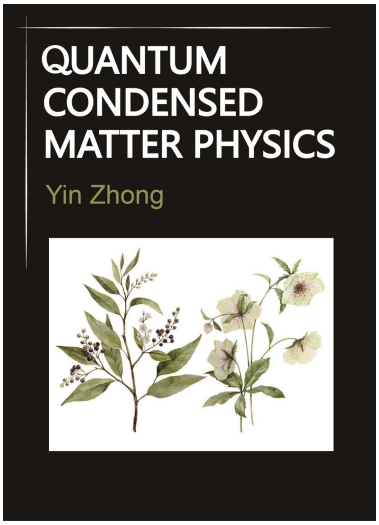
凝聚态物理学导论

作者: 钟寅, 兰州大学 物理科学与技术学院 zhongy@lzu.edu.cn


QUANTUM
CONDENSED
MATTER PHYSICS
Yin Zhong

前言

本讲义是作者于2017 – 2023年间在兰州大学物理科学与技术学院以及萃英学院讲授课程《凝聚态物理学导论》,《凝聚态物理学前沿导论》以及《固体理论》的基础上改写而成.事实上,凝聚态物理的相关教材已有很多,因此这份讲义的目的是从最简单的模型系统出发,采用最直接的技术手段讨论凝聚态物理学发展中的一些重要话题,并结合近些年的研究进展以期能够使读者掌握进一步从事凝聚态物理研究,特别是理论研究所必须的基本观念和必要的计算技巧.

在这份讲义中,我们将从描述量子多粒子系统的基本语言,也就是二次量子化形式出发,讨论玻色子,费米子以及自旋系统为代表的凝聚态多粒子系统的基本物理和处理它们的基本理论方法.希望通过该课程的学习可以提升学生们对现代凝聚态物理一些话题的理解以及解实际问题的能力.为真正理解讲义中的主要内容,我们假定读者已学过本科生程度的量子力学,热力学与统计物理以及固体物理.若学过量子场论和高等量子力学的基本内容,那么理解绝大部分内容应确有把握.

对一学期的课程而言,讲义的内容确实过多,因此若是介绍性质的课程,(36学时)我们建议讲授$1,4,5,6,7,10$章的多数内容.这些章节基本不涉及二次量子化和场论形式,只要具备本科量子力学即可理解和掌握核心内容.进一步,54学时的课程可以加上$2,3,8$章,这样二次量子化形式和简单的一些应用都已包含.对于72课时的研究生课程,可再添加$9,11,12,13$四章.剩下的章节$(14-19)$可作为高级课程,例如《凝聚态场论》的讲授内容.同时带有星号的章节在第一次阅读时可先跳过.

Contents

1 序章:多就是不同 **19**

1.1 凝聚态物理学 20
1.2 凝聚态物理学之父 23
1.3 凝聚态理论 25
1.4 凝聚态物理的基本方程 27
1.4.1 什么是电子关联? 30
1.4.2 我们会学到什么? 30
1.5 主要参考书与网络视频资源 32
1.5.1 主要参考书 32
1.5.2 网络视频资源 36
1.6 固体物理简要回顾 37
1.7 本章小结和进一步阅读 39
1.8 附录 41
1.8.1 常用能量单位与换算 41
1.8.2 半经典方程的证明 42
1.8.3 电子隧穿 42
1.8.4 高斯单位制与国际单位制 43
1.9 序章习题 44
1.9.1 习题1:一些概念 44
1.9.2 习题2:Drude电导率 44
1.9.3 习题3:Wiedemann-Franz律 44

2 二次量子化:冒险开始 **47**

2.1 一次与二次量子化:谁更受欢迎? 48
2.2 一次量子化形式中的多体波函数:容纳所有伙伴的函数 49
2.2.1 一次量子化的困难 58
2.3 二次量子化形式:再来一次量子化 59
2.3.1 谐振子的升降算符表示 59
2.3.2 占据数表示 60

2.3.3 多体哈密顿量的二次量子化形式 64
2.3.4 场论中的二次量子化与Noether定理* 69
2.4 Coulomb电子气:多体物理的新手教程 80
2.4.1 微扰理论计算 82
2.4.2 发散与重新求和* 85
2.4.3 Hartree-Fock(平均场)近似 86
2.4.4 屏蔽长程Coulomb相互作用 88
2.4.5 Lindhard介电函数(无规相近似/RPA) 92
2.5 Green函数与线性响应:联系物理与真实* 95
2.5.1 推迟Green函数与运动方程* 95
2.6 线性响应理论:什么才是物理? * 99
2.6.1 线性响应与电导率* 102
2.6.2 虚时Green函数与关联函数* 105
2.6.3 虚时Green函数的微扰计算* 109
2.6.4 电荷极化率* 119
2.7 本章小结和进一步阅读 126
2.8 附录 127
2.8.1 单体与两体算符二次量子化的细节 127
2.8.2 电流密度的二次量子化形式 129
2.8.3 热力学势与Luttinger-Ward泛函 132
2.8.4 数学形式:傅里叶变换,δ函数和其他 139
2.8.5 自由电子气的极化函数和Lindhard函数 144
2.8.6 Bethe ansatz与Lieb-Liniger模型 147
2.9 第二章习题 158
2.9.1 习题1:二次量子化的计算 158
2.9.2 习题2:热容的统计表达式 158
2.9.3 习题3:刚球势 158
2.9.4 习题4:三维电子气体的铁磁态 158
2.9.5 习题5:一次量子化形式中的等离激元 159

3 晶格费米子:直面凶猛的电子关联 163
3.1 Hubbard模型:多体物理的'Ising'模型 164
3.1.1 Hubbard模型的导出 164
3.1.2 两格点Hubbard模型 175
3.1.3 $t-J$模型和隐藏费米液体 179
3.2 Heisenberg模型与自旋波激发:量子磁性来临 186
3.2.1 离子磁性与电子结构 190
3.2.2 铁磁Heisenberg模型 192
3.2.3 反铁磁Heisenberg模型 196

3.3 一维晶格费米子:一维空间就是不同 202
3.3.1 一维量子XY模型与Jordan-Wigner变换 203
3.3.2 一维相互作用费米子系统:玻色化与Tomonaga模型 207
3.3.3 无自旋费米子的Tomonaga模型 208
3.3.4 玻色化的实际形式* 217
3.3.5 玻色化的应用:XY模型的自旋关联* 224
3.3.6 玻色化的应用:反铁磁Heisenberg链* 225
3.3.7 玻色化的应用:一维Hubbard模型* 230
3.4 磁性杂质与近藤问题:最干净的多体问题* 235
3.4.1 从Anderson到Kondo模型* 236
3.4.2 近藤的电阻极小* 239
3.4.3 近藤问题* 243
3.5 本章小结与进一步阅读 247
3.6 附录 248
3.6.1 Dirac费米子与一维量子电动力学 248
3.6.2 有自旋费米子的Tomonaga模型 250
3.6.3 符号函数与阶跃函数 252
3.6.4 一维Heisenberg模型的Bethe ansatz解 253
3.7 第三章习题 259
3.7.1 练习1:三角与Kagome晶格 259
3.7.2 练习2:居里定律 259
3.7.3 习题3:XXZ模型 259
3.7.4 习题4:无自旋Tomonaga模型热容 260
3.7.5 习题5:Kondo模型的平均场理论 260

4 费米液体:Landau的探险 265
4.1 Landau与费米液体:Landau十诫之一 266
4.1.1 理论物理教程与其他 267
4.1.2 动机:He-3流体 270
4.1.3 费米液体的精髓 271
4.2 绝热性:电子总归是电子 274
4.2.1 Landau能量泛函 278
4.2.2 费米液体的热力学熵和自由能 279
4.2.3 Landau参数 281
4.2.4 准粒子相互作用对磁化率和有效质量的修正 282
4.3 费米液体的集体模式与Boltzman方程:面对非平衡 288
4.3.1 碰撞项 289
4.3.2 无碰撞Boltzman方程与零声 290
4.4 费米液体准粒子的散射率:黄金规则定乾坤 294

4.4.1 准粒子概念的推广 295
4.5 费米液体的微观基础:场论方法初显神威* 297
4.5.1 Luttinger定理* 299
4.5.2 费米液体的序参量* 299
4.6 本章小结与进一步阅读 300
4.7 附录 301
4.7.1 带电费米液体:Landau-Silin理论 301
4.7.2 费米液体作为自洽解 301
4.7.3 Luttinger定理 305
4.7.4 边缘费米液体 320
4.8 第四章习题 321
4.8.1 习题1:一些概念 321
4.8.2 习题2:Boltzmann方程 321
4.8.3 习题3:临界准粒子 321

5 相变和对称破缺:Landau的再一次探险 325
5.1 相变和对称破缺:不对称的世界 326
5.2 Landau平均场理论:临界点的故事 329
5.2.1 Landau平均场理论的可观测量 330
5.2.2 临界指数与标度律 331
5.2.3 Ginzburg-Landau理论:非均匀序参量 333
5.2.4 Landau平均场理论的正确性 336
5.2.5 平均场上的涨落效应I 336
5.2.6 平均场上的涨落效应II 339
5.3 多分量情况:越多越好 342
5.3.1 $O(2)$模型中的相位模式 343
5.3.2 Anderson-Higgs机制 344
5.4 一级相变与电磁场涨落诱导的一级相变:避开临界点* 347
5.4.1 电磁场涨落诱导的一级相变* 347
5.4.2 一级相变的其他例子* 349
5.5 本章小结和进一步阅读 349
5.6 附录 351
5.6.1 一点群论知识 351
5.6.2 Gauss积分相关的公式 366
5.6.3 关联函数的细节 368
5.6.4 从Ising模型到Ψ^4模型 376
5.6.5 量子力学中的对称性 379
5.7 第五章习题 386
5.7.1 习题1:一些概念 386

5.7.2 习题2:Ising临界指数 386
5.7.3 习题3:相竞争 386

6 标度与重整化:Wilson的传奇 389
6.1 标度与关联长度:幂律形式就是好 390
6.1.1 准备:什么是标度? 390
6.1.2 最实用的标度理论:量纲分析* 391
6.1.3 热力学相变的标度理论 394
6.2 重整化:按照要求修改参数 397
6.2.1 重整化的物理含义 397
6.2.2 实空间重整化:Ising自旋链 401
6.2.3 Wilson动量空间重整化 403
6.2.4 Ψ^4模型与$\epsilon = 4 - d$展开 408
6.2.5 $O(3)$非线性sigma模型与$d = 2 + \epsilon$展开* 414
6.3 重整化在凝聚态物理中的其他应用:多才多艺的重整化* 417
6.3.1 局域化的标度理论* 417
6.3.2 近藤问题的穷人标度理论* 420
6.4 本章小结和进一步阅读 422
6.5 附录 423
6.5.1 共形不变性与共形场论 423
6.5.2 Ψ^4理论的双圈图修正 457
6.6 第六章习题 459
6.6.1 习题1:标度函数 459
6.6.2 习题2:自由场的标度维度 459
6.6.3 习题3:相关与无关扰动 459

7 KT相变:拓扑的崛起 463
7.1 KT相变:师徒合力破难题 464
7.2 XY模型:涡旋快来 465
7.2.1 高温展开 468
7.2.2 涡旋 470
7.2.3 Sine-Gordon模型 473
7.2.4 Sine-Gordon模型的重整化群结果 474
7.3 KT理论的预言与实验证实:理论的力量 478
7.4 本章小结和进一步阅读 478
7.5 附录 480
7.5.1 超导体中的涡旋 480
7.5.2 XY模型与Sine-Gordon模型的对偶 481
7.5.3 Sine-Gordon模型重整化方程推导 483

7.5.4 XY模型对偶的场论形式 485
7.6 第七章习题 487
7.6.1 习题1:一维XY模型 487
7.6.2 习题2:多个涡旋的能量 487
7.6.3 习题3:Bogoliubov不等式与最佳二次型 487

8 量子相变:聆听量子海洋的涨落 491
8.1 量子相变:量子力学压倒热运动 492
8.1.1 经典Ising模型 495
8.2 一维量子横场Ising模型:看我们的十八般兵器 498
8.2.1 一维量子Ising模型 498
8.2.2 微扰理论计算 507
8.2.3 平均场理论 508
8.2.4 一维量子Ising模型的对偶变换与自对偶* 510
8.3 量子Ising模型的精确解:旅行中最美的珍珠 514
8.3.1 Jordan-Wigner变换 514
8.3.2 与Kitaev超导链模型的等价* 515
8.3.3 模型的对角化 516
8.3.4 精确解的物理性质 519
8.3.5 自由能密度与临界指数 520
8.3.6 与实验的比较* 522
8.4 量子模型与经典统计模型的对应:总归是经典的好 523
8.4.1 物理量的统计平均计算 525
8.4.2 一般情况的对应 526
8.4.3 一维Ising模型的转移矩阵解与对应* 527
8.5 拓扑量子相变:当拓扑遇见量子涨落* 530
8.5.1 自由费米子的Lifshitz相变* 530
8.5.2 Lifshitz相变的一个例子:磁场下的一维量子XY模型* . . . 532
8.5.3 拓扑量子相变:一维费米子的拓扑态及其量子相变* . . . 536
8.5.4 一维量子横场Ising模型中的拓扑物态与Majorana费米子* 548
8.5.5 一维量子横场Ising模型的共形场论描述* 551
8.6 本章小结与进一步阅读 552
8.7 附录 554
8.7.1 量子Ising模型的Z_2对称性 554
8.7.2 量子Ising模型的数值对角化 554
8.7.3 量子-经典对应的应用:量子Ising模型的量子蒙特卡洛模拟 557
8.8 第八章习题 558
8.8.1 习题1:量子Ising模型的横向磁化 558
8.8.2 习题2:二维量子Ising模型 558

8.8.3 习题3:量子标度 . . . 558
8.8.4 习题4:杨-李边界奇异性的临界指数 . . . 558

9 路径积分:多体物理的新宠 561
9.1 路径积分:对历史求和 . . . 562
9.1.1 单粒子的路径积分 . . . 563
9.2 量子场的路径积分:我们都用相干态 . . . 569
9.2.1 玻色场 . . . 569
9.2.2 费米场 . . . 574
9.3 路径积分的简单例子:三人行比四人强 . . . 580
9.3.1 自由费米子 . . . 580
9.3.2 Coulomb电子气 . . . 582
9.3.3 巡游电子的量子相变:Hertz理论* . . . 587
9.4 量子自旋的路径积分形式:逃脱算符的枷锁 . . . 591
9.4.1 单个$S=1/2$自旋 . . . 591
9.4.2 一维量子Heisenberg反铁磁链模型 . . . 593
9.4.3 高维Heisenberg反铁磁体:非线性sigma模型场论* . . . 602
9.5 本章小结与进一步阅读 . . . 606
9.6 附录 . . . 608
9.6.1 J-Q模型与退禁闭临界现象 . . . 608
9.7 第九章习题 . . . 610
9.7.1 习题1:作用量与配分函数 . . . 610
9.7.2 习题2:一些概念 . . . 610
9.7.3 习题3:Kondo晶格 . . . 610

10 拓扑物态:万物皆拓扑 613
10.1 拓扑物态:看看谁没有拓扑 . . . 614
10.2 量子Hall效应:强磁场的礼物 . . . 616
10.2.1 Laughlin的规范讨论 . . . 616
10.2.2 Laudau量子化 . . . 617
10.2.3 量子振荡 . . . 620
10.2.4 量子霍尔电导的计算 . . . 631
10.2.5 圆柱几何下的Laughlin规范讨论 . . . 636
10.2.6 边缘态 . . . 637
10.3 Hofstadter模型与Hofstadter butterfly:让人迷恋的蝴蝶 . . . 640
10.3.1 Peierls代换 . . . 640
10.3.2 Hofstadter模型 . . . 642
10.4 六角晶格上的紧束缚模型系统:新世纪的交响乐 . . . 650
10.4.1 石墨烯的紧束缚模型 . . . 650

10.4.2 Haldane模型与Chern绝缘体 . . . 654
10.4.3 Kane-Mele模型与量子自旋霍尔绝缘体 . . . 659
10.4.4 Z_2拓扑不变量与拓扑绝缘体 . . . 660
10.5 Kitaev超导链模型:玩具也好用* . . . 669
10.5.1 相变* . . . 670
10.5.2 动量空间哈密顿量* . . . 671
10.5.3 动量空间粒子空穴变换的效果* . . . 672
10.5.4 动量空间的能谱和拓扑不变量* . . . 672
10.5.5 Kitaev超导模型的物理实现/对应* . . . 673
10.6 本章小结和进一步阅读 . . . 674
10.7 附录 . . . 675
10.7.1 Hall电导的Kubo公式 . . . 675
10.7.2 拓扑与有能隙量子系统 . . . 678
10.7.3 拓扑不变量 . . . 679
10.7.4 对称性与拓扑态的分类 . . . 679
10.8 第十章习题 . . . 686
10.8.1 习题1:一些概念 . . . 686
10.8.2 习题2:时间反演 . . . 686

11 超流Mott相变:玻色子成为囚徒 689
11.1 玻色凝聚与超流:低温物理的奇遇 . . . 690
11.1.1 基本模型 . . . 690
11.1.2 短程相互作用下的模型 . . . 691
11.2 玻色-爱因斯坦凝聚与超流:到底谁才是主人 . . . 693
11.2.1 自由空间的玻色-爱因斯坦凝聚 . . . 693
11.2.2 简谐势阱中的玻色-爱因斯坦凝聚 . . . 695
11.2.3 弱相互作用的玻色子体系:液氦-4的超流理论 . . . 697
11.2.4 液氦-4的Feynman理论* . . . 701
11.2.5 序参量和规范对称破缺* . . . 703
11.2.6 非对角长程序* . . . 704
11.3 晶格中的玻色子:Bose-Hubbard模型初探 . . . 705
11.3.1 几个极限分析 . . . 707
11.3.2 超流-Mott相变的平均场理论 . . . 711
11.3.3 超越平均场理论* . . . 714
11.3.4 无穷大U极限:变换至自旋模型 . . . 714
11.4 本章小结与进一步阅读 . . . 715
11.5 附录 . . . 717
11.5.1 超流体的临界速度 . . . 717
11.5.2 超流Mott相变与量子转子模型 . . . 717

11.5.3 超流Mott相变的场论描述 720
11.6 第十一章习题 722
11.6.1 习题1:一些概念 722
11.6.2 习题2:Bose-Hubbard模型 722

12 声子和光子:量子场的集体舞蹈 725
12.1 晶格振动与声子:电子无处不在的伙伴 726
12.1.1 一维原子链的经典描述 726
12.1.2 一维原子链的量子描述 727
12.1.3 零模与总动量 728
12.1.4 原子链的量子化 730
12.1.5 声子Green函数 731
12.1.6 声子气体的热容 731
12.1.7 一维固体的电子-声子相互作用 732
12.1.8 层展的标量(量子)场* 735
12.1.9 标量场的拓扑解:扭结* 737
12.2 电磁场与光子:重新理解光* 741
12.2.1 Maxwell方程与规范条件* 741
12.2.2 修改Maxwell方程:Dirac磁单极* 745
12.2.3 电磁场的量子哈密顿量* 747
12.2.4 电磁场的路径积分形式* 751
12.2.5 拓扑场论与轴子电动力学* 755
12.3 电磁场与物质的相互作用:量子电动力学速成班* 757
12.3.1 Dirac费米子* 757
12.3.2 Dirac费米子的关联函数* 764
12.3.3 量子电动力学* 767
12.4 推广的电动力学:走马观花Yang-Mills非阿贝尔规范场* 777
12.4.1 $SU(N)$规范理论* 777
12.4.2 渐进自由与禁闭* 782
12.4.3 对称破缺与质量产生* 783
12.4.4 磁单极与瞬子* 786
12.5 本章小结与进一步阅读 790
12.6 附录 791
12.6.1 极化子 791
12.7 第十二章习题 794
12.7.1 习题1:一些概念 794
12.7.2 习题2:流守恒 794
12.7.3 习题3:Maxwell方程 794
12.7.4 习题4:Dirac方程的Landau量子化 794

13 超导:拥有BCS理论的幸运? 799
13.1 超导:神秘的宏观量子现象 . . . 800
13.1.1 什么是超导 . . . 800
13.1.2 超导简史 . . . 800
13.1.3 超导的应用 . . . 809
13.1.4 当前超导理论的困难 . . . 810
13.2 拓扑平凡的超导:从Cooper开始 . . . 812
13.2.1 Cooper不稳定性 . . . 812
13.2.2 非常规Cooper配对* . . . 815
13.3 BCS超导的平均场理论:Bardeen-Cooper-Schrieffer的成功 . . . 817
13.3.1 BCS超导波函数 . . . 822
13.3.2 超导平均场方程 . . . 824
13.3.3 Gor'kov的Green函数方法* . . . 826
13.3.4 简单的s波超导 . . . 828
13.3.5 熵和热容* . . . 831
13.3.6 超流密度* . . . 832
13.4 超越BCS平均场理论:搜寻超导配对的踪迹 . . . 834
13.4.1 配对机制:电子吸引相互作用的来源 . . . 834
13.4.2 超导体的相位涨落* . . . 842
13.4.3 关联电子系统超导配对的确定* . . . 844
13.4.4 经典超导体有拓扑序* . . . 849
13.5 拓扑超导/超流:孕育量子计算的宠儿? . . . 851
13.5.1 无自旋/自旋极化费米子的$p+ip$波态 . . . 851
13.5.2 时间反演不变的拓扑超导态* . . . 857
13.5.3 非阿贝尔任意子与拓扑量子计算* . . . 858
13.6 本章小结与进一步阅读 . . . 862
13.7 附录 . . . 863
13.7.1 超导Green函数 . . . 863
13.7.2 Nambu旋量 . . . 863
13.7.3 一些有用的关系和物理量 . . . 866
13.8 第十三章习题 . . . 871
13.8.1 习题1:一些概念 . . . 871
13.8.2 习题2:BCS波函数 . . . 871
13.8.3 习题3:d波超导 . . . 871
13.8.4 习题4:Richardson模型 . . . 871
13.8.5 习题5:可解的BCS-Hubbard模型 . . . 872

14 费米子的相变:金属走向何方? 877
14.1 Hubbard模型与费米子相变:迈不过去的一道坎 878
14.2 反铁磁自旋密度波平均场理论:最熟悉的陌生人 881
14.2.1 零温 885
14.2.2 有限温度 886
14.2.3 超越平均场理论* 887
14.3 巡游铁磁态的平均场理论:金属铁磁性的起源 891
14.3.1 巡游铁磁态的自旋波激发 892
14.3.2 进一步的理论进展* 895
14.4 电子系统的Mott相变:没有序参量的相变 897
14.4.1 概述 897
14.4.2 动力学平均场 899
14.4.3 辅助粒子理论* 909
14.4.4 Mott相变的分类 933
14.4.5 掺杂的Mott绝缘体* 935
14.4.6 Hubbard模型的运动方程与Mott相变 937
14.4.7 评论:Mott临界性 945
14.5 Mott相变的一类可解模型:Hatsugai-Kohmoto模型纵览* 950
14.5.1 Hatsugai-Kohmoto模型* 950
14.5.2 HK模型的基态相图* 952
14.5.3 配分函数与热力学* 953
14.5.4 单粒子激发* 960
14.5.5 其他性质* 962
14.6 本章小结与进一步阅读 963
14.7 附录 965
14.7.1 激子与相变 965
14.7.2 HK模型的一些计算细节 968
14.8 第十四章习题 970
14.8.1 习题1:六角晶格Hubbard模型 970
14.8.2 习题2:电荷密度波 971
14.8.3 习题3:Anderson杂质模型 971

15 晶格规范理论:从Wagner到Kitaev 975
15.1 规范理论与晶格规范场:生活在格点上 976
15.1.1 玩具模型 977
15.2 Z_2晶格规范理论I:经典模型初探 981
15.2.1 面积律 984
15.2.2 周长律 984
15.2.3 物质场 986

15.3 Z_2晶格规范理论II:玩转量子模型 989
15.3.1 对偶变换 990
15.3.2 可解的费米子与Z_2规范场耦合模型* 992
15.3.3 Z_2规范场理论的实验实现 1001
15.4 Kitaev的toric-code模型:从玩具到现实 1003
15.4.1 基态简并度与拓扑序 1005
15.4.2 基态波函数 1008
15.4.3 电荷与涡旋的统计性质 1009
15.4.4 磁场下的Toric-code模型* 1012
15.5 量子纠缠与拓扑纠缠熵:量子革命? 1013
15.5.1 纠缠熵的面积律 1015
15.5.2 超越面积律 1019
15.5.3 动量空间的纠缠* 1021
15.5.4 全息对偶与全息纠缠熵* 1023
15.5.5 量子纠缠对多体物理的应用 1034
15.5.6 toric-code模型与拓扑纠缠熵* 1035
15.5.7 toric-code模型的物理实现* 1039
15.6 Kitaev honeycomb模型与量子自旋液体:你要的它全都有 1041
15.6.1 Kitaev量子自旋液体 1041
15.6.2 Kitaev honeycomb模型的求解 1043
15.6.3 Kitaev honeycomb模型的物理性质 1049
15.6.4 Kitaev模型的Jordan-Wigner变换求解与热力学 1052
15.7 本章小结与进一步阅读 1058
15.8 附录 1059
15.8.1 全息对偶的补充知识 1059
15.8.2 紧致的$U(1)$量子规范理论 1072
15.9 第十五章习题 1074
15.9.1 习题1:经典规范场 1074
15.9.2 习题2:Kitaev自旋链 1074
15.9.3 习题3:Z_2规范对称性 1074

16 隶粒子与规范理论:劈裂电子不可避免 1077
16.1 隶粒子的引入:只能避开电子 1078
16.2 Z_2 slave-spin表示:再多一次劈裂电子 1080
16.2.1 Z_2 slave-spin表示的基本形式 1080
16.2.2 平均场退耦 1083
16.2.3 超越单格点近似 1092
16.2.4 正交金属态* 1094
16.2.5 超越平均场退耦 1098

16.3 重费米子:电子能有多重？* 1101
16.3.1 Kondo晶格与Doniach相图* 1101
16.3.2 Kondo necklace模型与键算符平均场理论* 1107
16.3.3 拓扑近藤绝缘体* 1116
16.4 本章小结与进一步阅读 1127
16.5 附录 1128
16.5.1 Anderson杂质模型的slave-spin平均场理论 1128
16.5.2 两格点Hubbard模型在slave-spin平均场近似下的基态性质 1131
16.5.3 Z_2隶自旋表示配分函数的行列式形式与量子蒙特卡洛模拟 1132
16.5.4 Z_2隶自旋理论的晶格规范场论形式 1135
16.6 第十六章习题 1138
16.6.1 习题1:Z_2表示 1138
16.6.2 习题2:单格点模型的动力学 1138
16.6.3 习题3:Kondo晶格模型的平均场理论 1138

17 分数量子霍尔效应:Laughlin联姻Chern-Simons 1143
17.1 分数量子霍尔效应与规范理论:携带分数电荷？ 1144
17.2 分数量子霍尔效应的Laughlin波函数:它终于来了 1147
17.2.1 对称规范与非对易几何 1148
17.2.2 Laughlin波函数 1155
17.2.3 集体激发:GMP理论 1158
17.2.4 边界态 1161
17.2.5 其他量子Hall态 1166
17.3 分数量子Hall效应的Chern-Simons-Landau-Ginzburg有效理论:场论的胜利 1171
17.3.1 CSLG理论的基本物理图像 1172
17.3.2 二次量子化哈密顿量和拉格朗日量 1174
17.3.3 Chern-Simons项的简要讨论 1177
17.3.4 平均场解 1179
17.3.5 平均场近似下的扰动 1180
17.3.6 涡旋作为FQHE的准粒子 1181
17.3.7 复合费米子图像 1184
17.4 半满Landau能级的Dirac费米子描述和Dirac费米子之间的对偶:疑难依旧* 1186
17.4.1 半满Landau能级的Dirac费米子描述* 1188
17.4.2 Dirac费米子之间的对偶* 1189
17.4.3 对偶之网* 1189

17.5 本章小结与进一步阅读 1191
17.6 附录 1192
17.6.1 流体力学方法 1192
17.7 第十七章习题 1194
17.7.1 习题1:$\nu = 1/5$分数量子霍尔态 1194
17.7.2 习题2:玻色子体系 1194
17.7.3 习题3:GMP理论 1194

18 SYK模型与非费米液体:Kitaev传说的延续 1197
18.1 非费米液体:谁是费米液体? 1198
18.2 Majorana费米子的SYK模型:复杂的历史 1200
18.2.1 从自旋玻璃到SY模型再到SYK模型 1200
18.2.2 SYK模型的定义 1213
18.2.3 大N极限下的Green函数 1215
18.2.4 热力学熵 1222
18.2.5 out-of-time-ordered关联函数* 1223
18.2.6 与黑洞的对应* 1224
18.3 复费米子的SYK模型:属于Sachdev的快乐 1225
18.4 SYK模型与非费米液体:后Landau时代最好的玩具 1229
18.4.1 单带模型 1229
18.5 本章小结与进一步阅读 1231
18.6 附录 1232
18.6.1 SYK模型的对称破缺相变 1232

19 展望:路在何方? 1237
19.1 最近的发展:条条大路通罗马 1238
19.2 多体局域化:想要加热也不容易 1239
19.2.1 量子系统的热化 1239
19.2.2 超越热化:Anderson局域化和多体局域化 1240
19.2.3 多体局域化的模型研究 1240
19.2.4 多体局域化的实验研究 1242
19.3 非厄密与多体物理:对厄密体系说不 1245
19.3.1 非厄密与费米弧 1245
19.3.2 非厄密与重费米子 1248
19.4 分形子:一个拓扑的新故事 1252
19.4.1 可解模型 1252
19.4.2 无能隙分形子态 1256
19.4.3 偶极Bose-Hubbard模型 1257

Chapter 1

序章:多就是不同

凝聚态物理学

这门课程叫作《凝聚态物理学导论》,原则上既需要讲授基本理论和模型,也需要涉及实验材料和方法.但鉴于本人的专业方向以及对实验话题的熟悉程度,我们将从理论物理的观点出发,讨论凝聚态物质系统的基本理论,观念,模型以及计算方法. 因此,该课程名称更贴切的应是《凝聚态理论》(Condensed Matter Theory,CMT).我们将侧重于简单模型系统的讨论而不涉及具体材料的复杂性,这是因为许多实际物理体系在低温和低频下的性质可由这些简单模型系统理解,并且,用俄国伟大物理学家朗道(L.D.Landau)的话说,理论物理并不研究那些参数足够多以至于可以拟合任意不过度奇异的曲线的理论.[1]

那么什么是凝聚态物理呢？从字面上来说,凝聚态物理就是研究处于凝聚态的物质的物理性质的学科.哪到底那些是处于所谓的凝聚态的物质呢？在中学时代,我们便知道物质可分为固液气三态,[2]这里的固体和气态便是凝聚态物质的典型.在《固体物理》课程的学习中,我们讨论了具有良好周期性结构的晶态固体(晶体)的基本性质,而凝聚态物理研究的对象除了固体也包括液体以及低温下显示量子力学效应的原子气体.

在南京大学的冯端院士和金国钧教授合著的宏篇巨著《凝聚态物理学》中对凝聚态物理给出如下专业化定义,

凝聚态物理学的定义 从微观角度出发,研究相互作用多粒子系统组成的凝聚态物质的结构和动力学过程,及其与宏观物理过程之间关系的一门科学.

因此,可以说凝聚态物理研究的就是相互作用的多粒子系统.这些系统既可以是经典系统也可是量子系统,当然本质上都是量子的.以统计力学的基本原理出发原则上可从微观角度讨论这些多粒子系统的宏观热力学行为,大家熟知的固体热容的Einstein理论便是范例.

凝聚态研究的主要对象 固体+液体+超冷原子气体

凝聚态研究的物理基础 统计力学+量子力学

物理科学是一门实验学科,因此实验研究总是第一位的.理论研究从实验现象出发提出假设构建理论解释和预言实验现象.而随着计算机技术的发展,越来越多理论研究者以数值计算的方式研究物理问题,这样计算研究也成了理论与实验之外的第三类重要研究手段.在凝聚态物理研究中,实验研究者数量最多,大约占据七成的份额,理论与计算则占据剩下三成,且计算为主的研究者数目大有超过理论研究的趋势.[3]最后,我们研究凝聚态物理的目的可以简单归纳为理解凝聚

[1] 机器学习可以做这类巨大参数的拟合问题,不过其还是一个黑箱子,我们对这些物理问题的本质还是难以理解.

[2] 后面知道还有等离子体态

[3] 这里的计算研究主要是第一性原理电子结构计算.以当前追逐热门话题的研究氛围而言,若不从事实验研究,年轻研究者可以选择数值计算研究入门并辅以理论基础培养.

态物质的结构和性质,并通过理论与计算预言新的物理现象或者提供新材料的选择:

凝聚态研究的主要方式 实验+理论+计算

凝聚态研究的基本目标 理解,预言,创造新材料与物态

哲学是人们对世界的基本看法.物理学的发展史也是物理哲学的发展史,从Newton的粒子论到Laplace机械式决定论以及近代以来的量子论和量子场论(Quantum Field Theory,QFT),[4]人们关于物质的认识逐渐深化.在当前,量子信息(Quantum Information,QI)和量子计算(Quantum Computing,QC)技术的发展使得人们认识到物质就是信息,而量子信息与量子物质可能将导致第二次量子革命,即万物来自量子比特(All from qubits).[5]

凝聚态物理学作为物理学的主要分支,其基本哲学观具有如下特点:

- 凝聚态物理的哲学是呈展论(emergent),其与高能物理和场论研究所秉持的还原论(reductionism)截然不同.

还原论 自然界的一切都由其最基本的组成单元和规律所决定.

呈展论 客观世界是分层次的,每个层次都有自己的基本规律.

在还原论看来,只要清楚自然界的基本粒子以及基本相互作用力的性质,就可以推出自然界的所有(物理)规律.这是大统一理论的追求目标,也是当代粒子物理成功的重要原因.但答案是否定的,因为虽然粒子物理标准模型给出三种自然界基本相互作用的正确描述,但面对具体问题时并不见得真的可以从它们出发解决问题,我们往往根据被研究系统的对称性和物理观测出发直接建立更有唯象意味的微观理论.另一方面,就算基本规律精确已知,当我们面对实际凝聚态材料中原子数$N \sim 10^{23}$ 时,系统总自由度数不是每个粒子自由度的简单相加,而是相乘.这说明自由度随粒子数指数增加,即指数墙问题.经典物理中三体问题尚且无法定论,更何况如此巨大粒子数系统的行为.因此,虽然可以相信还原论给出的基本规律,但运用这些规律解决多粒子系统问题却并不平凡,并不是简单套用场论或者更高级基本粒子理论可以直接处理的.这说明,单纯依靠还原论并不是正确的做法,我们需要另一种观点,也就是下面要具体讨论的呈展论.

在呈展论看来,大量粒子系统的集体行为不是个体行为的简单相加.诺贝尔物理学奖获得者,凝聚态物理学之父P.W.Anderson在一篇题目为《More is different》的《Science》文章中有如下著名的论断:

- 由基本粒子构成的巨大的和复杂的集聚体的行为并不能依据少数粒子的性质作简单外推就能理解.正好相反,在复杂性的每一个层次之中会呈现全新

[4]当然也包含广义相对论和最有希望的统一理论,即超弦理论.

[5]这个观点来自凝聚态物理领域的著名华人物理学家文小刚而超弦理论中的全息对偶也给出正面的支持.

的性质,而要理解这些新行为所需要作的研究,就其基础性而言,与其他研究相比毫不逊色.

这样,我们可以理解不同学科例如物理,化学和生物之间并没有高低贵贱之分,不存在谁的研究更重要,谁更基本的问题.每一个学科都有其重要性,对我们理解世界都发挥各自的作用.例如虽然引力研究者发现了Einstein早已预言的引力波,但这对绝大多数凝聚态研究话题而言并没有什么影响,这是因为引力研究与凝聚态研究对象一个是天体,一个是实验室的材料,彼此之间互相退耦,能量尺度相差甚大.同理最近很热门的转角石墨烯超导的发现也并不会对暗物质和黑洞研究有任何直接的影响.[6]

最后,我们简要指出,凝聚态物理研究的目的是:

1. 为实验对象建立模型;
2. 为观测到的现象提出机制;
3. 为预言物理性质发展精确的方法;
4. 最终建立凝聚态物质的世界观,提高人类生活质量.

[6]弦论中的全息对偶可能联系了量子引力与某些凝聚态物质在极端参数情况下的性质,这就是AdS/CMT.(anti-de Sitter/condensd matter theory)

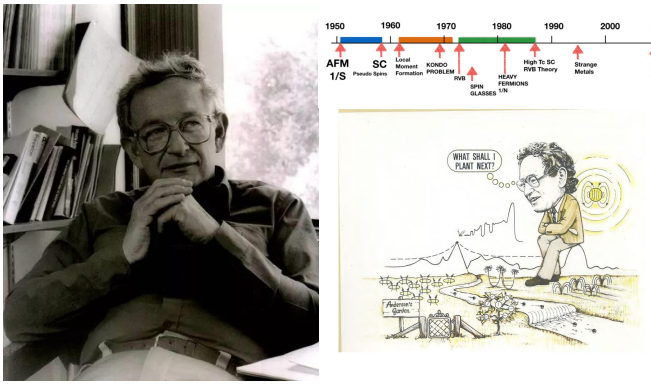


Figure 1.1: Philip Warren Anderson(1923 – 2020),因磁性和无序系统的电子结构的基础性理论研究荣获1977 年诺贝尔物理学奖.Anderson在磁性方面的重要工作与Anderson的花园.

凝聚态物理学之父

提到凝聚态物理我们就不得不提到凝聚体物理之父Philip Anderson,他个人的研究史几乎是我们研究凝聚态的历史,尤其对关联电子系统而言.(图1.1)[7]

Philip Warren Anderson(1923 – 2020),生于美国印第安纳波利斯市,因磁性和无序系统的电子结构的基础性理论研究荣获1977年诺贝尔物理学奖.[8]他最先提出凝聚态物理一词并对凝聚态物理的众多方向作出开创性贡献,例如:

1. 无序驱动的Anderson局域化,局域化的标度理论,自旋玻璃理论;
2. Anderson杂质模型,Kondo杂质问题的Poor man's标度理论;
3. 高温超导和量子自旋液体的共振价键理论;
4. 局域磁性的超交换机制和反铁磁自旋波理论;
5. 超导杂质问题的Anderson定理,超流He−3A相配对理论,Anderson-Higgs机制.

我们将会在后续的章节中学习上述成果中的部分内容.他是二十世纪最富创造力的科学家之一,被认为是凝聚态物理学之父.

Anderson是一系列有影响科学书籍的作者,如《Concepts of Solids》(固体概念)和《Basic Notions of Condensed Matter Physics》(凝聚态物理的基本概念).这两本书被认为是奠定凝聚态物理学研究范式的专著.特别是后者强调了凝聚态物质研究中对称破缺,广义刚性,绝热性和重整化的核心地位.《The Theory

[7]关于Anderson重要工作的纪念文集是《PWA90:A Lifetime of Emergence》,值得一读.
[8]和其导师van Vleck共同获奖

of Superconductivity in the High-Tc Cuprates》(高温铜氧化物的超导理论)则阐述了他关于高温超导机制这一难题的思考.此外安德森还经常在科学期刊上发表科学评论,对复杂性(complexity), 呈展现象(emergent phenomena) 等都做了深刻阐述.和Steven Weinberg一样,Anderson也是公众眼中最具份量的科学家的代言人.(例如关于美国粒子物理超级对撞机的激烈辩论[9])

Anderson在2006年的一项研究中被认为是最有原创力的物理学家,在这项统计研究中,引用最少文献,但产生了最大引用率的作者被定义为是最有原创力的.紧随Anderson之后的是粒子物理学的领军人物S.Weinberg,排名第三的则是弦理论界的教皇E.Witten.

Anderson的一个同事把安德森描述为:一个谦让,甚至很害羞的人,但他才能卓越,兴趣非常广泛.除物理学外,他喜欢室外活动,长途步行.他的学生D.Haldane获得了2016年诺贝尔物理学奖,另外像P.Coleman,G.Kotliar,G.Baskaran等也是凝聚态物理界的著名学者.

一代物理学巨人Anderson于美国当地时间2020年3月29日早晨逝世.[10]

[9]其实最大的反对建造派是K.Wilson为首的粒子物理自己人.

[10]P.Coleman

凝聚态理论

既然我们将要学习讨论的是凝聚态理论,那么就需要给其一个简要的定义,即:

- 凝聚态理论是研究凝聚态物质时所发展的理论和方法,现代凝聚态理论的基本观念是对称性破缺(symmetry breaking),准粒子(quasi-particle)以及拓扑序(topological order).

对称性破缺 物质的相与对称性相联系,相变伴随对称性的变化;

准粒子 物质的低能激发可看成一些弱相互作用准粒子的集合;

拓扑序 物态在参数空间可拥有非平凡的拓扑结构.

对称性破缺与准粒子(原激发)[11]的观念来自Landau的创造性工作,即连续相变理论和他的Fermi液体理论.

对称破缺强调的是凝聚态物质系统的低温有序态常常是高温无序态发生对称性破缺的后果,可以破缺的对称性既包括空间对称性(例如平移,旋转)也包括系统的内部对称(如自旋和同位旋).对于对称破缺态可以引入非零的参数,也就是序参量进行表征,而体系的热力学就由序参量所构造的有效理论,即Ginzburg-Landau理论完全决定.把Ginzburg-Landau理论框架与Wilson重整化群相结合,这样便构成了相变理论中居于核心地位的Ginzburg-Landau-Wilson范式.

原激发的概念事实上说明的是量子多体系统的低能激发往往可以用相互作用很弱的粒子系统的集合来近似表示,这些弱相互作用着的粒子就是原激发,它们可以与系统的基本组元直接联系,例如电子与相互作用修正后的准电子,也可以与组元差别甚大,比如组成晶格的原子和它们集体运动产生的声子.[12]一般来说我们称前者为粒子激发而后者则是集体激发.

上述两个观念进一步由Anderson发展而成为现代凝聚态物理学的基石.

拓扑序的早期观念根源于KT相变的研究,其让我们认识到以涡旋为代表的拓扑缺陷对于低维系统相变的重要性.后来经过量子Hall效应和拓扑绝缘体的广泛传播与应用,已成为凝聚态物理的第三个基石.这样通过对称性和拓扑结构,我们可以把所有已知物态作出大体的分类并刻画相应的基态行为.基态以上的低能激发则由准粒子以及拓扑缺陷所组成.(图1.2)

自Einstein提出热容的量子解释以来,凝聚态理论已经取得诸多成就,例如:

- Landau费米液体理论(Landau,Luttinger,Nozeris...)
- Landau连续(二级)相变理论(Landau,Ginzburg,Kadanoff...)

[11]狭义上我们也把原激发划分为准粒子激发和集体激发

[12]更极端的例子是分数量子霍尔效应中的携带分数电荷的电荷磁通复合体,它们与系统基本组元电子差别甚大

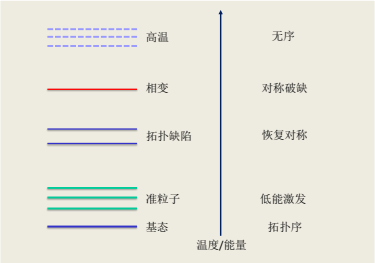


Figure 1.2: 凝聚态物理基本概念与能量尺度

- BCS超导理论(Bardeen,Cooper,Schrieffer...)
- Anderson局域化理论(Anderson,Mott,Touless...)
- 量子Hall效应理论(Laughlin,Haldane,Wen...)
- KT相变理论(Thouless,Kosterlitz...)
- 拓扑绝缘体理论(Kane,Mele,Zhang...)

伴随这些重要的理论成果,凝聚态理论的基本框架主要还是基于单电子近似,即能带理论,费米液体和拓扑能带理论.然而,越来越多的新奇量子现象,特别是铜氧化物高温超导体的发现和广泛研究促使人们重新审视单电子框架的合理性,催促相关领域的理论工作者发展关联电子的统一理论,但时至今日,相应的理论框架仍未建立.当中的困难是我们缺少研究一般性强相互作用多粒子系统的可靠解析和数值计算方法.[13]

- 当前凝聚态物理(理论)研究的前沿主要包括两部分,即关联电子系统和拓扑物态的研究.它们的研究实际上反映的是我们超出Landau相变理论和费米液体理论框架的不断尝试,即人们希望建立新的凝聚态物理范式.

关联电子系统 铜氧化物和铁基超导体,重费米子系统,量子临界,量子自旋液体,非费米液体...

拓扑物态 量子Hall效应,拓扑绝缘体,Majorana费米子,Wely半金属...

[13]虽然可以寄希望于不知何年才能实用的量子计算机,但这类模拟手段终归是黑箱子,只输出结果而无法告诉我们到底发生了什么.能够处理强关联系统的解析方法实际上很少,例如玻色化和Bethe ansatz都只在一维适用,强耦合展开和运动方程方法的收敛性存在问题,AdS/CFT对偶是否真实对应关心的物理系统目前是未知数.

凝聚态物理的基本方程

原则上,与高能物理不同,[14]我们明确知道描述固体或者凝聚态物质的基本方程,即包含电子以及原子核的多粒子Schödinger方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;\vec{R}_1,...,\vec{R}_M;t)=H\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;\vec{R}_1,...,\vec{R}_M;t) \tag{1.1}$$

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2_{\vec{r}_i}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}V_{ee}(\vec{r}_i-\vec{r}_j)+\sum_{k=1}^{M}\frac{-\hbar^2}{2m_n}\nabla^2_{\vec{R}_k}+\frac{1}{2}\sum_{k\neq l=1}^{M}V_{nn}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)+\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{M}V_{en}(\vec{r}_i-\vec{R}_k) \tag{1.2}$$

这里$\vec{r}_1,\vec{r}_N$代表电子坐标,$\vec{R}_1,\vec{R}_M$代表原子核坐标.当然,电子和原子核都还有自旋指标,这里为简单起见未明确写出.$\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;\vec{R}_1,...,\vec{R}_M;t)$ 是描述电子与原子核系统的波函数,在给定哈密顿量H时便可通过求解以上方程得到.哈密顿量H包含电子的动能,电子−电子相互作用的Coulomb势能V_{ee},原子核的动能,原子核之间的Coulomb势能V_{nn}以及电子与原子核之间的Coulomb能V_{en}.

- 对于凝聚态系统的绝大多数性质研究而言,实际上只有原子的外层电子有主要贡献,因此通常把内层电子与原子核看作一个整体,即原子实.

经过上述简化,现在$\{\vec{r}_i\}$描述外层电子坐标而$\{\vec{R}_k\}$代表原子实坐标.进一步,注意到组成原子核的质子与中子质量是电子质量的1000多倍,因此原子实质量也远大于电子质量.这种巨大的质量差导致电子系统与原子实系统的近似退耦,物理上就是所谓的绝热近似.

- 电子与晶格原子实的退耦:电子质量远小于原子实,因而电子速度远大于原子实速度,这说明在电子运动的时间尺度内,原子实可以看作是近似不动的背景,这导致电子系统与原子实系统的退耦.

这样我们可以得到固定的原子实背景下的约化电子哈密顿量:

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2+V_{ext}(\vec{r}_i)\right)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}V_{ee}(\vec{r}_i-\vec{r}_j) \tag{1.3}$$

这里$V_{ext}(\vec{r}_i)$是所有原子实对第i个电子的相互作用之和形成的一个等效外势,其定义为$V_{ext}(\vec{r}_i)=\sum_{k=1}^{M}V_{en}(\vec{r}_i-\vec{R}_k)$,当原子实坐标固定时便对应一个不含时间的稳定外势.同时,电子之间Coulomb势的明确形式是$V_{ee}(\vec{r}_i-\vec{r}_j)=\frac{e^2}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}$.这样便得到了凝聚态材料中电子运动的基本方程:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;t)=\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2+V_{ext}(\vec{r}_i)\right)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}V_{ee}(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\right]\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;t)} \tag{1.4}$$

[14]标准模型现在被认为是更基本理论的低能有效模型,而非最基本的理论

- 求解该方程就可理解关于金属,绝缘体,半导体,超导体,磁体乃至生命本身的所有物理内容.[15]

然而,我们能够解析求解的几乎只限于一到两个电子的Schödinger方程,相应的例子包括自由粒子,谐振子,氢原子以及势阱问题.如果采用现代计算机经行计算,例如基于量子力学的矩阵对角化计算,其最大计算的自旋数为40,而采用蒙特卡洛方法能计算的电子数最大约为10^3,就算采用超级计算机,那么所能直接计算的电子数也不会超过10^4.

但我们知道,固体材料中电子的数目是异常巨大的.可以估计如下:晶格间距估计为$a \sim 10^{-10}m$,[16] 而常用的固体块材的尺度至少在厘米量级,即$L \sim 10^{-2}m$,这样三维块体包含的晶胞数目大约是

$$N \sim \left(\frac{L}{a}\right)^3 \sim 10^{23} - 10^{24} \tag{1.5}$$

通常电子的数目不会小于原胞数,也就是说典型情况下我们所需要处理的电子数目的量级是10^{23}.这样,对于典型的单价金属,其传导电子浓度为$n \sim 10^{23}/cm^3$.毫无疑问,即使是现在最先进计算能力最强的超级计算机,例如'神威–太湖之光',也不可能计算如此多电子的波函数,更不用说抽出当中的物理内容.

既然直接求解多电子Schödinger方程并不现实,那只能采取一些近似方案,也就是忽略某些物理因素的影响,着重于感兴趣的或者关注的自由度.常见的近似方法列举如下:

自由电子近似 不考虑电子之间相互作用以及与晶格的相互作用.

独立电子近似 不考虑电子之间的相互作用但仍感受到晶格势的作用.

Hartree-Fock近似(HF) 考虑电子相互作用的直接交换与间接交换的效果.

无规相近似(randon phase approximation,简称RPA) 是超越HF近似中最常用也最简单的方案,广泛应用于电子气体以及超导配对的研究.

局域密度近似(local density approximation,简称LDA 密度泛函理论实际计算采用的主要近似方法.

Gutzwiller近似 广泛应用于关联电子模型的定性计算,其特点是把投影算符的效果用一系列系数代替进而极大简化模型的计算.

[15] 由于原子实位置固定不动,因此原子实的振动并未计入.要完整描述这些体系自然需要计入原子实的振动,这通常意味着考虑电子与声子的相互作用.

[16] 与自然给予我们的基本长度,即普朗克长度$l_p = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} \sim 1.6 \times 10^{-33}cm$相比,晶格间距总是很大的.当然,电子质量与普朗克质量$M_p = \frac{\hbar c}{G} \sim 2.2 \times 10^{-8}kg$比那就是小量,而任何固体中的特征时间都远大于普朗克时间$t_p = \frac{\hbar G}{c^5} \sim 5.4 \times 10^{-44}s$.

动力学平均场理论(dynamic mean-field theory,简称DMFT) 把晶格模型映射至一个或者几个量子杂质问题,然后把杂质问题的解与晶格问题相匹配得到晶格模型的近似解.其对空间关联做了平均场近似,而时间关联则通过求解杂质问题而明确计入,既然时间关联反映系统的动力学行为,因此称为动力学平均场.

密度矩阵重整化群(density matrix renormalization group,简称DMRG) 是实空间重整化群理论的重要改进,其特点是把约化密度矩阵的本征值的大小作为重整化过程中剔除的量子态的判据,是一维晶格模型求解的良好方法.

张量网络(tensor network) 把系统的波函数假设为张量乘积形式,通过变分最优化张量波函数的每一个元素而得到系统状态的近似描述.其一维形式是矩阵乘积形式的波函数,即矩阵乘积态.

在多电子Schödinger方程中忽略外势以及电子之间的相互作用,就是自由电子近似,此时可得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;t)=\sum_{i=1}^{N}\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;t) \tag{1.6}$$

现在每个电子都是独立运动并且由于外场的缺失,电子运动就是最熟悉的自由运动,此时单电子波函数是平面波$\psi(\vec{r}_i)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_i}$.

- 至于如何用单电子波函数$\psi(\vec{r}_i)$构造多电子波函数$\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;t)$则是后续章节的问题,其核心在于必须明确体现Pauli不相容原理或者说费米统计的要求.

  在自由电子近似的基础上考虑外场就得到独立电子近似

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;t)=\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2+V_{ext}(\vec{r}_i)\right)\right]\Psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;t) \tag{1.7}$$

此时每一个电子依然独立运动,但由于受到外场影响,其波函数已不是简单的平面波,而是空间中复杂变化的.对应的单粒子Schödinger方程是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}_i,t)=\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2+V_{ext}(\vec{r}_i)\right)\psi(\vec{r}_i,t) \tag{1.8}$$

对于不含时外势,可直接处理定态Schödinger方程

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2+V_{ext}(\vec{r}_i)\right)\psi(\vec{r}_i)=E\psi(\vec{r}_i) \tag{1.9}$$

如果进一步假定外势具有空间周期性,那么以上方程就是固体物理学的基本出发点,即周期势场中运动的单电子Schödinger方程.

显然,无论是自由电子近似还是独立电子近似都完全忽略电子–电子之间的相互作用,这对于弱关联材料例如简单的金属或者半导体至少定性上是合理的简化.然而对于中间关联或者强关联电子系统,例如d电子或者f电子主导的材料,忽略相互作用会导致完全错误的物理结果.这要求明确考虑电子之间的相互作用,并对相互作用的效果做出实质上的处理,而不是简单的近似.

什么是电子关联?

需要说明,这里提到的电子关联可以理解为一个电子运动会受到其他电子所处状态的影响,这种影响很弱时称为弱关联,而反之则是强关联.例如能带理论中考虑一个电子运动时可以把它看作是独立的电子,其他电子并不会对其有多大影响,它们仅仅是按照能量最低原理填充其他状态而形成背景.这种体系就是典型的弱关联系统.与之相反,考虑在晶格格点上不断跳跃的电子,若这些电子中同时有两个占据同一个格点会导致非常大排斥作用,那么任意一个电子都不能自由的运动,它们在格点间运动会顾及其他电子运动的情况,会尽量避免在同一个格点位置相遇,这就是典型的强关联系统.

- 如何判断实际体系中电子关联的强弱呢? 通常认为如果体系的物理性质比较接近于自由费米气体(费米液体)或者LDA计算的结果,那么我们会说体系是弱关联的.反之,相应的体系可能是强关联的.

如果我们需要系统化处理电子–电子相互作用所导致的关联效应,那么目前来说最有效的理论框架就是基于量子多体理论的一些基本工具和方法.量子多体理论指的是描述大量相互作用的量子粒子组成的系统的理论,从范围上看既包括凝聚态物理系统,也包括原子核系统以及量子场系统.通常,量子多体理论的工作语言是量子场论,[17]如果处理的是高能物理领域的问题,需要的是相对论性量子场论,代表性的理论是量子电动力学(QED)和量子色动力学(QCD).如果关心的是凝聚态问题,那么使用的是非相对论情况的量子场论形式,当然在某些情况下,非相对论性的场论也会在低能或者低温下显示出等效的相对论性场论结构,[18]这是一个相当有趣并且内容十分丰富的问题.在某种程度上,可以通过人工合成的方法得到一些新颖的材料,在这些材料中电子的运动行为有可能可模拟高能物理中那些实验难以直接观测的效应,例如著名的夸克禁闭,渐进自由以及超对称.

我们会学到什么?

在接下来的各章中,我们将学习量子多体物理的基本内容并且以此来研究凝聚态物理的一些基本模型和相关的处理方法.一般来说,标准的量子多体物理课程或教科书涉及的基本内容包括二次量子化,零温Green函数,有限温度的松

[17]量子场论的基本观点是我们所处的时空存在着无处不在的量子化了的场,这些场的激发量子就是我们所看到的各种基本粒子,这些基本粒子的进一步组合形成了原子,分子乃至整个世界.

[18]这也是层展现象的重要体现,甚至超对称也能在凝聚态系统中显现.

基本	Coulomb电子气	Hubbard模型	Heisenberg模型
理论	量子Ising模型	Bose-Hubbard模型	BCS模型
模型	Kitaev模型	Kondo晶格	SYK模型
重要	费米液体	Landau理论	重整化
基本	Luttinger液体	KT相变	量子相变
概念	Mott相变	晶格规范场	Chern-Simons项
使用	Jordan-Wigner变换	Holstein-Primakoff变换	Bogoliubov变换
技巧	对偶变换	相干态	隶转子
讨论	Z_2隶自旋	键算符	无序平均
常用	平均场	Feynman图微扰论	RPA
理论	玻色化	微扰重整化	高温展开
近似	高斯近似	鞍点近似	动力学平均场

Table 1.1: 后续章节会学到的主要内容,包括模型,概念,近似与技巧.

原Green函数,量子场的Feynman 路径积分以及几个典型的应用,例如Coulomb电子气,反铁磁自旋波,电声相互作用模型,Bogoliubov超流理论以及BCS超导理论.在之后章节中我们会涉及这些内容,不过Green函数和相应的Feynman图计算仅简要提及,其原因是一方面基本的微扰计算在多数教科书中都有详细讨论,另一方面目前关心的很多话题本身具有非微扰特性,并不能通过简单的微扰计算或者求和就可得到合理的物理结果,此外就算高阶微扰修正原则上能给出靠谱的结果,其实际计算本就是技术活,并不能以简单的方式阐述,因此我们在这里忽略这些方面的讨论,感兴趣的读者请参考相关的教科书(例如P.Coleman的《Introduction to Many-Body Physics》)

根据笔者的经验和当前凝聚态物理前沿的发展,我们也增加了很多一般多体物理教科书中较少涉及但实际上已经成熟的话题,例如Landau费米液体,KT相变,量子相变,拓扑物态,Mott相变以及晶格规范理论.此外,隶粒子,分数量子霍尔效应,SYK模型和量子纠缠等较为专门的内容对于了解前沿课题应会有所帮助.为了提高本课程的自包容性,我们也用两章的篇幅介绍Landau相变理论和重整化理论,声子和光子场的处理也涉及一章的内容.

主要参考书与网络视频资源

主要参考书

作为物理学中最大的一门分支学科,凝聚态物理的内容足够丰富,因此相应的参考书也很多,下面我们仅列举一些具有代表性的参考书.

凝聚态物理

1. 冯端,金国钧,凝聚态物理学(上卷+下卷),2013.[凝聚态物理的系统介绍,1300页,推荐]
2. S.Girvin,K.Yang,Modern Condensed Matter Physics,2019[侧重于多体物理的凝聚态物理教科书,从第七章开始看最合适,推荐].
3. P.M.Chaikin,T.C.Lubensky,Principles of Condensed Matter Physics,1995.[十分有野心的一本书,写得很液晶,不适合一般读者]
4. G.D.Mahan,Condensed Matter in a Nutshell,2011.[凝聚态物理导论性质的介绍读物]
5. P.W.Anderson,Concepts in Solids,2003.[对凝聚态物理基本观念的专业化评述,不太容易看明白]

固体物理

1. N.W.Ashcroft,N.D.Mermin,Solid State Physics,1976.[虽然是老书但内容丰富,推导简明,据说适合做实验的研究人员参考,推荐]
2. 黄昆,韩汝琦,固体物理学,1988.[国内固体物理的经典教材]
3. C.基泰儿,固体物理导论(8th).[本校固体物理课程的主要参考书,部分重要内容讲解不细致,不推荐]
4. S.H.Simon,The Oxford Solid State Basics,2013.[简洁易懂的固体物理教科书,牛津大三本科生课程配套教材]
5. 阎守胜,现代固体物理学导论,2008.[简洁地介绍了低维,无序和关联系统]
6. J.M.Ziman,Principles of the theory of solids,1972[介绍固体物理基础知识的一本名著]

固体理论

1. 李正中,固体理论(2nd),2002.[对固体理论专题的详细介绍,数学推导详尽,(有些过于详细以至于繁琐)适合自学,推荐]

2. P.Phillips,Advanced Solid State Physics(2rd),2015.[内容比较新,对Mott绝缘体的简明讨论,推荐]

3. P.L.Taylor,O.Heinonen,A quantum approach to condensed matter physics,2002.[物理图像清楚,公式简单]

4. D.I.Khomskii,Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids,2010.[多体理论背后的物理图像分析透彻]

凝聚态场论

1. A.Altland,B.Simons,Condensed Matter Field Theory(2nd),2010.[可读性很强的入门级凝聚态场论教科书,推荐]

2. E.Fradkin,Field Theory of Condensed Matter Physics(2nd),2013.[内容丰富的凝聚态场论专著]

3. N.Nagaosa(永长直人),Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics,Quantum Field Theory in Strongly Correlated Electronic Systems,1999.[推荐有场论基础后使用]

4. X.G.Wen(文小刚),Quantum Field Theory of Many-body Systems,2004.[很有特色的凝聚态场论书,有人觉得私货较多]

5. A.O.Gogolin,A.A.Nersesyan,A.M.Tsvelik,Bosonization and Strongly Correlated Systems,1998.[玻色化理论的'圣经']

6. Z.F.Ezawa(江泽润一),Quantum Hall Effects:Field Theoretical Approach and Related Topics(2nd),2008.[量子霍尔效应的神书]

7. A.M.Tsvelik,Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics,2003[有一本凝聚态场论书,从第十六章开始阅读吧]

8. E.C.Marino,Quantum Field Theory Approach to Condensed Matter Physics,2017[与众不同的凝聚态场论书]

9. R.Shankar,Quantum Field Theory and Condensed Matter,2017[比较简明的凝聚态场论书,但公式符号让人看不下去]

经典和量子相变

1. H.Nishimori,G.Ortiz,Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena,2011.[关于相变相关基础知识很好的介绍,共形场论和无序系统说得很明白,推荐]

2. I.Herbut,A Modern Approach to Critical Phenomena,2007.[简明的重整化群理论和对偶介绍]

3. M.Kardar,Statistical Physics of Fields,2007.[统计场论基础的详细讨论与具体应用,特别是晶格场论部分值得阅读]

4. M.A.Continentino,Quantum Scaling in Many-Body Systems(2nd),2017.[量子标度和量子相变,简明扼要]

5. S.Sachdev,Quantum Phase Transitions(2nd),2010.[量子相变的专著,不推荐初学者使用]

量子多体理论

1. P.Coleman,Introduction to Many-Body Physics,2015.[量子多体理论的新教科书,推荐]

2. A.A.Abrikosov,L.P.Gorkov,I.E.Dzyaloshinskii,Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics,1965.[简称为AGD的神书,是Green函数与费曼图技术求解固体理论问题的权威著作,不过阅读体验并不好]

3. A.L.Fetter,J.D.Walecka,Quantum Theory of Many-Particle Systems,1971.[推导详细但有些旧的多体教科书,适用于新手从头学习多体系统的Green函数理论]

4. G.Mahan,Many-Particle physics(3rd),2000[比较经典的多体物理教科书,上一辈国内研究者喜欢使用]

5. R.A.Jishi,Feynman Diagram Techniques in Condensed Matter Physics,2013[讲Green函数和Feynman图]

量子磁性

1. S.Blundell,Magnetism in Condensed Matter,2001[关于凝聚态体系磁性的简明介绍,推荐]

2. P.Fazekas,Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism,1999.[关联电子磁性的教科书,可读性很强]

3. A.C.Hewson,The Kondo Problem to Heavy Fermions,1993.[近藤问题的专著]

4. K.Yosida,Theory of Magnetism,1996[似乎是关于磁性的一本名著]

5. H.Tasaki,Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems,2020[介绍Heisenberg和Hubbard模型的磁性]

拓扑绝缘体

1. Shun-Qing Shen(沈顺清),Topological Insulators:Dirac Equation in Condensed Matters(2nd),2017.[拓扑绝缘体的教科书,推荐]
2. G.E.Volovik,The Universe in a Helium Droplet,2003.[做拓扑物态研究必备神书]
3. B.A.Bernevig,T.L.Hughes,Topological insulators and topological supercnductors,2013.[很多人入门拓扑绝缘体的教科书,但该书有不少文字公式错误]
4. J.K.Asbóth,L.Oroszlány,A.Pályi,A Short Course on Topological Insulators,2016.[主要考虑一维和二维体系的能带与边界态]

量子场论

1. T.Lancaster,S.J.Blundell,Quantum Field Theory for the Gifted Amateur,2013.[量子场论的优秀参考书,适合凝聚态方向研究者或学生参考使用,推荐]
2. A.Zee,Quantum Field Theory in a Nutshell,2010.[有趣,侧重路径积分形式的现代量子场论读物,推荐,但不太适合作为教科书]
3. D.McMahon,Quantum Field Theory Demystified,2008.[能找到的最简单的量子场论书]
4. M.Stone,The Physics of Quantum Fields,2000.[只有270页的量子场论教科书]
5. M.E.Peskin,D.V.Schroeder,An Introduction to Quantum Field Theory,1995.[计算十分详细的标准量子场论教科书]
6. 郑汉青,量子场论,2018.[简明的中文场论书]
7. E.Fradkin,Quantum Field Theory:An Integrated Approach,2021.[有不少非相对论下场论的计算]

群论和相对论

1. A.Zee,Group Theory in a Nutshell for Physisists,2016.[徐一鸿的另一本nutshell,推荐]
2. J.Schwichtenberg,Physics from Symmetry(2nd),2018.[简单明了阐述对称性和群论在基本物理方面的应用,推荐]
3. A.Zee,Einstein Gravity in a Nutshell,2013.[从牛顿力学讲起的超详细广义相对论nutshell,不过有800+页]

4. D.McMahon,Relativity Demystified,2006.[解密相对论]

5. P.Labelle,Supersymmetry Demystified,2010.[解密超对称]

6. D.McMahon,String Theory Demystified,2006.[解密弦论]

网络视频资源

除了上述推荐的参考书,与本课程内容有相似或互补的网络视频课程列举如下:

1. Marcel Franz,http://pirsa.org/C14035

2. Roger Melko,http://pirsa.org/C1507

3. Rakesh Tiwari,http://pirsa.org/C18028

4. Steven Simon,https://www.bilibili.com/video/BV1ef4y1S7v2

5. 刘海文,蔻享上可找到他主讲的《固体理论》课程视频.

第一和第三个视频课程是比较标准的固体理论或者凝聚态理论入门课程,难度不高.第二个视频难度高一些,其主要是量子多体物理的课程内容.初学者建议先看1, 3,再学习2.第四个是牛津固体物理课程视频,配套教材是课程主讲Steven Simon自己编写的书《The Oxford Solid State Basics》. 第五个视频是北京师范大学刘海文老师的固体理论课程视频,讲解细致,既有传统固体理论内容也穿插现代进展,推荐观看.

固体物理简要回顾

在本科固体物理的学习中,我们主要回答了以下几个问题:

- 给定一个固体材料,我们如何描述其组成结构?这就是晶体结构(点阵,基元,晶胞,Bragg散射,布里渊区).
- 为什么大量原子会形成固体？这就是固体的形成(原子能级,离子键,共价键,金属键,范德瓦尔斯键,氢键).
- 组成晶体的原子的运动如何描述？这就是晶格动力学和声子(单原子与双原子链,Einstein模型,Dybye模型,声子热导).
- 金属中电子运动如何描述？初步的理论是自由电子气理论(Drude模型,Sommerfeld模型,电子热容).
- 电子在周期势场中的运动如何描述？能带理论完整描述了相关运动(自由电子近似,紧束缚近似,Bloch定理,Bloch电子的半经典运动,费米面).

这里,我们简要回顾能带理论的相关的几个问题.首先,我们知道能带理论的实质是电子填充能带,在零温下,填满的能带为绝缘体和半导体,而部分填充的是金属.数学上,能带理论研究的是处于周期势场中的无相互作用电子,其运动由下列方程描述

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + V_{ext}(\vec{r}_i)\right)\psi(\vec{r}_i) = E\psi(\vec{r}_i) \tag{1.10}$$

为简单起见,我们考虑一维情况,也就是研究如下一维定态Schödinger方程:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x), \quad V(x+a) = V(x) \tag{1.11}$$

这里外势$V(x)$周期为a,而a是晶格间距.Bloch定理表明,在周期势场$V(x)$中运动的电子,其波函数具有如下形式:

$$\psi(x) \to \psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}, \quad u_k(x) = u_k(x+a) \tag{1.12}$$

这说明周期势中运动电子的波函数与自由电子相比,其仍然具有平面波的因子e^{ikx},但由于周期势的存在,还包含一个周期性的部分$u_k(x)$.对于长度为$L = N_s a$ 的系统,若取周期边界条件,则晶体动量$k = \frac{2\pi n}{N_s}, n = 0, 1, 2, 3...N_s - 1$.

接下来把$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$代入Schödinger方程可得

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}(\partial_x + ik)^2 + V(x)\right)u_k(x) = Eu_k(x) \tag{1.13}$$

对给定的k,我们可得一些列本征值$E_{1,k}, E_{2,k}, E_{3,k}...$和对应的本征态$u_{1,k}, u_{2,k}, u_{3,k}....$这些下标$n = 1, 2, 3...$称为能带指标,而$k$则是晶体动量指标.因此,我们得到系统的

本征态为$\psi_{nk}(x) = u_{nk}(x)e^{ikx}$,本征值为$E_{nk}$.对于固定的$n$,改变$k$ 使得E_{nk} 形成带状结构,这就是固体能带.

在讨论Bloch电子在电磁场$\vec{E}, \vec{B}$中运动时,若外加电磁场强度很弱,振荡频率很低,在空间变化足够慢,那么可采用所谓的半经典方法来处理.需要说明,外加场的振荡频率应远小于能带宽度和能带之间的能隙,外加场在空间上的变化在晶格尺度上应是非常平缓的,换句话说,我们要求低频长波的电磁场.此外,半经典的含义是电子的运动用经典牛顿方程描述,而其分布用量子力学所要求的费米分布.对于某一能带中运动的电子,其半经典运动方程是

$$\boxed{\frac{\hbar d\vec{k}}{dt} = \vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v}_k \times \vec{B}), \quad \vec{v}_k = \frac{1}{\hbar}\frac{dE_k}{d\vec{k}}} \tag{1.14}$$

这里$\vec{v}_k$是处于k态时电子的速度,$\vec{k}$取在第一布里渊区.这个方程左边是电子在动量空间中运动的情况,右边反映了实空间中电磁场和速度对运动的影响.[19]此外,根据加速度$\vec{a}_k = d\vec{v}_k/dt$可得

$$a_k^\alpha = dv_k^\alpha/dt = \partial_{k_\beta} v_k^\alpha \frac{dk_\beta}{dt} = \partial_{k_\beta}\left(\frac{1}{\hbar}\partial_{k_\alpha} E_k\right)\frac{F_\beta}{\hbar} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\partial_{k_\alpha}\partial_{k_\beta} E_k\right) F_\beta \tag{1.15}$$

由此,我们可以定义逆有效质量张量:

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\partial_{k_\alpha}\partial_{k_\beta} E_k \tag{1.16}$$

显然,这个有效质量与电子的质量并不相同,它反映的是Bloch电子对于外力的响应.让我们考虑一个简单的例子,即二维正方晶格在有最近邻和次近邻跃迁情况下的电子色散为$E_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t'(\cos k_x \cos k_y)$,则系统的四个逆有效质量张量元素为

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{m^*}\right)_{xx} = 2t\cos k_x + 4t'\cos k_x \quad \left(\frac{1}{m^*}\right)_{yy} = 2t\cos k_y + 4t'\cos k_y \\ &\left(\frac{1}{m^*}\right)_{xy} = \left(\frac{1}{m^*}\right)_{yx} = -4t'\sin k_x \sin k_x. \end{aligned} \tag{1.17}$$

作为半经典理论的具体应用,让我们考虑x方向有常数电场$\mathcal{E}$的情况,此时y, z方向不受影响,即$dk_y/dt = dk_z/dt = 0$,剩下的x方向运动满足

$$\frac{\hbar dk_x}{dt} = -e\mathcal{E} \tag{1.18}$$

此时可解得$k_x(t) = k_x(0) - \frac{e\mathcal{E}t}{\hbar}$,对于简单立方晶格,$k_x$的周期时$2\pi/a$,因此,电子在电场的加速下从初始点$k_x(0)$穿过布里渊区边界重新回到$k_x(0)$所需的时间$T_B$由$k_x(t) - k_x(0) = 2\pi/(\hbar a) = e|\mathcal{E}|T_B$ 决定,即电子运动一周的周期为

$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{e|\mathcal{E}|a} = \frac{h}{e}\frac{1}{a|\mathcal{E}|} \tag{1.19}$$

[19]这两个关系都可以通过定义直接证明,参考附录1.8.2

这类电子由于电场而在布里渊区中产生的周期运动称为Bloch振荡.进一步,我们可以计算电子在实空间的运动情况,比如x方向的位移是

$$x(t)=\int_0^t dt' v_k(t')=\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt'\frac{dE_k}{dk_x}=\frac{1}{\hbar}\int_0^t \frac{dt'}{dk_x}dk_x\frac{dE_k}{dk_x}=\int_0^t dE_k\frac{1}{\hbar dk_x/dt'}=\int_0^t dE_k\frac{1}{-e\mathcal{E}} \tag{1.20}$$

由此,我们得到

$$x(t)=\frac{E_{k(t)}-E_{k(0)}}{-e\mathcal{E}}. \tag{1.21}$$

当$t=T_B$时,$E_{k(T)}=E_{k(0)}$,这样电子位移恰好为零,也就是说,电子在实空间也经历了周期运动而回到出发点.为了在实验上观测到Bloch振荡,我们要求电子运动周期T_B应小于电子的散射寿命.对于典型的电场强度$\mathcal{E}=1V/m$,晶格间距$a=10^{-10}m$,我们有$T_B\sim 10^{-5}s$,这个时间明显比室温下金属中电子寿命$\tau\sim 10^{-14}s$要大很多,因此在通常的金属中难以观测到Bloch振荡.高纯度半导体超晶格出现后,人们在低温下测量了位移与时间的关系,其结果与理论预言基本一致,这证实了Bloch振荡效应.[20]

现在,让我们考虑电磁场同时存在的情况,我们设恒定磁场沿着z轴的正方向$\vec{B}=B\vec{e}_z$, 且电子的寿命为τ,那么有

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar dk_x}{dt}+\frac{\hbar}{\tau}k_x&=-eE_x-ev_yB\\
\frac{\hbar dk_y}{dt}+\frac{\hbar}{\tau}k_y&=-eE_y+ev_xB\\
\frac{\hbar dk_z}{dt}+\frac{\hbar}{\tau}k_z&=-eE_z
\end{aligned} \tag{1.22}$$

对于很纯的样品,电子散射率$\hbar/\tau$为小量可忽略,(与$\omega_c=\frac{eB}{m}$比较)那么在系统达到稳定时有$d\vec{k}/dt=0$,则有$v_x=\frac{E_y}{B}$. 注意到经典电流密度为$j_x=n(-e)v_x$同时与电导率之间满足$j_x=\sigma_{xx}E_x, j_x=\sigma_{xy}E_y$.由此可得

$$\sigma_{xy}=\frac{j_x}{E_y}=\frac{n(-e)v_x}{E_y}=\frac{-ne}{B} \tag{1.23}$$

这样系统的Hall电阻率$\rho_{xy}=1/\sigma_{xy}=\frac{1}{-ne}B$实际上正比于磁场$B$,而比例系数$\frac{1}{-ne}$称为Hall系数,其代表系统载流子的浓度和电荷正负,对电子型载流子为负,而空穴型则为正.

本章小结和进一步阅读

本章小结 凝聚态物理尽管基本方程确认无疑且处理的基本对象是电子和原子实,然而由于材料结构的复杂性以及相互作用的丰富性,实际的凝聚态物质总给人们不断的惊喜.

[20] Lyssenko et al.,Phys.Rev.Lett.**79**,301(1997).当然,这里讨论的是弱电场时的情况,当电场强度足够时会发生电击穿,此时电子会从一个能带隧穿到另一个能带,其隧穿的概率可以通过量子力学估计.(附录1.8.3)

本章关键词 凝聚态物理;凝聚态理论;呈展论

进一步阅读 冯端和金国钧合著《凝聚态物理学》(上卷)的绪论部分(p1-p22);文小刚的《Quantum Field Theory of Many-body Systems》第一章

附录

常用能量单位与换算

在凝聚态物理的研究中,我们会常常遇到不同能量单位之间的转换,例如电子伏eV,热能k_BT以及磁能μ_BB.所谓电子伏,就是带电量为单位电荷$e = 1.60 \times 10^{-19}C$($C$是电荷单位库伦,其物理意义是若导线中载有1安培的稳恒电流,则在1秒内通过导线横截面积的电量为1库仑.)的粒子在1伏特电势下的能量,即

$$1eV = 1.60 \times 10^{-19}J \tag{1.24}$$

J代表能量单位焦耳.常用的还有毫电子伏,即$meV = 10^{-3}eV$,则

$$1meV = 1.60 \times 10^{-22}J. \tag{1.25}$$

对于热能,我们通常以温度为$1K$时的能量作为基准,(K是绝对温标的温度单位开尔文),即

$$k_B1K = 1.38 \times 10^{-23}J \tag{1.26}$$

$k_B = 1.38 \times 10^{-23}J/K$是玻尔茨曼常数.对于磁能,1特斯拉磁场时的能量为

$$\mu_B1T = 9.27 \times 10^{-24}J \tag{1.27}$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27 \times 10^{-24}J/T$是玻尔磁子,$\hbar = h/2\pi$是约化普朗克常数,$h = 6.63 \times 10^{-34}J/s$是普朗克常数,$m_e = 9.11 \times 10^{-31}kg$为电子质量.

通常,为了表述方便,在叙述磁能和热能时,我们会忽略k_B, μ_B,而直接用$1K$或者$1T$来指代相应的能量.例如$1eV$的能量可以换算为

$$1ev = 11594K = 17260T \tag{1.28}$$

也就是说$1eV$的能量等价于温度为$11594K$时的热量以及磁场为$17260T$的磁能.一般我们关心的凝聚态物质,其温度从$10^{-3}K$到10^2K,相应的能量与电子伏相比都是小量.而实验室中磁场最大值为$50T$,这远小于$1eV$.由于eV单位过大,因此我们也用meV,则有

$$\boxed{1mev = 11.6K = 17.3T} \tag{1.29}$$

在简单估计数量级时,也常用$1meV \sim 10K \sim 15T$.最后,热能与磁能间的换算为

$$1K = 1.5T, \quad 1T = 0.66K. \tag{1.30}$$

这样,$50T$的磁场能量对应为$33K$的温度,也对应$3meV$的能量.

半经典方程的证明

根据定义,电子在k态(Bloch态)的x方向速度平均值为

$$v_k = \langle\psi_k|\frac{d\hat{x}}{dt}|\psi_k\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi_k|\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}|\psi_k\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int dx\psi_k^*(xH - Hx)\psi_k \quad (1.31)$$

同时,我们对本征方程$H\psi_k = E_k\psi_k$两边对k求导可得$\nabla_k(H\psi_k) = \nabla_k(E_k\psi_k)$,同时

$$\nabla_k(H\psi_k) = iHx\psi_k + He^{ikx}\nabla_k u_k \quad \nabla_k(E_k\psi_k) = \nabla_k E_k\psi_k + ixH\psi_k + E_k e^{ikx}\nabla_k u_k \quad (1.32)$$

这样把导数的具体结果代入可得

$$(\nabla_k E_k + ixH - iHx)\psi_k = (H - E_k)e^{ikx}\nabla_k u_k. \quad (1.33)$$

现在,把上式两边左乘ψ_k^*并对x积分可得

$$\int dx\psi_k^*(\nabla_k E_k + ixH - iHx)\psi_k = \int dx\psi_k^*(H - E_k)e^{ikx}\nabla_k u_k. \quad (1.34)$$

由于$\int dx\psi_k^* He^{ikx}\nabla_k u_k = \int dx(H\phi_k)^* e^{ikx}\nabla_k u_k = \int dx(E_k\phi_k)^* e^{ikx}\nabla_k u_k = \int dx\phi_k)^* E_k e^{ikx}\nabla_k u_k$,因此上述方程右边为零,则左边为

$$\int dx\psi_k^*(\nabla_k E_k + ixH - iHx)\psi_k = 0 \Rightarrow \nabla_k E_k = -\int dx\psi_k^*(ixH - iHx)\psi_k = \hbar v_k \quad (1.35)$$

由此我们证明了$v_k = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E_k$.对于三维情况,自然有$\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar}\frac{dE_k}{d\vec{k}}$.

根据经典力学的定义,我们知道能量对时间的导数是功率,也就是力乘以速度,即有$\frac{dE_k}{dt} = \vec{F}\cdot\vec{v}_k$. 对于$\frac{dE_k}{dt}$我们有

$$\frac{dE_k}{dt} = \frac{dE_k}{d\vec{k}}\cdot\frac{d\vec{k}}{dt} = \hbar\vec{v}_k\cdot\frac{d\vec{k}}{dt} \quad (1.36)$$

这样我们有

$$\hbar\vec{v}_k\cdot\frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}\cdot\vec{v}_k \Rightarrow \left(\frac{\hbar d\vec{k}}{dt} - \vec{F}\right)\cdot\vec{v}_k = 0 \quad (1.37)$$

因此有$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}$.

电子隧穿

在量子力学中,电子在运动过程中如果遇到能量高于自身动能的势垒,那么除了反射之外还存在一定的透射,也就是隧穿过势垒的部分.为明确起见,考虑一维势垒问题,此时在$x \in [0, a]$区域存在高度为$V_0 > 0$的势垒,其他区域电子势能都为零.现在能量为$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < V_0$的电子从左边,也就是从$x < 0$一边入射.显然,遇

到势垒后会有一部分电子波反射,剩下的则可以隧穿过势垒而出现在$x > a$的区域.这样,$x < 0$区域的波函数是

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Re^{-ikx} \tag{1.38}$$

这里Ae^{ikx}是入射波,Re^{-ikx}是反射波.A, R分别是入射波与反射波的振幅.在$x > a$的区域,仅存在自由的透射波,即$\psi(x) = De^{ikx}$.在势垒存在的区域$x \in [0, a]$,波函数是指数型的$\psi(x) = Be^{-\lambda x} + Ce^{+\lambda x}$. 利用定态Schodinger方程以及在$x = 0, a$处波函数及其导数的连续性可得电子隧穿过势垒的几率或者说是透射率为

$$T = \frac{|D|^2}{|A|^2} \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2a\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}} \tag{1.39}$$

如果我们取$a = 10^{-10}m, V_0 - E = 1eV$,那么$T \sim 0.4$,这说明电子有不小的概率隧穿过一个电子伏级别的势垒.

对于一般形状的势垒$V(x)$,电子隧穿的几率可估计为

$$T \sim e^{-2\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}}} \tag{1.40}$$

这里x_1, x_2是经典的回转点,也就是电子能量$E = V$的位置,或者说是(经典)电子动能恰好完全转化为势能的点.

高斯单位制与国际单位制

在涉及电磁现象的研究中,常用的单位制是高斯单位制与国际单位制,例如高斯单位制中电子间的Coulomb 势写成$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{|\vec{r}|}$.而在国际单位制中,同样的Coulomb势是$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$.

对于Lorentz力,高斯制为$\vec{f} = q(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B})$,国际单位制中有$\vec{f} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$.最重要的Maxwell方程在国际单位制中具有如下形式:

$$\begin{aligned}
&\nabla \cdot \vec{D} = \rho \\
&\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\
&\nabla \cdot \vec{B} = 0 \\
&\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}
\end{aligned} \tag{1.41}$$

其中$\vec{D} = \epsilon_0\vec{E} + \vec{P}, \vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$. 而在高斯制中则有

$$\begin{aligned}
&\nabla \cdot \vec{D} = 4\pi\rho \\
&\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{c\partial t} \\
&\nabla \cdot \vec{B} = 0 \\
&\nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{c\partial t}
\end{aligned} \tag{1.42}$$

其中$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}, \vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M}$.

序章习题

习题1:一些概念

Q1:对于还原论和呈展论各列举一个例子进行说明.

Q2:解释什么是能带理论,并用其解释金属与绝缘体的区别.

Q4:解释什么是费米面,并画出一维费米气体的费米面.

习题2:Drude电导率

Q:设金属电子满足经典牛顿方程$m\frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} - m\frac{\vec{v}}{\tau}$.$\tau$ 代表弛豫时间.考虑x方向的均匀交流电场$\vec{E} = E_0 e^{-i\omega t}\vec{e}_x$,根据电流密度公式$\vec{j} = -ne\vec{v}$以及欧姆定律$\vec{j} = \sigma\vec{E}$,推导Drude电导率$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m}\frac{1}{1-i\omega\tau} = \frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau}$.

习题3:Wiedemann-Franz律

Q:金属在不太低的温度下,其热导率与电导率之比正比于温度且比例常数值不依赖具体金属,这就是著名的Wiedemann-Franz律.试根据金属电子气的电导率,热导率解释这一结果.

Bibliography

[1] Daniel I. Khomskii, Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids, 第八章,第九章

Chapter 2

二次量子化:冒险开始

一次与二次量子化:谁更受欢迎?

在这一章,我们将讨论量子多体物理的基础,即所谓的二次量子化形式.这里的二次的含义是指相对于通常《量子力学》课程中的量子化过程,也就是再进行一次量子化.然而,这种再一次量子化的理解并不准确,二次量子化就实质而言是对场的量子化.例如在量子力学中,电磁场是作为经典场存在,并没有进行量子化.(Zeeman效应,Stark 效应)这在非相对论情况下是合理的近似,然而在涉及粒子产生湮灭的高能粒子反应与碰撞中,电磁场的量子化不可避免.既然电磁场用势$A_\mu = (\phi, \vec{A})$描述,并且$\vec{A}$ 满足标准波动方程形式[1], 那么自然会认为$\vec{A}$就是电磁场的波函数,这样不就已经量子化了.但是根据我们都熟知的Einstein 光量子(光子)假设以及光电效应的实验,电磁场的量子形式必然是以光子为基础而非所谓的电磁场波函数.类似于量子力学中谐振子的升降算符处理,电磁场的激发,即光子也用升降算符(例如$\hat{a}^\dagger, \hat{a}$)表示,并且系统的哈密顿量具有简单的形式$\hat{H} \sim \sum_{k\lambda} \hbar\omega_k \hat{a}^\dagger_{k\lambda}\hat{a}_{k\lambda}$.($\lambda$ 代表极化方向)这样,电磁场自然地用光子描述,但对于我们一般处理的凝聚态系统中的大量电子,这种自然量子化并不存在,因此我们的任务是找到相应的正确处理方式,这也是本章的核心.

回忆一次量子化的基本内容.首先写出系统的经典哈密顿量,[2]考虑单个粒子的情形有

$$H = H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{2.1}$$

这里x和p分别是粒子的正则坐标和正则动量,并满足如下哈密顿方程

$$\dot{x} \equiv \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} \equiv \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \tag{2.2}$$

然后,我们把正则坐标和正则动量都换成算符$x \to \hat{x}, p \to \hat{p}$,并赋予正则对易关系

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{2.3}$$

此时体系的经典哈密顿量换成量子哈密顿量

$$H \to \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{2.4}$$

而粒子的运动状态由波函数$\psi(x,t)$描述并满足Schödinger方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) \tag{2.5}$$

- 一次量子化的本质:把经典的数换成算符
- 在二次量子化形式中,我们把波函数提升为算符并赋予相应的对易关系:

$$\psi \to \hat{\psi}, \quad \psi^* \to \hat{\psi}^\dagger \tag{2.6}$$

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)]_\pm = \delta(x-y) \tag{2.7}$$

[1] 真空中为$\partial_t^2\vec{A} - c^2\nabla^2\vec{A} = 0$.

[2] 更好的出发点是以坐标x和速度$\dot{x}$为基本变量的拉格朗日形式,即$L(x,\dot{x}) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)$.再由$p = \partial L/\partial\dot{x}$得到动量,进而获得哈密顿量$H = p\dot{x} - L$.

其中$\hat{\psi},\hat{\psi}^{\dagger}$称为场算符,费米子体系的场算符满足反对易关系而玻色子系统满足对易关系.历史上,把波函数解释为算符值的场算符的想法可以归功于E.P.Jordan.同时,原先波函数的作用由状态矢量$|\Psi\rangle$代替.

在解释二次量子化之前,我们先看看一次量子化形式,也就是通常量子力学如何描述多粒子系统.

一次量子化形式中的多体波函数:容纳所有伙伴的函数

考虑N个全同粒子组成的系统,(可以是大量的电子或者氦-3,氦-4原子)这个体系在位置/坐标空间的N粒子波函数是

$$\langle\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N|\psi\rangle\equiv\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N)=\psi(\{\vec{r}_i\}) \tag{2.8}$$

在量子力学中,如果粒子不可分辨,那么当交换粒子坐标时概率密度$|\psi(\{\vec{r}_i\})|^2$必须不变($\vec{r}_j$不仅代表空间坐标,更一般地也表示自旋,轨道等指标.).[3]

也就是说交换两个粒子体系波函数最多只能改变一个相位

$$P_{jk}\psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_j,...,\vec{r}_k,...,\vec{r}_N)=e^{i\varphi}\psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_k,...,\vec{r}_j,...,\vec{r}_N) \tag{2.9}$$

P_{jk}代表交换粒子坐标$\vec{r}_j$和$\vec{r}_k$而保持其他粒子不变的所谓置换(permutation)操作.显然,再一次对波函数交换坐标$\vec{r}_j$和$\vec{r}_k$必然使得波函数还原即

$$\begin{aligned}&P_{kj}P_{jk}\psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_j,...,\vec{r}_k,...,\vec{r}_N)=e^{i\varphi}P_{kj}\psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_k,...,\vec{r}_j,...,\vec{r}_N)\\&=e^{i2\varphi}\psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_j,...,\vec{r}_k,...,\vec{r}_N)=\psi(\vec{r}_1,...,\vec{r}_j,...,\vec{r}_k,...,\vec{r}_N)\end{aligned} \tag{2.10}$$

因此相位必须满足

$$e^{i2\varphi}=1 \tag{2.11}$$

此时$\varphi=0$或$\varphi=\pi$.[4]

- $P\psi=+\psi$,表示交换粒子相位不变,(交换对称)或者说在置换操作P_{jk}下是偶函数,这对应于玻色子系统.
- $P\psi=-\psi$,表示交换粒子波函数改变一个负号,(交换反对称)即在置换操作P_{jk}下是奇函数,这对应于费米子系统.

[3]这里的原因一方面在于如此假设所得结果符合实验事实,另一方面则是我们认定只有粒子在空间的分布或者说粒子密度分布是物理可观测量,而波函数以及其相位本身是不可观测量.对于不可观测量,其在各种操作下可以改变,而物理观测量则必须是不变量.这里就是要求波函数的模方不变而波函数相位具有任意性.这类对不变量或者说不变性的追求构成了现代物理的基础.

[4]在一维和二维情况下其他类型的相位因子也是可能的,例如分数量子Hall效应中的任意子(anyon),其相互交换产生的相位可以是任意有理数甚至是矩阵形式,后者对应非阿贝尔任意子(non-abelian anyon),其在拓扑量子计算(topological quantum computation)中十分重要.

同时,相对论性量子场论中的自旋–统计定理告诉我们粒子的自旋与其交换产生的相位因子紧密联系,即整数自旋对应的粒子是玻色子而半整数自旋对应费米子.注意到该定理仅对满足相对论性方程的基本实物粒子成立,对于凝聚态当中大量层展而出的准粒子或者有效粒子而言,可以出现带自旋为零的费米子和自旋半整数的玻色子.当然这些奇怪的粒子只在凝聚态材料中运动并不能在真空中出现,因为它们是凝聚态物质中的某种集体激发行为.

那么如何写出一个合适的对称或反对称N粒子波函数呢？显然,我们最熟悉的是单粒子的波函数,那么很直接的一种考虑就是让每个粒子都用各自的单粒子波函数描述,然后再把它们直接乘在一起.数学上,我们考虑任意一组完备的单粒子波函数,也就是单粒子态的集合,例如$\{\phi_\alpha\}, \alpha = 1, 2...$标记不同的单粒子态.现在,我们让第一个粒子处于$\phi_{\alpha_1}$态,第二个粒子处于$\phi_{\alpha_2}$态,依此类推,第$N$ 个粒子处于ϕ_{α_N}.把这些单粒子态乘在一起就可以构造出如下乘积形式的波函数:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N | \psi \rangle = \phi_{\alpha_1}(\vec{r}_1)\phi_{\alpha_2}(\vec{r}_2)...\phi_{\alpha_N}(\vec{r}_N) \tag{2.12}$$

当$\alpha_1, \alpha_2...\alpha_N$取遍所有可能的取值,我们就得到上述乘积形式波函数的所有可能.换句话说,此时任意多粒子波函数都可以通过这些波函数的叠加来获得,也就是

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \sum_{\alpha_1, \alpha_2...\alpha_N} C_{\alpha_1, \alpha_2...\alpha_N}\phi_{\alpha_1}(\vec{r}_1)\phi_{\alpha_2}(\vec{r}_2)...\phi_{\alpha_N}(\vec{r}_N). \tag{2.13}$$

注意到态矢量

$$|\psi\rangle = |\phi_{\alpha_1}, \phi_{\alpha_2}...\phi_{\alpha_N}\rangle = |\phi_{\alpha_1}\rangle \otimes |\phi_{\alpha_2}\rangle ... \otimes |\phi_{\alpha_N}\rangle = |\{\phi\}\rangle \tag{2.14}$$

是不同粒子Hilbert空间的张量乘积,我们一般也把这种张量乘积形式的态称为乘积态(product state).

现在,我们要求波函数需要满足交换对称或者反对称性,这可以通过先固定每个粒子所处状态,然后再做状态的交换来实现.让我们举一个例子来说明如何构造对称或反对称波函数.考虑三个全同粒子,它们可能占据的状态是ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3,那么可以构造的其中一个状态是

$$\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)\phi_3(\vec{r}_3) \tag{2.15}$$

然后我们交换$\vec{r}_1, \vec{r}_2$可得新的状态

$$\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)\phi_3(\vec{r}_3) \tag{2.16}$$

如果我们交换$\vec{r}_1, \vec{r}_3$可得

$$\phi_1(\vec{r}_3)\phi_2(\vec{r}_2)\phi_3(\vec{r}_1) \tag{2.17}$$

再交换$\vec{r}_2, \vec{r}_3$可得

$$\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_3)\phi_3(\vec{r}_2) \tag{2.18}$$

然后交换$\vec{r}_1,\vec{r}_2$，$\vec{r}_2,\vec{r}_3$可得

$$\phi_1(\vec{r}_3)\phi_2(\vec{r}_1)\phi_3(\vec{r}_2) \tag{2.19}$$

最后我们连续交换$\vec{r}_2,\vec{r}_3$，$\vec{r}_1,\vec{r}_2$

$$\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_3)\phi_3(\vec{r}_1). \tag{2.20}$$

现在,我们可以把它们直接加在一起,这样系统的波函数是

$$\begin{aligned}\psi=\frac{1}{\sqrt{3!}}[&\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)\phi_3(\vec{r}_3)+\phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)\phi_3(\vec{r}_3)+\phi_3(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)\phi_1(\vec{r}_3)\\&+\phi_1(\vec{r}_1)\phi_3(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_3)+\phi_2(\vec{r}_1)\phi_3(\vec{r}_2)\phi_1(\vec{r}_3)\rangle+\phi_3(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_3)]\end{aligned} \tag{2.21}$$

很显然,这个波函数对任意两个粒子的交换都是对称的,这说明其描述的是玻色子系统.如果我们要求其描述费米子,那么最简单的方案是我们要求除了第一个参考的波函数$\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)\phi_3(\vec{r}_3)$以外,对其他波函数而言,若波函数可以通过参考态交换奇数次粒子坐标实现,那么相应的状态前面必须有一个负号,反之偶数次交换不产生负号.这样,我们发现交换反对称而能够描述费米子的态是

$$\begin{aligned}\psi=\frac{1}{\sqrt{3!}}[&\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)\phi_3(\vec{r}_3)-\phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)\phi_3(\vec{r}_3)-\phi_3(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)\phi_1(\vec{r}_3)\\&-\phi_1(\vec{r}_1)\phi_3(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_3)+\phi_2(\vec{r}_1)\phi_3(\vec{r}_2)\phi_1(\vec{r}_3)\rangle+\phi_3(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_3)]\end{aligned} \tag{2.22}$$

注意到费米子的波函数也可以写为Slater行列式的形式,即

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{3!}}\mathrm{Det}\begin{pmatrix}\phi_1(\vec{r}_1)&\phi_1(\vec{r}_2)&\phi_1(\vec{r}_3)\\\phi_2(\vec{r}_1)&\phi_2(\vec{r}_2)&\phi_2(\vec{r}_3)\\\phi_3(\vec{r}_1)&\phi_3(\vec{r}_2)&\phi_3(\vec{r}_3)\end{pmatrix}. \tag{2.23}$$

- 上述三粒子体系波函数也可以写成紧凑的形式,即$\psi=\frac{1}{\sqrt{3!}}\sum_{i,j,k=1}^{3}\epsilon^{ijk}\phi_i(\vec{r}_1)\phi_j(\vec{r}_2)\phi_k(\vec{r}_3)$. 这里$\epsilon^{ijk}$是全反对称张量.

一般地,通过对参考的某个乘积形式波函数做对称或反对称化处理可得如下形式的对称/反对称波函数:

$$\psi(\{\vec{r}_i\})=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P\rho\phi_{P_1}(\vec{r}_1)\phi_{P_2}(\vec{r}_2)\phi_{P_3}(\vec{r}_3)...\phi_{P_N}(\vec{r}_N) \tag{2.24}$$

这里求和对所有$N!$个可能的状态指标的置换求和,$\rho=\mathrm{sign}(P)=\pm1$代表相应的置换/交换的符号.对于$N$个全同费米子,其多体Slater波函数形式如下

$$\boxed{\psi(\{\vec{r}_i\})=\frac{1}{\sqrt{N!}}\mathrm{Det}\begin{pmatrix}\phi_1(\vec{r}_1)&\phi_1(\vec{r}_2)&...&\phi_1(\vec{r}_N)\\\phi_2(\vec{r}_1)&\phi_2(\vec{r}_2)&...&\phi_2(\vec{r}_N)\\...&...&...&...\\\phi_N(\vec{r}_1)&\phi_N(\vec{r}_2)&...&\phi_N(\vec{r}_N)\end{pmatrix}}. \tag{2.25}$$



Figure 2.1: Erwin Schödinger(1887−1961),Werner Karl Heisenberg(1901−1976)和Paul Adrien Maurice Dirac(1902 − 1984).Schödinger 和Dirac因原子理论的新形式的发现荣获1933年诺贝尔物理学奖.Heisenberg因对量子力学的产生所做出的贡献荣获1932 年诺贝尔物理学奖.

注意到在Slater行列式中如果任意两个波函数ϕ_α指标相同,那么相应的行列式自动为零,这体现了费米子的Pauli不相容原理. [5]

当然对于两个全同的玻色子和费米子,其波函数是最基本的

$$\psi^B(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)+\phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)) \tag{2.26}$$

$$\psi^F(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)-\phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)) \tag{2.27}$$

最后,我们强调这里构造出的对称或反对称N粒子波函数一般而言并不是多体系统的本征态,但是所有可能的这类波函数的集合可以构成一个完备的基矢,用来展开任意波函数.[6]我们会发现系统真实的本征态必定是这些对称或反对称波函数的线性叠加,问题的核心自然在于叠加系数如何确定,然而这是一个困难的问题.在具体描述困难之前,让我们看一个一次量子化应用的例子,即铁磁交换作用的产生.

一次量子化的简单应用:铁磁交换作用的产生

考虑两个电子占据两个正交轨道,例如五个d轨道中的某两个,记为$|\phi_a\rangle,|\phi_b\rangle$并满足正交归一条件$\langle\phi_a|\phi_b\rangle=\delta_{ab}$.两电子系统的哈密顿量是

$$H=H_0(1)+H_0(2)+\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \tag{2.28}$$

并且$|\phi_a\rangle,|\phi_b\rangle$是单电子本征态

$$H_0|\phi_a\rangle=\varepsilon_a|\phi_a\rangle,\quad H_0|\phi_b\rangle=\varepsilon_b|\phi_b\rangle \tag{2.29}$$

[5]两个Slater行列式波函数的重叠度为$\langle\varphi|\psi\rangle=\mathrm{Det}[\varphi^\dagger\psi]$,即对应矩阵相乘后取行列式.
[6]这组基矢并不满足正交性

根据费米子波函数的反对称要求,可构造四个两电子波函数

$$|\psi_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_a(1),\phi_b(2)\rangle - |\phi_b(1),\phi_a(2)\rangle)|\uparrow\uparrow\rangle \tag{2.30}$$

$$|\psi_{1-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_a(1),\phi_b(2)\rangle - |\phi_b(1),\phi_a(2)\rangle)|\downarrow\downarrow\rangle \tag{2.31}$$

$$|\psi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_a(1),\phi_b(2)\rangle - |\phi_b(1),\phi_a(2)\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{2.32}$$

$$|\psi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_a(1),\phi_b(2)\rangle + |\phi_b(1),\phi_a(2)\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{2.33}$$

注意前三个波函数的自旋部分是三重态(triplet),而最后一个波函数的自旋部分是单重态(singlet).由于Coulomb相互作用本身不涉及自旋,相应的计算容易给出这四个态都是系统本征态,能量是

$$\langle\psi_{11}|H|\psi_{11}\rangle = \langle\psi_{1-1}|H|\psi_{1-1}\rangle = \langle\psi_{10}|H|\psi_{10}\rangle = \varepsilon_a + \varepsilon_b + C - J \tag{2.34}$$

$$\langle\psi_{00}|H|\psi_{00}\rangle = \varepsilon_a + \varepsilon_b + C + J \tag{2.35}$$

$$C \equiv \langle\phi_a(1),\phi_b(2)|\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}|\phi_a(1),\phi_b(2)\rangle = \langle\phi_b(1),\phi_a(2)|\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}|\phi_b(1),\phi_a(2)\rangle > 0$$

$$J \equiv \langle\phi_a(1),\phi_b(2)|\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}|\phi_b(1),\phi_a(2)\rangle = \langle\phi_b(1),\phi_a(2)|\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}|\phi_a(1),\phi_b(2)\rangle > 0$$

这说明对于处于正交态上的电子,Coulomb相互作用使得它们倾向于自旋三重态的排列方式,也就是铁磁型的自旋排列.注意到在自旋三重态,空间波函数部分是单重态,也就是说两个电子在实空间的重叠下降进而避免Coulomb 相互作用导致的能量增加.

同时,注意到这里的四个态可对应于两个$S=1/2$自旋耦合的量子Heisenberg模型,即

$$|\psi_{11}\rangle \leftrightarrow \chi_{11} = |\Uparrow\rangle, |\psi_{1-1}\rangle \leftrightarrow \chi_{1-1} = |\Downarrow\Downarrow\rangle \tag{2.36}$$

$$|\psi_{10}\rangle \leftrightarrow \chi_{10} = \frac{1}{2}(|\Uparrow\Downarrow\rangle + |\Downarrow\Uparrow\rangle), |\psi_{00}\rangle \leftrightarrow \chi_{00} = \frac{1}{2}(|\Uparrow\Downarrow\rangle - |\Downarrow\Uparrow\rangle) \tag{2.37}$$

左边是两电子系统本征态,右边是对应的两个自旋$S=1/2$系统的四个本征态.再定义有效自旋耦合$J_{eff}=2J$,常数能量移动$\varepsilon_0 = \varepsilon_a + \varepsilon_b - \frac{J}{2}$, 那么正交轨道下的双电子模型等效于如下自旋模型:

$$\hat{H} = -J_{eff}\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 + \varepsilon_0 \tag{2.38}$$

可以看到这是一个等效的铁磁Heisenberg模型.

- 正交轨道间的直接交换(J项)导致铁磁型的耦合,如果考虑氢分子问题,那么原子间的轨道将不会正交,此时电子在轨道间的间接交换导致反铁磁型的耦合.

- Coulomb相互作用与电子的费米统计共同作用导致磁性(相互作用)的产生.

另一个例子:密度泛函理论

密度泛函理论(density functional theory),一般简称为DFT,是现代材料电子结构计算的基础.DFT的基本出发点是Hohenberg-Kohn定理,这个定理是说:相互作用电子系统的基态物理性质由系统自身的基态电子密度唯一决定.这样,原来需要求解巨大数量变量(每个电子的坐标,自旋...)的问题转化为求解单个变量(电子密度)的更简单问题.通过基态电子密度我们就能够对材料的各类物性做出准确的预言.

但是仅有HK定理并不能指导我们做实际的计算,为此Kohn和Sham(沈吕九)提出了一个实用的形式,即著名的Kohn-Sham 形式.在这个形式中,我们考虑一个无相互作用的电子系统,即为一个辅助的系统,然后通过构造合适的势能使得该系统的基态电子密度与待求解的相互作用系统的密度一致.(电子密度是DFT中最核心的量)具体而言,辅助系统的单粒子Schödinger方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_s(r)\right)\phi_i(r) = \varepsilon_i\phi_i(r), \quad \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3... \tag{2.39}$$

这里ϕ_i是辅助的无相互作用的单电子波函数,ε_i是相应的本征能量.$V_s(r)$ 是一个等效的单电子势能,其形式为

$$V_s(r) = V_{ext}(r) + \int dr' \frac{e^2}{|r-r'|} n(r') + V_{xc}(r) \tag{2.40}$$

V_{ext}是电子感受到的外势,例如晶格的周期势.上式的第二部分反映的是r处的电子感受到空间其他位置电子对它的直接Coulomb相互作用,也就是所谓的Hartree项.V_{xc}是交换−关联能,是包括电子之间的交换能以及更复杂的关联效应的贡献.一般而言,V_{xc}是电子密度的复杂函数,可以包含空间非局域的依赖.如果假定V_{xc}是电子密度$n(r)$的函数,那么相应的V_{xc}称为局域密度近似(local density approximation,LDA)下的交换关联势,此时整个理论形式称为DFT-LDA形式.

假定我们已经求解出每一个ϕ_i,那么N电子系统的基态电子密度就是$n(r) = \sum_{i=1}^{N} |\phi_i(r)|^2$.当然,这个$n(r)$并不是最终的结果,我们需要把$n(r)$带入到交换关联势$V_{xc}$具体形式中得到新的交换关联势,然后再重复求解$\phi_i$以达到自洽,也就是波函数$\phi_i$以及电子密度$n(r)$不再变化了.这样,最后自洽(收敛)后的电子密度$n(r)$就是待求系统的基态电子密度,$\varepsilon_i$就是待求系统的电子能带结构.

- V_{xc}的具体形式有时会选取RPA近似下的Coulomb电子气或者直接通过拟合蒙特卡洛模拟结果来获得.
- DFT把相互作用等效用V_{xc}代替,这相当于转移了困难,对于复杂的体系和强关联系统,一般的V_{xc} 形式并不好用.(会结合强关联系统的方法,例如DMFT等来进行更为复杂但可靠的计算)
- 具体计算时往往采用成熟的软件来进行,例如VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package) 软件包.

Hartree-Fock近似

考虑N个全同费米子所组成体系的哈密顿量是

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m}+U(\vec{r}_i)\right]+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V(\vec{r}_i,\vec{r}_j)=\sum_{i=1}^{N}T_i+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V_{ij} \tag{2.41}$$

这里$U(\vec{r}_i),V(\vec{x}_i,\vec{r}_j)$代表粒子的势能和相互作用.为了简单起见,我们暂时忽略自旋自由度.假设单粒子的动能和势能$T_i\equiv\frac{\vec{p}_i^2}{2m}+U(\vec{r}_i)$所对应的本征态是$\{\phi_\alpha(\vec{r}_i)\}$,本征能量是$\{\varepsilon_\alpha\}$,$\alpha=1,2,3...$按照能量从低到高排列.现在我们考虑两类多体波函数,第一类是乘积态:

$$\psi_{prd}(\vec{r}_1...\vec{r}_N)=\phi_1(\vec{r}_1)...\phi_N(\vec{r}_N), \tag{2.42}$$

这说明第一个粒子处于能量最低的单粒子态,第二个粒子处于第一激发态,其他粒子以此类推.第二类是反对称化后的态,其满足费米子波函数反对称的基本要求:

$$\psi_{sym}(\vec{r}_1...\vec{r}_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\alpha_1...\alpha_N=1}^{N}\epsilon^{\alpha_1...\alpha_N}\phi_{\alpha_1}(\vec{r}_1)...\phi_{\alpha_N}(\vec{r}_N). \tag{2.43}$$

现在,我们分别计算两类波函数所对应的能量.首先考虑乘积态,$E_{prd}=E_0+E_{Hartree}$:

$$\begin{aligned}E_0 &= \int d\vec{r}_1...\int d\vec{r}_N\psi^*_{prd}(\vec{r}_1...\vec{r}_N)\sum_{j=1}^{N}T_j\psi_{prd}(\vec{r}_1...\vec{r}_N)\\ &= \sum_{j=1}^{N}\prod_{i\neq j}\overbrace{\int d\vec{r}_i|\phi_i^*(\vec{r}_i)|^2}^{=1}\int d\vec{r}_j\phi_j^*(\vec{r}_j)T_j\phi_j(\vec{r}_j)\\ &= \sum_{j=1}^{N}\varepsilon_j.\end{aligned} \tag{2.44}$$

这说明能量E_0可以理解为第一到第N个能级都被粒子占据.

$$\begin{aligned}E_{Hartree} &= \int d\vec{r}_1...\int d\vec{r}_N\psi^*_{prd}(\vec{r}_1...\vec{r}_N)\frac{1}{2}\sum_{j\neq k}V_{jk}\psi_{prd}(\vec{r}_1...\vec{r}_N)\\ &= \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\prod_{i\neq j,k}\overbrace{\int d\vec{r}_i|\phi_i^*(\vec{r}_i)|^2}^{=1}\int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k\phi_j^*(\vec{r}_j)\phi_k^*(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_j(\vec{r}_j)\phi_k(\vec{r}_k)\\ &= \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k|\phi_j^*(\vec{r}_j)|^2V_{jk}|\phi_k(\vec{r}_k)|^2.\end{aligned} \tag{2.45}$$

注意到上述能量可以分解为两两相互作用,第j个粒子通过相互作用V_{jk}与第k个粒子相互作用,其相互作用依赖于第j和第k个粒子的密度$|\phi_j^*(\vec{r}_j)|^2,|\phi_k(\vec{r}_k)|^2$.一般我们把乘积态波函数所得到的相互作用能$E_{Hartree}$称作Hartree能量,乘积

态ψ_{prd}称作Hartree波函数.注意到ψ_{prd}波函数本身只是相互作用体系本征态的近似,因此这种做法也叫做Hartree近似.

- ψ_{prd}波函数本身不具有费米子的反对称性,因此某种程度上可以理解为经典极限下费米子的波函数,其算出的相互作用能$E_{Hartree}$可视作经典相互作用能.

接下来,我们考虑反对称波函数ψ_{sym},我们称其为Hartree-Fock波函数.

$$\begin{aligned}
E_0 &= \int d\vec{r}_1 ... \int d\vec{r}_N \psi^*_{sym}(\vec{r}_1 ... \vec{r}_N) \sum_{j=1}^{N} T_j \psi_{sym}(\vec{r}_1 ... \vec{r}_N) \\
&= \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 ... \alpha_N} \sum_{\beta_1 ... \beta_N} \epsilon^{\alpha_1 ... \alpha_N} \epsilon^{\beta_1 ... \beta_N} \prod_{i \neq j} \int d\vec{r}_i \phi^*_{\alpha_i}(\vec{r}_i) \phi_{\beta_i}(\vec{r}_i) \int d\vec{r}_j \phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j) \overbrace{T_j \phi_{\beta_j}(\vec{r}_j)}^{=\varepsilon_{\beta_j} \phi_{\beta_j}(\vec{r}_j)} \\
&= \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 ... \alpha_N} \sum_{\beta_1 ... \beta_N} \epsilon^{\alpha_1 ... \alpha_N} \epsilon^{\beta_1 ... \beta_N} \prod_{i \neq j} \int d\vec{r}_i \phi^*_{\alpha_i}(\vec{r}_i) \phi_{\beta_i}(\vec{r}_i) \varepsilon_{\beta_j} \overbrace{\int d\vec{r}_j \phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j) \phi_{\beta_j}(\vec{r}_j)}^{=\delta_{\alpha_j, \beta_j}} \\
&= \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 ... \alpha_N} \sum_{\beta_1 ... \beta_N} \epsilon^{\alpha_1 ... \alpha_N} \epsilon^{\beta_1 ... \beta_N} \prod_{i \neq j} \overbrace{\int d\vec{r}_i \phi^*_{\alpha_i}(\vec{r}_i) \phi_{\beta_i}(\vec{r}_i)}^{=\delta_{\alpha_i, \beta_i}} \varepsilon_{\beta_j} \delta_{\alpha_j, \beta_j} \\
&= \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 ... \alpha_N} (\epsilon^{\alpha_1 ... \alpha_N})^2 \varepsilon_{\alpha_j} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_j=1}^{N} (N-1)! \varepsilon_{\alpha_j} = \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j .
\end{aligned}$$

可以看到Hartree-Fock波函数所得到的单粒子能量与Hartree波函数所得相同.这说明单粒子部分并不能区分两类波函数的不同.让我们继续研究Hartree-Fock波函数对应的相互作用部分的能量:

$$\begin{aligned}
E_{HF} &= \int d\vec{r}_1 ... \int d\vec{r}_N \psi^*_{sym}(\vec{r}_1 ... \vec{r}_N) \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} V_{jk} \psi_{sym}(\vec{r}_1 ... \vec{r}_N) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \sum_{\alpha_1 ... \alpha_N} \sum_{\beta_1 ... \beta_N} \epsilon^{\alpha_1 ... \alpha_N} \epsilon^{\beta_1 ... \beta_N} \prod_{i \neq j,k} \overbrace{\int d\vec{r}_i \phi^*_{\alpha_i}(\vec{r}_i) \phi_{\beta_i}(\vec{r}_i)}^{=\delta_{\alpha_i, \beta_i}} \\
&\times \int d\vec{r}_j \int d\vec{r}_k \phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j) \phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k) V_{jk} \phi_{\beta_j}(\vec{r}_j) \phi_{\beta_k}(\vec{r}_k) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \sum_{\alpha_1 ... \alpha_N} \sum_{\beta_1 ... \beta_N} \epsilon^{\alpha_1 ... \alpha_N} \epsilon^{\beta_1 ... \beta_N} \prod_{i \neq j,k} \delta_{\alpha_i, \beta_i} \\
&\times \int d\vec{r}_j \int d\vec{r}_k \phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j) \phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k) V_{jk} \phi_{\beta_j}(\vec{r}_j) \phi_{\beta_k}(\vec{r}_k) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \sum_{\alpha_1 ... \alpha_N} \sum_{\beta_j, \beta_k} \epsilon^{\alpha_1 ... \alpha_j ... \alpha_k ... \alpha_N} \epsilon^{\alpha_1 ... \beta_j ... \beta_k ... \alpha_N} \\
&\times \int d\vec{r}_j \int d\vec{r}_k \phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j) \phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k) V_{jk} \phi_{\beta_j}(\vec{r}_j) \phi_{\beta_k}(\vec{r}_k) .
\end{aligned}$$

显然,为了使得两个全反对称张量非零,我们只有两种选择,即$\alpha_j=\beta_j,\alpha_k=\beta_k$或者 $\alpha_j=\beta_k,\alpha_k=\beta_j$,这导致

$$\begin{aligned}
E_{HF} &= \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\frac{1}{N!}\sum_{\alpha_1\ldots\alpha_N}(\epsilon^{\alpha_1\ldots\alpha_j\ldots\alpha_k\ldots\alpha_N}\epsilon^{\alpha_1\ldots\alpha_j\ldots\alpha_k\ldots\alpha_N}\delta_{\alpha_j,\beta_j}\delta_{\alpha_k,\beta_k}\\
&+ \epsilon^{\alpha_1\ldots\alpha_j\ldots\alpha_k\ldots\alpha_N}\epsilon^{\alpha_1\ldots\alpha_k\ldots\alpha_j\ldots\alpha_N}\delta_{\alpha_j,\beta_k}\delta_{\alpha_k,\beta_j})\\
&\times \int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k\phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j)\phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_{\beta_j}(\vec{r}_j)\phi_{\beta_k}(\vec{r}_k)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\frac{1}{N!}\sum_{\alpha_1\ldots\alpha_N}(\epsilon^{\alpha_1\ldots\alpha_N})^2\\
&\times \int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k\left[\phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j)\phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_{\alpha_j}(\vec{r}_j)\phi_{\alpha_k}(\vec{r}_k)-\phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j)\phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_{\alpha_k}(\vec{r}_j)\phi_{\alpha_j}(\vec{r}_k)\right]\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\frac{1}{N!}\sum_{\alpha_j\neq\alpha_k}(N-2)!\\
&\times \int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k\left[\phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j)\phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_{\alpha_j}(\vec{r}_j)\phi_{\alpha_k}(\vec{r}_k)-\phi^*_{\alpha_j}(\vec{r}_j)\phi^*_{\alpha_k}(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_{\alpha_k}(\vec{r}_j)\phi_{\alpha_j}(\vec{r}_k)\right]\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k\left[\phi^*_j(\vec{r}_j)\phi^*_k(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_j(\vec{r}_j)\phi_k(\vec{r}_k)-\phi^*_j(\vec{r}_j)\phi^*_k(\vec{r}_k)V_{jk}\phi_k(\vec{r}_j)\phi_j(\vec{r}_k)\right]\\
&= \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k\left[|\phi_j(\vec{r}_j)|^2V_{jk}|\phi_k(\vec{r}_k)|^2-\phi^*_j(\vec{r}_j)\phi_k(\vec{r}_j)V_{jk}\phi^*_k(\vec{r}_k)\phi_j(\vec{r}_k)\right].
\end{aligned}$$

我们发现E_{HF}第一项就是Hartree能量$E_{Hartree}$,而第二项明显是波函数反对称叠加后的结果,文献中叫做Fock能量,记作E_{Fock}.注意到Fock能量中的积分可以解释为两个粒子在发生相互作用时,两个粒子的状态发生交换,即j粒子从j态转变为k态,而k粒子从k态变为j态.基于这种物理解释,我们一般也把Fock能量称作交换能(exchange energy),以强调其交换电子状态这一特性.与之相对,Hartree能量中的粒子相互作用前后不发生状态的变换,因此我们称其为直接能(direct energy).

- 利用单粒子波函数反对称组合后所得的Hartree-Fock波函数来计算体系的性质叫做Hartree-Fock近似;
- Hartree-Fock近似包含相互作用的直接能和交换能;
- 如果我们不假设ϕ_α是单粒子部分的本征态,体系的能量依然可以写成$E=E_0+E_{HF}$,只不过E现在看作是依赖于ϕ_α具体形式的泛函,即有

$$\begin{aligned}
E(\{\phi_\alpha\}) &= \int d\vec{r}_1\ldots\int d\vec{r}_N\psi^*_{sym}H\psi_{sym}=\sum_{j=1}^{N}\int d\vec{r}_j\phi^*_j(\vec{r}_j)T_j\phi_j(\vec{r}_j)\\
&+ \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\int d\vec{r}_j\int d\vec{r}_k\left[|\phi_j(\vec{r}_j)|^2V_{jk}|\phi_k(\vec{r}_k)|^2-\phi^*_j(\vec{r}_j)\phi_k(\vec{r}_j)V_{jk}\phi^*_k(\vec{r}_k)\phi_j(\vec{r}_k)\right].
\end{aligned}$$

注意到我们还要求ψ_{sym}满足归一化条件,这等价于在上式中添加拉格朗日乘子项

$$E_\lambda = -\lambda \int d\vec{r}_1 ... \int d\vec{r}_N |\psi_{sym}|^2 = -\lambda \sum_j \int d\vec{r}_j |\phi_j(\vec{j})|^2.$$

让$F(\{\phi_\alpha\}) = E + E_\lambda$对任意$\phi^*_\alpha$变分为零($\frac{\delta F(\{\phi_\alpha\})}{\delta \phi^*_\alpha} = 0$)就给出著名的Hartree-Fock方程:

$$\left[T_j + \sum_{k\neq j} \int d\vec{r}_k V_{jk} |\phi_k(\vec{r}_k)|^2 \right] \phi_j(\vec{r}_j) - \sum_{k\neq j} \int d\vec{r}_k V_{jk} \phi^*_k(\vec{r}_k) \phi_j(\vec{r}_k) \phi_k(\vec{r}_j) = \lambda \phi_j(\vec{r}_k).$$

可以看到,上述Hartree-Fock方程可以看作是单粒子Schödinger方程的一种推广,此时直接能部分给出等效的单粒子势能$V^{dir}(\vec{r}_i) \equiv \sum_{k\neq j} \int d\vec{r}_k V_{jk} |\phi_k(\vec{r}_k)|^2$,我们叫它直接项.另一方面,Hartree-Fock方程左边第二项来自交换能部分,我们称其为交换项,其最主要的特点是不能写成简单的势能形式,这导致了Hartree-Fock方程解析研究的困难.[7]

一次量子化的困难

当尝试用多体波函数计算物理量期望值时,我们发现需要计算十分可怕的多重积分

$$\langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle = \int d\vec{r}_1 ... \int d\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N) \mathcal{O} \psi(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N) \tag{2.46}$$

可以看到,对坐标的积分重数是$3N$,而后面波函数乘积的项数是$(N!)^2$,所以对关心的凝聚态系统$N \sim 10^{23}$,计算的复杂性与困难性显而易见.[8]此外,很多时候需要粒子数可变的形式(巨正则系综)来描述相对于真空态(通常并不是物理上或者说相对论量子场论的真空态,而是多体系统的基态)的(准)粒子激发. [9]

尽管我们将主要使用接下来要仔细讨论的二次量子化语言处理量子多体问题,但是下面几个例外情况也值得注意:

- 分数量子霍尔效应中的多体波函数,例如Laughlin波函数,Moore-Read波函数(Bob Laughlin 获得1998年诺贝尔物理学奖);
- 一维精确可解模型的Bethe ansatz(Hans Bethe获得1967年诺贝尔物理学奖);
- 冷原子物理中的少体问题(Feshbach共振).

[7]唯一的例外可能是当外势$U = 0$时,若相互作用V具有平移不变性,那么单粒子态ϕ_α选为平面波就是Hartree-Fock方程的解.

[8]从前面Hartree-Fock近似的复杂计算我们已经可以感受到多体波函数计算物理量是件让人抓狂的工作.

[9]究竟什么是粒子,是量子场这个汪洋大海中的稳定激发(数学结构)还是粒子物理加速器中看到的微小组元(物理观测)或者是高维空间中振动的弦(终极理论)?

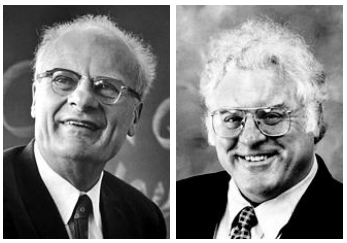


Figure 2.2: Hans Bethe$(1906-2005)$)和Robert B. Laughlin$(1950-)$.Bethe因核反应,尤其是星体中能量的产生机制的发现而荣获1967 年诺贝尔物理学奖.Laughlin因发现具有分数电荷激发的新型量子流体而荣获1998年诺贝尔物理学奖.

二次量子化形式:再来一次量子化

在讨论二次量子化形式之前,让我们先回忆量子力学中的谐振子问题.

谐振子的升降算符表示

在量子力学中,谐振子哈密顿量$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$可通过引入升降算符改写为如下简洁形式:

$$\hat{H}=\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)=\omega\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right) \tag{2.47}$$

且满足本征值问题

$$\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle,\quad n=0,1,2,3... \tag{2.48}$$

这里$\hat{n}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$是占据数算符,$|n\rangle$是本征态,其可通过真空态$|0\rangle$也就是基态构造,即$|n\rangle=\frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$.$\hat{a}^\dagger,\hat{a}$ 分别称为升算符和降算符,其作用是

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle,\quad \hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle \tag{2.49}$$

若把n解释为某种粒子的粒子数,那么$\hat{a}^\dagger$的作用是增加粒子,而$\hat{a}$则减少粒子,因此也把$\hat{a}^\dagger,\hat{a}$称作产生(creation)和湮灭(annilation)算符.此时$\hat{n}$是粒子数算符,给出相应态$|n\rangle$的粒子数占据情况,这样$|n\rangle$也称为占据数态.

为完整起见,动量与位置算符与升/降算符的关系是

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger+\hat{a}),\quad \hat{p}=i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a}) \tag{2.50}$$

记$\langle x|n\rangle=\varphi_n(x)$,[10]则

$$x\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x)+\sqrt{n}\varphi_{n-1}(x)),\quad \partial_x\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{m\omega}{2}}(-\sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x)+\sqrt{n}\varphi_{n-1}(x)). \tag{2.51}$$

因此,$\langle n|\hat{x}|n\rangle=\langle n|\hat{p}|n\rangle=0$,也就是在谐振子的本征态下动量和位置的平均值皆为零.

在下面的讨论中,我们会发现所有的无相互作用多粒子系统都可以表述为某种谐振子的形式.

占据数表示

由于一次量子化多体波函数的复杂性,让我们先忘记其复杂的波函数形式.对于大量粒子构成的多粒子系统,我们实际上并不对具体某个粒子处于某个状态感兴趣,而只想知道每个单粒子态占据的情况,这导致研究占据数表示也就是Fock空间.

考虑如下由大量谐振子粒子数态的直积构成的多体态

$$|n_1,n_2,...n_N\rangle=|n_1\rangle\otimes|n_2\rangle\otimes...\otimes|n_N\rangle=\prod_{j=1}^{N}|n_j\rangle \tag{2.52}$$

其中任意一个$n_j=0,1,2,3...$表示占据j状态的粒子数为n_j.对于每一个谐振子,其产生湮灭算符是$\hat{a}_j^\dagger,\hat{a}_j$并且满足

$$\hat{a}_j^\dagger|n_j\rangle=\sqrt{n_j+1}|n_j+1\rangle,\quad \hat{a}_j|n_j\rangle=\sqrt{n_j}|n_j-1\rangle \tag{2.53}$$

而$|n_j\rangle=\frac{(\hat{a}_j^\dagger)^{n_j}}{\sqrt{n_j}}|0\rangle$. 对于同一个谐振子模式,其满足对易关系$[\hat{a}_j,\hat{a}_j^\dagger]=1,[\hat{a}_j,\hat{a}_j]=[\hat{a}_j^\dagger,\hat{a}_j^\dagger]=0$. 对于不同的谐振子,我们假设它们之间彼此独立,完全对易,因此有如下关系:

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger]=\delta_{ij},\quad [\hat{a}_i,\hat{a}_j]=[\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_j^\dagger]=0. \tag{2.54}$$

同时,对任意占据数态作用产生算符可得

$$\hat{a}_j^\dagger|n_1,...,n_j,...=|n_1\rangle...\hat{a}_j^\dagger|n_j\rangle...=\sqrt{n_j+1}|n_1,...,n_j+1,...\rangle \tag{2.55}$$

而湮灭算符有$\hat{a}_j|n_1,...,n_j,...=\sqrt{n_j}|n_1,...,n_j-1,...\rangle$. 这样粒子数算符或占据数算符$\hat{n}_j\equiv\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j$ 的作用是

$$\hat{n}_j|n_1,...,n_j,...=n_j|n_1,...,n_j,...\rangle \tag{2.56}$$

也就是说占据数算符作用在占据数态下得到相应状态的占据数.

---

[10]具体形式是$\varphi_n(x)=N_n\mathrm{H}_n(x/x_0)e^{-\frac{(x/x_0)^2}{2}}$,这里$N_n=(\sqrt{\pi}(n!)2^nx_0)^{-1/2}$为归一化常数.$\mathrm{H}_n(x)$是厄密多项式,前三个多项式为$H_0(x)=1,H_1(x)=2x,H_2(x)=4x^2-2$而其他阶多项式可由递推关系$\frac{1}{2}\mathrm{H}_{n+1}(x)=x\cdot\mathrm{H}_n(x)-n\cdot\mathrm{H}_{n-1}(x)$得到.$x_0=\frac{1}{\sqrt{m\omega}}$是特征长度.

显然体系的真空态(vacuum state)是$|0,0,...,0\rangle$,其表示完全没有粒子存在的状态.[11]由湮灭算符的性质可知

$$\hat{a}_j|0,0,...,0\rangle = 0 \tag{2.57}$$

也就是真空态不会变得更空,因此任意湮灭算符消灭真空态.

事实上,谐振子占据数态构成的多体态$|n_1,n_2,...n_N\rangle$是N个无耦合谐振子集合的本征态,即[12]

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha \tag{2.58}$$

而

$$\hat{H}|n_1,n_2,...n_N\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_\alpha \overbrace{\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha |n_\alpha\rangle}^{=n_\alpha|n_\alpha\rangle} \prod_{j\neq\alpha} |n_j\rangle = \overbrace{\sum_{\alpha=1}^{N} \omega_\alpha n_\alpha}^{E(\{n\})} |n_1,n_2,...n_N\rangle = E(\{n\})|n_1,n_2,...n_N\rangle \tag{2.59}$$

这里$E(\{n\})$是对应的本征能量.

- 谐振子是一种理论抽象的模型系统,如果其他实际系统可以对应为谐振子,那么上述多体态也就可以描述相应系统的状态.事实上,光子和声子体系都可以写成无耦合谐振子的形式,而电子体系也有类似形式.[13]

当$\{n_1,n_2,...,n_j\}$取遍所有可能取值时,相应的状态$|n_1,n_2,...n_N\rangle$就构成了一个完备的Hilbert空间,基矢$|n_1,n_2,...n_N\rangle$称为占据数基矢,也就是我们用某个状态占据多少粒子作为体系状态的衡量.用这类基矢张开的空间称为Fock空间,表示为

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus ... \oplus \mathcal{F}_N \oplus ... \tag{2.60}$$

其中$\mathcal{F}_0$代表真空态的空间.此时体系允许任意粒子数状态的出现.显然,占据数态是正交归一的,即

$$\langle n_1',n_2',...n_N'|n_1,n_2,...n_N\rangle = \prod_{j=1}^{N} \langle n_j'|n_j\rangle = \prod_{j=1}^{N} \delta_{n_j',n_j} = \delta_{n_1',n_1}\delta_{n_2',n_2}...\delta_{n_N',n_N} \tag{2.61}$$

例如,$|1001\rangle$表示第一个与第四个单粒子态有一个粒子占据,而其他单粒子态没有占据.在实际使用中,会按照某种约定把单粒子态按顺序排列,最常用的是按能量从小到大排列.

[11]这对每个粒子能量都大于零的无相互作用系统总是成立.

[12]这里我们忽略了谐振子系统的基态能$E_0 = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{1}{2}\omega_\alpha$.这个零点振动能量虽不影响系统的动力学,但却有可观测效应.例如真空中的零点量子涨落会导致Casimi效应,即真空中两个无限大金属平板之间由于真空涨落存在吸引相互作用.更仔细的说明可以参考Lancaster书105 – 106页.

[13]万物皆是谐振子.

注意到,上述状态中$n_j = 0, 1, 2...$,也就是一个状态占据的粒子数没有限制,这说明所描述的体系应是玻色子系统.而粒子数没有限制的来源是产生湮灭算符之间的对易关系,(回忆单个谐振子的情况)因此,我们可以说玻色子体系的产生湮灭算符应满足对易关系.

费米子

但是,如果我们描述一个费米子系统,那么根据Pauli不相容原理的要求,任意一个(单粒子)状态最多占据一个粒子,也就是n_j只能取0或1.为了构造满足这个要求的理论形式,我们从单个谐振子开始考虑.$|0\rangle$依然表示没有粒子的真空态,而$\hat{a}^\dagger|0\rangle = |1\rangle$表示有一个粒子的状态.既然一个状态不能由超过一个费米子占据,这说明下式必定成立:

$$\hat{a}^\dagger|1\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|0\rangle = 0 \tag{2.62}$$

显然这要求$(\hat{a}^\dagger)^2 = 0$,而取共轭可得$\hat{a}^2 = 0$.这两个关系可以用如下反对易关系写出,($\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$)

$$\{\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\} = \{\hat{a}, \hat{a}\} = 0. \tag{2.63}$$

这样由$\hat{a}^\dagger|0\rangle = |1\rangle, \hat{a}^\dagger|1\rangle = 0$可知

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{1-n}|n+1\rangle, \quad n = 0, 1. \tag{2.64}$$

而同理可知湮灭算符满足$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, n = 0, 1.$

现在,我们需要确定$\hat{a}, \hat{a}^\dagger$的对易关系.既然产生或者湮灭算符各自都满足反对易关系,这提示我们产生湮灭算符之间应满足反对易关系,即

$$\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1. \tag{2.65}$$

设谐振子的哈密顿为$\hat{H} = \omega\hat{a}^\dagger\hat{a}$,那么我们期待$\hat{H}|0\rangle = 0|0\rangle = 0, \hat{H}|1\rangle = \omega|1\rangle$.而由反对易关系可得

$$\hat{H}|1\rangle = \omega\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle = \omega\hat{a}^\dagger(1 - \hat{a}^\dagger\hat{a})|0\rangle = \omega\overbrace{\hat{a}^\dagger|0\rangle}^{=|1\rangle} - \omega\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\overbrace{\hat{a}|0\rangle}^{=0} = \omega|1\rangle. \tag{2.66}$$

这与预期是符合的.因此,描述费米子体系,我们需要采用反对易关系.对于由许多不同模式的费米子型谐振子组成的体系,我们自然要求如下的结果:

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0. \tag{2.67}$$

与玻色子系统不同,费米子之间的反对易关系导致很不同的结果.例如考虑$\hat{a}_2^\dagger|n_1, n_2, n_3\rangle$,若$n_1 = 0$那么有

$$\hat{a}_2^\dagger|0, n_2, n_3\rangle = |0\rangle\hat{a}_2^\dagger|n_2\rangle|n_3\rangle = \sqrt{1-n_2}|0, n_2+1, n_3\rangle \tag{2.68}$$

而当$n_1 = 1$时则有

$$\hat{a}_2^\dagger|1,n_2,n_3\rangle = \overbrace{\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1^\dagger}^{-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger}|0\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle = -\hat{a}_1^\dagger|0\rangle\hat{a}_2^\dagger|n_2\rangle|n_3\rangle = (-1)\sqrt{1-n_2}|1,n_2{+}1,n_3\rangle. \tag{2.69}$$

把这两类情况综合在一起有

$$\hat{a}_2^\dagger|n_1,n_2,n_3\rangle = (-1)^{n_1}\sqrt{1-n_2}|n_1,n_2+1,n_3\rangle. \tag{2.70}$$

这说明费米子产生算符作用于占据数态时需要考虑额外的负号因子,这也称为费米子弦(fermionic string).对一般的情况,我们发现

$$\hat{a}_j^\dagger|n_1,...,n_j,...\rangle = \sqrt{1-n_j}(-1)^\nu|n_1,...,n_j+1,...\rangle \tag{2.71}$$

$\nu = \sum_{k=1}^{j-1} n_k$表示粒子交换的次数.对湮灭算符$\hat{a}_j$有

$$\hat{a}_j|n_1,...,n_j,...\rangle = \sqrt{n_j}(-1)^\nu|n_1,...,n_j-1,...\rangle. \tag{2.72}$$

小结

根据前面的讨论,我们发现当产生(湮灭)算符满足反对易关系时,一个状态的占据数不会超过一个,这对应费米子的情况,所以把满足反对易关系的生灭算符叫做费米子产生湮灭算符.而当算符满足对易关系时,粒子数占据没有限制,因而是玻色子算符.注意到当用这些算符描述时,费米子或玻色子波函数的反对称/对称特性可以完全由对应的生灭算符来描述,这是占据数表示的最大优点.

如果引入对易关系的记号$[,]_-$和反对易关系的记号$[,]_+$,那么我们可以把玻色子和费米子算符之间的对易情况统一写成如下形式,

$$\boxed{[\hat{a}_j,\hat{a}_k^\dagger]_\pm = \delta_{jk},\quad [\hat{a}_j,\hat{a}_k]_\pm = [\hat{a}_j^\dagger,\hat{a}_k^\dagger]_\pm = 0} \tag{2.73}$$

- 玻色子:$\boxed{\hat{a}_j^\dagger|n_1,...,n_j,...\rangle = \sqrt{n_j+1}|n_1,...,n_j+1,...\rangle,\quad \hat{a}_j|n_1,...,n_j,...\rangle = \sqrt{n_j}|n_1,...,n_j-1,...\rangle}$
- 对于费米子,注意到每个态填充最多为一个粒子,则有:

$$\boxed{\hat{a}_j^\dagger|n_1,...,n_j,...\rangle = \sqrt{1-n_j}(-1)^\nu|n_1,...,n_j+1,...\rangle,\quad \hat{a}_j|n_1,...,n_j,...\rangle = \sqrt{n_j}(-1)^\nu|n_1,...,n_j-1,...\rangle} \tag{2.74}$$

- 进行费米子算符作用于粒子数态计算时需注意态定义的顺序,即$(-1)^\nu$因子,否则会导致符号差别,这在写多体哈密顿矩阵时尤其需小心.

生灭算符的基矢变换

在实际物理研究中,我们经常会在不同的基矢下研究问题,(比如坐标空间和动量空间)那么相应的,产生湮灭算符在不同基矢下的变换形式也是重要的.定义

完备系$1=\sum_j|j\rangle\langle j|$,并且其中的任意态$|j\rangle$可由产生算符$\hat{a}_j^\dagger$作用于真空态$|0\rangle$生成,即

$$|j\rangle=\hat{a}_j^\dagger|0\rangle \tag{2.75}$$

同理,定义另一个完备系$1=\sum_\lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|$,且$|\lambda\rangle=\hat{a}_\lambda^\dagger|0\rangle$,那么有

$$|j\rangle=\sum_\lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|j\rangle\Rightarrow\hat{a}_j^\dagger|0\rangle=\sum_\lambda\hat{a}_\lambda^\dagger|0\rangle\langle\lambda|j\rangle=\sum_\lambda\langle\lambda|j\rangle\hat{a}_\lambda^\dagger|0\rangle \tag{2.76}$$

由于j,λ都是任意的,因此上式恒成立的条件是

$$\hat{a}_j^\dagger=\sum_\lambda\langle\lambda|j\rangle\hat{a}_\lambda^\dagger \tag{2.77}$$

而通过对上式两边求共轭可知湮灭算符也有类似的关系

$$\hat{a}_j=\sum_\lambda\langle j|\lambda\rangle\hat{a}_\lambda \tag{2.78}$$

场算符

定义位置基矢$\{|x\rangle\}$下的产生/湮灭算符为所谓的场算符,即

$$\hat{\psi}^\dagger(x)|0\rangle\equiv\hat{a}^\dagger(x)|0\rangle=|x\rangle \tag{2.79}$$

物理上,$\hat{\psi}^\dagger(x)(\hat{\psi}(x))$表示在空间位置$x$产生(消灭)一个粒子.同时,利用算符间的基矢变换关系,可把场算符和生灭算符$\hat{a}_j^\dagger,\hat{a}_j$联系在一起,

$$\hat{\psi}^\dagger(x)=\sum_j\langle j|x\rangle\hat{a}_j^\dagger=\sum_j\phi_j^*(x)\hat{a}_j^\dagger,\quad\phi_j(x)=\langle x|j\rangle \tag{2.80}$$

$$\hat{\psi}(x)=\sum_j\phi_j(x)\hat{a}_j \tag{2.81}$$

现在,我们可以计算场算符的对易关系

$$\begin{aligned}[\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(y)]_\pm &= \sum_{i,j}\phi_i(x)\phi_j^*(y)[\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger]_\pm=\sum_{i,j}\phi_i(x)\phi_j^*(y)\delta_{ij}=\sum_j\phi_j(x)\phi_j^*(y)=\sum_j\langle x|\phi_j\rangle\langle\phi_j|y\rangle\\ &= \langle x|y\rangle=\delta(x-y)\end{aligned} \tag{2.82}$$

同理可得其他两组对易关系

$$[\hat{\psi}^\dagger(x),\hat{\psi}^\dagger(y)]=[\hat{\psi}(x),\hat{\psi}(y)]=0 \tag{2.83}$$

多体哈密顿量的二次量子化形式

考虑一般性的包含单体和两体相互作用的多粒子系统哈密顿量,例如

$$\boxed{H=\sum_j\left[-\frac{\nabla_j^2}{2m}+U(x_j)\right]+\frac{1}{2}\sum_{j\neq m}V(x_j,x_m)} \tag{2.84}$$

一次量子化	H	$H\Psi = E\Psi$	$\hat{O} = \sum_j \hat{o}_j$	$\hat{V} = \sum_{j\neq m} \hat{v}^{jm}$
$\Updownarrow$	$\Updownarrow$	$\Updownarrow$	$\Updownarrow$	$\Updownarrow$
二次量子化	$\hat{H}$	$\hat{H}\|\Psi\rangle = E\|\Psi\rangle$	$\hat{O} = \sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha\|\hat{o}\|\beta\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\beta$	$\hat{V} = \sum_{\alpha,\beta,\delta,\gamma}\langle\alpha\beta\|\hat{v}\|\delta\gamma\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}^\dagger_\beta\hat{a}_\lambda\hat{a}_\delta$

Table 2.1: 一次与二次量子化形式之间的简单对应关系.

这里为简化记号而令$\hbar = 1$,$V(x_j, x_m)$是两体相互作用势,一般仅依赖于粒子之间的相对位置并且有时也依赖于自旋等内部量子数.这一部分的目标是讨论对于这类一般性的多粒子哈密顿量,其二次量子化形式为何.[14]

首先考虑单体算符$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{j=1}^N \hat{o}(x_j) = \sum_j \hat{o}^j$(例如动能),其二次量子化形式是

$$\boxed{\hat{\mathcal{O}} = \sum_\alpha\sum_\beta\langle\alpha|\hat{o}|\beta\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\beta.} \tag{2.85}$$

这里$\{\alpha\},\{\beta\}$是任意正交完备单粒子基矢.对于粒子的动能以及外势项,如果选取位置空间$\{|x\rangle\}$作为基矢,那么这两者都是对角的,也就是有

$$\sum_\alpha \to \int d^dx,\quad \sum_\beta \to \int d^dy,\quad \hat{a}^\dagger_\alpha \to \hat{\psi}^\dagger(x),\quad \hat{a}_\beta \to \hat{\psi}(y),\quad \langle\alpha|\hat{o}|\beta\rangle \to \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right)\delta(x-y) \tag{2.86}$$

$$\begin{aligned} H = \sum_j\left[-\frac{\nabla_j^2}{2m} + U(x_j)\right] \to \qquad \hat{H} &= \int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right)\delta(x-y)\hat{\psi}(y) \\ &= \int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right]\hat{\psi}(x) \end{aligned} \tag{2.87}$$

我们知道粒子密度$\rho(x) = \sum_j \delta(x - x_j)$,那么根据二次量子化的规则可知

$$\hat{\rho}(x) = \int d^dx'\hat{\psi}^\dagger(x')\delta(x-x')\hat{\psi}(x') = \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \tag{2.88}$$

显然$\hat{\rho}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)$可以解释为粒子密度算符,其物理意义是在$x$处的粒子密度,把粒子密度算符对全空间积分可得系统的总粒子数算符,

$$\hat{N} = \int d^dx\hat{\rho}(x) = \int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \tag{2.89}$$

进一步,一般的两体算符$V = \sum_{j\neq m} V(x_j, x_m) = \sum_{j\neq m}\hat{v}^{jm}$ 有如下形式

$$\boxed{\hat{V} = \sum_{\alpha,\beta,\delta,\gamma}\langle\alpha\beta|\hat{v}|\delta\gamma\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}^\dagger_\beta\hat{a}_\lambda\hat{a}_\delta} \tag{2.90}$$

在位置空间时

$$\boxed{\hat{V} = \frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x,y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x).} \tag{2.91}$$

[14]详细推导请看附录2.8.1

二次量子化形式

当选取位置空间时,多粒子系统的二次量子化哈密顿量可写为

$$\boxed{\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)} \tag{2.92}$$

这里的场算符满足如下对易关系:

$$[\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(y)]_\pm=\delta(x-y),\quad [\hat{\psi}(x),\hat{\psi}(y)]_\pm=[\hat{\psi}^\dagger(x),\hat{\psi}^\dagger(y)]_\pm=0 \tag{2.93}$$

如果我们关心系统的输运性质,例如有限频率光学电导或温度依赖电阻,电流密度的二次量子化形式也是重要的.[15]

$$\boxed{\hat{\vec{j}}(x)=\frac{1}{2mi}\left[\psi^\dagger(x)\nabla\psi(x)-\nabla(\psi^\dagger(x))\psi(x)\right]} \tag{2.94}$$

该式乘以电荷e就得到电流密度的二次量子化形式.

带自旋的情况

当明确考虑电子系统时,需要计入自旋的影响,那么相应的二次量子化哈密顿量是

$$\hat{H}=\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\int d^dx\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}_\sigma(x)+\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(y)V(x-y)\hat{\psi}_{\sigma'}(y)\hat{\psi}_\sigma(x) \tag{2.95}$$

这里的场算符满足如下对易关系:

$$[\hat{\psi}_\sigma(x),\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(y)]_+=\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(x-y),\quad [\hat{\psi}_\sigma(x),\hat{\psi}_{\sigma'}(y)]_+=[\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x),\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(y)]_+=0 \tag{2.96}$$

平面波展开下的二次量子化哈密顿量

在周期性的固体(弱周期势极限)或者任意空间均匀的系统中,动量是系统的守恒量,这样研究物理量在动量空间的行为往往比实空间更简单也更直观,因此,在这一小节我们将推导在平面波展开下的二次量子化形式.我们考虑一个体积为V的系统,引入场算符的傅里叶变换[16]

$$\hat{\psi}_\sigma(x)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}\hat{c}_{k\sigma} \tag{2.97}$$

以及逆变换

$$\hat{c}_{k\sigma}=\frac{1}{\sqrt{V}}\int d^dx e^{-ikx}\hat{\psi}_\sigma(x) \tag{2.98}$$

[15] 请看附录2.8.2

[16] 一些相关细节请参看附录2.8.4,注意我们把体积因子V 更对称地分配到$\hat{\psi}_\sigma(x),\hat{c}_{k\sigma}$中

那么

$$\begin{aligned}[\hat{c}_{\sigma k},\hat{c}^{\dagger}_{\sigma' k'}] &= \frac{1}{V}\int d^dxd^dye^{-ikx}e^{ik'y}[\hat{\psi}_\sigma(x),\hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma'}(y)] = \frac{1}{V}\int d^dxd^dye^{-ikx}e^{ik'y}\delta_{\sigma\sigma'}\delta(x-y)\\ &= \delta_{\sigma\sigma'}\frac{1}{V}\int d^dxe^{-i(k-k')x} = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{k,k'} \qquad (2.99)\end{aligned}$$

这里用到了$\frac{1}{V}\int d^dxe^{-i(k-k')x} = \delta_{k,k'}$.(具体讨论请参看附录)同理可得另外的对易关系$[\hat{c}_{k\sigma},\hat{c}_{k'\sigma'}] = [\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma},\hat{c}^{\dagger}_{k'\sigma'}] = 0$.

让我们考虑一般性的二次量子化哈密顿量,即公式2.95.对于其动能部分,我们有

$$\begin{aligned}\int d^dx\hat{\psi}^{\dagger}_\sigma(x)\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right)\hat{\psi}_\sigma(x) &= \int d^dx\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k'}e^{-ik'x}\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right)\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}\hat{c}_{k\sigma}\\ &= \sum_{k,k'}\int\frac{d^dx}{V}e^{-ik'x}\left(\frac{-\nabla^2}{2m}e^{ikx}\right)\hat{c}^{\dagger}_{k'\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\\ &= \sum_{k,k'}\int\frac{d^dx}{V}e^{i(k-k')x}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^{\dagger}_{k'\sigma}\hat{c}_{k\sigma} = \sum_{k,k'}\delta_{k,k'}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^{\dagger}_{k'\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\\ &= \sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} \qquad (2.100)\end{aligned}$$

而外势部分可以化为

$$\begin{aligned}\int d^dx\hat{\psi}^{\dagger}_\sigma(x)U(x)\hat{\psi}_\sigma(x) &= \sum_{k,k'}\int\frac{d^dx}{V}e^{i(k-k')x}U(x)\hat{c}^{\dagger}_{k'\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\\ &= \sum_{k,k'\sigma}U_{k'-k}\hat{c}^{\dagger}_{k'\sigma}\hat{c}_{k\sigma} \qquad (2.101)\end{aligned}$$

在这里我们定义了外势的傅里叶变换$U_q = \frac{1}{V}\int d^dxe^{-iqx}U(x)$.

最后,对于相互作用部分有

$$\begin{aligned}&\int d^dxd^dy\hat{\psi}^{\dagger}_\sigma(x)\hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma'}(y)V(x-y)\hat{\psi}_{\sigma'}(y)\hat{\psi}_\sigma(x)\\ &= \frac{1}{V^2}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\int dxdye^{-i(k_1x+k_2y-k_3y-k_4x)}V(x-y)\hat{c}^{\dagger}_{k_1\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k_2\sigma'}\hat{c}_{k_3\sigma'}\hat{c}_{k_4\sigma}\end{aligned}$$

既然$V(x-y)$仅依赖于相对位置,那么我们可以引入相对坐标$r = x-y$和质心坐标$R = (x+y)/2$,$(x = R+r/2, y = R-r/2)$这样上式改写为[17]

$$\begin{aligned}&\frac{1}{V^2}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\int drdRe^{i(-k_1-k_2+k_3+k_4)R}e^{i(-k_1+k_2-k_3+k_4)r/2}V(r)\hat{c}^{\dagger}_{k_1\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k_2\sigma'}\hat{c}_{k_3\sigma'}\hat{c}_{k_4\sigma}\\ &= \frac{1}{V}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\delta_{-k_1-k_2+k_3+k_4=0}\int dre^{i(-k_1+k_2-k_3+k_4)r/2}V(r)\hat{c}^{\dagger}_{k_1\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k_2\sigma'}\hat{c}_{k_3\sigma'}\hat{c}_{k_4\sigma}\end{aligned}$$

[17] $\int dxdy$改写为$\int drdR$时的雅可比行列式$J = \det\begin{pmatrix}\frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial R}\\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial R}\end{pmatrix} = 1$,因此$\int dxdy = \int drdRJ = \int drdR$.

这里对质心坐标R的积分导致了$V\delta_{-k_1-k_2+k_3+k_4=0}$.为了满足$\delta$函数的要求,我们可以令$k_1=k+q,k_2=k'-q,k_3=k',k_4=k$,这样对$k_1,k_2,k_3,k_4$的求和变为对$k,k',q$的求和,即

$$\begin{aligned}&\int d^dxd^dy\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(y)V(x-y)\hat{\psi}_{\sigma'}(y)\hat{\psi}_\sigma(x)=\sum_{k,k',q}\int\frac{dr}{V}e^{-iqr}V(r)\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}\\=&\sum_{k,k',q}V_q\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}\end{aligned}\tag{2.102}$$

其中相互作用势的傅里叶变换系数是$V_q=\frac{1}{V}\int d^dre^{-iqr}V(r)$. 这样整个模型在平面波基矢下的形式是

$$\boxed{\hat{H}=\sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k,k'\sigma}U_{k'-k}\hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}V_q\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}}$$

- 这类哈密顿量常用于讨论空间平移不变系统的性质,例如电子气体,液氦以及晶格周期势影响不大的晶格电子问题.
- 对于具有周期性的固体材料,采用Bloch波作为展开的基矢更为合适,此时单粒子项自动对角化,代表Bloch电子的单粒子能量以及占据数.

此外,粒子密度算符在平面波基矢下是

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(x)&=\sum_\sigma\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\psi}_\sigma(x)=\sum_\sigma\left(\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{-ikx}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k'}e^{ik'x}\hat{c}_{k',\sigma}\right)\\&=\frac{1}{V}\sum_\sigma\sum_{k,k'}e^{i(k'-k)x}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k',\sigma}=\frac{1}{V}\sum_{k,q}e^{iqx}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k+q,\sigma}\\&=\frac{1}{V}\sum_q e^{iqx}\hat{\rho}_q,\quad\hat{\rho}_q=\sum_\sigma\hat{\rho}_{q,\sigma}=\sum_{k,\sigma}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k+q,\sigma}\end{aligned}\tag{2.103}$$

$\hat{\rho}_q$是动量空间的密度算符,其由自旋上和下两个分量组成.而系统的总粒子数算符可以写成

$$\hat{N}=\sum_\sigma\int d^dx\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\psi}_\sigma(x)=\frac{1}{V}\int d^dx\sum_\sigma\sum_{k,k'}e^{i(k'-k)x}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k',\sigma}=\sum_\sigma\sum_{k,k'}\delta_{k,k'}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k',\sigma}=\sum_{k,\sigma}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k,\sigma}\tag{2.104}$$

即系统总粒子数算符等于每个动量模式粒子数算符的总和.

最后,粒子流密度算符在平面波基矢下的形式是

$$\begin{aligned}\hat{\vec{j}}(x)&=\sum_\sigma\frac{1}{2mi}\left[\psi^\dagger_\sigma(x)\nabla\psi_\sigma(x)-\nabla(\psi^\dagger_\sigma(x))\psi_\sigma(x)\right]=\frac{1}{2miV}\sum_\sigma\sum_{k,k'}e^{i(k'-k)x}i(k+k')\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\\&=\frac{1}{V}\sum_\sigma\sum_{k,q}e^{iqx}\frac{k+q/2}{m}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k+q,\sigma}\\&=\frac{1}{V}\sum_q e^{iqx}\hat{j}_q,\quad\hat{j}_q=\sum_\sigma\hat{j}_{q,\sigma}=\sum_{k,\sigma}\frac{k+q/2}{m}\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k+q,\sigma}\end{aligned}\tag{2.105}$$

注意当$q=0$时,$e\hat{j}_{q=0}$类似于经典电子输运中电流表达式$j=nev$.

场论中的二次量子化与Noether定理*

作为对比,在这一小节,我们简要叙述场论,或者更确切的说是相对论性量子场论中二次量子化的操作流程.简单来说,我们的出发点是描述微观粒子的一些基本方程,例如Klein-Gordon方程或者Dirac方程.对Klein-Gordon方程,其形式为

$$(\partial^2 + m^2)\varphi = 0 \tag{2.106}$$

这里$\varphi = \varphi(t, x, y, z)$是四维时空中描述无自旋粒子的波函数.当然,在相对论量子力学中,由于φ^2并不代表守恒的概率密度,因此我们把φ 看作是时空中的场,类似于电磁场A_μ.此外,由于φ在坐标变换下不变,因此我们称φ为标量场.当然,在相对论中,我们把时空中的任意点记为$x^\mu = (t, x, y, z) = (x^0, x^1, x^2, x^3)$.这样对时空坐标的求导是$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = (\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$. 同时,为了理论描述的方便引入Minkowski度规$g^{\mu\nu}$,其常用的形式是

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.107}$$

这样有$\partial^2 = \partial_\mu \partial^\mu = \partial_\mu g^{\mu\nu} \partial_\nu = \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 = \partial_t^2 - \nabla^2$. 既然时空是均匀的,那么我们设此时的解为平面波,即$\varphi \sim e^{-ik_\mu x^\mu} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x} - iEt}$.($k^\mu = (E, \vec{k})$是四维动量)这样有$-k_\mu k^\mu + m^2 = m^2 + \vec{k}^2 - E^2 = 0$,这就得到了相对论性自由粒子的能量$E_k = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$.

拉格朗日方程

在经典力学的拉格朗日形式中,我们关注的是系统的拉格朗日量$L = L(q, \dot{q})$,其是坐标q和速度$\dot{q} = \partial_t q$的函数.对单个粒子有$L = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)$,也就是拉格朗日量是粒子动能$\frac{m}{2}\dot{q}^2$和势能$V(q)$的差值.粒子的实际运动由拉格朗日方程$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0$描述.该方程可由在固定的出末位置情况下的作用量$S = \int_{t_i}^{t_f} dt L(q, \dot{q})$ 取极值确定:

$$0 = \delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta \dot{q} \right) = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q \right) |_{t=t_i}^{t=t_f} \tag{2.108}$$

注意到粒子的初末位置固定,因此$\delta q(t = t_i) = \delta q(t = t_f) = 0$.既然$\delta q$是任意的,因此仅当积分中的括号为零时$\delta S = 0$ 能够恒成立,这样我们就得到了拉格朗日方程.需要指出,如果我们给拉格朗日量添加一个时间的微分项,即$L \to L' = L + \frac{d}{dt}W(q, t)$,那么这个时间微分项对作用量的贡献是一个初末时刻决定的常数$\Delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{d}{dt} W(q, t) = W(q(t_f), t_f) - W(q(t_i), t_i)$.由此这一项并不影响作用量的极值位置,因此系统的拉格朗日方程是不变的.[18]

[18]通常我们把$L \to L' = L + \frac{d}{dt}W(q, t)$的变换称为规范变换.

现在,让我们用拉格朗日形式推导出Klein-Gordon方程.为此,我们设作用量为$S = \int dtdxdydz\mathcal{L} = \int d^4x\mathcal{L}$. 这里$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu\varphi)$是拉格朗日密度,其是$\varphi$和$\partial_\mu\varphi$的函数.对$\mathcal{L}$做空间积分就是拉格朗日量$L = \int d^3x\mathcal{L}$.由最小作用量原理可知,经典系统的运动满足作用量最小原则,即$\delta S = 0$也就是作用量的变分为零.那么根据定义可得

$$\delta S = \int d^4x\delta\mathcal{L} = \int d^4x\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi}\delta\varphi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\delta(\partial_\mu\varphi)\right) \tag{2.109}$$

利用导数∂与变分δ的可交换性有

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\delta(\partial_\mu\varphi) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\partial_\mu(\delta\varphi) = \partial_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\delta\varphi\right) - \partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\delta\varphi \tag{2.110}$$

那么

$$\delta S = \int d^4x\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} - \partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\right)\delta\varphi + \int d^4x\partial_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\delta\varphi\right). \tag{2.111}$$

我们发现上式右边是一个四维时空的表面项,对于无穷大时空应为零.对于任意的场变化$\delta\varphi$,$\delta S = 0$意味着下面的欧拉−拉格朗日方程恒成立:

$$\boxed{\partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} = 0}. \tag{2.112}$$

如果选取拉格朗日密度为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial\varphi)^2 - \frac{m^2}{2}\varphi^2 = \frac{1}{2}\partial^\mu\varphi\partial_\mu\varphi - \frac{m^2}{2}\varphi^2 \tag{2.113}$$

那么有

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} = -\frac{m^2}{2}\frac{\partial\varphi^2}{\partial\varphi} = -m^2\varphi, \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi} = \frac{1}{2}\frac{\partial\partial_\nu\varphi}{\partial\partial_\mu\varphi}\partial^\nu\varphi + \frac{1}{2}\partial^\nu\varphi\frac{\partial\partial_\nu\varphi}{\partial\partial\partial_\mu\varphi} = \delta^\mu_\nu\partial^\nu\varphi = \partial^\mu\varphi \tag{2.114}$$

利用拉格朗日方程就重新得到Klein-Gordon方程.这样,我们的关注点便是体系的作用量,更一般的,系统的作用量可写成

$$S = \int d^4x\left(\overbrace{\frac{1}{2}(\partial\varphi)^2}^{-\frac{1}{2}\varphi g^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu\varphi} - \frac{m^2}{2}\varphi^2 - V(\varphi)\right) = \int d^4x\left(\frac{1}{2}(\partial_t\varphi)^2 - \frac{1}{2}(\nabla\varphi)^2 - \frac{m^2}{2}\varphi^2 - V(\varphi)\right) \tag{2.115}$$

这里$V(\varphi)$相当于某种势能.($V(\varphi) = \lambda\varphi^4$是典型的势能项)有趣的是,如果我们把Minkowski度规$g^{\mu\nu}$换成一般弯曲时空中的Einstein 度规$g^{\mu\nu}$, 并且在时空体积d^4x 中添加$\sqrt{-g} = \sqrt{-\det g_{\mu\nu}}$,($g_{\mu\nu}$是$g^{\mu\nu}$的逆矩阵,即$g^{\mu\nu}g_{\nu\rho} = \delta^\mu_\rho$)那么相应的作用量满足广义协变性,也就是正确的弯曲时空标量场作用量为[19]

$$S = \int d^4x\sqrt{-g}\left(\frac{1}{2}g^{\mu\nu}\partial_\mu\varphi\partial_\nu\varphi - \frac{m^2}{2}\varphi^2 - V(\varphi)\right) \tag{2.116}$$

[19] $d^4x\sqrt{-g}$是不变体积元,也就是任意坐标系下都有这样的形式.更详细的讨论请参考A.Zee书《Quantum Field Theory in a Netshell》的I.11节.

由拉格朗日方程可得其对应的方程为$\frac{1}{\sqrt{-g}}\partial_\mu(\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\partial_\nu\varphi)+m^2\varphi+\partial_\varphi V(\varphi)=0$. 当我们选取满足Einstein 场方程的度规,例如Schwarzschild度规后,我们就可以研究弯曲空间中有趣的物理了,特别是黑洞附近让人困惑的一些问题.[20]

经典力学的Noether定理

在经典力学中,系统在连续变换下的不变性或者说对称性与系统所包含的守恒量紧密相关,这就是Noether定理.

让我们先考虑经典力学中单粒子的情况.如果用坐标q描述其运动,那么它的拉格朗日量是$L=L(q,\dot{q})$.如果我们用另一套坐标q',那么粒子的拉格朗日量是$L'(q',\dot{q}')\equiv L(q(q'),\dot{q}(\dot{q}'))$,这说明坐标变换$q\to q'=q'(q)$后的拉格朗日量的具体形式相当于利用$q'=q'(q)$把$q$用$q'$解出来,然后把这个解代入$L(q,\dot{q})$.进一步,坐标变换前后都满足相应的拉格朗日方程$\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}=0,\frac{\partial L'}{\partial q'}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L'}{\partial\dot{q}'}=0$,这说明拉格朗日方程是协变的.

例如直角坐标下的拉格朗日量是$L(x,y,\dot{x},\dot{y})=\frac{1}{2}(\dot{x}^2+\dot{y}^2)$,如果我们用平面极坐标$x=\rho\cos\varphi,y=\rho\sin\varphi$ 改写,那么有$L'(\rho,\varphi,\dot{\rho},\dot{\varphi})=\frac{1}{2}(\dot{\rho}^2+\rho^2\dot{\varphi}^2)$. 虽然直角坐标和极坐标下体系都满足拉格朗日方程,但方程的具体形式是不同的,比如$\ddot{x}=0,\ddot{y}=0$而$\rho\dot{\varphi}^2-\ddot{\rho}=0,\frac{d}{dt}(\rho^2\dot{\varphi})=0$.

另一方面,如果设坐标变换为$x'=x+a,y'=y+b$,a,b都是常数,那么有$L'(x',y',\dot{x}',\dot{y}')=\frac{1}{2}(\dot{x}'^2+\dot{y}'^2)=L(x',y',\dot{x}',\dot{y}')$, 这样关于$x',y'$的方程是$\ddot{x}'=0,\ddot{y}'=0$,这在形式上与$L(x,y,\dot{x},\dot{y})$所得的方程一致.

一般而言,如果坐标变换前后的拉格朗日量满足

$$\boxed{L'(q',\dot{q}')\equiv L(q(q'),\dot{q}(\dot{q}'))=L(q',\dot{q}')} \tag{2.117}$$

那么我们说坐标变换前后的拉格朗日量是不变的.当我们考虑无穷小坐标变换,也就是$q\to q'=q+\epsilon g$,(ϵ是无穷小的常数,$g=g(q)$是关于q 的任意函数)那么利用泰勒展开有

$$L(q',\dot{q}')=L(q,\dot{q})+\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q}\epsilon g+\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial\dot{q}}\epsilon\dot{g}+\mathcal{O}(\epsilon^2) \tag{2.118}$$

利用$L(q(q'),\dot{q}(\dot{q}'))=L(q',\dot{q}')$有

$$L(q,\dot{q})=L(q,\dot{q})+\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q}\epsilon g+\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial\dot{q}}\epsilon\dot{g}\Rightarrow\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q}g+\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial\dot{q}}\dot{g}=0 \tag{2.119}$$

最后利用$L(q,\dot{q})$满足的拉格朗日方程$\frac{\partial L}{\partial q}=\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}$可得

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}g+\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\dot{g}=0\Rightarrow\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}g\right)=0 \tag{2.120}$$

[20]若是选反de Sitter 空间的黑洞度规,那么我们实际上就可以讨论十分热门的AdS/CFT对应.

这说明在连续的坐标变换$q \to q' = q + \epsilon g$下,如果拉格朗日量不变($L'(q', \dot{q}') \equiv L(q, \dot{q}) = L(q', \dot{q}')$),那么$Q = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} g$是不随时间变化的量,也就是所谓的守恒量.这就是经典力学中的Noether定理.[21]

- Noether定理适用的条件:1)连续的坐标变换;(只有连续的变换才能使其有任意小的变化,也就是使得ϵ任意小而忽略ϵ的高阶项)2)坐标变换下拉格朗日量不变.(拉格朗日量发生改变实际上导致方程形式改变,例如之前直角坐标与极坐标的例子)

对于先前的例子,$L = \frac{1}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2)$, 在坐标变换为$x' = x + a, y' = y + b$下拉格朗日量不变($L(x, y, \dot{x}, \dot{y}) = L(x', y', \dot{x}', \dot{y}')$),而$g = 1$,因此守恒量是:

$$Q_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}, \quad Q_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \tag{2.121}$$

显然,守恒量Q_x, Q_y是系统的动量,这说明在坐标的任意平移$x \to x' = x + a, y \to y' = y + b$下不变的系统(拉格朗日量不变)其动量守恒.

注意到规范变换$L \to L' = L + \frac{d}{dt} W(q, t)$使得拉格朗日方程不变,那么这说明拉格朗日量不变的条件$L'(q', \dot{q}') \equiv L(q(q'), \dot{q}(q')) = L(q', \dot{q}')$可以放松为

$$L(q(q'), \dot{q}(q')) = L(q', \dot{q}') - \frac{d}{dt} F(q', t') \tag{2.122}$$

这样在坐标变换$q \to q' = q + \epsilon g$下,系统的守恒量变成

$$Q = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} g + \frac{F}{\epsilon} \tag{2.123}$$

例如无穷小的时间平移$t \to t' = t + \epsilon$对应的守恒量是系统的哈密顿量$H = p\dot{q} - L$.(也就是能量守恒)

场论中的Noether定理

现在,让我们回到场的讨论.为明确起间,我们假设系统的时空坐标x^μ有一个无穷小的平移a^μ:

$$x^\mu \to x'^\mu = x^\mu + a^\mu \tag{2.124}$$

此时场$\varphi(x)$变成$\varphi(x + a)$.[22]由于a是无穷小量,则泰勒展开有

$$\varphi(x + a) = \varphi(x) + a^\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x^\mu} = \varphi(x) + a^\mu \partial_\mu \varphi \tag{2.125}$$

那么时空无穷小平移下场的变化是$\delta\varphi = a^\mu \partial_\mu \varphi$.既然场发生了变化,那么系统的作用量也发生了变化,由先前拉格朗日方程的推导我们知道

$$\delta S = \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \delta\varphi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi} \delta(\partial_\mu \varphi) \right) \tag{2.126}$$

[21]我们也可以直接用作用量形式:$0 = \delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right)$.再利用拉格朗日量方程有$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right) = 0$即$Q = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q$是要找的守恒量.

[22]这里采用主动的观点也就是我们不改变场而直接改变坐标.如果用被动的观点是x坐标系与x'的坐标系原点相差a.这样x坐标系中$\varphi(x)$的取值与x'坐标系中$\varphi'(x')$的取值相同,则有$\varphi'(x') = \varphi(x)$.

若系统具有时空平移不变性,也就是时空平移不改变拉格朗日方程的形式,因此可以利用已经得到的拉格朗日方程可以把上式第一项的$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi}$替换掉,则有

$$\delta S=\int d^4x\left(\partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\delta\varphi+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\overbrace{\delta(\partial_\mu\varphi)}^{\partial_\mu(\delta\varphi)}\right)=\int d^4x\partial_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\delta\varphi\right). \quad (2.127)$$

另一方面,既然系统的变化直接来自时空坐标的变化,那么作用量的变化也可以写成

$$\delta S=\int d^4x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x^\mu}a^\mu=\int d^4x\partial_\mu\mathcal{L}\delta^\mu_\nu a^\nu, \quad (2.128)$$

显然这个变化与前面的结果相同,则有

$$\int d^4x\partial_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\overbrace{\delta\varphi}^{a^\nu\partial_\nu\varphi}\right)=\int d^4x\partial_\mu\mathcal{L}\delta^\mu_\nu a^\nu \quad (2.129)$$

即有

$$\int d^4x\partial_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\partial_\nu\varphi-\delta^\mu_\nu\mathcal{L}\right)a^\nu=0 \quad (2.130)$$

由于a^μ是任意小量那么我们得到方程

$$\partial_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\partial_\nu\varphi-\delta^\mu_\nu\mathcal{L}\right)=0 \quad (2.131)$$

通常我们把上式中括号内的部分定义为能量–动量张量T^μ_ν:

$$\boxed{T^\mu_\nu=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi}\partial_\nu\varphi-\delta^\mu_\nu\mathcal{L}} \quad (2.132)$$

为了看出T^μ_ν的意义,取$\mu=\nu=0$有

$$T^0_0=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_t\varphi}\partial_t\varphi-\mathcal{L} \quad (2.133)$$

对比经典力学中熟悉的单粒子情况下的$\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\dot{q}-L=p\dot{q}-L=H$,我们发现上式就是系统的哈密顿量密度.因此$T^0_0$代表系统的能量密度.而$T^0_i$代表$i$方向的动量密度:

$$T^0_i=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_t\varphi}\partial_i\varphi. \quad (2.134)$$

现在由守恒流/守恒方程$\partial_\mu T^\mu_\nu=0$可知

$$\partial_tT^0_0+\partial_iT^i_0=0\Rightarrow\partial_t\int d^3xT^0_0=\int d^3x\partial_iT^i_0=0 \quad (2.135)$$

上式最右边是无穷远处的表面项而为零.则有$\partial_t\int d^3xT^0_0=0$,这说明系统的总能量不随时间变化,也就是系统能量守恒.类似地也能发现系统的总动量也守恒.

- 系统的时空平移不变性导致能量与动量守恒.

另一方面,场本身的变化(与时空坐标无关),例如规范变换,也可以导致作用量的改变.若我们要求系统的作用量或者拉格朗日量密度在场自身的连续变化$\varphi \to \varphi + \delta\varphi$下不变,则有$\delta S = 0$,即

$$0 = \delta S = \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi} \right) \delta\varphi + \int d^4x \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi} \delta\varphi \right). \tag{2.136}$$

既然我们要求作用量或拉格朗日密度不变,这意味着拉格朗日方程仍然成立,那么上式左边为零,这样右边为零给出流守恒方程:

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi} \delta\varphi \right) = 0 \Rightarrow \partial_\mu J^\mu = 0. \tag{2.137}$$

这里守恒流定义为

$$\boxed{J^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi} \delta\varphi} \tag{2.138}$$

与能量一样,我们发现系统的'电荷'Q是守恒量:

$$Q = \int d^3x J^0. \tag{2.139}$$

- 场自身的连续对称性导致相应的流守恒.

  让我们考虑如下复标量场模型:

$$\mathcal{L} = \partial^\mu \Phi^* \partial_\mu \Phi - m^2 \Phi^* \Phi = \partial_\mu \Phi^* \partial^\mu \Phi - m^2 \Phi^* \Phi \tag{2.140}$$

我们发现$\Phi \to e^{i\theta}\Phi$(θ是时空坐标无关的常数)的相位因子变换(也称为整体规范变换)并不改变系统的拉格朗日密度,因此我们说系统具有规范不变性或规范对称性.[23]当θ足够小时,Φ场的变化是

$$\Phi \to e^{i\theta}\Phi = (1 + i\theta)\Phi = \Phi + \delta\Phi \tag{2.141}$$

则有$\delta\Phi = i\theta\Phi, \delta\Phi^* = -i\theta\Phi^*$,那么代入相应的守恒流可得

$$J^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \Phi} \delta\Phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \Phi^*} \delta\Phi^* = i\theta\Phi\partial^\mu\Phi^* - i\theta\Phi^*\partial^\mu\Phi = i\theta(\Phi\partial^\mu\Phi^* - \Phi^*\partial^\mu\Phi) \tag{2.142}$$

相应的守恒'电荷'是

$$Q = -i \int d^3x (\Phi\partial_t\Phi^* - \Phi^*\partial_t\Phi). \tag{2.143}$$

注意到这样定义的Q是实的.利用拉格朗日方程容易发现Φ满足Klein-Gordon方程.由于Q可正可负,Φ的概率解释失效,这是Klein-Gordon方程作为相对论性单粒子量子力学方程失效的重要原因.

[23]规范对称性不是物理的对称性而是对于同一个物理的不同等价描述罢了.

场的正则量子化

接下来,让我们转换至哈密顿形式.为了得到哈密顿量,首先需要得到正则动量Π,

$$\Pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_t \varphi} = \partial_t \varphi. \tag{2.144}$$

然后,利用勒让德变换可知哈密顿量为

$$H = \int d^3x \Pi \partial_t \varphi - L = \int d^3x \left(\frac{1}{2} (\overbrace{\partial_t \varphi}^{\Pi})^2 + \frac{1}{2}(\nabla\varphi)^2 + \frac{m^2}{2}\varphi^2 + V(\varphi) \right) \tag{2.145}$$

即有

$$H = \int d^3x \left(\frac{1}{2}\Pi^2 + \frac{1}{2}(\nabla\varphi)^2 + \frac{m^2}{2}\varphi^2 + V(\varphi) \right). \tag{2.146}$$

现在,仿照量子力学的标准处理,我们把正则动量$\Pi(x)$和正则坐标$\varphi(x)$都当成量子算符并赋予其对易关系,即$[\hat{\varphi}(x), \hat{\Pi}(y)] = i\delta(x-y)$,$\hbar = 1$.$\hat{\varphi}(x)$称为场算符,描述满足量子力学要求的场的运动.由此我们发现Klein-Gordon场量子化后对应的量子系统由如下哈密顿量描述:

$$\hat{H} = \int d^3x \left(\frac{1}{2}\hat{\Pi}^2 + \frac{1}{2}(\nabla\hat{\varphi})^2 + \frac{m^2}{2}\hat{\varphi}^2 + V(\hat{\varphi}) \right). \tag{2.147}$$

既然系统具有平移不变性,那么我们对$\hat{\varphi}, \hat{\Pi}$做傅里叶变换:

$$\hat{\varphi}(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{\varphi}(k), \quad \hat{\Pi}(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{\Pi}(k) \tag{2.148}$$

代入哈密顿量得到(设相互作用$V(\hat{\varphi}) = 0$以简化讨论)正则动量积分为

$$\begin{aligned} \int d^3x \frac{1}{2}\hat{\Pi}^2(x) &= \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{i(\vec{k}+\vec{p})\cdot\vec{x}} \hat{\Pi}(k)\hat{\Pi}(p) \\ &= \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta(k+p)\hat{\Pi}(k)\hat{\Pi}(p) \\ &= \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hat{\Pi}(k)\hat{\Pi}(-k) \end{aligned} \tag{2.149}$$

梯度部分是

$$\begin{aligned} \int d^3x \frac{1}{2}(\nabla\hat{\varphi}(x))^2 &= \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int d^3x (\nabla e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}) \cdot (\nabla e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}) \hat{\varphi}(k)\hat{\varphi}(p) \\ &= \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} (-\vec{k}\cdot\vec{p}) \int d^3x e^{i(\vec{k}+\vec{p})\cdot\vec{x}} \hat{\varphi}(k)\hat{\varphi}(p) \\ &= \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{k}^2 \hat{\varphi}(k)\hat{\varphi}(-k) \end{aligned} \tag{2.150}$$

最后质量部分是

$$\begin{aligned} \int d^3x \frac{m^2}{2}\hat{\varphi}^2(x) &= \frac{m^2}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{i(\vec{k}+\vec{p})\cdot\vec{x}} \hat{\varphi}(k)\hat{\varphi}(p) \\ &= \frac{m^2}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hat{\varphi}(k)\hat{\varphi}(-k). \end{aligned} \tag{2.151}$$

把这三项加在一起得到

$$\hat{H}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{2}\left(\hat{\Pi}(k)\hat{\Pi}(-k)+E_k^2\hat{\varphi}(k)\hat{\varphi}(-k)\right),\quad E_k=\sqrt{\vec{k}^2+m^2}.\ (2.152)$$

注意$E_k\geq 0$是正确的相对论性自由粒子的能量.由于$\hat{\varphi}(x),\hat{\Pi}(x)$是实算符,其傅里叶变换满足$\hat{\varphi}^\dagger(k)=\hat{\varphi}(-k),\hat{\Pi}^\dagger(k)=\hat{\Pi}(-k)$.由正则对易关系$[\hat{\varphi}(x),\hat{\Pi}(y)]=i\delta(x-y)$可得

$$[\hat{\varphi}(k),\hat{\Pi}(-p)]=\int d^3xd^3ye^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\vec{p}\cdot\vec{y})}[\hat{\varphi}(x),\hat{\Pi}(y)]=i(2\pi)^3\delta(k-p).\ (2.153)$$

注意到动量空间的哈密顿量类似于一些列退耦和的谐振子,因此我们引入产生湮灭算符

$$\hat{a}_k=\sqrt{\frac{E_k}{2}}\hat{\varphi}(k)+i\frac{1}{\sqrt{2E_k}}\hat{\Pi}(k),\quad \hat{a}_k^\dagger=\sqrt{\frac{E_k}{2}}\hat{\varphi}(-k)-i\frac{1}{\sqrt{2E_k}}\hat{\Pi}(-k)\ (2.154)$$

则有

$$[\hat{a}_k,\hat{a}_p^\dagger]=-i\sqrt{\frac{E_k}{4E_p}}[\hat{\varphi}(k),\hat{\Pi}(-p)]+i\sqrt{\frac{E_p}{4E_k}}[\hat{\Pi}(k),\hat{\varphi}(-p)]=(2\pi)^3\delta(k-p)\ (2.155)$$

同理有$[\hat{a}_k,\hat{a}_p]=[\hat{a}_k^\dagger,\hat{a}_p^\dagger]=0$.反过来有

$$\hat{\varphi}(k)=\frac{1}{\sqrt{2E_k}}(\hat{a}_k+\hat{a}_{-k}^\dagger),\quad \hat{\Pi}(k)=-i\sqrt{\frac{E_k}{2}}(\hat{a}_k-\hat{a}_{-k}^\dagger).\ (2.156)$$

这样利用产生湮灭算符得到

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{E_k}{4}\left(-(\hat{a}_k-\hat{a}_{-k}^\dagger)(\hat{a}_{-k}-\hat{a}_k^\dagger)+(\hat{a}_k+\hat{a}_{-k}^\dagger)(\hat{a}_{-k}+\hat{a}_k^\dagger)\right)\\&=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{E_k}{2}(\hat{a}_{-k}^\dagger\hat{a}_{-k}+\hat{a}_k\hat{a}_k^\dagger)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}E_k\left(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k+\frac{1}{2}(2\pi)^3\delta(0)\right)\end{aligned}$$

我们看到系统确实化为一些列无耦合谐振子的集合.同时系统的基态是没有任何粒子激发的真空,记为$|0\rangle$.当系统在基态时有非零的实际上是发散的零点振动能量$\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{E_k}{2}(2\pi)^3\delta(0)$.由于绝大多数感兴趣的物理量与真空的零点振动无关,因此我们可以忽略这个发散的能量,这相当于我们用'重整化'的哈密顿量:

$$\hat{H}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}E_k\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k.$$

现在,我们可以用生灭算符改写场$\hat{\varphi},\hat{\Pi}$:

$$\hat{\varphi}(x)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2E_k}}(\hat{a}_k+\hat{a}_{-k}^\dagger)e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2E_k}}(\hat{a}_ke^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}+\hat{a}_k^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}})\ (2.157)$$

$$\hat{\Pi}(x)=-i\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{E_k}{2}}(\hat{a}_k-\hat{a}_{-k}^\dagger)e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}=-i\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{E_k}{2}}(\hat{a}_ke^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}-\hat{a}_k^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}).\ (2.158)$$

当我们需要计算系统的动力学也就是时间依赖行为时,算符的Heisenberg运动方程$\frac{d\hat{O}(t)}{dt}=\frac{1}{i}[\hat{O},\hat{H}]$告诉我们

$$\hat{a}_k(t)=\hat{a}_k e^{-iE_k t},\quad \hat{a}_k^\dagger(t)=\hat{a}_k^\dagger e^{iE_k t} \tag{2.159}$$

因此场算符

$$\hat{\varphi}(x,t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2E_k}}(\hat{a}_k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-E_k t)}+\hat{a}_k^\dagger e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-E_k t)}) \tag{2.160}$$

物理上$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-E_k t)}$代表动量为$\vec{k}$能量为$E_k>0$的平面波,因此$\hat{a}_k$部分对应正能粒子.与之相反$e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-E_k t)}$对应着动量为$-\vec{k}$能量为$-E_k<0$的负能量解,这在Klein-Gordon理论中是主要的困难.在场论中,我们把$e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-E_k t)}$因子解释为能量为$E_k$的反粒子的平面波态度,这样$\hat{a}_k^\dagger$描述Klein-Gordon场的反粒子.当然对于当前的实标量场$\hat{\varphi}$,$\hat{a}_k^\dagger$同时是粒子的产生算符,所以我们说标量场的粒子其反粒子是自身.

- 实标量场中粒子与反粒子相同.

卡西米尔效应

需要指出,真空的零点振动实际上也具有可观测效应,也就是著名的卡西米尔效应(Casimir effect).简单来说,如果我们在(电磁场的)真空中引入两个无穷大的导电平板,那么原来的真空会受到扰动,这样真空的能量就会有变化,这个变化会在两个导电平板诱导出作用力,这个力称为卡西米尔力.

为简化讨论,我们讨论一维空间的情况,此时两个导电平板可以简化为x轴上的两个点,即$x=0$与$x=d$,这样导电平板间的距离就是d.当然,为了避开导电平板外真空的变化,我们可以加上第三个平板,可以设它位于$x=L$处.由于是导电平板,因此电磁场在导电平板处场强$\vec{E}$为零,这相当于给出边界条件

$$\vec{E}(x=0)=\vec{E}(x=d)=\vec{E}(x=L)=0 \tag{2.161}$$

结合一维空间的电磁波方程$\partial_t^2\vec{E}-c^2\partial_x^2\vec{E}=0$,并设$\vec{E}(x,t)=\vec{E}(x)e^{-i\omega_k t}$可知其解为$\vec{E}(x)=\vec{E}_0\sin\frac{\pi n}{d}x$($x=d$到$x=L$区域的解为$\vec{E}(x)=\vec{E}_0\sin\frac{\pi n}{L-d}x$)而频率$\omega_k=ck=c\frac{\pi n}{d}$($n=0,1,2,3...$).与自由空间中电磁场的频率$\omega_k=c|k|$ $k\in(-\infty,\infty)$相比,导电平板所在区域的波矢从连续值变为一系列离散值$k=\frac{\pi n}{d}(n=0,1,2,3)$.

然后,让我们固定$x=0,x=L$处的平板改变d,那么三个平板内部的总真空能(忽略电磁场的极化/偏振)与前面标量场的形式一致,只不过对波矢的积分换为求和,即

$$\begin{aligned}E_g&=E_g(d)+E_g(L-d)\\E_g(d)&=\sum_k\frac{\hbar\omega_k}{2}=\frac{\hbar c}{2}\frac{\pi}{d}\sum_{n=0}^{\infty}n.\end{aligned} \tag{2.162}$$

显然$\sum_{n=0}^{\infty} n$自然是发散的,但是注意到我们处理的是物理问题,也就是说原则上频率足够高的电磁波会跑出导电平板,这说明高频部分在求和中的贡献必须被抑制.因此,我们把对n的求和进行改写,[24]

$$\sum_{n=0}^{\infty} n \to \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-an/d} = (-d)\frac{\partial}{\partial a}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-an/d} = (-d)\frac{\partial}{\partial a}\frac{1}{1-e^{-a/d}} = \frac{e^{-a/d}}{(1-e^{-a/d})^2}.$$

接下来,让我们对展开$\frac{e^{-a/d}}{(1-e^{-a/d})^2}$:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-an/d} = \frac{e^{-a/d}}{(1-e^{-a/d})^2} = \frac{d^2}{a^2} - \frac{1}{12} + \frac{a^2}{240d^2} + \mathcal{O}(a^4/d^4) \tag{2.163}$$

注意到$a \to 0$时上述结果是发散的,这自然与所有自然数的求和$\sum_{n=0}^{\infty} n$发散是一致的.我们这里得到的新东西是$-1/12$这个因子,这对于我们下面的计算是至关重要的.这样,我们有

$$E_g(d) = \hbar c\left(\frac{\pi d}{2a^2} - \frac{\pi}{24d} + \frac{\pi a^2}{480d^3} + \mathcal{O}(a^4/d^5)\right) \tag{2.164}$$

最后,我们可以让能量对d求导就得到作用在导电平板($x = d$处)上的力:

$$F = -\lim_{a\to 0}\left(\frac{\partial E_g(d)}{\partial d} + \frac{\partial E_g(L-d)}{\partial d}\right) = -\frac{\hbar c\pi}{24}\left(\frac{1}{d^2} - \frac{1}{(L-d)^2}\right) \to -\frac{\pi\hbar c}{24d^2}. \tag{2.165}$$

在上式的最后我们取了$L \gg d$的极限.注意上式的负号代表力的方向是x轴负方向,也就是$x = d$处的导电平板受到$x = 0$处平板的吸引力.$\hbar, c$分别体现了卡西米尔力源自量子效应和相对论效应,而我们知道相对论与量子力学的结合自然是量子场论了,因此卡西米尔效应是量子场论的直接结果.

复标量场

对于公式2.140所描述的复标量场,其经典哈密顿量是

$$H = \int d^3x \left(\Pi^*\Pi + \nabla\Phi^* \cdot \nabla\Phi + m^2\Phi^*\Phi\right) \tag{2.166}$$

这里正则动量$\Pi = \partial_t\Phi^*$.类似于实标量场,我们把Φ, Π提升为量子算符并赋予对易关系$[\hat{\Phi}(x), \hat{\Pi}(y)] = i\delta(x-y)$,这样系统的量子哈密顿量是

$$\hat{H} = \int d^3x \left(\hat{\Pi}\hat{\Pi}^\dagger + \nabla\hat{\Phi}^\dagger \cdot \nabla\hat{\Phi} + m^2\hat{\Phi}^\dagger\hat{\Phi}\right) \tag{2.167}$$

与实标量场类似,复标量场的场算符有如下展开形式:

$$\hat{\Phi}(x,t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2E_k}}(\hat{a}_k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - E_k t)} + \hat{b}_k^\dagger e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x} - E_k t)}) \tag{2.168}$$

[24]不同的改写方式,或者说正规化(从发散的量中分离出有限部分和发散部分)方式并不会影响卡西米尔力的计算结果

$\hat{a}_k$是粒子的湮灭算符而$\hat{b}_k$代表反粒子.这里粒子与反粒子是不同的,所以我们说复标量场中粒子与反粒子不同.利用Noether定理的结果,我们发现复标量场的守恒电荷可以写成

$$\hat{Q} = -i\int d^3x(\hat{\Phi}\partial_t\hat{\Phi}^\dagger - \hat{\Phi}^\dagger\partial_t\hat{\Phi}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k - \hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k). \tag{2.169}$$

因此我们发现粒子带正电荷而反粒子带负电荷.同时系统的哈密顿量化为简单的谐振子形式(忽略无穷大的零点能):

$$\hat{H} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}E_k(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k).$$

我们把标量场的二次量子化形式(公式2.147和2.167)对比公式2.95,两者实际上是类似的,不过正则动量部分是额外的.当然,注意到公式2.95的量子哈密顿实际上是非相对论性质的,因此更合适的出发点是Schödinger方程$i\partial_t\psi = (\frac{-\nabla^2}{2m} + U)\psi$.注意到,在复标量场对应的Klein-Gordon方程$(\partial^2 + m^2)\Phi = 0$中如果令$\Phi = e^{-imt}\psi$则有

$$e^{-imt}\left(-2im\partial_t - m^2 + \partial_t^2 - \nabla^2 + m^2\right)\psi = 0 \tag{2.170}$$

若ψ随时间相当于e^{-imt}缓慢变化,那么我们可以忽略上式中的时间二阶导数项$\partial_t^2\psi$,就可得Schödinger方程.可以看到,Schödinger 方程可从下面的作用量得到

$$S = \int dtd^3x\mathcal{L} = \int dtd^3x\left(i\psi^*\partial_t\psi + \psi^*\frac{\nabla^2}{2m}\psi - U\psi^*\psi\right). \tag{2.171}$$

容易得到相应的正则动量是$\Pi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_t\psi} = i\psi^*$.由此可知哈密顿量为

$$H = \int d^3x\left(\psi^*\frac{-\nabla^2}{2m}\psi + U\psi^*\psi\right). \tag{2.172}$$

毫无疑问,波函数ψ, ψ^*替换为量子算符$\hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger$,我们就重新得到了公式2.95中相应的部分.

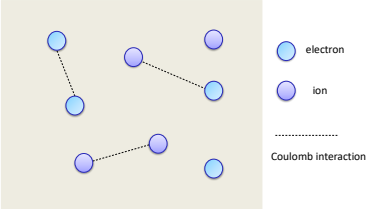


Figure 2.3: Coulomb电子气模型

Coulomb电子气:多体物理的新手教程

在这一部分,作为二次量子化的应用,我们讨论简并电子气或者Coulomb电子气模型,即凝胶模型(jellium model).[25]这相当于是金属中电子气体的简化描述.在一次量子化形式中,体系的哈密顿量由三项组成,即电子部分,离子实构成的正电荷背景的部分以及电子与正电荷背景的相互作用.

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b} \tag{2.173}$$

$$H_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^{-\mu|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.174}$$

$$H_b = \frac{e^2}{2} \int d^3x d^3x' \frac{n(\vec{x}) n(\vec{x}') e^{-\mu|\vec{x} - \vec{x'}|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \tag{2.175}$$

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^{N} \int d^3x \frac{n(\vec{x}) e^{-\mu|\vec{x} - \vec{r}_i|}}{|\vec{x} - \vec{r}_i|} \tag{2.176}$$

为了避免长程Coulomb相互作用的发散特性,我们给相互作用加上一个衰减部分$e^{-\mu|x|}$,$(\mu > 0)$ 即相当于用Yukawa(汤川)势代替裸的Coulomb势,当然在计算的最后要取$\mu = 0$以回到原来Coulomb力的情况.[26]这种做法有时也叫做Coulomb相互作用正规化(Coulomb interaction regularizatio).[27]

假定正电荷是均匀分布的并且与电子数相同,则有$n(\vec{x}) = \frac{N}{V}$,(电中性条

[25] 主要参考M.Franz在PI的课程视频.[2]

[26] 这里Coulomb势采用的是高斯单位制中的形式,例如电子间的Coulomb势写成$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{|\vec{r}|}$.而在国际单位制中,同样的Coulomb势是$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$.

[27] 正规化通常指的是场论中分离出无穷大积分的一类操作.

件)那么离子实之间的Coulomb能是

$$\begin{aligned} H_b &= \frac{e^2}{2}\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3x d^3x' \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} = \frac{e^2}{2}\left(\frac{N}{V}\right)^2 \overbrace{\int d^3R}^{=V} \int 4\pi r^2 dr \frac{e^{-\mu r}}{r} \\ &= \frac{e^2}{2}\left(\frac{N}{V}\right)^2 V\frac{4\pi}{\mu^2} = \frac{1}{2}e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} \end{aligned} \tag{2.177}$$

这里我们引入了相对坐标和质心坐标$\vec{r}=\vec{x}-\vec{x}', \vec{R}=(\vec{x}+\vec{x}')/2$.对于电子与正电背景的Coulomb能可计算为

$$H_{el-b} = -e^2\frac{N}{V}\sum_{i=1}^{N}\int d^3x \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{r}_i|}}{|\vec{x}-\vec{r}_i|} = -e^2\frac{N}{V}N\int d^3x\frac{e^{-\mu|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} = -e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} \tag{2.178}$$

这上述计算中,对每一个粒子i的积分计算时平移了$\vec{x}$坐标,即$\vec{x}\to\vec{x}+\vec{r}_i$.

这样哈密顿量中的两项已经计算完成,剩下的电子部分根据一般的二次量子化操作,其形式是

$$\hat{H}_{el} = \sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} V_q \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{2.179}$$

其中相互作用V_q是

$$\begin{aligned} V_{\vec{q}} &= \frac{e^2}{V}\int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\frac{e^{-\mu|r|}}{|\vec{r}|} = \frac{2\pi e^2}{V}\int_0^\infty r^2dr\frac{e^{-\mu r}}{r}\int_{-1}^{1}dx e^{-iqrx} = \frac{2\pi e^2}{iqV}\int_0^\infty dr(e^{(-\mu+iq)r}-e^{(-\mu-iq)r}) \\ &= \frac{2\pi e^2}{iqV}\left(\frac{e^{(-\mu+iq)\infty}-1}{-\mu+iq}+\frac{e^{(-\mu-iq)\infty}-1}{-\mu-iq}\right) = \frac{1}{V}\frac{4\pi e^2}{\mu^2+q^2} \end{aligned} \tag{2.180}$$

注意到上式中μ是大于零的有限值,因此$e^{-\mu\infty}=0$,这样没有明确取值的$e^{iq\infty}$部分的贡献就可不用考虑.

这样电子部分的明确哈密顿量形式是

$$\hat{H}_{el} = \sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \frac{1}{2V}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi e^2}{\mu^2+q^2}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{2.181}$$

我们先考虑$q=0$部分的相互作用:

$$\begin{aligned} \hat{V}_0 = \frac{4\pi e^2}{2\mu^2 V}\sum_{k,k',\sigma,\sigma'}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} &= -\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}\left[\sum_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} - \left(\sum_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\right)\left(\sum_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\right)\right] \\ &= -\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}[N-N^2] = \frac{1}{2}e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} - \frac{1}{2}e^2\frac{N}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} \end{aligned} \tag{2.182}$$

在这里我们利用总电子数算符$\hat{N}=\sum_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$ 与哈密顿量对易是体系的守恒量,用电子数目N代替了$\hat{N}$.此外在热力学极限下,负号项可忽略.我们发现

$$\hat{V}_0 + H_b + H_{el-b} = 0 \tag{2.183}$$

物理量	电子平均距离	Bohr半径	Wigner-Seitz半径
符号	r_0	a_B	r_s
具体形式	$\sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n}}$	$\frac{1}{me^2}$	$\frac{r_0}{a_B}$
数值	$1\sim 3\mathring{A}$	$0.53\mathring{A}$	$2\sim 6$

Table 2.2: 金属电子气中的典型长度尺度.

也就是说电子之间的直接Coulomb相互作用与正电背景相互作用恰好抵消,这实际上是系统电中性的直接体现.因此,体系剩下的部分就是纯粹的电子部分,且相互作用不包含$q=0$:

$$\boxed{\hat{H}_{el}=\sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\frac{1}{2V}\sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi e^2}{q^2}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}} \tag{2.184}$$

我们已经令$\mu=0$因为$q\neq 0$. 为了便于讨论,引入特征长度r_0,代表每个电子之间的平均距离,通过$\frac{V}{N}=\frac{4}{3}\pi r_0^3$定出.另一方面,Bohr半径是$a_B=\frac{1}{me^2}=0.53\mathring{A}$.对于一般的金属,$r_s=\frac{r_0}{a_B}\sim 2-6$.如果定义无维度的体积$\bar{V}=r_0^{-3}V$ 和动量$\bar{k}=r_0k$,可把哈密顿量写为

$$\begin{aligned}\hat{H}_{el} &= \frac{e^2}{2a_Br_s^2}\left[\sum_{\bar{k}\sigma}\bar{k}^2\hat{c}^\dagger_{\bar{k}\sigma}\hat{c}_{\bar{k}\sigma}+\frac{r_s}{\bar{V}}\sum_{\bar{k},\bar{k}',\bar{q}\neq 0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi}{\bar{q}^2}\hat{c}^\dagger_{\bar{k}+\bar{q}\sigma}\hat{c}^\dagger_{\bar{k}'-\bar{q}\sigma'}\hat{c}_{\bar{k}'\sigma'}\hat{c}_{\bar{k}\sigma}\right]\\ &= \frac{1}{r_s^2}\left[\sum_{\bar{k}\sigma}\bar{k}^2\hat{c}^\dagger_{\bar{k}\sigma}\hat{c}_{\bar{k}\sigma}+\frac{r_s}{\bar{V}}\sum_{\bar{k},\bar{k}',\bar{q}\neq 0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi}{\bar{q}^2}\hat{c}^\dagger_{\bar{k}+\bar{q}\sigma}\hat{c}^\dagger_{\bar{k}'-\bar{q}\sigma'}\hat{c}_{\bar{k}'\sigma'}\hat{c}_{\bar{k}\sigma}\right]\text{Ry}.\end{aligned}$$

$\text{Ry}\equiv\frac{e^2}{2a_B}\simeq 13.6eV$代表体系的能量尺度.[28]可以看到,如果$r_s<<1$,那么就可按小参数$r_s$ 展开,计算相互作用的微扰修正.物理上,$r_s<<1$表明平均到每个元胞/格点有很多电子,这与强关联电子体系每个格点仅有$1-2$ 个电子恰好相反.因此,$r_s<<1$称为高密度极限,而$r_s>>1$ 称为低密度极限或强关联区.

微扰理论计算

假定相互作用部分是小量,那么可以采用微扰理论计算体系的基态能量.当体系没有相互作用时,电子形成自由电子气体,其基态必定是费米球分布,即

$$|F\rangle=\prod_{k<k_F}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|0\rangle=|\overbrace{11111...1111}^{k<k_F}\overbrace{00000...0000}^{k>k_F}\rangle=\prod_{k\sigma}\overbrace{|n_{k\sigma}\rangle}^{\hat{c}^\dagger_{k\sigma}|0\rangle} \tag{2.185}$$

这里$n_{k\sigma}$是处于动量为k,自旋为σ电子的占据数.在费米球分布下,当$k<k_F$时取值为1,而$k>k_F$时取值为0,用阶跃函数可表示为$n_{k\sigma}=\theta(k_F-k)$.费米动量$k_F$由

[28]有趣的是,氢原子的基态能就是$-13.6eV$.

基态时的总电子数决定

$$\begin{aligned} N &= \langle F|\sum_{k\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}|F\rangle = \sum_{k\sigma}\langle F|\overbrace{\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}}^{\hat{n}_{k\sigma}}\overbrace{|n_{k,\sigma}\rangle\prod_{k'\neq k,\sigma'\neq\sigma}|n_{k'\sigma'}\rangle}^{|F\rangle} = \sum_{k,\sigma}n_{k\sigma}\overbrace{\langle F|F\rangle}^{1} = \sum_{k\sigma}\theta(k_F-k) \\ &= \sum_{\sigma}V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\theta(k_F-k) = 2\frac{4\pi V}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F}k^2dk = \frac{V}{3\pi^2}k_F^3 \end{aligned} \tag{2.186}$$

这样,根据非简并微扰理论,体系基态能量准确到一阶的修正是[29]

$$E_g = E_g^0 + \langle F|\hat{H}_{int}|F\rangle \tag{2.187}$$

其中E_g^0是电子动能的无相互作用基态平均值,计算如下

$$\begin{aligned} E_g^0 &= \langle F|\sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}|F\rangle = \sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\theta(k_F-k) = 2\frac{4\pi V}{2m(2\pi)^3}\int_0^{k_F}k^4dk \\ &= \frac{V}{2m\pi^2}\frac{k_F^5}{5} = \frac{3}{5}NE_F = 2.21\frac{N}{r_s^2}\frac{e^2}{2a_B} \end{aligned} \tag{2.188}$$

其中$E_F = k_F^2/(2m)$是电子气的费米能.$k_F = (3\pi^2\frac{N}{V})^{1/3} = (3\pi^2)^{1/3}n^{1/3}$是密度$n$依赖的费米波矢.可以看到电子气的总能量相当于百分之六十的电子都在费米面上贡献的费米能的总和.

接下来计算一阶修正

$$\langle F|\hat{H}_{int}|F\rangle = \frac{1}{2V}\sum_{k,k',q\neq0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi e^2}{q^2}\langle F|\hat{c}^{\dagger}_{k+q\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}|F\rangle \tag{2.189}$$

由于左右两边都是完全占据的费米球态,因此以上期望值当且仅当四个算符两两配成粒子数算符的形式才会有非零值.这个结论的普遍形式在文献中称为Wick定理.对一般的无相互作用费米子系统$\hat{H} = \sum_{ij}\hat{c}^{\dagger}_i\varepsilon_{ij}\hat{c}_j$,Wick定理表明,对于系统的任何本征态$|\Psi\rangle$,有以下重要结果

$$\boxed{\langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_i\hat{c}^{\dagger}_j\hat{c}_k\hat{c}_l|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_i\hat{c}_l|\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_j\hat{c}_k|\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_i\hat{c}_k|\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_j\hat{c}_l|\Psi\rangle}} \tag{2.190}$$

这里右边第二项负号来自于把$\hat{c}_k$换到$\hat{c}^{\dagger}_j$前面而导致的反对易.若算符的排列为$\hat{c}^{\dagger}_i\hat{c}_j\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_l$, 则有

$$\boxed{\langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_i\hat{c}_j\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_l|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_i\hat{c}_j|\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_l|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{c}^{\dagger}_i\hat{c}_l|\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{c}_j\hat{c}^{\dagger}_k|\Psi\rangle}} \tag{2.191}$$

利用Wick定理,我们发现配成粒子数算符的形式有两种即直接项与交换项:

$$\begin{aligned} \langle F|\hat{c}^{\dagger}_{k+q\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}|F\rangle &= \langle F|\hat{c}^{\dagger}_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}|F\rangle\langle F|\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}|F\rangle - \langle F|\hat{c}^{\dagger}_{k+q\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}|F\rangle\langle F|\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}|F\rangle \\ &= \delta_{q=0}\theta(k_F-|\vec{k}|)\theta(k_F-|\vec{k}'|) - \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{k',k+q}\theta(k_F-|\vec{k}|)\theta(k_F-|\vec{k}+\vec{q}|) \end{aligned}$$

[29] 二阶修正为$\sum_f\frac{|\langle f|\hat{H}_{int}|g\rangle|^2}{E_g^0-E_f^0}$,$f$代表激发态.这样,准确到二阶修正的基态能量是$E_g = E_g^0 + \langle F|\hat{H}_{int}|F\rangle + \sum_f\frac{|\langle f|\hat{H}_{int}|g\rangle|^2}{E_g^0-E_f^0}$.

这里的第一项是直接项,也叫作Hartree项,而带有负号的第二项是交换项,就是Fock项.注意到在当前的电子气模型中,$q=0$部分已经事先处理掉,因此这里不存在Hartree 项,只剩下Fock项,此时能量修正是

$$\langle F|\hat{H}_{int}|F\rangle = -\frac{1}{2V}\sum_{k,q\neq 0,\sigma}\frac{4\pi e^2}{q^2}\theta(k_F-|\vec{k}|)\theta(k_F-|\vec{k}+\vec{q}|) \tag{2.192}$$

注意到Fock项的对能量的贡献是负的,也就是会降低系统的能量,同时考虑到只有相同自旋的电子才有贡献.物理上,这表明自旋相同的电子倾向于彼此远离而降低排斥的Coulomb相互作用的影响,进而降低系统的能量.做变量代换$\vec{q}\to\vec{q}=\vec{k}'-\vec{k}$,可得

$$\begin{aligned}
E_g^1 &= \langle F|\hat{H}_{int}|F\rangle = -\frac{4\pi e^2V}{(2\pi)^6}\int d^3k\theta(k_F-|\vec{k}|)\int d^3k'\theta(k_F-|\vec{k}'|)\frac{1}{(\vec{k}-\vec{k}')^2}\\
&= -\frac{4\pi e^2V}{(2\pi)^6}\int d^3k\theta(k_F-|\vec{k}|)\int_0^{k_F}(k')^2dk'\int_{-1}^{1}d\cos\theta\frac{2\pi}{|\vec{k}|^2+(k')^2-2|\vec{k}|k'\cos\theta}\\
&= -\frac{4\pi e^2V}{(2\pi)^6}\int d^3k\theta(k_F-|\vec{k}|)\int_0^{k_F}(k')^2dk'\frac{1}{-2|\vec{k}|k'}2\pi\ln\frac{(|\vec{k}|-k')^2}{(|\vec{k}|+k')^2}\\
&= -\frac{4\pi e^2V}{(2\pi)^6}\int_0^{k_F}4\pi k^2dk\frac{2\pi}{k}\int_0^{k_F}dk'k'[\ln|k+k'|-\ln|k'-k|]\\
&= -\frac{4\pi e^2V}{(2\pi)^6}\int_0^{k_F}4\pi k^2dk\frac{2\pi}{k}k_Fk\left[1+\frac{k_F^2-k^2}{2k_Fk}\ln\frac{|k+k_F|}{|k-k_F|}\right]\\
&= -\frac{4\pi e^2V}{(2\pi)^6}8\pi^2k_Fk_F^3\int_0^1x^2dx\left[1+\frac{1-x^2}{2x}\ln\frac{|1+x|}{|1-x|}\right].
\end{aligned} \tag{2.193}$$

关于x的积分值为1/2,因此有

$$E_g^1 = -\frac{4\pi e^2V}{(2\pi)^6}8\pi^2k_Fk_F^3\frac{1}{2} = -\frac{3e^2}{4\pi}Nk_F = -\frac{e^2}{2a_B}\frac{N}{r_s}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{3}{2\pi} = -0.916\frac{e^2}{2a_B}\frac{N}{r_s}.$$

这样,体系在微扰修正后平均每个电子的总能量是

$$\frac{E_g}{N} = \frac{1}{N}(E_g^0+E_g^1) = \frac{e^2}{2a_B}\left[\frac{2.21}{r_s^2}-\frac{0.916}{r_s}\right] \tag{2.194}$$

注意到这个能量在高密度情况,也就是$r_s<<1$时是主导的,因此我们也把对Comlomb 相互作用展开称为高密度展开.如果把r_s当做变分参数对待,那么能量的变分极值是$r_s^{min}=4.83$,对应的能量最小值是$E_g/N=-0.095\frac{e^2}{2a_B}=-1.23eV$,与金属钠的实验值$r_s=3.36, E_g/N=-1.13eV$比较接近.在相反的低密度极限下$r_s\to\infty$,电子系统会形成Wigner 晶体,[30]其能量是$E_g/N=\frac{e^2}{2a_B}[-\frac{1.29}{r_s}+\frac{2.66}{r_s^{2/3}}+...]$.

- 对三维凝胶模型,量子蒙特卡洛模拟表明$r_s<75$时系统是正常金属态(费米液体),$75<r_s<100$是铁磁金属态,$r_s>100$是Wigner晶体.对二维凝胶模

[30]电子由于相互作用局域化在格点上,形成晶体(原型Mott绝缘体).

三维凝胶模型	金属($r_s < 75$)	铁磁金属($75 < r_s < 100$)	Wigner晶体($r_s > 100$)
二维凝胶模型	金属($r_s < 20$)	？？？ ($20 < r_s < 34$)	Wigner晶体($r_s > 34$)

Table 2.3: 量子蒙特卡洛模拟关于二维和三维凝胶模型的基本结果.

型,量子蒙特卡洛模拟表明$r_s < 20$对应费米液体,$r_s > 34$是Wigner 晶体,至于中间状态则有争议.

- 由于实验上实现大的r_s,也就是极低密度电子气体仍然很困难,因此我们看到的电子气几乎都处于正常金属态.当然强磁场下能够实现Wigner晶体以及整数和分数量子霍尔态.

- 除了上述基态,Overhauser指出电子气系统还可以出现电荷密度波(charge-density-wave,CDW)和自旋密度波(spin-density-wave,SDW)态.

如果体系的自旋上和自旋下电子密度可以写成如下形式,

$$\begin{aligned} n_\uparrow(\vec{r}) &= \frac{n}{2} + A\cos(\vec{Q}\cdot\vec{r}) \\ n_\uparrow(\vec{r}) &= \frac{n}{2} + A\cos(\vec{Q}\cdot\vec{r}+\phi). \end{aligned} \tag{2.195}$$

这里特征波矢$\vec{Q} \simeq 2\vec{k}_F$,$\phi$是相位差.那么当相位差$\phi = 0$时,电荷密度

$$n(\vec{r}) = n_\uparrow(\vec{r}) + n_\uparrow(\vec{r}) = n + 2A\cos(\vec{Q}\cdot\vec{r}). \tag{2.196}$$

而自旋密度$S^z(\vec{r}) = n_\uparrow(\vec{r}) - n_\uparrow(\vec{r}) = 0$,此时我们说体系是CDW态.与之相对,当$\phi = \pi$时,自旋密度

$$S^z(\vec{r}) = 2A\cos(\vec{Q}\cdot\vec{r}), \tag{2.197}$$

而$n(\vec{r}) = n$是均匀的,这是我们称体系进入SDW态.当$\phi \neq 0, \pi$时,CDW和SDW同时存在,这就是两者的共存态.一般而言,CDW有序态可以通过X射线来探测而SDW则用中子散射来判定.当CDW/SDW出现时,实验谱线会看到显著的峰结构,其位置对应的是特征波矢$\vec{Q}$的位置.[31]

发散与重新求和*

当然,我们上面的计算只是给出了一阶微扰论的结果,原则上可以计算二阶三阶等高阶微扰的修正.虽然具体计算有些复杂,但重要的是,由于Coulomb相互作用$V_q \sim \frac{1}{q^2}$,因此二阶微扰计算由于$q \to 0$导致积分发散.更高阶的微扰计算也存在类似的发散行为.

[31] 由于电声相互作用,电子形成CDW也会影响晶格,这样CDW相变一般会是一级相变并伴随晶体的结构相变.

从数学形式来说,r_s为函数的微扰理论的发散意味着我们的出发点,也就是$r_s = 0$的无相互作用电子基态是微扰展开的奇异点.当r_s比较小,也就是高密度极限时,这个困难可以被绕过.在1957年Gell-Mann和Brueckner的经典文献中,[32]他们发现微扰级数实际上可以重新求和到无穷阶,物理上这等价于Coulomb相互作用在长距离时可以被屏蔽.在高密度极限下,对于基态能量的修正有贡献的长波长部分可以精确计算,而短波长部分可以展开为以r_s为函数的收敛级数.把这两项的贡献加在一起就等到有限的基态能量.对三维电子气体,基态能密度的结果是,

$$\frac{E_g}{N} \simeq \left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + 0.062\ln r_s - 0.093 + \mathcal{O}(r_s \ln r_s)\right] \frac{e^2}{2a_B}. \tag{2.198}$$

注意到对数项$\ln r_s$的出现表明能量在$r_s \to 0$时是非解析的,这就解释了直接微扰计算的失效原因.需要指出,上面这个公式仅对很小的r_s是足够准确的.

Hartree-Fock(平均场)近似

对于一般的相互作用系统,通常无法精确求解其多体基态,更不用说有限温度的性质.如果退而求其次,想得到一个体系的近似描述或者定性上理解体系的行为,这个时候常用的处理方案就是Hartree-Fock近似,有时也叫平均场近似.假定有两个算符$\hat{A}$和$\hat{B}$,它们的乘积$\hat{A}\hat{B}$是难以处理的形式,例如四个场算符的乘积,那么有以下等式

$$\hat{A}\hat{B} = [\langle\hat{A}\rangle + \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle][\langle\hat{B}\rangle + \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle] = [\langle\hat{A}\rangle + \Delta\hat{A}][\langle\hat{B}\rangle + \Delta\hat{B}] \tag{2.199}$$

$\langle.\rangle$代表基态或者热力学系综平均,这里记$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$(同理有$\Delta\hat{B}$)表示相对于平均值的偏离,这样有

$$\hat{A}\hat{B} = \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\Delta\hat{B} + \langle\hat{B}\rangle\Delta\hat{A} + \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \tag{2.200}$$

如果假定偏离$\Delta\hat{A}$与$\Delta\hat{B}$都是小量,那么可以忽略二级小量$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$, 则有重要的近似公式:

$$\boxed{\hat{A}\hat{B} \approx \hat{A}\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\hat{B} - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle} \tag{2.201}$$

注意在得到这个结果时已经把第二第三项中的涨落部分用其原始定义代替,这样才会出现关于两个平均值的负号形式.

- 一般而言,弱和中间耦合时HF近似可以使用,但强耦合时会失效.

对于前面处理的电子气问题,难以处理的是相互作用部分

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2V}\sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{2.202}$$

[32]Gell-Mann,Brueckner,Correlation Energy of an Electron Gas at High Density,Phys.Rev. **106**,364(1957)

在使用Hartree-Fock近似时,实际上就是要把四算符形式拆分成两算符形式的乘积,并对其做平均,这里可能的拆分方式有

$$\langle \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\rangle \tag{2.203}$$

$$\langle \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\rangle \tag{2.204}$$

$$\langle \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\rangle \tag{2.205}$$

第一种实际上是代表电子配对,这在超导理论当中很重要,[33]对于电子气体,每个电子相对独立,因而可以不用考虑. 注意到第二种和第三种分别对应微扰论计算时的交换项与直接项,那么其意义是显而易见的.对于Coulomb 气体,直接项不用考虑,那么只需要计算交换项,这相当于对相互作用哈密顿量中的四算符形式做如下近似:

$$\begin{aligned}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} &= -\overbrace{\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}}^{\hat{A}}\overbrace{\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}}^{\hat{B}} \\ &\approx -\langle \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\rangle\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} - \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\langle \hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}\rangle + \langle \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\rangle\langle \hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}\rangle\end{aligned}$$

我们期待这些项的计入并不改变原先费米球分布的基本特性(k_F不变等),[34]那么可以进一步得到

$$\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \approx -\delta_{k+q,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}(\langle \hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\rangle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\langle \hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\rangle)$$

这里我们忽略了常数能量项.这样体系的相互作用部分近似成为了算符的二次型形式,即

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} &= -\frac{1}{2V}\sum_{k,k',\sigma}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}(\langle \hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\rangle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\langle \hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\rangle) \\ &= -\frac{1}{V}\sum_{k,k',\sigma}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}(\langle \hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\rangle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma})\end{aligned} \tag{2.206}$$

那么电子系统的哈密顿量是

$$\hat{H}_{el} \approx \sum_{k\sigma}\left[\frac{k^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_{k'}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\langle \hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\rangle\right]\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} \tag{2.207}$$

这样,等效的单电子能量是

$$\varepsilon(k) = \frac{k^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_{k'}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\langle \hat{c}^\dagger_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\rangle \tag{2.208}$$

[33]此时我们称相应的近似为Hartree-Fock-Bogoliubov近似

[34]自由电子的色散$\frac{k^2}{2m}$与Coulomb势能$V = \frac{4\pi e^2}{q^2}$都有球对称的情况下k_F是不变的,如果是晶格中的电子,其色散由于晶格对称性低于球体而不具有球对称,此时k_F会改变.具体可参考Kohn,Luttinger,Ground-State Energy of a Many-Fermion System,Phys.Rev.**118**,41(1960).

其中第二项,即交换项或Fock项的贡献计算如下:

$$\begin{aligned}
-\varepsilon_{ex}(k) &= \frac{1}{V}\sum_{k'}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\langle \hat{c}^{\dagger}_{k'\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\rangle = \frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3}\int d^3k'\frac{1}{|k'-k|^2}\theta(k_F-|\vec{k}|) \\
&= \frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-1}^{1}d\cos\theta\int_0^{k_F}k'^2dk'\frac{1}{k'^2+k^2-2k'k\cos\theta} \\
&= \frac{e^2}{\pi k}\int_0^{k_F}dk'k'[\ln|k'+k|-\ln|k'-k|] \\
&= \frac{e^2k_F}{\pi}\left[1+\frac{k_F^2-k^2}{2k_Fk}\ln\left|\frac{k+k_F}{k-k_F}\right|\right] \qquad (2.209)
\end{aligned}$$

这样得到HF近似下的单电子能量是

$$\varepsilon^{HF}(k) = \frac{k^2}{2m} - \frac{2e^2k_F}{\pi}F\left(\frac{k}{k_F}\right), \qquad (2.210)$$

这里$F(x)$是附录2.8.5中重点介绍的Lindhard函数,其形式为$F(x)=\frac{1}{2}+\frac{1-x^2}{4x}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|$.

如果计算费米面上的速度,那么有

$$v = \frac{\partial\varepsilon^{HF}(k)}{\partial k}|_{k=k_F} = \frac{k_F}{m} - \frac{2e^2}{\pi}F'(1) \qquad (2.211)$$

但是注意到$F'(1)$实际上发散,也就是说$k=k_F$是奇异的,这导致费米面上的电子速度发散,显然这是非物理的.这样,我们发现Hartree-Fock近似尽管物理上简单合理,但实际上却导致非物理的结果,为此我们需要在Hartree-Fock近似的基础上寻找避免电子速度发散的方式.

直观上,我们知道,对于一个带电粒子系统,由于粒子之间的长程相互作用,存在屏蔽效应,也就是说两个带点粒子之间存在Coulomb相互作用,那么当有其他带电粒子存在时,一个粒子感受到另一个粒子的电场就会受到其他粒子的影响,会从Coulomb 场转变为更为短程的电场,这就是屏蔽效应.数学上,这说明实际粒子感受到的等效相互作用是$V_{eff}(q,\omega)=\frac{4\pi e^2/q^2}{\varepsilon(q,\omega)}$,$\varepsilon(q,\omega)$代表动量和频率依赖的介电常数.低频介电常数$\varepsilon(q,\omega\to 0)$对应通常意义上的屏蔽效应而高频介电常数$\varepsilon(q,\omega>>1)$会给出电子体系的集体激发模式,即等离激元(plasmon).

- 实际上,HF近似导致的电子费米速度发散可以通过屏蔽长程Coulomb相互作用来解决;
- 屏蔽效应的动力学后果是导致电子气体中产生集体激发.

屏蔽长程Coulomb相互作用

首先,我们考虑在电子气体中有一个位置固定的正电荷,这个正电荷的存在会吸引电子,导致正电荷周围存在大量负电荷.这样,远处电子感受到的正电荷的

所采用近似	有效相互作用$V(q)$	费米速度v_F	集体模式
Hartree-Fock	$\frac{4\pi e^2}{q^2}$	发散	无
Tomas-Fermi	$\frac{4\pi e^2}{q^2+\kappa_{TF}^2}$	有限	无
RPA	$\frac{4\pi e^2}{q^2(1+4\pi e^2\chi(q,\omega)/q^2)}$	有限	等离激元

Table 2.4: Coulomb电子气在几种常用近似下的物理结果.

电场会由于正电荷周围积累的负电荷而受到屏蔽.为了进一步讨论,我们设正电荷产生的电势为ϕ^{ext},这个电势自然满足Poisson方程:

$$\nabla^2\phi^{ext}(x) = -4\pi\rho^{ext}(x) \tag{2.212}$$

这里$\rho^{ext}(x)$是这个正电荷的电荷密度.此外,我们设正电荷以及其诱导出的电子(注意到电子气在没有外电荷时是电中性的,因此这里的诱导电荷是相对于电中性时的偏离.)产生的总电势为$\phi(x)$, 其也满足Poisson方程:

$$\nabla^2\phi(x) = -4\pi\rho(x) \tag{2.213}$$

这里$\rho(x) = \rho^{ext}(x) + \rho^{int}(x)$.$\rho^{int}(x)$是正电荷存在时诱导出的电荷.现在,让我们假设外电势ϕ^{ext}和总电势ϕ满足如下非局域的线性关系:

$$\phi^{ext}(x) = \int dx'\varepsilon(x,x')\phi(x') \tag{2.214}$$

在空间均匀的电子气中,$\varepsilon(x,x')$仅依赖于相对位置,即$\varepsilon(x,x') = \varepsilon(x-x')$, 这样

$$\phi^{ext}(x) = \int dx'\varepsilon(x-x')\phi(x'). \tag{2.215}$$

我们可以对上式中的每一项做傅里叶变换,例如$\varepsilon(x) = \frac{1}{V}\sum_q e^{iqx}\varepsilon(q)$,那么有$\phi^{ext}(\vec{q}) = \varepsilon(\vec{q})\phi(\vec{q})$,即

$$\boxed{\phi(\vec{q}) = \frac{1}{\varepsilon(\vec{q})}\phi^{ext}(\vec{q})} \tag{2.216}$$

这个关系反应了外电荷(正电荷)产生的电势ϕ^{ext}与总电势ϕ的直接关系.$\varepsilon(\vec{q})$ 是波矢依赖的介电常数.另一方面,诱导电荷和总电势满足如下线性关系:[35]

$$\boxed{\rho^{int}(\vec{q}) = \chi_c(\vec{q})\phi(\vec{q})} \tag{2.217}$$

其中$\chi_c(\vec{q})$是电荷极化率.下面的问题是需要建立χ_c与ε的直接关系.首先,我们可以对ϕ^{ext},ϕ所满足的Poisson方程做傅里叶变换,这样我们发现$q^2\phi^{ext}(\vec{q}) = 4\pi\rho^{ext}(\vec{q}), q^2\phi(\vec{q}) = 4\pi\rho(\vec{q})$. 然后我们让这两个方程左右两别分别对应相减,这样可得

$$q^2(\phi(\vec{q}) - \phi^{ext}(\vec{q})) = 4\pi(\rho(\vec{q}) - \rho^{ext}(\vec{q})) = 4\pi\rho^{int}(\vec{q}) = 4\pi\chi_c(\vec{q})\phi(\vec{q}) \tag{2.218}$$

[35]这个关系可通过线性响应理论直接证明.

整理可得

$$\left(1-\frac{4\pi}{q^2}\chi_c(\vec{q})\right)\phi(\vec{q})=\phi^{ext}(\vec{q}) \tag{2.219}$$

该式对比$\phi(\vec{q})=\frac{1}{\varepsilon(\vec{q})}\phi^{ext}(\vec{q})$ 可知

$$\boxed{\varepsilon(\vec{q})=1-\frac{4\pi}{q^2}\chi_c(\vec{q})} \tag{2.220}$$

这样我们建立了介电函数和电荷极化率的直接关系.[36]

现在,让我们采用Thomas-Fermi近似来计算电子气系统的介电函数.假定电子气的哈密顿量是

$$\hat{H}=\int d^3x\hat{\psi}^\dagger(x)T(x)\hat{\psi}(x),\quad T(x)=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}-e\phi(\vec{x}) \tag{2.221}$$

当$\phi(\vec{x})=\phi_0=const.$时,体系哈密顿量化为

$$\hat{H}=\sum_k\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-e\phi_0\right)\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k \tag{2.222}$$

根据Thomas-Fermi近似,对于缓慢变化的$\phi(\vec{x})$,可把ε_k用$\varepsilon_k(\vec{x})=\frac{\hbar^2k^2}{2m}-e\phi(\vec{x})$代替.如果计算电子密度,那么有

$$\begin{aligned}\rho(\vec{x}) &= -e\langle\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})\hat{\psi}(\vec{x})\rangle=-\frac{e}{V}\sum_{k,k'}e^{i(k'-k)x}\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{k'}\rangle=-\frac{e}{V}\sum_{k,k'}e^{i(k'-k)x}\delta_{k,k'}f_F(\varepsilon_k(\vec{x}))\\ &= -\frac{e}{V}\sum_k f_F(\varepsilon_k(\vec{x}))=-\frac{e}{V}\sum_k\frac{1}{e^{\varepsilon_k(\vec{x})-\mu}+1}\end{aligned} \tag{2.223}$$

定义$n_0(\mu)=\frac{1}{V}\sum_k\frac{1}{e^{\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu}+1}$, 那么有

$$\rho(\vec{x})=(-e)n_0(\mu+e\phi(\vec{x})) \tag{2.224}$$

由于电势ϕ存在而诱导出的电荷密度是

$$\rho^{int}(\vec{x})=-e[n_0(\mu+e\phi(\vec{x}))-n_0(\mu)] \tag{2.225}$$

假定$e\phi(\vec{x})<<\mu$,那么展开可得

$$\rho^{int}(\vec{x})\approx-e[n_0(\mu)+e\phi(\vec{x})\frac{\partial n_0(\mu)}{\partial\mu}-n_0(\mu)]=-e^2\frac{\partial n_0}{\partial\mu}\phi(\vec{x}) \tag{2.226}$$

两边做傅里叶变换可得

$$\rho^{int}(\vec{q})=-e^2\frac{\partial n_0}{\partial\mu}\phi(\vec{q}) \tag{2.227}$$

即有电荷极化率

$$\chi_c(\vec{q})=-e^2\frac{\partial n_0}{\partial\mu} \tag{2.228}$$

[36] 当计入时间依赖后,更一般的关系是$\varepsilon(\vec{q},\omega)=1-\frac{4\pi}{q^2}\chi_c(\vec{q},\omega)$.

而介电常数是

$$\varepsilon(\vec{q}) = 1 - \frac{4\pi}{q^2}\chi(\vec{q}) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{\partial n_0}{\partial \mu} \tag{2.229}$$

定义Thomas-Fermi特征波矢为$\kappa_{TF}^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n_0}{\partial \mu}$,那么介电常数可以简写为

$$\varepsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{\kappa_{TF}^2}{q^2} \tag{2.230}$$

对于三维电子气,在零温时电子密度由费米波矢k_F确定,即有$n_0 = \frac{4\pi}{3}k_F^3\frac{2}{(2\pi)^3}$.同时零温化学势$\mu = \frac{k_F^2}{2m}$, 那么有

$$\kappa_{TF}^2 = 4\pi e^2\frac{\partial n_0}{\partial \mu} = 4\pi e^2\frac{4\pi}{3}\frac{\partial}{\partial \mu}(2m\mu)^{3/2}\frac{2}{(2\pi)^3} = \frac{4e^2 m}{\pi}k_F \sim \frac{1}{a_B r_0} \tag{2.231}$$

这里$a_B = \frac{1}{me^2}$是玻尔半径,r_0是电子平均间距,对金属有$r_0 \sim (2-6)a_B$,则有$\kappa_{TF} \sim \frac{1}{r_0} \sim k_F$.这样我们发现对于金属,Thomas-Fermi特征波矢是费米波矢的量级.

假如考虑把一个带电为Q的外电荷放在电子气当中,那么其产生的外电势为$\phi^{ext}(\vec{r}) = \frac{Q}{r}$,对应的傅里叶分量是

$$\phi^{ext}(\vec{q}) = \frac{4\pi Q}{q^2} \tag{2.232}$$

显然电子气系统会对这个外来电荷做出反应,这样体系总的电势将不是裸的外电荷电势而是

$$\phi(\vec{q}) = \frac{1}{\varepsilon(\vec{q})}\phi^{ext}(\vec{q}) = \frac{1}{1+\frac{\kappa_{TF}^2}{q^2}}\frac{4\pi Q}{q^2} = \frac{4\pi Q}{q^2+\kappa_{TF}^2} \tag{2.233}$$

可以看到裸的长程Comlomb势已经变为短程的Yukawa势,在实空间有$\phi(\vec{r}) = \frac{Q}{r}e^{-r\kappa_{TF}}$,即屏蔽的Coulomb势.既然自由电子气体的$\kappa_{TF}$是$k_F$的量级而$k_F$本身反比于粒子间的平均距离,因此电子的屏蔽距离大体是电子间距的量级,这样两个距离稍远电子其实感受到的是很弱的相互作用而非原先长程的Coulomb力.

- 考虑电子气体的屏蔽效应后,长程的Coulomb相互作用被屏蔽为短程的Yukawa 势,这会使得HF近似下费米速度不再发散而成为有限值.在Yukawa势情况下,我们计算电子能量的Hartree-Fock修正

$$\begin{aligned} -\varepsilon^{HF-Y}(k) &= \frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_0^{k_F} \tilde{k}^2 d\tilde{k} \frac{1}{k^2+\tilde{k}^2-2k\tilde{k}\cos\theta+\kappa_{TF}^2} \\ &= -\frac{e^2}{2\pi}\Upsilon(k,k_F,\kappa_{TF}) \end{aligned} \tag{2.234}$$

$$\begin{aligned} &\Upsilon(k,k_F,\kappa_{TF}) = \int_0^{k_F} d\tilde{k}\frac{\tilde{k}}{k}\ln\left[\frac{1+(k-\tilde{k})^2/\kappa_{TF}^2}{1+(k+\tilde{k})^2/\kappa_{TF}^2}\right] \\ &= \frac{1}{2k}\left[(k_F^2-k^2+\kappa_{TF}^2)\ln\frac{1+(k_F-k)^2/\kappa_{TF}^2}{1+(k_F+k)^2/\kappa_{TF}^2} + 4k\kappa_{TF}\left(\arctan\frac{k_F-k}{\kappa_{TF}}+\arctan\frac{k_F+k}{\kappa_{TF}}\right)\right] \\ &-2k_F \end{aligned}$$

此时费米面上电子的速度已经是一个有限值,这说明屏蔽势相比于无屏蔽Coulomb势是一个更好的近似.

$$v=\frac{k_F}{m}+\frac{e^2}{2\pi}\partial_k\Upsilon(k,k_F,\kappa_{TF})|_{k=k_F}=\frac{k_F}{m}-\frac{e^2}{2\pi}\left(1+\frac{\kappa_{TF}^2}{2k_F^2}\right)\ln\left[1+\left(\frac{2k_F}{\kappa_{TF}}\right)^2\right]$$

在κ_{TF}很大时(物理上对应很小的屏蔽长度,也就是说只要离开外加电荷的位置,那么就感受不到其Coulomb势的效应,剩下的是近乎δ函数的局域相互作用)有$v=\frac{k_F}{m}-\frac{e^2}{\pi}$. 此时,电子在费米面上的有效质量为$m^*=k_F/v\simeq m(1+\frac{e^2m}{k_F\pi})$, 这显示了相互作用对质量的增强.

- 屏蔽来自于有限的Thomas-Fermi波矢$\kappa_{TF}^2=4\pi e^2\frac{\partial n_0}{\partial\mu}\propto N(0)$,[37]即正比于费米面上的态密度.也就是说如果费米面上有大的态密度,那么Coulomb相互作用屏蔽的就越完全,而如果出现类似于石墨烯的半金属行为,由于费米面态密度为零,Coulomb 相互作用的长程特性将会表现得更为明显,体系会显示奇异的物理.

Lindhard介电函数(无规相近似/RPA)

这一次,我们不采用Thomas-Fermi近似,而是认为$-e\phi(\vec{r})$是一个微扰,用非简并微扰理论来计算体系的诱导电荷.

根据量子力学中的非简并微扰论,那么动量k的自由电子波函数$\psi_k^0(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{ikr}$在微扰后变为

$$\psi_k(\vec{r})=\psi_k^0(\vec{r})+\sum_{k'}\frac{\langle\psi_{k'}^0|-e\phi|\psi_k^0\rangle}{\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}}\psi_{k'}^0(\vec{r})+...,\quad \varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m},\tag{2.235}$$

$$\langle\psi_{k'}^0|-e\phi|\psi_k^0\rangle=-\frac{e}{V}\int d^3re^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\phi(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}=-\frac{e}{V}\phi(\vec{k}-\vec{k}')\tag{2.236}$$

这样,我们得到微扰修正后的波函数是

$$\psi_k(\vec{r})=\psi_k^0(\vec{r})-\frac{e}{V}\sum_{k'}\frac{\phi(\vec{k}-\vec{k}')}{\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}}\psi_{k'}^0(\vec{r})\tag{2.237}$$

电子密度是

$$\rho(\vec{r})=-e\sum_k|\psi_k(\vec{r})|^2f_F(\varepsilon_k)\tag{2.238}$$

而诱导的电荷密度是

$$\rho^{int}(\vec{r})=-\frac{e^2}{V}\sum_{k,k'}\left[f_F(\varepsilon_k^0)\frac{e^{i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}}{\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}}\phi(\vec{k}-\vec{k}')+c.c.\right]\tag{2.239}$$

[37] $\frac{\partial}{\partial\mu}n_0=\int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{\partial}{\partial\mu}f_F(\varepsilon-\mu)\simeq N(\mu)\equiv N(0)$

做变量代换$\vec{k}\to\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\ \vec{k}'\to\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}$则有

$$\rho^{int}(\vec{r})=-\frac{e^2}{V}\sum_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\left[\sum_k\frac{f_F(\varepsilon_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}})-f_F(\varepsilon_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}})}{\varepsilon_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}}-\varepsilon_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}}}\right]\phi(\vec{q}) \tag{2.240}$$

这样我们得到体系的Lindhard电荷极化率为

$$\chi(\vec{q})=-\frac{e^2}{V}\sum_k\frac{f_F(\varepsilon_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}})-f_F(\varepsilon_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}})}{\varepsilon_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}}-\varepsilon_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}}}=e^2\chi_0(q) \tag{2.241}$$

这里$\chi_0(q)$是附录2.8.5中定义并计算的自由电子极化函数.在低温和小动量转移的情况下,可以展开费米分布函数而得到$\chi(\vec{q})=-\frac{e^2}{V}\sum_k\frac{\partial f_F}{\partial\mu}$, 这就是Tomas-Fermi近似下的电荷极化率.

当$T=0$时,对k求和可以算出

$$\chi(\vec{q})=e^2\left(\frac{mk_F}{\pi^3\hbar^2}\right)F(x)=2e^2N(0)F(x),\quad x=\frac{|\vec{q}|}{2k_F} \tag{2.242}$$

这里的函数$F(x)$就是HF近似计算单电子能量时的Lindhard函数.由于这个函数在$\vec{q}=2k_F$导数奇异性,导致介电函数$\varepsilon(\vec{q})=1+\frac{4\pi}{q^2}\chi(\vec{q})$的非解析性,这会导致单个外电荷的势在电子气修正后会有如下的振荡行为:

$$\phi(\vec{r})\sim\frac{1}{r^3}\cos(2k_Fr) \tag{2.243}$$

电子在这个电荷周围也会以同样的方式变化,这就是著名的Friedel振荡.物理上这对应着电子会倾向于屏蔽多余的电荷,但屏蔽电荷云雾实际上是振荡变化.

- $\phi(\vec{r})\sim\frac{1}{r^3}\cos(2k_Fr)$代表的势既有正也有负,负的部分说明电子之间可有吸引相互作用,Kohn和Luttinger预期这种形式的电子相互作用可以导致超导,这与通过交换声子的BCS超导机制明显不同,现在称为超导电性的Kohn-Luttinger机制.[38]

- 如果同样的情况出现在自旋自由度中,叫做RKKY振荡(Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida,把电势换成磁场导致的Zeeman势并考虑相应的微扰计算可得相同的磁化率).但是对于自旋而言,由于自旋有上下两个自由度,所以我们看到的是待屏蔽自旋附近的电子既有向上的也有向下的,在远处看来自旋得以屏蔽.当金属系统中存在两个磁性杂质时,这两个磁杂质可以通过影响金属的自由电子而产生等效的磁相互作用,这就是RKKY相互作用.这类相互作用在稀磁半导体和重费米子材料中十分重要.

- Friedel振荡在费米液体或Luttinger液体中也能够稳定存在,前者依赖于维度$\rho^{int}(\vec{r})\sim\frac{1}{|\vec{r}|^d}\cos(2k_F|\vec{r}|+\delta_d),d=2,3$,而后者依赖于相互作用强度$\rho^{int}(r)\sim\frac{1}{r^K}\cos(2k_Fr+\delta)$(对于无自旋费米子,$K$是依赖于相互作用强

[38]Kohn,Luttinger,New mechanism for superconductivity,Phys.Rev.Lett.**15**,524(1965).

度的Luttinger参数).注意到不管是费米液体还是Luttinger液体都存在费米面(费米点),也就是电子分布在动量空间具有奇异性,这是Friedel振荡产生的根本原因.;[39]

[39] [Simion,Giuliani,Friedel oscillations in a Fermi liquid,Phys.Rev.B **72**,045127(2005);Egger,Grabert,Friedel Oscillations for Interacting Fermions in One Dimension,Phys.Rev.Lett. **75**,3505(1995)]

Green函数与线性响应:联系物理与真实*

在经典物理中,Green函数是求解数学物理方程的重要工具.[40]例如,假设我们需要求解无限大系统中静电势$\phi(x)$所满足的拉普拉斯方程,

$$\nabla^2\phi(x) = f(x), \quad f(x) = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_0} \tag{2.244}$$

那么我们可以定义Green函数为满足如下方程的函数,即

$$\nabla^2 G(x-y) = \delta(x-y) \tag{2.245}$$

这样,只要由上述方程求得Green函数G,那么静电势便可由泊松方程的基本积分公式$\phi(x) = \int d^d y G(x-y)f(y)$得到.在下面讨论的量子多体系统中,我们会看到Green 函数发挥了更为重要的作用,某种程度上是我们描述多粒子相互作用体系最为有效的理论工具之一.

推迟Green函数与运动方程*

在量子多体物理的研究中,一种实用的理论方法是Green函数方法,在这类方法中,求解系统性质的关键在于计算系统哈密顿量对应的Green函数,通常记为G,只要求得G, 那么其他所有热力学与动力学量都可以容易地计算得到.由于目的不同,Green函数也有很多不同的类型,例如

- 计算系统基态也就是零温物理性质的一类Green函数称为因果Green函数或Feynman Green函数,其来源是量子电动力学.如需要计算有限温度平衡态的性质,我们就需要虚时Green函数(也称松原Green函数).这类Green数一般用于实际的Feynman图形微扰展开计算.
- 明确考虑时间先后顺序的推迟(retarded)和超前(advanced)Green函数.这类Green函数主要用于响应函数的计算.
- 以Keldysh Green函数为代表的非平衡态Green函数,主要用于非平衡输运问题.[41]

在这里,我们简要介绍最简单的推迟Green函数和相应的Green函数运动方程方法.首先我们知道在Heisenberg绘景(picture)下算符的时间演化是

$$\hat{A}(t) = e^{-i\hat{H}t}\hat{A}e^{-i\hat{H}t} \tag{2.246}$$

那么定义推迟Green函数$G^R_{AB}(t)$为如下形式:

$$\boxed{G^R_{AB}(t) \equiv -i\theta(t)\langle[\hat{A}(t),\hat{B}]_{\pm}\rangle = -i\theta(t)\langle\hat{A}(t)\hat{B} \pm \hat{B}\hat{A}(t)\rangle} \tag{2.247}$$

[40]更多细节可参考各类《数学物理方法》教科书,比如梁昆淼书(第四版)的第12章.

[41]当然,由周光召等老一辈国内理论家发展的闭路Green函数也是处理非平衡量子多体问题的可选方案.

R表示我们研究的是推迟Green函数,$\theta(t)$是阶跃函数,其取值当$t>0$时为1, 而$t<0$时为0. 在这里,阶跃函数的出现表示后发生的物理(算符$\hat{A}(t)$的作用)在时间上总是在先发生的物理(算符$\hat{B}$的作用)之后,也就是满足因果律,[42]这也是推迟这个称谓的来历.

$\langle ...\rangle$代表对基态或者有限温度的系综平均,对基态平均可以写为$\langle\Psi_g|...|\Psi_g\rangle$,这里假设基态已经归一化,否则需要用$\frac{\langle\Psi_g|...|\Psi_g\rangle}{\langle\Psi_g|\Psi_g\rangle}$.对有限温度的平衡态,根据量子统计力学的知识有$\langle ...\rangle=\mathrm{Tr}\hat{\rho}(...)$,$\hat{\rho}=\frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}}=\frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\mathcal{Z}}$是平衡态时的密度矩阵,[43]Tr代表对量子态求迹,若我们采用哈密顿量的本征态$\{|n\rangle\}$ 作为求迹的操作态,则有

$$\langle ...\rangle=\sum_n\frac{1}{\mathcal{Z}}e^{-\beta E_n}\langle n|...|n\rangle. \tag{2.248}$$

$[,]_\pm$是对易或反对易关系,通常对玻色子算符选择对易关系,而对于费米子或者自旋算符则选反对易关系.

对于时间平移不变的系统,也就是能量守恒或者哈密顿量不含时间的系统,我们喜欢研究频率或者能量空间的推迟Green函数,记为$G^R_{AB}(\omega)$,其是$G^R_{AB}(t)$的傅里叶变换:

$$G^R_{AB}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i(\omega+i0^+)t}G^R_{AB}(t)\equiv\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_\omega \tag{2.249}$$

$\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_\omega$是推迟Green函数的Zubarev记号.注意在做傅里叶变换时我们给ω添加了无穷小的正虚部$i0^+$,其作用是使得对t的积分能够收敛.这一点在处理推迟Green函数时是默认的.这可以通过如下的Lehmann谱表示得以说明.把$G^R_{AB}(t)$的

[42]因果律甚至独立于时间和空间存在,这在圈量子引力(loop quantum gravity)理论中是核心观念.

[43]密度矩阵是Landau研究原子核时最先引入的.若哈密顿量的本征态$\{|n\rangle\}$是完备的,即有$\sum_n|n\rangle\langle n|=1$,那么密度矩阵也可以写成$\hat{\rho}=\frac{1}{\mathcal{Z}}e^{-\beta\hat{H}}\sum_n|n\rangle\langle n|=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}|n\rangle\langle n|$,这相当于能量表象下的密度矩阵.进一步,若系统由$N$个粒子组成$(x_1,x_2...x_N)$,那么坐标空间的密度矩阵的矩阵元是$\rho(x_1...x_N;x'_1...x'_N)=\langle x_1...x_N|\hat{\rho}|x'_1...x'_N\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle x_1...x_N|n\rangle\langle n|x'_1...x'_N\rangle\equiv\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}\Psi^*_n(x_1...x_N)\Psi_n(x'_1...x'_N)$.对2到$N$粒子的坐标积分就得到所谓的单粒子约化密度矩阵$\rho(x_1,x'_1)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}\int dx_2...\int dx_N\int dx'_2\int dx'_N\Psi^*_n(x_1...x_N)\Psi_n(x'_1...x'_N)$.类似的,我们可以定义双粒子约化密度矩阵$\rho(x_1,x_2;x'_1,x'_2)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}\int dx_3...\int dx_N\int dx'_3\int dx'_N\Psi^*_n(x_1...x_N)\Psi_n(x'_1...x'_N)$,这样系统的单粒子能量和两粒子相互作用分别可用$\rho(x_1,x'_1)$和$\rho(x_1,x_2;x'_1,x'_2)$表示.此外,杨振宁提出,在热力学极限下,如果$\lim_{|x_1-x'_1|\to\infty}\rho(x_1,x'_1)\sim n$,($n$ 为粒子密度)则称系统具有非对角长程有序,这在超流和超导问题中明确存在.

具体形式代入傅里叶变换可得

$$\begin{aligned}
G^R_{AB}(\omega) &= -i\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega+i0^+)t}\theta(t)\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n \langle n|e^{-\beta\hat{H}}(\hat{A}(t)\hat{B}\pm\hat{B}\hat{A}(t))|n\rangle \\
&= -i\int_0^{\infty} dt e^{i(\omega+i0^+)t}\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}\langle n|e^{-\beta E_n}(\hat{A}(t)|m\rangle\langle m|\hat{B}\pm\hat{B}|m\rangle\langle m|\hat{A}(t))|n\rangle \\
&= \frac{-i}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\int_0^{\infty} dt e^{i(\omega+i0^++E_n-E_m)t}\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle \\
&\pm\ e^{i(\omega+i0^+-E_n+E_m)t}\langle n|\hat{B}|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle \\
&= \frac{-i}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\frac{e^{i(\omega+i0^++E_n-E_m)\infty}-1}{i(\omega+i0^++E_n-E_m)}\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle \\
&\pm\ \frac{e^{i(\omega+i0^+-E_n+E_m)\infty}-1}{i(\omega+i0^+-E_n+E_m)}\langle n|\hat{B}|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle \qquad (2.250)
\end{aligned}$$

这样,由于$i0^+$的存在,上式分子$e^{-0^+\infty}=e^{-\infty}=0$使得积分值有意义,则有

$$\boxed{G^R_{AB}(\omega)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\left[\frac{\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle}{\omega+i0^++E_n-E_m}\pm\frac{\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\hat{B}|m\rangle}{\omega+i0^+-E_n+E_m}\right]}$$

这称为推迟Green函数的Lehmann谱表示.在推导此表示时,我们只需用系统的本征值E_n和本征态$|n\rangle$并做积分即可得到.从复变函数的角度来看,$G^R_{AB}(\omega)$的奇点是$\omega=-i0^+\pm(E_n-E_m)$,如果能级是分立的,那么这些奇点就成为简单的一阶极点.如果能级是连续分布的,这样很多奇点会连成线,也就是会出现支点和相应的割线.总的来说,由于$-i0^+$因子,推迟Green函数在上半平面以及实轴上是解析函数.

作为对比,超前Green函数定义为$G^A_{AB}(t)\equiv i\theta(-t)\langle[\hat{A}(t),\hat{B}]_\pm\rangle$,其谱表示是

$$G^A_{AB}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}dt e^{i(\omega-i0^+)t}G^R_{AB}(t)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\left[\frac{\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle}{\omega-i0^++E_n-E_m}\pm\frac{\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\hat{B}|m\rangle}{\omega-i0^+-E_n+E_m}\right]$$

这说明超前Green函数在实轴和下半平面是解析的.这样我们发现$G^R(\omega)$与$G^A(\omega)$的差别仅在于分母上无穷小因子$i0^+$的正负号,因此两者具有简单的关系,

$$\boxed{G^R_{AB}(\omega)=(G^A_{AB}(\omega))^*} \qquad (2.251)$$

也就是说推迟和超前Green函数互为共轭.

进一步,让我们利用重要的关系式

$$\frac{1}{x+i0^+}=\frac{1}{x}-i\pi\delta(x) \qquad (2.252)$$

这样可以得到推迟Green函数的实部ReG和虚部ImG:

$$\mathrm{Re}G^R_{AB}(\omega)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\left[\frac{\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle}{\omega+E_n-E_m}\pm\frac{\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\hat{B}|m\rangle}{\omega-E_n+E_m}\right]$$

$$\mathrm{Im}G^R_{AB}(\omega)=\frac{-\pi}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\left[\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle\delta(\omega+E_n-E_m)\pm\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\hat{B}|m\rangle\delta(\omega-E_n+E_m)\right]$$

通常,我们把推迟Green函数的虚部乘上因子$-\frac{1}{\pi}$的整体称为谱函数,记为$A_{AB}(\omega)$,即

$$\boxed{A_{AB}(\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R_{AB}(\omega)} \tag{2.253}$$

结合推迟和超前Green函数的谱表示,我们发现他们都可以用谱函数简单地表示,即

$$\begin{aligned}G^R_{AB}(\omega)&=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\frac{A_{AB}(\omega')}{\omega+i0^+-\omega'}\\ G^A_{AB}(\omega)&=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\frac{A_{AB}(\omega')}{\omega-i0^+-\omega'}\end{aligned} \tag{2.254}$$

现在,设$\hat{A},\hat{B}$分别为固体中电子的湮灭$\hat{c}_k$和产生算符$\hat{c}^\dagger_k$,相应的谱函数$A_{cc^\dagger}(\omega)$可以通过光谱学方法,例如角度分辨光电子谱技术(ARPES)来直接测量.[44]

我们可以证明$A_{cc^\dagger}(\omega)$是正定的($A_{cc^\dagger}(\omega)\geq 0$),且是归一化的($\int_{-\infty}^{\infty}d\omega A_{cc^\dagger}=1$).由Green函数的Green函数的谱分解可知:

$$A_{cc^\dagger}(\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R_{cc^\dagger}(\omega)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\left[|\langle n|\hat{c}_k|m\rangle|^2\delta(\omega+E_n-E_m)+|\langle n|\hat{c}^\dagger_k|m\rangle|^2\delta(\omega-E_n+E_m)\right]$$

既然上式每一项大于等于零,则$A_{cc^\dagger}(\omega)\geq 0$.(这同时也说明$\mathrm{Im}G^R_{cc^\dagger}\leq 0$.)然后对上式积分可得

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega A_{cc^\dagger}(\omega) &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R_{cc^\dagger}(\omega)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}\left[\langle n|\hat{c}_k\sum_m|m\rangle\langle m|\hat{c}^\dagger_k|n\rangle+\langle n|\hat{c}^\dagger_k\sum_m|m\rangle\langle m|\hat{c}_k|n\rangle\right]\\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\overbrace{(\hat{c}_k\hat{c}^\dagger_k+\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k)}^{=1}|n\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}\overbrace{\langle n|n\rangle}^{=1}=1.\end{aligned} \tag{2.255}$$

即有

$$\boxed{A_{cc^\dagger}(\omega)\geq 0,\qquad\int_{-\infty}^{\infty}d\omega A_{cc^\dagger}(\omega)=1} \tag{2.256}$$

最后,让我们介绍一个实用的Green函数计算方法,也就是所谓的推迟Green函数的运动方程: [45]

$$\boxed{\omega\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_\omega=\langle[\hat{A},\hat{B}]_\pm\rangle+\langle\langle[\hat{A},\hat{H}]_-|B\rangle\rangle} \tag{2.257}$$

[44]ARPES利用Einstein的光电效应来探测固体中的电子谱,显然,其只能探测占据态的电子,也就是能量在费米能以下状态的谱信息.

[45]运动方程方法可以用来研究Hubbard模型,Anderson杂质模型等需要非微扰手段的关联电子问题.[Lacroix,Density of states for the asymmetric Anderson model,J.Appl.Phys. **53**,2131(1982)]

上述关系可以通过推迟Green函数的定义直接推得.通过求解运动方程原则上(多数情况下需要做合理的近似处理)总可以得到$\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_\omega$的具体形式,这样便可以通过谱定理计算相应的算符平均值:

$$\boxed{\langle\hat{B}\hat{A}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_{F/B}(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R_{AB}(\omega)\right]} \tag{2.258}$$

- 定义推迟Green函数时用反对易,则在运动方程里面也是反对易,最后在谱定理计算时则用费米分布函数f_F,反之定义用对易,运动方程用对易关系,最后用玻色分布函数f_B.

运动方程的简单应用

作为推迟Green函数运动方程的简单应用我们分别计算费米子与玻色子模型$\hat{H}_f=\varepsilon_f\hat{c}^\dagger\hat{c},\hat{H}_b=\varepsilon_b\hat{b}^\dagger\hat{b}$ 的推迟Green函数$G(\omega)$和相应的平均值$\langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle,\langle\hat{b}^\dagger\hat{b}\rangle$.

根据推迟Green函数的谱定理,要计算$\langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle$和$\langle\hat{b}^\dagger\hat{b}\rangle$就需要构造推迟Green函数$G_{cc}(\omega)\equiv\langle\langle\hat{c}|\hat{c}^\dagger\rangle\rangle_\omega$ 和$G_{bb}(\omega)\equiv\langle\langle\hat{b}|\hat{b}^\dagger\rangle\rangle_\omega$. 根据Green 函数运动方程可以得到

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle\hat{c}|\hat{c}^\dagger\rangle\rangle_\omega&=\langle[\hat{c},\hat{c}^\dagger]_+\rangle+\langle\langle[\hat{c},\hat{H}_f]_-|\hat{c}^\dagger\rangle\rangle_\omega\\ \omega\langle\langle\hat{b}|\hat{b}^\dagger\rangle\rangle_\omega&=\langle[\hat{b},\hat{b}^\dagger]_-\rangle+\langle\langle[\hat{b},\hat{H}_b]_-|\hat{b}^\dagger\rangle\rangle_\omega\end{aligned} \tag{2.259}$$

计算对易关系可以发现$[\hat{c},\hat{H}_f]_-=\varepsilon_f\hat{c}$ 和$[\hat{b},\hat{H}_b]_-=\varepsilon_b\hat{b}$,代入运动方程会发现方程已经封闭,这样就可以解得推迟Green函数的明确形式:

$$\begin{aligned}G_{cc}(\omega)=\langle\langle\hat{c}|\hat{c}^\dagger\rangle\rangle_\omega&=\frac{1}{\omega-\varepsilon_f}\\ G_{bb}(\omega)=\langle\langle\hat{b}|\hat{b}^\dagger\rangle\rangle_\omega&=\frac{1}{\omega-\varepsilon_b}\end{aligned} \tag{2.260}$$

代入谱定理可以得到

$$\begin{aligned}\langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_F(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{1}{\omega-\varepsilon_f+i0^+}\right]\\ \langle\hat{b}^\dagger\hat{b}\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_B(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{1}{\omega-\varepsilon_b+i0^+}\right]\end{aligned} \tag{2.261}$$

利用$\frac{1}{x+i0^+}=\frac{1}{x}-i\pi\delta(x)$,我们发现$\langle\hat{c}^\dagger\hat{c}\rangle=f_F(\varepsilon_f),\langle\hat{b}^\dagger\hat{b}\rangle=f_B(\varepsilon_b)$, 显然这是预期的结果.

线性响应理论:什么才是物理？*

当处于平衡态的系统受到外界扰动时,其会偏离平衡态,系统的物理量则会显示时间依赖,也就是会随着时间发生变化.当外界扰动强度比较弱时,通过研究物理量的时间依赖可以反过来得到系统在平衡态时的基本性质.在所谓线性响应

区,也就是物理量偏离平衡态的值正比于外界扰动强度的区域,比例系数由系统处于平衡态时的信息给出.通常比例系数称为极化率,例如给系统加上磁场导致系统出现磁化,磁化与外加磁场的比值即为熟悉的磁化率;给系统加上电场导致电流的产生,电流与电场的比例系数就是电导.

在外界扰动强度很弱的线性响应区,通过计算平衡态的极化率我们就可以得到外加扰动与物理量的直接联系,这是十分重要的结果.在凝聚态物理的实验研究中,绝大多数的实验探测都可以看成强度很弱的外界扰动,因而平衡态得到的极化率事实上成为了联系实验和理论的主要桥梁.

下面我们来看线性响应理论的具体形式.首先,平衡态系统由不含时哈密顿量$\hat{H}$ 描述,系统的状态分布由密度矩阵$\hat{\rho} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta \hat{H}}$给出.($\beta = 1/T$,$T$为温度,$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\hat{\rho}$是系统的配分函数.)物理量在平衡态的平均值为$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}]$. 注意下面的处理中我们将多次使用求迹操作的轮换对称性,即$\mathrm{Tr}[\hat{A}\hat{B}\hat{C}] = \mathrm{Tr}[\hat{C}\hat{A}\hat{B}] = \mathrm{Tr}[\hat{B}\hat{C}\hat{A}]$.

当给系统加上时间依赖的外界扰动$\hat{V}(t)$时,系统哈密顿量变为$\hat{H}(t) = \hat{H} + \hat{V}(t)$,同时密度矩阵会随着时间变化,即$\hat{\rho}(t)$.根据量子统计力学的一般理论,$\hat{\rho}(t)$满足如下量子版的Liouville方程:

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{H}(t)\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t)\hat{H}(t)).} \tag{2.262}$$

此时物理量的平均值也包含时间依赖,即$\langle \hat{\mathcal{O}}(t) \rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}(t)\hat{\mathcal{O}}]$.为了进一步处理,让我们引入相互作用绘景,也就是对算符$\hat{\mathcal{O}}$做如下变换:

$$\hat{\mathcal{O}}_I(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\mathcal{O}}e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{S}^{-1}\hat{\mathcal{O}}\hat{S} \tag{2.263}$$

这样

$$\langle \hat{\mathcal{O}}(t) \rangle = \mathrm{Tr}[\hat{S}^{-1}\hat{\rho}(t)\hat{S}\hat{S}^{-1}\hat{\mathcal{O}}\hat{S}] = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_I(t)\hat{\mathcal{O}}_I(t)] \tag{2.264}$$

进一步,$\hat{\rho}_I(t)$的时间依赖为

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} &= \frac{d\hat{S}^{-1}}{dt}\hat{\rho}(t)\hat{S} + \hat{S}^{-1}\hat{\rho}(t)\frac{d\hat{S}}{dt} + \hat{S}^{-1}\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt}\hat{S} \\ &= -\frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}_I(t)] + \frac{1}{i\hbar}\left([\hat{H}, \hat{\rho}_I(t)] + [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)]\right) \\ &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)] \end{aligned} \tag{2.265}$$

即相互作用绘景的密度算符满足方程

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)]} \tag{2.266}$$

为求解该方程,我们可以两边对dt求积分,积分范围从t_0到t,则有

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'[\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')] = \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'[\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt''[\hat{V}_I(t''), \hat{\rho}_I(t'')]] + \ldots \tag{2.267}$$

上式右边为反复迭代第一个等号所得.当扰动$\hat{V}$强度很小时,我们预期上述展开式可以只保留到$\hat{V}_I$ 的线性项,即有

$$\hat{\rho}_I(t) \simeq \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'[\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t_0)] \tag{2.268}$$

通常,我们假设扰动是从$t=-\infty$时缓慢加入系统的,因此$t=-\infty$时系统仅由$\hat{H}$描述,即负无穷时间时系统处于平衡态,因此$\hat{\rho}_I(-\infty)=\hat{\rho}$,因此上式简化为

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho} + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'[\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}]. \tag{2.269}$$

这样,物理量的时间依赖平均$\langle\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle$化为

$$\langle\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}_I(t)] + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\mathrm{Tr}[\hat{\mathcal{O}}_I(t)[\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}]]. \tag{2.270}$$

我们注意到$\hat{\mathcal{O}}_I(t)$实际上是$\hat{H}$控制下Heisenberg绘景下的算符,因此我们把$\hat{\mathcal{O}}_I(t)$写为$\hat{\mathcal{O}}_H(t)$, 则有

$$\langle\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}_H(t)] + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\mathrm{Tr}[\hat{\mathcal{O}}_H(t)[\hat{V}_H(t'), \hat{\rho}]]. \tag{2.271}$$

在平衡态时,物理量的期望值并不会随时间变化,因此$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}_H(t)] = \mathrm{Tr}[\hat{S}^{-1}\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}\hat{S}] = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}]$, 同时利用求迹操作下的轮换对称可得$\mathrm{Tr}\hat{\mathcal{O}}_H(t)[\hat{V}_H(t'), \hat{\rho}] = \mathrm{Tr}\hat{\rho}[\hat{\mathcal{O}}_H(t), \hat{V}_H(t')]$. 利用推迟Green函数时的记号则有$\mathrm{Tr}\hat{\rho}[\hat{\mathcal{O}}_H(t), \hat{V}_H(t')] = \langle[\hat{\mathcal{O}}_H(t), \hat{V}_H(t')]\rangle$, 那么

$$\boxed{\langle\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}] + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\langle[\hat{\mathcal{O}}_H(t), \hat{V}_H(t')]\rangle.} \tag{2.272}$$

在物理系统中,如果我们关心的物理量$\hat{\mathcal{O}}$与外加扰动直接耦合,那么有$\hat{V}(t) = \hat{\mathcal{O}}f(t)$,例如我们需要计算外电磁场存在时系统电流的时间变化,那么$\hat{\mathcal{O}}$就代表微观的电流密度算符,而$\hat{V}(t)$则表示电流密度算符与电磁场$f(t)$的耦合.这样,当我们关心扰动加入后系统物理量相对于平衡态的偏离时,则可以定义描述偏离的平均值$\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle = \langle\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle - \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}]$, 则

$$\boxed{\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' f(t')\langle[\hat{\mathcal{O}}_H(t), \hat{\mathcal{O}}_H(t')]\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\chi(t,t')f(t').} \tag{2.273}$$

这就是著名的Kubo(久保)公式.[46]它是我们研究近平衡态体系物理性质的基本公式,在凝聚态物理和多体理论发展史上占据重要的地位.这里我们定义了对平衡态密度矩阵取平均的(广义)极化率$\chi(t,t')$:

$$\chi(t,t') = \frac{1}{i\hbar}\theta(t-t')\langle[\hat{\mathcal{O}}_H(t), \hat{\mathcal{O}}_H(t')]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\theta(t-t')\mathrm{Tr}[\hat{\rho}[\hat{\mathcal{O}}_H(t), \hat{\mathcal{O}}_H(t')]] \tag{2.274}$$

[46]历史上,久保亮伍最早建立了基于线性响应的输运理论.

这里为了反应t是t'后面的时刻,因而添加了阶跃函数$\theta(t-t')$,这实际上反映了物理过程的因果性,也就是t时刻的物理是由于之前时刻t'的影响而导致的.这种效应也称为物理过程是推迟的,因此极化率χ也称为推迟关联函数或者对比先前关于推迟Green函数的定义可知其就是一类推迟Green 函数,用先前的记号也可记为$G^R_{\mathcal{O}\mathcal{O}}(t,t')$.下面用$\chi^R$表示具有推迟特性的极化率.

当然,注意到$\chi^R(t,t')$是平衡态的极化率,其只依赖于相对时间$t-t'$,(利用求迹的轮换对称可证明)则有$\chi^R(t,t')=\chi^R(t-t')$,则

$$\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dt'\chi^R(t-t')f(t'). \tag{2.275}$$

对$\chi^R(t-t')$做傅里叶变换可得$\chi^R(t-t')=\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t-t')}\chi^R(\omega)$, 把这个结果代入$\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle$可得

$$\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle=\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\chi^R(\omega)\int_{-\infty}^{\infty}dt'e^{i\omega t'}f(t'). \tag{2.276}$$

注意到上式右边对t'的积分就是$f(t')$的傅里叶变换系数$f(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}dt'e^{i\omega t'}f(t')$,那么

$$\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(t)\rangle=\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\chi^R(\omega)f(\omega)=\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(\omega)\rangle, \tag{2.277}$$

$$\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(\omega)\rangle=\chi^R(\omega)f(\omega) \tag{2.278}$$

这样,在频率空间,我们发现物理量对平衡态偏离的傅里叶变换$\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(\omega)\rangle$ 与外加扰动的傅里叶变换$f(\omega)$比值就是极化率的傅里叶变换:

$$\boxed{\chi^R(\omega)=\frac{\langle\delta\hat{\mathcal{O}}(\omega)\rangle}{f(\omega)}.} \tag{2.279}$$

线性响应与电导率*

让我们回忆系统存在电磁场时哈密顿量的具体形式,(参考附录2.8.2)这里我们设电磁场的标量势$\phi=0$,而矢量势$\vec{A}$显含时间,即有$\vec{A}=\vec{A}(t)$, 则有

$$\hat{H}(t)=\int d^dx\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)-q\hat{\vec{j}}\cdot\vec{A}(t)\right)+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x) \tag{2.280}$$

由此,时间依赖的外加扰动项是

$$\hat{V}(t)=\int d^dx\left(-q\hat{\vec{j}}\cdot\vec{A}(t)\right)=\int d^dx\left(-\hat{\vec{j}}_e\cdot\vec{A}(t)\right). \tag{2.281}$$

$$\hat{\vec{j}}_e(x)=\overbrace{\frac{q}{2mi}\left[\hat{\psi}^\dagger(x)\nabla\hat{\psi}(x)-\nabla(\hat{\psi}^\dagger(x))\hat{\psi}(x)\right]}^{\hat{\vec{j}}_e^{par}}\overbrace{-\frac{q^2\vec{A}}{m}\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)}^{\hat{\vec{j}}_e^{dia}}=\hat{\vec{j}}_e^{par}+\hat{\vec{j}}_e^{dia}$$

这里$\hat{\vec{j}}_e^{par}, \hat{\vec{j}}_e^{dia}$分别是顺磁流和抗磁流密度.根据先前的讨论,(公式2.272)t时刻,空间位置x处的电流密度的平均值为

$$\begin{aligned}\langle\hat{\vec{j}}_e(x,t)\rangle &= \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\vec{j}}_e(x)] + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\mathrm{Tr}[\hat{\rho}[\hat{\vec{j}}_e(x,t), \overbrace{-\int d^d y \hat{\vec{j}}_e(y,t')\cdot\vec{A}(y,t')}^{\hat{V}(t)}]] \\ &= \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\vec{j}}_e(x)] - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \int d^d y \mathrm{Tr}[\hat{\rho}[\hat{\vec{j}}_e(x,t), \hat{\vec{j}}_e(y,t')\cdot\vec{A}(y,t')]]\end{aligned} \tag{2.282}$$

这里为了简化符号而略去了Heisenberg绘景的下标H.注意到系统平衡时顺磁电流为零,[47]那么$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\vec{j}}_e(x)]$项由抗磁电流项确定

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\vec{j}}_e(x)] = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\vec{j}}_e^{dia}(x)] = -\frac{q^2\vec{A}(x,t)}{m}\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)] = -\frac{q^2\vec{A}(x,t)}{m}n \tag{2.283}$$

这里设系统空间是均匀的,因此对密度算符$\hat{\rho}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)$的平均为系统的粒子密度$n$.进一步,公式2.282第二项的对易关系式可以写成

$$[\hat{\vec{j}}_e(x,t), \hat{\vec{j}}_e(y,t')\cdot\vec{A}(y,t')] = [\hat{\vec{j}}_e^{par}(x,t)+\hat{\vec{j}}_e^{dia}(x,t), (\hat{\vec{j}}_e^{par}(y,t')+\hat{\vec{j}}_e^{dia}(y,t'))\cdot\vec{A}(y,t')] \tag{2.284}$$

在准确到矢量势$\vec{A}$一次项的情况下,注意到抗磁流$\hat{\vec{j}}_e^{dia}$包含$\vec{A}$的一次项,因此我们可以忽略上式中抗磁流的贡献,则有

$$[\hat{\vec{j}}_e(x,t), \hat{\vec{j}}_e(y,t')\cdot\vec{A}(y,t')] = [\hat{\vec{j}}_e^{par}(x,t), \hat{\vec{j}}_e^{par}(y,t')\cdot\vec{A}(y,t')] + \mathcal{O}(A^2). \tag{2.285}$$

因此,公式2.282第二项仅需要考虑顺磁电流的贡献.为减少记号,我们把顺磁流记为$\hat{\vec{J}}$.注意到电流密度可分为三个方向,例如$\hat{\vec{j}}_e = (\hat{j}_e^x, \hat{j}_e^y, \hat{j}_e^z)$, 那么对某个分量(记为$\alpha$)的电流密度平均值有

$$\begin{aligned}&\langle\hat{j}_e^\alpha(x,t)\rangle = -\frac{q^2 n}{m}A^\alpha(x,t) - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \int d^d y \mathrm{Tr}[\hat{\rho}[\hat{J}_e^\alpha(x,t), \hat{J}_e^\beta(y,t')]]A^\beta(y,t') \\ &= \int_{-\infty}^{t} dt' \int d^d y \Pi_{\alpha\beta}^R(x,t;y,t')A^\beta(y,t').\end{aligned} \tag{2.286}$$

这里定义了推迟极化函数$\Pi_{\alpha\beta}^R$:

$$\Pi_{\alpha\beta}^R(x,t;y,t') = \Pi_{\alpha\beta}^R(x,y,t-t') = -\frac{q^2 n}{m}\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')\delta(x-y) - \frac{1}{i\hbar}\theta(t-t')\langle[\hat{J}_e^\alpha(x,t), \hat{J}_e^\beta(y,t')]\rangle. \tag{2.287}$$

进一步,对于空间均匀的系统,$\Pi_{\alpha\beta}^R$仅是相对位置的函数,即有$\Pi_{\alpha\beta}^R(x,y,t-t') = \Pi_{\alpha\beta}^R(x-y,t-t')$, 那么对其做时空傅里叶变换可得

$$\Pi_{\alpha\beta}^R(x-y,t-t') = \int\frac{d\omega}{2\pi}\int\frac{d^d q}{(2\pi)^d}e^{iq(x-y)}e^{-i\omega(t-t')}\Pi_{\alpha\beta}^R(q,\omega) \tag{2.288}$$

[47]顺磁电流是我们对材料加电压后测量的通过材料的电流.当不加电压时,系统会在平衡态,电流为零.

其逆变换为

$$\Pi^R_{\alpha\beta}(q,\omega)=\int dt\int d^dxe^{-iqx}e^{i\omega t}\Pi^R_{\alpha\beta}(x,t)=-\frac{q^2n}{m}\delta_{\alpha\beta}+\Lambda^R_{\alpha\beta}(q,\omega). \quad (2.289)$$

这里我们定义了顺磁流−顺磁流之间的推迟关联函数:

$$\boxed{\Lambda^R_{\alpha\beta}(q,\omega)=-\frac{1}{i\hbar}\int dt\int d^dxe^{-iqx}e^{i\omega t}\theta(t)\langle[\hat{J}^\alpha_e(x,t),\hat{J}^\beta_e]\rangle.} \quad (2.290)$$

当$t=\infty$时,$\langle\hat{j}^\alpha_e(x,t)\rangle$的傅里叶变换$\langle\hat{j}^\alpha_e(q,\omega)\rangle$与$\Pi^R_{\alpha\beta}(q,\omega)$ 的关系为

$$\langle\hat{j}^\alpha_e(q,\omega)\rangle=\Pi^R_{\alpha\beta}(q,\omega)A^\beta(q,\omega) \quad (2.291)$$

由于上述关系与超导体中London方程$\vec{j}=-Q\vec{A}$在形式上的一致性,我们通常称$Q^R_{\alpha\beta}(q,\omega)=-\Pi^R_{\alpha\beta}(q,\omega)$为London响应核.注意到根据电场$\vec{E}=-\nabla\phi-\partial_t\vec{A}=-\partial_t\vec{A}$,[48]两边做傅里叶变换可知

$$\int\frac{d\omega d^dq}{(2\pi)^{d+1}}e^{iqx-i\omega t}\vec{E}(q,\omega)=\int\frac{d\omega d^dq}{(2\pi)^{d+1}}(-\partial_t)e^{iqx-i\omega t}\vec{A}(q,\omega)=\int\frac{d\omega d^dq}{(2\pi)^{d+1}}(i\omega)e^{iqx-i\omega t}\vec{A}(q,\omega) \quad (2.292)$$

这说明$E^\alpha(q,\omega)=i\omega A^\alpha(q,\omega)$,则有

$$\langle\hat{j}^\alpha_e(q,\omega)\rangle=\frac{\Pi^R_{\alpha\beta}(q,\omega)}{i\omega}E^\beta(q,\omega) \quad (2.293)$$

根据电导率的定义$j^\alpha=\sigma^{\alpha\beta}E^\beta$,我们得到

$$\sigma^{\alpha\beta}(q,\omega)=\frac{\langle\hat{j}^\alpha_e(q,\omega)\rangle}{E^\beta(q,\omega)}=\frac{\Pi^R_{\alpha\beta}(q,\omega)}{i\omega}. \quad (2.294)$$

在通常的固体材料中,光波/电磁波波速c远大于系统电子或其他激发的速度,因此$q=\omega/c<<k_F$,对于电导率的计算而言,其波矢q可以看作零,则有如下重要结果:

$$\sigma^{\alpha\beta}(\omega)=\frac{\Pi^R_{\alpha\beta}(q\to0,\omega)}{i\omega}=\frac{-\frac{q^2n}{m}\delta_{\alpha\beta}+\Lambda^R_{\alpha\beta}(q\to0,\omega)}{i\omega}. \quad (2.295)$$

既然电导率$\sigma^{\alpha\beta}(\omega)$一般用光学手段,例如椭偏仪,进行测量,我们也把它称为光学电导,简称光电导.对于各项同性的系统,光电导可化为$\sigma^{\alpha\beta}(\omega)=\delta_{\alpha\beta}\sigma(\omega)$,此时我们只需要计算某个方向,例如$x$方向的电导即可.对系统的电阻率直接相关的是电导率$\sigma^{\alpha\beta}(\omega)$的实部,即有

$$\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(\omega)=\frac{\mathrm{Im}\Pi^R_{\alpha\beta}(q\to0,\omega)}{\omega} \quad (2.296)$$

注意到抗磁流对$\Pi^R_{\alpha\beta}$的贡献$\frac{-q^2n}{m}\delta_{\alpha\beta}$ 是实的,不会贡献虚部,因此$\mathrm{Im}\Pi^R_{\alpha\beta}$仅包含顺磁流的贡献.所以在计算电导实部的过程中,我们仅需要如下公式

$$\boxed{\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(\omega)=\frac{\mathrm{Im}\Lambda^R_{\alpha\beta}(q\to0,\omega)}{\omega}.} \quad (2.297)$$

[48]取$\phi=0$的规范.当然,真实的物理不依赖于所选择的规范,毕竟做实验的时候没有人会说我是在Coulomb规范或者Lorentz规范下测量物理量的.

也就是电导率的实部仅由顺磁流–顺磁流关联函数的虚部决定.对于静态电导,有$\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}=\lim_{\omega\to 0}\frac{\mathrm{Im}\Lambda^R_{\alpha\beta}(q\to 0,\omega)}{\omega}$, 这样静态电阻率也可容易得到($\rho=\sigma^{-1}$).

- $\Pi^R_{\alpha\beta}$的实部$\mathrm{Re}\Pi^R_{\alpha\beta}$与电导无关,物理上其与超导体中超导电子的密度直接相关.

- 由于London响应核$Q^R_{xx}(q,\omega)$在$\omega=0$,$q_x=0,q_y\to 0$的极限下是$\frac{n_s e^2}{m}$,因此我们有 $\frac{e^2 n}{m}-\Lambda^R_{xx}(q_x=0,q_y\to 0,\omega=0)=\frac{n_s e^2}{m}\equiv\frac{D_s}{\pi}$. 这里$n_s$是处于超导态的电子的密度,一般也叫做超流浓度.$D_s$称为超流权重.我们可以用非零的$n_s$或者$D_s$来判断体系是否处于超导态.

- 另一方面,固体物理中熟知的Drude电导率是$\sigma(\omega)=\frac{ne^2}{m}\frac{\tau}{1-i\omega\tau}$,当电子寿命$\tau\gg\omega^{-1}$时就有$\sigma(\omega)=\frac{\pi ne^2}{m}-\frac{ne^2/m}{i\omega}$.与$\sigma^{\alpha\beta}(\omega)$对比就有 $\frac{q^2 n}{m}-\Lambda^R_{xx}(q=0,\omega\to 0)=ne^2/m\equiv\frac{D}{\pi}$.(假设$x,y,z$方向都等价)$D$称为Drude权重,对于导体有$D_s=0,D\neq 0$而绝缘体有$D_s=D=0$.

虚时Green函数与关联函数*

我们已经看到,计算系统电导率需要计算推迟极化函数Π^R或者$\Lambda^R(q,\omega)$.但是推迟函数的计算通常并不方便,为了克服这个困难,通常采用解析延拓的方法,即把推迟函数中的时间依赖因子$\hat{S}=e^{-i\hat{H}t}$中的时间延拓为$t=-i\tau$.(为简单起见,下面我们都省略$\hbar$)这里τ称为虚时间,简称虚时,其取值范围是$\tau\in[0,\beta=1/T]$.这个操作也称为Wick转动.由此,算符在Heisenberg绘景中的时间依赖转变为如下的虚时依赖

$$\hat{\mathcal{O}}_H(t)=e^{-i\hat{H}t}\hat{\mathcal{O}}e^{-i\hat{H}t}\to\hat{\mathcal{O}}(\tau)=e^{\tau\hat{H}}\hat{\mathcal{O}}e^{-\tau\hat{H}} \tag{2.298}$$

那么算符的Heisenberg运动方程在虚时下的形式为

$$\frac{d\hat{\mathcal{O}}(\tau)}{d\tau}=\hat{H}\hat{\mathcal{O}}(\tau)-\hat{\mathcal{O}}(\tau)\hat{H}=[\hat{H},\hat{\mathcal{O}}(\tau)] \tag{2.299}$$

现在,让我们考虑一个自由费米子哈密顿量$\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k$, 利用虚时下的Heisenberg运动方程可得

$$\frac{d\hat{c}_k(\tau)}{d\tau}=[\hat{H},\hat{c}_k(\tau)]=\sum_{k'}\varepsilon_{k'}[\hat{c}^\dagger_{k'}(\tau)\hat{c}_{k'}(\tau),\hat{c}_k(\tau)]=-\varepsilon_k c_k(\tau) \tag{2.300}$$

显然上述方程的解为$\hat{c}_k(\tau)=\hat{c}_k e^{-\tau\varepsilon_k}$, 同理可得$\hat{c}^\dagger_k(\tau)=\hat{c}^\dagger_k e^{\tau\varepsilon_k}$.

- 虚时的引入本身是处理问题的数学技巧,目前来看并没有明确的物理意义.

与推迟Green函数$G^R(x,t;y,t')=\frac{1}{i}\theta(t-t')\langle[\hat{\mathcal{O}}(x,t),\hat{\mathcal{O}}(y,t')]\rangle$ 类似,让我们定义虚时Green 函数:

$$\boxed{\mathcal{G}(x,\tau;y,\tau')=-\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{T}_\tau\hat{\mathcal{O}}(x,\tau)\hat{\mathcal{O}}(y,\tau')]\equiv-\langle\hat{T}_\tau\hat{\mathcal{O}}(x,\tau)\hat{\mathcal{O}}(y,\tau')\rangle} \tag{2.301}$$

这里$\hat{T}_\tau$是编时算符,其作用是把时间在后的算符换到求平均的左边,注意费米子算符会出现额外的负号.利用求迹的轮换对称,根据定义可知虚时Green 函数仅是相对时间的函数,即$\mathcal{G}(x,\tau;y,\tau')=\mathcal{G}(x,\tau-\tau';y,0)$,这说明其傅里叶变换为

$$\mathcal{G}(x,\tau;y,0)=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(x,y,\omega_n) \tag{2.302}$$

而逆变换是

$$\mathcal{G}(x,y,\omega_n)=\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(x,\tau;y,0) \tag{2.303}$$

这里这里ω_n是虚频率,对于玻色型算符构成的虚时Green函数,其取值为$\omega_n=\frac{2\pi n}{\beta}=2n\pi T, n=0,\pm1,\pm2...$只取一些列分立的值,即所谓玻色型虚频率.对费米型算符构成的虚时Green 函数,$\omega_n=\frac{2\pi(n+1/2)}{\beta}=(2n+1)\pi T$, 即费米型虚频率.在文献中,为了区分玻色和费米型频率,通常用Ω_n指玻色型虚频率而ω_n指费米型虚频率.在下面的讨论中,我们就采取这一符号约定.

类似于推迟Green函数的谱表示,对于虚时Green函数也有如下谱表示:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(x,y,\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(x,\tau;y,0)=-\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}\theta(\tau)\frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}\hat{\mathcal{O}}(x,\tau)\hat{\mathcal{O}}(y,0)\\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}e^{-\beta E_n}e^{\tau(E_n-E_m)}\langle n|\hat{\mathcal{O}}(x)|m\rangle\langle m|\hat{\mathcal{O}}(y)|n\rangle\\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\frac{e^{i\omega_n\beta}e^{\beta(E_n-E_m)}-1}{i\omega_n+E_n-E_m}\langle n|\hat{\mathcal{O}}(x)|m\rangle\langle m|\hat{\mathcal{O}}(y)|n\rangle\end{aligned} \tag{2.304}$$

注意到,对于费米子型的频率ω_n,我们发现

$$e^{i\omega_n\beta}=e^{i\frac{2\pi(n+1/2)}{\beta}\beta}=e^{i\pi}=-1 \tag{2.305}$$

则有

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(x,y,\omega_n) &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}\frac{e^{\beta(E_n-E_m)}+1}{i\omega_n+E_n-E_m}\langle n|\hat{\mathcal{O}}(x)|m\rangle\langle m|\hat{\mathcal{O}}(y)|n\rangle\\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}\left[e^{-\beta E_n}\frac{1}{i\omega_n+E_n-E_m}+e^{-\beta E_m}\frac{1}{i\omega_n+E_n-E_m}\right]\langle n|\hat{\mathcal{O}}(x)|m\rangle\langle m|\hat{\mathcal{O}}(y)|n\rangle\end{aligned}$$

对上式第二部分交换n,m最终可得

$$\mathcal{G}(x,y,\omega_n)=\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{n,m}\left[e^{-\beta E_n}\frac{\langle n|\hat{\mathcal{O}}(x)|m\rangle\langle m|\hat{\mathcal{O}}(y)|n\rangle}{i\omega_n+E_n-E_m}+e^{-\beta E_m}\frac{\langle m|\hat{\mathcal{O}}(x)|n\rangle\langle n|\hat{\mathcal{O}}(y)|m\rangle}{i\omega_n-E_n+E_m}\right]$$

对比推迟Green函数$G^R(x,y,\omega)$的谱表示,我们发现两者的差别在于$\mathcal{G}$分母出现的是$i\omega_n$而G^R则是$\omega+i0^+$,因此我们有如下解析延拓规则:[49]

$$\boxed{G^R(\omega)=\mathcal{G}(i\omega_n\to\omega+i0^+),\quad \omega_n>0} \tag{2.306}$$

[49]由于从虚频$i\omega_n$解析延拓到$\omega+i0^+$相当于从正虚轴旋转至实轴上方,因此这里要求$\omega_n>0$也就是虚频Green函数的正频率部分解析延拓为推迟Green函数.类似的,虚频Green函数的负频率部分解析延拓为超前Green函数.相关讨论可以参考Altland和Simons书7.3节.

同时对比谱函数$A(\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R(\omega)$,则虚频Green也可以用谱函数表示,即

$$\boxed{\mathcal{G}(\omega_n)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{A(\omega)}{i\omega_n-\omega}.} \tag{2.307}$$

综合虚频,推迟和超前Green函数,我们可以定义如下Green函数:

$$G(z)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\frac{A(\omega')}{z-\omega'}=\begin{cases}G^R(\omega), & z\to\omega+i0^+;\\ G^A(\omega), & z\to\omega-i0^+;\\ \mathcal{G}(\omega_n), & z\to i\omega_n.\end{cases} \tag{2.308}$$

可以看到$G(z)$在实轴以外的复平面解析,通过对其解析延拓就可以得到推迟超前等Green函数.

对于当前的目的,实时的推迟Green函数$G^R(x,t;y,t')$与虚时Green函数$G(x,\tau;y,\tau')$有如下一一对应:

$$\boxed{G^R(x,t;y,t')=\frac{1}{i}\theta(t-t')\langle[\hat{\mathcal{O}}(x,t),\hat{\mathcal{O}}(y,t')]\rangle\to\mathcal{G}(x,\tau;y,\tau')=-\langle\hat{T}_\tau\hat{\mathcal{O}}(x,\tau)\hat{\mathcal{O}}(y,\tau')\rangle.} \tag{2.309}$$

因此推迟流−流关联函数与虚时流−流关联函数有如下对应

$$\Lambda^R_{\alpha\beta}(x,t;y,t')=-\frac{1}{i}\theta(t-t')\langle[\hat{J}^\alpha_e(x,t),\hat{J}^\beta_e(y,t')]\rangle\to\Lambda_{\alpha\beta}(x,\tau;y,\tau')=\langle\hat{T}_\tau\hat{J}^\alpha_e(x,\tau)\hat{J}^\beta_e(y,\tau')\rangle \tag{2.310}$$

$\Lambda_{\alpha\beta}(x,\tau;y,\tau')$对应的傅里叶变换是

$$\boxed{\Lambda_{\alpha\beta}(q,\Omega_n)=\int d\tau\int d^dxe^{-iqx}e^{i\Omega_n\tau}\langle\hat{T}_\tau\hat{J}^\alpha_e(x,\tau)\hat{J}^\beta_e\rangle.} \tag{2.311}$$

这里Ω_n是玻色型虚频率.当我们成功计算出$\Lambda_{\alpha\beta}(q,\Omega_n)$,再通过解析延拓$i\Omega_n\to\omega+i0^+$就可得到推迟流−流关联函数:

$$\Lambda^R_{\alpha\beta}(q,\omega)=\Lambda_{\alpha\beta}(q,i\Omega_n\to\omega+i0^+),\Omega_n>0. \tag{2.312}$$

一般而言,上述解析延拓是比较难操作的,尤其是当我们并没有$\Lambda_{\alpha\beta}(q,i\Omega_n)$的解析表达式,只有一些列分立的数值时,这类解析延拓操作在数学上是病态的.虽然可以通过最大熵方法或者Padé近似得到近似的解析延拓结果,[50]但对比较复杂的系统,所得到的结果可能不可靠,目前如何从虚时/频数据反演得到完全正确的实频信息仍然是很多强关联多体数值计算方法的基本挑战.

[50]例如Padé近似就是假设如果我们知道函数$g(i\omega_n)$在每个$i\omega_n$的取值,然后需要求对应的解析延拓$f(\omega)$,那么我们可以假设$f(\omega)$满足连分式的形式,即$f(\omega)=\frac{a_1}{1+\frac{a_2(\omega-i\omega_1)}{1+\frac{a_3(\omega-i\omega_2)}{1+\dots}}}$.同时我们要求$f(\omega\to i\omega_n)=g(i\omega_n)$对每个$\omega_n$都成立,这样就建立了关于系数$a_1,a_2\dots$的方程,求解方程得到系数也就等价于获得了解析延拓的结果$f(\omega)$.[Kiss,Self-energy Padé approach for analytic continuation:Application to the zero-gap Kondo lattice model,Phys.Rev.B **100**,214417(2019)]

最后,我们写出用虚频关联函数表示的电导率实部,

$$\boxed{\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(\omega)=\frac{\mathrm{Im}\Lambda_{\alpha\beta}(q\to 0,i\Omega_n\to\omega+i0^+)}{\omega}.} \tag{2.313}$$

在实际应用中,对于玻色子或者费米子系统,我们通常利于产生和湮灭算符构造所谓的单粒子Green函数,例如,对由自由费米子哈密顿量$\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k$ 定义的系统,其单粒子虚时Green函数定义为

$$\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau)=-\langle\hat{T}_\tau\hat{c}_k(\tau)\hat{c}_k^\dagger\rangle_0 \tag{2.314}$$

这个量反映的是在平衡态下在零时刻产生一个状态为k的费米子,然后让其演化至τ时刻并使其湮灭的过程的概率.根据定义,我们发现

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau) &= -\theta(\tau)\langle\hat{c}_k(\tau)\hat{c}_k^\dagger\rangle_0+\theta(-\tau)\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k(\tau)\rangle_0\\ &= e^{-\tau\varepsilon_k}(-\theta(\tau)\langle\hat{c}_k\hat{c}_k^\dagger\rangle_0+\theta(-\tau)\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\rangle_0)\\ &= e^{-\tau\varepsilon_k}(-\theta(\tau)(1-f_F(\varepsilon_k))+\theta(-\tau)f_F(\varepsilon_k))\end{aligned} \tag{2.315}$$

当$\tau>0$时则有$\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau)=-\theta(\tau)e^{-\tau\varepsilon_k}(1-f_F(\varepsilon_k))$.注意到当$\varepsilon_k=0$时,即系统具有平直的能带时,$\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau)=-\frac{\mathrm{sign}(\tau)}{2}$.

对于$\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau)$,其傅里叶变换为

$$\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}e^{-i\omega_n\tau}\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n) \tag{2.316}$$

逆变换是

$$\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)=\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau)=-(1-f_F(\varepsilon_k))\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}e^{-\tau\varepsilon_k}=-(1-f_F(\varepsilon_k))\frac{e^{(i\omega_n-\varepsilon_k)\beta}-1}{i\omega_n-\varepsilon_k} \tag{2.317}$$

注意到$e^{i\omega_n\beta}=e^{(2n+1)\pi}=-1$,则有$-e^{-\varepsilon_k\beta}-1=-f_F(-\varepsilon_k)=-(1-f_F(\varepsilon_k))$,那么有

$$\boxed{\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k}} \tag{2.318}$$

同理,对由自由玻色子系统$\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k$, 我们有

$$\boxed{\mathcal{G}^{(0)}(k,\Omega_n)=-\int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_n\tau}\langle\hat{T}_\tau\hat{b}_k(\tau)\hat{b}_k^\dagger\rangle_0=\frac{1}{i\Omega_n-\varepsilon_k}.} \tag{2.319}$$

需要指出,我们目前仅求得对自由系统$\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k$的虚时Green函数,对一般的相互作用系统,例如Coulomb电子气该如何计算呢？这就需要采用微扰论或者说Feynamn图的方式进行系统化的处理.

虚时Green函数的微扰计算*

为了进行微扰论计算,我们把体系写成$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$,$H_0$通常代表单粒子部分而$\hat{V}$代表相互作用部分.让我们定义虚时下相互作用绘景的算符:

$$\hat{\mathcal{O}}_I(\tau)=e^{\tau\hat{H}_0}\hat{\mathcal{O}}e^{-\tau\hat{H}_0} \tag{2.320}$$

对比虚时下Heisenberg绘景的算符$\hat{\mathcal{O}}(\tau)=e^{\tau\hat{H}}\hat{\mathcal{O}}e^{-\tau\hat{H}}$, 我们发现

$$\hat{\mathcal{O}}(\tau)=\overbrace{e^{\tau\hat{H}}e^{-\tau\hat{H}_0}}^{\hat{U}^{-1}(\tau)}\hat{\mathcal{O}}_I(\tau)\overbrace{e^{\tau\hat{H}_0}e^{-\tau\hat{H}}}^{\hat{U}(\tau)}=\hat{U}^{-1}(\tau)\hat{\mathcal{O}}_I(\tau)\hat{U}(\tau) \tag{2.321}$$

这里$\hat{U}(\tau)=e^{\tau\hat{H}_0}e^{-\tau\hat{H}}$是时间演化算符.对$\hat{U}(\tau)$求时间演化可得

$$\frac{d\hat{U}(\tau)}{d\tau}=e^{\tau\hat{H}_0}(\hat{H}_0-\hat{H})e^{-\tau\hat{H}}=-\hat{V}_I(\tau)\hat{U}(\tau). \tag{2.322}$$

对该式两边求τ积分可得($\int_0^\tau d\tau$,$\hat{U}(0)=1$)

$$\hat{U}(\tau)-\hat{U}(0)=-\int_0^\tau d\tau'\hat{V}_I(\tau')\hat{U}(\tau')\Rightarrow\hat{U}(\tau)=1-\int_0^\tau d\tau'\hat{V}_I(\tau')\hat{U}(\tau'). \tag{2.323}$$

反复迭代上式可以看到如下结果:

$$\hat{U}(\tau)=1-\int_0^\tau d\tau_1\hat{V}_I(\tau_1)+(-1)^2\int_0^\tau d\tau_1\int_0^{\tau_1}d\tau_2\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)+... \tag{2.324}$$

事实上,上式迭代n次会得到一个n重积分

$$(-1)^n\int_0^\tau d\tau_1\int_0^{\tau_1}d\tau_2...\int_0^{\tau_{n-1}}d\tau_n\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n)\hat{U}(\tau_n). \tag{2.325}$$

这样,无穷次迭代后的精确形式是

$$\hat{U}(\tau)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\int_0^\tau d\tau_1\int_0^{\tau_1}d\tau_2...\int_0^{\tau_{n-1}}d\tau_n\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n) \tag{2.326}$$

此时,为了进一步简化形式可以引入先前用到的时序算符$\hat{T}_\tau$,这样上述积分的上限都可以取为τ, 则有

$$\hat{U}(\tau)=\hat{T}_\tau[e^{-\int_0^\tau d\tau'\hat{V}_I(\tau')}]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\tau d\tau_1d\tau_2...d\tau_n\hat{T}_\tau[\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n)]. \tag{2.327}$$

现在,让我们考虑Green函数

$$\mathcal{G}_k(\tau)=-\langle\hat{T}_\tau\hat{c}_k(\tau)\hat{c}_k^\dagger\rangle=-\frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}\hat{T}_\tau\hat{c}_k(\tau)\hat{c}_k^\dagger]=-\frac{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}\hat{T}_\tau\hat{c}_k(\tau)\hat{c}_k^\dagger]}{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}]} \tag{2.328}$$

注意到$e^{-\beta\hat{H}}=e^{-\beta\hat{H}_0}\hat{U}(\beta)$,我们有

$$\mathcal{G}_k(\tau)=-\frac{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\hat{U}(\beta)\hat{T}_\tau\hat{c}_k(\tau)\hat{c}_k^\dagger]}{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\hat{U}(\beta)]}=-\frac{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\hat{U}(\beta)\hat{T}_\tau\hat{c}_{kI}(\tau)\hat{c}_{kI}^\dagger(0)]}{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\hat{U}(\beta)]}=-\frac{\langle\hat{U}(\beta)\hat{T}_\tau\hat{c}_{kI}(\tau)\hat{c}_{kI}^\dagger(0)\rangle_0}{\langle\hat{U}(\beta)\rangle_0}$$
$$=-\frac{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\hat{T}_\tau(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\tau d\tau_1d\tau_2...d\tau_n\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n)\hat{c}_{kI}(\tau)\hat{c}_{kI}^\dagger(0))]}{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\tau d\tau_1d\tau_2...d\tau_n\hat{T}_\tau[\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n)]]}.$$

对上式分子和分母同时除以$e^{\beta\hat{H}_0}$可得

$$\mathcal{G}_k(\tau)=-\frac{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\tau d\tau_1 d\tau_2...d\tau_n\langle\hat{T}_\tau\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n)\hat{c}_{kI}(\tau)\hat{c}^\dagger_{kI}(0)\rangle_0}{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\tau d\tau_1 d\tau_2...d\tau_n\langle\hat{T}_\tau\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n)\rangle_0}.$$

其中$\langle...\rangle_0=\frac{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_0}...}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_0}}$代表对$\hat{H}_0$的热力学系综平均.同时,系统的配分函数可以写成

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}=\mathcal{Z}_0\langle\hat{U}(\beta)\rangle_0=\mathcal{Z}_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\tau d\tau_1 d\tau_2...d\tau_n\langle\hat{T}_\tau\hat{V}_I(\tau_1)\hat{V}_I(\tau_2)...\hat{V}_I(\tau_n)\rangle_0. \tag{2.329}$$

现在,我们考虑典型的相互作用,即$\hat{V}=\frac{1}{2}\sum_{kk'q}V_q\hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{c}^\dagger_{k'-q}\hat{c}_{k'}\hat{c}_k$, 这样Green函数 $\mathcal{G}_k(\tau)$准确至$\hat{V}$一阶的形式为:

$$\mathcal{G}_k(\tau)=-\frac{\langle\hat{c}_{kI}(\tau)\hat{c}^\dagger_{kI}\rangle_0-\int d\tau'\langle\hat{T}_\tau\hat{V}_I(\tau')\hat{c}_{kI}(\tau)\hat{c}^\dagger_{kI}\rangle_0}{1-\int d\tau\langle\hat{T}_\tau V_I(\tau)\rangle_0}. \tag{2.330}$$

进一步,我们需要计算分子和分母,对于分母中的部分,我们有

$$\frac{1}{2}\int d\tau\langle\hat{T}_\tau\sum_{kk'q}V_q\hat{c}^\dagger_{k+qI}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k'-qI}(\tau)\hat{c}_{k'I}(\tau)\hat{c}_{kI}(\tau)\rangle_0 \tag{2.331}$$

若$\hat{H}_0$确实是自由粒子形式,例如$\hat{H}_0=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k$,那么由广义Wick定理可知对$\hat{H}_0$ 的热力学平均非零的项必须两两收缩成单粒子Green 函数,即$\mathcal{G}^{(0)}$:

$$\begin{aligned}
&\langle\hat{T}_\tau\hat{c}^\dagger_{k+qI}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k'-qI}(\tau)\hat{c}_{k'I}(\tau)\hat{c}_{kI}(\tau)\rangle_0\\
=\;&(-1)^2\langle\hat{T}_\tau\hat{c}^\dagger_{k+qI}(\tau)\hat{c}_{kI}(\tau)\rangle_0\langle\hat{T}_\tau\hat{c}^\dagger_{k'-qI}(\tau)\hat{c}_{k'I}(\tau)\rangle_0-\langle\hat{T}_\tau\hat{c}^\dagger_{k+qI}(\tau)\hat{c}_{k'I}(\tau)\rangle_0\langle\hat{T}_\tau\hat{c}^\dagger_{k'-qI}(\tau)\hat{c}_{kI}(\tau)\rangle_0\\
=\;&\mathcal{G}^{(0)}_{k,k+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k',k'-q}(0^-)-\mathcal{G}^{(0)}_{k',k+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k,k'-q}(0^-)
\end{aligned} \tag{2.332}$$

上式中的负号来自我们移动费米子算符时涉及的反对易关系,换句话说,在时序算符的影响下,我们可以任意交换算符的次序,这是十分重要的性质.对$\hat{H}_0=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k$我们知道$\mathcal{G}^{(0)}$仅对相同动量才非零,因此分母化为

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}_0}\simeq 1-\frac{1}{2}\int d\tau\sum_{kk'q}V_q(\delta_{q=0}\mathcal{G}^{(0)}_k(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(0^-)-\delta_{k'=k+q}\mathcal{G}^{(0)}_{k+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(0^-))\\
=\;&1-\frac{\beta}{2}\left(\sum_{kk'}V_{q=0}\mathcal{G}^{(0)}_k(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(0^-)-\sum_{kq}V_q\mathcal{G}^{(0)}_{k+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(0^-)\right)\\
=\;&1-\frac{\beta}{2}\left(\sum_{kk'}V_{q=0}f_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k'})-\sum_{kq}V_qf_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k+q})\right).
\end{aligned} \tag{2.333}$$

由$-T\ln\mathcal{Z}/\mathcal{Z}_0=F-F_0=\Delta F$,(这里$\Delta F$代表相互作用修正导致的自由能变

化)我们发现

$$\begin{aligned}
\Delta F &= -T\ln\left(1-\frac{\beta}{2}(\sum_{kk'}V_{q=0}f_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k'})-\sum_{kq}V_q f_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k+q}))\right)\\
&\simeq \frac{1}{2}\sum_{kk'}V_{q=0}f_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k'})-\frac{1}{2}\sum_{kq}V_q f_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k+q})\\
&= \frac{1}{2}\sum_k f_F(\varepsilon_k)\left(\sum_{k'}V_{q=0}f_F(\varepsilon_{k'})-\sum_{k'}V_{k'-k}f_F(\varepsilon_{k'})\right)=\frac{1}{2}\sum_k f_F(\varepsilon_k)\varepsilon_{HF}(k)
\end{aligned}$$

对照Hartree-Fock近似,这里定义了ε_{HF}.注意到如果考虑Coulomb电子气体,那么ε_{HF} 中的直接项消失,剩下的就是交换项的贡献.因此,这里的结果就是Hartree-Fock近似下的自由能修正.

当然,我们已经注意到上述的计算必然会因为展开阶数的增加而变得复杂,因此,采用更利于计算的方式成了必然的选择,这当中,所谓Feynman图形技术是最常用的近似方法.简单来说,对于上述的$\mathcal{Z}/\mathcal{Z}_0$计算,我们可以把一些式子用图形来代替并附加上一些统一的规则.这样微扰计算就可以转化为对相应图形的计算.对当前例子,我们定义自由费米子Green函数$G_k^{(0)}(\tau)$用一条带箭头的实线表示,箭头的方向是粒子运动的方向也就是从产生算符到湮灭算符的方向,k代表粒子的动量,0和τ表示粒子从0时刻运动至τ时刻.同时,四费米子之间的相互作用用带四个箭头的虚线组合表示,记为$-V_q$.(图2.4)这样,相互作用对自由能的一阶修正可以用图2.4(c)中的两个图形表示.注意,在把图形翻译为公式时需要考虑:[51]

1. 每一条实线对应$G^{(0)}$;

2. 每一个虚线组合表示$-V_q$;

3. 每个闭合圈贡献-1因子;

4. 每一个虚线与实线的交点处动量守恒;

5. 对内部的动量和时间求和或积分;

6. 乘以对称因子,例如图2.4(c)中为1/2.

[51]这些规则又称为Feynman规则

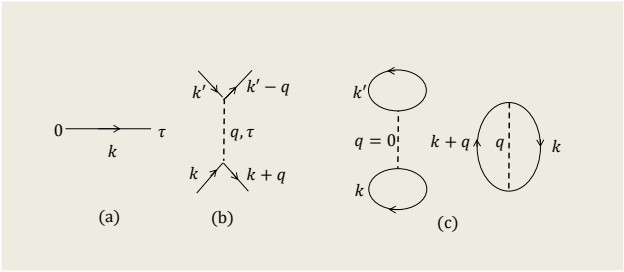


Figure 2.4: 无自旋费米子的Feynman图形.(a)自由费米子Green函数;(b)四费米子相互作用;(c)对ΔF有贡献的一阶图形.

类似的,分子也可以做同样的操作,即有

$$
\begin{aligned}
& \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau)+\frac{1}{2}\int d\tau' \sum_{k'k''q} V_q \langle \hat{T}_\tau \hat{c}^\dagger_{k'+qI}(\tau')\hat{c}^\dagger_{k''-qI}(\tau')\hat{c}_{k''I}(\tau')\hat{c}_{k'I}(\tau')\hat{c}_{kI}(\tau)\hat{c}^\dagger_{kI}\rangle_0 \\
= \;& \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau)-\frac{1}{2}\int d\tau' \sum_{k'k''q} V_q(\delta_{q=0}\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k''}(0^-)-\delta_{k''=k'+q}\mathcal{G}^{(0)}_{k'+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(0^-))\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau) \\
+ \;& \frac{1}{2}\int d\tau' \sum_{k'k''q} V_q(\delta_{q=0}\delta_{k'=k}\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}_{k''}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau')-\delta_{k'',k}\delta_{k',k-q}\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}^{(0)}_{k-q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau' \\
+ \;& \frac{1}{2}\int d\tau' \sum_{k'k''q} V_q(\delta_{q=0}\delta_{k''=k}\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}_{k'}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau')-\delta_{k',k}\delta_{k'',k+q}\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}^{(0)}_{k+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau' \\
= \;& \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau)-\frac{1}{2}\int d\tau'(\sum_{k'k''} V_{q=0}\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k''}(0^-)-\sum_{k'q} V_q\mathcal{G}^{(0)}_{k'+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(0^-))\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau) \\
+ \;& \frac{1}{2}\int d\tau'(\sum_{k''} V_{q=0}\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}_{k''}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau')-\sum_{q} V_q\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}^{(0)}_{k-q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau')) \\
+ \;& \frac{1}{2}\int d\tau'(\sum_{k'} V_{q=0}\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}_{k'}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau')-\sum_{q} V_q\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau-\tau')\mathcal{G}^{(0)}_{k+q}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau')) \\
= \;& \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau)+diag(a)\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau)+\frac{1}{2}diag(b)+\frac{1}{2}diag(c). \qquad (2.334)
\end{aligned}
$$

与分母一样,上述展开也可通过Feynman图形进行表示,即图2.5.其中$diag(a)$对应(a)中的图形,(扣除$\mathcal{G}^{(0)}_k(\tau)$)$diag(b), diag(c)$ 分别对应图(b)和(c).注意到一般地相互作用V_q应是q的偶函数,这样$V_q = V_{-q}$,并且令图(b) 中$q \to -q, k'' \to k'$可使得(b)与(c)完全相同,这样就可以消掉1/2因子,于是我们发现Green函数可以表示

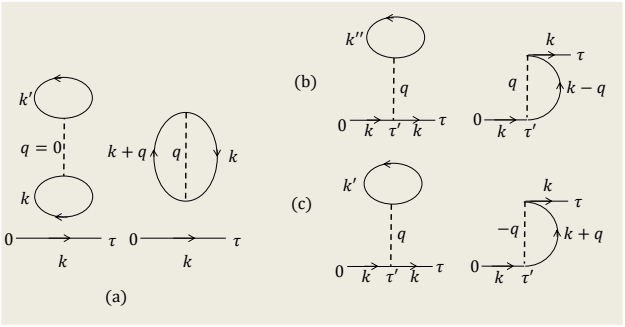


Figure 2.5: 无自旋费米子的Feynman图形.(a)一阶展开的非联通图;(b),(c)对Green 函数有贡献的一阶图形.

为

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_k(\tau) &= \frac{\mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + diag(a)\mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + diag(b)}{1 + diag(a)} \\
&= (\mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + diag(a)\mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + diag(b)(1 - diag(a) + ...) \\
&= \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + diag(a)\mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + diag(b) - diag(a)\mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + O(V^2) \\
&= \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + diag(b) = \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau) + \mathcal{G}_k^{(0)}(\tau')\Sigma_k^{(1)}(0^-)\mathcal{G}_k^{(0)}(\tau - \tau') \quad (2.335)
\end{aligned}$$

注意到上式分子中的非连通图部分(图(a))与分母抵消,这实际是相连集团定理的直接结果.这个结果更一般性的声明是我们计算Green函数时可以不用考虑分母的贡献并且同时非连通图也无需计入.[52]这里我们引入了一阶自能函数$\Sigma^{(1)}$用以表示图2.5中去掉两个Green函数剩下部分的贡献.

进一步,我们还可以计算Green函数的高阶修正,此时采用Feynman图形的方法可以得到大量图形.手动计算可以计算的图形数目有限,此时可利用计算机抽样计算,这就是图形蒙特卡洛方法. 回到当前的问题,通过做傅里叶变换可以把上述结果都化为能量–动量空间的问题,也就是可以定义能量–动量空间的Feynman图和Feynman规则.此时唯一的区别是对时间的积分变为对(虚)频率的求和并且每个交点的频率也必须守恒.例如一阶近似下的Green函数可以写成:

$$\mathcal{G}(k, \omega_n) \simeq \mathcal{G}^{(0)}(k, \omega_n) + \mathcal{G}^{(0)}(k, \omega_n)\Sigma^{(1)}(k, \omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k, \omega_n). \quad (2.336)$$

[52]所谓非连通图就是指与我们需要计算的Green函数没有连在一起的图形,显然自由能修正的图都是非连通图.

事实上,更高阶的修正都可以归并到自能函数中,因此我们会发现如下简单的结果,即严格的Green函数$\mathcal{G}$ 由严格的自能Σ决定:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(k,\omega_n) &= \mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)+\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\Sigma(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\\ &+ \mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\Sigma(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\Sigma(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\\ &+ ...\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)(\Sigma(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n))^m+...\\ &= \frac{\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)}{1-\Sigma(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)}\\ &= \frac{1}{(\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n))^{-1}-\Sigma(k,\omega_n)}.\end{aligned} \tag{2.337}$$

这个结果称为Green函数的Dyson方程.当然,对于多粒子Green函数或者响应函数而言,其也满足相应的Dyson方程,具体内容不再叙述,感兴趣的读者请参考专门的多体理论或Green函数理论专著.[53]

最后,我们计算电导$\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(\omega)$的明确表达式.这里需要计算流−流关联函数$\Lambda_{\alpha\beta}(q,\Omega_n)$:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(q,\Omega_n)=\int d\tau\int d^dx e^{-iqx}e^{i\Omega_n\tau}\langle\hat{T}_\tau\hat{J}_e^\alpha(x,\tau)\hat{J}_e^\beta\rangle. \tag{2.338}$$

对于自由粒子色散的费米子体系,先前已经得到其电流密度算符是$\hat{J}_e^\alpha=\frac{-e}{V}\sum_{k,q}e^{iqx}\frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{k+q}$. 因此有

$$\langle\hat{T}_\tau\hat{J}_e^\alpha(x,\tau)\hat{J}_e^\beta\rangle=\frac{e^2}{V^2}\sum_{k'q'}\sum_{k''q''}e^{iq'x}\frac{k'^\alpha+q'^\alpha/2}{m}\frac{k''^\beta+q''^\beta/2}{m}\langle\hat{T}_\tau\hat{c}_{k'}^\dagger(\tau)\hat{c}_{k'+q'}(\tau)\hat{c}_{k''}^\dagger\hat{c}_{k''+q''}\rangle. \tag{2.339}$$

这样,我们的重点便是计算四费米子构成的双粒子Green函数$\mathcal{G}(k',q',\tau;k'',q'')=\langle\hat{T}_\tau\hat{c}_{k'}^\dagger(\tau)\hat{c}_{k'+q'}(\tau)\hat{c}_{k''}^\dagger\hat{c}_{k''+q''}\rangle$. 当系统具有相互作用$\hat{V}=\frac{1}{2}\sum_{kk'q}V_q\hat{c}_{k+q}^\dagger\hat{c}_{k'-q}^\dagger\hat{c}_{k'}\hat{c}_k$时,我们可以微扰地计算这个Green 函数,即

$$\mathcal{G}(k',q',\tau;k'',q'')=\frac{\langle\hat{T}_\tau\hat{c}_{k'I}^\dagger(\tau)\hat{c}_{k'+q'I}(\tau)\hat{c}_{k''I}^\dagger\hat{c}_{k''+q''I}\rangle_0-\int d\tau'\langle\hat{T}_\tau\hat{V}_I(\tau')\hat{c}_{k'I}^\dagger(\tau)\hat{c}_{k'+q'I}(\tau)\hat{c}_{k''I}^\dagger\hat{c}_{k''+q''I}\rangle_0+}{1-\int d\tau\langle\hat{T}_\tau V_I(\tau)\rangle_0+...}$$

我们首先考虑零级近似,也就是

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{(0)}(k',q',\tau;k'',q'') &= \langle\hat{T}_\tau\hat{c}_{k'I}^\dagger(\tau)\hat{c}_{k'+q'I}(\tau)\hat{c}_{k''I}^\dagger\hat{c}_{k''+q''I}\rangle_0\\ &= \langle\hat{T}_\tau\hat{c}_{k'I}^\dagger(\tau)\hat{c}_{k'+q'I}(\tau)\rangle_0\langle\hat{c}_{k''I}^\dagger\hat{c}_{k''+q''I}\rangle_0+\langle\hat{T}_\tau\hat{c}_{k'I}^\dagger(\tau)\hat{c}_{k''+q''I}\rangle_0\langle\hat{c}_{k'+q'I}(\tau)\hat{c}_{k''I}^\dagger\rangle_0\\ &= \delta_{q'=0}\delta_{q''=0}\mathcal{G}_{k'}^{(0)}(0^-)\mathcal{G}_{k''}^{(0)}(0^-)-\delta_{q''=k'-k''}\delta_{q'=k''-k'}\mathcal{G}_{k'}^{(0)}(-\tau)\mathcal{G}_{k''}^{(0)}(\tau)\end{aligned} \tag{2.340}$$

[53]系统的热力学性质可以通过热力学势得到,即$\Omega[G]=-T\sum_k\sum_n e^{i\omega_n0^+}[\ln(-i\omega_n+\varepsilon_k+\Sigma(k,\xi_n))+\mathcal{G}(k,i\omega_n)\Sigma(k,\omega_n)]+\Phi[G]$. 这里$\Omega[G]$就是著名的Luttinger-Ward泛函,其包含所有闭合的连通骨架图(骨架图不包含明确的自能图)且每一个Green函数都用完全Green函数$\mathcal{G}$ 表示.$\Omega[G]$的构造过程可参考Luttinger,Ward,Ground-State Energy of a Many-Fermion System.II,Phys.Rev. **118**,1417(1960)中的公式41 − 55.

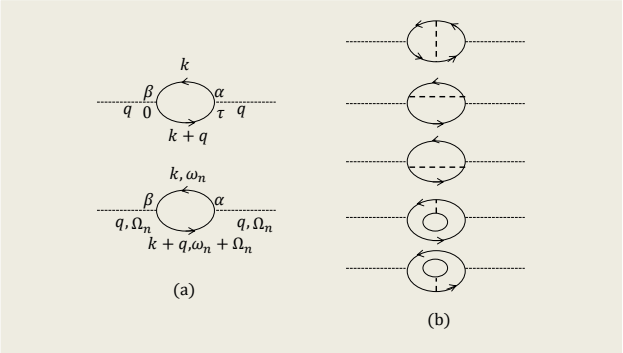


Figure 2.6: 流−流关联函数$\Lambda_{\alpha\beta}$的Feynman 图形.(a)零级近似;(b) 考虑相互作用修正的一阶图形.

这样

$$\langle \hat{T}_\tau \hat{J}_e^\alpha(x,\tau)\hat{J}_e^\beta\rangle_0 = \frac{e^2}{V^2}\sum_{k',k''}\left(\frac{k'^\alpha k''^\beta}{m^2}\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(0^-)\mathcal{G}^{(0)}_{k''}(0^-) - e^{i(k''-k')x}\frac{k'^\alpha+k''^\alpha}{2m}\frac{k''^\beta+k'^\beta}{2m}\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(-\tau)\mathcal{G}^{(0)}_{k''}(\tau)\right)$$

注意到$\mathcal{G}^{(0)}_k(0^-)$是k的偶函数,因此上式第一项积分为零,则有

$$\begin{aligned}\int d\tau\int d^dx e^{-iqx}e^{i\Omega_n\tau}\langle\hat{T}_\tau\hat{J}_e^\alpha(x,\tau)\hat{J}_e^\beta\rangle_0 &= -\frac{e^2}{V^2}\sum_{k',k''}\int d^dx e^{i(k''-k'-q)x}\frac{k'^\alpha+k''^\alpha}{2m}\frac{k''^\beta+k'^\beta}{2m}\\ &\times \int d\tau e^{i\Omega_n\tau}\mathcal{G}^{(0)}_{k'}(-\tau)\mathcal{G}^{(0)}_{k''}(\tau)\\ &= -\frac{e^2}{V}\sum_{k'}\frac{k'^\alpha+q^\alpha/2}{m}\frac{k'^\beta+q^\beta/2}{m}\\ &\times \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\mathcal{G}^{(0)}(k',\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k'+q,\omega_n+\Omega_n)\end{aligned}\quad(2.341)$$

即零级近似下的虚频流−流关联函数是

$$\boxed{\Lambda^{(0)}_{\alpha\beta}(q,\Omega_n) = -\frac{e^2}{V}\sum_k\frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}\frac{k^\beta+q^\beta/2}{m}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k+q,\omega_n+\Omega_n)}.\quad(2.342)$$

这可以用图2.6(a)的Feynan图形表示.其中点线与实线的交点代表流顶角$e\frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}$.
利用虚频Green函数的谱关系$\mathcal{G}(k,\omega_n)=\int d\omega\frac{A(k,\omega)}{i\omega_n-\omega}$可以把上式化为

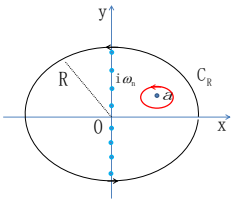


Figure 2.7: 费米子的频率求和.

$$\begin{aligned}\Lambda^{(0)}_{\alpha\beta}(q,\Omega_n) &= -\frac{e^2}{V}\sum_k \frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}\frac{k^\beta+q^\beta/2}{m}\int d\omega_1\omega_2 A^{(0)}(k,\omega_1)A^{(0)}(k+q,\omega_2)\\ &\times \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-\omega_1}\frac{1}{i\omega_n+i\Omega_n-\omega_2}\end{aligned} \tag{2.343}$$

这里对频率ω_n的求和可以通分为

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\left(\frac{1}{i\omega_n-\omega_1}-\frac{1}{i\omega_n+i\Omega_n-\omega_2}\right)\frac{1}{i\Omega_n-\omega_2+\omega_1} \tag{2.344}$$

为了计算上述对ω_n的求和,让我们先考虑如下例子,即计算费米子的虚频率求和$I=\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-a},\omega_n=(2n+1)\pi$.注意到求和是对所有分离的频率求和,那么自然会联想到通过构造适当函数的回路积分,其回路积分等于相应极点的留数之后,这些留数求和应是I.构造如下复变函数

$$f(z)=\frac{1}{e^z+1}\frac{1}{z-a} \tag{2.345}$$

这个函数的极点分别是a和$i\omega_n$.现在考虑该函数在复平面内以原点为中心的一个无穷大圆形的回路$\mathcal{C}$,(如图2.7)

$$I_{\mathcal{C}}=\oint_{\mathcal{C}}\frac{1}{e^z+1}\frac{1}{z-a}dz \tag{2.346}$$

在这个无穷大圆回路上的积分可以估计为

$$|I_{\mathcal{C}}|\leq|\oint_{\mathcal{C}}||\frac{1}{e^z+1}||\frac{1}{z-a}||dz|=\int_0^{2\pi}Rd\varphi\frac{1}{R}e^{-R}\to 0\quad(z=Re^{i\varphi},R\to\infty) \tag{2.347}$$

因此,我们得到回路积分$I_{\mathcal{C}}$值为零.另一方面,由留数定理可知,$I_{\mathcal{C}}$的积分值等于所有极点留数之和的$2\pi i$ 倍,

$$I_{\mathcal{C}}=2\pi i\sum_i \mathrm{Res}f(z_i)=2\pi i\sum_{\omega_n}\mathrm{Res}f(i\omega_n)+2\pi i\mathrm{Res}f(a) \tag{2.348}$$

而

$$\mathrm{Res}f(i\omega_n)=\lim_{z\to i\omega_n}(z-i\omega_n)\frac{1}{e^z+1}\frac{1}{z-a}=(-1)\frac{1}{i\omega_n-a} \tag{2.349}$$

$$\mathrm{Res}f(a)=\lim_{z\to a}(z-a)\frac{1}{e^z+1}\frac{1}{z-a}=\frac{1}{e^a+1} \tag{2.350}$$

这样我们得到

$$0=I_{\mathcal{C}}=2\pi i(\frac{1}{e^a+1}-\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-a}) \tag{2.351}$$

也就是

$$I=\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-a}=\frac{1}{e^a+1} \tag{2.352}$$

在实际的使用中,由于虚频率定义为$\omega_n=(2n+1)\pi T$,T是系统的温度,这样相应的结果是

$$\boxed{T\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-a}=\frac{1}{e^{a/T}+1},\quad \omega_n=(2n+1)\pi T} \tag{2.353}$$

此外,如果我们考虑玻色子的频率求和,采用完全相同的处理可以得到

$$\boxed{T\sum_{\Omega_n}\frac{1}{i\Omega_n-a}=-\frac{1}{e^{a/T}-1},\quad \Omega_n=2n\pi T} \tag{2.354}$$

这样,利用上述公式可得

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\left(\frac{1}{i\omega_n-\omega_1}-\frac{1}{i\omega_n+i\Omega_n-\omega_2}\right)\frac{1}{i\Omega_n-\omega_2+\omega_1}=\frac{f_F(\omega_1)-f_F(\omega_2)}{i\Omega_n-\omega_2+\omega_1}$$

即有

$$\boxed{\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-\omega_1}\frac{1}{i\omega_n+i\Omega_n-\omega_2}=\frac{f_F(\omega_1)-f_F(\omega_2)}{i\Omega_n-\omega_2+\omega_1}} \tag{2.355}$$

这样我们发现

$$\Lambda^{(0)}_{\alpha\beta}(q,\Omega_n)=-\frac{e^2}{V}\sum_k\frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}\frac{k^\beta+q^\beta/2}{m}\int d\omega_1\omega_2A^{(0)}(k,\omega_1)A^{(0)}(k+q,\omega_2)\frac{f_F(\omega_1)-f_F(\omega_2)}{i\Omega_n-\omega_2+\omega_1}. \tag{2.356}$$

此时做解析延拓$i\Omega_n\to\omega+i0^+$可得$\mathrm{Im}\Lambda^{(0)}_{\alpha\beta}(q,\omega+i0^+)$为(利用$\frac{1}{x+i0^+}=\frac{1}{x}-i\pi\delta(x)$)

$$\mathrm{Im}\Lambda^{(0)}_{\alpha\beta}(q,\omega)=\frac{\pi e^2}{V}\sum_k\frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}\frac{k^\beta+q^\beta/2}{m}\int d\omega_1A^{(0)}(k,\omega_1)A^{(0)}(k+q,\omega_1+\omega)(f_F(\omega_1)-f_F(\omega_1+\omega)). \tag{2.357}$$

最后令$q=0$得到零阶近似下电导实部的表达式:

$$\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(\omega)=\frac{\pi e^2}{V}\sum_k\frac{k^\alpha}{m}\frac{k^\beta}{m}\int d\omega_1A^{(0)}(k,\omega_1)A^{(0)}(k,\omega_1+\omega)\frac{f_F(\omega_1)-f_F(\omega_1+\omega)}{\omega}. \tag{2.358}$$

而令$\omega \to 0$可得静态电导

$$\boxed{\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(0) = \frac{\pi e^2}{V}\sum_k \frac{k^\alpha}{m}\frac{k^\beta}{m}\int d\omega_1 (A^{(0)}(k,\omega_1))^2 \frac{-\partial f_F(\omega_1)}{\partial \omega_1}}. \tag{2.359}$$

考虑零温度极限则有$\frac{-\partial f_F(\omega_1)}{\partial \omega_1} = \theta(\omega_1)$,那么

$$\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(T=0) = \frac{\pi e^2}{V}\sum_k \frac{k^\alpha}{m}\frac{k^\beta}{m}(A^{(0)}(k,0))^2. \tag{2.360}$$

现在设$A^{(0)}(k,\omega) = \frac{\Gamma/\pi}{(\omega-\varepsilon_k)^2+\Gamma^2}$,[54]那么各向同性的色散$\varepsilon_k$使得电导只有对角项,则有

$$\begin{aligned}
\mathrm{Re}\sigma^{\alpha\beta}(T=0) &= \delta_{\alpha\beta}\sum_\sigma \frac{1}{V}\sum_k \pi e^2 \frac{k^2}{3m}\left(\frac{\Gamma/\pi}{\varepsilon_k^2+\Gamma^2}\right)^2 \\
&\simeq \delta_{\alpha\beta}\sum_\sigma \pi e^2 \frac{k_F^2}{3m}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon N(\varepsilon)\left(\frac{\Gamma/\pi}{\varepsilon^2+\Gamma^2}\right)^2 \\
&\simeq \delta_{\alpha\beta}\sum_\sigma \pi e^2 \frac{k_F^2}{3m^2}\overbrace{N(0)}^{=\frac{4\pi m k_F}{(2\pi)^3}}\overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{(\Gamma/\pi)^2}{(\varepsilon^2+\Gamma^2)^2}}^{=\frac{1}{2\pi\Gamma}} \\
&= \delta_{\alpha\beta} e^2 \frac{\overbrace{4\pi k_F^3}^{3(2\pi)^3 n}}{3m(2\pi)^2}\frac{1}{\Gamma} = \delta_{\alpha\beta}\frac{ne^2}{m}\frac{1}{\Gamma}
\end{aligned} \tag{2.361}$$

若定义$1/\Gamma$为粒子寿命,那么上式就重新得到了静态电导的Drude公式.($N(0)$为三维自由电子气的费米面上态密度,k_F是相应的费米动量,n为电子密度.)

当考虑相互作用对流–流关联函数的一阶修正时,典型的Feynman图是图2.6(b)所示的五个图形,其对应下式中连通图的贡献:

$$-\frac{e^2}{V^2}\sum_{k'q'}\sum_{k''q''} e^{iq'x}\frac{k'^\alpha + q'^\alpha/2}{m}\frac{k''^\beta + q''^\beta/2}{m}\int d\tau' \langle \hat{T}_\tau \hat{V}_I(\tau')\hat{c}^\dagger_{k'I}(\tau)\hat{c}_{k'+q'I}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k''I}\hat{c}_{k''+q''I}\rangle_0 \tag{2.362}$$

这里积分部分是四费米Green函数$\mathcal{G}(k',q',\tau;k'',q'')$的一阶修正.在图2.6(b)的五个图形中,下面四个图都可以归并到单粒子Green函数$\mathcal{G}$的自能修正中,因此真正新的图是第一个,这表示相互作用对流–流关联的直接影响,一般可把其效果归到流顶角$e\frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}$的修正中,具体写出其表达式为(这里略去频率和流顶角)

$$-\sum_k \mathcal{G}^{(0)}(k)\mathcal{G}^{(0)}(k+q)\overbrace{\sum_{q'}(-V_{q'})\mathcal{G}^{(0)}(k-q')\mathcal{G}^{(0)}(k+q-q')}^{\Gamma(k,q)} \tag{2.363}$$

可以看到$\Gamma(k,q)$与零阶近似部分可以分别对待,它相当于把简单的电磁顶角$e\frac{k^\alpha+q^\alpha/2}{m}$修正为一个动量/频率依赖的复杂顶角.在很多实际应用中,我们会

[54]这等价于$G(k,\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k + i\Gamma}$,$\Gamma$源自稀薄静态杂质的散射.

把零阶近似流–流关联函数中的单粒子Green函数替换为自能修正后的形式同时不考虑对对角的修正,这样等效计入了相互作用的高阶修正而不导致复杂的形式.

电荷极化率*

我们已经讨论了Coulomb电子气,特别是提到了电荷屏蔽效应,这种效应实际上是大量电子对'杂质'电荷总是倾向于抹平其效应.这个抹平的能力可以用电荷极化率来刻画.下面我们就推导无自旋费米子系统电荷极化率的基本形式.我们考虑如下模型

$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= \int d^dx\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\left[\frac{-\nabla^2}{2m}-U(x,t)\right]\hat{\psi}(x)\right)+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\\ &= \int d^dx\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\frac{-\nabla^2}{2m}\hat{\psi}(x)\right)+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\\ &- \int d^dxU(x,t)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\end{aligned}$$

这里$U(t)$是外加的小扰动.这样,时间依赖的外加扰动项是

$$\hat{V}(t)=-\int d^dxU(x,t)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)=-\int d^dxU(x,t)\hat{n}(x). \tag{2.364}$$

那么根据线性响应理论,t时刻x位置的粒子密度平均值与平衡时的偏差$\langle\delta\hat{n}(x,t)\rangle=\langle\hat{n}(x,t)\rangle-\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{n}(x)]$ 由下式决定

$$\langle\delta\hat{n}(x,t)\rangle=-\frac{1}{i}\int_{-\infty}^{t}dt'\int d^dy\mathrm{Tr}[\hat{\rho}[\hat{n}(x,t),\hat{n}(y,t')]]U(y,t')=\int_{-\infty}^{t}dt'\int d^dy\chi_c^R(x,t;y,t')U(y,t'). \tag{2.365}$$

这里我们定义了描述电荷–电荷关联的推迟关联函数$\chi_c^R(x,t;y,t')$,也就是电荷极化率.当系统具有空间平移不变性且取$t\to\infty$,我们可以做傅里叶变换把上式变换至动量–频率空间,即

$$\langle\delta\hat{n}(q,\omega)\rangle=\chi_c^R(q,\omega)U(q,\omega) \tag{2.366}$$

$$\chi_c^R(q,\omega)=-\frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty}dt\int d^dxe^{i\omega t}e^{-iqx}\theta(t)\mathrm{Tr}[\hat{\rho}[\hat{n}(x,t),\hat{n}(0,0)]] \tag{2.367}$$

当然,实际计算电荷极化率$\chi_c^R(q,\omega)$可通过相应的虚时关联函数$\chi_c(q,\Omega_n)$解析延拓得到,

$$\boxed{\chi_c(q,\Omega_n)=\int_0^\beta d\tau\int d^dxe^{i\Omega\tau}e^{-iqx}\langle\hat{T}_\tau\hat{n}(x,\tau)\hat{n}(0,0)\rangle.} \tag{2.368}$$

这样,我们得到了电荷极化率的一般表达式.

现在,让我们考虑系统是自由费米气体,则不考虑外扰动时的系统哈密顿量可用傅里叶变换对角化为$\hat{H}=\sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$,($\varepsilon_k=\frac{k^2}{2m}$), 那么上述表达式可以解析算出.我们的出发点是粒子密度$\hat{n}(x)$的傅里叶变换:

$$\hat{n}(x)=\frac{1}{V}\sum_{k,q} e^{iqx}\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+q} \tag{2.369}$$

这样

$$\langle \hat{T}_\tau \hat{n}(x,\tau)\hat{n}(0,0)\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{k,q}\sum_{k',q'} e^{iqx}\langle \hat{T}_\tau \hat{c}_k^\dagger(\tau)\hat{c}_{k+q}(\tau)\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'+q'}\rangle \tag{2.370}$$

我们看到这里出现了费米子算符的虚时演化$\hat{c}_k(\tau)$,根据虚时Heisenberg 运动方程可知$\hat{c}_k(\tau)=\hat{c}_k e^{-\tau\varepsilon_k}$.由此,我们发现

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{T}_\tau \hat{c}_k^\dagger(\tau)\hat{c}_{k+q}(\tau)\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'+q'}\rangle = e^{\tau(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})}\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+q}\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'+q'}\rangle \\
&= e^{\tau(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})}(\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+q}\rangle\langle \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'+q'}\rangle + \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'+q'}\rangle\langle \hat{c}_{k+q}\hat{c}_{k'}^\dagger\rangle) \\
&= e^{\tau(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})}(\delta_{q=0}\delta_{q'=0}\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k\rangle\langle \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'}\rangle + \delta_{q',-q}\delta_{k',k+q}\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k\rangle(1-\langle \hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_{k+q}\rangle)) \\
&= e^{\tau(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})}(\delta_{q=0}\delta_{q'=0}f_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k'}) + \delta_{q',-q}\delta_{k',k+q}f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_{k+q})))
\end{aligned}$$

当然,若采用先前引入的单粒子Green函数$\mathcal{G}^{(0)}(k,\tau)$,那么上述结果也可表示为

$$\delta_{q=0}\delta_{q'=0}\mathcal{G}^{(0)}(k,0)\mathcal{G}^{(0)}(k',0) - \delta_{q',-q}\delta_{k',k+q}\mathcal{G}^{(0)}(k,-\tau)\mathcal{G}^{(0)}(k',\tau) \tag{2.371}$$

因此,虚数关联函数可简化为

$$\langle \hat{T}_\tau \hat{n}(x,\tau)\hat{n}(0,0)\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{k}\sum_{k'} f_F(\varepsilon_k)f_F(\varepsilon_{k'}) + \frac{1}{V^2}\sum_{k,q} e^{iqx}e^{\tau(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})}f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_{k+q})) \tag{2.372}$$

$$\begin{aligned}
\chi_c(q,\Omega_n) &= \beta V n^2 + \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int \frac{d^dq'}{(2\pi)^d}\int_0^\beta d\tau \int d^dx e^{i(q'-q)x}e^{(i\Omega_n+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q'})\tau}f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_{k+q'}) \\
&= \beta V n^2 + \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_0^\beta d\tau e^{(i\Omega_n+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})\tau}f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_{k+q})) \\
&= \beta V n^2 + \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{e^{(i\Omega_n+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})\beta}-1}{i\Omega_n+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}}f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_{k+q}))
\end{aligned} \tag{2.373}$$

注意到$e^{i\Omega_n\beta}=e^{i2\pi n}=1$,这样可得

$$(e^{(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})\beta}-1)f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_{k+q})) = f_F(\varepsilon_{k+q})-f_F(\varepsilon_k) \tag{2.374}$$

因此我们有

$$\chi_c(q,\Omega_n) = \beta V n^2 + \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{f_F(\varepsilon_{k+q})-f_F(\varepsilon_k)}{i\Omega_n+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}} \tag{2.375}$$

注意到这里的第一项反映均匀的电子密度n,这并不是电子之间关联的体现,由于常数并不改变对易关系,因此我们可以重新定义

$$\chi_c^R(q,\omega) = -\frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^d x e^{i\omega t} e^{-iqx}\theta(t)\mathrm{Tr}[\hat{\rho}[\hat{n}(x,t)-n, \hat{n}(0,0)-n]] \quad (2.376)$$

因此

$$\chi_c(q,\Omega_n) = \int_0^\beta d\tau \int d^d x e^{i\Omega\tau} e^{-iqx}\langle \hat{T}_\tau(\hat{n}(x,\tau)-n)(\hat{n}(0,0)-n)\rangle. \quad (2.377)$$

- 对于一般的相互作用系统,双粒子关联函数或者极化率,例如$\chi_c(q,\Omega_n)$,具有复杂的Green函数依赖形式,此时可以定义所谓的顶角函数(通常用符号Γ)来得到形式上简单的结果,例如$\chi_c(q,\Omega_n) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k+q,\omega_n+\Omega_n)\Gamma(k,q,\omega_n,\Omega_n)$.

- 对于无相互作用电子气,自然$\Gamma = 1$,而对于有相互作用的情况,通常用费曼图方法分析最低阶的顶角修正.实际上,很多成功的多体问题的处理都没有涉及顶角函数的计算,例如Coulomb电子气,超导的BCS 理论以及Eliashberg-Migdal理论.而像分数霍尔效应以及高温超导等问题则很难从费曼图微扰论出发来研究,自然顶角函数的计算也就不重要了.

  这样定义后,我们就可以消掉原先的常数项部分,则有

$$\chi_c(q,\Omega_n) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{f_F(\varepsilon_{k+q}) - f_F(\varepsilon_k)}{i\Omega_n + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}} = \chi_0(q, i\omega_n) \quad (2.378)$$

$\chi_0(q,i\omega_n)$是附录2.8.5中统一定义的自由电子极化函数.利用单粒子Green函数$\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)$,$\chi_c(q,\Omega_n)$也可写成

$$\chi_c(q,\Omega_n) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\mathcal{G}^{(0)}(k,\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}(k+q,\omega_n+\Omega_n). \quad (2.379)$$

这种形式的好处是当电子受到杂质或者相互作用影响时,其色散ε_k会发生改变,并且其也具有有限寿命,用Green函数可以很容易包含这些效应.[55]

最后,做解析延拓可得

$$\chi_c^R(q,\omega) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{f_F(\varepsilon_{k+q}) - f_F(\varepsilon_k)}{\omega + i0^+ + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}} = \chi_0(q, \omega + i0^+) \quad (2.380)$$

考虑该函数的实部并设$\omega = 0$,我们发现该函数就是Coulomb电子气讨论中提到的Lindhard电荷极化率.(乘上e^2)注意到电荷极化率总是正的,根据$\langle\delta\hat{n}(q,\omega)\rangle = \chi_c^R(q,\omega)U(q,\omega)$, 一个在$x$点处排斥的势存在时会导致$x$点附近的粒子数减少,即有$\langle\delta\hat{n}(x,\infty)\rangle < 0$(我们势的定义是$-U(x)$,排斥势对应$U(x) < 0$),而吸引势则导致粒子数增加.

[55] Feynman图形表示类似于图2.6(a),不考虑流顶角.

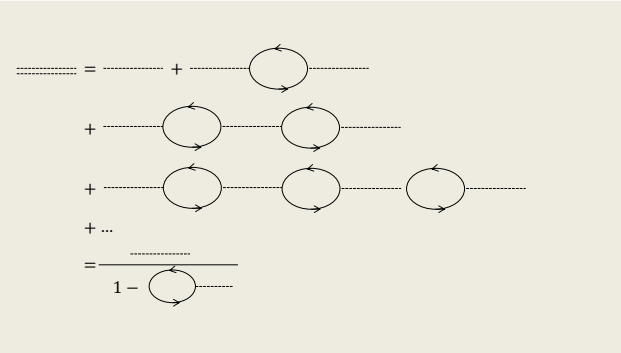


Figure 2.8: 有效Coulomb相互作用RPA修正的Feynman图形,分子为裸Coulomb势,分母表示RPA 修正后的介电函数.

取$\chi_c^R(q,\omega)$的虚部可得

$$\mathrm{Im}\chi_c^R(q,\omega)=\pi\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(f_F(\varepsilon_k)-f_F(\varepsilon_{k+q})\right)\delta(\omega+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}) \tag{2.381}$$

显然,根据上式中的δ函数,外扰动的频率恰好等于k态与$k+q$态的能量差时系统才有非零的电荷极化虚部,即

$$\omega=\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k=\frac{k^2+q^2+2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m}-\frac{k^2}{2m}=\frac{q^2}{2m}+\frac{\vec{k}\cdot\vec{q}}{m} \tag{2.382}$$

同时,在零温基态,只有k态占据而$k+q$态未占据时上述函数才非零.因此,我们可以理解为费米球内处于k态的电子在吸收能量ω的情况下从k态跃迁至费米球外未被占据的$k+q$态,同时在k留一个空位,即空穴.ω 就是这个粒子−空穴激发的能量.显然,对于固定的q,ω的最大值为$\omega_{max}=\frac{q^2}{2m}+\frac{|k||q|}{m}$而最小值为$\frac{q^2}{2m}-\frac{|k||q|}{m}$,注意到激发能量非负则$\omega_{min}=\max(0,\frac{q^2}{2m}-\frac{|k||q|}{m})$. 注意到$k$ 最大值为k_F, 那么以q为横轴,ω为纵轴的色散图中由曲线$\omega=\frac{q^2}{2m}+\frac{k_F|q|}{m}$,$\omega=\max(0,\frac{q^2}{2m}-\frac{k_F|q|}{m})$以及$\omega=0$所围成的区域有粒子−空穴激发. (图2.9)

进一步,回忆先前提到的介电函数与电荷极化率的关系$\varepsilon(q)=1+\frac{4\pi e^2}{q^2}\chi_c(q)$,(这里的电荷极化率$\chi_c$包含对自旋的求和)对于有限频率的外势,则有[56]

$$\frac{1}{\varepsilon(q,\omega)}=\frac{1}{1+\frac{4\pi e^2}{q^2}\chi_c^R(q,\omega)} \tag{2.383}$$

当分母为零时,介电函数为零,此时一个弱的外电场将会诱导出巨大的总电场,这说明系统存在一种新的激发模式.这个激发模式的色散由$1+\frac{4\pi e^2}{q^2}\mathrm{Re}\chi_c^R(q,\omega)=0$

[56]我们也可以通过图2.8的Feynman图求和得到同样的结果.文献中称为环形图近似.

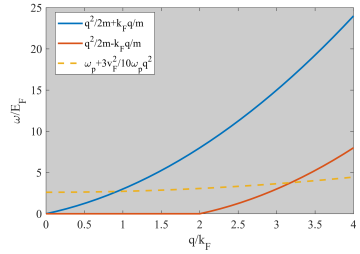


Figure 2.9: Coulomb电子气的两类激发模式.

定出,而其阻尼或者说衰变率由$\mathrm{Im}\chi_c^R(q,\omega)$给出.在长波$q=2\pi/\lambda\to 0$ 和高频下极限($\omega >> |\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k|$)下,可以解出三维系统的激发模式是色散为如下形式的等离激元:

$$\omega(q)=\omega_p+\frac{3v_F^2}{10\omega_p}q^2 \tag{2.384}$$

这里$v_F=k_F/m$,$\omega_p=\sqrt{4\pi e^2 n/m}$是等离子振荡频率,对简单金属其对应的能量量级为$10eV$.显然,等离激元是很高能的激发模式,在低能下我们只需要考虑粒子−空穴激发即可.图2.9虚线给出了等离激元的色散关系,注意到当色散关系进入粒子−空穴激发区时,$\mathrm{Im}\chi_c^R(q,\omega)$ 非零,说明在此区域等离激元会耗散为电子−空穴激发,因此在该区域等离激元并不是定义良好的激发模式.

为了完整性,我们下面给出上述等离激元激发谱的推导,对细节不感兴趣的读者可以跳过这一段.

等离激元激发谱$\omega(q)$的计算

首先,我们把$\varepsilon(q,\omega)$中的电荷极化函数χ_c用自由电子体系的结果χ_0代替,然后对χ_0我们有

$$\begin{aligned}\chi_0(q,\omega) &= \frac{1}{V}\sum_{k,\sigma}\frac{f_F(\varepsilon_{k+q})-f_F(k)}{\omega+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}}\\ &= \frac{1}{V}\sum_{k,\sigma}f_F(\varepsilon_k)\left[\frac{1}{\omega+\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k}-\frac{1}{\omega+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}}\right].\end{aligned}$$

然后,注意到电子的色散可以写成$\varepsilon_k=\frac{k^2-k_F^2}{2m}$,这样我们发现

$$\chi_0(q,\omega)=\frac{1}{V}\sum_{k,\sigma}f_F(\varepsilon_k)\left[\frac{1}{\omega+\frac{q^2-2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m}}-\frac{1}{\omega-\frac{q^2+2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m}}\right].$$

假设ω是上式分母中最大的量,因此我们可以做泰勒展开,即有

$$\frac{1}{\omega+\frac{q^2-2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m}}=\frac{1}{\omega}\frac{1}{1+\frac{q^2-2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m\omega}}=\frac{1}{\omega}\left(1-\frac{q^2-2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m\omega}+\ldots\right).$$

原激发类型	色散关系	数学结构	能量尺度
电子/空穴:个别激发	ε_k	$G(k,\omega)$的极点	低能激发,激发能可趋于零
等离激元:集体激发	$\omega(q)$	$\varepsilon(q,\omega)$的零点	高能激发,eV量级

Table 2.5: Coulomb电子气模型原激发的基本性质.

同理,

$$\frac{1}{\omega-\frac{q^2+2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m}}=\frac{1}{\omega}\frac{1}{1-\frac{q^2+2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m\omega}}=\frac{1}{\omega}\left(1+\frac{q^2+2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m\omega}+...\right).$$

把这些结果代入χ_0可得

$$\chi_0(q,\omega)=\frac{-2}{\omega}\frac{1}{V}\sum_{k,\sigma}f_F(\varepsilon_k)\frac{q^2-2\vec{k}\cdot\vec{q}}{2m\omega}+...$$

考虑零温极限,此时χ_0可以进一步化简为:

$$\begin{aligned}\chi_0(q,\omega) &= \frac{-4\pi}{\omega(2\pi)^3}\sum_\sigma\int_{-1}^{1}d\cos\theta\int_0^{k_F}k^2dk\frac{q^2-2kq\cos\theta}{2m\omega}\\ &= \frac{-4\pi}{\omega(2\pi)^3}\sum_\sigma\int_0^{k_F}k^2dk\frac{2q^2}{2m\omega}=\frac{-4\pi}{\omega(2\pi)^3}\sum_\sigma\frac{k_F^3}{3}\frac{2q^2}{2m\omega}\\ &= \frac{-3n}{2\omega}\sum_\sigma\frac{1}{3}\frac{2q^2}{2m\omega}=-\frac{nq^2}{m\omega^2}.\end{aligned}\tag{2.385}$$

把这个结果代入$\varepsilon(q,\omega)=0$就发现$\omega^2=\frac{4\pi ne^2}{m}\equiv\omega_p^2$.进一步,如果展开到$1/\omega^4$项就可以得到关于动量的依赖,也就是$\omega^2(q)=\omega_p^2+\frac{3q^2v_F^2}{5}$.

运动方程

从经典的角度来说,电子相对于均匀分布的正电背景发生移动就会有类似弹簧的线性恢复力,这样对电子而言其运动方程就是经典的谐振子方程,方程的解就是以频率ω_p振动的等离激元.假设每个电子相对于正电背景移动距离为x,这样会导致同方向的电场$E=4\pi nex$,[57]这样,作用于每个电子上的力就是$F=-eE=-4\pi ne^2x$. 由此我们发现电子的经典运动方程是$m\ddot{x}=F=-4\pi ne^2x$. 设$x(t)=x(0)e^{-i\omega t}$, 这样方程给出特征振荡频率为$\omega_p=\omega=\sqrt{\frac{4\pi ne^2}{m}}$.

而从量子的角度来看,我们发现等离激元是介电函数为零时的高能激发模式,这个模式实际上可以通过求解如下运动方程得到: [58]

$$\boxed{[\hat{H}_{el},\hat{\rho}_{kq}^\dagger]=\omega\hat{\rho}_{kq}^\dagger}\tag{2.386}$$

[57]利用高斯定理,我们知道长方体$xdydz$内的正电荷为$en(xdydz)$,其取值乘以4π(高斯单位制)等于电场在表面$dydz$通量,即有$Edydz=4\pi en(xdydz)$,化简就有$E=4\pi nex$.

[58]这类运动方程处理最早出现在Pines处理Coulomb电子气问题中.其一个重要应用是计算BCS超导体的RPA修正.[Anderson,Random-Phase Approximation in the Theory of Superconductivity,Phys.Rev.**112**,1900(1958).]

这里$\hat{H}_{el}$是Coulomb电子气系统的哈密顿量,$\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}=\hat{c}^{\dagger}_{k+q}\hat{c}_k$是电子−空穴对激发算符.我们可以计算这个对算符的对易关系:

$$[\hat{\rho}_{kq},\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q'}]=\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_{k+q}\hat{c}^{\dagger}_{k'+q'}\hat{c}_{k'}-\hat{c}^{\dagger}_{k'+q'}\hat{c}_{k'}\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_{k+q}=\delta_{k+q,k'+q'}\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_{k'}-\delta_{k,k'}\hat{c}^{\dagger}_{k'+q'}\hat{c}_{k+q} \tag{2.387}$$

我们发现对易后仍然是算符而非简单的常数,但若让上式右边对自由费米气体的基态做平均可得

$$[\hat{\rho}_{kq},\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q'}]=\delta_{q,q'}\delta_{k,k'}(\theta(k_F-|k|)-\theta(k_F-|k+q|)) \tag{2.388}$$

这样电子−空穴对激发算符在低温和低能下可以近似看成是玻色子.现在,我们计算对易关系$[\hat{H}_{el},\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}]$

$$\begin{aligned}[\hat{H}_{el},\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}] &= \omega_{kq}\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}+\frac{1}{2}\frac{4\pi e^2}{q^2}\left[(\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_k-\hat{c}^{\dagger}_{k+q}\hat{c}_{k+q})\sum_{k'}\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q}-\sum_{k'}\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q}(\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_k-\hat{c}^{\dagger}_{k+q}\hat{c}_{k+q})\right]\\ &+\frac{1}{2}\sum_{q'\neq q}\frac{4\pi e^2}{(q')^2}\left[(\hat{c}^{\dagger}_{k+q-q'}\hat{c}_k-\hat{c}^{\dagger}_{k+q}\hat{c}_{k+q'})\sum_{k'}\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q'}-\sum_{k'}\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q'}(\hat{c}^{\dagger}_{k+q-q'}\hat{c}_k-\hat{c}^{\dagger}_{k+q}\hat{c}_{k+q'})\right]\end{aligned}$$

显然,上式既包含$\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}$的线性部分也包含非线性部分.作为一个实际的近似,我们让上式中的费米子算符对自由费米气体取热力学平均,也就是用$\langle\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_k\rangle$代替$\hat{c}^{\dagger}_k\hat{c}_k$,这样$q'$ 部分自动为零,这在文献中称为无规相近似(Randon Phase Approximation,RPA)[59],而相应的简化结果是

$$[\hat{H}_{el},\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}]=\omega_{kq}\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}+2\frac{4\pi e^2}{q^2}(f_F(\varepsilon_k)-f_F(\varepsilon_{k+q}))\sum_{k'}\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q} \tag{2.389}$$

这里$\omega_{kq}=\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k$.可以看到,当Coulomb势为零,也就是我们面对自由电子气体时,运动方程是 $[\hat{H}_{el},\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}]=\omega_{kq}\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}=\omega\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}$ 这说明粒子−空穴对激发算符对应的色散就是$\omega=\omega_{kq}$,这也表明关于$\hat{\rho}_{kq}$ 的哈密顿量可以写成$\hat{H}=\sum_{kq}\omega_{kq}\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}\hat{\rho}_{kq}$,也就是一个近似的无相互作用玻色子系统.对于有相互作用的情况,我们有

$$2\frac{4\pi e^2}{q^2}(f_F(\varepsilon_k)-f_F(\varepsilon_{k+q}))\sum_{k'}\hat{\rho}^{\dagger}_{k'q}=(\omega-\omega_{kq})\hat{\rho}^{\dagger}_{kq} \tag{2.390}$$

两边除以$\omega-\omega_{kq}$并对k求和消去对激发算符可得

$$2\frac{4\pi e^2}{q^2}\sum_k\frac{f_F(\varepsilon_k)-f_F(\varepsilon_{k+q})}{\omega-\omega_{kq}}=1 \tag{2.391}$$

即$1+\frac{4\pi e^2}{q^2}\chi_c(q,\omega)=0$,这个方程决定了系统的激发模式,也就是电子- 空穴对激发和等离激元.

[59]Pines认识到RPA近似是任何多体理论中寻找集体模式的普遍方法.例如核物理中的巨偶极共振可视为强子−强子相互作用导致的无碰撞集体运动模式.

- 形如$[\hat{H}_{el}, \hat{\rho}^{\dagger}_{kq}] = \omega\hat{\rho}^{\dagger}_{kq}$ 形式的运动方程是求得相互作用系统激发模式的实用方法.如果把电子−空穴激发算符换成自旋密度算符或者激子算符,那么我们就可以研究自旋波激发和激子的激发谱.

- 如果把这里讨论的自由电子色散换成一般的色散关系,那么上述物理结果又会有什么样的变化呢?

- 如果保留RPA的基本形式并计入更多的高阶修正,一个简单的方式是所谓的局域场因子,例如可以把RPA形式的介电函数修正为 $\frac{1}{\varepsilon(q,\omega)} = \frac{1}{1+\frac{4\pi e^2}{q^2}G(q,\omega)\chi^R_c(q,\omega)}$,这里$G(q,\omega)$称为局域场,其代表高阶微扰过程的等效修正.[5]当然,最常用的情况是G为常数,如果再结合一些守恒条件就可以得到双粒子自洽形式(Two-Particle Self-Consistent). [60]

本章小结和进一步阅读

本章小结 二次量子化是描述量子多粒子系统的有效手段;平均场近似是处理量子多体系统的基本近似;Green函数是重要的多体系统计算工具;线性响应联系着物理真实与理论.

本章关键词 二次量子化;Fock空间;Coulomb电子气;Hartree-Fock近似;Lindhard介电函数;Friedel振荡;推迟Green函数;Lehmann谱表示;线性响应

进一步阅读 Lancaster和Blundell合著的《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》第二到第四章;P.Coleman的《Introduction to Many-Body Physics》第三章;Altland和Simons的《Condensed Matter Field Theory》第二章

[60] Vilk and Tremblay,Non-perturbative many-body approach to the Hubbard model and single-particle pseudogap,J.Phys.I France **7**,1309(1997)

附录

单体与两体算符二次量子化的细节

单体算符的二次量子化形式

首先考虑单体算符$\hat{\mathcal{O}}=\sum_{j=1}^{N}\hat{o}(x_j)=\sum_j\hat{o}^j$(例如动能),假设单粒子算符$\hat{o}^j$在单粒子态$\{|\lambda\rangle\}=\{|\lambda_1\rangle,|\lambda_2\rangle,...\}$下是对角的,此时有

$$\hat{\mathcal{O}}=\sum_j\sum_{\lambda'}\sum_{\lambda}|\lambda'\rangle\langle\lambda'|\hat{o}^j|\lambda\rangle\langle\lambda|=\sum_j\sum_{\lambda'}\sum_{\lambda}o^j_{\lambda,\lambda}\delta_{\lambda',\lambda}|\lambda'\rangle\langle\lambda|=\sum_j\sum_{\lambda}o^j_{\lambda,\lambda}|\lambda\rangle\langle\lambda|,\quad o^j_{\lambda,\lambda}=\langle\lambda|\hat{o}^j|\lambda\rangle \tag{2.392}$$

然后,对于Fock态中任意两个态有

$$\langle n'_{\lambda_1},n'_{\lambda_2},...|\hat{\mathcal{O}}|n_{\lambda_1},n_{\lambda_2},...\rangle=\sum_{\lambda}\langle n'_{\lambda_1},n'_{\lambda_2},...|\sum_j o^j_{\lambda,\lambda}|\lambda\rangle\langle\lambda|n_{\lambda_1},n_{\lambda_2},...\rangle$$

注意到$|\lambda\rangle=|1_\lambda\rangle$,也就是说$|\lambda\rangle\langle\lambda|$的作用是给出态$|n_{\lambda_1},n_{\lambda_2},...\rangle$中是否有一个粒子处于$|\lambda\rangle$态,而对于所有$j$的求和则进一步说明$N$个粒子中有多少个粒子处于$|\lambda\rangle$态,因此有

$$\langle n'_{\lambda_1},n'_{\lambda_2},...|\hat{\mathcal{O}}|n_{\lambda_1},n_{\lambda_2},...\rangle=\sum_{\lambda}\langle n'_{\lambda_1},n'_{\lambda_2},...|o_{\lambda,\lambda}n_\lambda|n_{\lambda_1},n_{\lambda_2},...\rangle=\langle n'_{\lambda_1},n'_{\lambda_2},...|\sum_\lambda o_{\lambda,\lambda}\hat{n}_\lambda|n_{\lambda_1},n_{\lambda_2},...\rangle$$

这里已经利用了全同粒子的矩阵元$o^j_{\lambda,\lambda}$是相同的,简记为$o_{\lambda,\lambda}$.

由于选取的左右Fock态是任意的,因此上式成立要求

$$\hat{\mathcal{O}}=\sum_\lambda o_{\lambda,\lambda}\hat{n}_\lambda=\sum_\lambda\langle\lambda|\hat{o}|\lambda\rangle\hat{a}^\dagger_\lambda\hat{a}_\lambda \tag{2.393}$$

而对于单粒子算符在相应基矢下非对角的情况,通过基矢变换可以得到

$$\hat{\mathcal{O}}=\sum_\lambda\sum_\alpha\sum_\beta\langle\lambda|\hat{o}|\lambda\rangle\langle\alpha|\lambda\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\langle\lambda|\beta\rangle\hat{a}_\beta=\sum_\alpha\sum_\beta\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\beta\sum_\lambda\langle\alpha|\lambda\rangle\langle\lambda|\hat{o}|\lambda\rangle\langle\lambda|\beta\rangle \tag{2.394}$$

回忆$\langle\lambda|\hat{o}|\lambda\rangle$实际上是由$\langle\lambda|\hat{o}|\lambda'\rangle\delta_{\lambda,\lambda'}$得到的,因此有

$$\hat{\mathcal{O}}=\sum_\alpha\sum_\beta\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\beta\langle\alpha|\sum_\lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|\hat{o}\sum_{\lambda'}|\lambda'\rangle\langle\lambda'|\beta\rangle=\sum_\alpha\sum_\beta\langle\alpha|\hat{o}|\beta\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\beta \tag{2.395}$$

即单体算符的二次量子化形式是

$$\boxed{\hat{\mathcal{O}}=\sum_\alpha\sum_\beta\langle\alpha|\hat{o}|\beta\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\beta} \tag{2.396}$$

对于粒子的动能以及外势项,如果选取位置空间$\{|x\rangle\}$作为基矢,那么这两者都是对角的,也就是有

$$\sum_\alpha\to\int d^dx,\quad\sum_\beta\to\int d^dy,\quad\hat{a}^\dagger_\alpha\to\hat{\psi}^\dagger(x),\quad\hat{a}_\beta\to\hat{\psi}(y),\quad\langle\alpha|\hat{o}|\beta\rangle\to\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\delta(x-y) \tag{2.397}$$

$$H=\sum_j\left[-\frac{\nabla_j^2}{2m}+U(x_j)\right]\to\hat{H} = \int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\delta(x-y)\hat{\psi}(y)$$
$$= \int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right] \tag{2.398}$$

我们知道粒子密度$\rho(x)=\sum_j\delta(x-x_j)$,那么根据二次量子化的规则可知

$$\hat{\rho}(x)=\int d^dx'\hat{\psi}^\dagger(x')\delta(x-x')\hat{\psi}(x')=\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \tag{2.399}$$

显然$\hat{\rho}(x)=\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)$可以解释为粒子密度算符,其物理意义是在$x$处的粒子密度,把粒子密度算符对全空间积分可得系统的总粒子数算符,

$$\hat{N}=\int d^dx\hat{\rho}(x)=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \tag{2.400}$$

两体算符的二次量子化形式

考虑一个对称的两体相互作用势$V(x_j,x_m)=V(x_m,x_j)$,当把这种相互作用势作用于位置空间中的多体态时有

$$\hat{V}|x_1,x_2,...,x_N\rangle=\sum_{j<m}V(x_j,x_m)|x_1,x_2,...,x_N\rangle=\frac{1}{2}\sum_{j\neq m}V(x_j,x_m)|x_1,x_2,...,x_N\rangle \tag{2.401}$$

根据单体算符的二次量子化形式,可以猜测$\hat{V}$对应的二次量子化形式应是

$$\boxed{\hat{V}=\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x,y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x),\quad (x\neq y)} \tag{2.402}$$

要证明这个结果,只需要把这个二次量子化形式作用到$|x_1,x_2,...,x_N\rangle$,看看是否得到$\frac{1}{2}\sum_{j\neq m}V(x_j,x_m)|x_1,x_2,...,x_N\rangle$。

$$\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x,y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)|x_1,x_2,...,x_N\rangle$$
$$= \frac{1}{2}\int d^dx\int d^dyV(x,y)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(x_N)\hat{\psi}^\dagger(x_{N-1})...\hat{\psi}^\dagger(x_1)|0\rangle$$

通过不断使用场算符的对易关系,我们可以把$\hat{\psi}(x)$移动到最右边,此时与真空态$|0\rangle$ 作用恰好湮灭包含$\hat{\psi}(x)$的项,剩下的项具有如下形式

$$\sum_{j=1}^N(-1)^{N-j}\delta(x-x_j)\hat{\psi}^\dagger(x_N)\hat{\psi}^\dagger(x_{N-1})...\hat{\psi}^\dagger(x_1)|0\rangle \tag{2.403}$$

这里以费米子为例,玻色子的情况由于没有-1因子而更为简单.其中每一项都缺少相应的场算符$\hat{\psi}^\dagger(x_j)$.注意到对x的积分恰好使得剩下的$\hat{\psi}^\dagger(x)$变成$\hat{\psi}^\dagger(x_j)$,那么把$\hat{\psi}^\dagger(x_j)$向右移动到相应位置就重新生成了多体态$|x_1,x_2,...,x_N\rangle$,并且同时也抵

消了因子$(-1)^{N-j}$,这样有

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x,y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)|x_1,x_2,...,x_N\rangle \\ = & \frac{1}{2}\int d^dy\sum_j V(x_j,y)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)|x_1,x_2,...,x_N\rangle, \quad (x_j\neq y) \end{aligned} \tag{2.404}$$

对$\hat{\psi}^\dagger(y),\hat{\psi}(y)$也采取之前一样的操作,并且对$y$积分可得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x,y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)|x_1,x_2,...,x_N\rangle \\ = & \frac{1}{2}\sum_{j,m} V(x_j,x_m)|x_1,x_2,...,x_N\rangle, \quad (x_j\neq x_m) \\ = & \frac{1}{2}\sum_{j\neq m} V(x_j,x_m)|x_1,x_2,...,x_N\rangle \end{aligned} \tag{2.405}$$

由此证明上述的二次量子化形式是正确的.进一步,一般的两体算符则有如下形式

$$\boxed{\hat{V}=\sum_{\alpha,\beta,\delta,\gamma}\langle\alpha\beta|v|\delta\gamma\rangle\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}^\dagger_\beta\hat{a}_\lambda\hat{a}_\delta} \tag{2.406}$$

电流密度的二次量子化形式

电流与电流密度

在经典电磁学中,电流I定义为通过所考虑系统的截面的电荷总数,而单位时间内通过单位横截面的电荷总数则定义了电流密度j_e.根据j_e的定义,我们知道对于粒子密度为n,粒子带电为q,粒子速度为v的系统,其电流密度为$j_e=nqv$,写成矢量形式即为$\vec{j}_e=nq\vec{v}$.更一般地,对于单位体积ΔV内粒子,若每个粒子带电为q_i,速度为$\vec{v}_i$,则电流密度为

$$\vec{j}_e=\frac{1}{\Delta V}\sum_i q_i\vec{v}_i \tag{2.407}$$

更一般地,因此$\vec{j}_e$在空间中可以存在变化,则其依赖于空间坐标,即

$$\vec{j}_e(x)=\frac{1}{\Delta V}\sum_i q_i\vec{v}_i(x_i) \tag{2.408}$$

这里$\vec{j}_e(x)$反映了在空间位置x处单位时间内通过单位横截面积的电荷数,其取值依赖于x 附近每个粒子的电荷q_i和速度$\vec{v}_i$.

下面我们考虑仅由电子组成的系统,这样所有粒子的电荷都相同,即$q_i=-e$,那么有

$$\vec{j}_e(x)=\frac{-e}{m}\frac{1}{\Delta V}\sum_i\vec{p}_i(x_i) \tag{2.409}$$

这里$m,\vec{p}_i$分别是电子的质量和动量.进一步,根据分析力学,我们知道,在有电磁场存在时,电子的动量实际上应替换为动量,即$\vec{p}\to\vec{p}+e\vec{A}$,这样电流密度为

$$\vec{j}_e(x)=\frac{-e}{m}\frac{1}{\Delta V}\sum_i(\vec{p}_i(x_i)+\vec{A}(x_i)). \tag{2.410}$$

接下来,我们尝试把电流密度推广到量子力学的情形.在量子力学中,每个电子的动量由动量算符在粒子所在状态下的平均决定,即$\vec{p}=\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle=\langle\psi|(-i\hbar\nabla)|\psi\rangle$,同理有$\vec{A}=\langle\psi|\hat{\vec{A}}|\psi\rangle$.注意到这里求得的$\vec{p}$和$\vec{A}$都是在宏观小微观大的体积单元做的,简单起见可以取$\delta V$,这个体积可以认为是波函数实际积分的区域.因此有

$$\vec{j}_e(x)=\frac{-e}{m}\frac{1}{\Delta V}\sum_i\langle\psi_i|(\hat{p}+\hat{\vec{A}})|\psi_i\rangle. \tag{2.411}$$

这里我们设第i个电子处于的状态为$|\psi_i\rangle$.但是注意到电子由于Pauli 原理,在每个状态只能占据一个电子,因此我们对i求和是对不同状态求,即$|\psi_i\rangle,|\psi_j\rangle$.进一步,如果只要求基态,若有$N$电子,则求和只涉及最低能量的$N$个态的求和,即有

$$\vec{j}_e(x)=\frac{-e}{m}\frac{1}{\Delta V}\sum_{i=1}^{N}\langle\psi_i|(\hat{p}+\hat{\vec{A}})|\psi_i\rangle. \tag{2.412}$$

而在有限温度时,电子占据每个态的概率由费米分布$f_F(x)$给出,则有

$$\vec{j}_e(x)=\frac{-e}{m}\frac{1}{\Delta V}\sum_i f_F(\varepsilon_i-\mu)\langle\psi_i|(\hat{p}+\hat{\vec{A}})|\psi_i\rangle. \tag{2.413}$$

这里ε_i是态$|\psi_i\rangle$的能量平均值.在实际计算中,我们通常设$|\psi_i\rangle$是电子单粒子哈密顿量的本征态.同时对电子数的求和也转变为对所有态的求和,此时电子数由$N=\sum_i f_F(\varepsilon_i-\mu)$给出.($\mu$为化学势)需要指出,以上公式仅对无相互作用电子系统成立,对有相互作用的情况,我们需要采用二次量子化形式来改写.最后,对于宏观均匀的系统,以上公式也可写为

$$\boxed{\vec{j}_e=\frac{-e}{m}\frac{1}{\Delta V}\sum_i f_F(\varepsilon_i-\mu)\langle\psi_i|(\hat{p}+\hat{\vec{A}})|\psi_i\rangle.} \tag{2.414}$$

电流密度的二次量子化形式

如果我们关心系统的输运性质,例如有限频率的光学电导或者温度依赖的电阻,那么就需要知道电流密度的二次量子化形式.对于上述哈密顿量,可以利用流守恒条件$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=0$来得到相应的电流密度公式.[61]注意到粒子密度算符对时间的导数实际上可以用Heisenberg运动方程求得,那么剩下的问题就是计算相应

[61]在经典层次上,流守恒是系统规范不变性的直接结果.数学上可以通过Noether定理直接证明.在量子世界中,流守恒来自微观电磁相互作用的规范不变性,数学上是电磁相互作用顶角满足Ward-Takashashi恒等式的结果.具体证明可以参考量子电动力学的详细讨论.

的对易关系,也就是$[\hat{\psi}(x),\hat{H}],[\hat{\psi}^\dagger(x),\hat{H}]$.注意到系统的二次量子化哈密顿量为

$$\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x) \tag{2.415}$$

那么,

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}(x),\hat{H}] &= \int d^dx'[\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(x')]\left(-\frac{\nabla^2_{x'}}{2m}+U(x')\right)\hat{\psi}(x')+\frac{1}{2}\int d^dx'ld^dy[\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(x')\hat{\psi}^\dagger(y)]V(x'-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x'\\
&= \int d^dx'\delta(x-x')\left(-\frac{\nabla^2_{x'}}{2m}+U(x')\right)\hat{\psi}(x')+\frac{1}{2}\int d^dx'd^dy(\delta(x-x')\hat{\psi}^\dagger(y)+\hat{\psi}^\dagger(x')\delta(x-y))V(x'-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x'\\
&= \left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}(x)+\int d^dyV(x-y)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)
\end{aligned}$$

对于$[\hat{\psi}^\dagger(x),\hat{H}]$,注意到$[\hat{\psi}(x),\hat{H}]^\dagger=[\hat{H},\hat{\psi}^\dagger(x)]=-[\hat{\psi}^\dagger(x),\hat{H}]$, 那么有

$$[\hat{\psi}^\dagger(x),\hat{H}]=-\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}^\dagger(x)-\int d^dyV(x-y)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)$$

因此,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\hat{\rho}(x)}{\partial t} &= \frac{\partial\hat{\psi}^\dagger(x)}{\partial t}\hat{\psi}(x)+\hat{\psi}^\dagger(x)\frac{\partial\hat{\psi}(x)}{\partial t}=\frac{1}{i}\left[-\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\hat{\psi}^\dagger(x)\right)\hat{\psi}(x)+\hat{\psi}^\dagger(x)\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\hat{\psi}(x)\right)\right]\\
&= -\frac{1}{2mi}\left[\nabla(\hat{\psi}^\dagger(x)\nabla\hat{\psi}(x))-\nabla(\nabla(\hat{\psi}^\dagger(x))\hat{\psi}(x))\right]=-\frac{\nabla}{2mi}\left[\hat{\psi}^\dagger(x)\nabla\hat{\psi}(x)-\nabla(\hat{\psi}^\dagger(x))\hat{\psi}(x)\right]\\
&= -\nabla\cdot\hat{\vec{j}}(x)
\end{aligned}$$

这样最终得到粒子流密度的表达式

$$\boxed{\hat{\vec{j}}(x)=\frac{1}{2mi}\left[\hat{\psi}^\dagger(x)\nabla\hat{\psi}(x)-\nabla(\hat{\psi}^\dagger(x))\hat{\psi}(x)\right]} \tag{2.416}$$

而电流密度则是在$\hat{\vec{j}}(x)$基础上乘以电荷q即可得到.

- 在推导流密度公式时,我们发现一般的两体相互作用以及外势是否存在并不影响流密度的形式,因此上述公式是普遍成立的,与是否有相互作用无关.

当系统存在外电磁场$(\phi,\vec{A})$时,系统的哈密顿量可以写为[62]

$$\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[\frac{(-i\nabla-q\vec{A})^2}{2m}+U(x)-q\phi(x)\right]\hat{\psi}(x)+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x) \tag{2.417}$$

q为系统粒子的所携带的电荷.我们知道在选择Coulomb规范时[63],$(-i\nabla-q\vec{A})^2$可化为简单的形式,即有

$$(-i\nabla-q\vec{A})^2=-\nabla^2-2qA\cdot(-i\nabla)+q^2\vec{A}^2 \tag{2.418}$$

[62] P.Coleman书的10.1节

[63] $\nabla\cdot\vec{A}=0$, 这里可以看到凝聚态物理中普遍选择Coulomb规范的重要性.

那么哈密顿量的单粒子部分是

$$\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)-q\phi(x)+\frac{q^2\vec{A}^2}{2m}+\frac{-q\vec{A}\cdot(-i\nabla)}{m}\right]\hat{\psi}(x) \tag{2.419}$$

那么有

$$\frac{\partial\hat{\rho}(x)}{\partial t}=\frac{1}{i}\left[\frac{1}{2m}\nabla(\nabla\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{)}\psi(x)-\hat{\psi}^\dagger(x)\nabla\hat{\psi}(x))+\frac{iq\vec{A}}{m}\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\right] \tag{2.420}$$

因此粒子流密度的表达式为

$$\hat{\vec{j}}(x)=\frac{1}{2mi}\left[\hat{\psi}^\dagger(x)\nabla\hat{\psi}(x)-\nabla(\hat{\psi}^\dagger(x))\hat{\psi}(x)\right]-\frac{q\vec{A}}{m}\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \tag{2.421}$$

而在电磁场存在时最终的电流密度为

$$\boxed{\hat{\vec{j}}_e(x)=\frac{q}{2mi}\left[\hat{\psi}^\dagger(x)\nabla\hat{\psi}(x)-\nabla(\hat{\psi}^\dagger(x))\hat{\psi}(x)\right]-\frac{q^2\vec{A}}{m}\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)=\hat{\vec{j}}_e^{par}+\hat{\vec{j}}_e^{dia}}$$

在文献中第一项$\hat{\vec{j}}_e^{par}$称为顺磁流,第二项$\hat{\vec{j}}_e^{dia}$则成为抗磁流.对于非超导体系,我们研究的电流或者想要计算的电导由第一部分贡献,而对于超导系统,我们必须考虑第二项的效应.

- 注意到$\hat{\vec{j}}_e^{par},\hat{\vec{j}}_e^{dia}$是非规范不变的,但是它们的和$\hat{\vec{j}}_e^{par}+\hat{\vec{j}}_e^{dia}$保持规范不变.换句话说,真正具有物理意义的电流密度是抗磁流和顺磁流之和.
- 当然,在具体的规范下,比如Coulomb规范下,抗磁流和顺磁流都是具有物理意义的.前者代表导体的抗磁响应而后者对金属中电流的衰减负责.

最后,我们可以把包含电磁场的哈密顿量写为更实用的形式,即流–场耦合形式(类似于相对论中的$-qJ_\mu A^\mu$)

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\int d^dx\left(\hat{\psi}^\dagger(x)\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)-q\phi(x)\hat{\rho}(x)-q\hat{\vec{j}}\cdot\vec{A}\right)\\&\quad+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\end{aligned} \tag{2.422}$$

热力学势与Luttinger-Ward泛函

如果我们知道系统的虚频/时Green函数,那么系统的热力学势/自由能可以由Green函数直接表示,这对于相互作用系统的研究至关重要,其结果就是著名的Luttinger-Ward泛函.在这里,我们将推导Luttinger-ward泛函的基本形式.

首先,考虑系统的哈密顿量是$H=H_0+V$,一般H_0是无相互作用部分而V代表相互作用部分.其对应的配分函数和热力学势是$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta H},\Omega=-T\ln\mathcal{Z}$.当$V=0$时,则有$\mathcal{Z}_0=\mathrm{Tr}e^{-\beta H_0},\Omega_0=-T\ln\mathcal{Z}_0$.现在,考虑给$V$项加上一个参数$\lambda$,即有

$$V(\lambda)=\lambda V,\quad H(\lambda)=H_0+V(\lambda) \tag{2.423}$$

这样相应的配分函数记作$Z(\lambda)=\mathrm{Tr}e^{-\beta H(\lambda)}$.然后对$Z(\lambda)$求导可得

$$\frac{\partial Z(\lambda)}{\partial\lambda}=\mathrm{Tr}e^{-\beta H(\lambda)}(-\beta)\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}=-\beta\mathrm{Tr}e^{-\beta H(\lambda)}\frac{\partial V(\lambda)}{\partial\lambda} \tag{2.424}$$

因此

$$\frac{\partial\ln\mathcal{Z}(\lambda)}{\partial\lambda}=\mathcal{Z}^{-1}(\lambda)\frac{\partial Z(\lambda)}{\partial\lambda}=-\beta\frac{\mathrm{Tr}e^{-\beta H(\lambda)}\frac{\partial V(\lambda)}{\partial\lambda}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta H(\lambda)}}\equiv-\beta\left\langle\frac{\partial V(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_\lambda \tag{2.425}$$

对上式左右两边积分有

$$\int_0^1 d\lambda\frac{\partial\ln\mathcal{Z}(\lambda)}{\partial\lambda}=-\beta\int_0^1 d\lambda\left\langle\frac{\partial V(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_\lambda \tag{2.426}$$

这样可得

$$\overbrace{-\frac{1}{\beta}\ln\mathcal{Z}(\lambda=1)}^{=\Omega}-\overbrace{-\frac{1}{\beta}\ln\mathcal{Z}(\lambda=0)}^{=\Omega_0}=\int_0^1 d\lambda\left\langle\frac{\partial V(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_\lambda \tag{2.427}$$

注意到$\frac{\partial V(\lambda)}{\partial\lambda}=\frac{\partial V}{\partial\lambda}=\frac{1}{\lambda}V(\lambda)$,则有

$$\boxed{\Omega-\Omega_0=\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\langle V(\lambda)\rangle_\lambda} \tag{2.428}$$

我们看到相互作用系统的热力学势可以用无相互作用的热力学势以及相互作用能的积分表示.让我们考虑一个无自旋的费米子系统,即

$$H_0=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x),\ V=\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dyV(x-y)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)$$

这样

$$\langle V(\lambda)\rangle_\lambda=\frac{\lambda}{2}\int d^dx\int d^dyV(x-y)\langle\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\rangle_\lambda$$

为了计算$\langle\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\rangle_\lambda$,我们考虑单粒子Green函数$\lim_{\tau'\to\tau+0^+}G^\lambda(x,\tau;x',\tau')=-\lim_{\tau'\to\tau+0^+}\langle T_\tau\hat{\psi}(x,\tau)\hat{\psi}^\dagger(x',\tau')\rangle_\lambda=\lim_{\tau'\to\tau+0^+}\langle\hat{\psi}^\dagger(x',\tau')\hat{\psi}(x,\tau)\rangle_\lambda$.由于

$$\partial_\tau\hat{\psi}(x,\tau)=[H(\lambda),\hat{\psi}(x,\tau)]=-\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x,\tau)-\lambda\int d^dyV(x-y)\hat{\psi}^\dagger(y,\tau)\hat{\psi}(y,\tau)\hat{\psi}(x,\tau) \tag{2.429}$$

这样

$$\begin{aligned}\lim_{\tau'\to\tau+0^+}\partial_\tau G^\lambda(x,\tau;x',\tau') &= -\lim_{\tau'\to\tau+0^+}\langle\hat\psi^\dagger(x',\tau')\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat\psi(x,\tau)\rangle_\lambda\\ &- \lim_{\tau'\to\tau+0^+}\lambda\int d^dyV(x-y)\langle\hat\psi^\dagger(x',\tau')\hat\psi^\dagger(y,\tau)\hat\psi(y,\tau)\hat\psi(x,\tau)\rangle_\lambda\\ &= -\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\lim_{\tau'\to\tau+0^+}\langle\hat\psi^\dagger(x',\tau')\hat\psi(x,\tau)\rangle_\lambda\\ &- \lim_{\tau'\to\tau+0^+}\lambda\int d^dyV(x-y)\langle\hat\psi^\dagger(x',\tau')\hat\psi^\dagger(y,\tau)\hat\psi(y,\tau)\hat\psi(x,\tau)\rangle_\lambda\\ &= -\left[\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\lim_{\tau'\to\tau+0^+}G^\lambda(x,\tau;x',\tau')\\ &- \lambda\int d^dyV(x-y)\langle\hat\psi^\dagger(x',\tau)\hat\psi^\dagger(y,\tau)\hat\psi(y,\tau)\hat\psi(x,\tau)\rangle_\lambda\end{aligned} \tag{2.430}$$

即有

$$\lambda\int d^dyV(x-y)\langle\hat\psi^\dagger(x',\tau)\hat\psi^\dagger(y,\tau)\hat\psi(y,\tau)\hat\psi(x,\tau)\rangle_\lambda = -\lim_{\tau'\to\tau+0^+}\left(\partial_\tau+\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right)G^\lambda(x,\tau;x',\tau').$$

上式两边取$x'\to x$的极限并对x积分就得到

$$2\langle V(\lambda)\rangle_\lambda = -\int d^dx\lim_{x'\to x,\tau'\to\tau+0^+}\left(\partial_\tau+\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right)G^\lambda(x,\tau;x',\tau') \tag{2.431}$$

这说明相互作用能确实能够用单粒子Green函数表示.结合$\Omega=\Omega_0+\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\langle V(\lambda)\rangle_\lambda$可得

$$\boxed{\Omega=\Omega_0-\frac{1}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d^dx\lim_{x'\to x,\tau'\to\tau+0^+}\left(\partial_\tau+\frac{-\nabla^2}{2m}+U(x)\right)G^\lambda(x,\tau;x',\tau')}$$

对于平移不变的系统,我们有$U(x)=0$,然后对Green函数做傅里叶变换有$G^\lambda(x,\tau;x',\tau')=T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{ik(x-x')-i\omega_n(\tau-\tau')}G^\lambda(k,\omega_n)$:

$$\Omega=\Omega_0-\frac{V}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(-i\omega_n+\frac{k^2}{2m}\right)e^{i\omega_n0^+}G^\lambda(k,\omega_n) \tag{2.432}$$

利用Dyson方程$G^\lambda(k,\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\frac{k^2}{2m}-\Sigma^\lambda(k,\omega_n)}$则有

$$\begin{aligned}\Omega &= \Omega_0+\frac{V}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{i\omega_n0^+}\frac{i\omega_n-\frac{k^2}{2m}}{i\omega_n-\frac{k^2}{2m}-\Sigma^\lambda(k,\omega_n)}\\ &= \Omega_0+\frac{V}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{i\omega_n0^+}\left(1+\frac{\Sigma^\lambda(k,\omega_n)}{i\omega_n-\frac{k^2}{2m}-\Sigma^\lambda(k,\omega_n)}\right)\\ &= \Omega_0+\frac{V}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{i\omega_n0^+}\left(1+\Sigma^\lambda(k,\omega_n)G^\lambda(k,\omega_n)\right)\end{aligned} \tag{2.433}$$

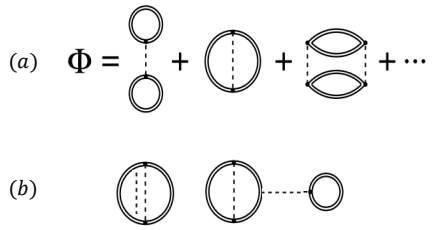


Figure 2.10: (a)Φ所包含的骨架图;(b)由于额外的部分可以归并为自能,因此这两个图为非骨架图.虚线表示裸相互作用(没有修正)而双实线表示相互作用修正后的Green 函数G.

注意到$T\sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} = 0$,那么

$$\boxed{\Omega = \Omega_0 + \frac{V}{2}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} T\sum_{\omega_n}\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d} e^{i\omega_n 0^+}\Sigma^\lambda(k,\omega_n)G^\lambda(k,\omega_n)} \tag{2.434}$$

为了计算量子多体系统平衡态的热力学性质,Luttinger和Ward构造了下面的泛函 [64]

$$\boxed{\tilde{\Omega} = -T\sum_n\sum_k e^{i\omega_n 0^+}\left[\ln(-G^{-1}(k,\omega_n))) + \Sigma(k,i\omega_n)G(k,i\omega_n)\right] + \Phi} \tag{2.435}$$

这里$G(k,i\omega_n) = (i\omega_n - \varepsilon_k - \Sigma(k,\omega_n))^{-1}$是电子的Green函数,$\varepsilon_k$是无相互作用时电子的色散,$\Sigma(k,i\omega_n)$是电子的自能函数.$\Phi[G]$就是Luttinger-Ward泛函,假设$\Phi$可通过Feynman图微扰论获得,那么$\Phi$便包含所有闭合的骨架图.(图2.10[65])

关于Φ的一个形式化的表示是:

$$\Phi = T\sum_{\omega_n}\sum_{\nu}\frac{1}{2\nu}\Sigma_\nu(k,\omega_n)G(k,\omega_n) \tag{2.436}$$

这里$\Sigma_\nu(k,\omega_n)$是Feynman图形展开中的第ν阶自能,例如图2.10(a)的前两个图便是一阶自能$\Sigma_{\nu=1}$而第三个图是二阶自能$\Sigma_{\nu=2}$.现在,我们假设$\Phi[G]$对G的变分满足如下关系,即

$$\frac{\delta\Phi}{\delta G(k,\omega_n)} = T\sum_\nu \Sigma_\nu(k,\omega_n) = T\Sigma(k,\omega_n) \tag{2.437}$$

这个关系说明泛函$\Phi[G]$对某个固定G的变分就得到自能函数Σ.

[64] Luttinger and Ward, Ground-State Energy of a Many-Fermion System.II, Phys.Rev. **118**,1417(1960).

[65] [Ortloff,Balzer,Potthoff,Non-perturbative conserving approximations and Luttinger's sum rule,Eur.Phys.J.B **58**,37(2007)]骨架图指的是那些不明确包含自能图形的Feynman图.

进一步,我们可以证明$\frac{\delta\tilde{\Omega}}{\delta\Sigma}=0$,即有

$$\begin{aligned}\frac{\delta\tilde{\Omega}}{\delta\Sigma(k,\omega_n)} &= -T\frac{\delta}{\delta\Sigma(k,\omega_n)}\left[\ln(-G^{-1}(k,\omega_n)))+\Sigma(k,i\omega_n)G(k,i\omega_n)\right]+\frac{\delta\Phi}{\delta\Sigma(k,\omega_n)}\\ &= -T\left[\frac{-1}{G(k,\omega_n)}\frac{\delta G(k,\omega_n)}{\delta\Sigma(k,\omega)}+G(k,i\omega_n)+\Sigma(k,i\omega_n)\frac{\delta G(k,i\omega_n)}{\delta\Sigma(k,\omega_n)}\right]+\frac{\delta\Phi}{\delta G(k,\omega_n)}\frac{\delta G(k,\omega_n)}{\delta\Sigma(k,\omega_n)}\\ &= -T\left[\frac{-1}{G(k,\omega_n)}G^2(k,\omega_n)+G(k,i\omega_n)\right]-T\Sigma(k,i\omega_n)\frac{\delta G(k,i\omega_n)}{\delta\Sigma(k,\omega_n)}+T\Sigma(k,\omega_n)\frac{\delta G(k,\omega_n)}{\delta\Sigma(k,\omega_n)}\\ &= 0\end{aligned} \tag{2.438}$$

这说明对于任意的自能变化,$\tilde{\Omega}$总是稳定的.

最后,让我们证明$\tilde{\Omega}$事实上等价于热力学势Ω,即$\tilde{\Omega}=\Omega$.让我们假设相互作用势乘上了一个参数$\lambda(V\to\lambda V)$,那么$G,\Sigma,\Phi,\tilde{\Omega}$都成为$\lambda$的函数,即有

$$\tilde{\Omega}(\lambda)=-T\sum_n\sum_k e^{i\omega_n 0^+}\left[\ln(-(G^\lambda(k,\omega_n))^{-1}))+\Sigma^\lambda(k,i\omega_n)G^\lambda(k,i\omega_n)\right]+\Phi(\lambda) \tag{2.439}$$

注意到Luttinger-Ward泛函$\Phi(\lambda)$中第ν阶自能涉及ν个相互作用,因此有λ^ν的明确依赖,即

$$\Phi(\lambda)=T\sum_{\omega_n}\sum_\nu\frac{1}{2\nu}\lambda^\nu\tilde{\Sigma}^\lambda_\nu(k,\omega_n)G^\lambda(k,\omega_n) \tag{2.440}$$

这里$\tilde{\Sigma}^\lambda_\nu$表示拿掉明确依赖$\lambda^\nu$后的自能,换句话说$\tilde{\Omega}$对参数$\lambda$的明确依赖包含在$\Phi$中.因此,

$$\frac{d\tilde{\Omega}(\lambda)}{d\lambda}=\left(\frac{\partial\tilde{\Omega}(\lambda)}{\partial\lambda}\right)_\Sigma+\left(\frac{\partial\tilde{\Omega}(\lambda)}{\partial\Sigma}\right)_\lambda\frac{\partial\Sigma}{\partial\lambda} \tag{2.441}$$

这里我们把$\tilde{\Omega}$看作是自能的泛函,当然看作Green函数的泛函其结果是一样的.注意到对于固定的λ有$\frac{\delta\tilde{\Omega}}{\delta\Sigma}=0$,那么

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{\Omega}(\lambda)}{d\lambda} &= \left(\frac{\partial\tilde{\Omega}(\lambda)}{\partial\lambda}\right)_\Sigma=\left(\frac{\partial\Phi(\lambda)}{\partial\lambda}\right)_\Sigma=T\sum_{\omega_n}\sum_\nu\frac{1}{2\nu}\nu\lambda^{\nu-1}\tilde{\Sigma}^\lambda_\nu(k,\omega_n)G^\lambda(k,\omega_n)\\ &= \frac{1}{2\lambda}T\sum_{\omega_n}\sum_\nu\lambda^\nu\tilde{\Sigma}^\lambda_\nu(k,\omega_n)G^\lambda(k,\omega_n)=\frac{1}{2\lambda}T\sum_{\omega_n}\Sigma^\lambda(k,\omega_n)G^\lambda(k,\omega_n)\end{aligned}$$

回忆热力学势可写成($V\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\to\sum_k$)

$$\Omega(\lambda=1)=\Omega_0+\frac{1}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}T\sum_{\omega_n}e^{i\omega_n 0^+}\Sigma^\lambda(k,\omega_n)G^\lambda(k,\omega_n) \tag{2.442}$$

对于一般的λ依赖则是

$$\Omega(\lambda)=\Omega_0+\frac{1}{2}\int_0^\lambda\frac{d\lambda'}{\lambda'}T\sum_{\omega_n}e^{i\omega_n 0^+}\Sigma^{\lambda'}(k,\omega_n)G^{\lambda'}(k,\omega_n) \tag{2.443}$$

因此

$$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda}=\frac{1}{2\lambda}T\sum_{\omega_n}e^{i\omega_n 0^+}\Sigma^{\lambda}(k,\omega_n)G^{\lambda}(k,\omega_n) \tag{2.444}$$

这样我们发现$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda}=\frac{d\tilde{\Omega}(\lambda)}{d\lambda}$.两边积分可得

$$\Omega(\lambda=1)-\Omega(\lambda=0)=\tilde{\Omega}(\lambda=1)-\tilde{\Omega}(\lambda=0) \tag{2.445}$$

而$\Omega(\lambda=0)=\Omega_0,\Omega(\lambda=1)=\Omega,\tilde{\Omega}(\lambda=1)=\tilde{\Omega}$,因此只要证明$\tilde{\Omega}(\lambda=0)=\Omega_0$就能得到$\Omega=\tilde{\Omega}$.对于$\Omega_0=\mathrm{Tr}e^{-\beta H_0}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\sum_k(\varepsilon_k-\mu)}=-T\sum_k\ln(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-mu)})$.让我们计算$\tilde{\Omega}(\lambda=0)$, 由于$\lambda=0$,因此自能为零而$G$成为自由电子Green函数$G^{(0)}=(i\omega_n-(\varepsilon_k-\mu))^{-1}$,

$$\tilde{\Omega}(\lambda=0)=-T\sum_n\sum_k e^{i\omega_n 0^+}\ln(\varepsilon_k-\mu-i\omega_n) \tag{2.446}$$

注意到对数函数的奇异性出现在实轴上,如果构造函数$F(z)=\frac{1}{e^{\beta z}+1}\ln(\varepsilon_k-\mu-z)$,包围复平面的无穷大圆的回路积分$\oint dzF(z)$ 等价于在$z=i\omega_n$处的留数以及逆时针方向包围实轴的无限扁的回路积分,即

$$\oint dzF(z)=0=2\pi i\sum_{\omega_n}\mathrm{Res}F(z=i\omega_n)+\int_C dzF(z) \tag{2.447}$$

而$\mathrm{Res}F(z=i\omega_n)=\lim_{z\to i\omega_n}(z-i\omega_n)\frac{1}{e^{\beta z}+1}\ln(\varepsilon_k-\mu-z)=-T\ln(\varepsilon_k-\mu-i\omega_n)$,因此

$$-T\sum_{\omega_n}\ln(\varepsilon_k-\mu-i\omega_n)=-\frac{1}{2\pi i}\int_C dzF(z) \tag{2.448}$$

同时

$$\begin{aligned}\int_C dzF(z) &= \int_C dz\frac{1}{e^{\beta z}+1}\ln(\varepsilon_k-\mu-z)\\ &= \int_C dz-T\frac{d}{dz}\ln(1+e^{-\beta z})\ln(\varepsilon_k-\mu-z)\\ &= -T\int_C dz\left(\frac{d}{dz}[\ln(1+e^{-\beta z})\ln(\varepsilon_k-\mu-z)]-\ln(1+e^{-\beta z})\frac{d}{dz}\ln(\varepsilon_k-\mu-z)\right)\\ &= -T\int_C dz\left(\frac{d}{dz}[\ln(1+e^{-\beta z})\ln(\varepsilon_k-\mu-z)]+\ln(1+e^{-\beta z})\frac{1}{\varepsilon_k-\mu-z}\right)\end{aligned} \tag{2.449}$$

由于我们考虑的是回路积分,因而上式第一项所对应的边界贡献为零,第二项则是在$z=\varepsilon_k-\mu$处的留数

$$\int_C dzF(z) = T\int_C dz\ln(1+e^{-\beta z})\frac{1}{z-\varepsilon_k+\mu}=2\pi iT\ln(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}) \tag{2.450}$$

这样我们发现$\tilde{\Omega}(\lambda=0)=-T\sum_n\sum_k e^{i\omega_n 0^+}\ln(\varepsilon_k-\mu-i\omega_n)=-T\sum_k\ln(1+e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)})=\Omega_0$, 因此$\Omega=\tilde{\Omega}$.为了方便使用,我们也会把Luttinger-Ward的结果改

写为

$$\Omega[G]=-T\sum_n\sum_k e^{i\omega_n 0^+}\left[\ln(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu+\Sigma(k,\omega_n)))+\Sigma(k,i\omega_n)G(k,i\omega_n)\right]+\Phi[G] \tag{2.451}$$

以强调其可以看作是G的泛函.

上面的讨论主要基于平移不变的体系,对于存在电磁场或处于非均匀外势中的系统,对动量的求和可以用求迹表示,同时Green函数和自能都表示为矩阵:

$$\Omega[G]=-T\sum_n e^{i\omega_n 0^+}\mathrm{Tr}\left[\ln(-G^{-1}(\omega_n))+\Sigma(\omega_n)G(\omega_n)\right]+\Phi[G] \tag{2.452}$$

这里$G^{-1}(\omega_n)=(G^{(0)}(\omega_n))^{-1}-\Sigma(\omega_n)=i\omega_n-H_0-\Sigma(\omega_n)$.注意到$\mathrm{Tr}\ln(...)=\ln\mathrm{Det}(...)$,也就是说矩阵对数的求迹等于矩阵的行列式的对数,因此对任意正交归一的单粒子基矢$\{|w\rangle\}$有

$$\mathrm{Tr}\ln(-G^{-1}(\omega_n))=\ln\mathrm{Det}(-G^{-1}(\omega_n))=\ln\prod_w\langle w|-G^{-1}(\omega_n)|w\rangle=\sum_w\ln\langle w|-G^{-1}(\omega_n)|w\rangle \tag{2.453}$$

$$\mathrm{Tr}\Sigma(\omega_n)G(\omega_n)=\sum_w\langle w|\Sigma(\omega_n)G(\omega_n)|w\rangle=\sum_{w,w'}\langle w|\Sigma(\omega_n)|w'\rangle\langle w'|G(\omega_n)|w\rangle \tag{2.454}$$

若取$\{|m\rangle\}$为$|k\rangle$(单粒子的动量本征态)并假设系统有平移不变性就自动回到对动量k求和的形式.

通常的热力学量,例如粒子数,磁化以及热容可以通过热力学势对相应的参数X求导获得,(X可以是化学势μ,磁场B,电场E,磁矢量势A以及粒子质量m等)那么我们有

$$\frac{\partial\Omega}{\partial X}=\left(\frac{\partial\Omega}{\partial X}\right)_\Sigma+\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\Sigma}\right)_X\frac{\partial\Sigma}{\partial X} \tag{2.455}$$

对固定的X必然有$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\Sigma}\right)_X=0$,因此我们仅需要对明确$X$依赖的部分求导即可.例如当我们计算粒子数$N$时,对于化学势明确的依赖出现在自由电子部分$H_0$中,因此

$$\begin{aligned}N&=-\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}=\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_\Sigma=T\sum_n e^{i\omega_n 0^+}\mathrm{Tr}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln(-G^{-1}(\omega_n))_\Sigma\\&=T\sum_n e^{i\omega_n 0^+}\mathrm{Tr}(G^{-1}(\omega_n))^{-1}\frac{\partial}{\partial\mu}(G^{-1}(\omega_n))_\Sigma\\&=T\sum_n e^{i\omega_n 0^+}\mathrm{Tr}G(\omega_n)\frac{\partial}{\partial\mu}(i\omega_n-H_0-\Sigma(\omega_n))_\Sigma\end{aligned} \tag{2.456}$$

在单粒子基矢下,化学势项总是对角的,因此$\frac{\partial}{\mu}H_0=-1$,这样我们就得到

$$N=T\sum_n e^{i\omega_n 0^+}\mathrm{Tr}G(\omega_n) \tag{2.457}$$

设系统具有平移不变性并取动量本征态得到熟悉的形式$N=T\sum_n\sum_k e^{i\omega_n 0^+}G(k,\omega_n)$.

数学形式:傅里叶变换,δ函数和其他

在我们的这份课程讲义中将会用到傅里叶级数,傅里叶变换以及Dirac的δ函数等基础数学内容,这里我们给出一些重要的结果并结合物理问题进行简要讨论.

有限系统

我们考虑一个一维系统,这个系统长度为L,这个系统中的物理量$f(x)$是空间位置$x \in [0, L]$的函数.为了分析物理量$f(x)$在动量空间(k空间)的行为,我们需要对其做傅里叶级数展开.

数学上一个函数可以做傅里叶展开是要求该函数具有周期性,例如若连续函数$g(x)$满足$g(x) = g(x + 2T)$,那么该函数的傅里叶级数展开是

$$g(x) = \frac{1}{2T}\sum_{k_n} e^{ik_n x}G_k \quad k_n = \frac{2\pi n}{2T}, n = 0, \pm 1, \pm 2...$$
$$G_k = \int_{-T}^{T} dx e^{-ik_n x} g(x). \tag{2.458}$$

注意到动量k_n仅取一些分立的值,而空间坐标x取值是连续的.

既然物理量$f(x)$仅定义在$x \in [0, L]$内,因此并不是周期函数,但是我们可以假象有很多一模一样的系统,每一个长度都是L,然后把它们拼接在一起,这样就形成了一个大系统,显然这个新的大系统具有周期性,其周期为L,也就是物理量$f(x)$满足$f(x) = f(x + L)$.既然$f(x)$具有周期性,那么可以就可以把x 取值范围从$[0, L]$转换为 $[-L/2, L/2]$,然后套用数学上关于傅里叶级数的定义可得:

$$f(x) = \frac{1}{L}\sum_{k} e^{ikx}c_k, \quad k = \frac{2\pi n}{L}, n = 0, \pm 1, \pm 2...$$
$$c_k = \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-ikx} f(x). \tag{2.459}$$

注意到k关于n的依赖是暗含的.当然,由于$f(x)$有周期性,有时候也用$c_k = \int_0^L dx e^{-ikx} f(x)$.

自然,一个明显的问题是上述公式正确吗? 一个直接判断的方式是用上述两个关系互相替代,看看能不能算出等于左边的结果.例如把$f(x)$的表达式代入c_k的表达式可得

$$c_k = \int_0^L dx e^{-ikx}\left(\frac{1}{L}\sum_{k'} e^{ik'x}c_{k'}\right) = \sum_{k'} c_{k'}\frac{1}{L}\int_0^L dx e^{i(k'-k)x} \tag{2.460}$$

$$\frac{1}{L}\int_0^L dx e^{i(k'-k)x} = \frac{1}{L}\frac{e^{i(k'-k)L} - 1}{i(k'-k)} \tag{2.461}$$

注意到$e^{i(k'-k)L} = e^{i\frac{2\pi(n'-n)}{L}L} = 1$,因此当$k' \neq k$,即$n' \neq n$ 时,上述积分为

零,而当$k'=k$时,直接积分给出$\frac{1}{L}\int_0^L dxe^{i0x}=1$.这样,我们得到重要的结果:

$$\boxed{\frac{1}{L}\int_0^L dxe^{i(k'-k)x}=\delta_{k,k'}=\begin{cases}1, & k=k';\\ 0, & k\neq k'.\end{cases}} \tag{2.462}$$

- 这里引入了分立情况的Dirac δ函数$\delta_{k,k'}$,它的变量k,k'是分立的变量.

此外,与一般的δ函数一样是偶函数,也就是对k,k'是对称,即$\delta_{k,k'}=\delta_{k',k}$. 有时也写成$\delta_{k,k'}=\delta_{k-k',0}=\delta_{k'-k,0}=\delta_{0,k-k'}=\delta_{0,k'-k}$. 利用$\delta_{k,k'}$, 我们发现 $f(x)$的表达式代入c_k的表达式确实返回到c_k.

同理,我们也可以把c_k代入到$f(x)$的表达式,则有

$$f(x)=\frac{1}{L}\sum_k e^{ikx}\left(\int_{-L/2}^{L/2}dx'e^{-ikx'}f(x')\right)=\int_{-L/2}^{L/2}dx'f(x')\frac{1}{L}\sum_k e^{ik(x-x')} \tag{2.463}$$

现在的问题是求和$\frac{1}{L}\sum_k e^{ik(x-x')}$等于多少.显然,为了要上上式左右相等,这个求和的结果只能是δ函数,也就是$\delta(x-x')$.哪如何来得到这个结果呢？首先我们对求和做进一步的处理,即

$$\begin{aligned}\frac{1}{L}\sum_k e^{ik(x-x')} &= \frac{1}{L}\sum_{n=0,\pm1,\pm2...}e^{i\frac{2\pi n}{L}(x-x')}=\frac{1}{L}\left(1+\sum_{n=1}^{\infty}(e^{i\frac{2\pi n}{L}(x-x')}+e^{-i\frac{2\pi n}{L}(x-x')})\right)\\ &= \frac{1}{L}\left(1+2\sum_{n=1}^{\infty}\cos\frac{2\pi n}{L}(x-x')\right).\end{aligned} \tag{2.464}$$

另一方面,一般情况的δ函数是定义在$(-\infty,\infty)$的奇异函数,其取值仅当$x=0$是为无穷大,其他情况为零.因此,我们实际上可以构造一个工作在$[-L/2,L/2]$上的δ函数其取值与原始定义相同.然后我们对它做和$f(x)$一样的周期性推广,这样就可以对它做傅里叶级数展开,即

$$\delta(x)=a_0+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\cos\frac{2\pi n}{L}x \tag{2.465}$$

其中系数a_0,a_n由标准公式可得

$$a_0=\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}dx\delta(x)\cos\frac{2\pi 0}{L}x=\frac{1}{L},\quad a_n=\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2}dx\delta(x)\cos\frac{2\pi n}{L}x=\frac{2}{L}. \tag{2.466}$$

因此,我们发现周期性推广的δ函数的傅里叶级数展开为$\delta(x)=\frac{1}{L}+\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty}\cos\frac{2\pi n}{L}x$. 所以我们所计算的求和就是这种周期性推广的$\delta$函数,即有

$$\boxed{\frac{1}{L}\sum_k e^{ik(x-x')}=\delta(x-x')} \tag{2.467}$$

- 注意到x,x'都是连续变量,而k是分立变量,并满足$k=2\pi n/L, n=0,\pm1,\pm2...$的要求.

- 注意k的取值并不限制在第一布里渊区,而是在整个动量空间$(-\infty,\infty)$,只不过我们是取分立的值.

利用这个结果,我们自然就证明了$f(x)$的傅里叶级数展开的正确性.

现在,我们考虑在当前的一维系统中即包括电子,也包括带正电的离子,两者总数相同,记为N.若电子的电荷密度$\rho(x)=\frac{N}{L}=\rho$是常数,那么它的傅里叶展开系数ρ_k为$\rho_k=\int_{-L/2}^{L/2}dxe^{-ikx}\rho=\rho\frac{e^{-ikL/2}-e^{ikL/2}}{-ik}=N\frac{\sin(kL/2)}{kL/2}$. 因此常数电荷密度对应的傅里叶级数是$\rho(x)=\rho\sum_k e^{ikx}\frac{\sin(kL/2)}{kL/2}$.注意到$\rho(x)=\rho$,我们发现一个有用的结果,即

$$\sum_{n=0,\pm1,\pm2...}e^{i\frac{2\pi n}{L}x}\frac{\sin(n\pi)}{n\pi}=1 \tag{2.468}$$

进一步,若电子密度为$\rho(x)=\rho+a\cos(2k_Fx)$,则电子密度在空间以$\pi/k_F=1/\rho$做周期振荡,这一般称为电荷密度波.对于$\rho(x)$,其傅里叶展开系数为 $\rho_k=\rho L\frac{\sin(kL/2)}{kL/2}+aL\frac{\sin(2k_F-k)L}{(2k_F-k)L}+aL\frac{\sin(2k_F+k)L}{(2k_F+k)L}$. 注意到$\lim_{L\to\infty}L\frac{\sin xL}{xL}=\delta(x)$, 那么$\lim_{L\to\infty}\rho_k=\rho\delta(k)+a(\delta(2k_F-k)+\delta(2k_F+k))$. 换句话说,对于宏观级别的一维系统,当电子密度具有电荷密度波时,通过光散射实验可以看到额外的两个峰,分别位于$k=\pm2k_F$.

最后,对于体积为$V=L^d$的超立方晶格中的系统,我们有

$$\boxed{\frac{1}{V}\int d^dxe^{i(k'-k)x}=\delta_{k,k'}} \tag{2.469}$$

$$\boxed{\frac{1}{V}\sum_k e^{ik(x-x')}=\delta(x-x')} \tag{2.470}$$

这里$k=(k_x,k_y,k_z,...)$是d维矢量,任意一个分量是$k_\alpha=\frac{2\pi n_\alpha}{L},n_\alpha=0,\pm1,\pm2....$

热力学极限:无穷大系统

尽管我们一般研究地物质系统(例如凝聚态物质)在空间上总是有限的,但是由于其足够巨大并且一些重要的物理观念,例如相变,实际上尽在系统趋于无穷大,也就是所谓热力学极限下才有明确定义.因此,让我们继续先前的讨论,看看我们的长度为L的系统当$L\to\infty$时会发生什么.

先前我们定义了物理量$f(x)$的傅里叶级数展开为

$$f(x)=\frac{1}{L}\sum_k e^{ikx}c_k,\quad c_k=\int_{-L/2}^{L/2}dxe^{-ikx}f(x). \tag{2.471}$$

当系统长度$L\to\infty$,动量$k=\frac{2\pi n}{L}$将成为连续变量,取值范围遍及$(-\infty,\infty)$. 另一方面,动量的间隔$\Delta k=k_{n+1}-k_n=\frac{2\pi}{L}\to0$. 这种情况下,任意关于$k$的函数也都成为自变量为连续变量的函数,这样我们把$c_k$写成$c(k)$以强调这一点.因此,我们

有

$$f(x)\equiv\lim_{L\to\infty}f(x)=\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\sum_{k_n}\Delta k\frac{1}{\Delta k}e^{ik_nx}c_{k_n}=\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-\infty}^{\infty}dk\frac{1}{2\pi/L}e^{ikx}C(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx}C(k) \tag{2.472}$$

以及,

$$C(k)\equiv\lim_{L\to\infty}c_k=\lim_{L\to\infty}\int_{-L/2}^{L/2}dxe^{-ikx}f(x)=\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ikx}f(x) \tag{2.473}$$

这样,我们得到大系统极限,也就是热力学极限下的结果,

$$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx}C(k),\quad C(k)=\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ikx}f(x). \tag{2.474}$$

同时,也有如下重要结果

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\sum_k g(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}g(k) \tag{2.475}$$

对于体积为$V=L^d\to\infty$的无穷大超立方系统有

$$\boxed{f(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{ikx}C(k),\quad C(k)=\int_{-\infty}^{\infty}d^dxe^{-ikx}f(x).} \tag{2.476}$$

$$\boxed{\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_k g(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}g(k)} \tag{2.477}$$

- 对于一般的凝聚态物质系统,我们默认总会采取这种求和换为积分的操作.

分立的有限系统:晶格系统

我们自然知道,固体晶格格点的位置总是分立的,因此有必要考虑空间位置也是分立情况的傅里叶级数展开.

仍然以一维长度为L的系统为例,只不过此时系统有意义的位置是那些格点所在位置.假定系统有N_s个格点,格点间距为a,也就有$L=N_sa$.每一个格点位置以$x_j=ja,j=1,2,3...N_s$标记.然后我们根据之前采用的傅里叶变换,把位置坐标x换成x_j,对x积分换为求和.当然,为了所得形式的简单,这次我们把长度因子L放到c_k的定义中,这样有

$$f_j\equiv f(x_j)=\sum_k e^{ikx_j}c_k,\quad k=\frac{2\pi n}{N_sa},n=0,\pm1,\pm2...$$

$$c_k=\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}dxe^{-ikx}f(x)\to\frac{1}{N_sa}\sum_j\Delta xe^{-ikx_j}f_j=\frac{1}{N_s}\sum_j e^{-ikx_j}f_j,\quad x_j=ja.$$

也就是有

$$\boxed{f_j=\sum_k e^{ikx_j}c_k,\quad c_k=\frac{1}{N_s}\sum_j e^{-ikx_j}f_j.} \tag{2.478}$$

形式上,这个表达式对高维也成立.当然,我们也注意到$a \to 0$时会回到之前连续空间的情况,一半称晶格常数a趋于零为连续极限.

与先前讨论一样,把f_j, c_k互相代入可以验证这些公式的正确性.把f_j代入c_k会发现我们需要计算如下求和:

$$I_{k,k'} = \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k'-k)x_j} \tag{2.479}$$

注意到我们可以把每个格点位置平移晶格常数a的任意倍数ma而使得上述求和不变,即有

$$\frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k'-k)x_j} = \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k'-k)(x_j+ma)} = e^{i(k'-k)ma} \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k'-k)x_j} \tag{2.480}$$

显然,当$k \neq k'$时,仅当$I_{k,k'} = 0$才会成立.而当$k = k'$时,$I_{k,k'} = \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i0x_j} = 1$,因此我们得到:

$$\boxed{I_{k,k'} = \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k'-k)x_j} = \delta_{k,k'}}. \tag{2.481}$$

同理,把c_k代入f_j会发现

$$\boxed{\frac{1}{N_s} \sum_k e^{ik(x_j - x_m)} = \delta_{j,m}} \tag{2.482}$$

其证明也是把k移动任意$n\Delta k$来实现.

极限与物理世界

通过对蹩脚的长度为L的体系的分析,我们已经看到当晶格尺度$a \to 0$时导致物理系统取连续极限,而系统长度$L \to \infty$则对应热力学极限.在场论和统计物理的研究中往往会遇到如下积分,(例如四维场论中虚粒子对的激发和临界现象中的涨落修正)

$$\int_\Lambda^r \frac{d^4k}{k^4} \sim \ln \frac{\Lambda}{r}, \tag{2.483}$$

这里Λ一般估计为最大允许动量,如$\Lambda \sim 1/a$.换句话说,晶格尺度有限的系统总是存在最大动量,这使得该积分在大动量时的发散得到抑制.另一方面,参数r与系统最小能量尺度相联系,回忆量子力学无限深势阱的讨论,那里的最小能量正比于$1/L^2$,因此$r \sim 1/L$.换句话说,一个有限系统总是有最小动量尺度,这使得积分在小动量的发散被抑制.

从这里可以看到,热力学极限时$L \to \infty$,因此会导致发散,而这种发散正是相变所需要的,否则有限系统各种量总是有限的,叠加在一起也不会有奇异性,因而也不会有相变.

另一方面,场论中所有的粒子都是点粒子,空间本身也没有类似晶格间距a的最小尺度,因此$\Lambda \to \infty$的发散在数学上不可避免.

自由电子气的极化函数和Lindhard函数

在研究凝聚态系统的电子性质,例如静态磁化率,动力学磁化率,电荷极化率和光学电导率等物理量时,我们总会碰到如下形式的函数:

$$\begin{aligned}\chi_0(q,z) &= \frac{1}{V}\sum_k \frac{f_F(\varepsilon_{k+q})-f_F(\varepsilon_k)}{z+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}} = \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{f_F(\varepsilon_{k+q})-f_F(\varepsilon_k)}{z+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}} \\ &= \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left[\frac{-f_F(\varepsilon_k)}{z+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}}+\frac{f_F(\varepsilon_{k+q})}{z+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}}\right]\end{aligned}$$

这里z是复数,对于实际问题会取$z=\omega$或者$z=i\Omega_n$,前者为频率,后者为虚频率.ε_k 为电子的色散关系.$f_F(x)=\frac{1}{e^{x/T}+1}$ 是费米分布函数.为了方便计算,当积分上限下限为无穷时,我们对上式的第二项可以做变量代换$k\to k-q$,则有

$$\chi_0(q,z)=\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}f_F(\varepsilon_k)\left[\frac{-1}{z+\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}}+\frac{1}{z+\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k}\right] \tag{2.484}$$

三维自由电子气的极化函数

对于一般形式的色散关系ε_k,我们不能得到关于χ_0的精确解析形式.但是对于零温时的自由费米气体,χ_0的形式可直接算出.下面我们给出零温时三维自由电子气体极化函数χ_0的推导.注意对零温自由电子气体,$\varepsilon_k=\frac{k^2}{2m}-E_F, E_F=\frac{k_F^2}{2m}$.当不考虑自旋简并时,费米波矢$k_F=(6\pi^2n)^{1/3}$,$n=N/V$是电子密度.(考虑自旋简并则有$k_F=(3\pi^2n)^{1/3}$) 三维电子气的态密度为(不考虑自旋简并)

$$\begin{aligned}N(\omega) &= \frac{1}{V}\sum_k\delta(\omega-\varepsilon_k)=\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\infty k^2dk\delta\left(\omega-\frac{k^2}{2m}+E_F\right) \\ &= \frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\infty k^2dk\frac{\delta(k-\sqrt{2m(\omega+E_F)})+\delta(k+\sqrt{2m(\omega+E_F)})}{\frac{1}{m}\sqrt{2m(\omega+E_F)}} \\ &= \frac{4\pi m}{(2\pi)^3}\sqrt{2m(\omega+E_F)} \\ &= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2}\sqrt{\omega+E_F}\end{aligned} \tag{2.485}$$

这里利用了δ函数的性质$\delta(f(x))=\sum_j\frac{\delta(x-x_j)}{|f'(x_j)|}$,$x_j$ 是$f(x)=0$的根.这样费米面上的态密度是

$$\boxed{N(0)=\frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2}\frac{k_F}{\sqrt{2}\sqrt{m}}=\frac{mk_F}{2\pi^2}.} \tag{2.486}$$

当我们考虑自旋简并则是$2N(0)$.

首先,零温时$f_F(\varepsilon_k)=\theta(-\varepsilon_k)=\theta(k_F-k)$, 对动量的积分化为$\int d^3k=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-1}^1 d\cos\theta\int_0^\infty k^2dk$, 则有

$$\chi_0(q,z)=\frac{2\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F}k^2dk\int_{-1}^1 d\cos\theta\left[\frac{-1}{z-\frac{q^2}{2m}-\frac{kq\cos\theta}{m}}+\frac{1}{z+\frac{q^2}{2m}-\frac{kq\cos\theta}{m}}\right]$$

对$\cos\theta$积分可得

$$\begin{aligned}\chi_0(q,z) &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F}k^2dk\left(\frac{m}{kq}\ln\left[\frac{1+\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}{-1+\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}\right]-\frac{m}{kq}\ln\left[\frac{1-\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}{-1-\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}\right]\right)\\ &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\frac{m}{q}\int_0^{k_F}kdk\left(\ln\left[\frac{1+\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}{-1+\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}\right]-\ln\left[\frac{1-\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}{-1-\frac{q}{2k}-\frac{z}{kq/m}}\right]\right)\end{aligned}$$

注意由于z可取复数,因此$1/x$积分后的对数$\ln x$不加绝对值符号.进一步,令$\tilde{k}=k/k_F,\tilde{q}=q/(2k_F),\tilde{z}=z/(4E_F)$, 则有

$$\begin{aligned}\chi_0(q,z) &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\frac{mk_F}{2\tilde{q}}\int_0^1 d\tilde{k}\left(\tilde{k}\ln\left[\frac{1+\frac{\tilde{q}}{\tilde{k}}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{k}\tilde{q}}}{-1+\frac{\tilde{q}}{\tilde{k}}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{k}\tilde{q}}}\right]-\tilde{k}\ln\left[\frac{1-\frac{\tilde{q}}{\tilde{k}}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{k}\tilde{q}}}{-1-\frac{\tilde{q}}{\tilde{k}}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{k}\tilde{q}}}\right]\right)\\ &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\frac{mk_F}{2\tilde{q}}\int_0^1 d\tilde{k}\left(\tilde{k}\ln\left[\frac{\tilde{k}+\tilde{q}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{q}}}{-\tilde{k}+\tilde{q}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{q}}}\right]-\tilde{k}\ln\left[\frac{\tilde{k}-\tilde{q}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{q}}}{-\tilde{k}-\tilde{q}-\frac{\tilde{z}}{\tilde{q}}}\right]\right)\\ &= N(0)F(\tilde{q},\tilde{z})\end{aligned}\tag{2.487}$$

注意到,F中出现的q实际上是动量q的绝对值$|q|$,因此$\tilde{q}\geq 0$.这里定义了Lindhard函数:

$$F(x,w)=\frac{1}{4x}\int_0^1 dy\left(y\ln\left[\frac{y+x-\frac{w}{x}}{-y+x-\frac{w}{x}}\right]-y\ln\left[\frac{y-x-\frac{w}{u}}{-y-x-\frac{w}{x}}\right]\right)\tag{2.488}$$

利用$\int dx(x\ln x)=\frac{x^2}{2}(\ln x-\frac{1}{2})$可得显式形式的Lindhard函数为

$$\boxed{F(x,w)=\frac{1}{8x}\left(\left[1-\left(x-\frac{w}{x}\right)^2\right]\ln\left[\frac{x-\frac{w}{x}+1}{x-\frac{w}{x}-1}\right]+(w\to -w)\right)+\frac{1}{2}}\tag{2.489}$$

当$w=0$时,我们有静态形式的Lindhard函数

$$\boxed{F(x)\equiv F(x,0)=\frac{1}{4x}(1-x^2)\ln\left|\frac{x+1}{x-1}\right|+\frac{1}{2}}.\tag{2.490}$$

注意$F(0)=1$,$F'(1)=\lim_{x\to 1}\frac{dF(x)}{dx}$发散.这样,零温时三维自由电子气的静态极化率为

$$\chi_0(q)=N(0)F(q/2k_F)=N(0)\left(\frac{k_F}{2q}\left[1-\left(\frac{q}{2k_F}\right)^2\right]\ln\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right|+\frac{1}{2}\right),\quad q=|q|\geq 0\tag{2.491}$$

当动量q远小于$2k_F$时,我们可以得到小动量时的极化率,可通过令$x<<1$并展开指数函数得到(注意必须至少展开到二阶,一阶是不够的):

$$\ln\frac{1+x}{1-x}=\ln\left(1+\frac{2x}{1-x}\right)\approx\frac{2x}{1-x}-\frac{1}{2}\frac{4x^2}{(1-x)^2}\tag{2.492}$$

那么有

$$\frac{1-x^2}{4x}\ln\frac{1+x}{1-x}\approx\frac{1-x^2}{4x}\frac{2x}{1-x}-\frac{1-x^2}{4x}\frac{1}{2}\frac{4x^2}{(1-x)^2}=\frac{1}{2}-\frac{x^2}{1-x}\approx\frac{1}{2}-x^2\tag{2.493}$$

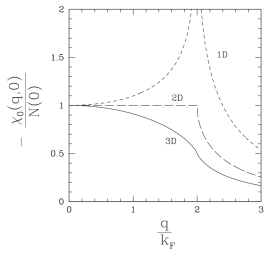


Figure 2.11: 不同空间维度下自由电子气的静态极化函数.[5]

这样我们发现小动量展开下的极化率是

$$\chi_0(q) = N(0)\left[1 - \frac{q^2}{4k_F^2}\right], \quad q/2k_F << 1. \tag{2.494}$$

最后,$q = 0$,也就是三维电子气体在零温时的均匀极化率为

$$\boxed{\chi_0 \equiv \chi_0(q=0) = N(0).} \tag{2.495}$$

因此,利用Lindhard函数,我们可以把三维自由电子气的零温极化函数写成如下形式:

$$\chi_0(q, i\Omega_n) = \lim_{T\to 0}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{f_F(\varepsilon_{k+q}) - f_F(\varepsilon_k)}{i\Omega_n + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}} = N(0)F(|q|/2k_F, i\Omega_n/4E_F).$$

二维与一维自由电子气的极化函数

与三维时计算类似,我们可以得到二维和一维时自由电子气体的极化函数,为简单起见,这里仅列出零频下的结果[66]

$$\chi_0^{2d}(q) = N(0)\left(1 - \theta(|q|/k_F - 2)\frac{(q/k_F)^2 - 4}{|q|/k_F}\right). \tag{2.496}$$

$$\chi_0^{1d}(q) = N(0)\frac{1}{|q|/k_F}\ln\left|\frac{|q|/k_F + 2}{|q|/k_F - 2}\right|. \tag{2.497}$$

由此,我们可以比较不同空间维度下的极化函数.(图2.11)

小动量转移时的自由电子极化函数

在一些情况下,例如涉及金属的量子临界问题时我们需要考虑小动量转移时的自由电子极化函数.令体系温度$T = 0$并且动量传递q很小时,($q << 2k_F$)我们

[66]完整的极化函数可参考文献[5]161 – 173页.

可以近似求出极化函数的解析形式.

$$\begin{aligned}\chi_0(q,\Omega_n) &\approx \frac{1}{V}\sum_k \frac{(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\frac{\partial f_F(\varepsilon_k)}{\partial\varepsilon_k}}{i\Omega_n-\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_k} \approx \frac{1}{V}\sum_k -\frac{(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\delta(\varepsilon_k)}{i\Omega_n-\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_k} \\ &= -\int\frac{d\varphi d\cos\theta}{4\pi}\int d\varepsilon_k N(\varepsilon_k)\frac{(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\delta(\varepsilon_k)}{i\Omega_n-\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_k} \\ &= -N(0)\int_{-1}^{1}\frac{d\cos\theta}{2}\frac{v_Fq\cos\theta}{i\Omega_n-v_Fq\cos\theta} = -\frac{N(0)}{2}\left[-2+\frac{i\Omega_n}{v_Fq}\ln\frac{i\Omega_n+v_Fq}{i\Omega_n-v_Fq}\right] \\ &= N(0)\left[1-\frac{i\Omega_n}{2v_Fq}\ln\frac{i\Omega_n+v_Fq}{i\Omega_n-v_Fq}\right] \qquad (2.498)\end{aligned}$$

当我们关心实频的信息时,可以做解析延拓$i\Omega_n\to\omega+i0^+(\omega>0)$

$$\chi_0(q,\omega+i0^+)\approx N(0)\left[1-\frac{\omega}{2v_Fq}\ln\frac{\omega+v_Fq}{\omega-v_Fq}\right] \qquad (2.499)$$

我们分情况讨论,当$v_Fq<\omega$时,极化函数是纯实的

$$\chi_0(q,\omega+i0^+)=N(0)\left[1-\frac{\omega}{2v_Fq}\ln\frac{\omega+v_Fq}{\omega-v_Fq}\right],\quad 0<v_Fq<\omega \qquad (2.500)$$

当$v_Fq>\omega$时,极化函数有额外的虚部

$$\begin{aligned}\chi_0(q,\omega+i0^+) &= N(0)\left[1-\frac{\omega}{2v_Fq}\ln(-1)\frac{v_Fq+\omega}{v_Fq-\omega}\right] = N(0)\left[1-\frac{\omega}{2v_Fq}\ln e^{i\pi}\frac{v_Fq+\omega}{v_Fq-\omega}\right] \\ &= N(0)\left[1-\frac{\omega}{2v_Fq}\left(i\pi+\ln\frac{v_Fq+\omega}{v_Fq-\omega}\right)\right] \\ &= N(0)\left[1-\frac{\omega}{2v_Fq}\ln\frac{v_Fq+\omega}{v_Fq-\omega}-\frac{\omega}{2v_Fq}i\pi\right] \\ &= N(0)\left(1-\frac{\omega}{2v_Fq}\ln\frac{v_Fq+\omega}{v_Fq-\omega}\right)-N(0)\frac{\pi}{2}\frac{i\omega}{v_Fq},\quad 0<\omega<v_Fq \qquad (2.501)\end{aligned}$$

在文献中,虚部所在的项$-i\gamma\frac{\omega}{v_Fq}$被称为Landau阻尼.

- 我们将会看到Landau阻尼项广泛地出现在具有费米面的费米子量子临界和量子规范理论中.

Bethe ansatz与Lieb-Liniger模型

对于一些一维多粒子系统(实际上是可积系统),人们发现它们的本征态可写成平面波态的叠加形式,即所谓Bethe ansatz波函数:

$$\boxed{\psi(x_1,x_2...x_N)=\sum_{P,Q}A_Pe^{i\sum_{j=1}^N k_{P_j}x_{Q_j}}\theta(x_{Q_1}<...<x_{Q_N})} \qquad (2.502)$$

这里$P=(P_1,P_2...P_N),Q=(Q_1,Q_2...Q_N)$是$1,2...N$的$N!$个排列.$A_P$是某个确定排列下波函数的系数.$k_{P_j}$是排列为$P$时第$j$个粒子的动量,$x_{Q_j}$是排列为$Q$时第$j$个

粒子的坐标.$\theta(x)$是标准的阶跃函数.既然波函数形式已经确定,那么不同模型的差异在于系数A_P和动量k_{P_j}的具体取值.

需要说明,ansatz一词源自德语,在这里指的是对于所求解的问题先猜测一个可能的形式然后再检验它是否工作,历史上上述求解多粒子问题的方法由Hans Bethe首先针对一维Heisenberg模型于1931年提出.注意到上述波函数写在坐标空间,其求解也在坐标空间,因此也叫做坐标Bethe ansatz(coordinate Bethe ansatz).与坐标空间Bethe ansatz对应,还有一类称为代数Bethe ansatz,这类方法可以比较容易得证明一般模型的可积性.代数Bethe ansatz主要源自Baxter在70年代早期的工作以及$70-80$年代法捷耶夫为核心的列宁格勒学派所研究的量子逆散射方法(quantum inverse scattering).[67]这一部分的讨论主要参考如下专著或会议文集:

- Bill Sutherland,Beautiful Models:70 years of Exactly Solved Quantum Many-body Problems(World Scientific Publishing,2004);[68]
- Hans-Peter Eckle,Models of Quantum Matter:A first Course on Integrability and the Bethe Ansatz(Oxford University Press,2019);
- 杨文力等,可解模型方法及其应用(科学出版社,2019).

下面我们将用一个具体模型,即Lieb-Liniger模型来具体解释上述波函数以及如何求解本征能量.

Lieb-Liniger模型

让我们考虑一维δ相互作用的玻色子体系,即所谓Lieb-Liniger模型:[69]

$$H=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+2c\sum_{i<j}^{N}\delta(x_i-x_j) \tag{2.503}$$

(这里设$2m=1$)显然,当$N=1$也就是只有一个粒子时,相互作用不起作用,此时波函数是平面波$\psi(x_1)=e^{ik_1x_1}$,而周期边界条件$\psi(x_1+L)=\psi(x_1)$给出动量k_1的量子化$k_1=\frac{2\pi I_1}{L}(I_1=0,\pm1,\pm2...)$,这里$L$是整个系统的长度.

然后考虑$N=2$的情况.我们假设体系的波函数可写成Bethe ansatz的形式,那么有

$$\begin{aligned}\psi(x_1,x_2) &= (A_{12}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)}+A_{21}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)})\theta(x_1<x_2)\\ &+ (A_{12}e^{i(k_1x_2+k_2x_1)}+A_{21}e^{i(k_2x_2+k_1x_1)})\theta(x_2<x_1)\end{aligned} \tag{2.504}$$

[67][Faddeev,How Algebraic Bethe Ansatz works for integrable model,arXiv:arXiv:hep-th/9605187;Faddeev,Algebraic Aspects of Bethe-Ansatz,arXiv:hep-th/9404013]

[68]有不少关于Bethe ansatz物理实质的讨论,建议阅读

[69][Lieb,Liniger,Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State,Phys.Rev. **130**,1605(1963)]

为了理解这个波函数,我们可以设$x_1 < x_2$,这样只有第一项起作用,此时波函数是

$$\psi(x_1, x_2) = A_{12}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + A_{21}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} \tag{2.505}$$

其描述的是动量为k_1坐标为x_1的粒子与动量为k_2位置为x_2的粒子的碰撞,碰撞前后的波函数分别是$A_{12}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)}$和$A_{21}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)}$.注意到碰撞前后的波函数相当于两个粒子交换了动量并且有了相位的变化.

引入质心和相对坐标$X = \frac{x_1+x_2}{2}, Y = x_2 - x_1$,这样

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial Y^2} \tag{2.506}$$

而定态Schödinger方程是

$$-\left[\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial Y^2}\right]\psi(X,Y) + 2c\delta(Y)\psi(X,Y) = E\psi(X,Y) \tag{2.507}$$

对于这个方程只要$Y \neq 0$,那么其本征能量就是自由粒子的结果,即$E = k_1^2+k_2^2$,同时总动量是$K = k_1 + k_2$.当然,k_1, k_2, A_{12}, A_{21}还未定出.因此,我们可以把上述方程对Y做积分,积分区间是$[-\varepsilon, +\varepsilon](\varepsilon \to 0)$,这样有

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dY\psi(X,Y) - 2\frac{\partial\psi(X,Y)}{\partial Y}|_{Y=-\varepsilon}^{Y=\varepsilon} + 2c\psi(X, Y=0) = E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dY\psi(X,Y) \tag{2.508}$$

取$\varepsilon \to 0$极限可知只有$\partial\psi/\partial Y$和$c\psi$两项非零,即有

$$\frac{\partial\psi(X,Y)}{\partial Y}|_{Y=0^+} - \frac{\partial\psi(X,Y)}{\partial Y}|_{Y=0^-} = c\psi(X, Y=0) \tag{2.509}$$

由于我们考虑的是玻色子系统,波函数$\psi(x_1, x_2) = \psi(X = x_1/2 + x_2/2, Y = x_2 - x_1)$应是$Y$的偶函数,这样

$$\frac{\partial\psi(X,Y)}{\partial Y}|_{Y=0^+} = -\frac{\partial\psi(X,-Y)}{\partial(-Y)}|_{Y=0^+} = -\frac{\partial\psi(X,Y)}{\partial Y}|_{Y=0^-} \tag{2.510}$$

所以

$$2\frac{\partial\psi(X,Y)}{\partial Y}|_{Y=0^+} = c\psi(X, Y=0) \tag{2.511}$$

注意到$\frac{\partial}{\partial Y} = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_2}$, 上式可写成

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1}\right)\psi|_{x_2=x_1+0^+} = c\psi|_{x_2=x_1} \tag{2.512}$$

代入波函数的具体形式可得

$$A_{12}ik_2 + A_{21}ik_1 - A_{12}ik_1 - A_{21}ik_2 = c(A_{12}ik_2 + A_{21}ik_1) \tag{2.513}$$

即

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = \frac{i(k_2-k_1)+c}{i(k_2-k_1)-c} = -\frac{i(k_2-k_1)+c}{-i(k_2-k_1)+c} \equiv -e^{i\Theta(k_2-k_1)} \tag{2.514}$$

这里$\Theta(x) = 2\arctan\frac{x}{c}$是复数$c + i(k_2 - k_1)$辐角主值$\arctan\frac{k_2-k_1}{c}$的两倍.因此,我们看到动量为$k_1, k_2$的玻色子在$\delta$相互作用下交换动量并产生相位移动$-e^{i\Theta(k_2-k_1)}$.既然两粒子相互作用可看作是两体散射过程,那么我们可以定义两体散射矩阵$S_{k_1,k_2} \equiv \frac{A_{12}}{A_{21}} = -e^{i\Theta(k_2-k_1)}$.

当$c \to \infty$时,相位移动是$-1(\arctan\frac{k_2-k_1}{\infty} = 0)$,此时波函数是(设$A_{12} = 1$)

$$\begin{aligned}\psi_B(x_1, x_2) &= (e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} - e^{i(k_2x_1+k_1x_2)})\theta(x_1 < x_2) + (e^{i(k_1x_2+k_2x_1)} - e^{i(k_2x_2+k_1x_1)})\theta(x_2 < x_1) \\ &= (e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} - e^{i(k_2x_1+k_1x_2)})\text{sign}(x_2 - x_1) \end{aligned} \tag{2.515}$$

这里符号函数$\text{sign}(x > 0) = 1, \text{sign}(x < 0) = -1$.我们发现上述波函数实际上是两个自由费米子波函数$\psi_F(x_1, x_2) = e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} - e^{i(k_2x_1+k_1x_2)}$与符号函数$\text{sign}(x_2 - x_1)$的乘积,这说明无穷大排斥相互作用的玻色子体系的性质非常接近自由费米子系统.

当c有限时,为了得到k_1, k_2的取值,我们可以考虑周期边界条件$\psi(x_1 + L, x_2) = \psi(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2 + L)$,对于$\psi(x_1 + L, x_2) = \psi(x_1, x_2)$代入波函数可知(设$x_1 < x_2$,但必然有$x_1 + L > x_2$)

$$\begin{aligned}&(A_{12}e^{ik_2L}e^{i(k_1x_2+k_2x_1)} + A_{21}e^{ik_1L}e^{i(k_2x_2+k_1x_1)})\theta(x_2 < x_1 + L) \\ = \;&(A_{12}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + A_{21}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)})\theta(x_1 < x_2)\end{aligned} \tag{2.516}$$

这样有

$$e^{ik_2L}\frac{A_{12}}{A_{21}} = 1, \quad e^{ik_1L}\frac{A_{21}}{A_{12}} = 1 \tag{2.517}$$

利用相位移动可写成(注意到$\Theta(x)$是奇函数,因此$\Theta(k_2 - k_1) = -\Theta(k_1 - k_2)$)

$$e^{ik_2L}(-1)e^{i\Theta(k_2-k_1)} = 1, \quad e^{ik_1L}(-1)e^{i\Theta(k_1-k_2)} = 1 \tag{2.518}$$

这两个方程称为Bethe ansatz方程,它们决定了动量的取值.可以看到,由于相互作用的存在,动量已不能简单取为$2\pi/L$的任意整数倍.

仿照$N = 2$的情况,可以证明N个玻色子体系的波函数系数仍然满足简单的相位关系,即

$$\frac{A_{P_1,P_2\ldots P_j\ldots P_k\ldots P_N}}{A_{P_1,P_2\ldots P_k\ldots P_j\ldots P_N}} = -e^{i\Theta(k_{P_k}-k_{P_j})} \tag{2.519}$$

这个关系说明,与$N = 2$相同,动量k_{P_j}, k_{P_k}的粒子碰撞后交换动量并产生相位移动$-e^{i\Theta(k_{P_k}-k_{P_j})}$.例如$N = 3$时有

$$\frac{A_{123}}{A_{213}} = -e^{i\Theta(k_2-k_1)} = S_{k_1,k_2}, \quad \frac{A_{123}}{A_{132}} = -e^{i\Theta(k_3-k_2)} = S_{k_2,k_3}, \quad \frac{A_{123}}{A_{321}} = -e^{i\Theta(k_3-k_1)} = S_{k_1,k_3}. \tag{2.520}$$

其他排列也有类似的结果.这样有

$$A_{123} = A_{213}S_{k_1,k_2} = A_{231}S_{k_1,k_2}S_{k_1,k_3} = A_{321}S_{k_1,k_2}S_{k_1,k_3}S_{k_2,k_3} \tag{2.521}$$

同理有

$$A_{123}=A_{132}S_{k_2,k_3}=A_{312}S_{k_2,k_3}S_{k_1,k_3}=A_{321}S_{k_2,k_3}S_{k_1,k_3}S_{k_1,k_2} \tag{2.522}$$

因此我们发现如下关系:

$$S_{k_1,k_2}S_{k_1,k_3}S_{k_2,k_3}=S_{k_2,k_3}S_{k_1,k_3}S_{k_1,k_2} \tag{2.523}$$

这可以看作是三个粒子通过两个不同的两体散射过程从初态(k_1,k_2,k_3)到达终态(k_3,k_2,k_1).对于当前的Lieb-Liniger模型,这个关系是平凡的,因为散射矩阵S_{k_i,k_j}是标量,该方程自动满足,但对于具有内部自由度的系统,散射矩阵成为非对易的矩阵,此时上述关系成立意味着Bethe ansatz波函数之间满足公式2.519,也就是我们能够用Bethe ansatz求解体系的性质.鉴于这个关系的重要性,文献中称其为Yang-Baxter方程,历史上由杨振宁在研究一维δ势相互走用费米系统和Baxter研究二维统计模型时分别独立发现.[70]

让我们回到一般N的讨论.考虑波函数满足周期边界$\psi(x_1+L,x_2...x_N)=\psi(x_1,x_2...x_N)$(设$x_1<x_2<...<x_N$而$x_2<x_3<...<x_N<x_1+L$),那么代入Bethe ansatz波函数的形式可知

$$\begin{aligned}&\sum_P A_P e^{i(k_{P_1}x_2+k_{P_2}x_3+...+k_{P_{N-1}}x_N+k_{P_N}(x_1+L))}\theta(x_2<x_3<...<x_N<x_1+L)\\ =&\sum_{P'} A_{P'}e^{i(k_{P'_1}x_1+k_{P'_2}x_2+...+k_{P'_N}x_N)}\theta(x_1<x_2<...<x_N)\end{aligned} \tag{2.524}$$

对比左右两边,这要求波函数的系数必须满足$(P'_1=P_N,P'_2=P_1...P'_{j+1}=P_j)$

$$A_{P_1,P_2...P_N}e^{ik_{P_N}L}=A_{P_N,P_1...P_{N-1}}\Rightarrow A_{P_1,P_2...P_N}=e^{-ik_{P_N}L}A_{P_N,P_1...P_{N-1}} \tag{2.525}$$

反复利用$\frac{A_{P_1,P_2...P_j...P_k...P_N}}{A_{P_1,P_2...P_k...P_j...P_N}}=-e^{i\Theta(k_{P_k}-k_{P_j})}$ 有

$$\begin{aligned}A_{P_1,P_2...P_N}&=e^{-ik_{P_N}L}(-e^{i\Theta(k_{P_1}-k_{P_N})})A_{P_1,P_N...P_{N-1}}\\&=...=e^{-ik_{P_N}L}(-1)^{N-1}e^{i\sum_{j=1}^{N-1}\Theta(k_{P_j}-k_{P_N})}A_{P_1,P_2...P_N}\end{aligned}$$

整理可得

$$e^{ik_{P_N}L}(-1)^{N-1}e^{i\sum_{j=1}^{N-1}\Theta(k_{P_N}-k_{P_j})}=1 \tag{2.526}$$

注意到k_{P_N},k_{P_j}的任意性,我们可以扔掉排列指标P而把上式写成

$$e^{ik_iL}(-1)^{N-1}e^{i\sum_{j\neq i}^{N-1}\Theta(k_i-k_j)}=1 \tag{2.527}$$

[70][Yang,Some Exact Results for the Many-Body Problem in one Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction,Phys.Rev.Lett. **19**,1312(1967);Baxter,Exactly Solved Models in Statistics Mechanics(Academic Press,1982)]

代入$e^{i\Theta(k_i-k_j)}=\frac{i(k_i-k_j)+c}{-i(k_i-k_j)+c}=-\frac{(k_i-k_j)-ic}{(k_i-k_j)+ic}$ 可得

$$e^{ik_iL}=\prod_{j\neq i}\frac{(k_i-k_j)+ic}{(k_i-k_j)-ic}=-\prod_{j}\frac{(k_i-k_j)+ic}{(k_i-k_j)-ic} \tag{2.528}$$

这个方程就是Lieb-Liniger模型的Bethe ansatz方程.对于有N个粒子的体系,我们有N个耦合的代数方程需要求解.与$N=2$时候类似,系统的能量和总动量仍然有自由粒子的形式

$$E=\sum_i k_i^2,\quad K=\sum_i k_i \tag{2.529}$$

考虑$c\to\infty$的极限情况,此时$e^{ik_iL}=(-1)^{N+1}$,因此$k_i=\frac{2\pi}{L}I_i, I_i=0,\pm1,\pm2...$($N$为奇数),或者$k_i=\frac{2\pi}{L}I_i, I_i=\pm1/2,\pm3/2...$($N$为奇数).推广$N=2,c\to\infty$的结果可知一般$N$,$c\to\infty$时体系的波函数是

$$\psi_B(x_1...x_N)=\psi_F(x_1...x_N)\prod_{i\neq j}\mathrm{sign}(x_i-x_j) \tag{2.530}$$

这里$\psi_F(x_1...x_N)$是自由费米子的Slater行列式波函数.既然基态时费米子部分的动量占据$[-k_F,k_F]$的区域,那么玻色子的动量也有相同的占据情况,且每个动量仅有一个玻色子占据.

- 文献中一般称强耦合极限下一维δ势玻色子体系的基态为Tonks-Gaudin气体.

  这样,我们发现对Bethe ansatz方程取对数可得

  $$k_iL=2\pi I_i-\sum_{j=1}^{N}2\arctan\frac{k_i-k_j}{c}=2\pi I_i-\sum_{j=1}^{N}\Theta(k_i-k_j) \tag{2.531}$$

  为了与$c\to\infty$极限时的结果一致,I_j取为整数$(0,\pm1,\pm2...,N$为奇数)或半整数$(\pm1/2,\pm3/2...,N$为偶数).在进一步讨论之前,有以下几点说明:

- Bethe ansatz方法的精髓在于假设结构最简单的平面波类型的波函数而把所有复杂性都放到系数A_P中;
- 不同A_P之间仅相差一个由两粒子散射决定的相位;
- 散射的相位依赖于粒子的相对动量,N个粒子就有N个动量k_i或者I_i;
- 强耦合极限$c\to\infty$时玻色子体系表现为自由费米子行为,若有N个粒子,(为了避免简并选N为奇数)那么其基态的I_i可选为$-\frac{N-1}{2},-\frac{N-3}{2}...-1,0,1....\frac{N-1}{2}$.最大和最小的$k_i$就是费米动量,即$\pm\frac{N-1}{L}\pi\equiv\pm k_F$.虽然直观上玻色子体系说费米动量比较奇怪,但一维空间粒子统计性质区别不大也是事实.换句话说,强耦合极限的δ势相互作用玻色子系统的基态表现为玻色子占据费米动量之间的区域(即费米海,$[-k_F,k_F]$)且每个动量只占据一个粒子.基态之上的激发可以理解为在费米海内一些动量未占据而费米海之外占据一些动量,这相当于是粒子-空穴激发.

很多时候我们关心的是热力学极限($N, L \to \infty$,N/L保持有限)的物理性质,那么我们可以引入动量分布函数$\rho(k) = \lim_{\Delta k \to 0} \frac{1}{L\Delta k}$,那么$k$到$k + \Delta k$区间的粒子数表示为$\Delta I(k) = L\rho(k)\Delta k$,($\frac{dI(k)}{dk} = L\rho(k)$)这样基态时的Bethe ansatz方程改写为(受强耦合极限的启发,我们假设一般c取值时的基态,其动量分布的区间是$[-k_F, k_F]$)

$$k = \frac{2\pi I(k)}{L} - \int_{-k_F}^{k_F} dq\Theta(k-q)\rho(q) \tag{2.532}$$

两边对k求导可得

$$1 = 2\pi\rho(k) - \int_{-k_F}^{k_F} dq\Theta'(k-q)\rho(q) \tag{2.533}$$

这样分布函数可以表示为

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi}\int_{-k_F}^{k_F} dq \frac{2c}{c^2 + (k-q)^2}\rho(q). \tag{2.534}$$

数学上,上述方程称为Fredholm积分方程,可通过把积分离散化而进行数值求解.利用$\rho(k)$可以表示基态粒子数密度$n = N/L$,基态能量密度$e = E/L$和基态动量密度$\tilde{k} = K/L$

$$\begin{aligned} n &= \int_{-k_F}^{k_F} dk\rho(k) \\ e &= \int_{-k_F}^{k_F} dkk^2\rho(k) \\ \tilde{k} &= \int_{-k_F}^{k_F} dkk\rho(k). \end{aligned} \tag{2.535}$$

考虑Tonks-Gaudin气体极限($c \to \infty$),此时$\Theta(x) = 0$,而$\rho(k) = \frac{1}{2\pi}$,那么$n = \frac{k_F}{\pi}, e = \frac{k_F^3}{3\pi}, \tilde{k} = 0$.

低能激发

现在,让我们考虑Lieb-Liniger模型的低能激发.为了获得定性的直觉,可以先考虑强耦合极限($c \to \infty$),此时基态类似于自由费米子气体,费米海中的每个动量都被占据而费米海之外没有任何占据.设粒子数N为奇数,那么基态的量子数I_i可以选为:

$$I_i^{(0),N} = -\frac{N-1}{2} + (i-1), i = 1, 2...N \tag{2.536}$$

例如$N = 5$时有

$$I_i^{(0),5} = \{-2, -1, 0, 1, 2\} \tag{2.537}$$

显然,自由费米气体的低能激发可以分成两类,即粒子数不变的激发和粒子数改变的激发,前者是粒子激发和空穴激发,后者是粒子-空穴激发.

- 粒子激发:在费米海之外添加一个粒子;
- 空穴激发:在费米海之内减少一个粒子;
- 粒子-空穴激发:在在费米海之内减少一个粒子并在费米海之外添加一个粒子;

$N=5$为例,粒子激发存在时粒子总数变为$N+1=6$,注意到此时I_j取值变为半整数,那么基态是

$$I_i^{(0),6}=\{-5/2,-3/2,-1/2,1/2,3/2,5/2\} \tag{2.538}$$

而粒子激发可看作是上述基态减少一个粒子并在费米海之外产生一个粒子,例如

$$I_i^{(p),5+1}=\{-5/2,-3/2,-1/2,1/2,5/2,11/2\} \tag{2.539}$$

这里我们假设添加粒子的量子数是$I_{i=6}^{(p),5+1}=11/2$.这样添加粒子导致的动量和能量变化(相对于基态)分别是

$$\Delta K=k_{i=2}^{(p),5+1}+k_{i=6}^{(p),5+1},\quad \Delta E=-(k_{i=2}^{(p),5+1})^2+(k_{i=6}^{(p),5+1})^2. \tag{2.540}$$

因此我们可以把$\Delta K,\Delta E$看作是粒子激发所携带的动量和能量.

类似的,空穴激发所对应基态的量子数是

$$I_i^{(0),4}=\{-3/2,-1/2,1/2,3/2\} \tag{2.541}$$

这样空穴激发的量子数分布是

$$I_i^{(h),5-1}=\{-3/2,-1/2,1/2,5/2\} \tag{2.542}$$

相应的空穴激发动量和能量是$\Delta K=k_1^{(h),5-1}+k_4^{(h),5-1},\Delta E=-(k_1^{(h),5-1})^2+(k_4^{(h),5-1})^2$.

最后,粒子-空穴激发不改变粒子数N,其量子数分布设为

$$I_i^{(0),5}=\{-2,0,1,2,10\} \tag{2.543}$$

粒子-空穴激发的动量和能量分别是

$$\Delta K=-I_{i=3}^{(0),5}+I_{i=5}^{(0),5},\quad \Delta E=-(k_{i=3}^{(0),5})^2+(k_{i=5}^{(0),5})^2. \tag{2.544}$$

这样我们发现,体系的所有低能激发都可以看成某种意义上的粒子-空穴激发.

对于有限c的情况,由于相互作用的存在,粒子激发相当于N粒子系统的基态动量分布$\{k_1,k_2...k_N\}$变成$N+1$粒子系统的激发态$\{k_1',k_2'...k_N',k_p\}$,所有这些动量的取值都由Bethe ansatz方程确定.k_p称为添加粒子的裸动量.让我们定义动量差

$$\delta k_j=k_j'-k_j,\quad j=1,2...N \tag{2.545}$$

而δk_j是$1/L$的量级.注意到k_j满足Bethe ansatz方程$k_jL = 2\pi I_j - \sum_{i=1}^{N}\Theta(k_j - k_i)$而$k'_j$满足

$$k'_jL = 2\pi I'_j - \sum_{i=1}^{N}\Theta(k'_j - k'_i) - \Theta(k'_j - k_p) \tag{2.546}$$

同时

$$k_pL = 2\pi I_p - \sum_{i=1}^{N}\Theta(k_p - k'_i) \tag{2.547}$$

这样有

$$\overbrace{(k'_j - k_j)}^{=\delta k_j}L = 2\pi\overbrace{(I'_j - I_j)}^{=1/2} - \sum_{i=1}^{N}(\Theta(k'_j - k'_i) - \Theta(k_j - k_i)) - \Theta(k'_j - k_p) \tag{2.548}$$

也就是

$$\delta k_jL + \sum_{i=1}^{N}(\Theta(k'_j - k'_i) - \Theta(k_j - k_i)) + \Theta(k'_j - k_p) = \pi \tag{2.549}$$

既然δk_j是$1/L$量级,那么我们可以展开$\Theta(k'_j - k'_i)$,

$$\Theta(k'_j - k'_i) = \Theta(k_j - k_i + \delta k_j - \delta k_i) \simeq \Theta(k_j - k_i) + (\delta k_j - \delta k_i)\Theta'(k_j - k_i)$$

定义$\Theta'(x) = K(x)$,因此有

$$\delta k_jL + \sum_{i=1}^{N}(\delta k_j - \delta k_i)K(k_j - k_i) + \Theta(k_j - k_p) = \pi \tag{2.550}$$

现在,让我们考虑上式的热力学极限,

$$2\pi\delta k\rho(k) = \frac{\pi - \Theta(k - k_p)}{L} - \int_{-k_F}^{k_F}dk'\delta k'\rho(k')K(k - k') \tag{2.551}$$

引入函数$F(k|k_p) = L\delta k\rho(k)$,这个函数描述添加动量为$k_p$的粒子后动量重新排列的情况,一般称其为单粒子移动函数.这样可以把积分方程写成

$$F(k|k_p) - \frac{1}{2\pi}\int_{-k_F}^{k_F}dk'K(k - k')F(k'|k_p) = \frac{\pi - \Theta(k - k_p)}{2\pi} \tag{2.552}$$

这样添加一个粒子的动量是

$$P = \delta p(k_p) = k_p + \sum_{j=1}^{N}(k'_j - k_j) = k_p + \sum_{j=1}^{N}\delta k_j = k_p + \int_{-k_F}^{k_F}dkF(k|k_p) \tag{2.553}$$

添加一个粒子的能量是

$$\delta e(k_p) = k_p^2 + \sum_{j=1}^{N}(k_j'^2 - k_j^2) = k_p^2 + \sum_{j=1}^{N}(2k_j\delta k_j - (\delta k_j)^2) = k_p^2 + \int_{-k_F}^{k_F}dkF(k|k_p)2k + \mathcal{O}(1/L^2) \tag{2.554}$$

类似的,对于空穴激发,我们也可以定义单粒子移动函数$F(k|k_h)$,其满足

$$F(k|k_h) - \frac{1}{2\pi}\int_{-k_F}^{k_F} dk' K(k-k')F(k'|k_h) = -\frac{\pi - \Theta(k-k_h)}{2\pi} \tag{2.555}$$

而动量和能量变化是

$$\delta p(k_h) = -k_h - \int_{-k_F}^{k_F} dk F(k|k_h) \tag{2.556}$$

添加一个粒子的能量是

$$\delta e(k_h) = -k_h^2 + \int_{-k_F}^{k_F} dk F(k|k_h) 2k + \mathcal{O}(1/L^2). \tag{2.557}$$

结合粒子激发与空穴激发,可以得到粒子-空穴激发的移动函数$F_{ph}(k|k_p,k_h)$,满足的积分方程是

$$F_{ph}(k|k_p,k_h) - \frac{1}{2\pi}\int_{-k_F}^{k_F} dk' K(k-k')F_{ph}(k'|k_p,k_h) = -\frac{\Theta(k-k_p)-\Theta(k-k_h)}{2\pi} = \int_{k_h}^{k_p} dk' K(k-k'). \tag{2.558}$$

- 有限温度时的热力学可以利用Yang-Yang方法或者说热力学Bethe ansatz获得.[71]

其他可解模型

除了这里主要讨论的Lieb-Liniger模型,还有其他一维多粒子模型也可通过Bethe ansatz方法求解:

- Heisenberg模型和XXZ模型;
- δ势相互作用费米体系;[72]
- 费米子的Hubbard模型;[73]
- Kondo杂质模型;[74]
- $1/r^2$势,$1/\sinh^2 r$势,$1/\cosh^2 r$势的玻色子或费米子模型;

[71] [Takahashi,Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models(Cambridge University Press,1999)]

[72] [Yang,Some Exact Results for the Many-Body Problem in one Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction,Phys.Rev.Lett. **19**,1312(1967)]

[73] [Lieb,Wu,Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension,Phys.Rev.Lett. **20**,1445(1968)]

[74] [Andrei,Diagonalization of the Kondo Hamiltonian,Phys.Rev.Lett. **45**,379(1980)]

- BCS配对模型(Richardson-Gaudin模型).[75]

此外,一些AdS/CFT模型也可以通过mapping到一维自旋链模型而通过Bethe ansatz求解,这对于理解大N极限下的强耦合超对称场论和全息对偶至关重要. [76]

[75] [Dukelsky,Pittel,Sierra,Colloquium:Exactly solvable Richardson-Gaudin models for many-body quantum systems,Rev.Mod.Phys. **76**,643(2004);Richardson,A restricted class of exact eigenstates of the pairing-force Hamiltonian,Physics Letters **3**,277(1963);Asorey,Falceto,Sierra,Chern – Simons theory and BCS superconductivity,Nuclear Physics B **622**,593 (2002);Dunning,Links,Integrability of the Russian doll BCS model,Nuclear Physics B **702**,481 (2004)]

[76] [Beisert et al.,Review of AdS/CFT Integrability:An Overview,arXiv:1012.3982]

第二章习题

习题1:二次量子化的计算

Q1:设$\hat{a}^\dagger,\hat{a}$为玻色子产生湮灭算符,计算$\hat{a}|0\rangle,\hat{a}|1\rangle,\hat{a}^\dagger|0\rangle,\hat{a}^\dagger|1\rangle$.

Q2:设$\hat{c}^\dagger,\hat{c}$为费米子产生湮灭算符,计算$\hat{c}|0\rangle,\hat{c}|1\rangle,\hat{c}^\dagger|0\rangle,\hat{c}^\dagger|1\rangle$.

Q3:设有两个费米子的多体Fock态$|1,1,0,0\rangle$与$|1,0,0,0\rangle$.$\hat{c}_j^\dagger$是第j个态的产生算符($j=1,2,3,4$按顺次排列).计算$\hat{c}_3^\dagger|1,1,0,0\rangle,\hat{c}_3^\dagger|1,0,0,0\rangle$.

Q4:证明双带费米子模型$\hat{H}=\sum_k(\varepsilon_k\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k+\omega_k\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+g\hat{a}_k^\dagger\hat{b}_k+g\hat{b}_k^\dagger\hat{a}_k)$ 的能谱是$E_{k\pm}=\frac{\varepsilon_k+\omega_k\pm\sqrt{(\varepsilon_k-\omega_k)+4g^2}}{2}$.(提示:采用旋量表示$\hat{\psi}=(\hat{a}_k,\hat{b}_k)^T$把哈密顿量写成$2\times2$的矩阵形式,对角化矩阵可得能谱.)

习题2:热容的统计表达式

Q1:证明系统$\hat{H}$热容的以下表达关系

$$C_v=\frac{\partial\langle\hat{H}\rangle}{\partial T}=-T\frac{\partial^2\mathcal{F}}{\partial T^2}=T\frac{\partial\mathcal{S}}{\partial T}=\frac{\langle\hat{H}^2\rangle-\langle\hat{H}\rangle^2}{T^2}. \tag{2.559}$$

Q2:考虑费米子模型$\hat{H}=\varepsilon\hat{c}^\dagger\hat{c}$,利用Q1的结果计算其热容.

Q3:考虑玻色子模型$\hat{H}=\omega\hat{b}^\dagger\hat{b}$,利用Q1的结果计算其热容.

Q4:设Majorana费米子的哈密顿量为$\hat{H}=i\varepsilon\hat{\chi}_1\hat{\chi}_2$,这里$\hat{c}=\hat{\chi}_1+i\hat{\chi}_2,\hat{c}^\dagger=\hat{\chi}_1+i\hat{\chi}_2,\hat{\chi}_1,\hat{\chi}_2$ 为Majorana费米子.试利用Q1的结果计算其热容.(提示:把Majorana费米子重新用标准费米子$\hat{c},\hat{c}^\dagger$表示)

习题3:刚球势

Q1:证明刚球势$V(x-y)=\lambda\delta(x-y)$的傅里叶变换系数$V_q=\frac{\lambda}{V}$.

Q2:仿照Coulomb电子气的处理,证明以下相互作用费米子系统基态能量的一阶修正为$E_g^1=\lambda V\left(\frac{4\pi}{3}\right)^2\left(\frac{k_F}{2\pi}\right)^6$,

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}\hat{c}_{k\sigma}^\dagger\hat{c}_{k\sigma}+\frac{\lambda}{2V}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\hat{c}_{k+q,\sigma}^\dagger\hat{c}_{k'-q,\sigma'}^\dagger\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}. \tag{2.560}$$

Q3:若把Q2中的费米子换成玻色子,那么基态能量的一阶修正是什么呢?(提示:自由玻色子的基态是什么?)

习题4:三维电子气体的铁磁态

Q1:我们知道Coulomb电子气体可以显示顺磁性的金属态,铁磁性的金属态和Wigner晶体.这里我们考虑铁磁金属态.当电子间相互作用不存在时,假设所有电子都完全极化,也就是自旋都取同一个方向,试给出此时体系的费米波矢k_F^*与费米气体时费米波矢k_F的关系.

Q2:利用一阶微扰理论计算Q1中完全极化铁磁态的基态能量,并与本章中所讨论的Coulomb电子气基态能比较,试找出从顺磁金属态到完全极化铁磁态相变时的r_s的取值.把这个取值与本章中所给出的蒙特卡洛结果进行比较,试解释其别差的原因.

习题5:一次量子化形式中的等离激元

Q1:本章中我们主要用二次量子化方法讨论了Coulomb电子气的等离激元激发.作为补充,这里我们考虑用一次量子化来得到同样的结果.首先,一次量子化下电子部分的哈密顿量是

$$H_{el}=\sum_j\frac{p_j^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{j\neq m}\frac{e^2}{|r_j-r_m|}.$$

基于粒子密度的表达式$\rho(r)=\sum_j\delta(r-r_j)$,证明其傅里叶变换为

$$\rho(r)=\frac{1}{V}\sum_q e^{iqr}\rho_q,\qquad \rho_q=\sum_j e^{-iqr_j}.$$

Q2:证明哈密顿量在傅里叶变换后可以改写为

$$H_{el}=\sum_j\frac{p_j^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_q V_q(\rho_{-q}\rho_q-N).$$

这里V_q是Coulomb势的傅里叶变换,其可写为$\frac{4\pi e^2}{Vq^2}$,N是电子总数.(提示:$\rho_{-q}\rho_q=\sum_{j,m}e^{-iq(r_m-r_j)}=\sum_{j\neq m}e^{-iq(r_m-r_j)}+N$)

Q3:利用对易关系$[p_j,e^{-iqr_j}]=-qe^{-iqr_j}$和Heisenberg运动方程$\frac{d\mathcal{O}}{dt}\equiv\dot{\mathcal{O}}=\frac{1}{i}[\mathcal{O},H]$,证明

$$\dot{\rho}_q=-i\sum_j e^{-iqr_j}\frac{q}{m}\left(p_j-\frac{q}{2}\right).$$

Q4:证明

$$\ddot{\rho}_q=-\sum_j e^{-iqr_j}\frac{1}{m^2}\left[q\cdot\left(p_j-\frac{q}{2}\right)\right]^2-\frac{1}{V}\sum_{q'jn}\frac{4\pi e^2}{mq'^2}q\cdot q'e^{-i(q-q')r_j}e^{-iq'r_n}.$$

对上式右边第一项做p_j的角度平均并设p_j的绝对值为费米波矢k_F,对第二项只考虑$q'=q$项,这样就得到 $\ddot{\rho}_q=-(\frac{4\pi ne^2}{m}+\frac{k_F^2q^2}{3m^2})\rho_q$.设$\rho_q(t)=\rho_q(0)e^{-i\omega t}$就可以得到标准的结果.

Bibliography

[1] R. Melko, Quantum Many-Body Physics, http://pirsa.org/C15078

[2] A. Altland and B. Simons, Condensed Matter Field Theory, 第二章

[3] M. Franz, Condensed Matter, http://pirsa.org/C14035

[4] 李正中, 固体理论(第二版), 第四章

[5] Gabriele Giuliani and Giovanni Vignale, Quantum theory of the electron liquid, 第四章–第五章.

Chapter 3

晶格费米子:直面凶猛的电子关联

模型	Hubbard模型	t-J模型	Heisenberg模型	一维量子XY模型
特性	晶格电子	半满附近的Hubbard模型	量子磁性	严格可解
技巧	精确对角化	Gutzwiller投影	Holstein-Primakoff变换	Jordan-Wigner变换

Table 3.1: 本章涉及的主要理论模型.

Hubbard模型:多体物理的'Ising'模型

Hubbard模型的导出

Bloch波函数

在上一讲,我们以Coulomb电子气为例讨论了平面波展开下的二次量子化哈密顿量的简单性质.注意到在理想情况下固体中的电子甚至是光晶格中的费米型原子都在周期势场中运动,此时必然需要用另外一类波函数来展开场算符.

在固体物理中,我们知道周期势场中的单粒子哈密顿量的本征态是Bloch波函数,满足以下本征方程

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\psi_{nk}(x)=\varepsilon_{nk}\psi_{nk}(x),\quad U(x)=U(x+R) \tag{3.1}$$

并且具有正交归一性$\int d^dx\psi^*_{nk}(x)\psi_{mk'}(x)=\delta_{k,k'}\delta_{n,m}$. 这提示我们在处理晶格中电子的二次量子化哈密顿量时可以用Bloch 函数来展开场算符,即

$$\hat{\psi}_\sigma(x)=\sum_{nk}\psi_{nk}(x)\hat{c}_{nk\sigma},\quad \hat{c}_{nk\sigma}=\int d^dx\psi^*_{nk}(x)\hat{\psi}_\sigma(x) \tag{3.2}$$

那么对于一般的二次量子化哈密顿量

$$\hat{H}=\sum_\sigma\int d^dx\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}_\sigma(x)+\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(y)V(x-y)\hat{\psi}_{\sigma'}(y)\hat{\psi}_\sigma(x) \tag{3.3}$$

代入场算符的Bloch函数展开可得

$$\hat{H}=\sum_{nk\sigma}\varepsilon_{nk}\hat{c}^\dagger_{nk\sigma}\hat{c}_{nk\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{n_1,n_2,n_3,n_4}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\sum_{\sigma,\sigma'}V_{12,34}\hat{c}^\dagger_{n_1k_1\sigma}\hat{c}^\dagger_{n_2k_2\sigma'}\hat{c}_{n_3k_3\sigma'}\hat{c}_{n_4k_4\sigma} \tag{3.4}$$

其中相互作用矩阵元$V_{12,34}$表示如下复杂积分

$$V_{12,34}\equiv\int d^dx\int d^dyV(x-y)\psi^*_{n_1k_1}(x)\psi^*_{n_2k_2}(y)\psi_{n_3k_3}(y)\psi_{n_4k_4}(x) \tag{3.5}$$

可以看到,尽管单粒子部分被简化为对每个能带每个晶格动量的求和,相互作用部分显得异常复杂,既涉及对不同能带的求和,也涉及不同动量态的跃迁,因此实际处理十分困难.

Wannier波函数

不过在实际的固体中,电子相互作用一般并不是长程的裸Coulomb势而是被屏蔽的Coulomb势,这表明尽管在动量空间相互作用矩阵元非零元素很多,但是在实空间,有贡献的矩阵元可能很少,因此我们希望用更加实空间的波函数,或者说空间更加局域的波函数来重写哈密顿量.

我们知道,固体物理中采用局域化的Wannier函数来描述比较局域化的电子波函数,在这里用它们来展开场算符

$$\hat{\psi}_\sigma(x) = \sum_j w(x - R_j)\hat{c}_{j\sigma} \tag{3.6}$$

$\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{j\sigma}$代表在晶格的$j$格点产生或湮灭一个费米子,而$w(x - R_j)$代表以原子实所在位置$R_j$为中心的Wannier波函数,定性上可以看作是$R_j$为中心的高斯型函数,远离$R_j$后波函数很快趋于零.这里仅讨论一个能带的情况,(因此没有能带指标n)多能带情况可以容易地推广而获得.关于Wannier函数有许多特殊的数学性质,这里最重要的是正交归一性和完备性,即

- 正交归一:$\int d^dx w^*(x-R_j)w(x-R_m) = \delta_{j,m}$.如果用Dirac态矢表示Wannier波函数有$w(x - R_j) = \langle x|j\rangle$,$|j\rangle$是$R_j$为中心的Wannier态.这样正交归一化条件可写为$\langle j|m\rangle = \delta_{j,m}$.
- 完备关系:$\sum_j w^*(x - R_j)w(y - R_j) = \delta(x - y)$,也可以写成$\sum_j |j\rangle\langle j| = 1$.

注意到逆变换

$$\hat{c}_{j\sigma} = \int d^dx w^*(x - R_j)\hat{\psi}_\sigma(x), \tag{3.7}$$

可以证明$\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{j\sigma}$标准费米子算符满足

$$[\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{j'\sigma'}]_+ = \int d^dx \int d^dy w^*(y-R_j)w^*(x-R_{j'})[\hat{\psi}_\sigma(x), \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(y)] = \delta_{\sigma\sigma'} \int d^dx w^*(x-R_j)w(x-R_{j'}) = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{jj'} \tag{3.8}$$

容易得到$[\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}_{j'\sigma'}] = [\hat{c}^\dagger_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{j'\sigma'}] = 0$.

单粒子部分

代入Wannier函数展开形式得到单粒子动能部分

$$\hat{H}_0 = \sum_{jm\sigma}(-t_{jm} + \varepsilon_j\delta_{jm})\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma} \tag{3.9}$$

其中跃迁积分定义如下

$$\int d^dx w^*(x - R_j)\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right] w(x - R_j) = \varepsilon_j \tag{3.10}$$

$$\int d^dx w^*(x - R_j)\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right] w(x - R_m) = -t_{jm}, \quad j \neq m \tag{3.11}$$

对于平移不变的晶格系统,可以认为ε_j在每一格点都相同,则其为常数可以舍去,这样得到:

$$\hat{H}_0 = -\sum_{jm\sigma} t_{jm}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma} \tag{3.12}$$

物理上,$\hat{H}_0$描述不同格点之间跳跃的电子,即自旋为σ的电子从m格点以强度t_{jm}跳跃至j 格点.在某些文献中也有用Dirac符号构造的投影形式来表示$\hat{H}_0$,即由产生湮灭算符自身定义有$\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} = |j\sigma\rangle\langle 0|, \hat{c}_{m\sigma} = |0\rangle\langle m\sigma|.|j\sigma\rangle = |j\rangle|\sigma\rangle$表示自旋态为$\sigma$,空间位置在$j$格点处.因此$\hat{H}_0$又可表示为

$$\hat{H}_0 = -\sum_{jm\sigma} t_{jm}|j\sigma\rangle\langle 0|0\rangle\langle m\sigma| = -\sum_{jm\sigma} t_{jm}|j\sigma\rangle\langle m\sigma|. \tag{3.13}$$

若以$\{|j\sigma\rangle\}$为基矢,在固定自旋情况下,则$\hat{H}_0$在该基矢下表示为$N_s \times N_s$的正方矩阵,其中N_s为系统总格点数.例如对$N_s = 4$ 且电子仅在最近邻格点跃迁的一维链,(跃迁强度为t)在不考虑自旋且满足开边界条件情况下,非零矩阵元为

$$\langle i|\hat{H}_0|j\rangle = -t, \quad j = i \pm 1, \quad i - j \neq \pm 3 \tag{3.14}$$

因此$\hat{H}_0$的矩阵表示为:

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & -t & 0 & 0 \\ -t & 0 & -t & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t \\ 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.15}$$

对角化矩阵可得该有限系统的本征能量和本征态.采用matlab的矩阵完全对角化命令$[A, B] = eig(H)$可得本征态与本征值矩阵A, B分别为

$$A = \begin{pmatrix} -0.3717 & -0.6015 & -0.6015 & -0.3717 \\ -0.6015 & -0.3717 & 0.3717 & 0.6015 \\ -0.6015 & 0.3717 & 0.3717 & -0.6015 \\ -0.3717 & 0.6015 & -0.6015 & 0.3717 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -1.618 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.618 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.618 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.618 \end{pmatrix} \tag{3.16}$$

B矩阵的对角元为系统的本征值,元素$B(n, n)$为从小到大排列的第n个本征能量ε_n.A矩阵的每一列代表对应本征能量的本征态,$A(:, n)$是ε_n的本征态,其中每一个元素$A(j, n)$表示这个本征态中电子在第j 个格点上的概率振幅.这样第n个本征态$|n\rangle$可以写成

$$|n\rangle = \sum_{j=1}^{4} A(j, n)|j\rangle \tag{3.17}$$

进一步,我们可以引入新费米子算符$\hat{c}_n \equiv |0\rangle\langle n|$,那么有

$$\hat{c}_n = |0\rangle\langle n|\sum_j |j\rangle\langle j| = \sum_j \langle n|j\rangle|0\rangle\langle j| = \sum_j \langle n|j\rangle\hat{c}_j \tag{3.18}$$

同时,

$$\hat{c}_j = \sum_n \langle j|n\rangle \hat{c}_n = \sum_n A(j,n)\hat{c}_n. \tag{3.19}$$

利用这些关系,哈密顿量$\hat{H}_0$可写为

$$\hat{H}_0 = \sum_{n,n',\sigma}\sum_{jm} A^*(j,n)(-t_{jm})A(m,n')\hat{c}^\dagger_{n\sigma}\hat{c}_{n'\sigma} = \sum_{n,n',\sigma} B(n,n)\delta_{n,n'}\hat{c}^\dagger_{n\sigma}\hat{c}_{n'\sigma} = \sum_{n,\sigma}\varepsilon_n \hat{c}^\dagger_{n\sigma}\hat{c}_{n\sigma} \tag{3.20}$$

这样,我们成功对角化了哈密顿量$\hat{H}_0$,原则上任何$\hat{H}_0$都可以容易处理.在实际计算中,一般处理的最大系统尺寸为$N_s \sim 10^4$,如果还需要计算所有本征态,并对本征态进行操作,那么能处理的系统大小则减小一个量级,即$N_s \sim 10^3$.对二维正方晶格,这对应30×30到40×40的体系.

既然已经对角化了哈密顿量,那么系统的配分函数为

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_0} = \prod_{n,\sigma}(1+e^{-\beta\varepsilon_n}) \tag{3.21}$$

而任意的四粒子关联函数可以写为

$$\begin{aligned}
\langle \hat{c}^\dagger_i\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_k\hat{c}_l\rangle &= \sum_{n_1,n_2,n_3,n_4} A(i,n_1)A(j,n_2)A(k,n_3)A(l,n_4)\langle \hat{c}^\dagger_{n_1}\hat{c}^\dagger_{n_2}\hat{c}_{n_3}\hat{c}_{n_4}\rangle \\
&= \sum_{n_1,n_2,n_3,n_4} A(i,n_1)A(j,n_2)A(k,n_3)A(l,n_4)(\langle \hat{c}^\dagger_{n_1}\hat{c}_{n_4}\rangle\langle \hat{c}^\dagger_{n_2}\hat{c}_{n_3}\rangle - \langle \hat{c}^\dagger_{n_1}\hat{c}_{n_3}\rangle\langle \hat{c}^\dagger_{n_2}\hat{c}_{n_4}\rangle) \\
&= \sum_{n_1,n_2,n_3,n_4} A(i,n_1)A(j,n_2)A(k,n_3)A(l,n_4)(\delta_{n_1,n_4}\delta_{n_2,n_3} - \delta_{n_1,n_3}\delta_{n_2,n_4})f_F(\varepsilon_{n_1})f_F(\varepsilon_{n_2}) \\
&= \langle \hat{c}^\dagger_i\hat{c}_l\rangle\langle \hat{c}^\dagger_j\hat{c}_k\rangle - \langle \hat{c}^\dagger_i\hat{c}_k\rangle\langle \hat{c}^\dagger_j\hat{c}_l\rangle
\end{aligned} \tag{3.22}$$

这可以看成量子场论中Wick定理的直接结果,$f_F(x) = 1/(e^{x/T}+1)$为费米分布函数,并且我们定义了单粒子密度矩阵(等时关联函数):

$$\langle \hat{c}^\dagger_i\hat{c}_l\rangle = \sum_n A(i,n)A(l,n)f_F(\varepsilon_n). \tag{3.23}$$

因此,原则上,我们可以计算自由费米子哈密顿量$\hat{H}_0$相关的任意热力学和关联函数.当然,对于平移不变的$\hat{H}_0$总可以做傅里叶变换化为熟悉的形式$\hat{H}_0 = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k$.

对于电子系统,其态密度$N(\omega) = \sum_k \delta(\omega-\varepsilon_k)$总是重要的物理量,特别对于金属而言,其决定了大多数热力学和输运行为.实验上可以通过隧穿谱或者STM进行测量.其基本原理可以用以下模型描述:

$$H = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}^\dagger_{Lk}\hat{c}_{Lk} + \sum_p \varepsilon_p \hat{c}^\dagger_{Rp}\hat{c}_{Rp} + \overbrace{\sum_{kp} T_{kp}(\hat{c}^\dagger_{Lk}\hat{c}_{Rp} + \hat{c}^\dagger_{Rp}\hat{c}_{Lk})}^{\hat{H}_T}. \tag{3.24}$$

这里考虑两个费米子体系(用费米气体表示)用一个隧穿结连在一起,电子从左边L隧穿到右边R的振幅为T_{kp}. 然后我们假定T_{kp}足够小,那么电子从左边隧穿到

右边的概率可以用费米黄金规则估计:

$$w_{L\to R}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{if}|\langle f|\hat{H}_T|i\rangle|^2\delta(E_i-E_f) \tag{3.25}$$

$|i\rangle$是未遂穿前的状态,(占据数态)$|f\rangle$是隧穿后的状态.既然一次隧穿让一个电子从左边的k 态转移到右边的p态,那么必然有$|f\rangle=\hat{c}^\dagger_{Rp}\hat{c}_{Lk}|i\rangle$. 因此有

$$\begin{aligned} w_{L\to R} &= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{kp}|\langle f|T_{kp}\sqrt{1-n_p}\sqrt{n_k}|f\rangle^2\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_k) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{kp}|T_{kp}|^2(1-n_p)n_k\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_k) \end{aligned} \tag{3.26}$$

这里n_k,n_p是电子的分布函数,可近似为费米分布.同理,从右到左的隧穿概率是

$$w_{R\to L}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{kp}|T_{kp}|^2(1-n_k)n_p\delta(\varepsilon_k-\varepsilon_p). \tag{3.27}$$

这样,系统流过隧穿结的净电流是

$$I=e(w_{L\to R}-w_{R\to L})=\frac{2\pi e}{\hbar}\sum_{kp}|T_{kp}|^2(n_k-n_p)\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_k) \tag{3.28}$$

现在,让我们定义相对于各自化学势的能量,即$\xi_k=\varepsilon_k-\mu_L,\xi_p=\varepsilon_p-\mu_R$,那么有

$$I=\frac{2\pi e}{\hbar}\sum_{kp}|T_{kp}|^2(f_F(\xi_k)-f_F(\xi_p))\delta(\xi_p-\xi_k+\mu_R-\mu_L) \tag{3.29}$$

设加外电势V后,$\mu_L-\mu_R=eV$,即左右两边有电势差.进一步我们假设T_{kp}与k,p无关,则对k,p的求和可化为对能量的积分,则有

$$I=\frac{2\pi e}{\hbar}|T|^2\int d\omega N_L(\omega)N_R(\omega+eV)(f_F(\omega)-f_F(\omega+eV)) \tag{3.30}$$

在弱场情况下$eV\to 0$,那么$N_R(\omega+eV)\simeq N_R(\omega)$.由此可得微分电导

$$\frac{dI}{d(eV)}=-\frac{2\pi e}{\hbar}|T|^2\int d\omega N_L(\omega)N_R(\omega)\frac{\partial f_F(\omega+eV)}{\partial eV}\simeq\frac{2\pi e}{\hbar}|T|^2N_L(-eV)N_R(-eV). \tag{3.31}$$

由此看到微分电导联系了态密度在$\omega=-eV$时的取值.现在设左边为STM的针尖,其态密度N_L已知,那么待测体系的态密度N_R就可通过扫描各种不同电压V而获得.

相互作用部分

现在让我们考虑相互作用部分,其明显具有复杂的形式

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{1}{2}\sum_{jklm,\sigma\sigma'}\int d^dxd^dyV(x-y)w^*(x-R_j)w^*(y-R_k)w(y-R_l)w(x-R_m)\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{m\sigma} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{jklm,\sigma\sigma'}V_{jklm}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{m\sigma}. \end{aligned} \tag{3.32}$$

这里相互作用矩阵元$V_{jklm} = \int d^dxd^dyV(x-y)w^*(x-R_j)w^*(y-R_k)w(y-R_l)w(x-R_m)$ 由四个格点为中心的Wannier函数重叠度确定.$\hat{H}_{int}$可形象地理解成自旋为σ和σ'的电子在相互作用V_{jklm}影响下各自由m,l格点跳跃至j,k格点.

这样系统的哈密顿量是

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} = -\sum_{jm\sigma} t_{jm}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{jklm,\sigma\sigma'} V_{jklm}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{m\sigma} \quad (3.33)$$

Hubbard模型

对于一般性哈密顿量$\hat{H}$,其相互作用V_{jklm}是依赖于j,k,l,m的复杂函数,进一步处理需要物理上的考虑.首先考虑同格点的相互作用,$(j=k=l=m)$即

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\sum_{j,\sigma\sigma'} V_{jjjj}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma'}\hat{c}_{j\sigma'}\hat{c}_{j\sigma} &= \frac{1}{2}\sum_j V_{jjjj}(\overbrace{\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}}^{=0} + \hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow} + \overbrace{\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}}^{=0}) \\ &= \frac{1}{2}\sum_j V_{jjjj}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}) = \sum_j V_{jjjj}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow} \\ &= \sum_j V_{jjjj}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow} \end{aligned} \quad (3.34)$$

这里已经利用了同格点费米子算符满足$(\hat{c}_{j\sigma})^2 = (\hat{c}^\dagger_{j\sigma})^2 = 0$.对于具有平移不变性的晶格体系,$V_{jjjj}$应与格点$j$无关,这样我们定义Hubbard相互作用$U$,即$U \equiv V_{jjjj}$,这样这一项对哈密顿量的贡献是

$$U\sum_j \hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow} = U\sum_j \hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}. \quad (3.35)$$

这里$\hat{n}_{j\sigma} = \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}$,代表$j$格点自旋为$\sigma$电子的数目.容易看到,这一项描述的是处于同一个格点自旋相反的电子之间具有相互作用,其强度为U.

接下来,考虑涉及到两个不同格点的相互作用,此时总计有三种不同的j,k,l,m选取,即

1. $j=k, l=m, j\neq l$,其相互作用是$\frac{1}{2}\sum_{j\neq l,\sigma\sigma'} V_{jjll}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{l\sigma}$;
2. $j=l, k=m, j\neq k$,其相互作用是$\frac{1}{2}\sum_{j\neq k,\sigma\sigma'} V_{jkjk}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma'}\hat{c}_{j\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}$;
3. $j=m, k=l, j\neq l$,其相互作用是$\frac{1}{2}\sum_{j\neq l,\sigma\sigma'} V_{jllj}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{l\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{j\sigma}$.

对于涉及V_{jjll}的项,我们有

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\sum_{j\neq l,\sigma\sigma'} V_{jjll}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{l\sigma} &= \frac{1}{2}\sum_{j\neq l} V_{jjll}(\overbrace{\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{l\uparrow}\hat{c}_{l\uparrow}}^{=0} + \hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow}\hat{c}_{l\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{l\uparrow}\hat{c}_{l\downarrow} + \overbrace{\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow}}^{=0}) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{j\neq l} V_{jjll}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow}\hat{c}_{l\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{l\uparrow}\hat{c}_{l\downarrow}) = \sum_{j\neq l} V_{jjll}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow}\hat{c}_{l\uparrow} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{j\neq l} U_p\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow}\hat{c}_{l\uparrow}, \quad U_p \equiv 2V_{jjll}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

显然,这一项仅当体系多数格点都占据两个电子时才有明显的能量贡献.

接下来是电荷与自旋密度的交换相互作用项

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\sum_{j\neq k,\sigma\sigma'}V_{jkjk}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma'}\hat{c}_{j\sigma'}\hat{c}_{k\sigma}=\frac{1}{2}\sum_{j\neq k}V_{jkjk}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\\ =\ &-\frac{1}{2}\sum_{j\neq k}V_{jkjk}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}+\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow}).\end{aligned}\tag{3}$$

如果引入自旋升降算符[1]$\hat{S}^+_j=\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow},\hat{S}^-_j=\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}$ 以及自旋z方向投影$\hat{S}^z_j=(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow})/2$, 以及电子数算符$\hat{n}_j=\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}$, 注意到

$$\begin{aligned}\hat{S}^z_j\hat{S}^z_k+\frac{1}{4}\hat{n}_j\hat{n}_k&=\frac{1}{4}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow})(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow})+\frac{1}{4}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow})(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow})\\&=\frac{1}{2}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow})\end{aligned}\tag{3.38}$$

这样我们可以把上述相互作用改写为

$$\begin{aligned}&-\sum_{j\neq k}V_{jkjk}(\hat{S}^z_j\hat{S}^z_k+\frac{1}{4}\hat{n}_j\hat{n}_k+\frac{1}{2}\hat{S}^+_j\hat{S}^-_k+\frac{1}{2}\hat{S}^-_j\hat{S}^+_k)=-\sum_{j\neq k}V_{jkjk}(\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_k+\frac{1}{4}\hat{n}_j\hat{n}_k)\\ =\ &-\sum_{j\neq k}J_F(\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_k+\frac{1}{4}\hat{n}_j\hat{n}_k),\quad J_F\equiv V_{jljl}.\end{aligned}\tag{3.39}$$

上述相互作用可理解为j,k格点间具有自旋交换相互作用$\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_k$和电荷相互作用$\hat{n}_j\hat{n}_k$,前者就是Hund相互作用,若$J_F>0$则会使体系自旋倾向于铁磁排列,这也是原子中Hund第一规则的起源,只不过在那里j和l代表不同的正交轨道.[2]

最后,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\sum_{j\neq l,\sigma\sigma'}V_{jllj}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{l\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{j\sigma}&=\frac{1}{2}\sum_{j\neq l}V_{jllj}\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}\sum_{\sigma'}\hat{c}^\dagger_{l\sigma'}\hat{c}_{l\sigma'}=\frac{1}{2}\sum_{j\neq l}V_{jllj}\hat{n}_j\hat{n}_l\\&=\frac{1}{2}\sum_{j\neq l}V\hat{n}_j\hat{n}_l,\quad V\equiv V_{jllj}\end{aligned}\tag{3.40}$$

这一项描述电荷涨落,在足够强的负V下可导致电荷密度波不稳定性.

把以上这几项收集在一起得到扩展Hubbard模型:

$$\boxed{\hat{H}_{EH}=-\sum_{jm\sigma}t_{jm}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma}+U\sum_j\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}+\sum_{j\neq m}\left[-J_F\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_m+\left(\frac{V}{2}-\frac{J_F}{4}\right)\hat{n}_j\hat{n}_m+\frac{U_p}{2}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow}\hat{c}_{l\uparrow}\right]}\tag{3.41}$$

只考虑最近邻跃迁(以$\langle\rangle$表示)以及Hubbard相互作用时,以上模型就简化为著名的(单带)Hubbard 模型:

$$\boxed{\hat{H}_{Hubbard}=-t\sum_{\langle j,m\rangle\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma}+U\sum_j\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}}\tag{3.42}$$

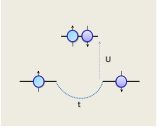


Figure 3.1: 最简单的晶格费米子相互作用模型,即Hubbard模型.

物理上$\hat{c}_{j\sigma}$可以描述过渡金属化合物中的d(轨道)电子,有机系统(基本上是塑料)如BEDT-TTF 的π电子,也适用于光学晶格中的费米型冷原子.当然,过渡金属氧化物(Ni,Cu)中的d轨道通常与氧原子的p轨道很接近(波函数重叠),因此更细致的描述也需要考虑p轨道的贡献,相应的模型也就更为复杂.例如铜氧化物材料的所谓三能带$(d-p)$模型就是典型的d,p轨道都考虑后的情况:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{dp} &= \hat{H}_t + \hat{H}_U + \hat{H}_V \\
\hat{H}_t &= -\sum_{\langle i,j\rangle\sigma} t_{dp}(\hat{d}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{p}_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \varepsilon_d \sum_i \hat{n}_{di} + \varepsilon_p \sum_i \hat{n}_{pi} \\
\hat{H}_U &= U_{dd}\sum_i \hat{n}_{di\uparrow}\hat{n}_{di\downarrow} + U_{pp}\sum_i \hat{n}_{pi\uparrow}\hat{n}_{pi\downarrow} \\
\hat{H}_V &= V_{dp}\sum_{\langle ij\rangle} \hat{n}_{di}\hat{n}_{pj}
\end{aligned} \tag{3.43}$$

这里$\hat{d}$代表d轨道电子,例如Cu^{2+}的$d_{x^2-y^2}$轨道,$\hat{p}$ 代表p轨道电子,例如O^{2-}的p_x, p_y轨道.t_{dp}代表d,p轨道间的跃迁能,一般是位置依赖的.$\varepsilon_d, \varepsilon_p$分别代表$d,p$轨道占据能,$U_{dd}, U_{pp}$是$d,p$轨道的Hubbard排斥能,$V_{dp}$代表$d,p$轨道间的Coulomb排斥.对铜氧化物$La_{2-x}M_xCuO_4$(M=Sr,Ba),光学测量给出$U_{dd} \simeq 6-10\text{eV}$,$t_{dp} \simeq 1-1.5\text{eV}$,$\Delta = \varepsilon_d - \varepsilon_p \simeq 1-3\text{eV}$,$U_{pp} \simeq 1\text{eV}$,$V_{dp} \simeq 1-1.5eV$.

- 单带Hubbard仅在一维和无穷维有严格解,在最感兴趣的二维和三维则没有一般意义上的明确解;
- 早期用来研究巡游铁磁性,后来则用来理解巡游反铁磁性和可能的高温超导电性;(图3.2显示了铜氧化物和铁基超导体的基本相图)
- 在强Hubbard相互作用区,也用来讨论Mott相变.

Hubbard模型的严格解(exact solution)

现在我们知道,单带Hubbard模型在如下几种情况下可以有严格解:

[1] 当然这里并不是真正的自旋,因为电子占据数并没有限制.
[2] 正交轨道间的电子直接交换导致铁磁型相互作用,例如具有多轨道特性的锰氧化物.

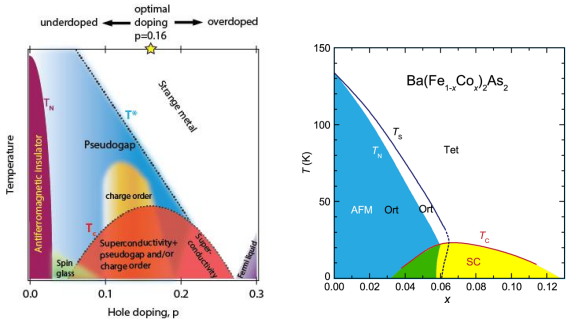


Figure 3.2: 铜氧化物高温超导体和铁基超导体的基本相图.

1. $t = 0$,这时候系统成为独立格点的集合,只需要求解一个格点的哈密顿量,例如$U\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}$.显然此时的本征态就是四个,即没有电子占据($|0\rangle$),有一个自旋向上电子占据($|\uparrow\rangle$),有一个自旋向下电子占据($|\downarrow\rangle$),有两个电子占据($|\uparrow\downarrow\rangle$),这四个态构成一个格点的一般态$|\Phi_j\rangle$而系统总的状态是不同格点状态的直接相乘;

2. $U = 0$,这是系统就只有跃迁项,那么在傅里叶变换后如果体系是仅有单子格,那么有$\sum_k \varepsilon_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$,这里$\varepsilon_k$是电子的色散关系,实际上就是固体物理中紧束缚近似下的能带色散.

3. $d = 1$,也就是空间维度是一的情况.

对于$U = 0$,若假设体系只有最近邻格点间的跃迁,比如一维时就有$\hat{H}_0 = -t\sum_{j\sigma}(\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j+1,\sigma} + \hat{c}^\dagger_{j+1,\sigma}\hat{c}_{j\sigma})$.假设周期边界条件$\hat{c}_{j\sigma} = \hat{c}_{j+N_s,\sigma}$,并做傅里叶变换 $\hat{c}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikR_j}\hat{c}_{k\sigma}$可得(晶格间距为$a$)

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= -t\sum_{j\sigma}\frac{1}{N_s}\sum_{k,k'}(e^{-ikR_j}e^{ik'(R_j+a)} + e^{-ikR_j}e^{ik'(R_j-a)})\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma} \\
&= -t\sum_{\sigma}\sum_{k,k'}\delta_{k,k'}(e^{ik'a} + e^{-ik'a})\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma} \\
&= \sum_{k\sigma} -2t(e^{ika} + e^{-ika})\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}. \qquad (3.44)
\end{aligned}$$

这里k取为第一布里渊区,例如$k \in [-\pi/a, \pi/a]$.

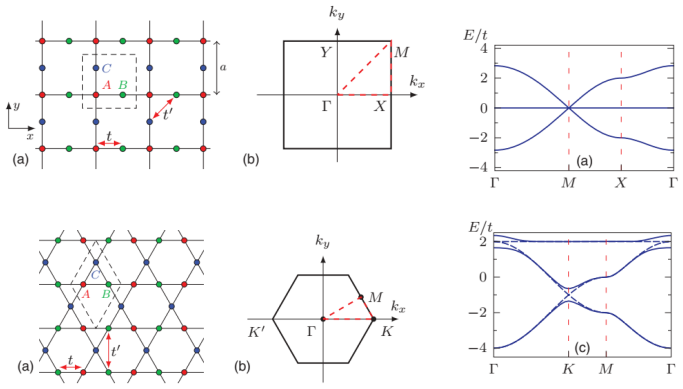


Figure 3.3: 上面三个图是Leib晶格的晶格结构,布里渊区以及电子色散.下面三个图对应于Kagome晶格,虚线是只有最近邻跃迁的情况.

对于二维正方晶格,只有最近邻格点间的跃迁的哈密顿量是

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle j,m\rangle,\sigma} \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma} = -t \sum_{j,\delta,\sigma} \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j+\delta,\sigma}. \tag{3.45}$$

这里δ指的是一个格点到最近邻格点的矢量,即$\delta = \pm a\hat{x}, \pm a\hat{y}$.($\hat{x},\hat{y}$是$x,y$方向的单位向量)做傅里叶变换可得

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{k\sigma}\sum_{\delta} e^{ik\cdot\delta}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}. \tag{3.46}$$

这里

$$\varepsilon_k \equiv -t\sum_{\delta} e^{ik\cdot\delta} = -t(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y).$$

类似的,对于简单立方,三角晶格,Leib晶格和Kagome(笼目)晶格,利用傅里叶变换都可以得到动量空间中的电子能谱ε_k.[3](图3.3)

值得注意的是,只有最近邻跃迁的Kagome晶格体系具有所谓的平带结构,也就是色散ε_k与动量k无关,是常数,这时该能带内电子的动能等效为零,因而计入相互作用后会显示各类关联效应,比如金属铁磁性,量子反常霍尔效应和超导电性等.其中近些年钒基笼目材料CsV_3Sb_5中观察到的电荷密度波与超导现象特别引人注意,详情可以参考综述文章.[4]

$d = 1$时的单带Hubbard模型首先由Lieb和伍法岳通过推广杨振宁处理一维δ函数相互作用费米子系统的方法(Bethe ansatz)严格求解了系统的基态能量

[3][Beugeling,Everts,Smith,Topological phase transitions driven by next-nearest-neighbor hopping in two-dimensional lattices,Phys.REV.B **86**,195129(2012)]

[4][奉熙林,姜坤,胡江平,钒基笼目超导体,物理学报(Acta Physics Sinica)**71**,118103(2022)]

密度,波函数,动量分布函数以及化学势.[5]

利用添加一个粒子和减少一个粒子所得化学势的差值,我们可以得到系统在半满也就是电子数与格点数恰好相等时候的基态的能隙,对于任意$U > 0$,系统总是存在能隙,这说明系统在半满基态时总是绝缘体.根据能带理论,我们知道元胞内电子数目为奇数时系统应是金属型的,因此能带理论预言半满时的Hubbard模型是金属但这与严格解矛盾.像这里由相互作用U驱动的从金属到绝缘体的相变称为Mott 相变,而这个绝缘体就是Mott绝缘体.

当然,绝缘体主要是针对电荷自由度,至于自旋自由度,后面的研究表明自旋自由度是无能隙的,也就是说任意小的能量就可使系统的自旋自由度得到激发.

从实际情况来说,Hubbard模型是研究电子关联最基本也是最重要的理论模型,在整个凝聚态物理历史上也是排名前几的基本模型系统.任何关于该模型的真正研究进展总会吸引广大理论研究者的目光.在一些乐观派眼里,如果我们可以精确求解Hubbad模型,那么关联电子系统的基本问题就都可得以解决.

事实上,除了一维和无穷维以外,[6]Hubbard模型并没有找到严格解,所有的解析和数值方法在处理该模型偏离半满的强耦合或中间耦合参数区域时都遇到极大困难,[7]困难的一个重要原因是在低温下存在许多能量极为接近$\Delta E \sim 0.01t$的有序态,例如条纹,自旋密度波,电荷密度波,对密度波,以及可能的d 波超导,这使得计算方法的误差以及近似会极大影响系统出现的状态.为了克服上述困难,目前人们通过通过综合不同计算手段来计算相同的参数区间,例如密度矩阵嵌入理论(DMET),密度矩阵重整化群(DMRG),辅助场量子蒙特卡洛(AFQMC)以及无穷大投影纠缠对态(iPEPS).这方面的重要进展包括空穴填充为1/8时Hubbard模型的基态是波长为$8a$的水平条纹态,(如图3.4)正方晶格低掺杂Hubbard模型在中间耦合和强耦合范围内不存在超导配对基态.[8]

另一个有希望的研究前沿是利用超冷原子技术直接模拟Hubbard模型的基

[5][Lieb,Wu,Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range,one-band model in one dimension,Phys.Rev.Lett.**20**,1445(1968)]N个电子的一次量子化波函数是$\Psi(x_1, x_2...x_N) = \sum_P A[P,Q]e^{\sum_{j=1}^{N} ik_{Pj}x_{Qj}}$ 这里$P = (P1, P2...PN), Q = (Q1, Q2...QN)$代表1到$N$的各种置换,$e^{ik_{Pj}x_{Qj}}$相当于每个电子$j$都是平面波,整个波函数就是各个电子的平面波在各种置换组合下的叠加,叠加系数是$A[P,Q]$,同时这个波函数对应的能量是$E = -\sum_{j=1}^{N} \cos k_j$.上述波函数就是Hubbard模型的Bethe ansatz波函数,原则上只要求解出叠加系数$A[P,Q]$就能得到波函数和能量的确定取值.在实际计算时,我们往往关心热力学极限的行为,这个会引入准动量k的分布函数$\rho(k)$以表示各类物理量,然后通过解相应的积分方程得到.

[6][Georges,Kotliar,Krauth,Rozenberg,Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions,Rev.Mod.Phys.**68**,13(1996)]详细介绍了无穷维下Hubbard模型的情况和动力学平均场近似.

[7][S. R. White,D. J. Scalapino,R. L. Sugar,E. Y. Loh,J. E. Gubernatis and R. T. Scalettar, Phys.Rev.B **40**,506(1989);J. P. F. LeBlanc et al., Solutions of the Two-Dimensional Hubbard Model: Benchmarks and Results from a Wide Range of Numerical Algorithms, Phys.Rev.X **5**,041041(2015);B.-X. Zheng et al., Stripe order in the underdoped region of the two-dimensional Hubbard model, Science **358**,1155(2017)]

[8][M. Qin et al., Absence of Superconductivity in the Pure Two-Dimensional Hubbard Model, Phys.Rev.X **10**,031016(2020)]

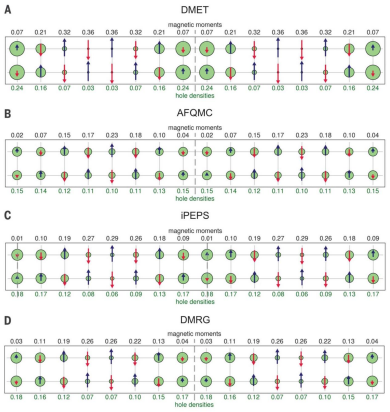


Figure 3.4: DMET,DMRG,AFQMC和iPEPS计算$x = 1/8$空穴填充Hubbard 模型基态的水平条纹序.在水平条纹序中,自旋排列基本是标准反铁磁构型,只不过在横向方向每间隔8个格点有一个畴壁,畴壁附近空穴聚集而自旋较小.

本性质,[9]这方面的进展表明中高温度区($T \sim J = \frac{4t^2}{U}$) 的Mott 态和反铁磁体特性都已在实验中得以确认,[10]进一步降低有效温度可能会得到全新的物理,[11]这对固体材料中观察到的赝能隙和奇异金属现象的解释具有重要价值.[12]

两格点Hubbard模型

一般的Hubbard模型是难以求解的,通常用数值模拟可以计算的系统尺度(N_s为格点总数)如下所示:

- ED:$N_s \leq 20$(精确)
- DQMC:$N_s \leq 400$(只有统计误差)
- DMRG:$N_s \sim 1000$(近似,截断Hilbert空间)

[9]用超冷费米子这个量子体系模拟如Hubbard模型的量子多体模型就是典型的"用魔法打败魔法".

[10][Mazurenko et al.,A cold-atom Fermi-Hubbard antiferromagnet,Nature **545**,462(2017);Salomon et al.,Direct observation of incommensurate magnetism in Hubbard chains,Nature **565**,56(2019);Koepsell et al.,Imaging magnetic polarons in the doped Fermi-Hubbard model,Nature **572**,358(2019)]

[11]目前冷原子模拟Hubbbard模型的困难在于其只能实现$T \succeq t$ 的中高温区间,这个区间的物理性质实际上早已由通常的凝聚态方法确定,而更低温度区域暂时无法实现,因此冷原子为代表的量子模拟还没有获得超越已知物理的新结果.

[12]近些年的铜氧化物超导体实验表明奇异金属行为源于赝能隙在零温消失的量子临界点的临界涨落(伴随着费米面从小费米面到大费米面的重构).[Tao Li,A short review of the recent progresses in the study of the cuprate superconductivity,arXiv:2103.13595(Chinese Phys. B **30** 100508(2021))]

- DMFT:$N_s \to \infty$(近似,空间平均)

此外,冷原子模拟可以实现的体系N_s在100个格点的量级,而其他量子模拟手段则只能处理更小的系统$N_s \sim 10$.注意到根据一般经验可知要得到系统接近于热力学极限的性质,我们至少需要计算的系统尺度为$N_s = L^d$,L为系统在某个方向上的线度,这里为$L \sim 50 - 100$.因此,一维Hubbard模型可以用现有的计算工具很好得模拟,而二维系统$N_s \sim 2500 - 10000$实际上超出了目前的计算能力,但不会超出太多,所以在未来还是可能被良好模拟的.至于三维系统,$N_s \sim 125000 - 1000000$,所以短期里不能期待出现可靠的数值模拟结果.

现在让我们通过求解两格点的玩具模型来得到一些物理图像.

$$\hat{H}_{two-site} = -t\sum_{\sigma}(\hat{c}^{\dagger}_{1\sigma}\hat{c}_{2\sigma} + \hat{c}^{\dagger}_{2\sigma}\hat{c}_{1\sigma}) + U(\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow} + \hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow}) \tag{3.47}$$

可以看到,总粒子数算符$\hat{N} = \sum_{\sigma}(\hat{n}_{1\sigma} + \hat{n}_{2\sigma})$显然与$\hat{H}_{two-site}$对易,也就是电子总数守恒,我们可以用总电子数标记体系不同类型的本征态.首先,当体系全空$N = 0$或全满时$N = 4$是平凡的.当体系中只有一个电子时,等效的哈密顿量只有动能起贡献,而填充为三个电子可以看做是体系存在一个空穴,与填一个电子时的性质相似.这样物理上真正感兴趣的是半填满,也就是$N = 2$的情况.可以写出$N = 2$时体系的六个双电子态(Fock态):

$$|\uparrow\uparrow\rangle = c^{\dagger}_{1\uparrow}c^{\dagger}_{2\uparrow}|0\rangle \tag{3.48}$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle = c^{\dagger}_{1\downarrow}c^{\dagger}_{2\downarrow}|0\rangle \tag{3.49}$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = c^{\dagger}_{1\uparrow}c^{\dagger}_{2\downarrow}|0\rangle \tag{3.50}$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle = c^{\dagger}_{1\downarrow}c^{\dagger}_{2\uparrow}|0\rangle \tag{3.51}$$

$$|0d\rangle = c^{\dagger}_{2\uparrow}c^{\dagger}_{2\downarrow}|0\rangle \tag{3.52}$$

$$|d0\rangle = c^{\dagger}_{1\uparrow}c^{\dagger}_{1\downarrow}|0\rangle \tag{3.53}$$

可以看到前四个态表示每个格点各有一个电子的情况,而后面两个代表一个格点双占据,另一个格点没有占据的情况.从自旋的角度来看,后四个态自旋为零,而前两个自旋为± 1.注意到总自旋$\hat{S}_z = \frac{1}{2}\sum_j(\hat{c}^{\dagger}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}^{\dagger}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow})$ 也与哈密顿量对易,这表明前两个自旋不为零的态作用的哈密顿量矩阵与后面四个自旋为零态的哈密顿矩阵是彼此独立的,也是说以这六个态为基矢写出的哈密顿量是分块对角的.

简单计算可知$|\uparrow\uparrow\rangle$与$|\downarrow\downarrow\rangle$这两个三重态是系统能量为0 的本征态.对于剩下四个态,以它们构成4维的Hilbert空间,四维空间的基矢是

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |0d\rangle \\ |d0\rangle \end{pmatrix} \tag{3.54}$$

接下来,计算哈密顿量在这个4维空间中的矩阵元,注意有如下关系

$$\langle\downarrow\uparrow|\hat{H}_{two-site}|0d\rangle = -t\langle\downarrow\uparrow|\hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{2\downarrow}|0\rangle = t\langle\downarrow\uparrow|\hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}|0\rangle = t$$
$$\langle\downarrow\uparrow|\hat{H}_{two-site}|d0\rangle = -t\langle\downarrow\uparrow|\hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}|0\rangle = -t\langle\downarrow\uparrow|\hat{c}^{\dagger}_{2\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}|0\rangle = t$$

这样可得哈密顿量矩阵

$$\hat{H}_{two-site} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -t & -t \\ 0 & 0 & t & t \\ -t & t & U & 0 \\ -t & t & 0 & U \end{pmatrix} \tag{3.55}$$

对角化这个4×4矩阵可得4个能量本征值:

$$E=0,\quad E=U,\quad E=\frac{1}{2}(U-\sqrt{U^2+16t^2}),\quad E=\frac{1}{2}(U+\sqrt{U^2+16t^2}) \tag{3.56}$$

$E=0$的本征值对应的态是z方向自旋投影为零的三重态$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, 显然加上原来的两个,这三个三重态的能量是简并的.

$E=U$的本征值对应的态是高能态,表示两个双占据态的混合$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0d\rangle + |d0\rangle)$.

$E=\frac{1}{2}(U-\sqrt{U^2+16t^2})$是能量最低态(基态),其混合了四个自旋为零的态,其波函数为:

$$|\psi\rangle = \frac{4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{-4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}|\downarrow\uparrow\rangle + |0d\rangle + |d0\rangle \tag{3.57}$$

注意这个波函数还没有归一化.为便于参考,可以计算这个基态下的双占据数$D=\langle\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow}\rangle = \frac{8t^2}{16t^2+U^2-U\sqrt{U^2+16t^2}}$. 当考虑强耦合极限即$U >> t$时,以上的波函数化简为

$$|\psi\rangle \approx \frac{U}{2t}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) + |0d\rangle + |d0\rangle \approx \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{3.58}$$

最后一步重新归一化了波函数,此时,能量简化为$E=-\frac{4t^2}{U}$.注意到强耦合时这个态是自旋单重态.

而最后一个解在强耦合极限下是$E=U+\frac{4t^2}{U}$,$|\psi\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(|0d\rangle + |d0\rangle)$.

这样我们发现,在强耦合极限下,体系能量较低的四个态分别是三个三重态与一个单重态,另两个高能态主要是涉及双占据态的混合.把强耦合下的能级与波函数整理如下:

$$E=U+\frac{4t^2}{U},\quad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0d\rangle + |d0\rangle) \tag{3.59}$$
$$E=U,\qquad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0d\rangle + |d0\rangle) \tag{3.60}$$
$$E=0,\qquad |\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{3.61}$$
$$E=-\frac{4t^2}{U},\qquad |\psi\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{3.62}$$

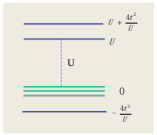


Figure 3.5: 半满两格点Hubbard模型在强耦合($U \gg t$)下的能级分布情况.

如果只关心低能态,那么此时三个三重态与一个单重态可以完全对应一个有效自旋$S=1/2$的量子Heisenberg模型,即[13]

$$\hat{H}_{two-site}^{N=2,U/t>>1} \leftrightarrow \hat{H}_{eff} = J\left(\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 - \frac{1}{4}\right), \quad J = \frac{4t^2}{U} > 0, \quad U/t >> 1 \tag{3.63}$$

注意到$J = \frac{4t^2}{U} > 0$这表明半填满模型的低能有效模型就是反铁磁型的Heisenberg模型.

也可以用微扰理论来理解反铁磁耦合的来源.根据非简并微扰理论,在$U >> t$的情况下有

$$\begin{aligned} |\uparrow\downarrow\rangle' &= |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\langle 0d|\hat{H}_t|\uparrow\downarrow\rangle}{-U} + \frac{\langle d0|\hat{H}_t|\uparrow\downarrow\rangle}{-U} + \mathcal{O}((t/U)^2) && (3.64)\\ &= |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{t}{U}(|0d\rangle + |d0\rangle) + \mathcal{O}((t/U)^2) && (3.65) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\downarrow\uparrow\rangle' &= |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\langle 0d|\hat{H}_t|\downarrow\uparrow\rangle}{-U} + \frac{\langle d0|\hat{H}_t|\downarrow\uparrow\rangle}{-U} + \mathcal{O}((t/U)^2) && (3.66)\\ &= |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{t}{U}(|0d\rangle + |d0\rangle) + \mathcal{O}((t/U)^2) && (3.67) \end{aligned}$$

这里的微扰修正物理上来自于从单占据到双占据的虚跃迁.而另外两个三重态没有修正,即$|\uparrow\uparrow\rangle' = |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle' = |\downarrow\downarrow\rangle$. 这样在上面两个态下的哈密顿量是

$$H = \begin{pmatrix} \langle\uparrow\downarrow|'H|\uparrow\downarrow\rangle' & \langle\uparrow\downarrow|'H|\downarrow\uparrow\rangle' \\ \langle\downarrow\uparrow|'H|\uparrow\downarrow\rangle' & \langle\downarrow\uparrow|'H|\downarrow\uparrow\rangle' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2t^2}{U} & +\frac{2t^2}{U} \\ +\frac{2t^2}{U} & -\frac{2t^2}{U} \end{pmatrix} \tag{3.68}$$

对角化这个哈密顿量我们得到

$$E = 0, \quad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle' + |\downarrow\uparrow\rangle') = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$E = -\frac{4t^2}{U}, |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle' - |\downarrow\uparrow\rangle') = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) + \frac{J}{2t}(|0d\rangle + |d0\rangle)$$

[13]两个$S=1/2$自旋耦合$\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2$的本征值由$\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 = \frac{1}{2}((\hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2)^2 - \hat{\vec{S}}_1^2 - \hat{\vec{S}}_2^2)$ 确定.根据量子力学的角动量耦合可知两个$S=1/2$自旋耦合的总自旋是$S=0$或$S=1$,这分别对应$\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 = \frac{1}{2}(0 \times 1 - 2\frac{3}{4}) = -3/4, \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 = \frac{1}{2}(1 \times 2 - 2\frac{3}{4}) = 1/4$.

可以看到最低能的单重态有一部分贡献来自于虚的双占据态的跃迁.

最后,计算系统的基态双占据数$D=\langle\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow}+\hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow}\rangle_g$,

$$D=\langle\psi_g|\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow}+\hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow}|\psi_g\rangle/\langle\psi_g|\psi_g\rangle, \tag{3.69}$$

$$|\psi_g\rangle=\frac{4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}|\uparrow\downarrow\rangle+\frac{-4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}|\downarrow\uparrow\rangle+|0d\rangle+|d0\rangle \tag{3.70}$$

利用波函数和双占据算符的矩阵表示,可得

$$\begin{aligned}
D &= \frac{\begin{pmatrix} \frac{4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}} & \frac{-4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}} & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}\\ \frac{-4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}\\1\\1 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} \frac{4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}} & \frac{-4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}} & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}\\ \frac{-4t}{-U+\sqrt{U^2+16t^2}}\\1\\1 \end{pmatrix}} \\
&= \frac{2}{2+2\left(\frac{4t}{\sqrt{U^2+16t^2}-U}\right)^2}
\end{aligned} \tag{3.71}$$

- 单重态/反铁磁交换的形成源自双占据态的跃迁,电子通过虚跃迁的退局域化降低能量,[14]反铁磁通过动能降低能量而铁磁通过减少双占据降低能量.
- 这里半满时候的两格点Hubbard模型可以看作是描述氢分子基态的有效模型.[15]

对于完整的半填满Hubbard模型,推广两格点的讨论到每一对格点,我们得到强耦合极限下其等价于$S=1/2$反铁磁量子Heisenberg模型:

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_{Hubbard}^{N=N_s,U/t>>1}=-\sum_{jm\sigma}t_{jm}\hat{c}_{j\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{m\sigma}+U\sum_j\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}\\
&\Rightarrow\hat{H}_{AFH}=\sum_{jm}J_{jm}\left(\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_m-\frac{1}{4}\right),\quad J_{jm}=\frac{4t_{jm}^2}{U}.
\end{aligned} \tag{3.72}$$

$t-J$模型和隐藏费米液体

一个重要的问题是对半满Hubbard模型或者$d-p$模型进行电子或者空穴掺杂时,体系在强耦合极限下的等效哈密顿量.由简并微扰论[16]可以求得此时的等效

[14]这就是著名的Anderson超交换机制,其建立在Mott绝缘体的基础上并考虑磁性离子之间的动态电子交换(虚跃迁).[Anderson,New Approach to the Theory of Superexchange Interactions,Phys.Rev.**115**,2(1959)]

[15]比如说两个格点对应两个氢原子,电子算符对应在氢原子的s轨道产生或消灭一个电子,Hubbard相互作用U代表氢原子s态能级占据两个电子时能量的升高.跃迁强度t表示电子在两个氢原子s轨道间的跳跃强度.Hubbard模型基态的自旋单重态就对应氢分子基态时的共价键.

[16]例如参阅李正中《固体理论》第十一章第九节.

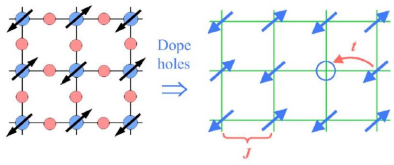


Figure 3.6: 二维铜氧层所对应的$d-p$模型简化为单带$t-J$模型.其中Cu原子位于正方晶格的顶点上而边的中点则有O原子.半满填充时Cu原子处电子之间的强烈Coulomb排斥导致Mott局域化,因而低能下体系由反铁磁型的Heisenberg 模型描述.掺杂空穴或电子后,电子在反铁磁背景上的运动由$t-J$模型描述.[14]

模型是研究铜氧化物高温超导体十分有名的$t-J$模型:(如图3.6)

$$\boxed{\hat{H}_{t-J}=\hat{P}\left[-t\sum_{\langle j,m\rangle\sigma}(\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma}+\hat{c}^{\dagger}_{m\sigma}\hat{c}_{j\sigma})+J\sum_{\langle j,m\rangle}\left(\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_m-\frac{1}{4}\hat{n}_j\hat{n}_m\right)\right]\hat{P}} \tag{3.73}$$

这里$\hat{P}=\prod_j\hat{P}_j=\prod_j(1-\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow})$ 是投影算符,其意义是从体系Hilbert空间中去掉格点有两个电子占据的情况.其相当于Gutzwiller投影算符$\hat{P}(g)=\prod_j(1-g\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow})$的$g=1$极限.历史上从三带$d-p$ 模型约化至$t-J$模型主要是张富春和Rice的早期工作,其提出的Zhang-Rice单态神似于著名的Kondo单态,(毕竟那时候张和李雅达已经做了重费米子的大N展开,其中自然涉及Kondo单态)且等价于隶玻色子理论中的带电隶玻色子.

让我们先分析模型的局域Hilbert空间.首先,完整的局域(每个格点)Hilbert空间满足完备性关系:

$$|0\rangle\langle 0|+|\uparrow\rangle\langle\uparrow|+|\downarrow\rangle\langle\downarrow|+|\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|=1 \tag{3.74}$$

当考虑投影算符后,双占据态$|\uparrow\downarrow\rangle$被排除,现在每个格点的Hilbert空间维度从4降低到3,完备性关系变为:

$$|0\rangle\langle 0|+|\uparrow\rangle\langle\uparrow|+|\downarrow\rangle\langle\downarrow|=1. \tag{3.75}$$

为了在计算时方便地考虑这个效果,我们可以把电子算符与投影合并在一起,即定义新的算符:

$$\tilde{\hat{c}}_{j\sigma}=\hat{c}_{j\sigma}\hat{P}_j=\hat{c}_{j\sigma}(1-\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow})=|0\rangle\langle\sigma|\equiv\hat{X}^{0\sigma}_j \tag{3.76}$$

这里$\hat{X}^{0\sigma}_j$就是Hubbard算符.(当然也有其他Hubbard算符,即$\hat{X}^{00}_j=|0\rangle\langle 0|,\hat{X}^{\sigma 0}_j=|\sigma\rangle\langle 0|,\hat{X}^{\sigma\sigma'}_j=|\sigma\rangle\langle\sigma'|$) 很显然,$\tilde{\hat{c}}_{j\sigma}$或$\hat{X}^{0\sigma}_j$已经不满足标准的费米子反对易关系.

投影算符与投影波函数

在实际计算中,如果$|\Phi\rangle$是投影前哈密顿量的本征态,那么$|\Psi\rangle = \hat{P}|\Phi\rangle$必然是投影后哈密顿也就是有投影的$t-J$模型的本征态.因此这提示我们可以先计算不加投影时$t-J$模型的本征态,然后再对得到的态做投影以获得有投影时的本征态.但是实际操作却相当困难,比如我们用一个Slater行列式描述投影前的本征态,例如费米液体$|\Phi_{FL}\rangle$,那么投影后的状态将是系统大小的指数多量级Slater行列式的叠加,这对解析计算堪称灾难.显然在此基础上作用标准算符的计算几乎是不可能的任务.[17]

为了对投影态有一点定性的理解,我们可以考虑投影的费米气体态,即$|\Psi\rangle = \hat{P}|\Phi_{FL}\rangle$.直观上来看,投影的费米气体态会保留费米气体的一些性质但同时也包含电子关联的修正,这类态可以作为我们理解$t-J$模型性质的出发点.为简单起见,考虑两个格点,并且体系有1个自旋向上和向下的电子,那么相应的费米气体态可以写成$|\Psi_{FL}\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{k_1\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{k_2\downarrow}|0\rangle$(我们取周期边界条件那么动量$k_i = \frac{2\pi}{L}n_i, L=2, n_i = 0,1$).由于投影算符作用于实空间,因此我们需要通过傅里叶变换把$|\Psi_{FL}\rangle$写到实空间,可得

$$\begin{aligned}
|\Psi_{FL}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_j e^{-ik_1R_j}\hat{c}^{\dagger}_{j\uparrow}\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_l e^{-ik_2R_l}\hat{c}^{\dagger}_{l\downarrow}|0\rangle \\
&= \frac{1}{L}\sum_{j,l=0,1} e^{-i(k_1R_j+k_2R_l)}\hat{c}^{\dagger}_{j\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{l\downarrow}|0\rangle \\
&= \frac{1}{2}(e^{-i(k_10+k_20)}\hat{c}^{\dagger}_{0\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{0\downarrow}|0\rangle + e^{-i(k_10+k_21)}\hat{c}^{\dagger}_{0\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}|0\rangle \\
&+ e^{-i(k_11+k_20)}\hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{0\downarrow}|0\rangle + e^{-i(k_11+k_21)}\hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{1\downarrow}|0\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow,0\rangle + e^{-ik_2}|\uparrow,\downarrow\rangle - e^{-ik_1}|\downarrow,\uparrow\rangle + e^{-i(k_1k_2)}|0,\uparrow\downarrow\rangle). \quad (3.77)
\end{aligned}$$

注意我们约定态的排序是$|\uparrow\rangle_0|\downarrow\rangle_0|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_1$,因此上式中$|\downarrow,\uparrow\rangle$前面的系数有一个负号,这源自$\hat{c}^{\dagger}_{1\uparrow}$需要跨过$\hat{c}^{\dagger}_{0\downarrow}$后再作用到1格点的真空态,由于费米子算符间的反对易关系自然就有一个负号.

现在,让我们对$|\Psi_{FL}\rangle$作用投影算符$\hat{P} = (1-\hat{n}_{0\uparrow}\hat{n}_{0\downarrow})(1-\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow})$.由于投影算符的作用时投影掉所有一个格点占据两个电子的状态,那么$|\Psi_{FL}\rangle$中$|\uparrow\downarrow,0\rangle, |0,\uparrow\downarrow\rangle$态就被舍弃了,这样四个态就剩下两个态,所以投影后的态就是$|\Psi\rangle = \hat{P}|\Psi_{FL}\rangle = \frac{1}{2}(e^{-ik_2}|\uparrow,\downarrow\rangle - e^{-ik_1}|\downarrow,\uparrow\rangle)$.

这样,对于电子数和自旋守恒的晶格问题,($N_\uparrow$个自旋上电子,$N_\downarrow$个自旋下电

[17]用变分蒙特卡洛模拟可以计算一两百个格点组成的体系,不过依然有诸多困难需要克服.

子,总电子数为$N=N_\uparrow+N_\downarrow$,有$N_s$个格点)我们可以把投影波函数写成如下形式:

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle=\hat{P}|\Psi_{FL}\rangle &= \prod_{j=1}^{N_s}(1-\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow})\prod_{k_i}^{N_\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k_i\uparrow}\prod_{k_j}^{N_\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k_j\downarrow}|0\rangle \\ &= \prod_{j=1}^{N_s}(1-\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow})\underbrace{\left(\prod_{k_i}^{N_\uparrow}\sum_{m=1}^{N_s}e^{-ik_iR_m}\hat{c}^\dagger_{m\uparrow}\right)\left(\prod_{k_j}^{N_\downarrow}\sum_{n=1}^{N_s}e^{-ik_jR_n}\hat{c}^\dagger_{n\downarrow}\right)|0\rangle}_{|\Psi_{FL}\rangle}\end{aligned} \tag{3.78}$$

这样$|\Psi_{FL}\rangle$在格点作为基矢的Fock态下总共有$(N^s)^N$项.然后投影算符会把这些项中任何涉及电子双占据的态排除掉,剩下的态就是所要的投影波函数.我们可以把投影后的波函数写成Fock态叠加的形式$|\Psi\rangle=\sum_i c_i|c_i\rangle$,这样物理量的期望值可以用下式计算:

$$\frac{\langle\Psi|\hat{\mathcal{O}}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}=\frac{\sum_{ij}c_i^*c_j\langle c_i|\hat{\mathcal{O}}|c_j\rangle}{\sum_i|c_i|^2}. \tag{3.79}$$

如果把$c_i^*c_j/\sum_i|c_i|^2$看作概率分布函数,那么上式就可以用蒙特卡洛方法进行计算,如果本身波函数中还有变分参数,那么相应的形式就叫做变分蒙特卡洛(variational Monte Carlo,VMC).

隶玻色子与重整化平均场理论

因此,由于投影算符的存在,关于$t-J$模型的研究并不比Hubbard模型简单.一类流行的方法是所谓隶粒子(slave particle) 方法.在这类方法中,投影算符影响通过引入非物理的辅助粒子而得以计入,这些辅助粒子形式下的模型一般比原始模型更为复杂,因此其计算结果的可靠性值得怀疑.在当前的$t-J$模型中,若采用 隶玻色子(slave boson)方法,则我们需要把电子算符分解为带电的玻色子和带自旋的费米子,即

$$\hat{c}_{j\sigma}=\hat{b}^\dagger_j\hat{f}_{j\sigma} \tag{3.80}$$

同时投影后的完备性关系要求$\sum_\sigma\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{f}_{j\sigma}+\hat{b}^\dagger_j\hat{b}_j=1$ 严格满足.这样投影的效果通过改写电子算符而得到明确体现.此时,$t-J$模型改写为

$$\hat{H}_{t-J}=-t\sum_{\langle j,m\rangle\sigma}(\hat{b}^\dagger_m\hat{b}_j\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{f}_{m\sigma}+\hat{b}^\dagger_j\hat{b}_m\hat{f}^\dagger_{m\sigma}\hat{f}_{j\sigma})+J\sum_{\langle j,m\rangle}\left(\hat{\vec{S}}^f_j\cdot\hat{\vec{S}}^f_m-\frac{1}{4}\hat{n}^f_j\hat{n}^f_m\right) \tag{3.81}$$

由于$\hat{b},\hat{f}$都是标准的玻色子和费米子,因此传统的平均场和费曼图形技术就可以用在$t-J$ 模型的计算当中.

当然,人们也采用更简单的方式处理投影算符,如张富春和Rice等通过估计投影影响下对电子跃迁的平均影响得到了Gutzwiller近似下的有效模型:

$$\hat{H}=-tg_t\sum_{\langle j,m\rangle\sigma}(\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma}+\hat{c}^\dagger_{m\sigma}\hat{c}_{j\sigma})+Jg_s\sum_{\langle j,m\rangle}\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_m \tag{3.82}$$

这里$g_t = \frac{2x}{1+x}, g_s = \frac{4}{(1+x)^2}$,$x$是相对于半满的空穴密度.对$J$项的进一步平均场近似导致了著名的重整化平均场理论,或者说是无修饰版的共振价键理论(the 'plain vanilla' version of RVB).[13]具体而言,我们可以明确写出J项的形式

$$\begin{aligned}\hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_m &= \frac{1}{2}(\hat{S}_j^+ \hat{S}_m^- + \hat{S}_j^- \hat{S}_m^+) + \hat{S}_j^z \hat{S}_m^z \\ &= \frac{1}{2}(\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} + \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}) \\ &+ \frac{1}{4}(\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow})(\hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} - \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}) \end{aligned} \tag{3.83}$$

注意到横向自旋相互作用部分$\hat{S}^+\hat{S}^-$可以写到配对通道也可为粒子−空穴通道,

$$\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} = \overbrace{\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow}}^{pairing} = -\overbrace{\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}}^{particle-hole} \tag{3.84}$$

同理有

$$\hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow} = \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} = -\hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow} \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}. \tag{3.85}$$

注意到配对与粒子−空穴通道本身没有差别,那么其对原始形式的贡献都是1/2,即有

$$\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} = \frac{1}{2}\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow} - \frac{1}{2}\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \tag{3.86}$$

类似的,纵向自旋相互作用部分$\hat{S}^z\hat{S}^z$也可写到配对通道或粒子− 空穴通道,

$$\begin{aligned} & (\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow})(\hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} - \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}) \\ = \; & \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} - \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow} - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} + \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow} \\ = \; & -\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow} \hat{c}_{j\downarrow} - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow} - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow} \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}. \end{aligned}$$

这样综合所有结果可得

$$\begin{aligned}\hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_m &= -\frac{1}{4}(\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger)(\hat{c}_{m\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow}) \\ &- \frac{1}{4}(\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow} + \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow})(\hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}_{m\downarrow} \hat{c}_{j\downarrow}). \end{aligned} \tag{3.87}$$

接下来,让我们对上式做平均场近似,很显然可以引入如下配对序参量Δ_{jm}以及所谓价键序参量χ_{jm}

$$\Delta_{jm} = \langle \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \rangle, \quad \chi_{jm} = \langle \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}_{m\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \rangle = \sum_\sigma \langle \hat{c}_{m\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle \tag{3.88}$$

前者的物理意义是在j,m格点生成一对自旋单重态的电子而后者则是产生j,m格点间的跃迁.这样我们发现平均场近似后的模型是

$$\hat{H} = \sum_{\langle j,m \rangle \sigma} \left(-tg_t - \frac{J}{4} g_s \chi_{jm} \right) \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{m\sigma} + h.c. - \frac{J}{4} g_s \sum_{\langle j,m \rangle} (\Delta_{jm}(\hat{c}_{m\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}_{m\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow}) + h.c. - |\Delta_{jm}|^2 - |\chi_{jm}|^2). \tag{3.89}$$

进一步,为简单起见我们假设$\chi_{jm}=\chi$是空间无关的常数,而$\Delta_{j,j\pm x}=\pm\Delta,\Delta_{j,j\pm y}=\mp\Delta$,这里$\Delta$也是常数.那么上述方程在傅里叶变换后可化为

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}-\sum_{k}(\Delta_k\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}+h.c.)+\frac{J}{4}g_s 2N_s(\Delta^2+\chi^2). \tag{3.90}$$

$\varepsilon_k=2(-tg_t-\frac{J}{4}g_s\chi)(\cos k_x+\cos k_y)$,$\Delta_k=2\frac{J}{4}g_s\Delta(\cos k_x-\cos k_y)$. 我们发现上述哈密顿量类似于一个等效的BCS配对哈密顿,只不过反铁磁交换重整化了电子色散并且导致配对的发生,这就是Anderson强调的反铁磁交换诱导超导配对.通过求解这些序参量的方程能够得到平均场相图,其很类似隶玻色子理论的结果.

隐藏费米液体与极端关联费米液体

当需要超越Gutzwiller近似/隶玻色子平均场时,Anderson的隐藏费米液体理论(hidden Fermi liquid,HFL)是理解投影算符物理效应的重要尝试.[18] 其核心点是铜氧化物在最佳掺杂时的正常态可以用投影的费米液体描述,($|\Psi\rangle=\hat{P}|\Phi_{FL}\rangle$) 在技术上这相当于考虑投影后的电子算符可以分解为投影前电子算符与电荷密度和自旋密度算符的叠加:

$$\tilde{\hat{c}}_{j\uparrow}=\hat{c}_{j\uparrow}(1-\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow})\rightarrow\tilde{\hat{c}}_{k\uparrow}\simeq\sum_{q}(\hat{c}_{k-q\uparrow}\hat{\rho}_{q\downarrow}+\hat{c}_{k-q\downarrow}\hat{S}^{\dagger}_{q}). \tag{3.91}$$

这样,进一步的物理量计算就只需要把这些算符作用于费米液体态上进行即可.(类似于Nozieres和de Dominicis 研究的金属x射线谱问题)这相比于先计算投影后的状态再作用上未投影的算符明显更容易操作.

由于HFL理论计算的谱性质与实验符合良好,Anderson认为我们现在有了处理Gutzwiller投影算符可控且系统化的理论.当然他还建议欠掺杂区正常态的性质应从隐藏/投影的RVB($|\Psi\rangle=\hat{P}|\Phi_{RVB}\rangle$[19])出发进行系统化的分析.

- HFL可能是正确处理$t-J$模型的出发点,值得进一步研究.
- HFL的核心在于处理强关联情况下系统自发出现的对状态空间的限制/约束,在$t-J$模型中就是Gutzwiller 投影算符.

当然,HFL很大程度上是一种猜测性的理论,毕竟其假设投影前的状态是费米液体.那么有没有理论更加定量地处理投影呢？答案是B.Sriram Shastry提出的极端关联费米液体理论(Extremely Correlated Fermi Liquids,ECFL).这套理论首先针对$U=\infty$的Hubbard模型和$t-J$模型提出,后来又进一步扩展到Anderson杂

[18] [Anderson, Hidden Fermi liquid: The secret of high−Tc cuprates, Phys.Rev.B **78**,174505(2008); Anderson,Casey, Hidden Fermi liquid; the moral: a good effective low-energy theory is worth all of Monte Carlo with Las Vegas thrown in, J.Phys.:Condens.Matter **22**,164201(2010)]

[19] 选择什么样的RVB态似乎是个严肃的问题.

质模型.[20]ECFL首先从考虑投影的电子算符,也就是Hubbard 算符出发建立物理电子Green 函数的运动方程.然后再把这套运动方程与一套辅助费米子相联系,此时物理电子的Green函数可写成辅助费米子Green函数与一个自适应的谱权重的乘积.自然辅助费米子与谱权重也满足相应的方程.在具体计算时,例如$t-J$ 模型可以对Gutzwiller投影算符中的g因子做展开.

最后,注意到一维$t-J$模型的数值计算表明当J/t不太大时系统处于Luttinger液体态,而大的J/t导致系统出现相分离.[21]

总体来说,关于$t-J$模型主要性质理解基本停留在一维和准一维.(一些ED和DMRG研究提供了主要的结果)二维情况不同方法得到的结果很不相同.[22]当然,二维$t-J$模型的所谓单空穴问题,也就是在半满的情况下考虑一个空穴运动,是相对理解比较清楚的.根据自洽Born近似和量子蒙特卡洛的对比,[23]单空穴运动会有一个等效的能带,这个能带的宽度大体上是J 的量级($J<t$ 情况),然后能带的底部在$(\pi/2,\pi/2)$ 附近.此外,单空穴的能量还有一个正比于$(\frac{J}{t})^{2/3}t$的部分,这个部分来自单空穴在反铁磁背景下运动会导致运动轨迹上的自旋与反铁磁背景失配,这样空穴相当于受到一个正比于运动轨迹长度的线性势能,这个线性势对应的Schödinger 方程有束缚态解的能量是$\sim(\frac{J}{t})^{2/3}t$,这个解称为所谓的弦解(string).[24]

[20][B. S. Shastry, Extremely Correlated Fermi Liquids, Phys.Rev.Lett. **107**,056403(2011);B. S. Shastry, Extremely correlated Fermi liquids: The formalism, Phys.Rev.B **87**,125124 (2013);B. S. Shastry, E. Perepelitsky and A. C. Hewson, Extremely correlated Fermi liquid study of the $U=\infty$ Anderson impurity model, Phys.Rev.B **88**,205108(2013)]

[21][M. Ogata, M. U. Luchini, S. Sorella, and F. F. Assaad, Phase diagram of the one-dimensional $t-J$ model, Phys.Rev.Lett. **66**,2388 (1991)]

[22]例如辅助粒子平均场理论预言了一系列超导和磁性态以及古怪的通量态.变分蒙特卡洛与平均场结果并不一致且显示多相竞争的倾向.ECFL 与DMFT的结果定性上倒是很相似.

[23][Kane,Lee and Read, Motion of a single hole in a quantum antiferromagnet, Phys.Rev.B**39**,6880(1989);Brunner,Assaad,Muramatsu,Single-hole dynamics in the t-J model on a square lattice,Phys.Rev.B**62**,15480(2000)]

[24][Shraiman and Siggia, Two-Particle Excitations in Antiferromagnetic Insulators,Phys.Rev.Lett.**60**,740(1988);Trugman,Interaction of holes in a Hubbard antiferromagnet and high-temperature superconductivity,Phys.Rev.B**37**,1597(1988)]弦的解释更直观的来源是审视$t-J_z$模型,也就是仅保留J项中的S^zS^z耦合,这样反铁磁的自旋背景是静态的,空穴的运动就自然导致线性势.

Heisenberg模型与自旋波激发:量子磁性来临

以量子Heisenberg模型,Hubbard模型以及相关实际材料为代表的量子磁性研究是现代凝聚态物理的重要话题之一.区别于经典统计力学和Landau唯象理论支配的经典磁性研究,许多低维磁性材料的物理性质只能从微观量子力学出发得以理解和研究.磁性从本质上讲总是量子的,无论是轨道磁矩还是自旋磁矩都来自量子力学效应.但是很多磁性现象存在经典物理对应,例如自旋波既可以通过求解经典Bloch方程得到,也可以由完全量子的Heisenberg模型出发通过HP玻色子求得.但是对于许多一维和二维磁性系统,其低温性质明显偏离磁有序态的预言,显示出具有强涨落特性的顺磁性,这类特殊的顺磁态只能在量子力学框架内得以理解和计算.我们通常称这类顺磁态为量子顺磁态,量子磁性研究的目的最基本的一个就是搞清楚这类量子顺磁态的物理特性和可能的实际应用.

量子Heisenberg模型是研究量子磁性的基本模型,(适用于绝缘体的磁性,巡游磁性需要Hubbard或更复杂的多带多轨道模型)虽然实际材料远比该模型复杂,但许多重要的现象都可由该模型推演得到.下面简单列出关于量子Heisengerg模型的基本事实:

- 对于$S=1/2$反铁磁量子Heisenberg模型,在两格点的情况,我们已经知道体系的基态是自旋单重态,而激发态是三个自旋三重态.
- 在一维反铁磁链的情况下,Bethe ansatz告诉我们系统的基态是顺磁性的量子自旋液体,而非具有长程序的反铁磁态.其低能激发是集体的声波型模式以及孤子型的自旋子(spinon),低能下我们可采用玻色化技术以及Luttinger液体的框架来理解.

在二维与三维,目前我们并不清楚系统的基态到底是什么样子,综合各种解析与数值方法来看,系统的基态取决于晶格的类型以及相互作用的类型,其核心在于有没有阻挫(frustration)效应.对于阻挫效应可用定义在三角形三个顶点上的经典Ising自旋理解.(图3.7)对于Ising自旋,其取值只有向上和向下.当自旋间有反铁磁相互作用时,若有两个自旋反平行排列,则第三个自旋无论向上还是向下都不是系统能量最低的唯一选择.换句话说第三个自旋为了使系统能量最低其自旋取向不知如何选取,这就是阻挫.

对于无阻挫的问题,一般而言基态是磁有序态,例如:

- $S=1/2$正方晶格最近邻反铁磁Heisenberg模型的基态是接近Neel反铁磁态的磁有序态.

而当阻挫出现时,体系可能会出现各种非平凡的顺磁态,例如价键固体(valence-bond solid(VBS)),共振价键态(resonance-valence-bond(RVB))等.需要指出的是,阻挫既可以是晶格几何自身导致(例如二维的三角[25]和Kagome晶

[25]例如三角晶格化合物κ-$(ET)_2Cu_2(CN)_3$在低温下的自旋磁化为常数,热容为温度线性,是类似于费米液体的一类自旋液体候选者,理论上称为具有自旋子费米面的自旋液体.

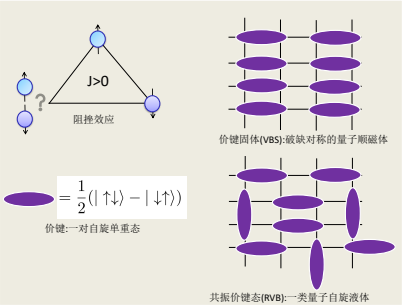


Figure 3.7: 三角形上的反铁磁耦合的Ising自旋所显示的自旋阻挫效应和两类量子顺磁体,即价键固体和共振价键态.

格[26])的也可以是相互作用具体形式导致(例如正方晶格上同时考虑最近邻和次近邻反铁磁交换的$S=1/2$量子Heisenberg模型).

图3.7给出了正方晶格上VBS和RVB的卡通示意.定性来说VBS顾名思义就是自旋单态,也就是化学中的所谓价键,在晶格中形成规则排列而产生的价键的固体.其并不破缺自旋的旋转对称,但是一般都破缺空间平移对称,因此VBS一般是具有破缺空间对称性的量子顺磁态.例如图3.7中的VBS在y方向不破坏晶格的平移不变性但破坏在x方向的平移一个格点不变的晶格平移不变性,相应的波函数可以写成如下形式:

$$|\Psi_{VBS-x}\rangle=\prod_{j=(j_x,j_y),j_x=odd}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_j\downarrow_{j+x}\rangle-|\downarrow_j\uparrow_{j+x}\rangle) \tag{3.92}$$

显然,这个VBS波函数是如下哈密顿量的基态:

$$\hat{H}=\sum_{j=(j_x,j_y),j_x=odd}\vec{S}_j\cdot\vec{S}_{j+x} \tag{3.93}$$

也就是说x方向上奇数格点与偶数格点的自旋都形成自旋单态,然后这种单态的直积就构成了整个VBS态.当然,这个哈密顿量没有y方向的耦合,因此并不真实.类似的,我们也可以构造其他的VBS态,例如图3.8(a)(b)与(c)分别是三种不同的VBS态.

值得注意的是,在一维,考虑自旋之间存在次近邻耦合的所谓Majumdar-Ghosh模型的基态是严格的VBS态:[27]

$$\hat{H}_{MG}=J\sum_{j=1}^{N}\left[\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_{j+1}+\frac{1}{2}\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_{j+2}\right] \tag{3.94}$$

[26]例如二维有机盐材料$ZnCu_3(OH)_6Cl_2$,其自旋关联具有局域形式,即$S(\vec{q},\omega)=f(\vec{q})g(\omega)$,这说明材料本身特性与无序有明显关系,例如其非弹性中子散射谱就可以由随机自旋单重态来解释.

[27]Majumdar,Ghosh,J.Math Phys.**10**,1388(1969).

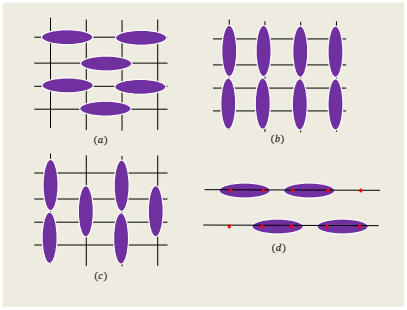


Figure 3.8: (a)(b)(c)正方晶格上的一些VBS态;(d)Majumdar-Ghosh模型的VBS基态.

这里最近邻$(\hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+1})$与次近邻$(\hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+2})$耦合强度之比是2.为了表示VBS基态,我们引入Schwinger玻色子表示(Schwinger boson),也就是把一个$S=1/2$自旋用两个玻色子$\hat{a},\hat{b}$来表示,即$|\uparrow\rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle, |\downarrow\rangle = \hat{b}^\dagger|0\rangle$而$|0\rangle$表示没有玻色子的真空态.这样自旋算符可以表示为

$$\begin{aligned}\hat{S}^z &= \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{b}) \\ \hat{S}^+ &= \hat{a}^\dagger\hat{b} \\ \hat{S}^- &= \hat{b}^\dagger\hat{a}\end{aligned} \tag{3.95}$$

当然,一个电子要么处于$|\uparrow\rangle$态或$|\downarrow\rangle$态以及它们的混合态,因此必然有完备性关系$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = 1$,这可以翻译为$\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} = 1$.这样,我们体系的基态就是两个简并VBS态

$$|\Psi_A\rangle = \prod_{j=odd}(\hat{a}_j^\dagger\hat{b}_{j+1} - \hat{b}_j^\dagger\hat{a}_{j+1})|0\rangle \tag{3.96}$$

或

$$|\Psi_B\rangle = \prod_{j=even}(\hat{a}_j^\dagger\hat{b}_{j+1} - \hat{b}_j^\dagger\hat{a}_{j+1})|0\rangle \tag{3.97}$$

其物理图像是如图3.8(d)所示的VBS构型.

RVB字面上的意思就是价键在不同格点间共振,相当于是VBS由于强量子涨落而融化后的液体,因此其波函数实际上包含大量的自旋单态构型,(图3.7中右下给出一个典型的自旋构型)是复杂的量子多体态,很难用少量参数刻画.我们通常把RVB类似的量子顺磁态称为量子自旋液体态(quantum spin liquid),简称自旋液体.历史上,RVB 最早由P.W.Andeson 提出, [28]并预期在三角晶格$S=1/2$ 反铁磁Heisenberg模型中存在(图3.9(a)(b)).但是后来的研究表明该系统的基态更接近自旋取向呈现120 度角相对排列的磁有序态(图3.9(c)).如果我们考虑RVB态的激发,那么最典型的就是所谓的自旋子(spinon),这相当于在RVB 背景上产生一

[28]P. W. Anderson, Resonating Valence Bonds: A new kind of insulator?, Mater.Res.Bull.**8**,153(1973).

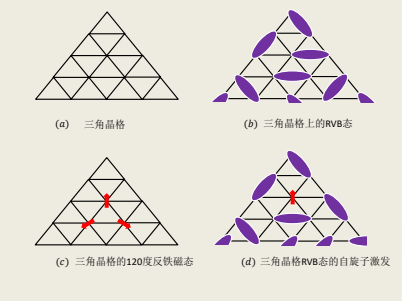


Figure 3.9: (a)三角晶格;(b)三角晶格的RVB态示意图;(c)三角晶格的120度磁有序态;(d)RVB态的自旋子激发.

个自由的$S = 1/2$自旋(图3.9(d)).由于RVB态中自旋单态可以自由共振,那么自旋子可以在系统中自由传播,用场论的语言来说就是自旋子是退禁闭的.与之相反,在通常的Néel反铁磁态中自旋子传播会导致传播路径上的自旋发生失配,这样自旋子等效于感受到线性势场而使得自旋子处于禁闭态,处于禁闭态的自旋子是无法自由传播的.

由于三角晶格$S = 1/2$反铁磁Heisenberg模型没有找到RVB态,因此后面的研究更多从阻挫程度更高的体系来寻找,例如Kagome 晶格或者具有$J_1 - J_2 - J_3$耦合的正方和三角晶格.这方面的研究是量子磁性的前沿问题,无论从解析还是数值计算[29] 角度来说都是极具挑战性的.

目前,关于2维自旋系统的RVB或者更一般的量子自旋液体态并没有公认的理论.[30]比较有代表性的理论有Laughlin提出的手性自旋液体理论[31],Anderson关于RVB的类BCS投影波函数,[32]quantum dimer模型,李雅达,文小刚和Nagaosa的规范理论,[33]文小刚关于自旋液体平均场态的投影对称群(PSG)分类理论等.

[29]例如基于量子信息的观念的密度矩阵重整化群(DMRG),投影纠缠对态(projected entangled pair states,PEPS) 和多尺度纠缠重整化(multiscale entanglement renormalization ansatz,MERA)

[30][C. Broholm, R. J. Cava, S. A. Kivelson, D. G. Nocera, M. R. Norman and T. Senthil, Quantum spin liquids, Science **367**,263(2020)]从理论和实验角度简明介绍了量子自旋液体研究的现状.

[31]分数量子霍尔效应Laughlin态的自旋类比,即Kalmeyer-Laughlin 手性自旋液体,其通过把反铁磁Heisenbrg模型改写为硬核玻色子模型,然后把跃迁系数解释为外磁场,这样在磁场与玻色子数目是2比1时系统便可能出现玻色子的分数量子霍尔态,即$v = 1/2$的Laughlin 态,这就是Kalmeyer-Laughlin自旋液体态.[V. Kalmeyer and R. B. Laughlin, Equivalence of the Resonating-Valence-Bond and Fractional Quantum Hall States, Phys.Rev.Lett. **59**, 2095(1987)]

[32]针对铜氧化物超导体,Anderson 提出了BCS投影波函数作为RVB 态的有效描述,即$|\psi_{RVB}\rangle = \hat{P}|\psi_{BCS}\rangle = \hat{P}\prod_k(\mu_k + \nu_k \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow})|0\rangle$.$\hat{P}$ 是投影到每个格点只有单个费米子占据的状态.

[33]规范理论形式,也就是把自旋用辅助粒子或部分子表示的规范理论,是目前为止量子自旋液体研究中最主流的理论,例如$U(1)$,$SU(2)$规范理论.这类理论表明自旋液体的低能有效理论是退禁闭的规范理论,此时自旋子可以在涨落的背景规范场中自由传播而不形成整数自旋的束缚态.同时规范场自由度抓住了体系非局域的量子纠缠的基本特性.

这里主要涉及的是$S=1/2$的自旋各项同性系统,如果超出这个范围,那么诸如Kitaev的honeycomb模型所带来的Majorana自旋液体是我们关于自旋液体理解的重要进展.

离子磁性与电子结构

在具体研究Heisenberg模型之前,我们先要审视组成化合物中离子磁性的来源.为明确起见,以铜氧化物高温超导体的母体化合物La_2CuO_4为例.在这里,O为-2 价,La 为+3价,Cu是+2价.由元素周期表可知,孤立的铜原子原子序数为29,这说明其核外电子为29个.而对于La_2CuO_4中的Cu^{2+}离子,核外电子数为$29-2=27$.我们知道原子壳层结构中前三个壳层能填充的电子数为$2,8,18$,总计28个电子.因此,Cu^{2+}离子应该有9个电子填充5个$3d$轨道,(即$3d^9$)或者说以完全填满为参考,可认为Cu^{2+}有一个空穴.

一般来说,理论分析中比较重要的是5个d轨道的角度部分,其由球谐函数$Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)(l=2,m_l=0,\pm1,\pm2)$描述,即$Y_{22}$,$Y_{21}$,$Y_{20}$,$Y_{2-1}$,$Y_{2-2}$.($Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)\sim P_l^{m_l}(\cos\theta)e^{im_l\varphi}$,$P_l^{m_l}$是连带Legendre多项式)实际使用时也把他们重新组合为$d_{xy},d_{yz},d_{zx},d_{x^2-y^2},d^{z^2}$,他们的角度部分分别是

$$\begin{aligned}
Y_{xy}&=\frac{Y_{22}-Y_{2-2}}{i\sqrt{2}}\\
Y_{yz}&=\frac{-Y_{21}-Y_{2-1}}{i\sqrt{2}}\\
Y_{zx}&=\frac{-Y_{21}+Y_{2-1}}{\sqrt{2}}\\
Y_{x^2-y^2}&=\frac{+Y_{22}+Y_{2-2}}{\sqrt{2}}\\
Y_{z^2}&=Y_{20}
\end{aligned}\tag{3.98}$$

进一步,9个电子是如何填充5个d轨道呢?这就需要Hund从光谱数据中总结出的关于电子壳层未填满的原子或离子基态的三个经验规律,即Hund定则:

- Hund第一定则:要求总自旋S取最大值;[34]
- Hund第二定则:在前述规则基础上,总轨道就角动量L取最大值;[35]
- Hund第三定则:对为半满壳层,总角动量是$J=|L-S|$,而超过半满则有$J=L+S$.[36]

[34]这主要来源于Pauli不相容原理使得自旋同向排列的在空间上彼此远离而降低彼此间的Coulomb排斥能

[35]这可以理解为旋转方向相同的电子可以避免彼此靠近

[36]这个规则来源于自旋-轨道耦合效应$\lambda\hat{L}\cdot\hat{S}=\frac{1}{2}\lambda(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2)$.对于类氢原子有$\lambda=\frac{Z^4e^2\hbar^2}{4\pi\epsilon_0 a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}$,这里$Z$是原子序数,$\epsilon_0$ 是真空介电常数,a_0是氢原子的Bohr半径,n是主量子数,l为轨道角动量量子数.可以看到重元素(Z大)将会有大的自旋-轨道耦合.

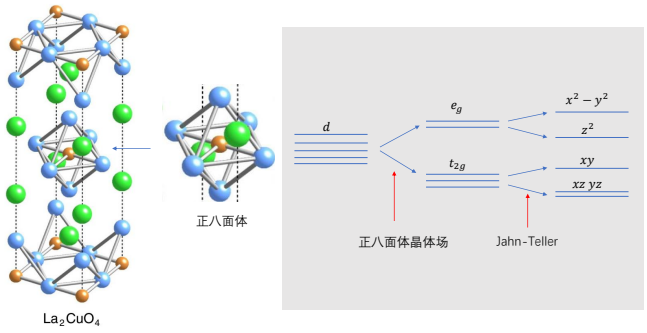


Figure 3.10: 铜氧化物母体La_2CuO_4的八面体结构和八面体晶体场中的过渡金属离子d轨道能级的劈裂.

现在,我们有9个电子取填充d轨道,显然,有4个d轨道被填满,剩下一个轨道有一个电子填充.注意到Hund第二规则要求角动量取最大值,因此剩下那个电子应占据轨道角动量$l = \pm 2$中的一个.然后根据Hund第三规则,9个电子显然超过半满,因此总角动量为$J = 2 + 1/2 = 5/2$.我们通常记Cu^{2+}离子的电子组态为$^2D_{3/2}$,这里D是总轨道角动量符号,$(S, P, D, F, G, H$对应$L = 0, 1, 2, 3, 4, 5)2$与总自旋角动量关系为$2S + 1$,3/2代表总轨道角动量.同时,定义离子的有效磁矩为

$$\mu_{eff} = g_L\sqrt{J(J+1)}\mu_B = p\mu_B \tag{3.99}$$

这里$g_L = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$为Landé因子,$J$为总角动量,$\mu_B = (e\hbar)/(2m)$为Bohr磁子,$p$为有效磁子数.这样$Cu^{2+}$的有效磁矩理论值为3.55.[37]同理稀土离子$Ce^{3+}$和$Sm^{3+}$的电子组态为$^2F_{5/2}$和$^6H_{5/2}$.然而离子在固体中时,还会感受到临近的其他离子对其的静电相互作用,这个相互作用等效于一个与原子排列有关的静电势场,(此时每一个临近的离子等效于一个负电荷)称为晶体场(crystal filed).对$3d$离子,晶体场最直接的作用是使得其轨道角动量淬灭,(对f离子没有这个问题)即等效于$3d$轨道角动量为零,因此我们会看到La_2CuO_4中的Cu^{2+}离子实际上没有轨道角动量,这样其等效于一个$S = 1/2$的离子,即一个有效$S = 1/2$自旋.[38]

但是,注意到轨道角动量猝灭后,剩余电子到底填充哪个轨道仍未确定.晶体场对所考虑的离子是一个等效环境,一般总是小于电子波函数的对称性,因

[37]有效磁矩μ_{eff}可通过拟合高温下居里类型的磁化率$\chi = \frac{n\mu_0\mu_{eff}^2}{3k_BT}$($n$为磁矩浓度,$\mu_0$为真空磁导率)来获得.当外场足够强时,电子将会沿着最大角动量投影方向排列,此时的有效磁矩是$g_L\mu_B J$.

[38]对$3d$离子而言,其晶体场比自旋-轨道耦合更强,因此Hund第三定则失效.在八面体型的晶体场环境中,晶体场对电子产生的等效势能是$V(x, y, z) \sim x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5}(x^2 + y^2 + z^2)^2$,这是一个实函数,这样哈密顿量的本征函数也都是实函数.(不同磁量子数的态重新组合为实函数)此时,注意到轨道角动量的期望值$\langle\hat{L}\rangle$从物理上来说必定为实数,但是角动量定义中含有虚数因子i,这样$\langle\hat{L}\rangle$又必须是纯虚数(本征函数为实),显然唯一的可能是$\langle\hat{L}\rangle = 0$.这就是轨道角动量的淬灭,其来源于晶体场导致本征函数为实值.

此会对电子态造成影响,导致简并能级的劈裂.自由的Cu^{2+}原本5个d轨道能量简并,但在La_2CuO_4中,氧离子相对于一个铜离子形成正八面体(octahedron)型的晶体场,Cu^{2+}离子的$d_{x^2-y^2}, d_{z^2}$轨道与氧离子的p_x, p_y轨道更接近(波函数重叠度高),[39]因此这两个轨道能量较高,形成两重简并的e_g 轨道,而剩下的d_{xy}, d_{yz}, d_{zx}轨道对氧离子的p_x, p_y轨道更远(波函数重叠度低),能量低一些,形成三重简并的t_{2g}能级.现在5重简并的d轨道在正八面体晶体场下分裂为e_g 和t_{2g}轨道.

然而这并不是最后的结果,Jahn-Teller定理指出,若一个对称非线形分子的基态有简并,则系统会自发畸变而消除能级简并,这称为Jahn-Teller效应.在当前情况下,正八面体会在z方向自发拉伸,这样简并的e_g轨道劈裂为$d_{x^2-y^2}$与d_{z^2}.由于d_{z^2}轨道在z方向与拉伸后的氧离子距离变远,因此其能量低于$d_{x^2-y^2}$.类似的,t_{2g}轨道也劈裂为d_{xy}和简并的d_{yz}, d_{zx} 轨道.这样我们得到如下结论:

- 八面体晶体场中的过渡金属离子d轨道能级相对大小为:$E_{d_{x^2-y^2}} > E_{d_{z^2}} > E_{d_{xy}} > E_{d_{yz}} = E_{d_{zx}}$. (图3.10)

回到La_2CuO_4的例子,可知除$d_{x^2-y^2}$轨道外所有轨道都填满,$d_{x^2-y^2}$轨道填充一个电子.因此对体系低能物理有贡献的电子是$d_{x^2-y^2}$电子.考虑到La_2CuO_4中Cu^{2+}离子在正方晶格上排列,那么正方晶格$S = 1/2$量子Heisenberg模型应是该体系磁性的正确出发点.(体系本身处于Mott绝缘态,电荷自由度可不予考虑.)

铁磁Heisenberg模型

尽管反铁磁Heisenberg模型难于求解,但是铁磁Heisenberg模型的理解就容易很多,所有我们先讨论铁磁的情况.为简单起见,讨论只包含最近邻耦合的一维铁磁量子Heisenberg 模型:

$$\hat{H}_{FM} = -J\sum_j \hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+1} = -J\sum_j \left[\frac{1}{2}\hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- + \frac{1}{2}\hat{S}_j^- \hat{S}_{j+1}^+ + \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z\right], \quad J > 0 \tag{3.100}$$

给定一个自旋哈密顿量,一般的思路是先寻找体系的基态,然后再考虑基态以上的低能激发.在这里,先尝试经典的铁磁态,(考虑N_s个自旋并采用周期边界条件)即所有自旋都朝一个方向排列,比如z轴的上方向:

$$|\psi_{FM}\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 ... |\uparrow\rangle_{N_s} = \prod_j |\uparrow\rangle_j \tag{3.101}$$

对这个态作用哈密顿量可得

$$\hat{H}_{FM}|\psi_{FM}\rangle = -\frac{J}{4}N_s|\psi_{FM}\rangle \tag{3.102}$$

换句话说,完全极化的铁磁态是系统的一个本征态,并且能量为$E_{FM} = -\frac{J}{4}N_s$.显然,任意扰动完全极化的铁磁态都会导致能量升高,因此完全的铁磁态是铁

[39]注意到这两个d轨道波函数直接与p_x, p_y重叠而剩下三个d轨道则有夹角

磁Heisenberg模型的基态,并且这个结果在任意空间维度都成立.[40]

此外,注意到铁磁基态是高度简并的,任意的自旋同向的态都是体系可能的基态.[41](我们有角度可以玩)

接下来,考虑完全极化铁磁态的一个偏离,比如在i格点的自旋从上变到下,其他格点自旋还都保持向上不变:

$$|\psi_i\rangle = |\downarrow\rangle_i \prod_{j\neq i} |\uparrow\rangle_j \tag{3.103}$$

可以算得这个态的能量是$E = -\frac{J}{4}(N_s - 2) + 2\frac{J}{4} = E_{FM} + 4\frac{J}{4}$, 相比于铁磁基态能量提高了$J$,物理上这对应于一个反向自旋不仅破坏了两对同向排列,并且也产生了两对自旋反向对,这样$4 \times \frac{J}{4} = J$.

现在,尝试体系波函数等于各个格点偏离的叠加,即有

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \tag{3.104}$$

代入本征方程$\hat{H}_{FM}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$可以得到如下形式

$$\sum_i [(E_{FM} + J)c_i - \frac{J}{2}(c_{i+1} + c_{i-1})]|\psi_i\rangle = \sum_i E c_i |\psi_i\rangle \tag{3.105}$$

在这里$\hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z$导致$c_i$前面的系数$E_{FM}+J$,$\hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^-, \hat{S}_j^- \hat{S}_{j+1}^+$ 分别产生c_{i+1} 和c_{i-1}部分.要使以上方程恒成立,则必有以下要求

$$(E_{FM} + J)c_i - \frac{J}{2}(c_{i+1} + c_{i-1}) = E c_i \tag{3.106}$$

注意到这个方程对任意格点i都成立,因此对于一个有N_s格点的系统,上述方程实际上对应N个方程组成的方程组:

$$\begin{aligned}
&(E_{FM} + J)c_1 - \frac{J}{2}(c_2 + c_{N_s}) = E c_1 \\
&(E_{FM} + J)c_2 - \frac{J}{2}(c_3 + c_1) = E c_2 \\
&\cdots \\
&(E_{FM} + J)c_{N_s} - \frac{J}{2}(c_1 + c_{N_s - 1}) = E c_{N_s}
\end{aligned} \tag{3.107}$$

[40]任意空间维度下的铁磁量子Heisenberg模型的基态是完全极化的铁磁态.当然这个结论直接证明并不显然,不过我们可以借助小系统的精确对角化计算和一维的Bethe ansatz精确解来确认它的正确性.

[41]我们可以定义自旋旋转算符$\hat{R}_i(\vec{n},\theta) = e^{i\theta\vec{n}\cdot\hat{\vec{S}}_i}$.例如单位矢量$\vec{n} = (0,0,1) = \vec{e}_z$时有$\hat{R}_i(\vec{e}_z,\theta) = e^{i\theta\hat{S}_i^z}$,这个算符作用到$\hat{S}_i^\alpha$上可得$\hat{R}_i(\vec{e}_z,\theta)\hat{S}_i^\alpha \hat{R}_i^\dagger(\vec{e}_z,\theta) = \hat{\tilde{S}}_i^\alpha$, 即有$\hat{\tilde{S}}_i^x = \hat{S}_i^x \cos\theta - \hat{S}_i^x \sin\theta, \hat{\tilde{S}}_i^y = \hat{S}_i^x \sin\theta + \hat{S}_i^y \cos\theta$,这说明$\hat{R}_i(\vec{e}_z,\theta)$让自旋绕着$z$轴转动了$\theta$角度.

或者我们可以写出相应的矩阵形式,

$$\begin{pmatrix} E_{FM}+J & -\frac{J}{2} & 0 & ... & -\frac{J}{2} \\ -\frac{J}{2} & E_{FM}+J & -\frac{J}{2} & 0 & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ -\frac{J}{2} & 0 & ... & -\frac{J}{2} & E_{FM}+J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ ... \\ ... \\ c_{N_s} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ ... \\ ... \\ c_{N_s} \end{pmatrix} \tag{3.108}$$

显然,我们可以令相应的特征行列式为零得到关于E的N次代数方程,它的解给出了体系的N个本征值,把本征值代回就得到相应的本征态.

当然,由于系统存在平移不变性,我们可以更简单得求解上述问题.考虑系数c_i的平面波解$c_i = e^{ikR_i}$,($k = \frac{2\pi}{N_s a}n, n = 1, 2, ...N_s$是波矢,$R_i = ia$是$i$格点的位置,为方便起见可设晶格间距$a = 1$)代入方程$(E_{FM} + J)c_i - \frac{J}{2}(c_{i+1} + c_{i-1}) = Ec_i$可得

$$(E_{FM} + J)e^{ikR_i} - \frac{J}{2}(e^{ik(R_i+a)} + e^{ik(R_i-a)}) = Ee^{ikR_i} \tag{3.109}$$

消去e^{ikR_i}就得到$E = E_{FM} + J(1 - \cos k)$,对应的波函数是$|\psi\rangle = \sum_i e^{ikR_i}|\psi_i\rangle$.注意到波矢$k$标记了这个状态,也就是说我们实际上考虑了一个波的传播状态,在铁磁体当中,这就是所谓的铁磁自旋波(spin wave).我们把对应的激发能和波函数重写如下:

$$\omega_k = E - E_{FM} = J(1 - \cos k) \tag{3.110}$$

$$|\psi_k\rangle = \sum_i e^{ikR_i}|\psi_i\rangle \tag{3.111}$$

注意这样的(单个)铁磁自旋波态是铁磁Heisenberg模型的本征态,因为我们通过解本征方程得到这个解.

磁振子与Holstein-Primakoff变换

既然自旋波是铁磁Heisenberg模型本征态,其行为与一个自由传播的粒子(类平面波态$|\psi_k\rangle$)并无实质不同,其具有定义良好的色散关系ω_k. 那么我们相信自旋波应对应某种量子,也就是下面讨论的磁振子(magnon).既然磁振子实际上是由不同格点自旋翻转叠加而成,因此与声子类似是一类集体激发,其统计属性也应是玻色子.我们把它记为$\hat{b}_j$,代表在j格点产生一个磁振子.显然,铁磁系统的基态可以设定为完全没有玻色子$\hat{b}$占据的真空态,我们假定此真空态对应自旋全部朝上的态,即$|\uparrow\uparrow\uparrow ...\rangle$.当有自旋翻转时对应有玻色子产生($b^\dagger$),而对于全部向上态的自旋翻转用$\hat{S}^-$实现,因此必定有 $\hat{S}^- \sim \hat{b}^\dagger$,同理可得$\hat{S}^- \sim \hat{b}$.同时格点上的自旋取值可由$\hat{S}^z = 1/2 - \hat{b}^\dagger\hat{b}$表示.也就是没有磁振子时自旋朝上,而有一个磁振子

时自旋向下.对自旋为S的自旋系统,数学上严格的表示是

$$\hat{S}_j^+ = \sqrt{2S - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j}\hat{b}_j \tag{3.112}$$

$$\hat{S}_j^- = \hat{b}_j^\dagger \sqrt{2S - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j} \tag{3.113}$$

$$\hat{S}_j^z = S - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \tag{3.114}$$

这就是著名的Holstein-Primakoff变换.利用这个变换,可以把自旋算符替换为标准的玻色子算符$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij},\ [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0$.

在大自旋极限下$2S >> \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j$,[42] 也就说我们假定玻色子激发数是很少的,这样有近似

$$\hat{S}_j^+ \approx \sqrt{2S}\hat{b}_j \tag{3.115}$$

$$\hat{S}_j^- \approx \sqrt{2S}\hat{b}_j^\dagger \tag{3.116}$$

$$\hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z \approx S^2 - S(\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_{j+1}) \tag{3.117}$$

代入一维铁磁体的哈密顿量$\hat{H}_{FM}$可得

$$\begin{aligned} \hat{H}_{FM} &\approx -JS\sum_j [\hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1} - (\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_{j+1})] - JN_s S^2 \\ &= -JS\sum_k (e^{ik} + e^{-ik} - 2)\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - JN_s S^2 \\ &= \sum_k \omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + E_{FM},\ \omega_k = 2JS(1-\cos k) = 4JS\sin^2\frac{k}{2} \end{aligned} \tag{3.118}$$

注意到这个得到的能谱ω_k与前一小节讨论的单个自旋波谱完全相同,因此我们认为玻色子$\hat{b}$就是描述自旋波激发的量子,即磁振子.

当动量k很小时,或者是在长波极限时,我们有

$$\omega_k = 4JS\sin^2\frac{k}{2} \approx JSk^2 \propto k^2 \tag{3.119}$$

即长波的自旋波激发动量以k^2变化,这实际上说明自旋波是铁磁体为了恢复自旋旋转对称性而产生的Goldstone模式.

对于一个d维超立方晶格并仅考虑最近邻耦合,采用类似操作可得如下自旋波激发谱

$$\omega_k = 2JS(d - \sum_{a=1}^d \cos k_a) \approx JSk^2 \equiv vk^2 \tag{3.120}$$

对于这样的自旋波激发谱,平均玻色子数/玻色子密度是

$$n_b = \frac{1}{N_s}\sum_k \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \rangle_T = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{1}{e^{\omega_k/T}-1} \propto \int_0^T d\omega \frac{\omega^{d/2-1}}{e^{\omega/T}-1} \approx \int_0^T d\omega \frac{\omega^{d/2-1}}{\omega} T = T\omega^{d/2-1}|_0^T$$

[42]相比于场论中的矢量场和矩阵场模型,这实际上是最早的大N展开.关于磁性模型的$1/S$展开的基础性工作来自Anderson.[P. W. Anderson,An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State, Phys.Rev. **86**,694(1952)]

对于$d=3$,也就是一个三维铁磁体,积分下限为零,则有$n_b \propto T^{3/2}$.但对于$d=1$,积分下限使得整个积分发散,这只能说明我们原先假设的铁磁态本身在有限温度是不稳定的.至于$d=2$,直接计算也表明存在对数型的发散,因此一维和二维铁磁体在有限温度是不稳定的,这与一般的统计力学要求一致.

所以,有实际意义的是$d=3$的情况,这样得到磁化温度依赖是

$$\Delta M(T) = S - M(T) = n_b \propto T^{3/2} \tag{3.121}$$

对于一个三维铁磁体,即$\Delta M(T) \propto T^{3/2}$,这就是Bloch$T^{3/2}$律.[43]

- 除了这里介绍的HP玻色子方法,我们也可以采用Green函数运动方程方法来得到铁磁自旋波并考虑自旋波之间的相互作用.[44]

反铁磁Heisenberg模型

让我们回到最感兴趣的反铁磁Heisenberg模型的讨论.为了避免阻挫效应,仅考虑d维超立方晶格中只包括最近邻耦合的反铁磁Heisenberg模型

$$\hat{H}_{AF} = J \sum_{<ij>} \left[\frac{1}{2} \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \frac{1}{2} \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+ + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right], \quad J > 0 \tag{3.122}$$

如果考虑经典反铁磁Néel态$\langle \hat{\vec{S}}_i \rangle = S(-1)^{R_i} \hat{e}_z$,即[45]

$$|\Psi_{Neel}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow ...\rangle \tag{3.123}$$

在这个态中,体系被划分成两个子格,记为A 与B,在子格内部,自旋指向相同,而在不同子格间,指向相反.(图3.11)那么体系在Néel态下的总能量是

$$\langle \Psi_{Neel}|\hat{H}_{AF}|\Psi_{Neel}\rangle = J \sum_{<ij>} \langle \Psi_{Neel}|\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z|\Psi_{Neel}\rangle = J \sum_{<ij>} \frac{-1}{4} S^2 \tag{3.124}$$

这样每对自旋的能量是$-\frac{1}{4}JS^2$.但是注意到Heisenberg 模型的横向自旋翻转部分改变Néel 态的自旋位形,导致体系偏离完美的Néel 反铁磁态

$$\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- |\downarrow\uparrow ...\rangle = |\uparrow\downarrow ...\rangle \tag{3.125}$$

这表明Néel反铁磁态不是反铁磁Heisenberg模型的本征态,更不是其基态.但是,我们可以把Néel 态作为一个参考态,从它出发引入涨落来得到更好的估计,而最简单的涨落就是铁磁时考虑的自旋波,只不过此时对应的是反铁磁自旋波.

[43] EuO,K_2CuF_4实验上发现是良好的铁磁绝缘体.

[44] 可以参考Continentino所著的《Key Methods and Concepts in Condensed Matter Physics》的2.2节.此外这本书的第三章系统化得给出了如何用运动方程方法计算响应函数.

[45] Néel和Landau独立预言了这个磁性态,然而Landau受到Bethe关于一维反铁磁链解的影响后来放弃了这个想法.Néel因为这类反铁磁态的研究而获得了诺贝尔物理学奖.

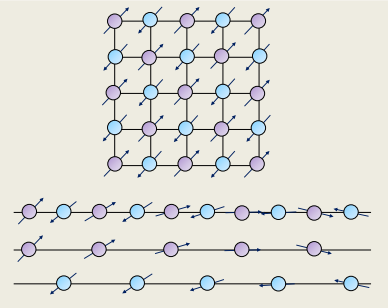


Figure 3.11: 反铁磁的经典基态,即Néel态以及经典基态的反铁磁自旋波激发,注意反铁磁自旋波可以看作子格铁磁自旋波的叠加组合.

既然体系有A,B两个子格,我们假设A子格基态时自旋都朝上,而B子格基态时自旋都向下.仿照铁磁时候的处理,当存在自旋波激发时,对A子格而言是把自旋从向上翻转到向下,用$\hat{S}_A^- \sim \hat{a}^\dagger$表示,对$B$子格而言则是把自旋从向下反转到向上,因此有$\hat{S}_B^+ \sim \hat{b}^\dagger$. 同时$A,B$ 子格的自旋取向由$\hat{S}_A^z = S - \hat{a}^\dagger\hat{a}$,$\hat{S}_B^z = -S + \hat{b}^\dagger\hat{b}$确定.更一般地,我们有如下变换规则:

$$\hat{S}_{Aj}^+ = \sqrt{2S - \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j}\hat{a}_j, \hat{S}_{Bj}^+ = \hat{b}_j^\dagger\sqrt{2S - \hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j} \tag{3.126}$$

$$\hat{S}_{Aj}^- = \hat{a}_j^\dagger\sqrt{2S - \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j}, \hat{S}_{Bj}^- = \sqrt{2S - \hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j}\hat{b}_j \tag{3.127}$$

$$\hat{S}_{Aj}^z = S - \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j, \hat{S}_{Bj}^z = -S + \hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j \tag{3.128}$$

在代入上述HP玻色子表示前,由于系统存在A,B两个子格,我们先改写哈密顿量

$$\hat{H}_{AF} = J\sum_{i,\delta}\left[\frac{1}{2}\hat{S}_{Ai}^+\hat{S}_{Bi+\delta}^- + \frac{1}{2}\hat{S}_{Ai}^-\hat{S}_{Bi+\delta}^+ + \hat{S}_{Ai}^z\hat{S}_{Bi+\delta}^z\right] \tag{3.129}$$

这里求和仅对A子格的格点i求和,若系统总格点数为N_s,那么求和数就是$N_s/2$.δ指的是从A 子格出发到最近邻B子格的矢量,对d维超立方晶格有$\delta = \pm\hat{x}, \pm\hat{y}, \pm\hat{z}...,\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$表示$x,y,z$方向的单位矢量.比如对一个由4 格点组成的满足周期边界条件的反铁磁链模型,$i = 1,3$,$\delta = \pm\hat{x} = \pm 1$,我们有

$$\hat{H}_{4-AF} = J\left[\frac{1}{2}\hat{S}_{A1}^+\hat{S}_{B2}^- + \frac{1}{2}\hat{S}_{A3}^+\hat{S}_{B4}^- + \frac{1}{2}\hat{S}_{A1}^-\hat{S}_{B4}^+ + \frac{1}{2}\hat{S}_{A3}^+\hat{S}_{B2}^- + (\hat{S}^-\hat{S}^+\text{−term}) + (z\text{−term})\right]. \tag{3.130}$$

与前面铁磁的情况一样,把大自旋S下的近似形式($\hat{S}_{Aj}^+ \simeq \sqrt{2S}\hat{a}_j, \hat{S}_{Bj}^+ \simeq \sqrt{2S}\hat{b}_j^\dagger$
)代入$\hat{H}_{AF}$可得

$$\hat{H}_{AF} \approx JS\sum_{i,\delta}[\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i + \hat{b}_{i+\delta}^\dagger\hat{b}_{i+\delta} + \hat{a}_i^\dagger\hat{b}_{i+\delta}^\dagger + \hat{a}_i\hat{b}_{i+\delta}] - JN_s\frac{Z}{2}S^2 \tag{3.131}$$

这里Z是最近邻格点数,对d维超立方满足$Z=2d$.定义$\hat{a},\hat{b}$玻色子的傅里叶变换为

$$\hat{a}_i=\frac{1}{\sqrt{N_s/2}}\sum_k e^{ikR_i}\hat{a}_k,\quad \hat{b}_i=\frac{1}{\sqrt{N_s/2}}\sum_k e^{-ikR_i}\hat{b}_k \tag{3.132}$$

注意上述定义中为了后面符号的简单而在指数中选择了相反的系数.当然,由于i求和仅包含一半格点,因此其对应的动量空间也仅有一半,即半个布里渊区.这实际上是我们把系统划分为A,B子格导致系统的元胞数从例N_s变为$N_s/2$的后果.例如在一维时$R_i=ia$,$i=1,3,5...$,系统原先的周期性要求$\hat{a}_i=\hat{a}_{i+N_s}$,但是由于$N_s$为奇数时$\hat{a}_{i+N_s}$并不存在,因此实际上我们要求$\hat{a}_i=\hat{a}_{i+2N_s}$.这样通过傅里叶变换并比较两边系数可知$1=e^{ik2N_sa}$,这样$k$的取值只能是$k=\frac{2\pi n}{2N_sa}=\frac{\pi n}{N_sa}$,$n=0,1,2...N_s-1$.在$N_s\to\infty$的极限下就有$k\in[-\pi/2,\pi/2]$.(晶格常数$a=1$)当然,这个结果也可以就简单认为是系统的双子格结构使得晶格间距从a变为$2a$,因此k的取值从$[-\pi/a,\pi/a]$变为$k\in[-\pi/(2a),\pi/(2a)]$.同理,对于二维正方晶格,k 的取值是所谓磁性布里渊区,也就是满足$\cos k_x+\cos k_y\geqslant 0$并以$k=(0,0)$为中心的方形区域.

在有这些准备后,我们用傅里叶变换可得

$$\hat{H}_{AF}=JS\sum_k[Z\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k+Z\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\left(\sum_\delta e^{ik\delta}\right)\hat{a}_k^\dagger\hat{b}_k^\dagger+\left(\sum_\delta e^{-ik\delta}\right)\hat{a}_k\hat{b}_k]-JN_s\frac{Z}{2}S^2$$

这个形式对于双子格系统总是成立的.定义$\gamma_k=\frac{1}{Z}\sum_\delta e^{ik\delta}$,且在超立方晶格有$\gamma_k=\gamma_k^*$,则有

$$\hat{H}_{AF}=JSZ\sum_k[\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\gamma_k\hat{a}_k^\dagger\hat{b}_k^\dagger+\gamma_k\hat{a}_k\hat{b}_k]-JN_s\frac{Z}{2}S^2. \tag{3.133}$$

为了处理上述既包含对角部分$(\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{b}^\dagger\hat{b})$又包含非对角部分$(\hat{a}^\dagger\hat{b}^\dagger,\hat{a}\hat{b})$的二次型哈密顿量,我们可以采用玻色子的Bogoliubov变换:

$$\boxed{\begin{pmatrix}\hat{a}_k\\ \hat{b}_k^\dagger\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cosh\theta_k & -\sinh\theta_k\\ -\sinh\theta_k & \cosh\theta_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{\alpha}_k\\ \hat{\beta}_k^\dagger\end{pmatrix}} \tag{3.134}$$

这里$\hat{\alpha}_k,\hat{\beta}_k$是新引入的玻色子,满足标准的对易关系.代入Bogoliubov变换可得,

$$\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k=\cosh^2\theta_k\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\sinh^2\theta_k\hat{\beta}_k\hat{\beta}_k^\dagger-\sinh\theta_k\cosh\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger+\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k) \tag{3.135}$$

$$\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k=\sinh^2\theta_k\hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_k^\dagger+\cosh^2\theta_k\hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k-\sinh\theta_k\cosh\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger+\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k) \tag{3.136}$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k &= (\cosh^2\theta_k+\sinh^2\theta_k)(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k)-2\sinh\theta_k\cosh\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger+\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k)+2\sinh^2\theta_k\\ &= \cosh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k)-\sinh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger+\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k)+\cosh 2\theta_k-1\end{aligned} \tag{3.137}$$

$$\hat{a}_k^\dagger\hat{b}_k^\dagger=-\sinh\theta_k\cosh\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\hat{\beta}_k\hat{\beta}_k^\dagger)+\cosh^2\theta_k\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger+\sinh^2\theta_k\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k \tag{3.138}$$

$$\hat{a}_k\hat{b}_k = -\sinh\theta_k\cosh\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k\hat{\beta}_k^\dagger) + \sinh^2\theta_k\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger + \cosh^2\theta_k\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k \quad (3.139)$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_k^\dagger\hat{b}_k^\dagger + \hat{a}_k\hat{b}_k &= (-2\sinh\theta_k\cosh\theta_k)(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k) + (\cosh^2\theta_k + \sinh^2\theta_k)(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger + \hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k)\\ &\quad -2\sinh\theta_k\cosh\theta_k\\ &= -\sinh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k) + \cosh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger + \hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k) - \sinh 2\theta_k \quad (3.140)\end{aligned}$$

这里利用了关系$2\sinh^2\theta_k = \cosh 2\theta_k - 1, \cosh^2\theta_k + \sinh^2\theta_k = \cosh 2\theta_k, 2\sinh\theta_k\cosh\theta_k = \sinh 2\theta_k$.

这样哈密顿量成为

$$\begin{aligned}\hat{H}_{AF} &= JSZ\sum_k[(\cosh 2\theta_k - \gamma_k\sinh 2\theta_k)(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k) + (\gamma_k\cosh 2\theta_k - \sinh 2\theta_k)(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger + \hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k)]\\ &\quad + JSZ\sum_k(\cosh 2\theta_k - 1 - \gamma_k\sinh 2\theta_k) - JN_s\frac{Z}{2}S^2 \quad (3.141)\end{aligned}$$

显然,这个哈密顿量仍然包含非对角部分,为了消除这些非对角项,我们可以令非对角项$\hat{a}_k^\dagger\hat{b}_k^\dagger, \hat{a}_k\hat{b}_k$的系数为零,可得如下方程:

$$\gamma_k\cosh 2\theta_k - 2\sinh 2\theta_k = 0 \Rightarrow \boxed{\gamma_k = \tanh 2\theta_k} \quad (3.142)$$

因此仅包含对角项的二次型哈密顿量是

$$\begin{aligned}\hat{H}_{AF} &= JSZ\sum_k[(\cosh 2\theta_k - \gamma_k\sinh 2\theta_k)(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k)] + JSZ\sum_k(\cosh 2\theta_k - \gamma_k\sinh 2\theta_k)\\ &\quad -JN_s\frac{Z}{2}S(S+1)\end{aligned}$$

注意到$\hat{a}_{k,}^\dagger\hat{a}_k, \hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k$ 的系数可以化简为

$$\cosh 2\theta - \gamma_k\sinh 2\theta = \cosh 2\theta - \frac{\sinh^2 2\theta}{\cosh 2\theta} = \frac{\cosh^2 2\theta - \sinh^2 2\theta}{\cosh 2\theta} = \frac{1}{\cosh 2\theta} \quad (3.143)$$

因此我们需要求得$\cosh 2\theta$以定出磁振子的色散,这可以通过对$\gamma_k = \tanh 2\theta$两边平方求得:

$$\gamma_k^2 = \tanh^2 2\theta = \frac{\sinh^2 2\theta}{\cosh^2 2\theta} = \frac{\cosh^2 2\theta - 1}{\cosh^2 2\theta} = 1 - \frac{1}{\cosh^2 2\theta} \Rightarrow \frac{1}{\cosh 2\theta} = \pm\sqrt{1-\gamma_k^2}. \quad (3.144)$$

我们取正支解,即有$\cosh 2\theta = \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_k^2}}$.另外,反解$\gamma_k = \tanh 2\theta$有$\sinh 2\theta = \gamma_k\cosh 2\theta = \frac{\gamma_k}{\sqrt{1-\gamma_k^2}}$. 由此我们得到$\cosh 2\theta - \gamma_k\sinh 2\theta = \sqrt{1-\gamma_k^2}$, 这样哈密顿量的最终形式为

$$\boxed{\hat{H}_{AF} = \sum_k[\omega_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k)] + \sum_k\omega_k - JN_s\frac{Z}{2}S(S+1), \omega_k = JSZ\sqrt{1-\gamma_k^2}}.$$

这里我们定义了自旋波的色散关系$\omega_k = JSZ\sqrt{1-\gamma_k^2}$.注意动量求和仅对半个布里渊区也就是磁布里渊区求.当然对于超立方晶格,$\gamma_{k+Q} = -\gamma_k$,$\omega_{k+Q} = \omega_k$,$Q = (\pi, \pi, \pi...)$ 为反铁磁特征波矢,因此在物理量计算的最后,如果只涉及γ_k^2相关的求和,那么就可以对完整布里渊区求和,然后再乘以因子1/2即可,即有$\sum_k f(\gamma_k^2) = \frac{1}{2}\sum_{k\in full} f(\gamma_k^2)$.

我们看到,在大S近似下,体系完全由玻色型的自旋波模式描述,其激发谱是ω_k.在磁布里渊区内的零点是$k = (0, 0, 0...)$,那么当$k \to 0$,也就是长波极限时有$\gamma_k \simeq 1 - k^2/Z$,则$\omega_k \simeq JSZ\frac{|k|}{\sqrt{d}} \propto |k|$.

显然,系统的基态$|\Psi_g\rangle$是Bogoliubov变换后的玻色子$\hat{\alpha}, \hat{\beta}$的真空态($\hat{\alpha}_k|\Psi_g\rangle = \hat{\beta}_k|\Psi_g\rangle = 0$).这样系统的基态能量就是上述哈密顿量的常数部分,即$E_g = \sum_k \omega_k - JN_s\frac{Z}{2}S(S+1)$,这是基态具有零点涨落的基本特征,类似于量子力学谐振子的零点能量$\frac{1}{2}\hbar\omega$.可以发现E_g要低于反铁磁Néel 态的能量.这表明在考虑自旋波涨落后,体系偏离Néel态,得到能量更低的态.

在$T = 0$时,可以计算系统的(子格)磁化,例如A子格:(基态时没有$\hat{\alpha}, \hat{\beta}$玻色子,$\hat{\alpha}^\dagger\hat{\beta}^\dagger, \hat{\alpha}\hat{\beta}$的基态期望值为零)

$$\begin{aligned} m &= S - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i\rangle_{T=0} = S - \frac{1}{N_s/2}\sum_k \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k\rangle_{T=0} = S - \frac{1}{N_s/2}\sum_k \sinh^2\theta_k \\ &= S - \frac{1}{N_s/2}\sum_k \frac{1}{2}\left(\cosh 2\theta_k - 1\right) \\ &= S - \frac{1}{N_s}\sum_k \left(\frac{1}{\sqrt{1-\gamma_k^2}} - 1\right) \\ &= S + \frac{1}{2} - \frac{1}{N_s}\sum_k \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_k^2}}. \end{aligned} \tag{3.145}$$

对于二维正方晶格

$$Z = 4,\ \gamma_k = \frac{\cos k_x + \cos k_y}{2},\ \frac{1}{N_s}\sum_k \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_k^2}} = 0.6966,\ m = 0.3034 \tag{3.146}$$

而对于三维简单立方晶格有

$$Z = 6,\ \gamma_k = \frac{\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z}{3},\ \frac{1}{N_s}\sum_k \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_k^2}} = 0.5784,\ m = 0.4216 \tag{3.147}$$

我们看到,在计入自旋涨落后,三维系统的磁化是饱和值$S = 0.5$的百分之84,而在二维正方晶格的情况下这个比例减少至百分之61.也就是说二维反铁磁体的子格磁化由于自旋涨落的影响只有经典值的$\frac{2}{3}$,这体现了涨落在低维系统中的明显作用.[46]此外,一维时我们会发现相应的积分发散,表明自旋波激发完全摧毁Neel反铁磁序,体系可能的基态是顺磁性的,这与Luttinger液体的结果是符合的.[47]

[46]在文献中,一般称自旋波理论为$S = \infty$的可靠理论,对有限自旋,认为其是半经典近似,其可靠性需靠实验和精确的数值模拟判断.

[47]与铁磁情况一致,$d = 2, 1$时磁振子数在有限温度时发散,因此有限温度下上述理论仅在三维系统成立.

- 无阻错的反铁磁Heisenberg模型的基态不是经典的Néel反铁磁态,而是偏离这个态的某个自旋磁化被减弱的有序态.(量子蒙特卡洛的大尺度模拟说明了这一点.)

- 既然半满(无阻挫)Hubbard模型的强耦合极限是反铁磁Heisenberg模型,那么该模型半满时的基态是有序的反铁磁态.

最后,铜氧化物超导体的母体,例如La_2CuO_4的低温磁性性质可以用这里讨论的反铁磁Heisenberg模型理解,其基态是接近Néel反铁磁态的磁性有序态,而反铁磁态的激发就是自旋波.我们可以把理论计算的自旋波色散关系ω_k与中子散射实验谱所得的自旋波激发谱进行拟合,[48]这样就得到$J \simeq 135$meV,这基本上是d 电子系统中最大的交换耦合.当然,要得到更好的拟合,事实上我们还需要考虑诸如次近邻,再次近邻耦合以及四自旋环交换作用.[49]

[48]实验所得的自旋波激发谱是动力学磁化率$\chi(\vec{k},\omega)$权重极大值位置.

[49][R. Coldea et al.,Spin Waves and Electronic Interactions in La_2CuO_4, Phys.Rev.Lett. **86**,5377(2001)]

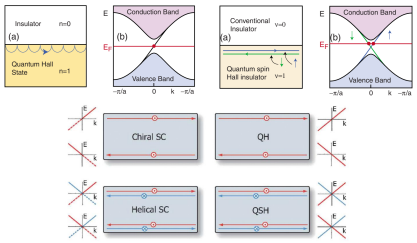


Figure 3.12: 一些拓扑非平庸体系的边缘态.

一维晶格费米子:一维空间就是不同

- 一维费米子模型可以用来理解一些准一维材料,例如碳纳米管,纳米线,高温超导体中的准一维条纹相,还有量子霍尔效应以及拓扑绝缘体的边缘态的物理.(图3.12)

先看一维自由费米子的例子,假定电子只在最近邻的格点之间跃迁,这个一维晶格的晶格间距是a,那么体系的哈密顿量是

$$\hat{H}_0 = -t\sum_{j\sigma}(\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j+1\sigma} + \hat{c}^\dagger_{j+1\sigma}\hat{c}_{j\sigma}) \tag{3.148}$$

利用费米子算符的傅里叶展开$\hat{c}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikR_j}c_{k\sigma}$, 可得

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= -t\sum_{k,k',\sigma}\sum_{\delta=\pm a}\frac{1}{N_s}\sum_j e^{-i(kR_j-k'R_{j+\delta})}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma} = -t\sum_{k,k',\sigma}\sum_{\delta=\pm a}\frac{1}{N_s}\sum_j e^{-i(k-k')R_j}e^{ik'\delta}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma} \\
&= -t\sum_{k,k',\sigma}\delta_{k,k'}\sum_{\delta=\pm a}e^{ik'\delta}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma} = -t\sum_{k,\sigma}(e^{ika}+e^{-ika})\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} \\
&= \sum_{k,\sigma}(-2t\cos ka)\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} \\
&= \sum_{k,\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}, \quad \varepsilon_k = -2t\cos ka
\end{aligned} \tag{3.149}$$

可以看到在最近邻近似下,一维晶格电子的色散是$\varepsilon_k = -2t\cos ka(t>0)$,能量最小值在$k=0$ 处,而最大值在布里渊区边界,也就是$k=\pm\frac{\pi}{a}$ 处.

当电子基本上只占据$k=0$附近的状态时,可把色散ε_k在$k=0$展开,那么有

$$\varepsilon_k = -2t\cos ka \approx -2t\left(1-\frac{(ka)^2}{2}\right) = -2t + tk^2a^2 \tag{3.150}$$

这样电子的有效速度是$v_k = \frac{\partial\varepsilon_k}{\partial k} = 2tka^2$.如果对于比标准的自由粒子$\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m}$, 我们得到此时的电子有效质量是$m = \frac{1}{2ta^2}$,反比于跃迁能$t$.

我们看到一维自由晶格费米子性质是简单的,在下一节会发现一些相互作用系统通过某种变换可以等价为这个简单模型.

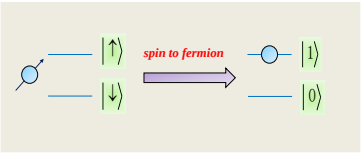


Figure 3.13: 孤立的$S=1/2$自旋与一个无自旋费米子的对应.

一维量子XY模型与Jordan-Wigner变换

让我们考虑一维量子XY模型,其描述x与y方向的自旋交换耦合.

$$\hat{H}_{XY}=-J\sum_j[\hat{S}_j^x\hat{S}_{j+1}^x+\hat{S}_j^y\hat{S}_{j+1}^y]=-\frac{J}{2}\sum_j[\hat{S}_j^+\hat{S}_{j+1}^-+\hat{S}_j^-\hat{S}_{j+1}^+] \tag{3.151}$$

这里的自旋1/2算符满足$SU(2)$对易关系$[\hat{S}_j^\alpha,\hat{S}_k^\beta]=i\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\delta_{jk}\hat{S}_k^\gamma$. 注意到与具有完全自旋$SU(2)$旋转对称的Heisenberg模型相比,这里少了$z$方向的耦合

$$-J\sum_j\hat{S}_j^z\hat{S}_{j+1}^z \tag{3.152}$$

换句话说,体系的对称性从$SU(2)$减少到$U(1)$或$O(2)$.[50]

对于一个孤立的$S=1/2$自旋,其Hilbert空间与一个无自旋费米子是相似的,这提示我们自旋与费米子之间可能有如下对应关系:(图3.13)

$$|\downarrow\rangle\leftrightarrow|0\rangle,\quad|\uparrow\rangle\leftrightarrow|1\rangle=\hat{f}^\dagger|0\rangle \tag{3.153}$$

也就是说我们可以把自旋的下态对应没有费米子的状态,而自旋上态对应有一个费米子的状态.那么相应的算符也有如下的对应[51]

$$\hat{S}^+=\hat{f}^\dagger,\quad\hat{S}^-=\hat{f},\quad\hat{S}^z=\hat{f}^\dagger\hat{f}-\frac{1}{2} \tag{3.154}$$

但是,由于每个格点间的自旋是对易的(每个格点的自旋是可分辨的),因此我们需要额外的东西来确保不同格点自旋的对易性.注意到费米子之间反对易,因此需要添加的可以是一个产生额外负号的相位因子部分,对一维自旋系统而言,Jordan-Wigner变换明确给出$S=1/2$系统与费米子系统的对应:

$$\boxed{\hat{S}_j^+=\hat{f}_j^\dagger e^{i\hat{\phi}_j},\quad\hat{\phi}_j=\pi\sum_{1\le m<j}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m,\quad\hat{S}_j^z=\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j-\frac{1}{2}} \tag{3.155}$$

[50] $U(1)/O(2)$表明自旋绕着z轴转动不变

[51] 定义一个量子力学问题需要定义Hilbert空间以及算符.

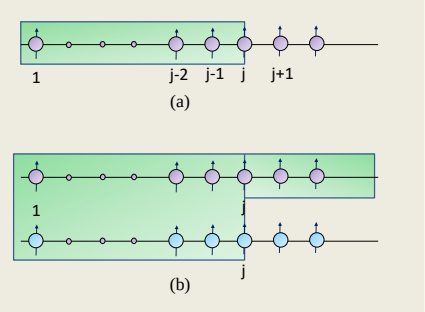


Figure 3.14: (a)一维自旋链,例如XY模型的Jordan-Wigner弦;(b)两个耦合的XY自旋链的Jordan-Wigner弦.

这里的相因子部分$e^{i\hat{\phi}_j} = e^{i\pi\sum_{1\leq m<j}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m} = e^{i\pi\sum_{1\leq m<j}(\hat{S}_m^z+1/2)}$称为Jordan-Wigner弦(算符),其物理意义是j格点的自旋算符感受到其他自旋对其的相位调制.(图3.14(a))在一维链的情况下,j格点的相位ϕ_j依赖于第一个到$j-1$格点的费米子的占据数$\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m$,每存在一个费米子就会贡献一个相位$\pi$,总的相位便是所有$j$格点左侧格点的相位之和.在实际使用中我们注意到$e^{i\pi\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m} = (-1)^{\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m} = 1-2\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m$.[52]

- 这里给出的自旋算符与费米子算符的对应就是著名的Jordan-Wigner变换,这类变换广泛地应用于一维系统,但是高维的推广形式却十分复杂[53].

把Jordan-Wigner变换代入XY模型可以得到

$$\hat{H}_{XY} = -\frac{J}{2}\sum_j[\hat{S}_j^+\hat{S}_{j+1}^- + \hat{S}_j^-\hat{S}_{j+1}^+] \tag{3.156}$$

$$= -\frac{J}{2}\sum_j[\hat{f}_j^\dagger e^{i\hat{\phi}_j}e^{-i\hat{\phi}_j}(1-2\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j)\hat{f}_{j+1} + H.c.] \tag{3.157}$$

$$= -\frac{J}{2}\sum_j[\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^\dagger\hat{f}_j] \tag{3.158}$$

这样我们发现一维量子XY模型已经变换为一维自由无自旋费米子系统.利用傅里叶变换可得体系的哈密顿量为

$$\hat{H}_{XY} = \sum_k(-J\cos k)\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k \tag{3.159}$$

[52]我们也可以用自旋来表示费米子,即有$\hat{f}_j^\dagger = \hat{S}_j^+e^{i\pi\sum_{m<j}(\hat{S}_m^z+1/2)} = \hat{S}_j^+\prod_{m<j}\hat{R}_m(\vec{e}_z,\pi)e^{i\pi(j-1)/2}$. 注意到自旋旋转算符$\hat{R}_m(\vec{e}_z,\pi)$会使得$\hat{S}_m^x \to -\hat{S}_m^x, \hat{S}_m^y \to -\hat{S}_m^y$, 这样当费米子算符$\hat{f}_j^\dagger$作用于$|\to\to\to\to\to\to\ldots\rangle$得到$|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\to\to\to\ldots\rangle$, 也就是相对于自旋取向均为$S^x = 1/2$的态产生一个在$j$处的畴壁.这说明费米子算符就是畴壁的产生或者湮灭算符,即XY模型中的畴壁是费米子.

[53]一般会包换规范场类型的自由度以及费米子自由度

在零温基态,费米子根据色散$-J\cos k<0$填满$k\in[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}]$的半个一维第一布里渊区,此时必然有$\langle\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k\rangle_{T=0}=\theta(\frac{\pi}{2}-|k|)$,这样$z$方向的磁化是[54]

$$\langle\hat{S}_j^z\rangle_{T=0}=\langle\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j\rangle_{T=0}-\frac{1}{2}=\frac{1}{N_s}\sum_k\langle\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k\rangle_{T=0}-\frac{1}{2}=\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk}{2\pi}\theta\left(\frac{\pi}{2}-|k|\right)-\frac{1}{2}=0 \tag{3.160}$$

换句话说,基态时的一维量子XY模型磁化为零,处于无序态.同时,为了便于参考,体系的基态能密度是

$$\frac{E_g}{N_s}=\frac{1}{N_s}\sum_k-J\cos k\theta(J\cos k)=\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{dk}{2\pi}(-J\cos k)=-\frac{J}{\pi} \tag{3.161}$$

这这里,我们发现一维的自旋系统类似于费米子,然而这并不是一维量子世界的一般规则.[55]

高维Jordan-Wigner变换的困难

在结束这一小节的讨论前,让我们感受一下一维Jordan-Wigner变换直接推广到高维的困难.为简单起见,我们考虑两个耦合的XY模型所组成的自旋双链,这可以看作是二维系统的一维极限,

$$\hat{H}=-\frac{J_1}{2}\sum_j[\hat{S}_{aj}^+\hat{S}_{aj+1}^-+\hat{S}_{aj}^-\hat{S}_{aj+1}^+]-\frac{J_2}{2}\sum_j[\hat{S}_{bj}^+\hat{S}_{bj+1}^-+\hat{S}_{bj}^-\hat{S}_{bj+1}^+]-\frac{w}{2}\sum_j[\hat{S}_{aj}^+\hat{S}_{bj}^-+\hat{S}_{aj}^-\hat{S}_{bj}^+] \tag{3.162}$$

这里指标a,b分别代表第一和第二个XY自旋链,J_1,J_2是链内的XY耦合,w是链间耦合.仿照一维XY模型的处理,我们可以假象把第二条自旋链直接拼接到第一条链的末端而形成等效的一维链,这样就可以套用Jordan-Wigner变换的基本形式,即有:(图3.14(b))

$$\hat{S}_{aj}^+=\hat{f}_{aj}^\dagger e^{i\hat{\phi}_{aj}},\quad \hat{\phi}_{aj}=\pi\sum_{1\le m<j}\hat{f}_{am}^\dagger\hat{f}_{am},\quad \hat{S}_{aj}^z=\hat{f}_{aj}^\dagger\hat{f}_{aj}-\frac{1}{2}$$
$$\hat{S}_{bj}^+=\hat{f}_{bj}^\dagger e^{i\hat{\phi}_{bj}},\quad \hat{\phi}_{bj}=\pi\sum_m\hat{f}_{am}^\dagger\hat{f}_{am}+\pi\sum_{1\le m<j}\hat{f}_{bm}^\dagger\hat{f}_{bm},\quad \hat{S}_{bj}^z=\hat{f}_{bj}^\dagger\hat{f}_{bj}-\frac{1}{2}$$

注意到第二个自旋链的每个相位因子$\hat{\phi}_{bj}$感受同一个自旋链上自旋的影响还会受到第一个自旋链的影响,即$\pi\sum_m\hat{f}_{am}^\dagger\hat{f}_{am}$.把这个变换代入模型可得

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{J_1}{2}\sum_j[\hat{f}_{aj}^\dagger\hat{f}_{aj+1}+h.c.]-\frac{J_2}{2}\sum_j[\hat{f}_{bj}^\dagger\hat{f}_{bj+1}+h.c.]\\ &- \frac{w}{2}\sum_j[\hat{f}_{aj}^\dagger e^{i(\pi\sum_{m\ge j}\hat{f}_{am}^\dagger\hat{f}_{am}+\pi\sum_{1\le m<j}\hat{f}_{bm}^\dagger\hat{f}_{bm})}\hat{f}_{bj}+h.c.]\end{aligned} \tag{3.163}$$

[54] x,y方向的磁化也是零,这是因为其涉及到奇数个费米子在自由费米子基态的平均,这自然是零.至于自旋关联函数,例如$\langle\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-\rangle,\langle\hat{S}_i^z\hat{S}_j^z\rangle$ 都是非零的,但具体的解析计算并不容易.

[55] 一维量子世界实际上的低能激发是类似于声波一样的集体激发.

我们发现描述自旋链耦合的w项出现了难以处理的费米子算符的指数形式$e^{i(\pi\sum_{m\geq j}\hat{f}^{\dagger}_{am}\hat{f}_{am}+\pi\sum_{1\leq m<j}\hat{f}^{\dagger}_{bm}\hat{f}_{bm})}$,这是从$a$自旋链上$j$格点到$b$自旋链$j$格点的Jordan-Wigner弦.显然,一般的二维自旋模型可以看作很多不同的一维自旋链的耦合,由于不同链间Jordan-Wigner弦的存在,自旋模型无法变换为简单的自由费米子问题而成为相互作用费米子问题,这就是Jordan-Wigner变换直接高维推广所面临的基本困难.

一维自由费米子系统的不稳定性

在Coulomb电子气的讨论中,我们知道电子气对于外加电荷和自旋扰动的响应可以用极化函数来描述

$$\chi_0(q,\omega)=\frac{1}{V}\sum_k\frac{f_F(\varepsilon_k)-f_F(\varepsilon_{k+q})}{\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k} \tag{3.164}$$

仿照三维自由费米子极化函数的计算,(参考第一章附录)当$T=0$时,我们可以直接算出一维自由费米子系统的极化函数:

$$\chi_0(q,\omega+i0^+)=\int_{-k_F}^{k_F}\frac{dk}{2\pi}\left[\frac{-1}{\omega+i0^+-\frac{q^2}{2m}-\frac{kq}{m}}+\frac{1}{\omega+i0^+-\frac{q^2}{2m}-\frac{kq}{m}}\right] \tag{3.165}$$

其实部为

$$\mathrm{Re}\chi_0(q,\omega)=\frac{m}{2\pi q}\left[\ln\left|\frac{1+\frac{q}{2k_F}+\frac{\omega m}{k_F q}}{-1+\frac{q}{2k_F}+\frac{\omega m}{k_F q}}\right|+(\omega\to-\omega)\right] \tag{3.166}$$

虚部是

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\chi_0(q,\omega) &= -\frac{m\pi}{|q|}\int_{-k_F}^{k_F}\frac{dk}{2\pi}\left[-\delta\left(k-\frac{\omega m}{q}+\frac{q}{2}\right)+\delta\left(k-\frac{\omega m}{q}-\frac{q}{2}\right)\right]\\ &= \frac{m}{2|q|}\left(\theta(k_F-|\omega m/q+q/2|)-\theta(k_F-|\omega m/q-q/2|)\right).\end{aligned}$$

当频率为零时,有

$$\mathrm{Re}\chi_0(q)=N(0)\frac{1}{2x}\ln\left|\frac{x+1}{x-1}\right|,\quad x=\frac{q}{2k_F}. \tag{3.167}$$

这里采用了一维无自旋自由费米子在费米能上的态密度$N(0)=\frac{m}{\pi k_F}$, 更一般的结果是$N(\omega)=\frac{1}{L}\sum_k\delta(\omega-\frac{k^2}{2m}+E_F)=\frac{m^{1/2}}{\pi^{1/2}\pi\sqrt{\omega+E_F}}$. 对比三维自由电子气在$q=2k_F$ 显示导数的不连续性,一维电子气在$q=2k_F$显示更强的奇异性,即对数发散行为.物理上$q=2k_F$对应着从一个费米点到另一个费米点的$2k_F$ 过程,这类发散说明一维自由费米子在外界或者自身的小扰动下就不稳定.注意到这种不稳定性来自于扰动的波矢恰好联系体系的两个费米点,(在高维时是联系费米面上的各个不同点,此时称为嵌套(nesting))也就是说一个无穷小扰动可以把费米面上的电子完全激发,这显然暗示这个电子系统是不稳定的.

另一方面,若忽略q^2项,也就是假设系统的动量转移$q<<2k_F$,那么$\mathrm{Im}\chi_0(q,\omega)=0$,也就是说小动量转移下极化函数没有虚部,因此相应的集体激发模式没有阻尼.

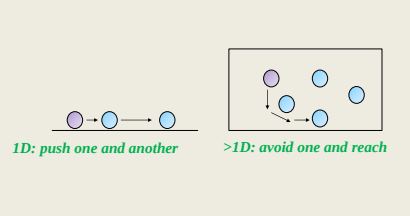


Figure 3.15: 一维与高维系统的区别,即相空间效应.

一维相互作用费米子系统:玻色化与Tomonaga模型

既然一维电子系统在小扰动下显示不稳定性,那么费米子之间相互作用带来的扰动亦可使不稳定得以发生.因此,我们需要仔细考虑这个问题.现在考虑一维相互作用费米子系统,为简单起见,先考虑无自旋费米子情况,体系的哈密顿量如下:

$$\hat{H}=\sum_{k}\varepsilon_k\hat{c}_k^{\dagger}\hat{c}_k+\sum_{k,k',q}V_q\hat{c}_{k+q}^{\dagger}\hat{c}_{k'-q}^{\dagger}\hat{c}_{k'}\hat{c}_k \tag{3.168}$$

考虑电子色散可以写为$\varepsilon_k=\frac{k^2}{2m}-E_F$,$E_F$ 为费米能,则体系的费米面是两个点,即$k=\pm k_F$,$k_F=\sqrt{2mE_F}$. 在无相互作用的基态时,费米子填满$\varepsilon_k<0$ 的所有态.那么当计入相互作用的效应时,体系会如何变化呢?

我们先做定性地考虑:在一维时,一个粒子要与另外一个粒子发生碰撞不能直接发生,而是要先碰撞附近的粒子,然后附近粒子再通过不断的碰撞把这种效果传递到需要影响的那个粒子.在研究晶格振动时,晶格振动通过相邻粒子的弹性相互作用描述,最终得到集体型的声波激发,即玻色子型的声子.显然这里讨论的一维费米子问题,与声子十分相似,所以我们期待一维费米子系统的激发应该是类似声子型的激发而不是简单的单个费米子激发.(图3.15)

在二维或三维时,一个粒子与另一个粒子碰撞可以不用经过其他粒子传递而直接碰撞,这表明高维时候体系的激发更像是单粒子型的激发,而不是声子型激发.换句话说,在高维时我们相信体系在考虑相互作用后也有很大可能保持无相互作用的费米气体的行为.[56](这其实就是Landau费米液体理论的实质)

[56]一维与高维的区别就是所谓的相空间效应.其实在二维,如果体系有磁场,那么相空间效应也会使得体系表现出不同于费米气体或者费米液体的行为,这就是分数量子Hall效应.

无自旋费米子的Tomonaga模型

自由系统

在数学上,可以用下面将要讨论的Tomonaga模型来阐述一维相互作用费米子(在一定条件下)等价于无相互作用的玻色子集体激发.

我们知道由$\hat{H}_0 = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$ 描述的一维自由费米气体在基态$|FG\rangle$时完全占据$k \in [-k_F, k_F]$的所有状态,(k_F为费米动量,由粒子密度n确定,即$n = k_F/\pi$.)其中$|FG\rangle = \prod_{k<k_F} \hat{c}_k^\dagger |0\rangle$. 当系统所受外界扰动或者本身粒子间相互作用不太强时,对低能物理其主要贡献的是费米面,一维是两个费米点($\pm k_F$), 附近的电子.因此我们先在费米面上$k = \pm k_F$上展开色散关系

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{k-k_F+k_F} \simeq \varepsilon_{k_F} + (k-k_F)\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k}|_{k_F} = v_F(k-k_F) \equiv v_F \tilde{k} \tag{3.169}$$

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{k+k_F-k_F} \simeq \varepsilon_{-k_F} + (k+k_F)\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k}|_{-k_F} = -v_F(k+k_F) \equiv -v_F \tilde{k} \tag{3.170}$$

这里我们在费米面上展开把粒子的色散线性化,这对于后面的处理而言是最基本的近似.注意$\tilde{k}$ 是相对于费米点的动量差,对于右费米点k_F而言,在基态$|FG\rangle$时$\tilde{k} < 0$都是占据的,而$\tilde{k} > 0$都没有占据.与之对应,在左费米点$-k_F$附近,$\tilde{k} > 0$是占据的,而$\tilde{k} < 0$没有费米子占据.由于我们是在费米点附近展开,因此$\tilde{k}$并不能取很大的值,一般我们可引入动量截断Λ使得所有$|\tilde{k}| < \Lambda$.

另一方面,既然色散关系在费米点附近展开,那么相应的费米子算符也需要展开,也就是

$$\hat{c}_k = \hat{c}_{k-k_F+k_F} \sim \hat{c}_{R\tilde{k}} \ \ (k \to k_F), \quad \hat{c}_k = \hat{c}_{k+k_F-k_F} \sim \hat{c}_{L\tilde{k}} \ \ (k \to -k_F) \tag{3.171}$$

这里$\hat{c}_{R\tilde{k}}, \hat{c}_{L\tilde{k}}$ 分别表示右边(k_F)与左边($-k_F$)费米点附近的费米子激发.既然这些费米子有左右之分,以此也称为左右手费米子或简称手性费米子.这样,一般相互作用哈密顿量的自由部分$\hat{H}_0$可以改写为

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \simeq \sum_{k\to k_F} \varepsilon_{k-k_F+k_F} \hat{c}_{k-k_F+k_F}^\dagger \hat{c}_{k-k_F+k_F} + \sum_{k\to -k_F} \hat{c}_{k+k_F-k_F}^\dagger \hat{c}_{k+k_F-k_F} \\ &\simeq \sum_{|\tilde{k}|<\Lambda} v_F \tilde{k} (\hat{c}_{R\tilde{k}}^\dagger \hat{c}_{R\tilde{k}} - \hat{c}_{L\tilde{k}}^\dagger \hat{c}_{L\tilde{k}})\end{aligned} \tag{3.172}$$

即有(图3.16)

$$\boxed{\hat{H}_0 \simeq \sum_{|\tilde{k}|<\Lambda} v_F \tilde{k} (\hat{c}_{R\tilde{k}}^\dagger \hat{c}_{R\tilde{k}} - \hat{c}_{L\tilde{k}}^\dagger \hat{c}_{L\tilde{k}}).} \tag{3.173}$$

注意到左右手费米子部分是彼此退耦的,因此,系统此时的基态可以写为

$$|\widetilde{FG}\rangle = \left(\prod_{0<\tilde{k}<\Lambda} \hat{c}_{L\tilde{k}}^\dagger |0\rangle_L\right) \otimes \left(\prod_{-\Lambda<\tilde{k}<0} \hat{c}_{R\tilde{k}}^\dagger |0\rangle_R\right). \tag{3.174}$$

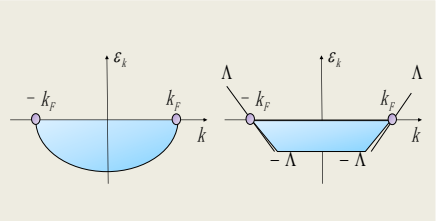


Figure 3.16: 一维费米系统色散的线性化,相当于在费米点处人为构造手性费米子$\hat{c}_R, \hat{c}_L$.

既然费米子系统已在费米点附近线性化,那么相应的费米子场算符变为:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k e^{ikx}\hat{c}_k \simeq \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{k\to k_F} e^{ikx}\hat{c}_{k-k_F+k_F} + \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{k\to -k_F} e^{ikx}\hat{c}_{k+k_F-k_F} \\ &= e^{ik_Fx}\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda} e^{i\tilde{k}x}c_{R\tilde{k}} + e^{-ik_Fx}\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda} e^{i\tilde{k}x}c_{L\tilde{k}} \\ &= e^{ik_Fx}\hat{\psi}_R(x) + e^{-ik_Fx}\hat{\psi}_L(x) \end{aligned} \tag{3.175}$$

这里$\psi_L(x), \psi_R(x)$分别是左右手费米子的场算符.注意到场算符中的动量$|\tilde{k}| << k_F$, 因此它们是慢变量或者说是系统的低能自由度,而高频振荡因子$e^{\pm ik_Fx}$则提醒我们这些场来源于费米点附近.利用场算符$\psi_L(x), \psi_R(x)$,$\hat{H}_0$也可表示为[57]

$$\hat{H}_0 = -iv_F\int dx(\hat{\psi}_R^\dagger\partial_x\hat{\psi}_R - \hat{\psi}_L^\dagger\partial_x\hat{\psi}_L). \tag{3.176}$$

自由系统的激发

现在,让我们考虑基态上的激发,显然把费米子从填满的费米海拿出来移动到费米海之外是系统守恒粒子数的典型激发,(即粒子−空穴激发)用原始的费米子可以表示为$\hat{c}_{k+q}^\dagger\hat{c}_k$, 其中要求$|k| < k_F, |k+q| > k_F$.这个激发对应的能量改变为$\Delta E_{k,q} = \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k$.显然这个能量变化当$k, k+q$都在费米点附近时有最小的能量,也就是最重要的低能激发.显然,当q比较小时,涉及的费米子都在同一个费米点附近,而当$q \sim 2k_F$时,涉及的费米就在不同的费米点了.所以,我们需要分两类情况讨论,即$(1)q \sim 0$;$(2)q \sim 2k_F$.

首先考虑$q \sim 0$的简单情况.当$q \to 0$且k在右费米点附近时,我们有$\Delta E_{k,q}^R \simeq (k+q-k_F)v_F - (k-k_F)v_F = v_Fq$.当$q \to 0$且$k$在左费米点附近时,我们有$\Delta E_{k,q}^L \simeq (k+q+k_F)(-v_F) - (k+k_F)v_F \simeq -v_Fq$. 既然相对基态的激发其能量应该大于

[57]这个哈密顿也可改写为Dirac 费米子的哈密顿量,加上电磁场后就成为一维量子电动力学,具体内容可参考本章附录.

零,则要求$\Delta E^R_{k,q}$ 中$\tilde{k}+q>0,\tilde{k}<0$, 而$\Delta E^L_{k,q}$中$\tilde{k}+q<0,\tilde{k}>0$.进一步,我们考虑所有在同一个费米点附近激发的总贡献,产生这些激发在数学上相当于用如下算符作用于基态$|\widetilde{FG}\rangle$,

$$\hat{\rho}^\dagger_{Rq}=\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{R\tilde{k}+q}\hat{c}_{R\tilde{k}},\quad q>0 \tag{3.177}$$

这里$\hat{\rho}^\dagger_{Rq}$是算符$\hat{\rho}_{Rq}$的厄密共轭.注意到这样定义的$\hat{\rho}^\dagger_q$ 在作用到$|\widetilde{FG}\rangle$上时可以放松对$\tilde{k}$的限制.同理,我们在左费米点附近也定义$\hat{\rho}^\dagger_{Lq}=\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{L\tilde{k}+q}\hat{c}_{L\tilde{k}},q<0$.(或者$\hat{\rho}^\dagger_{L-q}=\hat{\rho}_{Lq}=\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{L\tilde{k}-q}\hat{c}_{L\tilde{k}},q>0$) 现在的问题是$\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}_{Lq}$到底是什么物理量?

让我们看一下费米子密度算符的傅里叶级数展开(考虑系统是长度为L的一根线)

$$\hat{\rho}(x)=\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)=\frac{1}{L}\sum_{k,k'}e^{i(k'-k)x}\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k'}=\frac{\hat{N}}{L}+\frac{1}{L}\sum_{k,q\neq0}e^{iqx}\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k+q}\equiv\hat{\rho}+\frac{1}{L}\sum_{q\neq0}e^{iqx}\hat{\rho}_q,$$

这里$\hat{N}=\sum_k\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k$是总费米子数.$\hat{\rho}=\hat{N}/L$是总费米子密度.$\hat{\rho}_q=\sum_k\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k+q}$是密度算符的傅里叶变换,也就是动量空间的密度算符. 注意到$\hat{\rho}_q$在费米子基态$|\widetilde{GS}\rangle$下的期望值为零,因此$\hat{\rho}_q$实际上描述的是相对于基态$|\widetilde{GS}\rangle$的密度涨落.

注意到密度算符为实算符,因此其傅里叶变换系数满足$\hat{\rho}_{-q}=\hat{\rho}^\dagger_q$,因此也有

$$\hat{\rho}(x)=\hat{\rho}+\frac{1}{L}\sum_{q>0}(e^{iqx}\hat{\rho}_q+e^{-iqx}\hat{\rho}^\dagger_q) \tag{3.178}$$

这样我们下面仅需要考虑$q>0$的模式.当q为小量时,在左右费米点附近有

$$\hat{\rho}^\dagger_q\simeq\sum_{k\to k_F}\hat{c}^\dagger_{k+q-k_F+k_F}\hat{c}_{k-k_F+k_F}+\sum_{k\to-k_F}\hat{c}^\dagger_{Lk+q+k_F-k_F}\hat{c}_{Lk+k_F-k_F}=\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{R\tilde{k}+q}\hat{c}_{R\tilde{k}}+\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{L\tilde{k}+q}\hat{c}_{L\tilde{k}} \tag{3.179}$$

根据我们关于$\hat{\rho}^\dagger_{Rq}$和$\hat{\rho}^\dagger_{Lq}$定义,$\hat{\rho}^\dagger_q$ 可以写成

$$\boxed{\hat{\rho}^\dagger_q\simeq\hat{\rho}^\dagger_{Rq}+\hat{\rho}_{Lq}} \tag{3.180}$$

注意这里暗含了$q>0$的要求.由此,我们看到$\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}_{Lq}$的物理意义是在右边和左边费米点附近的密度涨落.这样,

$$\hat{\rho}(x)=\hat{\rho}+\frac{1}{L}\sum_{q>0}\left(e^{iqx}\hat{\rho}_{Rq}+e^{-iqx}\hat{\rho}^\dagger_{Rq}\right)+\frac{1}{L}\sum_{q>0}\left(e^{iqx}\hat{\rho}^\dagger_{Lq}+e^{-iqx}\hat{\rho}_{Lq}\right)=\hat{\rho}+\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x)$$

这里定义了实空间的左右密度涨落算符$\hat{\rho}_R(x),\hat{\rho}_L(x)$.

接下来,我们考虑$q\sim2k_F$的情况,此时相应的密度涨落涉及不同费米点,也就是

$$\hat{\rho}^\dagger_{q\sim2k_F}\simeq\sum_{k\to-k_F}\hat{c}^\dagger_{k+k_F+q-2k_F+k_F}\hat{c}_{k+k_F-k_F}=\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{R\tilde{k}+q-2k_F}\hat{c}_{L\tilde{k}} \tag{3.181}$$

这样

$$\hat{\rho}(x)=\hat{\rho}+\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x)+\frac{1}{L}\sum_{q>0}e^{-iqx}\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{R\tilde{k}+q-2k_F}\hat{c}_{L\tilde{k}}+(-2k_F-\text{term})$$

令$q\to q+2k_F$,则有

$$\hat{\rho}(x)=\hat{\rho}+\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x)+\frac{1}{L}e^{-i2k_Fx}\sum_{q}e^{-iqx}\sum_{|\tilde{k}|<\Lambda}\hat{c}^\dagger_{R\tilde{k}+q}\hat{c}_{L\tilde{k}}+(-2k_F-\text{term})$$

注意到移动q使得$q>0$的限制得到消除.利用左右手费米子的场算符可以把上式右边化为简单形式,即

$$\boxed{\hat{\rho}(x)=\hat{\rho}+\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x)+e^{i2k_Fx}\hat{\psi}^\dagger_L(x)\hat{\psi}_R(x)+e^{-i2k_Fx}\hat{\psi}^\dagger_R(x)\hat{\psi}_L(x).}$$

这里$\hat{\rho}_R(x)=\hat{\psi}^\dagger_R(x)\hat{\psi}_R(x),\hat{\rho}_L(x)=\hat{\psi}^\dagger_L(x)\hat{\psi}_L(x)$. 因此,完整的密度算符涉及$q\sim 0$的密度涨落,也涉及$q\sim 2k_F$的贡献.当然,由于因子$e^{2k_Fx}$在一般情况下是快速振荡的,因此对其积分为零.所以,让我们忘记$2k_F$部分,先看看仅由密度涨落算符描述下的良好性质.

密度涨落与玻色子

既然基态附近的所有激发都由密度涨落$\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}_{Lq}$描述,那么我们可以期待$\hat{H}_0$可用这些密度算符表示为

$$\hat{H}_0\sim E_0+\sum_{q>0}f(q)(\hat{\rho}^\dagger_{Rq}\hat{\rho}_{Rq}+\hat{\rho}^\dagger_{Lq}\hat{\rho}_{Lq}) \tag{3.182}$$

E_0相当于系统的基态能.当然,要写成上述形式的前提是密度算符可以写成标准的玻色子算符.[58]要判断一类粒子或者激发是否是标准玻色子,最直接的是计算其对易关系.注意到左右费米点的密度涨落实际上是彼此无关的,因此它们之间必然互相对易.所以需要计算的仅是同一个费米点附近的密度涨落.我们来看右费米点的情况,

$$[\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}^\dagger_{Rq'}]=\sum_{|k|,|k'|<\Lambda}[\hat{c}^\dagger_{Rk}\hat{c}_{Rk+q},\hat{c}^\dagger_{Rk'+q}\hat{c}_{Rk'}],\qquad q,q'>0 \tag{3.183}$$

计算上式中的对易关系,我们发现

$$[\hat{c}^\dagger_{Rk}\hat{c}_{Rk+q},\hat{c}^\dagger_{Rk'+q}\hat{c}_{Rk'}]=\delta_{k+q,k'+q'}\hat{c}^\dagger_{Rk}\hat{c}_{Rk'}-\delta_{k,k'}\hat{c}^\dagger_{Rk'+q'}\hat{c}_{Rk+q}, \tag{3.184}$$

这样有

$$\begin{aligned}[\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}^\dagger_{Rq'}] &= \sum_{|k|,|k'|<\Lambda}(\delta_{k+q,k'+q'}\hat{c}^\dagger_{Rk}\hat{c}_{Rk'}-\delta_{k,k'}\hat{c}^\dagger_{Rk'+q'}\hat{c}_{Rk+q})\\ &= \sum_{|k|<\Lambda}(\hat{c}^\dagger_{Rk}\hat{c}_{Rk+q-q'}-\hat{c}^\dagger_{Rk+q'}\hat{c}_{Rk+q}).\end{aligned} \tag{3.185}$$

[58]密度涨落是大量费米子激发的集合体,因此更可能是玻色型的.

显然,这是一个让人失望的结果,因为密度涨落算符的对易非但不是玻色子的对易关系,反而是复杂的算符.为了进一步处理,注意到这些密度涨落都是相对于费米气体基态$|\widetilde{FG}\rangle$而言的,因此可以做近似处理,也就是把这个对易关系看作是$|\widetilde{FG}\rangle$ 上的平均,也就是用下列平均代替原始的算符形式,即有[59]

$$\begin{aligned}[\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq'}] &\simeq \sum_{|k|<\Lambda}\left(\langle\widetilde{FG}|\hat{c}^{\dagger}_{Rk}\hat{c}_{Rk+q-q'}|\widetilde{FG}\rangle-\langle\widetilde{FG}|\hat{c}^{\dagger}_{Rk+q'}\hat{c}_{Rk+q}|\widetilde{FG}\rangle\right)\\ &= \delta_{q,q'}\sum_{|k|<\Lambda}\left(\langle\widetilde{FG}|\hat{c}^{\dagger}_{Rk}\hat{c}_{Rk}|\widetilde{FG}\rangle-\langle\widetilde{FG}|\hat{c}^{\dagger}_{Rk+q}\hat{c}_{Rk+q}|\widetilde{FG}\rangle\right)\end{aligned}$$

现在,我们必须注意到k求和是在有限范围内进行的,如果把它扩展到无穷大区间,那么当我们在计算$\langle\widetilde{FG}|\hat{c}^{\dagger}_{Rk+q}\hat{c}_{Rk+q}|\widetilde{FG}\rangle$时可以把$k+q\to k$,这样这一项就会和第一项抵消导致对易为零,这显然也是不好的结果.[60]注意到这一点,我们把对k求和换为积分可得(考虑系统长度为L)

$$\begin{aligned}[\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq'}] &\simeq \delta_{q,q'}\left(\frac{L}{2\pi}\int_{-\Lambda}^{\Lambda}dk\theta(-k)-\frac{L}{2\pi}\int_{-\Lambda}^{\Lambda}dk\theta(-k-q)\right)\\ &= \delta_{q,q'}\left(\frac{L}{2\pi}\Lambda-\frac{L}{2\pi}(\Lambda-q)\right),\quad \Lambda>>q\\ &= \delta_{q,q'}\frac{Lq}{2\pi}.\quad q>0\end{aligned}\tag{3.186}$$

注意到这个关系已经很接近标准的玻色子对易关系,我们仅需要把因子分配到对易关系这边就可以得到标准玻色子的对易形式.也就是我们可以定义如下的标准玻色子算符:

$$\boxed{\hat{a}_q=\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\hat{\rho}_{Rq},\quad \hat{a}^{\dagger}_q=\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq}}\tag{3.187}$$

同理,对于左费米点我们有

$$[\hat{\rho}_{Lq},\hat{\rho}^{\dagger}_{Lq'}]\simeq\delta_{q,q'}\left(\frac{L}{2\pi}\int_{-\Lambda}^{\Lambda}dk\theta(k)-\frac{L}{2\pi}\int_{-\Lambda}^{\Lambda}dk\theta(k-q)\right)=\delta_{q,q'}\frac{Lq}{2\pi}.\quad q>0$$

因此,

$$\boxed{\hat{b}_q=\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\hat{\rho}_{Lq},\quad \hat{b}^{\dagger}_q=\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\hat{\rho}^{\dagger}_{Lq}}\tag{3.188}$$

[59]这里用无相互作用费米子基态来取平均实际上暗示相互作用加入后并不影响费米面的结构(有两个费米点,其位置由原始费米子填充确定),注意到这与Landau费米子液体理论的绝热性假设(相互作用基态与无相互作用基态的费米面结构完全相同)有异曲同工之妙.在这一点上Tomonaga-Luttinger液体与Landau 费米液体并无本质的区别.一个有趣的研究结果表明可以套用Landau费米液体的形式重写Luttinger液体的激发,[J. M. Leinaas,Luttinger liquids,Fermi liquids,and fractional statistics, Phys.Rev.B **95**,155429(2017)]这进一步说明了两者存在内在联系或者说Landau费米液体理论形式中有某些更为深刻的物理观点,比如说绝热性.

[60]Luttinger的论文中就出现了这个问题,后来由Mattis 和Lieb给出了正确的处理,也就是现在采用的形式.Luttinger,J.Math.Phys.**4**,1154(1963);Mattis,Lieb, J.Math.Phys.**6**,304(1965)

为什么在这里密度算符可以等价的写成玻色子算符呢?原因是密度算符涉及当两个费米子算符的组合,因此在粒子交换下类似于玻色子.[61]当然,利用傅里叶变换我们可以得到实空间密度算符满足的对易关系$[\hat{\rho}_{R/L}(x),\hat{\rho}_{R/L}(y)]=\mp\frac{i\partial_x}{2\pi}\delta(x-y),[\hat{\rho}_R(x),\hat{\rho}_L(y)]=0$. 由于密度算符可以看成是相对论协变形式流密度算符的时间分量,因此这里的对易关系在场论中称为流代数.

到此为止,我们看到左右费米点附近的密度算符确实可以表示为玻色子,但是表述为玻色子后,原始哈密顿量$\hat{H}_0$具有什么样的形式呢？自然的猜测是

$$\hat{H}_0=E_0+\sum_{q>0}v_Fq(\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_q+\hat{b}_q^\dagger\hat{b}_q). \tag{3.189}$$

如果$\hat{H}_0$确实满足这个形式,那么我们知道必定有$[\hat{a}_q,\hat{H}_0]=v_Fq\hat{a}_q$.(对$\hat{b}_q$有相同关系)下面我们通过计算来证明这一点.

$$[\hat{a}_q,\hat{H}_0]=\sum_k\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}[\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk+q},\hat{H}_0]=\sum_{k,k'}\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}(v_Fk')[\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk+q},\hat{c}_{Rk'}^\dagger\hat{c}_{Rk'}]$$

这里我们用了$\hat{H}_0$的左右手费米子表示$\hat{H}_0=\sum_k v_Fk(\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk}-\hat{c}_{Lk}^\dagger\hat{c}_{Lk})$. 计算上式中的对易关系可得

$$[\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk+q},\hat{c}_{Rk'}^\dagger\hat{c}_{Rk'}]=\delta_{k',k+q}\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk'}-\delta_{k,k'}\hat{c}_{Rk'}^\dagger\hat{c}_{Rk+q}. \tag{3.190}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}[\hat{a}_q,\hat{H}_0] &= \sum_{k,k'}\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}(v_Fk')\left(\delta_{k',k+q}\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk'}-\delta_{k,k'}\hat{c}_{Rk'}^\dagger\hat{c}_{Rk+q}\right)\\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\sum_k\left((v_F(k+q))\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk+q}-(v_Fk)\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk+q}\right)\\ &= v_Fq\sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\sum_k\hat{c}_{Rk}^\dagger\hat{c}_{Rk+q}\\ &= v_Fq\hat{a}_q. \end{aligned} \tag{3.191}$$

因此,自由费米子部分的哈密顿量具有如下形式

$$\hat{H}_0=E_0+\sum_{q>0}v_Fq(\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_q+\hat{b}_q^\dagger\hat{b}_q). \tag{3.192}$$

E_0代表没有密度激发时候的能量,也就是基态能,因为系统在费米子的语言来看是自由费米子的基态,因此其能量实际上是$|\widetilde{GS}\rangle$ 的能量,即

$$E_0=\langle\widetilde{GS}|\hat{H}_0|\widetilde{GS}\rangle=\sum_{|k|<\Lambda}v_Fk\left(\theta(-k)-\theta(k)\right)=\frac{Lv_F}{2\pi}\int_{-\Lambda}^0kdk-\frac{Lv_F}{2\pi}\int_0^\Lambda kdk=-\frac{Lv_F}{2\pi}\Lambda^2. \tag{3.193}$$

[61]我们已经通过上面计算得到的对易关系确认了这一点.

显然,E_0在$\Lambda \to \infty$是发散,这来自我们对系统的线性化处理把晶格的离散性消除导致任意高能量的激发都存在.在完整的晶格描述中,最大动量是$\pm\pi$,因此系统能量对所有有限能量的求和不会发散.

- 一维费米气体在线性近似下可用密度涨落所对应的一维自由玻色子描述.

$$\hat{H}_0 = \sum_{|k|<\Lambda} v_F k(\hat{c}^\dagger_{Rk}\hat{c}_{Rk} - \hat{c}^\dagger_{Lk}\hat{c}_{Lk}) \simeq E_0 + \sum_{q>0} v_F q(\hat{a}^\dagger_q\hat{a}_q + \hat{b}^\dagger_q\hat{b}_q). \tag{3.194}$$

加入相互作用

如果玻色子的描述仅对自由费米气体适用,那么其价值并不大.仿照Landau费米液体的思路,如果一维相互作用费米子可以用玻色子改写为如下形式

$$\begin{aligned}\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k + \sum_{k,k',q} V_q \hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{c}^\dagger_{k'-q}\hat{c}_{k'}\hat{c}_k \quad &\simeq \quad E_0 + \sum_{q>0} A(q)(\hat{a}^\dagger_q\hat{a}_q + \hat{b}^\dagger_q\hat{b}_q) + \sum_{q>0} B(q)(\hat{a}^\dagger_q\hat{b}_q + \hat{a}^\dagger_q\hat{b}_q) \\ &+(aaaa + bbbb + aabb - \text{terms}) + ... \end{aligned} \tag{3.195}$$

并且所有大于算符平方项的部分都是小量,那么这样的玻色子表示实际上是有用的.现在,我们来看一般相互作用项用玻色子表示如何改写.首先,相互作用部分也可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} &= \sum_{k,k',q} V_q \hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{c}^\dagger_{k'-q}\hat{c}_{k'}\hat{c}_k = \sum_{k,k',q} V_q(-\hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{c}_{k'}\delta_{k,k'-q} + \hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{c}_k\hat{c}^\dagger_{k'-q}\hat{c}_{k'}) \\ &= \sum_{k,k',q} V_q \hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{c}_k\hat{c}^\dagger_{k'-q}\hat{c}_{k'} + C = \sum_{q\neq 0} V_q\hat{\rho}_{-q}\hat{\rho}_q + C + V_0\hat{\rho}^2 \\ &= \sum_{q>0}(V_q\hat{\rho}_{-q}\hat{\rho}_q + V_{-q}\hat{\rho}_q\hat{\rho}_{-q}) = \sum_{q>0}(V_q\hat{\rho}^\dagger_q\hat{\rho}_q + V_{-q}\hat{\rho}_q\hat{\rho}^\dagger_q)\end{aligned} \tag{3.196}$$

其中常数$C = -\sum_{kq} V_q\hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{c}_{k+q}$ 与$V_0\hat{\rho}^2$不影响动力学,因而已经忽略.在开始的讨论中,我们知道当q 为小量时,$\rho^\dagger_q \simeq \rho^\dagger_{Rq} + \rho_{Lq}$, 把这个结果代入上式可得

$$\hat{H}_{int} \simeq \sum_{q>0}\Big(V_q(\hat{\rho}^\dagger_{Rq} + \hat{\rho}_{Lq})(\hat{\rho}_{Rq} + \hat{\rho}^\dagger_{Lq}) + V_{-q}(\hat{\rho}_{Rq} + \hat{\rho}^\dagger_{Lq})(\hat{\rho}^\dagger_{Rq} + \hat{\rho}_{Lq})\Big) \tag{3.197}$$

整理以上公式我们发现

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} &\simeq \sum_{q>0}(V_q + V_{-q})(\hat{\rho}^\dagger_{Rq}\hat{\rho}_{Rq} + \hat{\rho}^\dagger_{Lq}\hat{\rho}_{Lq} + \rho^\dagger_{Rq}\hat{\rho}^\dagger_{Lq} + \hat{\rho}_{Rq}\hat{\rho}_{Lq}) \\ &= \sum_{q>0}(V_q + V_{-q})\frac{Lq}{2\pi}(\hat{a}^\dagger_q\hat{a}_q + \hat{b}^\dagger_q\hat{b}_q + \hat{a}^\dagger_q\hat{b}^\dagger_q + \hat{a}_q\hat{b}_q)\end{aligned} \tag{3.198}$$

这样我们发现一般性的相互作用实际上可以写成玻色子算符的二次形式,而根据我们之前处理反铁磁自旋波的经验,这类哈密顿量也很容易对角化.这说明玻色子表示对于一维相互作用费米子系统确实是有用的.更一般地,我们把相互作用部分写成(当前模型有$g_2 = g_4 = g$)

$$\hat{H}_{int} = \sum_{q>0}\frac{q}{2\pi}\Big(g_4(\hat{a}^\dagger_q\hat{a}_q + \hat{b}^\dagger_q\hat{b}_q) + g_2(\hat{a}^\dagger_q\hat{b}^\dagger_q + \hat{a}_q\hat{b}_q)\Big) \tag{3.199}$$

这里g_2, g_4可以看成是相互作用系数,当相互作用势V_q是对于q表现良好的函数时是合理的近似.结合自由费米子气体部分的结果,我们发现一维相互作用费米子系统可以用如下纯玻色子哈密顿量描述

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{q>0} q\left(\left(v_F + \frac{g_4}{2\pi}\right)(\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q) + \frac{g_2}{2\pi}(\hat{a}_q^\dagger \hat{b}_q^\dagger + \hat{a}_q \hat{b}_q)\right) \tag{3.200}$$

可以看到费米子模型完全转化成为了玻色子模型,这就是玻色化(bosonization).

- 为了得到玻色子模型,我们利用了三个近似:1) 在左右费米点线性化费米子能谱;2) 把密度算符对易关系用自由费米子基态平均代替并考虑有限的动量截断;3) 相互作用只考虑了小动量时的密度–密度相互作用.其中前两条对任意玻色化都是必须的,而最后一条只是为了得到二次型的玻色子模型.

  进一步,我们采用反铁磁自旋波处理时采用的Bogoliubov 变换,

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_q \\ \hat{b}_q^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\theta_q & -\sinh\theta_q \\ -\sinh\theta_q & \cosh\theta_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_q \\ \hat{\beta}_q^\dagger \end{pmatrix} \tag{3.201}$$

来对角化哈密顿量.令非对角项为零可得$\tanh 2\theta_q = \frac{g_2}{g_4 + 2\pi v_F}$. 对角化后的哈密顿量是

$$\begin{aligned} \hat{H} &= E_0 + \sum_{q>0}\Big((q\,(v_F + g_4/(2\pi))\cosh 2\theta_q - q g_2/(2\pi)\sinh 2\theta_q)(\hat{\alpha}_q^\dagger \hat{\alpha}_q + \hat{\beta}_q^\dagger \hat{\beta}_q)\Big) \\ &\quad + \sum_{q>0}(q\,(v_F + g_4/(2\pi))\cosh 2\theta_q - q g_2/(2\pi)\sinh 2\theta_q - q(v_F + g_4/(2\pi))) \\ &= \sum_{q>0}\omega_q(\hat{\alpha}_q^\dagger \hat{\alpha}_q + \hat{\beta}_q^\dagger \hat{\beta}_q) + \sum_{q>0}(\omega_q - q(v_F + g_4/(2\pi))) + E_0 \end{aligned} \tag{3.202}$$

这里玻色子的色散关系

$$\omega_q = q\,(v_F + g_4/(2\pi))\cosh 2\theta_q - q g_2/(2\pi)\sinh 2\theta_q = q\sqrt{\left(v_F + \frac{g_4}{2\pi}\right)^2 - \left(\frac{g_2}{2\pi}\right)^2} = v_c q \tag{3.203}$$

以此

$$\hat{H} = \sum_{q>0} v_c q(\hat{\alpha}_q^\dagger \hat{\alpha}_q + \hat{\beta}_q^\dagger \hat{\beta}_q) + E_g, \quad v_c = \sqrt{\left(v_F + \frac{g_4}{2\pi}\right)^2 - \left(\frac{g_2}{2\pi}\right)^2} \tag{3.204}$$

- 这样就把一个相互作用的一维无自旋费米子模型转化为了一个自由玻色子模型,这体现了玻色化技术相当让人满意的特性,即可以把相互作用问题通过非微扰的途径化为无相互作用问题.

现在,我们发现利用玻色化的技术可以把所以一维相互作用费米子系统都转化为自由玻色子系统,而自由玻色子系统是无能隙的,这反过来说明所有一维

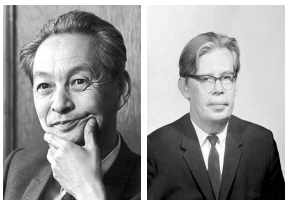


Figure 3.17: Sin-Itiro Tomonaga(朝永振一郎)(1906 – 1979)和Bogoliubov.Tomonaga因量子电动力学的基础性工作而产生对基本粒子物理的深远影响荣获1965年诺贝尔物理学奖.Bogoliubov是俄国著名的理论物理学家,其为人熟知的成果包括以他名字命名的Bogoliubov变换和Bogoliubov不等式,在他领导下的Bogoliubov 学派也是苏联时期重要的理论物理研究中心.

费米子都是无能隙的.然而,这个结论并不正确.从根源上来看,我们在考虑自由费米气体基态的激发时实际上仅考虑了在同一个费米点附近的激发,但实际上由$\hat{c}^{\dagger}_{k+q}\hat{c}_k$ 还可以在两个费米点之间进行,例如k在$-k_F$附近,而$k+q$ 在k_F附近,这自然要求$q \simeq 2k_F$,也就是当激发动量$q = 2k_F$时会使得费米点之间的费米彼此转化,这用固体物理的语言可称为倒逆散射.

既然倒逆散射涉及不同费米点之间的费米子,那么单纯用左右费米点附近的密度激发已经不能刻画.相关的理论超出了现在讨论的范围,但基本结果是明显的,也就是对于电子密度为一般取值时,倒逆散射不重要可忽略,然而对与公度填充(例如半满能带),倒逆散射不可忽略且会导致系统发生相变进入电荷密度波(CDW)绝缘体.当然,实际的一维CDW系统,例如无机链状材料$NbSe_3$,$K_{0.3}MoO_3$,多是电子−晶格相互作用的结果,即Peierls相变.在Peierls相变中,电声相互作用使得晶格不稳定倾向于晶格发生二聚化,即晶格间距变大一倍,布里渊区缩小一倍.出于能量最低的考虑,这种二聚化在一维是稳定的,同时为了适应晶格的改变,电子系统也有二聚化倾向,即显示电子密度在实空间的周期性调制,也就是CDW.(例如电子密度空间分布为$\rho(x) = \rho_0 + \rho_1 \cos(2k_F x + \varphi)$,$\rho_0$为平均密度,$\rho_1$是CDW振幅,$\varphi$是任意相位.)

最后,当考虑电子自旋时,一般性的非自旋依赖相互作用哈密顿可以化为如

模型	Tomonaga模型	XY模型	反铁磁Heisenberg模型	Hubbard模型
特性	严格求解	算关联函数	破坏自旋$SU(2)$对称	自旋电荷分离/Mott绝缘体

Table 3.2: 玻色化可以处理的典型一维问题.

下自由玻色子形式[62]

$$\hat{H}_c = \sum_q v_c q(\hat{\alpha}_q^\dagger \hat{\alpha}_q + \hat{\beta}_q^\dagger \hat{\beta}_q), \qquad v_c = \sqrt{(v_F + g_4/\pi)^2 - (g_2/\pi)^2}$$
$$\hat{H}_s = \sum_q v_s q(\hat{a}_{qs}^\dagger \hat{a}_{qs} + \hat{b}_{qs}\hat{b}_{qs}^\dagger), \quad v_s = v_F \tag{3.205}$$

这里$\hat{H}_c$代表电荷部分的密度激发,简称电荷密度激发,而$\hat{H}_s$描述自旋密度的激发.v_c, v_s分别是电荷密度与自旋密度激发传播的速度.

- 注意到一个重要的事实,即相互作用系统的电荷与自旋密度激发速度是不相同的($v_c \neq v_s$),也就是电荷与自旋自由度是分离的.这是一维相互作用系统的一般特性,形象地说,如果在这类系统中注入一个电子,那么这个电子的电荷与自旋自由度将会分离,电荷与自旋激发将会以不同的速度独立传播.

更一般地,一维无能隙的相互作用量子系统可以用Tomonaga-Luttinger液体理论来统一描述.在这里我们只是利用Tomonaga模型来示范如何从相互作用费米子模型变换至自由玻色子模型,实际上根据Haldane的唯象玻色化方案,任意的一维相互作用费米子或者玻色子模型都可以玻色化,详细内容可以参考Giamarchi 书第三章前半部分的说明.[6]当然,文献当中,特别是高能物理背景的研究者喜欢用场论形玻色化,其主要是根据对称性和拉格朗日量的一般要求来猜测性地构造玻色化规则,这方面最简单的介绍可以参考Altland-Simons书第四章最后一节的场论玻色化讨论.

玻色化的实际形式*

新变量$\hat{\phi}(x), \hat{\theta}(x)$

虽然相互作用费米子哈密顿量已经用玻色子表示,然而这种表示对于很多物理量的计算并不方便,因此我们需要引入新的变量.让我们考虑由密度涨落$\hat{\rho}_{Rq}, \hat{\rho}_{Lq}$所构造的场算符$\hat{\phi}(x)$:

$$\hat{\phi}(x) = -\frac{\hat{N}}{L}\pi x + \frac{i\pi}{L}\sum_{q>0}\frac{e^{-q\alpha/2}}{q}\left(e^{iqx}(\hat{\rho}_{Rq} + \hat{\rho}_{Lq}^\dagger) - e^{-iqx}(\hat{\rho}_{Rq}^\dagger + \hat{\rho}_{Lq})\right) \tag{3.206}$$

[62]细节可参考本章附录3.6.2.当然,对于有自旋的情况,我们可以采用更对称的形式,这就是E.Witten等提出的非阿贝尔玻色化理论.详情可参考Gogolin书的后半部分.

这里α是一个空间截断尺度.下面,我们考虑$\alpha \to 0, L \to \infty$的极限,对于有限粒子数$\hat{N} = \hat{N}_R + \hat{N}_L$,有$\hat{N}/L \to 0$,那么对$\hat{\phi}(x)$求$x$ 一阶导数可得:

$$\begin{aligned}\nabla\hat{\phi} = \partial_x\hat{\phi}(x) &\equiv \lim_{\alpha\to 0, L\to\infty} \partial_x\hat{\phi}(x) = -\frac{\pi}{L}\sum_{q>0}\left(e^{iqx}\hat{\rho}_{Rq} + e^{-iqx}\hat{\rho}^\dagger_{Rq} + e^{iqx}\hat{\rho}^\dagger_{Lq} + e^{-iqx}\hat{\rho}_{Lq})\right) \\ &= -\pi(\hat{\rho}_R(x) + \hat{\rho}_L(x)) \end{aligned} \tag{3.207}$$

即有

$$\boxed{\nabla\hat{\phi} = -\pi(\hat{\rho}_R(x) + \hat{\rho}_L(x))} \tag{3.208}$$

因此$\nabla\hat{\phi}$表示不包括$2k_F$部分的相对于基态$|\tilde{GS}\rangle$在空间位置x处的密度涨落.同理,我们也可以定义$\hat{\theta}(x)$使得

$$\boxed{\nabla\hat{\theta} = \pi(\hat{\rho}_R(x) - \hat{\rho}_L(x))}. \tag{3.209}$$

可以看到$\nabla\hat{\theta}$代表左右手费米子密度在空间x处的差异.$\hat{\theta}(x)$的具体形式一般选为

$$\hat{\theta}(x) = \frac{\hat{N}_R - N_L}{L}\pi x - \frac{i\pi}{L}\sum_{q>0}\frac{e^{-q\alpha/2}}{q}\left(e^{iqx}(\hat{\rho}_{Rq} - \hat{\rho}^\dagger_{Lq}) - e^{-iqx}(\hat{\rho}^\dagger_{Rq} - \hat{\rho}_{Lq})\right). \tag{3.210}$$

回忆一维电流密度算符为(由于没有乘电荷,因此更准确的称为粒子流密度)

$$\hat{j}(x) = \frac{1}{L}\sum_q e^{iqx}\hat{j}_q, \quad \hat{j}_q = \sum_k \frac{k + q/2}{m}\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k+q} \tag{3.211}$$

仿照密度算符$\hat{\rho}(x)$,我们发现在低能下电流密度算符近似表示为

$$\begin{aligned}\hat{j}(x) \quad = \quad & \frac{v_F}{L}(\hat{N}_R - \hat{N}_L) + v_F(\hat{\rho}_R(x) - \hat{\rho}_L(x)) + \hat{j}_R(x) + \hat{j}_L(x) + \frac{e^{2ik_Fx}}{2mi}(\hat{\psi}^\dagger_L\partial_x\hat{\psi}_R - \partial_x\hat{\psi}^\dagger_L\hat{\psi}_R) \\ & + \frac{e^{-2ik_Fx}}{2mi}(\hat{\psi}^\dagger_R\partial_x\hat{\psi}_L - \partial_x\hat{\psi}^\dagger_R\hat{\psi}_L)\end{aligned}$$

这里$\hat{j}_R, \hat{j}_L$分别表示费米点附近变化缓慢的手性费米子$\hat{\psi}_R, \hat{\phi}_L$所携带的电流,例如$\hat{j}_R = \frac{1}{2mi}(\hat{\psi}^\dagger_R\partial_x\hat{\psi}_R - \partial_x\hat{\psi}^\dagger_R\hat{\psi}_R)$.($\hat{j}_L$ 与$\hat{j}_R$形式相同)注意到$\hat{j}(x)$前两项具有费米速度v_F,因此在低能下这两项是主导项,所以我们一般就用如下更为简单的公式作为$\hat{j}(x)$ 的定义,即有

$$\boxed{\hat{j}(x) = \frac{v_F}{L}(\hat{N}_R - \hat{N}_L) + v_F(\hat{\rho}_R(x) - \hat{\rho}_L(x))}. \tag{3.212}$$

由此,我们发现$\hat{j}(x) = v_F\nabla\theta$,换句话说,场$\hat{\theta}(x)$与一维系统的电流相联系.

那么,系统哈密顿量$\hat{H}_0$也可以用$\hat{\phi}, \hat{\theta}$表示为

$$\boxed{\hat{H}_0 = \frac{v_F}{2\pi}\int dx\left[(\nabla\hat{\theta})^2 + (\nabla\hat{\phi})^2\right] = v_F\pi\int dx\left[\hat{\rho}^2_R + \hat{\rho}^2_L\right]} \tag{3.213}$$

这个公式可以通过代入$\hat{\phi},\hat{\theta}$关于$\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}_{Lq}$的具体形式得到验证.在实际应用时,$\hat{\phi},\hat{\theta}$之间的对易关系是重要的,在大系统极限$L\to\infty$时有

$$[\hat{\phi}(x),\hat{\theta}(y)]=-\frac{i\pi}{2}\mathrm{sign}(x-y) \tag{3.214}$$

这里符号函数sign(x)当$x>0$时取+1,$x<y$时取-1.上述结果可简单证明如下.利用$\hat{\phi},\hat{\theta}$的具体表达式我们发现

$$\begin{aligned}[\hat{\phi}(x),\hat{\theta}(y)] &= \frac{\pi^2}{L^2}\sum_{q,q'>0}\frac{e^{-(q+q')\alpha/2}}{qq'}(-e^{i(qx-q'y)}([\hat{\rho}_{Rq},\hat{\rho}^\dagger_{Rq'}]-[\hat{\rho}^\dagger_{Lq},\hat{\rho}_{Lq'}])\\ &+ e^{-i(qx-q'y)}([\hat{\rho}_{Lq},\hat{\rho}^\dagger_{Lq'}]-[\hat{\rho}^\dagger_{Rq},\hat{\rho}_{Rq'}]))\\ &= \frac{\pi^2}{L^2}\sum_{q>0}\frac{e^{-q\alpha}}{q^2}2\frac{Lq}{2\pi}(-e^{i(qx-qy)}+e^{-i(qx-qy)})\\ &= -\frac{2i\pi}{L}\sum_{q>0}\frac{e^{-\alpha q}}{q}\sin q(x-y)\\ &= -\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{\infty}dq\frac{e^{-\alpha|q|}}{q}\sin q(x-y)\end{aligned} \tag{3.215}$$

取$\alpha\to 0$并利用附录3.6.3中的结果可得

$$[\hat{\phi}(x),\hat{\theta}(y)]=-\frac{i\pi}{2}\mathrm{sign}(x-y)=\frac{i\pi}{2}\mathrm{sign}(y-x). \tag{3.216}$$

显然,对于上式中的场求一阶导数可得如下重要关系:

$$[\hat{\phi}(x),\nabla_y\hat{\theta}(y)]=i\pi\delta(x-y),\quad [\nabla_x\hat{\phi}(x),\hat{\theta}(y)]=-i\pi\delta(x-y). \tag{3.217}$$

这个结果表明,若我们把ϕ当作正则坐标,那么$\hat{\Pi}=\frac{1}{\pi}\nabla\hat{\theta}$就是它对应的正则动量,它们两者满足标准的量子力学对易关系.

Luttinger参数

虽然我们引入了新的变量$\hat{\phi}$与$\hat{\theta}$,但目前来看我们还未得到任何非平凡的东西.因此,我们考虑一般性的相互作用,这一次我们采用其实空间的形式,即

$$\hat{H}_{int}=\int dx\int dyV(x-y)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)=\int dx\int dyV(x-y)\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(y)-\int dxV(0)\hat{\rho}(x) \tag{3.218}$$

注意到第二项为势散射项,可简单忽略.然后我们代入大系统极限的密度算符并忽略$2k_F$项可得,(即忽略系统整体的粒子密度项)

$$\hat{H}_{int}=\int dx\int dyV(x-y)\left(\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x)\right)\left(\hat{\rho}_R(y)+\hat{\rho}_L(y)\right) \tag{3.219}$$

现在,让我们考虑$y\to x$的极限,这也是局域场论工作的实际情况,这可以通过假设$V(x-y)=V_0\delta(x-y)$而得到,因此我们发现

$$\hat{H}_{int}=V_0\int dx\left(\hat{\rho}_R^2(x)+\hat{\rho}_L^2(x)+2\hat{\rho}_R(x)\hat{\rho}_L(x)\right)=\frac{V_0}{\pi^2}\int dx(\nabla\hat{\phi})^2 \tag{3.220}$$

这样系统的总哈密顿量为[63]

$$\hat{H}=\frac{v_F}{2\pi}\int dx\left[(\nabla\hat{\theta})^2+\left(1+\frac{2\pi V_0}{v_F\pi^2}\right)(\nabla\hat{\phi})^2\right] \tag{3.221}$$

一般也把上述哈密顿量写为

$$\boxed{\hat{H}=\frac{u}{2\pi}\int dx\left[K(\nabla\hat{\theta})^2+\frac{1}{K}(\nabla\hat{\phi})^2\right]} \tag{3.222}$$

对于当前模型则有$uK=v_F, u/K=v_F\left(1+\frac{2\pi V_0}{v_F\pi^2}\right)$.因此,

$$u=v_F\sqrt{1+\frac{2\pi V_0}{v_F\pi^2}},\quad K=\frac{1}{\sqrt{1+\frac{2\pi V_0}{v_F\pi^2}}}. \tag{3.223}$$

- u代表激发的速度,K是著名的Luttinger参数,它是一维量子流体的特征参数.

可以看到,对于排斥相互作用,即$V_0>0$的情况,$K<1$而吸引相互作用($V_0<0$)导致$K>1$.这个结果具有一般性.此外,仅当系统是自由费米子时$K=1$.因此Luttinger 参数确实可以表征一维系统的基本特性.例如系统的压缩率$\kappa=\frac{\partial\rho}{\partial\mu}$可求得为$\kappa=\frac{K}{u\pi}$,(通过变量代换$\hat{\phi}$可得)这类似于费米气体的结果$\kappa_0=1/(v_F\pi)$.因此相互作用的效果相当于重整化$\kappa$,即$\kappa/\kappa_0=\frac{K}{u/v_F}$.容易求得系统的热容为$C_V/C_V^0=v_F/u$.[64]这样从热力学量来看,相互作用费米子系统类似于费米气体,只不过相应物理量有定量的修正.

费米子的玻色场对应

我们已经看到,费米点附近的密度涨落可用玻色型自由度$\hat{\rho}_R(x),\hat{\rho}_R(x)$或$\hat{\phi}(x),\hat{\theta}(x)$描述,但是费米点附近的大动量转移,即$2k_F$部分涉及左右手费米子.另一方面,对费米子系统,我们同时也关心其费米子之间的关联函数,其谱性质直接由光发射实验,例如角分辨光电子谱技术,[65]测量.

那么一个重要的问题是如何用先前引入的玻色型自由度表示费米子自由度,例如$\hat{\psi}_L,\hat{\psi}_R$. 一个具有启发性的思路是回忆我们在处理一维量子$XY$模型时采用了Jordan-Wigner变换,这个变换把自旋算符用费米子表示,这样XY 模型就转化为了一维自由费米气体.因此我们可以逆向使用Jordan-Wigner 变换,即

$$\hat{f}_j=\hat{S}_j^- e^{+i\pi\sum_{m<j}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m} \tag{3.224}$$

注意到$\hat{f}_j$在连续极限下会过渡到$\hat{\psi}(x)$,而指数中的$\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m$ 会对应密度算符$\hat{\rho}(y)$,这样会有

$$\hat{\psi}(x)\sim e^{i\pi\int_{-\infty}^{x}dy\hat{\rho}(y)} \tag{3.225}$$

[63]哈密顿量也可写成$\hat{H}=\int dx\left[v_F\pi(\hat{\rho}_R^2+\hat{\rho}_L^2)+V_0(\hat{\rho}_R^2+\hat{\rho}_L^2+2\hat{\rho}_R\hat{\rho}_L)\right]$, 即Sugawara 哈密顿量.

[64]利用自由玻色子形式可求,C_V^0为费米气体结果

[65]基本原理是著名的Einstein光电效应

因此,我们预期$\hat{\psi}_L, \hat{\psi}_R$应与走右费米点处的密度涨落的指数有关,即有

$$\hat{\psi}_L, \hat{\psi}_R \sim e^{i\hat{\rho}_R(x)} e^{i\hat{\rho}_L(x)} \sim e^{i\hat{\phi}(x)} e^{i\hat{\theta}(x)}. \tag{3.226}$$

详细的研究表明,对于一维无自旋费米子,其左右手费米场可用玻色型场$\hat{\phi}, \hat{\theta}$表示为

$$\boxed{\hat{\psi}_R(x) = U_R \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i(+\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))}} \tag{3.227}$$

$$\boxed{\hat{\psi}_L(x) = U_L \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i(-\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))}} \tag{3.228}$$

这里U_R, U_L是所谓的Klein因子,其性质类似于Majorana费米子,即有$U_R^2 = 1, U_L^2 = 1, U_R U_L = -U_L U_R$.一般不考虑其空间依赖.上述费米子与玻色型场的对应结果具有良好的性质,即局域性,也就是x处的费米子仅由同位置的场$\hat{\phi}, \hat{\theta}$表示,而无需涉及空间其他位置,这也是玻色化技术喜欢使用实空间场来表述和计算的实际原因.[66]

现在,让我们计算费米关联函数,例如

$$\langle \hat{\psi}_R(r) \hat{\psi}_R^\dagger(r') \rangle = \langle \hat{\psi}_R(r-r') \hat{\psi}_R^\dagger(0) \rangle \tag{3.229}$$

这里右边的结果来自于系统具有空间平移不变性,也就是公式3.222中的坐标平移任意距离,哈密顿量的形式是不变的.因此,我们仅需要研究

$$\langle \hat{\psi}_R(r) \hat{\psi}_R^\dagger(0) \rangle = \frac{1}{2\pi\alpha} \langle e^{-i(\hat{\phi}(r)-\hat{\theta}(r))} e^{+i(\hat{\phi}(0)-\hat{\theta}(0))} \rangle \tag{3.230}$$

这里的平均$\langle ... \rangle$是针对公式3.222所示的二次型哈密顿量而言.r现在既包含空间位置,也包括(虚)时间,例如$r = (x, \tau)$.利用量子力学中关于算符指数相乘的常用结果,即$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$,(注意$[\hat{A}, \hat{B}]$ 与$\hat{A}, \hat{B}$都对易)可得

$$\langle e^{-i(\hat{\phi}(r)-\hat{\theta}(r))} e^{+i(\hat{\phi}(0)-\hat{\theta}(0))} \rangle = \langle e^{i(-\hat{\phi}(r)+\hat{\theta}(r))+i(\hat{\phi}(0)-\hat{\theta}(0))} e^{[\hat{\phi}(r)-\hat{\theta}(r), \hat{\phi}(0)-\hat{\theta}(0)]} \rangle, \tag{3.231}$$

再利用$\hat{\phi}$与$\hat{\theta}$的对易关系可得第三个指数中的对应关系为零.对公式3.222所示的二次型哈密顿量,可证明如下重要结果:

$$\langle e^{i\sum_j (A_j \hat{\phi}(r_j) + B_j \hat{\theta}(r_j))} \rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle (\sum_j (A_j \hat{\phi}(r_j) + B_j \hat{\theta}(r_j)))^2 \rangle}. \tag{3.232}$$

这当前的计算的中有$r_{j=1} = r, x_{j=2} = 0, A_{j=1} = -1, B_{j=1} = 1, A_{j=2} = 1, B_{j=2} = -1$. 所以,

$$\begin{aligned} \langle e^{-i(\hat{\phi}(r)-\hat{\theta}(r))} e^{+i(\hat{\phi}(0)-\hat{\theta}(0))} \rangle &= e^{-\frac{1}{2}\langle (-\hat{\phi}(r)+\hat{\theta}(r)+\hat{\phi}(0)-\hat{\theta}(0))^2 \rangle} \\ &= e^{-\frac{1}{2}[\langle (-\hat{\phi}(r)+\hat{\phi}(0))^2 \rangle + \langle (\hat{\theta}(r)-\hat{\theta}(0))^2 \rangle + 2\langle (-\hat{\phi}(r)+\hat{\phi}(0))(\hat{\theta}(r)-\hat{\theta}(0)) \rangle]}. \end{aligned}$$

[66]用更为现代的语言来说,一维玻色化技术可以称为一维费米子与玻色子的对应或对偶.

定义如下形式,

$$\langle(\hat{\phi}(r)-\hat{\phi}(0))^2\rangle = KF_1(r), \tag{3.233}$$

$$\langle(\hat{\theta}(r)-\hat{\theta}(0))^2\rangle = K^{-1}F_1(r), \tag{3.234}$$

$$\langle\phi(r)\theta(0)\rangle = \frac{1}{2}F_2. \tag{3.235}$$

则有

$$\langle\hat{\psi}_R(r)\hat{\psi}_R^\dagger(0)\rangle = \frac{1}{2\pi\alpha}e^{-\frac{1}{2}[KF_1(r)+K^{-1}F_1(r)+2(-F_2(0)-\frac{1}{2}F_2(r)-\frac{1}{2}F_2(-r))]}. \tag{3.236}$$

在零温时,

$$\begin{aligned} F_1(r) &= \frac{1}{2}\ln\frac{x^2+(u|\tau|+\alpha)^2}{\alpha^2} \\ F_2(r) &= \mathrm{sign}(\tau)\arctan\frac{x}{u|\tau|+\alpha}+\pi\theta(-\tau)\mathrm{sign}(x). \end{aligned} \tag{3.237}$$

通过计算我们发现$F_2(r)+F_2(-r)=0, F_2(0)=0$,则

$$\langle\hat{\psi}_R(r)\hat{\psi}_R^\dagger(0)\rangle = \frac{1}{2\pi\alpha}\left(\frac{\alpha^2}{x^2+(u|\tau|+\alpha)^2}\right)^{\frac{1}{4}(K+K^{-1})}. \tag{3.238}$$

做解析延拓就得到实时的关联函数

$$\langle\hat{\psi}_R(x,t)\hat{\psi}_R^\dagger(0)\rangle \sim \left(\frac{\alpha^2}{x^2-u^2t^2}\right)^{\frac{1}{4}(K+K^{-1})}. \tag{3.239}$$

做傅里叶变换可得频率-动量空间的关联函数:

$$\langle\hat{\psi}_R(k,\omega)\hat{\psi}_R^\dagger(k,\omega)\rangle \sim \int dxdt\frac{e^{-ikx+i\omega t}}{(x^2-u^2t^2)^{\frac{1}{4}(K+K^{-1})}} \sim \frac{1}{(u^2k^2-\omega^2)^{\frac{1}{4}(4-K-K^{-1})}} \tag{3.240}$$

令$\tau=0,|x|>>\alpha$也就是仅考虑费米子之间在长距离下的空间关联,我们发现

$$\langle\hat{\psi}_R(r)\hat{\psi}_R^\dagger(0)\rangle \simeq \frac{1}{2\pi\alpha}\frac{\alpha^{\frac{1}{2}(K+K^{-1})}}{x^{\frac{1}{2}(K+K^{-1})}} \sim \frac{1}{x^{\frac{1}{2}(K+K^{-1})}} \tag{3.241}$$

换句话说,相互作用的一维费米子系统会显示出幂律的关联,幂律的指数依赖于Luttinger参数K.当$K=1$,即无相互作用费米气体时,关联函数是熟悉的$1/x$形式.当$K\neq1$时有$K+K^{-1}>2$,那么费米子之间在有相互作用时其关联在空间尺度上衰减的更快.当把x换成τ就得到同一位置的费米子时间关联也有同样的幂律衰减,且相互作用系统衰减更快,从非平衡统计的角度来说这意味着偏离平衡态不远的相互作用费米子系统会以更快的速度趋于平衡.

对于费米气体,我们知道其动量空间占据数分布$n(k)=\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\rangle_{T=0}=\theta(k_F-|k|)$, 也就是说分布函数在费米面上具有有限的跳变.现在我们来看一维相互作用费米子的情况.

$$n(k) \sim \int dxe^{-ikx}\langle\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(0)\rangle \sim \int dxe^{-i(k-k_F)x}\langle\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_R^\dagger(0)\rangle \sim |k-k_F|^{\frac{1}{2}(K+K^{-1})-1}+... \tag{3.242}$$

上述公式的最右边我们通过量纲的估计给出了结果,...部分表示非奇异的部分,这里未给出具体形式.相互作用的主要效果是涉及Luttinger参数的部分,也就是接近费米点时占据数是以幂律的形式接近,此时并没有费米气体那样的跳变行为.

类似的,相互作用费米子的态密度也具有如下的幂律形式,

$$N(\omega)\sim\int dte^{i\omega t}\langle\hat{\psi}(\tau)\hat{\psi}^{\dagger}(0)\rangle_{\tau=it}\sim\int dte^{-i\omega t}\langle\hat{\psi}_R(\tau)\hat{\psi}_R^{\dagger}(0)\rangle_{\tau=it}\sim|\omega|^{\frac{1}{2}(K+K^{-1})-1} \tag{3.243}$$

注意到能量的零点是费米能,因此$N(\omega)$的幂律行为表明费米能附近态密度会以幂律的形式趋于零,这与费米气体中接近常数的费米能处态密度有明显的区别.

其他关联函数

现在让我们来看密度−密度关联函数,

$$\begin{aligned}&\langle\hat{\rho}(r)\hat{\rho}(0)\rangle=\langle(\hat{\rho}_R(r)+\hat{\rho}_L(r)+e^{i2k_Fx}\hat{\psi}_L^{\dagger}(r)\hat{\psi}_R(r)+\text{h.c.})(r\to0)\rangle\\=\;&\frac{1}{\pi^2}\langle\nabla\hat{\phi}(r)\nabla\hat{\phi}(0)\rangle+\frac{1}{2\pi\alpha}e^{i2k_Fx}\langle e^{-2i(\hat{\phi}(r)-\hat{\phi}(0))}\rangle+\text{h.c.}\end{aligned} \tag{3.244}$$

这里$\nabla\hat{\phi}e^{2ik_Fx}(...)$项由于涉及奇数个$\hat{\phi}$而在平均后为零,此外$4k_F$项$\langle\hat{\psi}_L^{\dagger}\hat{\psi}_R\hat{\psi}_L^{\dagger}\hat{\psi}_R\rangle$是高阶的振荡项,因此也可忽略.上式中的第一项对空间的两次导数,因此贡献的是常规的$1/x^2$衰减,第二项可计算如下

$$\langle e^{-2i(\hat{\phi}(r)-\hat{\phi}(0))}\rangle=e^{-2\langle(\hat{\phi}(r)-\hat{\phi}(0))^2\rangle}=e^{-2KF_1(r)}=\left(\frac{\alpha^2}{x^2+(u\tau)^2}\right)^K \tag{3.245}$$

这里我们取$T=0$的情况.因此,密度−密度关联函数具有如下形式

$$\langle\hat{\rho}(r)\hat{\rho}(0)\rangle=\frac{K}{2\pi^2}\frac{(u\tau)^2-x^2}{r^4}+\frac{2}{2\pi\alpha}\cos(2k_Fx)\left(\frac{\alpha}{r}\right)^{2K} \tag{3.246}$$

这里$r=\sqrt{x^2+(u\tau)^2}$.若仅考虑空间关联,则有($|x|>>\alpha$)

$$\langle\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)\rangle\sim\frac{1}{x^2}+\cos(2k_Fx)\frac{1}{x^{2K}} \tag{3.247}$$

这里第一项来自$q\sim0$的密度涨落的贡献,而第二项来自$2k_F$项的贡献.注意到当$K<1$时$2k_F$项贡献是主导项,因此排斥相互作用使得密度关联相比于$K=1$的费米气体情况有所增强.

除了密度−密度关联以外,一维费米子系统另一类重要的关联是超导配对关联,对于无自旋费米子,明显的选择是自旋三重态配对,有时也称为p波配对,

$$\Delta(x,a)=\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x+a) \tag{3.248}$$

a相当于晶格间距,在连续极限下最后趋于零.利用左右手费米子可把配对函数$\Delta(x,a)$化为如下形式,

$$\Delta(x,a)=e^{ik_Fa}\hat{\psi}_L(x)\hat{\psi}_R(x+a)+e^{-ik_Fa}\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_L(x+a)+e^{2ik_Fx}e^{ik_Fa}\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_R(x+a)+e^{-2ik_Fx}e^{-ik_Fa}\hat{\psi}_L(x)\hat{\psi}_L(x+a) \tag{3.249}$$

现在取$a \to 0$极限,此时后面两项为零,这样配对函数是

$$\Delta(x) = 2i\sin(k_F a)\hat{\psi}_L(x)\hat{\psi}_R(x) = \frac{2i\sin(k_F a)}{2\pi\alpha}e^{2i\theta(x)} \tag{3.250}$$

因此

$$\langle\Delta(r)\Delta^\dagger(0)\rangle = \frac{4\sin(k_F a)}{(2\pi\alpha)^2}\langle e^{2i(\hat{\theta}(r)-\hat{\theta}(0))}\rangle \sim \frac{1}{r^{1/K}}. \tag{3.251}$$

与先前的密度−密度关联相比较,我们发现$K > 1$是是超导配对关联更强,而$K < 1$则是密度关联主导.

- 因此我们可以根据K的取值把一维无自旋相互作用费米子量子流体划分成两个相,即密度− 密度关联主导的类密度波态和配对关联主导的类超导态.

玻色化的应用:XY模型的自旋关联*

现在我们考虑量子XY模型的自旋关联函数.在先前的讨论中该模型对应于自由费米气体,且基态填满半个布里渊区.($k_F = \frac{\pi}{2a}$)现在我们利用玻色化的技术来近似计算横向自旋关联函数,例如

$$\langle\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-\rangle = \langle\hat{f}_i^\dagger e^{i\pi\sum_{m<i}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m}e^{-i\pi\sum_{n<j}\hat{f}_n^\dagger\hat{f}_n}\hat{f}_j\rangle \tag{3.252}$$

既然$\hat{f}^\dagger, \hat{f}$反对易为1,连续场$\hat{\psi}^\dagger, \hat{\psi}$ 反对易为δ函数,因此两者之间可有如下近似关系:

$$\frac{\hat{f}_j^\dagger}{\sqrt{a}} \sim \hat{\psi}^\dagger(x = x_j), \qquad \frac{\hat{f}_j}{\sqrt{a}} \sim \hat{\psi}(x = x_j) \tag{3.253}$$

而Jordan-Wigner变换中的相位因子可写成

$$e^{i\pi\sum_{m<i}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m} \simeq e^{i\pi\int_{-\infty}^{x}dy(\hat{\rho}+\hat{\rho}_L+\hat{\rho}_R+...)} \tag{3.254}$$

这里$\hat{\rho}$是无相互作用基态时的费米子密度,我们知道XY模型基态密度为$N/L = 1/(2a)$,... 部分表示$2k_F$部分,这个是振荡的贡献,相对于$q \sim 0$部分可以忽略,因此有,

$$e^{i\pi\sum_{m<i}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m} \simeq e^{i\pi x/(2a)}e^{-i\int_{-\infty}^{x}dy\nabla\hat{\phi}(y)} = e^{i\pi x/(2a)}e^{-i(\hat{\phi}(x)-\hat{\phi}(-\infty))} \tag{3.255}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}
\langle\hat{S}_x^+\hat{S}_0^-\rangle &\sim e^{i\pi x/(2a)}\langle\hat{\psi}^\dagger(x)e^{-i(\hat{\phi}(x)-\hat{\phi}(-\infty))}e^{+i(\hat{\phi}(0)-\hat{\phi}(-\infty))}\hat{\psi}(0)\rangle \\
&\sim \langle(e^{-i\hat{\theta}(x)} + (-1)^x e^{-i(2\hat{\phi}(x)+\hat{\theta}(x))})(e^{i\hat{\theta}(0)} + e^{i(2\hat{\phi}(0)+\hat{\theta}(0))})\rangle \\
&\sim \langle e^{-i(\hat{\theta}(x)-\hat{\theta}(0))}\rangle + (-1)^x\langle e^{-i(2\hat{\phi}(x)+\hat{\theta}(x)-2\hat{\phi}(0)+\hat{\theta}(0))}\rangle \\
&\sim \frac{1}{x^{\frac{1}{2K}}} + (-1)^x\frac{1}{x^{2K+\frac{1}{2K}}}.
\end{aligned} \tag{3.256}$$

既然XY对应的是自由费米子,以此其Luttiger参数$K = 1$,这样它的自旋关联函数为

$$\langle\hat{S}_x^+\hat{S}_0^-\rangle \sim \frac{1}{x^{\frac{1}{2}}} + (-1)^x\frac{1}{x^{\frac{5}{2}}} \tag{3.257}$$

这样我们发现对于铁磁量子XY模型($J > 0$),其自旋关联显示出空间距离的1/2次衰减.这说明量子XY模型的基态就是一类量子顺磁态,或者说是量子自旋液体.该自旋液体可由一维费米气体和相应的玻色子理论描述,自旋激发是无能隙的. •

玻色化的应用:反铁磁Heisenberg链*

作为玻色化的重要应用,让我们考虑一维反铁磁Heisenberg模型,即反铁磁Heisenberg链,其模型为

$$\hat{H}_H = J\sum_j \hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+1} = J\sum_j [\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y + \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z]. \tag{3.258}$$

为了利用玻色化处理,我们首先采用Jordan-Wigner变换把上述自旋模型转化为费米子模型,

$$\hat{H}_H = \frac{J}{2}\sum_j [\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^\dagger \hat{f}_j] + J\sum_j (\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j - 1/2)(\hat{f}_{j+1}^\dagger \hat{f}_{j+1} - 1/2) \tag{3.259}$$

进一步,我们令$\hat{f}_j \to (-1)^j \hat{f}_j$,这样上述模型变为

$$\hat{H}_H = -\frac{J}{2}\sum_j [\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^\dagger \hat{f}_j] + J\sum_j (\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j - 1/2)(\hat{f}_{j+1}^\dagger \hat{f}_{j+1} - 1/2) \tag{3.260}$$

这个模型一般也称为$t-V$模型,也就是我们把跃迁项系数写成$t = J/2$,相互作用项系数写成$V = J$,那么模型就是$\hat{H}_{t-V} = -t\sum_j [\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^\dagger \hat{f}_j] + V\sum_j (\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j - 1/2)(\hat{f}_{j+1}^\dagger \hat{f}_{j+1} - 1/2)$.

然后,与XY模型类似取连续近似,即$\frac{\hat{f}_j}{\sqrt{a}} \sim \hat{\psi}(x = x_j), a\sum_j \sim \int dx$,则有

$$\hat{H}_H = -\frac{J}{2}\int dx[\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x+a) + \hat{\psi}^\dagger(x+a)\hat{\psi}(x)] + Ja\int dx(\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) - 1/2)(\hat{\psi}^\dagger(x+a)\hat{\psi}(x+a) - 1/2) \tag{3.261}$$

对于第一部分,可以用低能场$\hat{\psi}_R, \hat{\psi}_L$改写为

$$-iv_F\int dx(\hat{\psi}_R^\dagger \partial_x \hat{\psi}_R - \hat{\psi}_L^\dagger \partial_x \hat{\psi}_L) = \frac{v_F}{2\pi}\int dx\left[(\nabla\hat{\theta})^2 + (\nabla\hat{\phi})^2\right] \tag{3.262}$$

这里$v_F = Ja\sin(k_F a) = Ja.k_F = \frac{\pi}{2a}$代表费米子半填满$\rho = 1/2$.对于第二项代

入$\hat{\rho}(x)=1/2+\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x)+e^{i2k_Fx}\hat{\psi}_L^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x)+e^{-i2k_Fx}\hat{\psi}_R^\dagger(x)\hat{\psi}_L(x)$可得

$$\begin{aligned}
&\lim_{a\to 0} Ja\int dx\left(\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x)+e^{i2k_Fx}\hat{\psi}_L^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x)+e^{-i2k_Fx}\hat{\psi}_R^\dagger(x)\hat{\psi}_L(x)\right)\times\\
&\left(\hat{\rho}_R(x+a)+\hat{\rho}_L(x+a)+e^{i2k_F(x+a)}\hat{\psi}_L^\dagger(x+a)\hat{\psi}_R(x+a)+e^{-i2k_F(x+a)}\hat{\psi}_R^\dagger(x+a)\hat{\psi}_L(x+a)\right)\\
&=\lim_{a\to 0} Ja\int dx(\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x))^2\\
&+Ja\int dx(\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x))(e^{i2k_F(x+a)}\hat{\psi}_L^\dagger(x+a)\hat{\psi}_R(x+a)+\text{h.c.})\\
&+Ja\int dx(\hat{\rho}_R(x+a)+\hat{\rho}_L(x+a))(e^{i2k_Fx}\hat{\psi}_L^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x)+\text{h.c.})\\
&+Ja\int dx e^{-i2k_Fa}\hat{\psi}_L^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_R^\dagger(x+a)\hat{\psi}_L(x+a)+\text{h.c.}\\
&+Ja\int dx e^{i4k_Fx}e^{i2k_Fa}\hat{\psi}_L^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_L^\dagger(x+a)\hat{\psi}_R(x+a)+\text{h.c.}
\end{aligned}\tag{3.263}$$

注意到第二与第三项是振荡项而为零.利用$\nabla\hat{\phi}=-\pi(\hat{\rho}_R(x)+\hat{\rho}_L(x))$ 第一项玻色化为

$$Ja\int dx\frac{1}{\pi^2}(\nabla\hat{\phi})^2\tag{3.264}$$

第四项需要 $\hat{\psi}_R(x)\sim U_R\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}e^{-i(+\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))},\hat{\psi}_L(x)\sim U_L\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}e^{-i(-\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))}$, 则有

$$\begin{aligned}
&Ja\int dx e^{-i2k_Fa}\frac{U_L\overbrace{U_RU_R}^{=1}U_L}{(2\pi a)^2}e^{i(-\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))}e^{-i(\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))}e^{i(\hat{\phi}(x+a)-\hat{\theta}(x+a))}e^{-i(-\hat{\phi}(x+a)-\hat{\theta}(x+a))}+\text{h.c.}\\
&=\frac{Ja}{(2\pi a)^2}\int dx e^{-i2k_Fa}e^{2i(\hat{\phi}(x+a)-\hat{\phi}(x))}+\text{h.c.}\simeq\frac{Ja}{(2\pi a)^2}\int dx e^{-i2k_Fa}e^{2ia\nabla\hat{\phi}(x)}+\text{h.c.}\\
&=\frac{Ja}{(2\pi a)^2}\int dx e^{-i2k_Fa}(1+2ia\nabla\hat{\phi}(x)-2a^2(\nabla\hat{\phi}(x))^2)+\text{h.c.}\\
&=-\frac{Ja}{\pi^2}\int dx\cos(2k_Fa)(\nabla\hat{\phi})^2.
\end{aligned}\tag{3.265}$$

对于半满系统,最后一项中的因子$e^{i4k_Fx}=1$导致这一项贡献需要考虑.可得最后一项的玻色化形式为

$$\begin{aligned}
&Ja\int dx\overbrace{e^{i4k_Fx}}^{=1}\overbrace{e^{i2k_Fa}}^{=-1}\hat{\psi}_L^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_L^\dagger(x+a)\hat{\psi}_R(x+a)+\text{h.c.}\\
&=-\frac{Ja}{(2\pi a)^2}\int dx U_LU_RU_LU_Re^{i(-\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))}e^{-i(\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))}e^{i(-\hat{\phi}(x+a)-\hat{\theta}(x+a))}e^{-i(\hat{\phi}(x+a)-\hat{\theta}(x+a))}+\text{h.c.}\\
&=\frac{Ja}{(2\pi a)^2}\int dx U_LU_RU_RU_Le^{2i(-\hat{\phi}(x)-\hat{\phi}(x+a))}+\text{h.c.}\\
&=\frac{2Ja}{(2\pi a)^2}\int dx\cos(4\hat{\phi}).
\end{aligned}\tag{3.266}$$

综合以上所有项得到反铁磁Heisenberg链玻色化的形式为

$$\hat{H}_H = \int dx \left(\frac{v_F}{2\pi} \left[(\nabla\hat{\theta})^2 + (\nabla\hat{\phi})^2 \right] - \frac{Ja(1-\cos(2k_F a))}{\pi^2} (\nabla\hat{\phi})^2 + \frac{2Ja}{(2\pi a)^2} \cos(4\hat{\phi}) \right). \tag{3.267}$$

让我们定义

$$uK = v_F, \quad \frac{u}{K} = v_F + \frac{2Ja(1-\cos(2k_F a))}{\pi}, \quad g = Ja \tag{3.268}$$

当然,上述结果只有在$Ja/v_F \ll 1$时才成立,对所有J都成立的结果由Bethe ansatz给出,

- $K = 1/2, u = \pi J/2$.

现在哈密顿量可以写成如下形式,

$$\hat{H}_H = \frac{1}{2\pi} \int dx \left[uK(\pi\hat{\Pi})^2 + \frac{u}{K} (\nabla\hat{\phi})^2 \right] + \frac{g}{2\pi^2 a^2} \int dx \cos(4\hat{\phi}). \tag{3.269}$$

Sine-Gordon模型与能隙产生

重标$\hat{\phi} \to \sqrt{\pi K}\hat{\phi}, \hat{\Pi} \to \frac{1}{\sqrt{\pi K}}\hat{\Pi}$ 并令$u = 1$ 则有

$$\hat{H}_H = \frac{1}{2} \int dx \left[\hat{\Pi}^2 + (\nabla\hat{\phi})^2 \right] + \frac{g}{2\pi^2 a^2} \int dx \cos(\sqrt{16\pi K}\hat{\phi}). \tag{3.270}$$

这个模型就是Sine-Gordon模型,($\tilde{\beta} = \sqrt{16\pi K}$)其一般形式为

$$\hat{H}_{SG} = \frac{1}{2} \int dx \left[\hat{\Pi}^2 + (\nabla\hat{\phi})^2 \right] + \frac{g}{2\pi^2 a^2} \int dx \cos(\tilde{\beta}\hat{\phi}). \tag{3.271}$$

由微扰重整化计算可知相应的重整化群方程是:[6]

$$\frac{dg(b)}{d\ln b} = \left(2 - \frac{\tilde{\beta}^2}{4\pi} \right) g = (2-4K)g, \qquad \frac{dK}{d\ln b} = -g^2 K^2 \tag{3.272}$$

其不动点为$K = 1/2$.这说明当$K > 1/2$时,cos项的作用近似可忽略,此时我们可以用$\frac{1}{2}\int dx \left[\hat{\Pi}^2 + (\nabla\hat{\phi})^2 \right]$理解体系的低能物理.反之当$K < 1/2$时,cos项的作用使得系统激发出现能隙.为了理解能隙的起源,我们考虑$g \gg 1$的极限,此时哈密顿量完全由cos项主导,那么为了使得能量最低,$\cos(\tilde{\beta}\hat{\phi}$中$\hat{\phi} = \phi^0 = \frac{1}{\tilde{\beta}}(\pi + 2\pi n), n = 0, 1, 2....$不同$\phi^0$代表不同能量最小值的(均匀)构型,也就是cos势的最小值的位置.现在,让我们考虑在最小值附近的小涨落,即$\hat{\phi} = \phi^0 + \delta\hat{\phi}$,代入哈密顿量$\hat{H}_{SG}$可得

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{SG} &= \frac{1}{2} \int dx \left[\hat{\Pi}^2 + (\nabla\delta\hat{\phi})^2 \right] + \frac{g}{2\pi^2 a^2} \int dx \cos(\tilde{\beta}(\phi^0 + \delta\hat{\phi})) \\
&= \frac{1}{2} \int dx \left[\hat{\Pi}^2 + (\nabla\delta\hat{\phi})^2 \right] + \frac{g}{2\pi^2 a^2} \int dx \cos(\tilde{\beta}\phi^0) \cos(\tilde{\beta}\delta\hat{\phi}) \\
&\simeq \frac{1}{2} \int dx \left[\hat{\Pi}^2 + (\nabla\delta\hat{\phi})^2 \right] - \frac{g}{2\pi^2 a^2} \int dx \left(1 - \frac{(\tilde{\beta}\delta\hat{\phi})^2}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2} \int dx \hat{\Pi}^2 + \int dx \left((\nabla\delta\hat{\phi})^2 + \frac{g\tilde{\beta}^2}{4\pi^2 a^2} (\delta\hat{\phi})^2 \right) + ...
\end{aligned} \tag{3.273}$$

显然,我们看到体系在最小值附近的涨落$\delta\hat{\phi}$具有有限能隙$\Delta\sim\sqrt{\frac{g\tilde{\beta}^2}{4\pi^2a^2}}$.另一种理解能隙的方式是所谓Luther-Emery解,也就是假设左右费米子之间存在背散射:

$$\hat{H}_{LE}=\int dx\left[\hat{\psi}_R^\dagger(-iv_F\partial_x)\hat{\psi}_R-\hat{\psi}_L^\dagger(-iv_F\partial_x)\hat{\psi}_L+g\hat{\psi}_R^\dagger\hat{\psi}_L+\hat{\psi}_L^\dagger\hat{\psi}_R\right]. \quad (3.274)$$

对于这个自由费米子体系,做傅里叶变换后可得

$$\hat{H}_{LE}=\sum_k\begin{pmatrix}\hat{c}_{kR}^\dagger & \hat{c}_{kL}^\dagger\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_Fk & g\\ g & -v_Fk\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{kR}\\ \hat{c}_{kL}\end{pmatrix} \quad (3.275)$$

对角化2×2矩阵就得到费米子的能谱$E_k=\pm\sqrt{(v_Fk)^2+g^2}$.因此体系在背散射下打开$g$量级的能隙.另一方面,由费米子的玻色化公式可知$\hat{H}_{LE}$的玻色化形式是

$$\hat{H}_{LE}=\int dx\left[\frac{v_F}{2\pi}\left((\nabla\hat{\Pi})^2+(\nabla\hat{\phi})^2\right)+\frac{2g}{2\pi a}\cos(2\hat{\phi})\right], \quad (3.276)$$

显然,背散射项玻色化为$\cos(2\hat{\phi})$,这一项导致了玻色子模型中能隙的产生.(用重整化群分析会发现$\frac{dg(b)}{d\ln b}=(2-K)g$而自由费米子有$K=1<2$,这样cos总会进入强耦合而是体系出现能隙)

系统出现能隙意味着cos项或者说原始模型中的Ising项$\hat{S}_j^z\hat{S}_j^z$起主导作用,此时若$g>0(J>0)$,那么系统处于有自旋能隙的Ising反铁磁态,($|\Psi_g\rangle\sim|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow...\rangle$)反之$g<0(J<0)$说明系统处于Ising铁磁态.($|\Psi_g\rangle\sim|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow...\rangle$)[67]

我们也可以用标度分析来得到g的重整化群方程.首先我们可以写出$\hat{H}_{SG}$对应的作用量,即

$$S_{SG}=\int d\tau dx\left[\frac{1}{2}(\partial_\tau\phi)^2+\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2+\frac{g}{2\pi^2a^2}\cos(\tilde{\beta}\phi)\right], \quad (3.277)$$

那么当$g=0$时作用量S_{SG}^0在标度变换$(x,\tau)\to(x'=x/b,\tau'=\tau/b)$下保持不变.注意到$g$项中出现$\cos(\tilde{\beta}\phi)$,那么以$S_{SG}^0$为权重的路径积分下的关联函数$\langle\cos(\tilde{\beta}\phi(x,\tau))\cos(\tilde{\beta}\phi(0,0))\rangle$是

$$\langle\cos(\tilde{\beta}\phi(x,\tau))\cos(\tilde{\beta}\phi(0,0))\rangle\sim\langle e^{i\tilde{\beta}(\phi(x,\tau)-\phi(0,0))}\rangle\sim e^{-\frac{1}{2}\langle(\tilde{\beta}(\phi(x,\tau)-\phi(0,0)))^2\rangle}$$
$$\sim e^{-\frac{\tilde{\beta}^2}{4\pi}\ln\frac{x^2+\tau^2}{\alpha^2}}=\frac{1}{(x^2+\tau^2)^{\tilde{\beta}^2/4\pi}}. \quad (3.278)$$

因此在标度变换下有

$$\langle\cos(\tilde{\beta}\phi(x',\tau'))\cos(\tilde{\beta}\phi(0,0))\rangle\sim\frac{1}{(x^2+\tau^2)^{\tilde{\beta}^2/4\pi}}b^{2(K\tilde{\beta}^2/4\pi)}=b^{2(K\tilde{\beta}^2/4\pi)}\langle\cos(\tilde{\beta}\phi(x,\tau))\cos(\tilde{\beta}\phi(0,0))\rangle.$$

这说明标度变换使得$\cos(\tilde{\beta}\phi(x,\tau))\to\cos(\tilde{\beta}\phi(x',\tau'))=b^{\tilde{\beta}^2/4\pi}\cos(\tilde{\beta}\phi(x,\tau))$. 如果我们要求cos项在标度变换下保持不变,那么有

$$\int d\tau dx\left[\frac{g}{2\pi^2a^2}\cos(\tilde{\beta}\phi)\right]=\int d\tau' dx'\left[\frac{g'}{2\pi^2a^2}\cos(\tilde{\beta}\phi(x',tau'))\right] \quad (3.279)$$

这只能使得$g'=gb^{2-\tilde{\beta}^2/4\pi}=gb^{2-4K}$.由$b=e^{\ln b}\simeq1+\ln b$可得$g'\simeq g(1+(2-4K)\ln b)$,设$g'=g(b)$并对$\ln b$求导就得到$\frac{dg(b)}{d\ln b}=(2-4K)g$.

[67]若$K=1/2,g>0$则cos项仍可忽略,$g<0$与$g<1/2$ 类似

自旋关联函数

现在,我们设反铁磁Heisenberg链满足$K \geq 1/2$.类似于之前XY模型的情况.对于横向自旋关联,其形式已算出,即(在铁磁XY模型的基础上加上了反铁磁的振荡因子$(-1)^x$)

$$\langle \hat{S}_x^+ \hat{S}_0^- \rangle \sim \frac{(-1)^x}{x^{\frac{1}{2K}}} + \frac{1}{x^{2K+\frac{1}{2K}}} \tag{3.280}$$

而纵向自旋关联等同于费米子的密度−密度关联:

$$\langle \hat{S}_x^z \hat{S}_0^z \rangle \sim \langle \hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0) \rangle \sim \frac{1}{x^2} + (-1)^x \frac{1}{x^{2K}} \tag{3.281}$$

既然系统不加外磁场时自旋关联应是各项同性的,这要求$\langle \hat{S}_x^+ \hat{S}_0^- \rangle \sim \langle \hat{S}_x^z \hat{S}_0^z \rangle$,这等价于$K = 1/2$.显然这个结果与之前假定吻合,这说明反铁磁Heisenberg链确实满足$K = 1/2$,自旋关联以$1/r$形式变化并由自由玻色子哈密顿量描述其基本特性.

- 为什么直接玻色化所得的纵向与横向自旋关联函数幂律不同呢？这里的原因可以归纳为当前采用的玻色化形式在处理横向与纵向自旋算符时形式并不对称,(回忆Jordan-Wigner变换对$\hat{S}_j^z, \hat{S}_j^+$明显不同)这样在一系列近似操作下导致最后得到的关联函数并不相同.这通常叫做$U(1)$玻色化形式没有明确反映自旋的$SU(2)$对称性.为了克服这一点,在这里讨论的基础上,人们发展了$SU(2)$ 形式的玻色化,这样自旋关联函数就能够得到正确的处理.

XXZ模型

进一步,如果我们考虑的是各向异性的Heisenberg模型,也就是XXZ模型:

$$\hat{H}_{XXZ} = J \sum_j [\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y] + J_z \sum_j \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z, \tag{3.282}$$

此时纵向自旋之间的耦合系数是J_z,当$J_z \neq J$时$SU(2)$自旋旋转对称将约化为Z_2Ising对称性.这个模型的玻色化哈密顿量与Heisenberg模型形式上是一致的,其差别在于cos项的系数变成纵向耦合$g = J_z a$.由Bethe ansatz 可知

$$J_z/J = -\cos(\pi\beta^2), \quad 1/K = 2\beta^2, \quad u = \frac{\sin\left(\pi(1-\beta^2)\right)}{1-\beta^2}\frac{J}{2}. \tag{3.283}$$

对于反铁磁相互作用$J_z > J$,$K < 1/2$而$J_z < J$时$K > 1/2$.对于铁磁相互作用,$|J_z| > J$时$K < 1/2$而$|J_z| < J$时$K > 1/2$.这样根据Sine-Gordon模型的重整化群方程可知$-1 < J_z/J < 1$时cos项总是无关的,因此这个这个区间总是由XY模型所描述,只不过低能下的参数K对不同相互作用取值是不同的.对于$|J_z| > J$ 的情况,cos项不可忽略,体系会形成Ising型的反铁磁($J_z > 0$)或铁磁序($J_z < 0$).(图3.18对于XXZ模型的基态相图给出了定性的小结)

由玻色化处理,我们看到反铁磁Heisenberg模型转化为相互作用的费米子问题,该问题最后成为自由玻色子问题,这样原始的模型的求解转换为自由玻色子的计算,这使得我们方便求出自旋关联函数等重要的物理量.

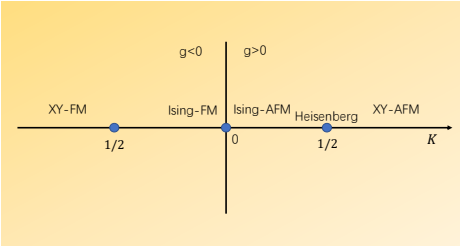


Figure 3.18: Sine-Gordon模型描述的XXZ模型的基态相图.

- 注意到玻色化模型中的$g\int dx\cos 4\hat{\phi}$项,$(g>0)$这一项取极小值要求$\hat{\phi}=\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{2}n, n=0,1,2....$体系的自旋平均值可以写成$\langle\hat{S}_z\rangle=\sum_j\langle\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j\rangle-N_s/2=\int dx\langle\psi^\dagger(x)\psi(x)\rangle-N_s/2=-\frac{1}{\pi}\int dx\nabla\hat{\phi}(x)$.我们假设相对基态而言$\Delta\hat{\phi}=-\frac{\pi}{2}$,也就是相邻两个cos势的极小值的差,那么此时$\langle\hat{S}_z\rangle=\frac{-1}{\pi}\frac{-\pi}{2}=1/2$.这说明体系存在$S=1/2$的非磁振子激发,这个激发就是自旋子(spinon).

- 可以看到自旋子来源于$\hat{\phi}$场在cos势两个极小值之间的变化,物理上可以理解为粒子在cos势所形成的势垒间的隧穿过程,数学上我们通常把场构型在不同真空值之间(cos势的极小值)的隧穿过程称为扭结(knik)或瞬子(instanton),这些都是所谓的孤子.因此,一维Heisenberg模型中的自旋子可以看作是一类孤子,它们与通常的自由费米子或玻色子很不相同.

- 利用玻色化技术也可以处理非厄密的反铁磁Heisenberg模型(或者XXZ模型),这里的非厄密指的是由于与外界环境的耦合,模型的相互作用系数成为复数,这样整个哈密顿量不再满足厄密性.[68]

玻色化的应用:一维Hubbard模型*

在结束玻色化理论之前,让我们考虑其对一维Hubbard模型的应用,首先我们写出只有最近邻跃迁的Hubbard模型:

$$\hat{H}=-t\sum_{j\sigma}(\hat{c}_{j\sigma}^\dagger\hat{c}_{j+1,\sigma}+h.c.)+U\sum_j\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}^\dagger\hat{c}_{j\downarrow} \tag{3.284}$$

与Heisenberg模型处理类似,我们先把模型写到连续空间,

$$\hat{H}=-t\int dx[\hat{\psi}_\sigma^\dagger(x)\hat{\psi}_\sigma(x+a)+\hat{\psi}_\sigma^\dagger(x+a)\hat{\psi}_\sigma(x)]+Ua\int dx\hat{\rho}_\uparrow(x)\hat{\rho}_\downarrow(x) \tag{3.285}$$

[68]具体可以参考[Yamamoto et al.,Universal properties of dissipative Tomonaga-Luttinger liquids: A case study of a non-Hermitian XXZ spin chain,arXiv:2112.12467]

然后设$\hat{\psi}_\sigma = e^{ik_F x}\hat{\psi}_{R\sigma} + e^{-ik_F x}\hat{\psi}_{L\sigma}$,那么跃迁项可以写成低能形式,

$$\hat{H}_0 = -iv_F \sum_\sigma \int dx(\hat{\psi}^\dagger_{R\sigma}\partial_x\hat{\psi}_{R\sigma} - \hat{\psi}^\dagger_{L\sigma}\partial_x\hat{\psi}_{L\sigma}) \tag{3.286}$$

这里$v_F = 2t\sin k_F$,而k_F由电子密度决定($k_F = \frac{n\pi}{2}$).同时电子密度算符

$$\hat{\rho_\sigma}(x) = \hat{\psi}^\dagger_\sigma\hat{\psi}_\sigma = \hat{\psi}^\dagger_{R\sigma}\hat{\psi}_{R\sigma} + \hat{\psi}^\dagger_{L\sigma}\hat{\psi}_{L\sigma} + e^{2ik_F x}\hat{\psi}^\dagger_{L\sigma}\hat{\psi}_{R\sigma} + e^{-2ik_F x}\hat{\psi}^\dagger_{R\sigma}\hat{\psi}_{L\sigma} \tag{3.287}$$

这里我们扔掉了均匀的电子密度背景.现在,让我们引入如下的玻色化公式

$$\begin{aligned}
&\hat{\psi}^\dagger_{R\sigma}\hat{\psi}_{R\sigma} = \hat{\rho}_{R\sigma}, \quad \hat{\psi}^\dagger_{L\sigma}\hat{\psi}_{L\sigma} = \hat{\rho}_{L\sigma} \\
&\hat{\rho}_{R\sigma} + \hat{\rho}_{L\sigma} = -\frac{1}{\pi}\nabla\phi_\sigma \\
&\hat{\rho}_{R\sigma} - \hat{\rho}_{L\sigma} = \frac{1}{\pi}\nabla\theta_\sigma
\end{aligned} \tag{3.288}$$

这里定义了$\hat{\phi}_\uparrow, \hat{\phi}_\downarrow, \hat{\theta}_\uparrow, \hat{\theta}_\downarrow$四个玻色型变量.这样无相互作用部分可以改写为

$$\hat{H}_0 = \frac{v_F}{2\pi}\sum_\sigma \int dx \left[(\nabla\hat{\theta}_\sigma)^2 + (\nabla\hat{\phi}_\sigma)^2\right] \tag{3.289}$$

为了得到相互作用部分的玻色化形式,仿照Heisenberg模型的情况,对每个自旋分量的电子引入玻色化的表示

$$\hat{\psi}_{R\sigma} \sim U_{R\sigma}\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}e^{-i(\phi_\sigma - \theta_\sigma)}, \quad \hat{\psi}_{L\sigma} \sim U_{L\sigma}\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}e^{i(\phi_\sigma + \theta_\sigma)}. \tag{3.290}$$

这样有

$$\begin{aligned}
\hat{H}_U &= Ua\int dx\left(-\frac{1}{\pi}\nabla\hat{\phi}_\uparrow + \frac{e^{2ik_F x}}{2\pi a}U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}e^{-i2\hat{\phi}_\uparrow} + \frac{e^{-2ik_F x}}{2\pi a}U_{R\uparrow}U_{L\uparrow}e^{i2\hat{\phi}_\uparrow}\right) \\
&\times \left(-\frac{1}{\pi}\nabla\hat{\phi}_\downarrow + \frac{e^{2ik_F x}}{2\pi a}U_{L\downarrow}U_{R\downarrow}e^{-i2\hat{\phi}_\downarrow} + \frac{e^{-2ik_F x}}{2\pi a}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}e^{i2\hat{\phi}_\downarrow}\right) \\
&= \frac{Ua}{\pi^2}\int dx\nabla\hat{\phi}_\uparrow\nabla\hat{\phi}_\downarrow + \frac{U}{(2\pi)^2 a}\int dx e^{4ik_F x}U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}U_{L\downarrow}U_{R\downarrow}e^{-i2(\hat{\phi}_\uparrow + \hat{\phi}_\downarrow)} + U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}e^{-i2(\hat{\phi}_\uparrow - \hat{\phi}_\downarrow)} \\
&+ U_{R\uparrow}U_{L\uparrow}U_{L\downarrow}U_{R\downarrow}e^{i2(\hat{\phi}_\uparrow - \hat{\phi}_\downarrow)} + e^{-4ik_F x}U_{R\uparrow}U_{L\uparrow}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}e^{i2(\hat{\phi}_\uparrow + \hat{\phi}_\downarrow)}
\end{aligned} \tag{3.291}$$

注意到$\hat{\phi}_\uparrow \pm \hat{\phi}_\downarrow$成对出现,这提示我们定义代表电荷自由度和自旋自由度的$\hat{\phi}$场$\hat{\phi}_c, \hat{\phi}_s$,

$$\hat{\phi}_c = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\phi}_\uparrow + \hat{\phi}_\downarrow), \quad \hat{\phi}_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\phi}_\uparrow - \hat{\phi}_\downarrow) \tag{3.292}$$

同理也有新的$\hat{\theta}$场,

$$\hat{\theta}_c = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\theta}_\uparrow + \hat{\theta}_\downarrow), \quad \hat{\theta}_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\theta}_\uparrow - \hat{\theta}_\downarrow). \tag{3.293}$$

利用这些新变量,我们可以把哈密顿量$\hat{H}_U$改写为

$$\begin{aligned}
\hat{H}_U &= \frac{Ua}{\pi^2}\int dx\nabla\hat{\phi}_\uparrow\nabla\hat{\phi}_\downarrow + \frac{U}{(2\pi)^2 a}\int dx - e^{4ik_F x}U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}e^{-i2\sqrt{2}\hat{\phi}_c} + U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}e^{-i2\sqrt{2}\hat{\phi}_s} \\
&+ U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}e^{i2\sqrt{2}\hat{\phi}_s} - e^{-4ik_F x}U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}e^{i2\sqrt{2}\hat{\phi}_c} \\
&= \frac{Ua}{\pi^2}\int dx\nabla\hat{\phi}_\uparrow\nabla\hat{\phi}_\downarrow + \frac{2U}{(2\pi)^2 a}U_{L\uparrow}U_{R\uparrow}U_{R\downarrow}U_{L\downarrow}\int dx\left(\cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_s) - \cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_c - 4k_F x)\right)
\end{aligned} \tag{3.294}$$

这里也利用$U_{R,L,\sigma}$的反对易性改写了它们的排序.对Hubbard模型,我们默认让电荷部分有负号的排序,这样下面的处理中便可以忽略因子U.注意到电荷部分存在$4k_Fx$的振荡项.同时$\hat{H}_0$部分可以写成

$$\hat{H}_0 = \frac{v_F}{2\pi}\int dx\left[(\nabla\hat{\theta}_c)^2+(\nabla\hat{\phi}_c)^2\right]+\frac{v_F}{2\pi}\int dx\left[(\nabla\hat{\theta}_s)^2+(\nabla\hat{\phi}_s)^2\right], \quad (3.295)$$

结合$\hat{H}_U$可以发现一维Hubbard模型的电荷和自旋自由度彼此退耦:

$$\begin{aligned}
&\hat{H} = \hat{H}_c+\hat{H}_s\\
&\hat{H}_c = \int dx\left[\frac{v_F}{2\pi}(\nabla\hat{\theta}_c)^2+\frac{v_F+Ua/\pi}{2\pi}(\nabla\hat{\phi}_c)^2\right]-\frac{2U}{(2\pi)^2a}\int dx\cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_c-4k_Fx)\\
&\hat{H}_s = \int dx\left[\frac{v_F}{2\pi}(\nabla\hat{\theta}_s)^2+\frac{v_F-Ua/\pi}{2\pi}(\nabla\hat{\phi}_s)^2\right]+\frac{2U}{(2\pi)^2a}\int dx\cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_s). \quad (3.296)
\end{aligned}$$

这说明一维Hubbard模型中电子的电荷与自旋自由度彼此分开,这称为一维电子的分数化现象.如果定义重整化的电荷和自旋激发速度u_c,u_s以及Luttinger参数K_c,K_s,那么我们可以把上述模型写成更简单的形式,即有

$$\begin{aligned}
&\hat{H} = \hat{H}_c+\hat{H}_s\\
&\hat{H}_c = \frac{1}{2\pi}\int dx\left[u_cK_c(\nabla\hat{\theta}_c)^2+\frac{u_c}{K_c}(\nabla\hat{\phi}_c)^2\right]+\frac{g_c}{2(\pi a)^2}\int dx\cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_c-4k_Fx)\\
&\hat{H}_s = \frac{1}{2\pi}\int dx\left[u_sK_s(\nabla\hat{\theta}_s)^2+\frac{u_s}{K_s}(\nabla\hat{\phi}_s)^2\right]+\frac{g_s}{2(\pi a)^2}\int dx\cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_s). \quad (3.297)
\end{aligned}$$

这里$g_c=-Ua, g_s=Ua$,

$$\begin{aligned}
&K_c = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{Ua}{v_F\pi}}}, \quad K_s = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{Ua}{v_F\pi}}}\\
&u_c = K_c(v_F+Ua/\pi), \quad u_s = K_s(v_F-Ua/\pi). \quad (3.298)
\end{aligned}$$

对于通常的电子Hubbard模型,相互作用$U>0$,这样电荷激发的Luttinger参数$K_c<1$.对于自旋激发,如果体系是自旋各向同性,那么必有$K_s=1$.在这种情况下,有标度讨论可知(相当于一般Sine-Gordon模型中取$\tilde{\beta}=2\sqrt{2\pi K_s}$)

$$\frac{dg_s(b)}{d\ln b} = (2-K_s)g_s \quad (3.299)$$

这说明$K_s=1$时$\hat{H}_s$中的cos项可以忽略,也就是说自旋激发总是无能隙的,其Luttinger参数固定为$K_s=1$.对于$\hat{H}_c$,若体系偏离半满,那么$4k_Fx$的振荡使得其cos项为零,这样电荷自由度也无能隙,K_c由相互作用U和v_F决定.当然,这里的玻色化实际上是低能下的一种弱耦合近似,它只能定性反映体系的特征,定量上来说K_c的取值需要借助于Bethe ansatz解或者数值方法给出.在半满时,$k_F=\pi/(2a)$,cos项必须考虑,注意到g_c的重整化群方程与g_s完全相同但$g_c=-Ua<0$,因此当$K_c<1$时电荷自由度产生能隙,这说明一维半满Hubbard模型是相互作用U诱导的绝缘体,一般称为Mott绝缘体.

- 一维半满Hubbard模型是Mott绝缘体(只要$U>0$)而偏离半满是自旋电荷都无能隙的Luttinger液体.
- 对于所谓的负UHubbard模型($U<0$),自旋自由度将会产生能隙而电荷自由度由于$K_c>1$而在半满和非半满都是无能隙的,这称为Luther-Emery液体.

关联函数

现在,让我们考虑Hubbard模型的关联函数.首先,自旋密度波的关联函数定义为, $\langle\hat{O}(x)^\dagger_{SDW\alpha}\hat{O}(0)_{SDW\alpha}\rangle$,这里$\hat{O}(x)_{SDW\alpha}=\sum_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\sigma}^\alpha_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}(x)$ 代表自旋密度序参量.这样自旋密度波序参量的的玻色化形式是

$$\begin{aligned}\hat{O}(x)_{SDWx}&\sim e^{-2ik_Fx}\cos(\sqrt{2}\hat{\phi}_\rho)\cos(\sqrt{2}\hat{\theta}_\sigma)\\ \hat{O}(x)_{SDWy}&\sim e^{-2ik_Fx}\cos(\sqrt{2}\hat{\phi}_\rho)\sin(\sqrt{2}\hat{\theta}_\sigma)\\ \hat{O}(x)_{SDWz}&\sim e^{-2ik_Fx}\cos(\sqrt{2}\hat{\phi}_\rho)\sin(\sqrt{2}\hat{\phi}_\sigma).\end{aligned}$$

对于$U>0$,既然$K_s=1$那么Luttinger液体态有$\langle\hat{O}(x)^\dagger_{SDW\alpha}\hat{O}(0)_{SDW\alpha}\rangle\sim\frac{1}{x^{1+K_c}}$.
我们也可以定义电荷密度波序参量$\hat{O}(x)_{CDW}=\sum_\sigma\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\psi}_\sigma(x)\sim e^{-2ik_Fx}\sin(\sqrt{2}\hat{\phi}_c)\cos(\sqrt{2}\hat{\phi}_s)$,它的关联函数的幂律行为与自旋密度波一致,但是实际上自旋密度波关联还有一个额外的对数修正($\ln^{1/2}\frac{x}{a}$),[69]因此自旋密度波关联是体系的主导关联.此外,我们还可以考虑自旋单重态的超导序参量$\hat{O}(x)_{SS}=\sum_\sigma\sigma\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\hat{\psi}^\dagger_{-\sigma}(x)\sim e^{-i\sqrt{2}\hat{\theta}_c}\cos(\sqrt{2}\hat{\phi}_s)$以及自旋三重态的超导序参量$\hat{O}(x)_{TS\alpha}=\sum_\sigma\sigma\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\sigma^\alpha_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(x)$,

$$\begin{aligned}\hat{O}(x)_{TSx}&\sim e^{-i\sqrt{2}\hat{\theta}_c}\cos(\sqrt{2}\hat{\theta}_s)\\ \hat{O}(x)_{TSy}&\sim -e^{-i\sqrt{2}\hat{\theta}_c}\sin(\sqrt{2}\hat{\theta}_s)\\ \hat{O}(x)_{TSz}&\sim e^{-i\sqrt{2}\hat{\theta}_c}\sin(\sqrt{2}\hat{\phi}_s).\end{aligned}$$

这样$\langle\hat{O}(x)^\dagger_{SS}\hat{O}(0)_{SS}\rangle\sim\langle\hat{O}(x)^\dagger_{TS\alpha}\hat{O}(0)_{TS\alpha}\rangle\sim\frac{1}{x^{1+1/K_c}}$.通过比较不同关联函数的幂律行为,我们发现$K_c>1$时三重态超导关联主导低能物理而$K_c<1$时则是自旋密度波主导.

当$U<0$时,自旋自由度出现能隙,这样当$K_\rho<1$电荷密度波是主导的关联而$K_\rho>1$时由单重态超导主导.($\langle\hat{O}(x)^\dagger_{CDW}\hat{O}(0)_{CDW}\rangle\sim\frac{1}{x^{K_c}}$,$\langle\hat{O}(x)^\dagger_{SS}\hat{O}(0)_{SS}\rangle\sim\frac{1}{x^{1/K_c}}$)

当然,对于一维Hubbard模型而言,$U>0$时$K_s=1,K_c<1$,体系低能下的主导关联是自旋密度波,与之相反,$U<0$时单重态超导是最主导的关联.对于单重态超导关联主导的区域,我们可以简单理解为当$U<0$时,Hubbard U项总是吸引作用,相反自旋的电子在同一格点写成自旋单重态.自旋密度波主导的区域可以理解为体系通过二阶微扰交换过程最大化临近自旋自由度之间的反铁磁耦合并同时降低Hubbard-U的排斥作用.

[69] 虽然$K_s=1$时自旋部分的cos项低能下可以忽略但它会导致这个额外的对数修正,这也是边缘无关扰动的典型特征.

- 类似于Heisenberg模型,$g_s \int dx \cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_s)$取极小值时$\hat{\phi}_s = \frac{\pi}{2\sqrt{2}} + \frac{\pi n}{\sqrt{2}}$,考虑$\Delta\hat{\phi}_s = -\pi/\sqrt{2}$那么有$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{-1}{2\pi} \int dx \nabla(\hat{\phi}_\uparrow - \hat{\phi}_\downarrow) = \frac{-\sqrt{2}}{2\pi} \int dx \nabla\hat{\phi}_s \simeq \frac{-\sqrt{2}}{2\pi}\Delta\hat{\phi}_s = 1/2$,这说明一维Hubbard模型也存在$S = 1/2$的自旋子激发.此外,考虑电荷部分的$g_c \int dx \cos(2\sqrt{2}\hat{\phi}_s)(g_c < 0)$取极小值时$\hat{\phi}_c = 0 + \frac{\pi n}{\sqrt{2}}$,设$\Delta\hat{\phi}_c = -\pi/\sqrt{2}$可得 $\langle \hat{\rho} \rangle = \frac{-1}{\pi} \int dx \nabla(\hat{\phi}_\uparrow + \hat{\phi}_\downarrow) = \frac{-\sqrt{2}}{\pi} \int dx \nabla\hat{\phi}_c \simeq \frac{-\sqrt{2}}{\pi}\Delta\hat{\phi}_c = 1$,这对应于携带单位电荷的激发,通常称为空穴子(holon).这样自旋子和空穴子自然成为Hubbard模型低能下的类粒子激发(但不是严格意义的Landau准粒子).

- 如果引入最近邻的密度相互作用$H_V = V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}(\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma})$, 就能在$|V|$大于$2|U|$的情况下实现电荷密度波与三重态超导占主导的区域.

- 当把一维体系彼此耦合时,我们一般期待这些主导的关联会形成真正的长程序,这可以用来理解一些准一维的电荷密度波材料或者超导材料超导配对的起源.

- 一维Hubbard模型在Luttinger液体态的电导率(记忆函数近似下)为$\sigma(\omega) = \mathcal{D}\delta(\omega) + \sigma_{reg}(\omega)$.这里$\mathcal{D} \sim \delta/\Delta$是Drude权重,$\delta$是相对于半满的电子密度偏离,$\Delta$是半满的电荷能隙,$\sigma_{reg}(\omega) \sim \omega^3(\omega < 2\Delta)$或者$\sigma_{reg}(\omega) \sim \omega^{3K_c - 4}(\omega > 2\Delta)(K_c \to 1$时有$\sigma_{reg}(\omega) \sim \frac{1}{\omega \ln^2 \omega})$.[70]

[70] 具体的讨论可以参考Giamarchi书的7.2节

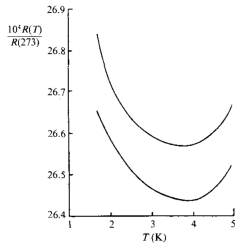


Figure 3.19: 稀磁金属中的电阻极小行为,这里显示的是Au掺入少量磁性原子的情况.[7]

磁性杂质与近藤问题:最干净的多体问题*

在上一节的讨论中,我们已经看到一维费米子体系呈现很多有趣的性质,那么对于更简单的体系,例如单杂质系统能够出现新物理吗？回答是肯定的,在历史上这就是著名的量子杂质问题,或者说是所谓的近藤(Kondo)问题.这类问题实际上描述金属中掺入少量磁性原子后整个体系的物理行为.实验上发现,有些磁性原子掺入金属后测量其温度依赖的电阻会发现电阻在低温下出现一个极小值,如图3.19 所示.我们知道金属在低温下的电阻一般由非磁性的杂质散射,电子−电子散射以及声子散射构成,即$\rho(T)=\rho_{imp}+aT^2+bT^5$.这里杂质贡献几乎温度无关的电阻,$T^2$源自电子之间相互作用,$T^5$是声子的贡献.显然,电阻是随温度单调下降的,因此电阻极小与这些因素都无关.1964年,近藤(Jun Kondo) 指出当我们额外考虑金属中传导电子与磁性杂质自旋的高阶散射可以解释实验上发现的电子极小行为,由此,这类金属电阻的极小行为又被称为近藤效应.

研究近藤效应的出发点一般是Anderson杂质模型或近藤模型(也称为$s-d$交换模型),其中Anderson模型定义为:

$$\hat{H}_A=\overbrace{\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}}^{\hat{H}^0}+\overbrace{\sum_{k\sigma}V_k(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_\sigma+\hat{d}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma})}^{\hat{H}^V}+\overbrace{E_d\sum_\sigma\hat{d}^\dagger_\sigma\hat{d}_\sigma+U\hat{d}^\dagger_\uparrow\hat{d}_\uparrow\hat{d}^\dagger_\downarrow\hat{d}_\downarrow}^{\hat{H}^U} \tag{3.300}$$

ε_k是金属中传导电子的色散,$\hat{c}_{k\sigma}$是传导电子的湮灭算符.E_d,U是磁性杂质电子的能级和局域库伦能,$\hat{d}_\sigma$是其湮灭算符.V_k是杂质电子与传导电子的杂化耦合.而近藤模型定义为

$$\hat{H}_K=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k,k'}(J_+\hat{S}^+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+J_-\hat{S}^-\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}+J_z\hat{S}^z(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})). \tag{3.301}$$

$\hat{S}^\pm=\hat{S}^x\pm i\hat{S}^y,\hat{S}^z$表示嵌入金属后磁性杂质的$S=1/2$自旋.在各向同性的情况下,$J_+=J_-=J_z$,我们可以把近藤模型写成更紧凑的形式,即

$$\hat{H}_K=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+2J\sum_{k,k'}\hat{\vec{S}}\cdot\hat{c}^\dagger_{k\alpha}\frac{\hat{\vec{\sigma}}_{\alpha\beta}}{2}\hat{c}_{k'\beta}. \tag{3.302}$$

需要指出,我们可以从Anderson模型出发在$E_d < E_F < E_d + U$的参数范围内利用正则变换方法导出近藤模型,(E_F是传导电子的费米能)这称为Schrieffer-Wolff 变换.

从Anderson到Kondo模型*

这里,我们采用Hewson书上的方法从Anderson模型推导Kondo模型.首先,当杂化$V_k = 0$时,Anderson模型中杂质电子可处于的状态是空占,($\langle \hat{n}_{d\uparrow} + \hat{n}_{d\downarrow} \rangle = 0$)单占和双占.如果杂质电子需要显示$S = 1/2$自旋磁矩,那么其电子占据必须是单占据,这要求单占的能量E_d必须小于空占据的0和双占据的$2E_d + U$,即有

$$E_d < 0 < E_d + U. \tag{3.303}$$

至于$E_d, E_d+U < 0$表示双占据,$E_d, E_d+U > 0$表示空占据.此外,当E_d或E_d+U其中一个接近费米能时,我们称Anderson模型处于所谓的混合价(mixed valence)区.

现在,我们把系统的(多体)波函数$|\phi\rangle$写成空占态$|\phi_0\rangle$,单占态$|\phi_1\rangle$ 以及双占态$|\phi_2\rangle$的叠加,(注意这几个态都是多体态.)即有$|\phi\rangle = |\phi_0\rangle + |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle$. 同时我们有完备性关系$1 = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$.由此可把系统哈密顿量写为

$$\hat{H} = \sum_{n,m} |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\hat{H}|\phi_m\rangle\langle\phi_m| \tag{3.304}$$

这样,Anderson模型的定态Schödinger方程$\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ 可以写成

$$\hat{H}|\phi\rangle = \sum_{n,m,n'} \overbrace{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}^{\hat{P}_n} \hat{H} \overbrace{|\phi_m\rangle\langle\phi_m|}^{\hat{P}_m} \phi_{n'}\rangle = E \sum_{n'} |\phi_{n'}\rangle \tag{3.305}$$

注意到正交归一关系$\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}$,那么上述方程可写成如下矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_{00} & \hat{H}_{01} & \hat{H}_{02} \\ \hat{H}_{10} & \hat{H}_{11} & \hat{H}_{12} \\ \hat{H}_{20} & \hat{H}_{21} & \hat{H}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\phi_0\rangle \\ |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\phi_0\rangle \\ |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \end{pmatrix} \tag{3.306}$$

这里$\hat{H}_{nm} = \hat{P}_n\hat{H}\hat{P}_m$是投影算符$\hat{P}$作用后的系统哈密顿量,且由于系统的厄密性有$\hat{H}_{nm} = \hat{H}^\dagger_{mn}$. 对于投影算符,其用算符表示的具体形式为

$$\hat{P}_0 = (1-\hat{n}_{d\uparrow})(1-\hat{n}_{d\downarrow}), \quad \hat{P}_1 = n_{\hat{d}\uparrow} + n_{\hat{d}\downarrow} - 2\hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow}, \qquad \hat{P}_2 = \hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow}. \tag{3.307}$$

显然投影算符满足$\hat{P}_n\hat{P}_m = \delta_{nm}\hat{P}_n$.注意到这里引入的投影算符与先前$t-J$模型投影算符的相似性,因而其物理意义不言自明,例如$\hat{P}_0$投影掉有电子占据的情况,也就是把系统投影到杂质电子空占据的子空间,而$\hat{P}_1, \hat{P}_2$分别投影到单占据和双占据子空间.由此哈密顿量中的杂化项$\hat{H}^V$仅能改变一个杂质电子而非两个,那

么空占据与双占据子空间之间就没有直接耦合,即$\hat{H}_{20}=\hat{H}_{02}=0$.这样 我们需要计算的矩阵元为三个对角元$\hat{H}_{00},\hat{H}_{11}\hat{H}_{22}$以及非对角元$H_{10},H_{12}$.既然

$$\hat{H}_{nm}=\hat{P}_n(\hat{H}^0+\hat{H}^V+\hat{H}^U)\hat{P}_m=\hat{H}^0_{nm}+\hat{H}^V_{nm}+\hat{H}^U_{nm}, \tag{3.308}$$

且投影只对杂质电子作用,那么$\hat{H}^0_{nm}=\hat{H}^0\hat{P}_n\hat{P}_m=\hat{H}^0\delta_{nm}\hat{P}_n$. 而杂质电子部分$\hat{H}^U$ 用投影算符可写为$E_d(\hat{P}_1+2\hat{P}_2)+U\hat{P}_2$,那么其是对角化的,非零元为

$$\begin{aligned}\hat{H}^U_{00}&=0\\ \hat{H}^U_{11}&=E_d\hat{P}_1\\ \hat{H}^U_{22}&=(2E_d+U)\hat{P}_2.\end{aligned} \tag{3.309}$$

现在,我们计算杂化项$\hat{H}^V$的矩阵元$\hat{H}^V_{10},\hat{H}^V_{12}$. 对$\hat{H}^V_{10}$ 有

$$\hat{H}^V_{10}=\hat{P}_1\hat{H}^V\hat{P}_0=\sum_{k\sigma}V_k\hat{P}_1\hat{d}^\dagger_\sigma\hat{P}_0\hat{c}_{k\sigma}=\sum_{k\sigma}V_k\hat{d}^\dagger_\sigma(1-\hat{n}_{d-\sigma})\hat{c}_{k\sigma} \tag{3.310}$$

对$\hat{H}^V_{12}$有

$$\hat{H}^V_{12}=\hat{P}_1\hat{H}^V\hat{P}_2=\sum_{k\sigma}V_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{P}_1\hat{d}_\sigma\hat{P}_2=\sum_{k\sigma}V_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_\sigma\hat{n}_{d-\sigma}. \tag{3.311}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}\hat{H}_{00}&=\hat{H}^0\hat{P}_0\\ \hat{H}_{11}&=(\hat{H}^0+E_d)\hat{P}_1\\ \hat{H}_{22}&=(\hat{H}^0+2E_d+U)\hat{P}_2\\ \hat{H}_{10}&=\sum_{k\sigma}V_k\hat{d}^\dagger_\sigma(1-\hat{n}_{d-\sigma})\hat{c}_{k\sigma}\\ \hat{H}_{12}&=\sum_{k\sigma}V_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_\sigma\hat{n}_{d-\sigma}.\end{aligned} \tag{3.312}$$

既然我们需要的是单占据态子空间下哈密顿量,那么由矩阵形式可解得关于$|\phi_1\rangle$的方程为(利用$|\phi_0\rangle=(E-\hat{H}_{00})^{-1}H_{01}|\phi_1\rangle,|\phi_2\rangle=(E-\hat{H}_{22})^{-1}H_{21}|\phi_1\rangle$)

$$(\hat{H}_{11}+\hat{H}_{12}(E-\hat{H}_{22})^{-1}\hat{H}_{21}+\hat{H}_{10}(E-\hat{H}_{00})^{-1}\hat{H}_{01})|\phi_1\rangle=E|\phi_1\rangle. \tag{3.313}$$

那么

$$\hat{H}_{12}(E-\hat{H}_{22})^{-1}\hat{H}_{21}=\sum_{kk'\sigma\sigma'}V_kV_{k'}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_\sigma\hat{n}_{d-\sigma}(E-\hat{H}_0-(2E_d+U))^{-1}\hat{d}^\dagger_{\sigma'}\hat{n}_{d-\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'} \tag{3.314}$$

现在让我们估计上式中倒数部分的贡献.首先注意到若$[\hat{H}_0,\hat{c}_{k'\sigma'}]=-\varepsilon_{k'}\hat{c}_{k'\sigma'}$,那么有

$$\frac{1}{E-\hat{H}_0}\hat{c}_{k'\sigma'}=\hat{c}_{k'\sigma'}\frac{1}{E+\varepsilon_{k'}+\hat{H}_0} \tag{3.315}$$

这样我们可以把所有算符移动到一边,即

$$\hat{H}_{12}(E-\hat{H}_{22})^{-1}\hat{H}_{21}=\sum_{kk'\sigma\sigma'}V_kV_{k'}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{d}_\sigma\hat{n}_{d-\sigma}\hat{d}^\dagger_{\sigma'}\hat{n}_{d-\sigma'}(E+\varepsilon_{k'}-\hat{H}_0-(2E_d+U))^{-1} \tag{3.316}$$

在V的零级近似下单占据空间的能量为$E=\langle\hat{H}_{11}\rangle_1=\langle\hat{H}^0\rangle_1+E_d$,而双占据空间的能量近似为$\langle\hat{H}_{22}\rangle_2=\langle\hat{H}^0\rangle_2+2E_d+U$.显然这两者的能量差为

$$E-\langle\hat{H}_{22}\rangle_2=\langle\hat{H}^0\rangle_1-\langle\hat{H}^0\rangle_2-E_d-U\simeq-E_d-U \tag{3.317}$$

因此有

$$(E+\varepsilon_{k'}-\hat{H}_0-(2E_d+U))^{-1}\simeq-(E_d+U-\varepsilon_{k'})^{-1} \tag{3.318}$$

则

$$\hat{H}_{12}(E-\hat{H}_{22})^{-1}\hat{H}_{21}=\sum_{kk'\sigma\sigma'}\frac{-V_kV_{k'}}{E_d+U-\varepsilon_{k'}}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{d}_\sigma\hat{n}_{d-\sigma}\hat{d}^\dagger_{\sigma'}\hat{n}_{d-\sigma'} \tag{3.319}$$

同理有($\frac{1}{E-\hat{H}_0}\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}=\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}\frac{1}{E-\varepsilon_{k'}+\hat{H}_0}$)

$$\hat{H}_{10}(E-\hat{H}_{00})^{-1}\hat{H}_{01}=\sum_{kk'\sigma\sigma'}\frac{-V_kV_{k'}}{\varepsilon_{k'}-E_d}\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}\hat{d}^\dagger_\sigma(1-\hat{n}_{d-\sigma})\hat{d}_{\sigma'}(1-\hat{n}_{d-\sigma'}). \tag{3.320}$$

现在,我们在单占据的子空间化简这些表达式,此时有$\hat{n}_{d\uparrow}+\hat{n}_{d\downarrow}=1,\hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow}=0$.
则有

$$\hat{H}_{12}(E-\hat{H}_{22})^{-1}\hat{H}_{21}=\sum_{kk'}\frac{V_kV_{k'}}{E_d+U-\varepsilon_{k'}}\left(\hat{S}^z(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})+\hat{S}^+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+\hat{S}^-\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}-\frac{1}{2}\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'} \tag{3.321}$$

$$\hat{H}_{10}(E-\hat{H}_{00})^{-1}\hat{H}_{01}=\sum_{kk'}\frac{V_kV_{k'}}{\varepsilon_k-E_d}\left(\hat{S}^z(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})+\hat{S}^+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+\hat{S}^-\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}+\frac{1}{2}\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\right) \tag{3.322}$$

这里定义了单占据子空间的$S=1/2$自旋算符

$$\hat{S}^z=\frac{1}{2}(\hat{d}^\dagger_\uparrow\hat{d}_\uparrow-\hat{d}^\dagger_\downarrow\hat{d}_\downarrow),\quad\hat{S}^+=\hat{d}^\dagger_\uparrow\hat{d}_\downarrow,\quad\hat{S}^-=\hat{d}^\dagger_\downarrow\hat{d}_\uparrow. \tag{3.323}$$

由此我们发现双占据与空占据子空间的贡献等价于自旋相互作用$\hat{H}_{sd}$和势散射$\hat{H}_p$:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{sd}&=\sum_{kk'}J_{kk'}\left(\hat{S}^z(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})+\hat{S}^+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+\hat{S}^-\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}\right)\\&=2\sum_{kk'}J_{kk'}\hat{\vec{S}}\cdot\hat{c}^\dagger_{k\alpha}\frac{\hat{\vec{\sigma}}_{\alpha\beta}}{2}\hat{c}_{k'\beta}\end{aligned} \tag{3.324}$$

$$\hat{H}_p=\sum_{kk'\sigma}P_{kk'}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma} \tag{3.325}$$

这里磁性交换耦合为

$$J_{kk'} = V_k V_{k'} \left(\frac{1}{E_d + U - \varepsilon_{k'}} + \frac{1}{\varepsilon_k - E_d} \right) \tag{3.326}$$

而势散射耦合为

$$P_{kk'} = \frac{V_k V_{k'}}{2} \left(-\frac{1}{E_d + U - \varepsilon_{k'}} + \frac{1}{\varepsilon_k - E_d} \right). \tag{3.327}$$

设V的动量依赖能够忽略,ε_k取费米能且$E_F = 0$.那么根据单占据条件$E_d < 0 < E_d + U$有

$$J_{kk'} \to J = V^2 \left(\frac{1}{E_d + U} + \frac{1}{-E_d} \right) > 0, \tag{3.328}$$

这对应反铁磁耦合.在对称情况下,$E_d = -U/2$,这样

$$\boxed{J = \frac{4V^2}{U}} \tag{3.329}$$

这通常用于对称Anderson杂质模型与Kondo模型参数的对应.

忽略散射哈密顿$\hat{H}_p$可得单占据子空间的有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}_0 + E_d + \hat{H}_{sd} \tag{3.330}$$

最后忽略常数项E_d就得到了先前的Kondo模型(公式3.302).可以看到,把Anderson模型投影到单占据子空间并准确到V^2便得到Kondo模型.Kondo 模型的耦合系数可以看作是单占据态发生虚跃迁至双占据或空占据的高能态在二阶微扰下的等效贡献.

近藤的电阻极小*

基于Kondo模型,近藤计算了其电阻行为,最终得到了符合实验观测的结果.在这一节,我们对此进行简要分析.

既然我们讨论的是杂质问题那么采用所谓的T矩阵形式是方便的.对于如下的杂质问题

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \sum_{kk'} V_{kk'} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{3.331}$$

可定义预解(resolvent)Green函数

$$\hat{G}(\omega) = (\omega - \hat{H})^{-1}. \tag{3.332}$$

若我们对其两边作用上动量本征态$|k\rangle, |k'\rangle$则有

$$\langle k|\hat{G}(\omega)|k'\rangle = G_{kk'}(\omega) = \langle k|(\omega - \hat{H})^{-1}|k'\rangle \tag{3.333}$$

现在,把预解Green函数中的$\hat{H}$换为$\hat{H}_0 + \hat{V}$可得

$$(\omega - \hat{H}_0 - \hat{V})\hat{G} = 1. \tag{3.334}$$

对上式两边左乘$\hat{G}_0=(\omega-\hat{H}_0)^{-1}$有

$$(1-\hat{G}_0\hat{V})\hat{G}=\hat{G}_0\Rightarrow\hat{G}=\hat{G}_0+\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}. \tag{3.335}$$

这样我们得到一个迭代关系,也就是不断用右边的形式

$$\hat{G}=\hat{G}_0+\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0+\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0+...=\hat{G}_0+\hat{G}_0\hat{T}\hat{G}_0 \tag{3.336}$$

这样就得到了T矩阵的形式

$$\hat{T}=\hat{V}+\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}+\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}+...=\hat{V}(1-\hat{G}\hat{V})^{-1}. \tag{3.337}$$

通常,我们用的是上述形式的展开部分.当我们计算电阻时,利用Boltzman方程或线性响应理论都可以证明电子的散射率为

$$\frac{1}{\tau_k}=2\pi c_{imp}\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\delta(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'})|T_{kk'}|^2(1-\cos\theta') \tag{3.338}$$

这里c_{imp}是杂质浓度,$T_{kk'}=\langle k|\hat{T}|k'\rangle$,$\theta'$是$k$ 与k'的夹角.这样系统的电阻率为

$$\rho=\frac{m}{ne^2}\frac{1}{\tau_{k_F}}. \tag{3.339}$$

对于动量无关的$T_{kk'}$,散射率可以化简为

$$\frac{1}{\tau_{k_F}}=2\pi c_{imp}|T(E_F)|^2\int_{-1}^{1}\frac{2\pi d\cos\theta}{4\pi}\int d\varepsilon N(\varepsilon)\delta(E_F-\varepsilon)(1-\cos\theta)=2\pi c_{imp}\overbrace{N(E_F)}^{\frac{3n/2}{2E_F}}|T(E_F)|^2 \tag{3.340}$$

这样有

$$\rho=\frac{3\pi c_{imp}m}{2e^2E_F}|T(E_F)|^2. \tag{3.341}$$

下面,让我们计算Kondo模型的电阻,这等价于计算T矩阵的矩阵元$T_{kk'}$.首先系统的模型哈密顿量为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0+\hat{H}_{sd}\\ &= \sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{kk'}J_{kk'}\left(\hat{S}^z(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})+\hat{S}^+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+\hat{S}^-\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}\right).\end{aligned}$$

对比T矩阵的一般形式3.337可知$\hat{V}=\hat{H}_{sd}$,则

$$\hat{T}=\hat{H}_{sd}+\hat{H}_{sd}\hat{G}_0\hat{H}_{sd}+... \tag{3.342}$$

首先,我们计算最低阶的T矩阵矩阵元$\langle k'\uparrow|\hat{T}|k\uparrow\rangle$

$$\langle k'\uparrow|\hat{T}|k\uparrow\rangle=\langle k'\uparrow|\hat{H}_{sd}|k\uparrow\rangle=J_{kk'}\hat{S}^z\langle k'\uparrow|\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}|k\uparrow\rangle=J_{kk'}\hat{S}^z \tag{3.343}$$

同理得

$$\langle k'\uparrow|\hat{T}|k\downarrow\rangle=\langle k'\uparrow|\hat{H}_{sd}|k\downarrow\rangle=J_{kk'}\hat{S}^-\langle k'\uparrow|\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow}|k\downarrow\rangle=J_{kk'}\hat{S}^-. \tag{3.344}$$

以及$\langle k'\downarrow|\hat{T}|k\downarrow\rangle=-J_{kk'}\hat{S}^z,\langle k'\downarrow|\hat{T}|k\uparrow\rangle=J_{kk'}\hat{S}^+$.综合这几项得到

$$\begin{aligned}|T_{kk'}|^2 &= |\langle k'\uparrow|\hat{T}|k\uparrow\rangle|^2+|\langle k'\downarrow|\hat{T}|k\downarrow\rangle|^2+|\langle k'\uparrow|\hat{T}|k\downarrow\rangle|^2+|\langle k'\downarrow|\hat{T}|k\uparrow\rangle|^2\\ &= |J_{kk'}|^2(2(\hat{S}^z)^2+\hat{S}^-\hat{S}^++\hat{S}^+\hat{S}^-)=2|J_{kk'}|^2S(S+1)\simeq 2J^2S(S+1).\end{aligned}$$

由此我们发现最低阶T矩阵给出的电阻率ρ正比于J^2,与温度无关.因此,寻找温度相关的电阻率需要考虑下一阶的贡献.

下一阶的T矩阵是$\hat{H}_{sd}\hat{G}_0\hat{H}_{sd}$,即

$$\begin{aligned}T^{\sigma\sigma'}_{kk'}(\omega) &= \sum_{k''k'''\sigma''\sigma'''}\langle k'\sigma'|\hat{H}_{sd}|k''\sigma''\rangle\langle k''\sigma''|\hat{G}_0(\omega)|k'''\sigma'''\rangle\langle k'''\sigma'''|\hat{H}_{sd}|k\sigma\rangle\\ &= \sum_{k''\sigma''}\langle k'\sigma'|\hat{H}_{sd}|k''\sigma''\rangle\frac{1}{\omega-\varepsilon_{k''}}\langle k''\sigma''|\hat{H}_{sd}|k\sigma\rangle \qquad (3.345)\end{aligned}$$

这样总共需要计算4个T矩阵.例如

$$T^{\uparrow\uparrow}_{kk'}(\omega)=\sum_{k''\sigma''}\langle k'\uparrow|\hat{H}_{sd}|k''\sigma''\rangle\frac{1}{\omega-\varepsilon_{k''}}\langle k''\sigma''|\hat{H}_{sd}|k\uparrow\rangle \qquad (3.346)$$

对中间态$\sigma''=\uparrow,\downarrow$分别需要计算.当$\sigma''=\downarrow$时,我们需要考虑的横向自旋耦合部分,也就是$\hat{S}^\pm$,

$$\sum_{k_1k_1'k_2k_2'k''}J_{k_1k_1'}J_{k_2k_2'}\hat{S}^-\hat{S}^+\langle k'\uparrow|\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}_{k_1'\downarrow}|k''\downarrow\rangle\langle k''\downarrow|\hat{c}^\dagger_{k_2\downarrow}\hat{c}_{k_2'\uparrow}|k\uparrow\rangle\frac{1}{\omega-\varepsilon_{k''}}$$

显然这样仅当$k_1=k',k_1'=k_2=k'',k_2'=k$非零,则有

$$\begin{aligned}&\sum_{k_2}J_{k'k_2}J_{k_2k}\hat{S}^-\hat{S}^+\langle k'\uparrow|\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow}\hat{c}_{k_2}\hat{c}^\dagger_{k_2\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}|k\uparrow\rangle\frac{1}{\omega-\varepsilon_{k_2}}\\ =\ &\sum_{k_2}J_{k'k_2}J_{k_2k}\hat{S}^-\hat{S}^+(1-f_F(\varepsilon_{k_2}))\frac{1}{\omega-\varepsilon_{k_2}}\\ =\ &J^2\hat{S}^-\hat{S}^+\sum_{k_2}\frac{1-f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}} \qquad (3.347)\end{aligned}$$

这可以用图形表示为图3.20(i),其物理意义是动量为k自旋为↑的电子通过与杂质自旋散射成为动量为k_2自旋为↓的中间态电子,然后该电子再进行一次散射成为动量为k'自旋为↑的终态电子.[71]

另一方面,3.20(ii)也对$T^{\uparrow\uparrow}_{kk'}(\omega)$有贡献,其表达式为

$$\sum_{k_1k_1'k_2k_2'k''}J_{k_1k_1'}J_{k_2k_2'}\hat{S}^+\hat{S}^-\langle k'\uparrow|\hat{c}^\dagger_{k_2\downarrow}\hat{c}_{k_2'\uparrow}|k''\downarrow\rangle\langle k''\downarrow|\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}_{k_1'\downarrow}|k\uparrow\rangle\frac{1}{\omega-\varepsilon_{k''}}$$

当$k_2'=k,k_1=k',k_1'=k_2=k''$有非零贡献,即

$$J^2\hat{S}^+\hat{S}^-\sum_{k_2}\frac{f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}} \qquad (3.348)$$

[71]这里的图形表示并不是费曼图.

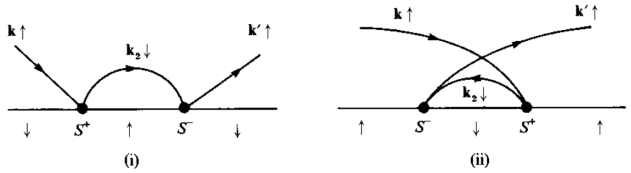


Figure 3.20: 散射T矩阵计算的两个二阶过程.[7]

这可以看成是中间态为一个具有k_2动量的空穴.把图3.20(i)和(ii)两项相加可得

$$J^2\sum_{k_2}\left[\hat{S}^-\hat{S}^+\frac{1-f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}+\hat{S}^+\hat{S}^-\frac{f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}\right]. \tag{3.349}$$

若中间态自旋为$\sigma''=\uparrow$,则只涉及纵向耦合,也就是$\hat{S}^z$,其也有正常项和空穴项.相应的表达式与$\sigma''=\downarrow$相似,唯一差别是所有出现的自旋算符换为$\hat{S}^z$,由此可得完整的$T^{\uparrow\uparrow}_{kk'}(\omega)$是

$$\begin{aligned}T^{\uparrow\uparrow}_{kk'}(\omega) &= J^2\sum_{k_2}\left[((\hat{S}^z)^2+\hat{S}^-\hat{S}^+)\frac{1-f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}+((\hat{S}^z)^2+\hat{S}^+\hat{S}^-)\frac{f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}\right]\\ &= J^2\sum_{k_2}\left[\frac{(\hat{S}^z)^2+\hat{S}^-\hat{S}^+}{\omega-\varepsilon_{k_2}}-\overbrace{[\hat{S}^+,\hat{S}^-]}^{2\hat{S}^z}\frac{f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}\right]\end{aligned} \tag{3.350}$$

注意到上式第二项包含费米分布函数,因此其会显示温度依赖.直接计算发现

$$J\sum_{k_2}\frac{f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}=J\int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{f_F(\varepsilon)}{\omega-\varepsilon}\simeq JN(0)\ln\frac{\sqrt{\omega^2+T^2}}{E_F} \tag{3.351}$$

这里$N(0)$是费米能上的态密度.对费米面上的电子,其能量ω可取为零,这样上式给出$JN(0)\ln\frac{T}{D}$的对数行为,这里我们用能带半宽D近似代替费米能E_F.由此,把这个二阶项与一阶项结合在一起可得

$$|T^{\uparrow\uparrow}_{kk'}|^2\sim\left(J-J^2N(0)\ln\frac{T}{D}\right)^2\sim J^2\left(1-2JN(0)\ln\frac{T}{D}\right) \tag{3.352}$$

换句话说,我们可以预期电阻率会显示温度的对数行为.考虑其他自旋态对应的T矩阵,近藤的计算表明磁性杂质散射的电阻率是

$$\rho=\frac{3\pi c_{imp}mJ^2S(S+1)}{2e^2E_F}\left(1-4JN(0)\ln\frac{T}{D}\right). \tag{3.353}$$

结合声子的T^5贡献可知系统的总电阻率为

$$\rho(T) = aT^5 + c_{imp}\rho_0 - c_{imp}\rho_1 \ln \frac{T}{D} \tag{3.354}$$

注意到T^5随温度降低而下降,而$\ln T$项则上升,因而系统必然会出现电阻率的极小值,其位置T_{min} 由$d\rho(T)/dT = 0$得到

$$T_{min} = \left(\frac{\rho_1}{5a}\right)^{1/5} c_{imp}^{1/5}. \tag{3.355}$$

这些结果与实验在温度不太低时符合很好,但是注意到$\ln T$项在低温发散,这显然非物理.历史上寻找近藤杂质在低温下的解就成为了所谓的近藤问题.

- 若仅有纵向耦合,($\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + J\sum_{kk'\sigma} \hat{S}^z \hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}$) 那么公式3.350分子中正常项和空穴项的费米分布函数互相抵消,因此其电阻率不会有明显的温度依赖.换句话说,正是横向,也就是自旋反转散射导致了对数形式的电阻行为.
- 但是,若空间每一个格点都有自旋和传导电子通过纵向自旋相互作用耦合,(即Ising-Kondo晶格模型 [72])那么当传导电子密度偏离半填满会出现各种温度依赖的电阻,显然,这里的温度依赖机制明显超出了单杂质问题的框架.[73]

近藤问题*

近藤的工作成功解释了电阻极小现象,但其发散特性促使人们进一步研究稀磁合金的低温特性.实验发现体系的低温电阻率和磁化率满足如下费米液体类似的行为:

$$\rho_{imp}(T) = \rho_0(1 - AT^2), \quad \chi_{imp}(T) = \chi_{imp}(1 - BT^2) \tag{3.356}$$

同时体系的杂质熵和有效磁矩趋于零.这用近藤模型可以解释为零温下传导电子和磁性杂质形成自旋单重态,这样杂质的有效磁矩自然为零,并且自旋单重态没有简并,这样熵也是零.既然杂质的自旋与传导电子形成单重态,那么可以理解为杂质磁矩被传导电子完全屏蔽,因此,传导电子感受到的仅仅是一个非磁性杂质的简单势散射,在低温下显然会出现类费米液体行为.

近藤单态

我们通常把这里的自旋单重态称为近藤单态(Kondo singlet),数学上,1966年芳田奎(Yosida)最早提出了相应的变分波函数:

$$|\Psi_{KS}\rangle = \sum_{k>k_F} a_k \left(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}|\downarrow\rangle - \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|\uparrow\rangle\right)|\Phi_{FS}\rangle \tag{3.357}$$

[72][W.-W. Yang,J. Zhao,H.-G. Luo,and Y. Zhong, Exactly solvable Kondo lattice model in the anisotropic limit, Phys.Rev.B **100**,045148(2019)]

[73]这个问题最可能的答案是Mott临界性.[W.-W. Yang,Y. Zhong,and H.-G. Luo,Doping Mott Insulator in Ising-Kondo Lattice: Strange metal and Mott Criticality, arXiv:2101.10611v2.]

这里a_k是变分参数,$|\uparrow,\downarrow\rangle$代表磁性杂质的自旋态,$|\Phi_{FS}\rangle$ 表示$\hat{H}_0$部分的费米球基态,其基态能为E_0 可以看到上述波函数是典型的自旋单态,唯一需要确定是a_k,这可以通过体系的本征方程$\hat{H}_K|\Psi_{KS}\rangle = E|\Psi_{KS}\rangle$ 得到,即有

$$(E - \hat{H}_0)|\Psi_{KS}\rangle = \hat{H}_{sd}|\Psi_{KS}\rangle. \tag{3.358}$$

上式左边

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_0|\Psi_{KS}\rangle = \sum_{k>k_F} a_k \sum_{k'\sigma'} \varepsilon_{k'} \hat{c}^\dagger_{k'\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'} \left(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}|\downarrow\rangle - \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &\sum_{k>k_F} a_k \sum_{k'\sigma'} \varepsilon_{k'} \left(\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'} \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}|\downarrow\rangle - \hat{c}^\dagger_{k'\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'} \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &\sum_{k>k_F} a_k \sum_{k'\sigma'} \varepsilon_{k'} \left(\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'} (\delta_{kk'}\delta_{\sigma'\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} \hat{c}_{k'\sigma'})|\downarrow\rangle - \hat{c}^\dagger_{k'\sigma'} (\delta_{kk'}\delta_{\sigma'\downarrow} - \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} \hat{c}_{k'\sigma'})|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &\sum_{k>k_F} a_k \sum_{k'\sigma'} \varepsilon_{k'} \left((\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}\delta_{kk'}\delta_{\sigma'\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} \hat{c}^\dagger_{k'\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'})|\downarrow\rangle - (\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}\delta_{kk'}\delta_{\sigma'\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} \hat{c}^\dagger_{k'\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'})|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &\sum_{k>k_F} a_k \left((\varepsilon_k \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} \hat{H}_0)|\downarrow\rangle - (\varepsilon_k \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} \hat{H}_0)|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &\sum_{k>k_F} a_k (\varepsilon_k + E_0) \left(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}|\downarrow\rangle - \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle
\end{aligned} \tag{3.359}$$

右边

$$\hat{H}_{sd}|\Psi_{KS}\rangle = \sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'q} \left(\hat{S}^z (\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\downarrow}) + \hat{S}^+ \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\uparrow} + \hat{S}^- \hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\downarrow} \right) \left(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}|\downarrow\rangle - \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}$$

这里$\hat{S}^z$项贡献为

$$\sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'q} \left(\frac{-1}{2} (\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\downarrow}) \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}|\downarrow\rangle - \frac{1}{2} (\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\downarrow}) \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle.$$

显然这里出现了多个费米子算符,因此一般而言本征方程并不能满足,因此,我们要求算符作用完$|\Phi_{FS}\rangle$仍然只能是费米球外存在一个粒子,这样我们发现上式中的项可近似为

$$(\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\downarrow}) \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} \simeq (\langle \hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\uparrow} \rangle - \langle \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\downarrow} \rangle) \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \langle \hat{c}_{q\uparrow} \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} \rangle = \hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \delta_{qk} \langle \hat{c}_{k\uparrow} \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} \rangle \tag{3.360}$$

这里的平均对费米球态$|\Phi_{FS}\rangle$进行.由此可得$\hat{S}^z$项贡献为

$$\begin{aligned}
&\sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'} \left(\frac{-1}{2} (\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow} \langle \hat{c}_{k\uparrow} \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} \rangle |\downarrow\rangle - \frac{1}{2} (-\hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \langle \hat{c}_{k\downarrow} \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} \rangle |\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &\frac{-1}{2} \sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'} \left(\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow}|\downarrow\rangle - \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow}|\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle.
\end{aligned}$$

$\hat{S}^{\pm}$项贡献为

$$\begin{aligned}
&\sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'q} \left(\hat{S}^{+} \hat{c}^{\dagger}_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow} |\downarrow\rangle - \hat{S}^{-} \hat{c}^{\dagger}_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\downarrow} \hat{c}^{\dagger}_{k\downarrow} |\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &\sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'q} \left(\hat{c}^{\dagger}_{k'\downarrow} \hat{c}_{q\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow} |\uparrow\rangle - \hat{c}^{\dagger}_{k'\uparrow} \hat{c}_{q\downarrow} \hat{c}^{\dagger}_{k\downarrow} |\downarrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
\simeq &-\sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'q} \left(-\hat{c}^{\dagger}_{k'\downarrow} \langle \hat{c}_{q\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow} \rangle |\uparrow\rangle + \hat{c}^{\dagger}_{k'\uparrow} \langle \hat{c}_{q\downarrow} \hat{c}^{\dagger}_{k\downarrow} \rangle |\downarrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle \\
= &-\sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'} \left(\hat{c}^{\dagger}_{k'\uparrow} |\downarrow\rangle - \hat{c}^{\dagger}_{k'\downarrow} |\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle
\end{aligned} \tag{3.361}$$

显然,我们发现横向自旋$\hat{S}^{\pm}$的贡献是纵向$\hat{S}^{z}$的两倍,这自然是哈密顿量和状态$|\Psi_{KS}\rangle$自旋旋转不变性的体现.由此,本征方程可以写为

$$\sum_{k>k_F} a_k (E - \varepsilon_k - E_0) \left(\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow} |\downarrow\rangle - \hat{c}^{\dagger}_{k\downarrow} |\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle = -\frac{3}{2} \sum_{k>k_F} a_k J \sum_{k'} \left(\hat{c}^{\dagger}_{k'\uparrow} |\downarrow\rangle - \hat{c}^{\dagger}_{k'\downarrow} |\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle$$

为了左右两边能够相等,我们要求右边的k'求和仅对$k' > k_F$求,然后再交换k, k'得到

$$\sum_{k>k_F} a_k (E - \varepsilon_k - E_0) \left(\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow} |\downarrow\rangle - \hat{c}^{\dagger}_{k\downarrow} |\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle = \sum_{k>k_F} -\frac{3}{2} \sum_{k'>k_F} a_{k'} J \left(\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow} |\downarrow\rangle - \hat{c}^{\dagger}_{k\downarrow} |\uparrow\rangle \right) |\Phi_{FS}\rangle$$

因此上式恒成立便得到以下方程:

$$a_k (E - \varepsilon_k - E_0) = -\frac{3J}{2} \sum_{k'>k_F} a_{k'} \tag{3.362}$$

即

$$2(\varepsilon_k - \Delta E) a_k - 3J \sum_{k'>k_F} a_{k'} = 0 \tag{3.363}$$

这里$\Delta E = E_g - E_0$表示相对于费米球基态的能量变化.令$\sum_{k'>k_F} a_{k'}$为常数然后再对k求和可得

$$1 = \frac{3J}{2} \sum_{k>k_F} \frac{1}{\varepsilon_k - \Delta E} \simeq \frac{3J}{2} N(0) \int_0^D \frac{1}{\varepsilon - \Delta E} = \frac{3J}{2} N(0) \ln \frac{\Delta E - D}{\Delta E} \tag{3.364}$$

则有$\Delta E = \frac{D}{1 - e^{\frac{2}{3JN(0)}}}$.在弱耦合下$(JN(0) << 1)$给出

$$\Delta E \simeq -D e^{-\frac{2}{3JN(0)}} \tag{3.365}$$

在强耦合下$(JN(0) >> 1)$给出$\Delta E \simeq -D \frac{3JN(0)}{2} = -\frac{3J}{4}$.[74] 既然负号表示能量的降低,这说明系统形成$|\Psi_{KS}\rangle$所描述的近藤单态相比于费米球更为稳定,因此是基态的更好可能.

[74]注意到利用傅里叶变换能把$\hat{H}_{sd}$变为$2J\vec{\hat{S}} \cdot \hat{c}^{\dagger}_{0\alpha} \frac{\vec{\hat{\sigma}}_{\alpha\beta}}{2} \hat{c}_{0\beta}$, 也就是杂质自旋与空间位置为$r = 0$处的传导电子自旋耦合.强耦合下相当于两个$S = 1/2$电子以$2J$的反铁磁强度耦合,显然基态能是自旋单态所对应的能量$-3J/2$.

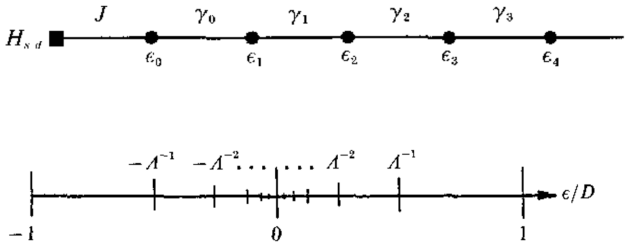


Figure 3.21: Kondo杂质模型的线性链表示以及传导电子能量的对数离散化.[7]

Wilson理论

当然,真正确认近藤单态的理论由Wilson通过数值重整化群(NRG)给出.[7]在NRG理论中,Wilson 首先把系统映射成一条一维费米子链:

$$\hat{H} = 2J\hat{\vec{S}} \cdot \hat{c}^{\dagger}_{0\alpha} \frac{\hat{\vec{\sigma}}_{\alpha\beta}}{2} \hat{c}_{0\beta} + \sum_{n,\sigma} \varepsilon_n \hat{c}^{\dagger}_{n\sigma} \hat{c}_{n\sigma} + \sum_{n,\sigma} \gamma_n (\hat{c}^{\dagger}_{n\sigma} \hat{c}_{n+1\sigma} + \hat{c}^{\dagger}_{n+1\sigma} \hat{c}_{n\sigma}) \quad (3.366)$$

这里每个格点的有效能量ε_n可选为零,而有效跃迁$\gamma_n = \frac{D(1+\Lambda^{-1})}{2\Lambda^{n/2}}$,$\Lambda > 1$.(图3.21)可以看到,除了第零格点电子与杂质自旋耦合外,其他电子可以自由跃迁.原则上,当格点总数N很小时我们可以完全对角化哈密顿量得到系统的所有能谱.Wilson指出为了得到近藤杂质模型的低能性质实际上需要计算足够大的N,但这样会很快超出计算机的计算能力,因此Wilson在实际计算时采取的方案是逐渐增加N 并同时抛弃高能的状态,这等价于通常的重整化的思想.增加N等价于系统在参数空间的流动,$N \to \infty$便意味着系统到达相应的重整化不动点.

Wilson通过计算发现N很大时,系统的低能能谱几乎是$J = 0$的$N-1$格点体系的能谱.由此,我们可以判断Kondo杂质体系的基态对应$J \to \infty$的强耦合极限,此时第零格点与杂质自旋耦合而与剩下的其他格点退耦,在自然解释了计算得到的结果.结合磁化率等热力学量的计算,Wilson确认系统的基态就是自旋单重态,因此近藤单态得以确认.

- Nozières关于强耦合极限的物理有一个很漂亮的解释,即局域费米液体理论.[75]

[75]原始工作可以参考[Nozières, A "Fermi liquid" description of the Kondo problem at low temperatures,J. Phys., Colloq. **37**,1(1976)],简化的讨论可以参考《Introduction to Many-Body Physics》一书的16.10节.

本章小结与进一步阅读

本章小结 Hubbard与Heisenberg模型是研究相互作用电子系统的基本模型;Luttinger液体所代表的一维电子系统具有非寻常的物理特性.

本章关键词 Hubbard模型;t-J模型;Heisenberg模型;价键固体;共振价键态;Holstein-Primakoff变换;Bogoliubov变换;自旋波;Jordan-Wigner变换;玻色化;Anderson杂质模型;Kondo杂质模型

进一步阅读 T.Giamarchi的《Quantum Physics in One Dimension》第一到第三章;P.Phillips的《Advanced Solid State Physics》第七,第八和第十章

附录

Dirac费米子与一维量子电动力学

利用左右手的场算符$\psi_L(x),\psi_R(x)$,一维费米子系统在费米能附近的有效哈密顿量$\hat{H}_0$ 可表示为

$$\hat{H}_0 = -iv_F \int dx(\hat{\psi}_R^\dagger \partial_x \hat{\psi}_R - \hat{\psi}_L^\dagger \partial_x \hat{\psi}_L). \tag{3.367}$$

如果引入旋量$\hat{\psi} = (\hat{\psi}_L, \hat{\psi}_R)^T$,我们可以把上述哈密顿量写成更紧凑的形式

$$\hat{H}_0 = \int dx \begin{pmatrix} \hat{\psi}_L^\dagger, & \hat{\psi}_R^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} iv_F\partial_x & m \\ m & -iv_F\partial_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\psi}_L \\ \hat{\psi}_R \end{pmatrix} = \int dx \hat{\psi}^\dagger (iv_F\tau^z\partial_x + m\tau^x)\hat{\psi}. \tag{3.368}$$

这里τ^x,τ^z是Pauli矩阵.此外,我们还添加了杂质散射对电子产生的背散射效应,这用非对角项$m(\hat{\psi}_L^\dagger\hat{\psi}_R + \hat{\psi}_R^\dagger\hat{\psi}_L)$描述.这样$\hat{\psi}$ 的运动方程是

$$\frac{d\hat{\psi}(t,x)}{dt} = \frac{1}{i}[\hat{\psi}(t,x), \hat{H}_0] = \frac{1}{i}(iv_F\tau^z\partial_x + m\tau^x)\hat{\psi}(t,x) \tag{3.369}$$

即

$$(i\partial_t - iv_F\tau^z\partial_x - m\tau^x)\hat{\psi}(t,x) = 0 \tag{3.370}$$

让我们对上式两边左乘Pauli矩阵τ^x可得

$$(i\tau^x\partial_t - iv_F\tau^x\tau^z\partial_x - m)\hat{\psi}(t,x) = 0 \tag{3.371}$$

若定义γ矩阵$\gamma^0 = \tau^x, \gamma^1 = -\tau^x\tau^z = i\tau^y$,那么它们满足Dirac方程所要求的关系(Clifford代数)$[\gamma^\mu,\gamma^\nu]_+ = g^{\mu,\nu}$,对这里的$1+1$维时空,$g^{00} = 1, g^{11} = -1, g^{01} = g^{10} = 0$.由此我们发现一维费米气体的低能物理可以用Dirac 方程描述:

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\hat{\psi} = 0 \tag{3.372}$$

这样,我们也称ψ是Dirac旋量.当然,还可以定义所谓的$\gamma^5 = \gamma^0\gamma^1 = -\tau^z$, 利用$\gamma^5$,我们可以把Dirac旋量投影到左手和右手场,即

$$P_L\hat{\psi} = \frac{1-\gamma^5}{2}\hat{\psi} = \begin{pmatrix} \hat{\psi}_L \\ 0 \end{pmatrix}, \quad P_R\hat{\psi} = \frac{1+\gamma^5}{2}\hat{\psi} = \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\psi}_R \end{pmatrix}. \tag{3.373}$$

对Dirac方程求厄密共轭可得

$$-i\partial_\mu\hat{\psi}^\dagger(\gamma^\mu)^\dagger - m\hat{\psi}^\dagger = 0 \Rightarrow -i\partial_0\hat{\psi}^\dagger(\gamma^0)^\dagger - i\partial_1\hat{\psi}^\dagger(\gamma^1)^\dagger - m\hat{\psi}^\dagger = 0 \tag{3.374}$$

利用$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, (\gamma^1)^\dagger = -\gamma^1$可得

$$-i\partial_0\hat{\psi}^\dagger\gamma^0 + i\partial_1\hat{\psi}^\dagger\gamma^1 - m\hat{\psi}^\dagger = 0 \tag{3.375}$$

两边右乘γ^0就得到共轭的Dirac方程

$$i\partial_\mu\hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu + m\hat{\bar{\psi}} = 0 \tag{3.376}$$

这里$\hat{\bar{\psi}} = \hat{\psi}^\dagger\gamma^0 = (\hat{\psi}_R, \hat{\psi}_L)$.在Dirac理论中,我们可以把系统的守恒流定义为

$$\hat{J}^\mu = \hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\hat{\psi} = (\hat{J}^0, \hat{J}^1), \quad \hat{J}^0 = \hat{\psi}_R^\dagger\hat{\psi}_R + \hat{\psi}_L^\dagger\hat{\psi}_L, \quad \hat{J}^1 = \hat{\psi}_R^\dagger\hat{\psi}_R + \hat{\psi}_L^\dagger\hat{\psi}_L \tag{3.377}$$

$\hat{J}^0$是左右费米子的总数,$\hat{J}^1$是左右费米子数的差别,可认为是从走边流到右边的'电流'.对Dirac方程左乘$\hat{\bar{\psi}}$,对共轭方程右乘$\hat{\psi}$可得

$$i\hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\partial_\mu\hat{\psi} = m\hat{\bar{\psi}}\hat{\psi}, \quad i\partial_\mu\hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\hat{\psi} = -m\hat{\bar{\psi}}\hat{\psi} \tag{3.378}$$

利用这两个关系,我们就可以证明下列方程成立

$$\partial_\mu\hat{J}^\mu = (\partial_\mu\hat{\bar{\psi}})\gamma^\mu\hat{\psi} + \hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\partial_\mu\hat{\psi} = im\hat{\bar{\psi}}\hat{\psi} - im\hat{\bar{\psi}}\hat{\psi} = 0 \tag{3.379}$$

这就是Dirac费米子的流守恒方程,记为$\partial_\mu\hat{J}^\mu = 0$.另一方面,我们定义所谓的轴矢流$\hat{J}^{\mu 5} = \hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\gamma^5\hat{\psi}$,则有$\partial_\mu\hat{J}^{\mu 5} = 2im\hat{\bar{\psi}}\gamma^5\hat{\psi}$,当$m = 0$ 时守恒.物理上,轴矢流守恒说明左手和右手费米子的数目各自守恒.

最后,当Dirac费米子与电磁场耦合时,系统的经典作用量是

$$S = \int dtdx\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi + e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi A_\mu - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{3.380}$$

这里e是电子电荷,A_μ是电磁规范场,在一维空间是$A_\mu = (\phi, -A^x)$,而$F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = F_{01}F^{01} + F_{10}F^{10} = -2(E_x)^2$.这样有

$$S = \int dtdx\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi + e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi A_\mu + \frac{1}{2}E_x^2. \tag{3.381}$$

利用作用量所对应的运动方程可以直接说明$\partial_\mu J^\mu = 0, \partial_\mu J^{\mu 5} = 0$.若采用路径积分形式,那么上述作用量描述了一维量子电动力学,也就是一维Dirac费米子与电磁场通过电荷e耦合的系统.如果我们利用Feynman图进行计算,会发现当考虑电磁场的耦合后,流守恒$\partial_\mu J^\mu = 0$ 依然成立.但是$J^{\mu 5}$所对应的轴矢流守恒被量子涨落所破坏,(例如费米子内线组成的三角图),在场论中,像这类在经典层次上守恒而量子层次上不守恒的现象称为量子反常(quantum anomaly).更技术化得说,

- 量子反常指的是作用量的对称性并不是配分函数中积分测度的对称性.这说明体系的作用量在对称性变换下不变但是配分函数的积分测度由于(场的)对称性变换而出现多余的因子.

这种反常在偶数维度都存在,对$3+1$维相当于把$\partial_\mu J^{\mu 5} = 0$修改为$\partial_\mu J^{\mu 5} = \frac{e^2}{(4\pi)^2}\varepsilon^{\mu\nu\lambda\sigma}F_{\mu\nu}F_{\lambda\sigma} = \frac{e^2}{2\pi^2}\vec{E}\cdot\vec{B}$. 而在一维的形式只能$\partial_\mu J^{\mu 5} = \frac{-e}{2\pi}\varepsilon^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = \frac{-e}{\pi}E_x$.物理上来说,非零电场的存在使得左右费米子的费米能出现差别导致左右

费米子数目不同因而轴矢流不守恒.[76]在场论中,轴矢流不守恒是手征对称性破缺(chiral symmetry breaking)的典型表现.

在很多物理问题中,我们的目标是对于给定的微观模型(紫外,UV)寻找其对应的长波有效理论(红外,IR)或者是反过来的逆问题,即给定的红外理论可以用什么样的紫外模型来实现.由于量子反常实际上具有重整化不变的特性,这意味着任何紫外模型中的反常肯定会在红外理论中以某种方式实现,这通常叫做反常匹配.

- 量子反常有时候比物质态更为基本,这是因为反常是体系Hilbert空间自由度和对称性如何作用其上的性质,独立于哈密顿量的具体选择.这样不同的物质态可以携带相同的反常.

在凝聚态物理中,与反常密切相关的例子是对称性保护拓扑态(symmetry-protected-state,SPT),其定义为在对称性G存在时所对应的拓扑非平凡态.SPT态可以用它们的边界态来表征,这些边界态的存在反映了体系的对称性G的量子反常.我们可以认为正是反常标记了体系的物质态.这个现象叫做anomaly inflow.

如果我们把反常定义为背景场(对应着对称性G)存在时边界态配分函数的变化,那么块体配分函数的变化需要抵消边界态的反常,这样整个系统可以保持G的对称性.因此,边界态不可能是平凡的,例如其可以是无能隙的,对称破缺的或者具有拓扑序.

有自旋费米子的Tomonaga模型

考虑有自旋费米的一维相互作用问题,其哈密顿量如下

$$\hat{H}=\sum_{k}\varepsilon_{k}\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}V_{q}\hat{c}^{\dagger}_{k+q\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{3.382}$$

对于自由粒子部分,在两个费米点附近线性化后的哈密顿量是

$$\hat{H}_{0}=\sum_{|k|<\Lambda,\sigma}v_{F}k(\hat{c}^{\dagger}_{Rk\sigma}\hat{c}_{Rk\sigma}-\hat{c}^{\dagger}_{Lk\sigma}\hat{c}_{Lk\sigma}) \tag{3.383}$$

注意到与无自旋情况相比,只不过多了自旋指标而已.仿照无自旋模型的处理,我们定义自旋依赖的密度算符,即有

$$\hat{\rho}_{\sigma}(x)=\hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(x)\hat{\psi}_{\sigma}(x)=\frac{1}{L}\sum_{k,q}e^{iqx}\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k+q\sigma}=\frac{1}{L}\sum_{q>0}(e^{iqx}\hat{\rho}_{q\sigma}+e^{-iqx}\hat{\rho}^{\dagger}_{q\sigma}) \tag{3.384}$$

注意我们忽略了均匀的密度部分ρ_{σ}.在两个费米点附近的密度算符近似为

$$\hat{\rho}^{\dagger}_{q\sigma}\simeq\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq\sigma}+\hat{\rho}_{Lq\sigma} \tag{3.385}$$

[76]简要的讨论可参考A.Zee书270 − 278页.详细的计算则参考Peskin书的19章或者Fradkin书的20章.除了通常的量子场论,引力也能出现反常.

并且对易关系近似为

$$[\hat{\rho}_{\alpha q\sigma}, \hat{\rho}^{\dagger}_{\alpha' q'\sigma'}] = \delta_{\alpha,\alpha'}\delta_{q,q'}\delta_{\sigma,\sigma'}\frac{L}{2\pi}q, \quad \alpha = R, L \tag{3.386}$$

相应的玻色子算符定义为

$$\hat{a}_{q\sigma} = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\hat{\rho}_{Rq\sigma}, \quad \hat{b}_{q\sigma} = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}}\hat{\rho}_{Lq\sigma} \tag{3.387}$$

这样自由粒子部分的哈密顿量可以用密度算符改写为

$$\hat{H}_0 = E_0 + \sum_{q>0,\sigma} v_F q(\hat{a}^{\dagger}_{q\sigma}\hat{a}_{q\sigma} + \hat{b}^{\dagger}_{q\sigma}\hat{b}_{q\sigma}) \tag{3.388}$$

接下来,对于相互作用部分,把它改写为密度-密度相互作用的形式:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int} &= \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} V_q \hat{c}^{\dagger}_{k+q\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \\
&= \sum_{q,\sigma,\sigma'} V_q \left(\sum_k \hat{c}^{\dagger}_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\right)\left(\sum_{k'} \hat{c}^{\dagger}_{k'-q\sigma}\hat{c}_{k'\sigma}\right) - \sum_{q,\sigma,\sigma'} V_q c^{\dagger}_{k+q\sigma}c_{k'\sigma'}\delta_{k,k'-q}\delta_{\sigma,\sigma'}
\end{aligned}$$

注意到第二项仅仅是移动化学势,那么这一项可以略去,则有

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int} &= \sum_{q,\sigma,\sigma'} V_q \hat{\rho}_{-q\sigma}\hat{\rho}_{q\sigma'} = \sum_{q>0,\sigma,\sigma'} (V_q \hat{\rho}^{\dagger}_{q\sigma}\hat{\rho}_{q\sigma'} + V_{-q}\hat{\rho}_{q\sigma}\hat{\rho}^{\dagger}_{q\sigma'}) \\
&\simeq \sum_{q,\sigma,\sigma'} \Big(V_q(\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq\sigma} + \hat{\rho}_{Lq\sigma})(\hat{\rho}_{Rq\sigma'} + \hat{\rho}^{\dagger}_{Lq\sigma'}) + V_{-q}(\hat{\rho}_{Rq\sigma} + \hat{\rho}^{\dagger}_{Lq\sigma})(\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq\sigma'} + \hat{\rho}_{Lq\sigma'})\Big) \\
&= \sum_{q,\sigma,\sigma'} [V_4(\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq\sigma}\hat{\rho}_{Rq\sigma'} + \hat{\rho}^{\dagger}_{Lq\sigma}\hat{\rho}_{Lq\sigma'}) + V_2(\hat{\rho}^{\dagger}_{Rq\sigma}\hat{\rho}_{Lq\sigma'} + \hat{\rho}^{\dagger}_{Lq\sigma}\hat{\rho}_{Rq\sigma'})]
\end{aligned} \tag{3.389}$$

结合自由粒子与相互作用部分,我们发现系统的哈密顿量可改写为

$$\hat{H} = \sum_{q>0,\sigma} v_F q(\hat{a}^{\dagger}_{q\sigma}\hat{a}_{q\sigma} + \hat{b}_{q\sigma}\hat{b}^{\dagger}_{q\sigma}) + \sum_{q>0,\sigma,\sigma'} \frac{|q|}{2\pi}[g_4(\hat{a}^{\dagger}_{q\sigma}\hat{a}_{q\sigma'} + \hat{b}^{\dagger}_{q\sigma}\hat{b}_{q\sigma'}) + g_2(\hat{a}_{q\sigma}\hat{b}_{q\sigma'} + \hat{b}^{\dagger}_{q\sigma}\hat{a}^{\dagger}_{q\sigma'})]$$

注意到相互作用部分中不同自旋的不同分支的玻色子互相耦合,对角化这部分,我们引入密度玻色子和自旋玻色子:

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{qc} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_{q\uparrow} + \hat{a}_{q\downarrow}) \\
\hat{a}_{qs} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_{q\uparrow} - \hat{a}_{q\downarrow}) \\
\hat{b}_{qc} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}_{q\uparrow} + \hat{b}_{q\downarrow}) \\
\hat{b}_{qs} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}_{q\uparrow} - \hat{b}_{q\downarrow})
\end{aligned} \tag{3.390}$$

那么哈密顿量是

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{q>0} v_F q(\hat{a}^\dagger_{qc}\hat{a}_{qc} + \hat{a}^\dagger_{qs}\hat{a}_{qs} + \hat{b}_{qc}\hat{b}^\dagger_{qc} + \hat{b}_{qs}\hat{b}^\dagger_{qs}) \\ &\quad + \sum_q \frac{q}{2\pi}[2g_4(\hat{a}_{qc}\hat{a}^\dagger_{qc} + \hat{b}^\dagger_{qc}\hat{b}_{qc}) + 2g_2(\hat{a}_{qc}\hat{b}_{qc} + \hat{b}^\dagger_{qc}\hat{a}^\dagger_{qc})]\end{aligned}$$

我们发现相互作用只影响电荷部分而不影响自旋部分的密度激发,整理上式可得

$$\begin{aligned}&\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_s \\ &\hat{H}_c = \sum_{q>0} v_F q(\hat{a}^\dagger_{qc}\hat{a}_{qc} + \hat{b}_{qc}\hat{b}^\dagger_{qc}) + \sum_q \frac{|q|}{2\pi}[2g_4(\hat{a}_{qc}\hat{a}^\dagger_{qc} + \hat{b}^\dagger_{qc}\hat{b}_{qc}) + 2g_2(\hat{a}_{qc}\hat{b}_{qc} + \hat{b}^\dagger_{qc}\hat{a}^\dagger_{qc})] \\ &\hat{H}_s = \sum_{q>0} v_F q(\hat{a}^\dagger_{qs}\hat{a}_{qs} + \hat{b}_{qs}\hat{b}^\dagger_{qs})\end{aligned} \tag{3.391}$$

利用Bogoliubov变换对角化第一个哈密顿量可得两个对角化的哈密顿,

$$\begin{aligned}&\hat{H}_c = \sum_q v_c q(\hat{\alpha}^\dagger_q\hat{\alpha}_q + \hat{\beta}^\dagger_q\hat{\beta}_q), \quad v_c = \sqrt{(v_F + g_4/\pi)^2 - (g_2/\pi)^2} \\ &\hat{H}_s = \sum_q v_s q(\hat{a}^\dagger_{qs}\hat{a}_{qs} + \hat{b}_{qs}\hat{b}^\dagger_{qs}), \quad v_s = v_F\end{aligned} \tag{3.392}$$

这里$\hat{H}_c$代表电荷部分的密度激发,简称电荷密度激发,而$\hat{H}_s$描述自旋密度的激发.

符号函数与阶跃函数

我们通常定义所谓符号函数sign(x)满足:

$$\text{sign}(x) = 1, \quad x > 0 \qquad\qquad \text{sign}(x) = -1, \quad x < 0 \tag{3.393}$$

此外阶跃函数$\theta(x)$定义为:

$$\theta(x) = 1, \quad x > 0 \qquad\qquad \theta(x) = 0, \quad x < 0 \tag{3.394}$$

因此这两个函数的联系是可用阶跃函数写出符号函数,即

$$\text{sign}(x) = \theta(x) - \theta(-x). \tag{3.395}$$

假设阶跃函数可以做傅里叶变换,那么有

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} C(k), \tag{3.396}$$

系数$C(k)$满足

$$C(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx}\theta(x) = \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{1 - e^{-ik\Lambda}}{ik}, \tag{3.397}$$

因此阶跃函数形式上等价于

$$\theta(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ikx}}{ik}-\lim_{\Lambda\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ik(x-\Lambda)}}{ik}, \tag{3.398}$$

因此符号函数具有如下积分形式

$$\mathrm{sign}(x)=\theta(x)-\theta(-x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ikx}-e^{-ikx}}{ik}-\lim_{\Lambda\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ik(x-\Lambda)}-e^{ik(-x-\Lambda)}}{ik}, \tag{3.399}$$

对于有限的x,上式右边积分的分子在$\Lambda\to\infty$下为零,这样符号函数仅由第一项决定,即有

$$\boxed{\mathrm{sign}(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ikx}-e^{-ikx}}{ik}=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk\frac{\sin kx}{k}}. \tag{3.400}$$

一维Heisenberg模型的Bethe ansatz解

在先前的讨论中,我们已经采用Bethe ansatz方法计算了一维δ势相互作用玻色子模型.这里,我们将采用同样的方法求解一维Heisenberg模型. [77]我们把模型重写为

$$H=J\sum_{j=1}^{N}(S_j^+S_{j+1}^-+S_j^-S_{j+1}^++2S_j^zS_{j+1}^z)-h\sum_{j=1}^{N}S_j^z \tag{3.401}$$

然后把铁磁态$|0\rangle=|\uparrow\uparrow...\uparrow\rangle$定义为参考态.这样有

$$H|0\rangle=\left(2JN\frac{1}{4}-h\frac{N}{2}\right)|0\rangle=E_0|0\rangle. \tag{3.402}$$

让我们考虑相对于参考态有M个自旋反转的态$|k_1,k_2...k_M\rangle$,这个态可以用不同格点上自旋反转的态叠加而成,[78]

$$|k_1,k_2...k_M\rangle=\sum_{x_1,x_2...x_M=1}^{M}\psi(x_1,x_2...x_M)S_{x_1}^-S_{x_2}^-...S_{x_M}^-|0\rangle \tag{3.403}$$

注意到每个格点自旋不可能反转两次,因此任意$x_i=x_j$时$\psi(x_1,x_2...x_M)=0$.

[77]主要参考杨文力等著的《可积模型方法及其应用》的第一章.更仔细和初等的考虑可以参考[Karbach,Müller,Introduction to the Bethe Ansatz I,arXiv:cond-mat/9809162;Karbach,Hu,Müller,Introduction to the Bethe Ansatz II,arXiv:cond-mat/9809163;Karbach,Hu,Müller,Introduction to the Bethe Ansatz III,arXiv:cond-mat/0008018]

[78]注意到$[H,\sum_j S_j^z]=0$,这说明总自旋的z分量S^z是守恒的,因此不同S^z的态彼此正交,这样我们可以直接考虑固定S^z的情况.在Bethe ansatz中等价于考虑固定数目的自旋反转M.

$N=1$情况:自旋波

让我们先考虑最简单的情况,也就是只有一个自旋反转($N=1$),此时波函数是

$$|k_1\rangle=\sum_{x_1=1}^{M}\psi(x_1)S_{x_1}^{-}|0\rangle=\sum_{x_1=1}^{M}\psi(x_1)|...\downarrow_{x_1}...\rangle. \tag{3.404}$$

把H作用于$|k_1\rangle$可得

$$\begin{aligned}H|k_1\rangle &= \sum_{x_1=1}^{M}\psi(x_1)[J\sum_{j=1}^{N}(S_j^+S_{j+1}^-|...\downarrow_{x_1}...\rangle+S_j^-S_{j+1}^+|...\downarrow_{x_i}...\rangle\\ &+ 2S_j^zS_{j+1}^z)|...\downarrow_{x_1}...\rangle-h\sum_{j=1}^{N}S_j^z|...\downarrow_{x_1}...\rangle\\ &= \sum_{x_1=1}^{M}\psi(x_1)J(|...\downarrow_{x_1+1}...\rangle+|...\downarrow_{x_i-1}...\rangle)\\ &+ 2J\frac{N-4}{4}|...\downarrow_{x_i}...\rangle-h\frac{N-2}{2}|...\downarrow_{x_i}...\rangle]\end{aligned} \tag{3.405}$$

移动$|...\downarrow_{x_1+1}...\rangle,|...\downarrow_{x_i-1}...\rangle$中的$x_i$可把上式化为

$$H|k_1\rangle = \sum_{x_1=1}^{M}[J(\psi(x_1-1)+\psi(x_1+1))+(E_0-2J+h)\psi(x_1)]|...\downarrow_{x_i}...\rangle$$

这样本征方程就是

$$\sum_{x_1=1}^{M}[J(\psi(x_1-1)+\psi(x_1+1))+(E_0-2J+h)\psi(x_1)]|...\downarrow_{x_i}...\rangle=\sum_{x_1=1}^{M}E\psi(x_1)|...\downarrow_{x_i}...\rangle$$

对比左右两边有

$$J(\psi(x_1-1)+\psi(x_1+1))+(E_0-2J+h)\psi(x_1)=E\psi(x_1) \tag{3.406}$$

设解为$\psi(x_1)=e^{ik_1x_1}$,那么我们发现

$$J(e^{ik_1(x_1-1)}+e^{ik_1(x_1+1)})+(E_0-2J+h)e^{ik_1x_1}=Ee^{ik_1x_1} \tag{3.407}$$

这样本征能量是

$$E=2J(\cos k_1-1)+E_0+h. \tag{3.408}$$

动量k_1由周期边界条件$\psi(x_1)=\psi(x_1+N)$定出,即$k_1=\frac{2\pi}{N}I_1,I_1=0,\pm1,\pm2....$可以看到$\psi(x_1)$描述的是通常的铁磁自旋波激发,其激发能是$E-E_0=2J(\cos k_1-1)+h$.

$N=2$情况

让我们考虑有两个自旋反转的情况,其波函数是

$$|k_1,k_2\rangle=\sum_{x_1,x_2=1}^{M}\psi(x_1,x_2)S_{x_1}^{-}S_{x_2}^{-}|0\rangle=\sum_{x_1,x_2=1}^{M}\psi(x_1,x_2)|...\downarrow_{x_1}...\downarrow_{x_2}...\rangle \tag{3.409}$$

这里我们假设$x_1<x_2$以简化讨论.由于H中的横向自旋交换涉及最近邻自旋,那么上述波函数实际上分为两类,即$x_2>x_1+1$:

$$\sum_{x_1,x_2>x_1+1}^{M}\psi(x_1,x_2)|...\downarrow_{x_1}...\downarrow_{x_2}...\rangle \tag{3.410}$$

以及$x_2=x_1+1$

$$\sum_{x_1}^{M}\psi(x_1,x_2=x_1+1)|...\downarrow_{x_1}\downarrow_{x_1+1}...\rangle. \tag{3.411}$$

对于第一种情况,代入本征方程有

$$\begin{aligned}&\sum_{x_1,x_2>x_1+1}^{M}\psi(x_1,x_2)[J|...\downarrow_{x_1-1}...\downarrow_{x_2}...\rangle+J|...\downarrow_{x_i+1}...\downarrow_{x_2}...\rangle+J|...\downarrow_{x_1}...\downarrow_{x_2-1}...\rangle+J|...\downarrow_{x_1}...\downarrow_{x_2+1}...\\&+\quad(E_0-4J+2h-E)|...\downarrow_{x_1}...\downarrow_{x_2}...\rangle]=0\end{aligned} \tag{3.412}$$

整理可得

$$\begin{aligned}&\sum_{x_1,x_2>x_1+1}^{M}[J(\psi(x_1+1,x_2)+\psi(x_1-1,x_2)+\psi(x_1,x_2-1)+\psi(x_1,x_2+1))\\&+\quad(E_0-4J+2h-E)\psi(x_1,x_2)]|...\downarrow_{x_1}...\downarrow_{x_2}...\rangle=0\end{aligned}$$

让我们采用Bethe ansatz型波函数

$$\psi(x_1,x_2)=A_{12}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)}+A_{21}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} \tag{3.413}$$

把这个波函数代入本征方程,我们发现

$$[J(e^{ik_1}+e^{-ik_1})+J(e^{ik_2}+e^{-ik_2})+(E_0-4J+2h-E)](A_{12}+A_{21})=0$$

也就是有

$$E-E_0=2J(\cos k_1+\cos k_2-2)+2h. \tag{3.414}$$

另一方面,波函数的系数A_{12},A_{21}尚未决定.让我们考虑$x_2=x_1+1$的情况,此时代入本征方程有

$$\begin{aligned}&\sum_{x_1,x_2=x_1+1}^{M}\psi(x_1,x_2=x_1+1)[J(|...\downarrow_{x_1-1}\downarrow_{x_1+1}...\rangle+|...\downarrow_{x_1}\downarrow_{x_1+2}...\rangle)\\&+\quad(E_0-4J+2h-E)|...\downarrow_{x_1}\downarrow_{x_1+1}...\rangle]=0.\end{aligned}$$

移动x_1, x_2可得

$$J(\psi(x_1, x_1+2)+\psi(x_1-1, x_1+1))+(E_0-4J+2h-E)\psi(x_1, x_1+1)=0$$

代入波函数具体形式有

$$\begin{aligned} & JA_{12}e^{i2k_2}+JA_{21}e^{i2k_1}+JA_{12}e^{-ik_1+ik_2}+JA_{21}e^{-ik_2+ik_1}+(E_0-4J+2h-E)A_{12}e^{ik_2} \\ + \quad & (E_0-4J+2h-E)A_{21}e^{ik_1}=0 \end{aligned} \tag{3.415}$$

整理可得

$$\frac{A_{21}}{A_{12}}=-\frac{e^{i(k_1+k_2)}+1-2e^{ik_2}}{e^{i(k_1+k_2)}+1-2e^{ik_1}}\equiv S_{k_1,k_2} \tag{3.416}$$

这里S_{k_1,k_2}是二体散射矩阵.

一般N情况

把H作用到$|k_1, k_2...k_M\rangle$可得,

$$\begin{aligned} & J\sum_{j=1}^{M}\sum_{\delta=\pm1}\psi(x_1...x_j+\delta...x_M)+(h-2J)M\psi(x_1...x_M)+2J\sum_{i<j}\psi(x_1...x_M)[\delta_{x_i,x_j+1}+\delta_{x_i,x_j-1}] \\ = \quad & (E-E_0)\psi(x_1...x_M) \end{aligned} \tag{3.417}$$

考虑Bethe ansatz型的波函数,

$$\psi(x_1...x_M)=\sum_{P,Q}A_P e^{i\sum_{j=1}^{M}k_{P_j}x_{Q_j}}\theta(x_{Q_1}<x_{Q_2}<...<x_{Q_M}) \tag{3.418}$$

为了简化讨论,可以考虑一个具体的排列$x_1<x_2<...<x_M$,这样上式可简化为

$$\psi(x_1...x_M)=\sum_{P}A_P e^{i\sum_{j=1}^{M}k_{P_j}x_j} \tag{3.419}$$

把这个代入本征方程可知当任意x_i, x_j不相邻时,

$$E-E_0=2J\sum_{j=1}^{M}(\cos k_j-1)+Mh. \tag{3.420}$$

而x_i与x_{i+1}相邻($x_{i+1}=x_i+1$)而与其他不相邻时有

$$\psi(...x_i-1, x_i+1...)+\psi(...x_i, x_i+2...)-2\psi(...x_i, x_i+1...)=2(\cos k_{P_i}+\cos k_{P_{i+1}})\psi(...x_i, x_i+1...)$$

代入Bethe ansatz波函数有

$$\frac{A_{P_1...P_{i+1}P_i...P_M}}{A_{P_1...P_iP_{i+1}...P_M}}=-\frac{e^{i(k_i+k_{i+1})}+1-2e^{ik_{P_{i+1}}}}{e^{i(k_i+k_{i+1})}+1-2e^{ik_{P_i}}}\equiv S_{k_{P_i},k_{P_{i+1}}} \tag{3.421}$$

再利用周期边界条件$\psi(...x_j+N...)=\psi(...x_j...)$可得

$$A_{P_1...P_M}=A_{P_2...P_MP_1}e^{ik_{P_1}N}. \tag{3.422}$$

结合上述两个关系可知

$$e^{ik_{P_1}N}=\frac{A_{P_1...P_M}}{A_{P_2...P_MP_1}}=\frac{A_{P_1...P_M}}{A_{P_2P_1...P_M}}\frac{A_{P_2P_1...P_M}}{A_{P_2P_3P_1...P_M}}...\frac{A_{P_2...P_1P_M}}{A_{P_2...P_MP_1}} \tag{3.423}$$

既然上述结果与具体排列P无关,我们可以设$P_1=j$,那么有

$$e^{ik_jN}=\prod_{l\neq j}^{M}S_{jl}^{-1},\quad S_{jl}=S_{k_j,k_l} \tag{3.424}$$

这就是Bethe ansatz方程.把e^{ik_j}参数化为$e^{ik_j}=\frac{\lambda_j-i/2}{\lambda_j+i/2}$,那么

$$S_{ij}=\frac{\lambda_i-\lambda_j+i}{\lambda_i-\lambda_j-i} \tag{3.425}$$

这样参数化的Bethe ansatz方程和本征能量可写成

$$\left(\frac{\lambda_j-i/2}{\lambda_j+i/2}\right)^N=-\prod_{l=1}^{M}\frac{\lambda_j-\lambda_l-i}{\lambda_j-\lambda_l+i} \tag{3.426}$$

$$E(\lambda_1...\lambda_M)=-\sum_{j=1}^{M}\left(\frac{J}{\lambda_j^2+1/4}-h\right)+E_0. \tag{3.427}$$

在进一步讨论之前,我们注意到若$\{\lambda_1...\lambda_M\}$是Bethe ansatz方程的解,那么$\lambda_j$都不相等.对参数化的Bethe ansatz方程取对数可得,

$$\theta_1(\lambda_j)=\frac{2\pi I_j}{N}+\frac{1}{N}\sum_{l=1}^{M}\theta_2(\lambda_j-\lambda_l) \tag{3.428}$$

这里$\theta_n(x)=2\arctan(2x/n)$,$I_j$取整数($N-M$为奇数)或半整数($N-M$为偶数).由于$\lambda_j$两两不相等,因此$I_j$也都不相等.注意到$k_j=\theta_1(\lambda_j)$,$2\pi I_j/N$是无相互作用时自旋波激发的波矢$k_j$的量子化取值,因此相互作用系统的$k_j$与自由系统一一对应.让我们定义

$$\begin{aligned}Z(\lambda)&=\frac{1}{2\pi}\left[\theta_1(\lambda)-\frac{1}{N}\sum_{l=1}^{M}\theta_2(\lambda-\lambda_l)\right]\\ \sigma(\lambda)&=\frac{dZ(\lambda)}{d\lambda}.\end{aligned} \tag{3.429}$$

这里$Z(\lambda_j)=I_j/N$.在热力学极限下,$\sigma(\lambda)$相当于反转自旋在λ点上的密度,

$$\sigma(\lambda)=a_1(\lambda)-\int_{-\Lambda}^{\Lambda}d\mu\sigma(\mu)a_2(\lambda-\mu),\quad a_n(\lambda)=\frac{1}{2\pi}\frac{n}{\lambda^2+n^2/4} \tag{3.430}$$

当$h=0$时,令$\Lambda\to\infty$,那么$a_n(\lambda)$的傅里叶变换是

$$\tilde{a}_n(\omega)=e^{-\frac{n}{2}|\omega|} \tag{3.431}$$

这样$\sigma(\lambda)$的傅里叶变换是

$$\tilde{\sigma}(\omega)=\frac{\tilde{a}_1(\omega)}{1+\tilde{a}_2(\omega)}=\frac{1}{2\cosh\frac{\omega}{2}}. \tag{3.432}$$

因此,λ的基态分布为

$$\sigma(\lambda)=\frac{1}{2\cosh(\pi\lambda)}. \tag{3.433}$$

这样基态的自旋反转数密度为

$$\frac{M}{N}=\int d\lambda\sigma(\lambda)=\tilde{\sigma}(0)=1/2 \tag{3.434}$$

这说明$N/2-M=0$,也就是说$h=0$时没有自发磁化.同时热力学极限下的基态能量密度为,

$$\begin{aligned} E/N &= -2\pi J\int d\lambda a_1(\lambda)\sigma(\lambda)+E_0/N=-J\int d\omega\tilde{a}_1(\omega)\tilde{\sigma}(\omega)+J/2 \\ &= \left(\frac{1}{2}-2\ln 2\right)J \end{aligned} \tag{3.435}$$

我们发现反铁磁Heisenberg模型的基态是非磁性的顺磁态,其能量比Néel反铁磁态更低($E_{AF}/N=-J/2$).

- 基态之上的最低激发的能量是$\varepsilon(\lambda)=\frac{\pi J}{\cosh(\pi\lambda)}$,动量为$q(\lambda)=\arctan(\sinh(\pi\lambda))$,这样就有$\varepsilon(q)=\pi J\cos(q)$,$q\in[-\pi/2,\pi/2]$. 在物理上,这种激发代表自旋为1/2的自旋子(spinon),对应一类称为扭结(kink)的拓扑孤子.传统的理解认为自旋子是反铁磁态之间的domain-wall,但更加真实的图像是自旋子可以看作是价键固体态中传播的$S=1/2$粒子.[79](如图3.22)
- 一个自旋反转激发可看作两个自旋子激发,其能量为$\varepsilon(q_1)+\varepsilon(q_2)$,总自旋为一.
- 另一类激发是所谓的弦激发,其代表非磁性的自旋单重态激发.

[79][Kulka et al.,An intuitive understanding of the spin excitations of a 1D antiferromagnet,arXiv:2303.02276]

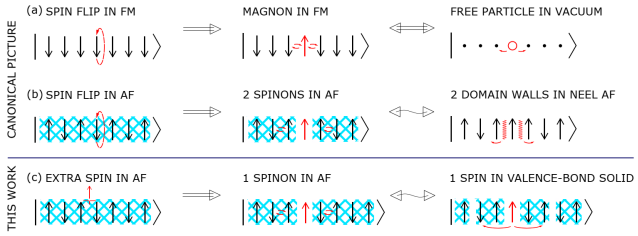


Figure 3.22: (a)铁磁态(FM)中的自旋翻转在体系中传播成为磁振子(magnon),其可理解为基态之上自由运动的粒子. (b)一维反铁磁体中自旋反转产生两个自旋子,其理解为Neel反铁磁态中的两个domain-wall. (c)在一维反铁磁体中添加一个额外$S=1/2$自旋导致一个自旋子,其看作价键固体(valence-bond solid)中传播的自旋.

第三章习题

练习1:三角与Kagome晶格

Q1:考虑定义在三角晶格上的自由费米子模型$\hat{H}_0=-t\sum_{\langle j,m\rangle}\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_m$,其仅具有最近邻格点间的跃迁$t$.试利用傅里叶变换计算电子的色散关系并指出电子密度$n=0.5$时费米面的位置.

Q2:考虑Q1中的模型,但现在把它放在Kagome晶格上,仍然只有最近邻格点间的跃迁.试计算电子的色散关系.(提示:Kagome晶格具有三子格结构,色散关系应有三支)

练习2:居里定律

Q1:考虑单个$S=1/2$自旋在外场下的哈密顿量$\hat{H}=-\hat{\sigma}^z B$,计算温度依赖磁化率.

Q2:计算该系统的热容.

习题3:XXZ模型

Q1:$S=1/2$自旋的XXZ模型定义如下:

$$\hat{H}_{XXZ}=-J\sum_j[\hat{S}_j^x\hat{S}_{j+1}^x+\hat{S}_j^y\hat{S}_{j+1}^y]-J_z\sum_j\hat{S}_j^z\hat{S}_{j+1}^z \tag{3.436}$$

利用Jordan-Wigner变换写出该模型的费米子表示形式.

Q2:假设Q1中的模型只有三个格点,(考虑开边界条件也就是1,3自旋无耦合)试写出其所有本征值和本征态.(提示:以$|S_1^z,S_2^z,S_3^z\rangle$为基矢,哈密顿量可以写

成8×8矩阵,注意到z方向总自旋$\hat{S}^z_{tot}=\hat{S}^z_1+\hat{S}^z_2+\hat{S}^z_3$与哈密顿量对易,那么$8\times8$矩阵可分块对角化为两个$1\times1$和两个$3\times3$矩阵的直和.)

Q3:假设Q1中的模型满足周期边界条件,计算$J_z=0$时费米子的色散关系并写出相应的基态波函数.

Q4:利用自旋波理论解释一维$S=1/2$反铁磁Heisenberg模型的近似基态不是Neel反铁磁态.(提示:考虑子格磁化是否发散)

习题4:无自旋Tomonaga模型热容

Q1:试计算无自旋Tomonaga模型的低温热容.(提示:采用玻色子表示的形式)

Q2:如果我们坚持采用费米子形式来计算热容是否可行,若不可行请说明理由.

习题5:Kondo模型的平均场理论

Q1:考虑Kondo杂质模型

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+J\sum_{kk'}\left(\hat{S}^z(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})+\hat{S}^+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+\hat{S}^-\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}\right) \tag{3.437}$$

设局域自旋可以用Schwinger(Abrikosov)费米子来表示:

$$\hat{S}^+=\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\downarrow,\quad \hat{S}^-=\hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\uparrow,\quad \hat{S}^z=\frac{1}{2}(\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\uparrow-\hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\downarrow) \tag{3.438}$$

证明哈密顿量可以改写为

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+J\sum_{kk'}\frac{1}{2}(\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\uparrow-\hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\downarrow)(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})-J\left(\sum_{k'}\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{c}_{k'\uparrow}\right)\left(\sum_k\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{f}_\downarrow\right)-J\left(\sum_{k'}\hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{c}_{k'\downarrow}\right) \tag{3.439}$$

实际上,Schwinger费米子表示需要附加上约束条件$\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\uparrow+\hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\downarrow=1$,这在平均场层次上可以通过在$\hat{H}$中计入拉格朗日乘子项$\lambda(\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\uparrow+\hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\downarrow-1)$来实现.当然,对于关于$\varepsilon_k=0$对称的传导电子能带,平均场下$\lambda=0$因而可以忽略约束项的作用.

Q2:设平均场序参量$V=-\sum_k\langle\hat{f}_\sigma\hat{c}_{k\sigma}\rangle=-\langle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma\rangle$,利用平均场近似证明哈密顿可近似为(扔掉纵向部分$J\sum_{kk'}\frac{1}{2}(\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\uparrow-\hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\downarrow)(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})$)

$$\hat{H}_{MF}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+JV\sum_{k\sigma}(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma})+2JV^2. \tag{3.440}$$

Q3:由Q2的平均场哈密顿量可知Green函数$\langle\langle\hat{f}_\sigma|\hat{f}^\dagger_\sigma\rangle\rangle_\omega=\frac{1}{\omega-\sum_k\frac{V^2J^2}{\omega-\varepsilon_k}}\simeq\frac{1}{\omega+i\Delta}$($\Delta=\pi\rho_0V^2J^2$, ρ_0是传导电子费米能处的态密度)而$\langle\langle\hat{c}_{k\sigma}|\hat{f}^\sigma\rangle\rangle=\frac{JV}{\omega-\varepsilon_k+i0^+}\langle\langle\hat{f}_\sigma|\hat{f}^\dagger_\sigma\rangle\rangle_\omega$,利用推迟Green函数的谱定理$\langle\hat{A}\hat{B}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_F(\omega)\frac{-1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle\hat{B}|\hat{A}\rangle\rangle_\omega$证明

$$\sum_k\langle\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_F(\omega)\frac{JV\rho_0\omega}{\omega^2+\Delta^2}. \tag{3.441}$$

(提示:利用$\sum_k \frac{1}{\omega-\varepsilon_k+i0^+}=-i\pi\rho_0$)

Q4:由Hellmann-Feynman定理可知$\frac{\partial\langle\hat{H}_{MF}\rangle}{\partial V}=\left\langle\frac{\partial\hat{H}_{MF}}{\partial V}\right\rangle=4J(\sum_k\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{c}_{k\sigma}\rangle+V)$,而体系的稳定性要求$\frac{\partial\langle\hat{H}_{MF}\rangle}{\partial V}=0$,因此有$\sum_k\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{c}_{k\sigma}\rangle=-V$.利用Q3的结果证明零温极限下

$$T_K\sim\Delta=De^{-\frac{1}{J\rho_0}} \tag{3.442}$$

这个能量尺度就是所谓的Kondo温度.(提示:积分下限可取为传导电子的能带半宽D并且考虑$D\gg\Delta$的极限)这样我们采用平均场方法[80]就得到了Kondo杂质问题中最重要的能量尺度,也就是Kondo温度T_K.当$T\ll T_K$时,系统的物性可用上面的平均场理论理解,此时传导电子相当于和一个非磁性的等效杂质弹性散射,其自然可用费米液体理论描述.

[80]历史上又叫做大N平均场或者辅助玻色子平均场,最早由Anderson建议在凝聚态物理中使用并首先用到求解Kondo杂质问题.

Bibliography

[1] Piers Coleman, Introduction to Many-Body Physics, 第四章,第十章

[2] Patrick Fazekas, Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism, 第三–六章

[3] P. W. Anderson, P. A. Lee, M. Randeria, T. M. Rice, N. Trivedi and F. C. Zhang, The physics behind high-temperature superconducting cuprates: the 'plain vanilla' version of RVB, J. Phys.: Condens. Matter **16**, R755 (2004).

[4] P. A. Lee, N. Nagaos and X.-G. Wen, Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).

[5] Alexander Altland and Ben Simons, Condensed Matter Field Theory Modern, 第二章,第四章

[6] Thierry Giamarchi, Quantum Physics in One Dimension, 第三章

[7] A. C. Hewson, The Kondo Problem to Heavy Fermions.

Chapter 4

费米液体:Landau的探险



Figure 4.1: Lev Davidovich Landau(1908 – 1968).Landau因提出凝聚态物质的开创性理论,尤其是液氦荣获1962年诺贝尔物理学奖.

Landau与费米液体:Landau十诫之一

在固体物理中,我们假定电子-电子相互作用并不明显影响电子的能带运动,换句话说,利用独立电子近似讨论能带中的电子.然而,真实材料中电子的相互作用总是存在,那么我们首先估计电子的动能与Coulomb 势的相对大小.

电子的动能:

$$T \propto \frac{p^2}{2m} \propto mv_F^2 \propto 10^{-31} \times (10^6)^2 J = 10^{-19} J \tag{4.1}$$

电子的势能:

$$V \propto \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{a} \propto 10^{10} \times \frac{(10^{-19})^2}{10^{-9}} = 10^{-19} J \tag{4.2}$$

显然,

$$T \approx V \propto 1eV \approx 10000K \tag{4.3}$$

表观而言电子的动能与势能相当,相互作用是不可忽略的.然而,Lev Landau(朗道)在观察电子系统之后断言相互作用可以等效忽略,这就是费米液体理论.可以说,Landau的费米液体理论是关于相互作用费米子系统的一个猜测性的基本理论,其广泛适用于从日常所见的金属到原子核和夸克汤甚至是遥远的恒星.在具体讨论费米液体理论之前,我们先介绍它的提出者,即Lev Landau这位伟大物理学家.

Lev Davidovich Landau(1908-1968)生于俄国石油城巴库的一个工程师家庭,是苏联伟大的理论物理学家,因发展液氦的超流理论而获得1962年诺贝尔物理学奖.他的主要科研成果包括量子力学(原子核理论)中的密度矩阵理论,抗磁性的量子理论(即Landau抗磁性),He−4超流理论,二级相变理论,超导电性的Ginzburg–Landau 理论,费米液体理论,等离子体物理中的Landau阻尼,量子电动力学中的Landau极点(莫斯科之零),中微子的二分量理论以及S矩阵奇异性



Figure 4.2: 现代凝聚态物理学根植于Landau的两个伟大想法,即费米液体和对称性破缺.

的Landau方程.这十项成果也被称为Landau十诫.此外,关于磁性的宏观动力学行为的Landau-Lifshitz-Gilbert方程以及湍流的Landau-Hopf理论也是Landau 的重要科研成果.

对于凝聚态物理这个学科而言,Landau的费米液体和对称性破缺(二级相变)理论事实上早已成为该学科的基石.任何超越这两个基本理论的进展都是人们关注的核心.虽然PW Anderson被称为凝聚态物理之父,但Landau对凝聚态物理学的贡献与影响并不比Anderson低,只不过Landau已是全能理论物理学家.[1]

理论物理教程与其他

这一部分主要参考了郝柏林在朗道诞辰100年时所撰写的纪念文章《朗道百年》.Landau推崇的理论物理的思维方法和解决问题的方式.他明确区分技术问题和理论物理,把只谈技术的人从讨论班的讲台上撵下去.他厌恶并列各 种因素,不突出物理关键的理论,把后者称为消防队长的基本公式(火灾原因等于电线短路加煤气泄漏加小孩玩火...).在1938年出版的《统计物理学》第一版序言中说:本书不讨论所谓液体理论,这些理论通常包含足够多的参数,可以把任何不十分野蛮的实验弄得同理论一致.

当然Landau主编的十卷本《理论物理教程》亦是对当代理论物理研究者影响深远,就像《费曼物理讲义》对大众物理爱好者那样. 《理论物理教程》从开始酝酿到Lifshitz在Landau身后坚持完成计划,前后历时40多年.这是一部空前而且很可能绝后的巨著. 按Landau的设想,这套书用统一的理论物理风格,描述了一个理论物理工作者应当具备的基础知识.不论今后在哪个方向发展,全面掌握理论物理的基础都是必要的.书中除了正文的系统论述,还有大量习题,许多习题本身就曾是研究成果.按照Lifshitz的最后筹划,全书包括以下10卷,俄文版总量超过4600页:

[1]Landau自称

1. 《力学》
2. 《场论》
3. 《量子力学(非相对论部分)》
4. 《量子电动力学》
5. 《统计物理学I》
6. 《流体力学》
7. 《弹性理论》
8. 《连续介质电动力学》
9. 《统计物理学II凝聚态理论》
10. 《物理动理学》

这十卷本目前都有中文版本并由高等教育出版社出版.

在哈尔科夫大学工作期间,24岁的朗道为希望追随他工作的研究生们制定了理论物理最低标准,即后来有人称为Landau势垒的一套考试.按照以后规范化了的要求,最低标准由一门数学和八门理论物理面试组成,后八门是理论力学,经典场论包括狭义和广义相对论,统计物理,非相对论量子力学,连续介质电动力学,物理动理学,连续介质流体力学和弹性力学,量子场论.考试中注重解决具体问题的能力,而不是抽象的理论框架.朗道有一次对年轻学生说,有准备的人应能在三个月里通过最低标准,如果需做准备也应能在一年内完成.Landau的许多自立门户的学生,也曾先后按最低标准取录学生.其实,对于有志于理论物理研究的俄国学生,最低标准谈不上是个势垒,他们通常在大学本科就开始闯关.[2]

最初Landau自己主持每次考试,后来由他的教授级的助手们分担大部课程,但第一门数学和最后一门量子场论总是由朗道本人出面.朗道备有一个笔记本,他亲自记录下最终通过考试的人名和年份.从1933年到1961年底,总共有43个名字记录在案.据不完全统计,这43人中至少有18人后来成为苏联或加盟共和国科学院院士或通讯院士,有一位获得诺贝尔物理学奖.名单中唯一的非苏联公民是1935年在哈尔科夫通过考试的匈牙利人Tisza,他比朗道大一岁,1941年移居美国,在麻省理工学院执教到退休,现仍健在.还有少数人在通过势垒之后,精疲力尽,心力交瘁,从此销声匿迹.

Landau喜欢对物理学家,科学文章,乃至女性的美丽按对数尺度打分,也就是著名的Landau对数坐标.第一流物理学家的贡献比第二 流多十倍,第二流比第三流多十倍.在这个标尺上,只有Einstein独自处于第半流的特殊地位.[3]Landau最初

[2]由此看来,我们的物理研究生考试以及博士资格考试还是过于简单和肤浅了.
[3]猜一猜牛顿是第几流?

把自己归入第二流半,据说直到1950年代初,同Ginzburg写完关于超导的Landau-Ginzburg方程的论文后,他把稿子往桌上一扔,叹道:终于爬到了第二流物理学家的位置.

Landau还用数学符号对理论物理学家分类:拉普拉斯算子Δ代表头脑尖又坐得住者,如Einstein;达兰贝尔算子□代表头脑笨但坐得住者,如莫斯科大学的某些教授;他本人由◊描述,头脑虽尖但坐不住.最后,∇代表头脑笨又坐不住的人,例如Ivanenko(Landau在列宁格勒和哈尔科夫时的同学和同事.自1943年以后一直是莫斯科大学教授).

最后,Landau是一个爱国者,曾经出色完成过各种国防任务,毕生致力于提高苏联的理论物理水平和培养理论物理人才.第二次世界大战期间,Landau所在的物理问题研究所撤退到后方.(类似于抗战时期清北浙大各校的内迁)Landau间接(通过为过去的学生出主意)和直接地参与了某些国防任务的研究.他本人在被问及时,往往神秘地一笑了之,但是,从1944年初版的《连续介质力学》一书中,有许多一般物理教科书中不大提及的内容,特别是燃烧,起爆,爆轰波传播,冲击波与固体碰撞等内容,可以窥见他在战争年代科学兴趣的拓展.1945年12月18日,全面领导核武器研制的Kurchatov(库尔恰托夫)院士写信给苏共中央专门委员会负责人贝利亚(KGB头目),请求让我国最伟大的理论物理学家Landau参加领导与原子弹有关的理论工作.在Kurchatov的坚持下,翌年2月此项提议被批准.Landau和他的理论组根据美国最初的实验数据和苏联自己早期实验结果,推导了原子弹的能量有效系数公式.此式曾经沿用多年.1949年10月29日,苏联最高苏维埃决定为研制原子弹的808位有功人员颁发列宁勋章,其中包括Landau.1954年,Landau被授予苏联社会主义劳动英雄称号.

Landau虽然可以称为天才,但他绝未独善其身,而是团结和教育了大批理论青年,形成了名副其实的Landau 学派.同一时期在苏联还有团结在Tamm(塔姆),Bogoliubov(玻戈留博夫)等人周围的理论团队,他们的竞争和合作使得苏联理论物理学称雄世界数十年.在理论物理这样的精确科学领域,不会产生科学观点各异的学派,他们的差别在于个人风格和教育治学之道的不同,这种学术多样性的出现有其历史和当代的原因.就历史而言,沙皇俄国的数学和物理已经相当发展,出现过国际知名的学者.Landau,Tamm 和Bogoliubov 都曾受到前辈的提携.苏联的科学领导部门从来没有以一刀切的方式干预基础科学研究,更没有用经济杠杆来贯彻官员们的意志:物理问题研究所是预算不受限制的单位,它的所长显然享有重要人事的决定权.苏联科学院研究所的工作时间从未受到政治运动冲击,Landau每星期四上午11 点的讨论班,从1930 年代到1968年,没有改过日期.Landau在列宁格勒大学时是少年三剑客之一,另两人是Ivanenko和Gamow(伽莫夫),评点相对论,切磋量子化,这三位本科生当时就颇引人瞩目.其中Gamow的科学天份或许并不逊于Landau,他在1933年趁出国参加会议而滞留于外,1940年成为美国公民,身边已经不可能团聚大批有为青年.他和Landau同年辞世,盖棺而论,其差别则明矣,爱国心显然是科学家的重要品格.

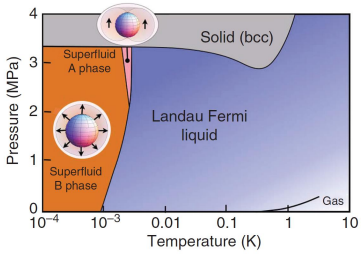


Figure 4.3: He-3的温度压力相图.摘自P.Coleman的量子多体物理教科书[1]

1962年1月7日,Landau遭遇车祸,他在当年被授予诺贝尔物理学奖,并在多方救治之下又存活了6 年,于1968 年4月1日去世.在Landau去世后,著名苏联物理学家Khalatnikov(卡拉特尼科夫)和其他Landau学派成员在六十年代末创办了朗道理论物理研究所.[4]

动机:He-3流体

历史上导致Landau提出费米液体理论的动机来自于费米子组成的He−3流体.[5]图4.3给出了He−3的温度压力相图,低温(mK温度量级)常压下He−3显示超流性,并且超流态可区分为A, B两个相.这里A, B相分别以相关理论提出者的名字命名,即P.Anderson和R.Balian.[6]保持低温增加压力可使He−3成为固体.而升高温度会使He−3成为正常流体.对于正常态的He−3流体,其特性是:

1. 不存在晶体结构,因而没有声子的干扰;

2. He−3原子是中性的,没有长程的库伦相互作用,剩余相互作用相对短程;

此外实验发现对于正常流体态的He−3,其有效质量是原子质量的2.8倍,即$m^* = 2.8m$,其有效磁矩是原子磁矩的3.3倍,即$(g^*)^2 = 3.3(g)^2$.

- 为了解释实验上He−3流体的这些性质,Landau创造了费米液体理论(Fermi liquid theory) 并由其学派以及欧洲和美国研究者例如Luttinger和Nozières发展完善.

直到现在,关于He−3的微观理论仍然没有定论,在80年前的Landau年代,基本上不可能构造其微观模型,因此Landau 从唯象角度出发建立费米液体几乎是唯一

[4]朗道研究所后来也培养了以Polyakov,Kiteav为代表的新一代理论物理大师.

[5]He-3原子包含两个质子,一个中子以及填满第一壳层的两个电子,因此是费米子,而它的同位素He−4的原子核由两个质子和两个中子构成,因此是玻色子

[6]David Lee(1931−),Douglas Osheroff(1945−)和Robert Richardson(1937 − 2013)因实验上发现He−3超流荣获1996年诺贝尔物理学奖.

的选择.在建立唯象理论成功之后,Landau和其学生从微观的弱相互作用费米气体模型出发利用量子场论的Feynman图形技术说明了费米液体态在自洽微扰论意义下成立.在铁幕的另一边,Luttinger等通过分析无穷阶微扰论进一步研究了费米液体的特性,例如指出了费米面包围体积与粒子数有直接关系(Luttinger求和规则).

- 微观上,从Hubbard模型出发并利用Gutzwiller近似,人们建立了费米液体理论的参数与微观模型的直接联系,并取得与实验相符合的结果,因此Vollhardt 称正常态的He−3流体为几乎局域化的费米液体.[7]

- Kondo杂质问题在低温下可以理解为局域费米液体.(来自Nozières的唯象费米液体研究.[8])而多通道或者多Kondo杂质问题则出现局域的非费米液体.[9]

在铜氧化物高温超导体出现后,人们意识到这类材料显示出与费米液体预言很不相同的性质,通常称为非费米液体行为.对于这类超越费米液体行为的理解使得人们重新审视费米液体这个凝聚态物理的基石.一类重要的尝试是采用重整化的框架理解费米液体的稳定性和在何种情况下失效.Shankar[10]等研究者考察自由费米气体在一般局域相互作用下的稳定性,他们的结果表明除了吸引相互作用诱导的超导配对不稳定性,一般费米面(无嵌套结构)情况下只有向前散射,这说明费米液体(气体)是稳定不动点.因此有如下结论:

- 现代重整化群理论表明费米液体在空间维度大于一时一般是稳定的.[11]

此外,通过先前章节的讨论我们知道自由费米气体在一维对相互作用是不稳定的,系统的低能激发是声波类型的玻色子,系统化的理论框架是Tomonaga-Luttinger液体而非费米液体.[12]

费米液体的精髓

现在我们从大的方面来看一下费米液体.首先,

Landau费米液体的基本结果是: 电子-电子相互作用的唯一效果是改变电子的质量,对物理可观测量(例如电荷与自旋磁化率)给出小的修正并导致无碰撞的零声波(zero sound wave).

这表明在用费米液体讨论具体问题时可用费米气体的简化形式去理解,在问题的最后把电子质量换成有效质量,相应的观测量用修正之后的形式代替即可.例

[7] Vollhardt,Rev.Mod.Phys.**56**,99(1984).
[8] Nozieres, J.Phys.**37**,1(1976).
[9] Nozieres,Blandin,J.Phys.**41**,193(1980).
[10] 红皮影印版《量子力学原理》一书作者
[11] Shankar,Rev.Mod.Phys.**66**,129(1994).著名的弦理论专家Polchinski(提出了D膜)也研究了类似的问题.
[12] Luttinger液体这个叫法来自于2016年诺贝尔物理学奖获得者Haldane在70年的一系列工作.



Figure 4.4: Joaquin Mazdak Luttinger(1923 – 1997),David Pines(1924 – 2018)和Philippe Nozières(1932–).Luttinger对一维金属中相互作用电子理论(Luttinger液体理论)以及费米液体理论有重要贡献.Pines最为人熟知的工作是描述金属中电子集体运动的理论.

如费米液体光学电导可通过自由电子气体的Drude公式把电子质量换为有效质量,散射率换成准粒子散射率得到.

其次,从定性角度来说,费米液体能够良好工作的原因有两个:

1. 长程Coulomb相互作用的屏蔽;
2. 电子费米面的存在.

一般的长程相互作用总会导致系统出现奇异性,因此长程Coulomb相互作用由于电子极化效应而得到屏蔽成为短程相互作用使得理论本身可能出现的奇异性大为减弱.而费米面的存在使得能量远低于和高于费米能的电子并不对低能物理其作用,这极大地限制了实际参与相互作用电子的数目,并使得相互作用过程变得简单且稳定.

作为一个物理理论,其必定存在基本假定,对费米液体而言,其基本假设有两个:

- 绝热性(adiabatic continuity);
- 一对一(one-to-one),即准粒子的存在(quasi-particle).

绝热性可以理解为无相互作用费米气体在缓慢加入相互作用后变成费米液体.一对一实际上是费米液体的准粒子/空穴激发与费米气体的粒子/空穴激发有一一对应关系.

最后,费米液体理论在某些情况下可能失效:

1. 量子临界系统;
2. 有量子规范场出现;

3. 强磁场下,即分数量子霍尔效应;

这里的量子临界系统指的是费米气体与处于临界状态的序参量场的耦合系统.例如在铁基超导和重费米子金属$CeCu_{6-x}Au_x$中观察到的金属性反铁磁量子临界行为就一般理解为费米气体与临界反铁磁序参量场耦合的产物.临界状态的序参量场会受到费米气体电子空穴对激发影响表现Landau阻尼,而Landau阻尼反作用于费米子导致准粒子行为偏离费米液体.类似的量子规范场在退禁闭情况下相当于临界的序参量场,因此其与费米气体耦合也会得到非费米液体的行为.至于强磁场下分数量子Hall效应则是电子在磁场下回旋运动与相互作用结合导致的绝缘体,自然不会等同费米液体.

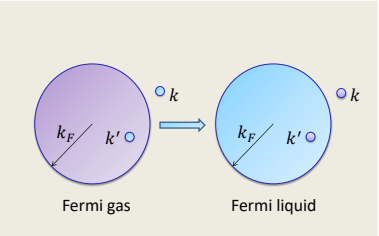


Figure 4.5: 在Landau费米液体理论中,当开启相互作用时,自由费米气体基态会逐渐演化到相互作用费米子基态,同时电子和空穴也同时转化为准粒子和准空穴激发,这就是Landau费米液体的绝热性假设.

绝热性:电子总归是电子

在Landau费米液体理论中,绝热性(假设)是指:当开启相互作用时,自由费米气体基态会逐渐演化到相互作用费米子基态.

简单来说,绝热性实际上表明相互作用前后系统的能谱/能级结构是相同的,也就是说无相互作用时若有10个能级,那么加上相互作用以后还是10个能级,并且这10个能级的相对顺序不变.[13]

注意,如果出现相变,那么绝热性条件就会失效.[14]比如说金属在低温下转变为超导体,显然相变前后状态全然不同,绝热性条件不成立.

自由费米气体

首先来看自由费米气体.在数学上,我们知道自由费米气体的基态是由Slater行列式表示的费米球态:

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow} |n_{k\sigma}\rangle \tag{4.4}$$

在这里,费米子占据数$n_{k\sigma} = \theta(k_F - |\vec{k}|)$表示只有动量小于费米波矢$k_F$的费米子占据为一,其他费米子占据为零.费米子的能量是$\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m} - E_F$,$E_F = \frac{k_F^2}{2m}$ 是系统的费米能. 对于N个无自旋费米子占据k_1到k_F的情况,波函数的明确形式是如下

[13] 当然,能级的能量可以因为相互作用而改变.
[14] 此时能级间的相对顺序会改变

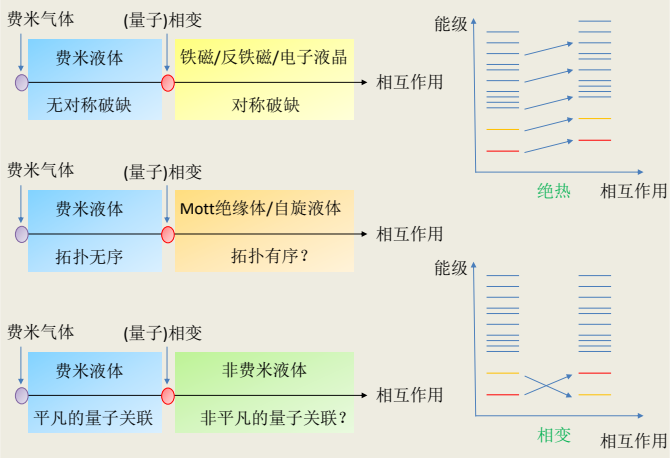


Figure 4.6: 相互作用费米子体系在相互作用开启后的几种可能演化方式.从费米气体到费米液体满足绝热性条件而进入对称破缺或拓扑有序态则必然需要经历相变.

行列式:

$$\Psi_0 = \langle x_1, x_2, x_3 ... | \Psi_0 \rangle = \mathrm{Det} \begin{pmatrix} e^{ik_1 x_1} & e^{ik_1 x_2} & ... & e^{ik_1 x_N} \\ e^{ik_2 x_1} & e^{ik_2 x_2} & ... & e^{ik_2 x_N} \\ ... & ... & ... & ... \\ e^{ik_F x_1} & e^{ik_F x_2} & ... & e^{ik_F x_N} \end{pmatrix} \tag{4.5}$$

这里每一个元素$e^{ik_i x_j}$代表动量为k_i的第j个费米子的平面波.[15]

在费米面附近,我们可以展开费米子能量

$$\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m} - E_F = \frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m} = \frac{k+k_F}{2m}(k-k_F) \approx \frac{k_F}{m}(k-k_F) = v_F(k-k_F) \tag{4.6}$$

这里定义了费米速度$v_F = k_F/m$.[16]

这样,我们可以简单地求得费米气体的态密度

$$N(\omega) = \frac{2}{V}\sum_k \delta(\omega - \varepsilon_k) = 2\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\delta(\omega - \varepsilon_k) \tag{4.7}$$

[15]费米液体也可以写出类似的波函数,只不过粒子的坐标成为准粒子坐标($x_j \to \tilde{x}_j = x_j + \sum_{k\neq j}(x_j - x_k)\eta(x_j - x_k)$,$\eta(r) = \frac{a^3}{r^3 + r_0^3}$),这里$r_0$是一个短距离截断,$a$刻画其他粒子对所考虑的准粒子影响,即背流(backflow)效应的强度.利用费米子的路径积分形式,人们发现随着a的不断增大,体系从费米气体($a = 0$)演化为关联越来越强的费米液体,最后在$a \simeq 1$时进入临界态(非费米液体).此时体系波函数所对应的节点面出现分形结构,这体现了临界点时的无标度性(标志费米液体的费米能消失).[Krüger,Zaanen,Fermionic quantum criticality and the fractal nodal surface,Phys.Rev.B **78**,035104(2008);Kaplis,Krüger,Zaanen,Entanglement entropies and fermion signs of critical metals,Phys.Rev.B **95**,155102(2017)]

[16]严格来说这些量都是矢量,即$\varepsilon_k \approx \vec{v}_F \cdot (\vec{k} - \vec{k}_F)$.这样的表示也适用于非各向同性的情况,此时费米面上不同位置的费米动量$\vec{k}_F$,费米速度$\vec{v}_F$各不相同.

考虑三维系统$d=3$并且$\varepsilon_k=\frac{k^2-k_F^2}{2m}$则有,

$$N(\omega)=2\int_0^\infty k^2\frac{dk}{(2\pi)^3}4\pi\delta\left(\omega-\frac{k^2-k_F^2}{2m}\right)=\int_0^\infty k^2\frac{dk}{\pi^2}\delta\left(\omega-\frac{k^2-k_F^2}{2m}\right) \tag{4.8}$$

那么三维费米气体费米面态密度$N(\omega=0)$是

$$N(0)=\int_0^\infty k^2\frac{dk}{\pi^2}\delta\left(\frac{k^2-k_F^2}{2m}\right)=\int_0^\infty k^2\frac{dk}{\pi^2}\frac{\delta(k-k_F)+\delta(k+k_F)}{k_F/m}=\frac{mk_F}{\pi^2} \tag{4.9}$$

可以看到费米面态密度正比于费米子的质量,反比于费米波矢.有了费米面态密度,根据热力学统计物理或者固体物理学过的关于自由费米气体(Sommerfeld简并费米气体)的基本性质,我们知道低温热容,磁化率都与费米面态密度成正比,即

$$C_v^0\propto N(0)T \tag{4.10}$$

$$\chi_s^0\propto\chi_c^0\propto N(0) \tag{4.11}$$

$$\rho(T)=0 \tag{4.12}$$

注意第三个公式表示费米气体的电阻为零,因为没有任何导致动量耗散的散射机制出现.

费米液体基态

根据绝热性,费米液体的能谱结构必须和无相互作用电子气体一致,因此其基态必定也是费米球分布,也就是说我们可以写出费米液体的基态波函数:

$$|\Psi_{FL}\rangle=\prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow}|\tilde{n}_{k\sigma}\rangle \tag{4.13}$$

这里相互作用费米子的分布函数是$\tilde{n}_{k\sigma}=\theta(k_F-|\vec{k}|)$,其与无相互作用时保持一致.注意,严格来说对于费米子系统,加入相互作用后其严格基态并不是费米球分布,而是各种可能的费米子占据状态的叠加,[17]但是若系统处于费米液体态,那么费米球分布所对应的状态是权重最大的.因此,我们直接说费米球分布就是费米液体的基态.

- 注意费米液体与费米气体有同样的费米波矢k_F,也就是说相互作用费米子系统具有无相互作用费米气体完全相同的费米面.[18]
- 相互作用基态依旧是填满的费米球,但是关于单粒子态能量以及相互作用的细节依然未知.

[17]实际的相互作用费米子系统的分布函数$n_{k\sigma}$在基态时并不是阶跃函数,而是类似于有限温度的费米分布函数

[18]这个结果对各向同性的系统成立,但若考虑各向异性就会使得费米液体与费米气体的费米波矢不同.

费米气体的激发

如果我们在费米气体的费米球态添加一个动量为k_0自旋为σ_0的粒子,那么体系的波函数是

$$|\Psi_0^{k_0,\sigma_0}\rangle = |k_0,\sigma_0\rangle \prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow} |n_{k\sigma}\rangle \tag{4.14}$$

我们把这个态叫做动量k_0自旋σ_0的粒子态,其扣除填满费米球的基态能量的粒子激发能是$\varepsilon_{k_0} = \frac{k_0^2}{2m} - E_F > 0$.同理,也可定义如下空穴态,也就是在填满的费米球中移除一个动量为k_0,自旋为σ_0的粒子

$$|\Psi_0^{-k_0,-\sigma_0}\rangle = \prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow,k\neq k_0,\sigma\neq\sigma_0} |n_{k\sigma}\rangle \tag{4.15}$$

这个空穴的能量$\varepsilon_{k_0} < 0$.

像上面这样的粒子或空穴激发成为单粒子激发,也就是只涉及一个粒子或空穴.另外,我们可以考虑双粒子激发,例如粒子-空穴激发,也就是在费米球内拿掉一个动量为k粒子(产生空穴)而在费米球外产生一个动量为$k+q$的粒子.这个的过程相对基态的能量变化是$\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k$.

费米液体的激发:准粒子与准空穴

根据费米液体一一对应的原则(one-to-one correspondence):无相互作用情况下的激发会演化至相互作用情况下的对应物.那么我们可以得到如下的对应关系,即费米气体中的粒子,空穴态激发对应费米液体中的准粒子和准空穴态激发:

$$|\Psi_0^{k_0,\sigma_0}\rangle = |n_{k_0,\sigma_0}\rangle \prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow} |n_{k\sigma}\rangle \Rightarrow |\Psi_{FL}^{k_0,\sigma_0}\rangle = |\tilde{n}_{k_0,\sigma_0}\rangle \prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow} |\tilde{n}_{k\sigma}\rangle \tag{4.16}$$

$$|\Psi_0^{-k_0,-\sigma_0}\rangle = |n_{k_0,\sigma_0}\rangle \prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow,k\neq k_0,\sigma\neq\sigma_0} |n_{k\sigma}\rangle \Rightarrow |\Psi_{FL}^{-k_0,-\sigma_0}\rangle = \prod_{k\leq k_F,\sigma=\uparrow,\downarrow,k\neq k_0,\sigma\neq\sigma_0} |\tilde{n}_{k\sigma}\rangle$$

- 注意,我们这里定义的准粒子/空穴激发实际上指的是费米子分布函数$\widetilde{n}_{k\sigma}$相对于基态分布$n_{k\sigma}^0$的偏离,记为$\delta n_{k\sigma} = \widetilde{n}_{k\sigma} - n_{k\sigma}^0$.因此,费米液体在基态的时候不存在准粒子,只有在被激发后才出现准粒子.

这样,我们知道准粒子的分布函数是$\delta n_{k\sigma}$,而裸费米子(He−3流体里面我们可以近似认为是组成系统的He原子)的分布函数是$\widetilde{n}_{k\sigma}$.在下面的讨论中,我们用$n_{k\sigma}$代替$\widetilde{n}_{k\sigma}$以简化符号.

现在,让我们定义单个准粒子的能量,也就是相对于完全填满的费米球基态的激发能,

$$E_{k_0,\sigma_0}^0 = E_{k_0,\sigma_0} - E_0 \tag{4.17}$$

这里E_0是指没有任何准粒子激发的基态能,通常是一个未知量,而E_{k_0,σ_0}是有一个准粒子激发的系统总能量,是一个关于k_0,σ_0 的复杂函数.

为了进一步讨论粒子数可变的情况,定义如下准粒子能量:

$$\varepsilon^0_{k_0,\sigma_0} = E^0_{k_0,\sigma_0} - \mu \tag{4.18}$$

这样费米面上的准粒子能量自动为零,而费米面以上的准粒子激发能量为正,费米面下激发的准空穴态能量为负.[19]

Landau能量泛函

在先前的讨论中我们考虑了单个准粒子的激发,更一般地,当系统处于有限温度或者受到外场的影响时必然会有多个准粒子激发,此时系统的能量应该是准粒子分布函数或者说是费米子分布函数的泛函,可以记为$\mathcal{E} = \mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\})$. [20]

原则上,能量泛函$\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\})$是关于分布函数$n_{k\sigma}$的复杂函数,但是,在低温下,分布函数对于基态分布$n^0_{k\sigma}$的偏离并不大,因此我们可以以基态分布作为泰勒展开的出发点,物理上这相当于是考虑准粒子数量不是太多的情况.这样,我们可以把$\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\})$展开为$n_{k\sigma} - n^0_{k\sigma}$的幂级数形式,(注意到$n_{k\sigma} - n^0_{k\sigma} = \delta n_{k\sigma}$,那么能量泛函实际上是用准粒子数作为展开参数)即

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\}) &= \mathcal{E}(\{n^0_{k\sigma}\}) + \sum_{k\sigma}(n_{k\sigma} - n^0_{k\sigma})\frac{\partial\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\})}{\partial n_{k\sigma}}|_{n_{k\sigma}=n^0_{k\sigma}} \\ &\quad + \frac{1}{2}\sum_{k\sigma,k'\sigma'}(n_{k\sigma} - n^0_{k\sigma})(n_{k'\sigma'} - n^0_{k'\sigma'})\frac{\partial\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\})}{\partial n_{k\sigma}\partial n_{k'\sigma'}}|_{n_{k\sigma}=n^0_{k\sigma},n_{k'\sigma'}=n^0_{k'\sigma'}} + \ldots\end{aligned}$$

在这里所有高阶项都未明确写出.首先,$\mathcal{E}(\{n^0_{k\sigma}\})$表示的费米子满足基态分布时系统的能量,也就是系统的基态能量,我们把它记为E_0,它是没有任何准粒子激发时的基态能量.其次,我们可以用准粒子分布函数$\delta n_{k\sigma} = n_{k\sigma} - n^0_{k\sigma}$来表示费米子占据数相对于基态的偏离.同时,$\frac{\partial\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\})}{\partial n_{k\sigma}}|_{n_{k\sigma}=n^0_{k\sigma}}$表示的是仅有动量为$k$,自旋为$\sigma$的费米子数目相对于基态分布有变化时,系统能量的变化率,这实际上就是单个准粒子的能量$\varepsilon^0_{k\sigma}$(也就是准粒子独立存在时的能量).此外,我们定义$f_{k\sigma,k'\sigma'} = \frac{\partial\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\})}{\partial n_{k\sigma}\partial n_{k'\sigma'}}|_{n_{k\sigma}=n^0_{k\sigma},n_{k'\sigma'}=n^0_{k'\sigma'}}$. $f_{k\sigma,k'\sigma'}$ 称为Landau相互作用函数,表示只有两个准粒子$k\sigma$和$k'\sigma'$存在时的相互作用强度.

因此,我们系统能量可以展开为准粒子激发数$\delta n_{k\sigma}$的幂级数形式,即所谓的Landau能量泛函表示:

$$\boxed{\mathcal{E}(\{n_{k\sigma}\}) = E_0 + \sum_{k\sigma}\varepsilon^0_{k\sigma}\delta n_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k\sigma,k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k\sigma}\delta n_{k'\sigma'} + \ldots} \tag{4.19}$$

[19]到底什么是准粒子的准确定义呢？在文小刚看来,对于有能隙的多体系统,准粒子是基态之上类似点粒子的激发,可以被势阱所束缚.

[20]所谓泛函,指的就是如果一个函数,它的自变量是一个函数,那么所讨论的这个函数本身称为泛函,也就是函数的函数.典型的例子就是经典力学中的作用量,它可看作是关于粒子坐标泛函.($S = \int dt\mathcal{L} = \int dt(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x))$)作用量$S$的取值依赖于函数$x(t)$的完整形式而非在某个点的取值,因此$S$是以函数$x$为自变量的函数,即泛函.

注意$\varepsilon^0_{k\sigma}, f_{k\sigma',k\sigma'}, \delta n_{k\sigma}$都是未知函数,因此目前为止Landau能量泛函仅仅是一个形式化的表述.

现在,让我们首先考虑准粒子独立存在时的能量$\varepsilon^0_{k\sigma}$,把它在费米面附近展开:

$$\varepsilon^0_{k\sigma} = \varepsilon^0_{k_F\sigma} + \frac{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}{\partial k}|_{k=k_F}(k-k_F) + ... \approx v^*_F(k-k_F) \tag{4.20}$$

这里定义了准粒子的有效费米速度

$$v^*_F = \frac{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}{\partial k}|_{k=k_F} \tag{4.21}$$

由有效费米速度,我们可以进一步定义准粒子的有效质量

$$m^* = \frac{k_F}{v^*_F} \tag{4.22}$$

当我们计算准粒子在费米面上的态密度时,可以发现

$$N^*(0) = 2\int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3}\delta(\varepsilon^0_k) = \int \frac{k^2dk}{\pi^2}\delta(v^*_F(k-k_F)) = \frac{k_F^2/v^*_F}{\pi^2} = \frac{m^*k_F}{\pi^2} \propto m^* \tag{4.23}$$

注意到准粒子的费米面态密度正比于准粒子的有效质量,这表明越大的有效质量导致越大的态密度.同时,$N^*(0) = \frac{m^*}{m}N(0)$.

接下来我们考虑有多个准粒子存在时对单个准粒子能量的修正,即我们考虑Landau能量泛函对占据数的一阶导数:

$$\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial n_{k\sigma}} = \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial(\delta n_{k\sigma})} \equiv \varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon^0_{k\sigma} + \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'} \tag{4.24}$$

这里$\varepsilon_{k\sigma}$代表有准粒子相互作用修正后单个准粒子的能量,当只有一个准粒子时$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon^0_{k\sigma}$,有两个准粒子时是$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon^0_{k\sigma} + f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'}$.可以看到,Landau相互作用函数改变了产生一个准粒子所需要的能量.

费米液体的热力学熵和自由能

当我们需要讨论体系的热力学行为时,我们需要知道系统自由能的形式,而通过Landau能量泛函已经得到了能量的表达式,那么还需要热力学熵的形式.根据费米液体的绝热性原理,我们知道有相互作用系统与无相互作用系统的能谱结构是相同的,而热力学熵仅依赖于能谱结构而非能谱的细节,因此我们认为无相互作用系统的熵与相互作用系统的熵完全相同,[21]这说明费米液体系统的热力学熵的公式在形式上就是自由费米气体的形式,因此费米液体的熵为:

$$\mathcal{S} = -\sum_{k\sigma}[n_{k\sigma}\ln n_{k\sigma} + (1-n_{k\sigma})\ln(1-n_{k\sigma})] \tag{4.25}$$

[21]为什么熵在相互作用开启前后不改变呢?因为量子态和它们的分布在绝热演化过程中几乎没有改变.

这样我们得到费米液体的自由能函数是

$$\begin{aligned}\mathcal{F}=\mathcal{E}-T\mathcal{S} &= E_0+\sum_{k\sigma}\varepsilon^0_{k\sigma}\delta n_{k\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{k\sigma,k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k\sigma}\delta n_{k'\sigma'}+... \\ &+ T\sum_{k\sigma}\left[n_{k\sigma}\ln n_{k\sigma}+(1-n_{k\sigma})\ln(1-n_{k\sigma})\right] \qquad (4.26)\end{aligned}$$

显然,在热平衡下的分布函数$n_{k\sigma}$应使自由能取极小值,[22]这导致($n_{k\sigma}$的变分是$\bar{\delta}n_{k\sigma}$而$\delta n_{k\sigma}=n_{k\sigma}-n^0_{k\sigma}$的变分也是$\bar{\delta}n_{k\sigma}$)

$$\bar{\delta}\mathcal{F}=0=\sum_{k\sigma}\left[\varepsilon^0_{k\sigma}+\sum_{k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'}\right]\bar{\delta}n_{k\sigma}+T\sum_{k\sigma}\ln\frac{n_{k\sigma}}{1-n_{k\sigma}}\bar{\delta}n_{k\sigma}=\sum_{k\sigma}\left[\varepsilon_{k\sigma}+T\frac{n_{k\sigma}}{1-n_{k\sigma}}\right]\bar{\delta}n_{k\sigma} \qquad (4.27)$$

这样立即得到费米子占据数分布的明确形式,即标准费米分布

$$n_{k\sigma}=\frac{1}{e^{\varepsilon_{k\sigma}/T}+1}=f_F(\varepsilon_{k\sigma}) \qquad (4.28)$$

而准粒子的分布函数是$\delta n_{k\sigma}=n_{k\sigma}-n^0_{k\sigma}=f_F(\varepsilon_{k\sigma})-\theta(k_F-|\vec{k}|)$.由于准粒子能量$\varepsilon_{k\sigma}=\varepsilon^0_{k\sigma}+\sum_{k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'}$ 仍然是其他准粒子分布的复杂函数,那么$n_{k\sigma}$并不是一个简单的函数,而是其自身的隐函数.实际计算时,我们需要给定$\varepsilon^0_{k\sigma},f_{k\sigma,k'\sigma'}$, 然后假设一个初始的分布$n_{k\sigma}$,再把这个分布代入$\varepsilon_{k\sigma}$的公式,然后利用新得到的准粒子能量代入$n_{k\sigma}=f_F(\varepsilon_{k\sigma})$ 以计算新的分布函数.不断重复这个循环(自洽迭代过程)直到收敛,我们就得到了正确的分布函数以及准粒子能量.

费米液体的低温热熔

低温下,准粒子数比较少,这样系统的能量主要由单粒子部分提供即

$$\mathcal{E}\simeq E_0+\sum_{k\sigma}\varepsilon^0_{k\sigma}\delta n_{k\sigma}=E_0+\sum_{k\sigma}\varepsilon^0_{k\sigma}(n_{k\sigma}-n^0_{k\sigma}) \qquad (4.29)$$

此时系统能量对温度的一阶导数就是系统的热容

$$C_v=\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial T}=\sum_{k\sigma}\varepsilon^0_{k\sigma}\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial T} \qquad (4.30)$$

同时我们有

$$n_{k\sigma}=\frac{1}{e^{\varepsilon_{k\sigma}/T}+1}\simeq\frac{1}{e^{\varepsilon^0_{k\sigma}/T}+1} \qquad (4.31)$$

那么我们得到[23]

$$C_v\approx\sum_{k\sigma}\varepsilon^0_{k\sigma}\frac{\partial f_F(\varepsilon^0_{k\sigma})}{\partial T}=\int d\varepsilon N^*(\varepsilon)\varepsilon\frac{\partial f_F(\varepsilon)}{\partial T}\approx N^*(0)\frac{\pi^2}{3}T\equiv\gamma^*T,\ \ \gamma^*=\frac{\pi^2}{3}N^*(0) \qquad (4.32)$$

[22]物理上这说明费米液体这类稳定的物质状态在我们改变其粒子分布时是稳定的,即自由能会随着分布函数改变而增加

[23]这里需要用到Sommerfeld展开:$\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon A(\varepsilon)f_F(\varepsilon)=\int_{-\infty}^{0}d\varepsilon A(\varepsilon)+\frac{\pi^2}{6}T^2\frac{\partial A(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}|_{\varepsilon=0}+O(T^4)$.

注意到费米气体的热容是$C_v^0=\gamma T,\ \gamma=\frac{\pi^2}{3}N(0)$,那么有

$$\frac{\gamma^*}{\gamma}=\frac{N^*(0)}{N(0)}=\frac{m^*}{m}=\frac{v_F}{v_F^*} \tag{4.33}$$

也就是说费米液体相对于费米气体的有效质量增强正比于费米面态密度的比率.

如果我们考虑$He-3$流体的正常态,那么当氦原子之间没有相互作用时,我们测得的氦原子质量记为m, 此时系统处于基态时的氦原子动量分布为费米球分布.当加入相互作用后,氦原子的基态动量分布已经不是阶跃函数,但是作为近似我们可以假设系统处于费米液体态,并且氦原子的分布仍然是费米球分布,只不过此时的质量变成有效质量m^*.这个有效质量m^*就是实验测量的He−3流体中氦原子的质量.

Landau参数

对自旋守恒系统,Landau相互作用函数可以分解为两部分:

$$f_{k\sigma,k'\sigma'}=f^s_{k,k'}+f^a_{k,k'}\sigma\sigma' \tag{4.34}$$

其中f^s是自旋无关部分而f^a是自旋依赖部分.[24] 当准粒子都在费米面附近时,相互作用函数只与准粒子的费米动量有关($k\approx k_F, k'\approx k'_F$), 并且对于各向同性的系统,只有费米动量的相对角度是重要的,这样我们有

$$f^{s/a}_{k,k'}\approx f^{s/a}(\cos\theta),\quad \cos\theta=\frac{\vec{k}_F\cdot\vec{k}'_F}{k_F^2} \tag{4.35}$$

为了得到无维度的形式,[25]我们把$f^{s/a}$乘上费米面上的准粒子态密度$N^*(0)$:

$$F^{s/a}(\cos\theta)=N^*(0)f^{s/a}(\cos\theta) \tag{4.36}$$

然后,我们把$F^{s/a}$做Legendre多项式展开可得

$$F^{s/a}(\cos\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)F_l^{s/a}P_l(\cos\theta) \tag{4.37}$$

这里的展开系数$F_l^{s/a}$就是著名的Landau参数,其具体形式由以下积分定义

$$F_l^{s/a}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}dxF^{s/a}(x)P_l(x) \tag{4.38}$$

而$P_l(\cos\theta)$是第l阶Legendre多项式,[26] 前几个是

$$P_0=1,\quad P_1=\cos\theta,\quad P_2=\frac{1}{4}(3\cos 2\theta+1) \tag{4.39}$$

实际上,我们将会看到只需要很少几个Landau参数($F_0^{s/a}, F_1^{s/a}$)就可以表征一般费米液体的可观测量.

[24]更一般的有$f_{k\sigma,k'\sigma'}=f^s_{k,k'}+f^a_{k,k'}\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma}'$

[25]注意根据准粒子能量的定义式$\varepsilon_{k\sigma}=\varepsilon^0_{k\sigma}+\sum_{k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'}$,$f^{s/a}$具有能量的量纲,无量纲化就是要乘上一个能量负一次的量,例如态密度.

[26]$P_l(x)$满足$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}dxP_{l'}(x)P_l(x)=\frac{\delta_{l,l'}}{2l+1}$

Landau参数	F_0^s	F_0^a	F_1^s
物理量	$\chi_c = \frac{N^*(0)}{1+F_0^s}$	$\chi_s = \frac{N^*(0)}{1+F_0^s}\mu_B^2$	$\frac{m^*}{m} = 1 + F_1^s$

Table 4.1: Landau参数与费米液体可观测量之间的关系.

准粒子相互作用对磁化率和有效质量的修正

现在讨论准粒子之间相互作用的实际效果,注意到计入相互作用后的准粒子的能量是

$$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon^0_{k\sigma} + \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'} \tag{4.40}$$

那么由于相互作用或者外场导致的准粒子的能量变化是

$$\delta\varepsilon_{k\sigma} = \delta\varepsilon^0_{k\sigma} + \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'} \tag{4.41}$$

$$n_{k\sigma} = f_F(\varepsilon^0_{k\sigma} + \delta\varepsilon_{k\sigma}) \approx f_F(\varepsilon^0_{k\sigma}) + \frac{\partial f_F(\varepsilon^0_{k\sigma})}{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}\delta\varepsilon_{k\sigma} \tag{4.42}$$

在零温时有$f_F(\varepsilon^0_{k\sigma}) = \theta(-\varepsilon^0_{k\sigma})$, 那么

$$T = 0: \quad \frac{\partial f_F(\varepsilon^0_{k\sigma})}{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}} = -\delta(\varepsilon^0_{k\sigma}) \tag{4.43}$$

这样得到

$$\delta n_{k\sigma} = n_{k\sigma} - f_F(\varepsilon^0_{k\sigma}) \approx -\delta(\varepsilon^0_{k\sigma})\delta\varepsilon_{k\sigma} \tag{4.44}$$

把这个结果代入 $\delta\varepsilon_{k\sigma} = \delta\varepsilon^0_{k\sigma} + \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'}$可得

$$\boxed{\delta\varepsilon_{k\sigma} = \delta\varepsilon^0_{k\sigma} - \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta(\varepsilon^0_{k'\sigma'})\delta\varepsilon_{k'\sigma'}} \tag{4.45}$$

这样得到了一个自洽的方程,在给定单准粒子能量$\varepsilon^0_{k\sigma}$和相互作用$f_{k\sigma,k'\sigma'}$后便可解出准粒子能量的变化量.[27]

当然,实际上我们可以用下面的处理得到更为有用的形式,即假定我们只关心费米面附近的物理,并且假设$\delta\varepsilon^0_{k\sigma}, \delta\varepsilon_{k\sigma}$可用球谐函数表示

$$\delta\varepsilon^0_{k\sigma} \simeq \delta\varepsilon^0_{k_F\sigma}(\theta,\varphi) = v_l Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{4.46}$$

$$\delta\varepsilon_{k\sigma} \simeq \delta\varepsilon_{k_F\sigma}(\theta,\varphi) = t_l Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{4.47}$$

[27]注意到这些描述这些物理量的方程类似于常用的Hartree-Fock 平均场自洽方程.因此,有时我们也把费米液体看成是一种高级的自洽Hartree-Fock理论.

同时有

$$\begin{aligned}\sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta(\varepsilon^0_{k'\sigma'})\delta\varepsilon_{k'\sigma'} &= \overbrace{\sum_{\sigma'}\int\frac{d\Omega'}{4\pi}\int d\varepsilon'\frac{1}{2}N^*(\varepsilon')}^{\sum_{k'}}(f^s(\cos\theta_{k_F,k'_F})+\sigma\sigma' f^a(\cos\theta_{k_F,k'_F}))\\ &\times\ \delta(\varepsilon')t_{l'}Y_{l'm'}(\theta',\varphi')\\ &= \int\frac{d\Omega'}{4\pi}F^s(\cos\theta_{k_F,k'_F})t_{l'm'}Y_{l'm'}(\theta',\varphi'),\end{aligned}$$

这里$\int d\Omega' = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^{1} d\cos\theta'$,而$F^s(\cos\theta_{k_F,k'_F}) = \sum_{l'}(2l'+1)F^s_{l'}P_{l'}(\cos\theta_{k_F,k'_F}) = 4\pi\sum_{l',m'} F^s_{l'}Y_{l'm'}(\theta,\varphi)Y^*_{l'm'}(\theta',\varphi')$. 这样有

$$\begin{aligned}\sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta(\varepsilon^0_{k'\sigma'})\delta\varepsilon_{k'\sigma'} &= \int\frac{d\Omega'}{4\pi}4\pi\sum_{l',m'}F^s_{l'}Y_{l'm'}(\theta,\varphi)Y^*_{l'm'}(\theta',\varphi')t_lY_{lm}(\theta',\varphi')\\ &= t_l\sum_{l',m'}F^s_{l'}Y_{l'm'}(\theta,\varphi)\int d\Omega' Y^*_{l'm'}(\theta',\varphi')Y_{lm}(\theta',\varphi')\\ &= t_l\sum_{l',m'}F^s_{l'}Y_{l'm'}(\theta,\varphi)\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}\\ &= t_lF^s_lY_{lm}(\theta,\varphi)\end{aligned}\tag{4.48}$$

这里用到了球谐函数的正交性关系$\int d\Omega' Y^*_{l'm'}(\theta',\varphi')Y_{lm}(\theta',\varphi') = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$.那么我们得到

$$t_lY_{lm}(\theta,\varphi) = v_lY_{lm}(\theta,\varphi) - F^s_lt_lY_{lm}(\theta,\varphi)\tag{4.49}$$

为了使得该方程恒成立,我们必须有

$$t_l = \frac{v_l}{1+F^s_l}\tag{4.50}$$

显然当$F^s_l = -1$时,分母为零会导致系统的不稳定性,如果此时$l=0$,这称为量子气-液相变,当$l>0$就叫做Pomeranchuk不稳定性.发生Pomeranchuk不稳定性时,体系的费米面会自发得发生畸变,所得的通常依然是费米液体,只不过破坏空间旋转对称性,这叫做nematic电子流体.[28]

同理,对于自旋相关的准粒子能量移动有$\delta\varepsilon^0_{k\sigma} = \sigma v^a_l Y_{lm}(\theta,\varphi), \delta\varepsilon_{k\sigma} = \sigma t^a_l Y_{lm}(\theta,\varphi)$以及

$$t^a_l = \frac{v^a_l}{1+F^a_l}\tag{4.51}$$

此时$F^a_l = -1 (l=0)$代表熟知的Stoner不稳定性,其描述的是费米液体的铁磁不稳定性.

现在我们考虑具体的物理量,例如电荷磁化率以及自旋磁化率

$$\chi_c = \frac{1}{V}\frac{\partial N}{\partial\mu},\quad \chi_s = \frac{1}{V}\frac{\partial M}{\partial B}.\tag{4.52}$$

[28]关于Pomeranchuk不稳定性的平均场理论可以参考文献[Quintanilla,Schofield,Pomeranchuk and topological Fermi surface instabilities from central interactions,Phys.Rev.B **74**,115126(2008)]

注意到要得到电荷磁化率,可以给单准粒子能量一个改变$\delta\varepsilon^0_{k\sigma} = -\delta\mu = v_0 Y_{00}(\hat{k})$, 这样有

$$t_0 = \frac{v_0}{1+F_0^s} \tag{4.53}$$

对于自旋磁化率则有$\delta\varepsilon^0_{k\sigma} = -\sigma\mu_B B = \sigma v_0^a Y_{00}(\hat{k})$

$$t_0^a = \frac{v_0^a}{1+F_0^a} \tag{4.54}$$

对于总粒子数的变化,我们有

$$\delta N = \sum_{k\sigma}\delta n_{k\sigma} = -\sum_{k\sigma}\delta(\varepsilon^0_{k\sigma})\delta\varepsilon_{k\sigma} = -\sum_{k\sigma}\delta(\varepsilon^0_{k\sigma})t_l Y_{lm}(\theta,\varphi) = -\sum_{k\sigma}\delta(\varepsilon^0_{k\sigma})\frac{v_l}{1+F_l^s}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{4.55}$$

代入$v_0 = -\delta\mu, v_{l\geq 1} = 0$可得

$$\delta N = \frac{\delta\mu}{1+F_0^s}\sum_{k\sigma}\delta(\varepsilon^0_{k\sigma}) = \frac{N^*(0)}{1+F_0^s}V\delta\mu,\ \ N^*(0) = \frac{1}{V}\sum_{k\sigma}\delta(\varepsilon^0_{k\sigma}) = \int d\varepsilon N^*(\varepsilon)\delta(\varepsilon) \tag{4.56}$$

这样我们得到

$$\chi_c = \frac{\delta N}{V\delta\mu} = \frac{N^*(0)}{1+F_0^s} \tag{4.57}$$

同理,当能量变化来自于自旋依赖的Zeeman场时,我们有

$$\delta N_\uparrow = -\delta N_\downarrow = \frac{1}{2}\frac{N^*(0)}{1+F_0^a}V\mu_B B \tag{4.58}$$

$$\delta M = \mu_B(\delta N_\uparrow - \delta N_\downarrow) = \frac{N^*(0)}{1+F_0^a}V\mu_B^2 B \tag{4.59}$$

这样可以得到自旋磁化率

$$\chi_s = \frac{\delta M}{V\delta B} = \frac{N^*(0)}{1+F_0^a}\mu_B^2,\ \ \delta B = B \tag{4.60}$$

由费米液体以及费米气体的热容和磁化率可构造一个无量纲比例系数,即Wilson比率,我们发现

$$\boxed{\mathcal{W} = \frac{\chi_s/\chi_s^0}{\gamma^*/\gamma^0} = \frac{1}{1+F_0^a}} \tag{4.61}$$

可以看到该系数唯一依赖于磁化率相关的Landau参数F_0^a.因此通过Wilson比率的测量直接能得到F_0^a的信息.在实际系统中,正常态的He-3流体有$\mathcal{W} = 3$而在Pd(钯)中则有$\mathcal{W} = 10$.显然,越大的Wilson比率表示越接近-1的Landau参数,也就是说外在或者内部的扰动被放大的越厉害,系统就越不稳定.此外,近藤杂质问题的Wilson比率一般是$\mathcal{W} = 2$,而许多重费米子材料都满足$\mathcal{W} = 1$.

最后,让我们推导准粒子有效质量与Landau参数的明确关系.首先注意到整个系统的总动量可以由裸粒子表示,

$$\vec{P} = \sum_{k\sigma}\vec{k}n_{k\sigma} = \sum_{k\sigma}\vec{k}(n^0_{k\sigma} + \delta n_{k\sigma}) = \sum_{k\sigma}\vec{k}\delta n_{k\sigma} \tag{4.62}$$

那么其通量就是$\vec{P}/m=\sum_{k\sigma}\frac{\vec{k}}{m}n_{k\sigma}$,$m$是裸粒子的质量.同时准粒子的粒子通量是

$$\sum_{k\sigma}\vec{v}\delta n_{k\sigma}=\sum_{k\sigma}\vec{v}n_{k\sigma} \tag{4.63}$$

其中准粒子速度$\vec{v}=\frac{\partial\varepsilon_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}$.显然准粒子的通量与裸粒子的通量应相同,那么我们得到

$$\boxed{\sum_{k\sigma}\left[\frac{\vec{k}}{m}-\frac{\partial\varepsilon_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}\right]n_{k\sigma}=0} \tag{4.64}$$

代入准粒子能量$\varepsilon_{k\sigma}=\varepsilon^0_{k\sigma}+\sum_{k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'}$可得

$$\sum_{k\sigma}\left(\frac{\vec{k}}{m}-\frac{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}\right)n_{k\sigma}-\sum_{k,\sigma,k'\sigma'}\frac{\partial f_{k\sigma,k'\sigma'}}{\partial\vec{k}}n_{k\sigma}\delta n_{k'\sigma'}=0 \tag{4.65}$$

对上述方程左边第二项做分部积分可得

$$\begin{aligned}&\sum_{k,\sigma,k'\sigma'}\left[\frac{\partial}{\partial\vec{k}}(f_{k\sigma,k'\sigma'}n_{k\sigma})-f_{k\sigma,k'\sigma'}\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}\right]\delta n_{k'\sigma'}=-\sum_{k,\sigma,k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}\delta n_{k'\sigma'}\\&=-\sum_{k,\sigma,k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\frac{\partial n_{k'\sigma'}}{\partial\vec{k'}}\delta n_{k\sigma}\end{aligned} \tag{4.66}$$

在最后一步我们交换了$k\sigma$与$k'\sigma'$.

把这个结果代回可得

$$\sum_{k\sigma}\left(\frac{\vec{k}}{m}-\frac{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}\right)n_{k\sigma}+\sum_{k,\sigma,k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\frac{\partial n_{k'\sigma'}}{\partial\vec{k'}}\delta n_{k\sigma}=0 \tag{4.67}$$

注意到占据数分布$n_{k\sigma}=n^0_{k\sigma}+\delta n_{k\sigma}$,这里$n^0_{k\sigma}$是平衡时的分布, 那么其乘以$\frac{\vec{k}}{m}-\frac{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}$ 并对动量的积分由对称性可知为零,则有

$$\sum_{k\sigma}\left[\frac{\vec{k}}{m}-\frac{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}+\sum_{k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\frac{\partial n_{k'\sigma'}}{\partial\vec{k'}}\right]\delta n_{k\sigma}=0 \tag{4.68}$$

为使得上式恒成立,这要求

$$\frac{\vec{k}}{m}-\frac{\partial\varepsilon^0_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}+\sum_{k'\sigma'}f_{k\sigma,k'\sigma'}\frac{\partial n_{k'\sigma'}}{\partial\vec{k'}}=0 \tag{4.69}$$

注意到$\varepsilon^0_{k\sigma}\approx v^*_F(k-k_F)$, 那么上式在费米面附近有

$$\frac{\vec{k}_F}{m}-\frac{\vec{k}_F}{m^*}+\sum_{k'\sigma'}(f^s(\cos\theta)+\sigma\sigma'f^a(\cos\theta))\frac{\partial n_{k'\sigma'}}{\partial\varepsilon^0_{k'\sigma'}}\frac{\partial\varepsilon^0_{k'\sigma'}}{\partial\vec{k'}}=0 \tag{4.70}$$

化简可得

$$\frac{\vec{k}_F}{m}-\frac{\vec{k}_F}{m^*}-\sum_{k'\sigma'}(f^s(\cos\theta)+\sigma\sigma'f^a(\cos\theta))\delta(\varepsilon_{k'\sigma'})\frac{\vec{k}'_F}{m^*}=0 \tag{4.71}$$

对上式两边同乘以$\vec{k}_F$并利用$\vec{k}_F \cdot \vec{k}'_F = k_F^2 \cos\theta$得到

$$\frac{1}{m} - \frac{1}{m^*} - \frac{1}{2}\sum_{\sigma'} \int d\varepsilon' N^*(\varepsilon')\delta(\varepsilon') \int \frac{d\Omega}{4\pi}(f^s(\cos\theta) + \sigma\sigma' f^a(\cos\theta))\frac{\cos\theta}{m^*} = 0 \tag{4.72}$$

注意到$N^*(\varepsilon)$包含自旋简并,因此上式有1/2因子.对自旋求和消掉f^a部分而对能量的积分给出费米面态密度$N^*(0)$

$$\frac{1}{m} - \frac{1}{m^*} - N^*(0) \int \frac{d\Omega}{4\pi} f^s(\cos\theta)\frac{\cos\theta}{m^*} = 0 \tag{4.73}$$

进一步利用$f^s(\cos\theta)$的Legendra多项式展开$f^s(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)F_l^s P_l(\cos\theta)$并考虑不同阶Legendra多项式在角度积分下的正交性条件,我们立即发现只有$l = 1$项有贡献,那么有

$$\frac{1}{m} - \frac{1}{m^*} - \frac{3F_1^s}{m^*} \int \frac{d\Omega}{4\pi} P_1(\cos\theta)\cos\theta = 0 \tag{4.74}$$

这里$\int \frac{d\Omega}{4\pi} P_1(\cos\theta)\cos\theta = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} d\cos\theta \cos^2\theta = \frac{1}{3}$, 此时有

$$\frac{1}{m} - \frac{1}{m^*} - \frac{F_1^s}{m^*} = 0 \tag{4.75}$$

对上式两边同乘以k_F并整理得到费米液体的费米速度具有如下形式:

$$v_F^* = \frac{k_F}{m^*} = \frac{k_F}{m} - \frac{k_F}{m}\frac{F_1^s}{1+F_1^s} \tag{4.76}$$

这里右边第一项表示裸粒子对费米速度贡献,而第二项描述准粒子之间相互作用导致的修正,这样我们得到准粒子有效质量相比于裸粒子质量的增强

$$\boxed{\frac{m^*}{m} = 1 + F_1^s} \tag{4.77}$$

注意到$F_1^s = N^*(0)f_1^s = \frac{m^*}{m}N(0)f_1^s$, 那么有

$$\boxed{\frac{m^*}{m} = \frac{1}{1 - N(0)f_1^s}} \tag{4.78}$$

如果相互作用很强,那么f_1^s会很大,这样分母就会趋近于零,这样准粒子质量会趋近发散.显然准粒子质量发散的物理解释就是准粒子将出现相互作用导致的局域化现象,这就是Mott局域化.

注意到热容直接正比于有效质量,那么通过测量热容可以得到Landau参数的信息,对于He-3有 $C_v^*/C_v = m^*/m = 3$,而重费米子系统则有$C_v^*/C_v = m^*/m \sim 1000$.此外,一般认为费米子在量子相变点附近会出现有效质量的极大增强.

- 注意在推导有效质量与Landau参数的依赖关系时我们考虑的是平移不变的均匀费米系统,也就是说如果考虑的是固体晶格中的电子,那么这里得到的公式是不适用的,因为晶格的存在破坏了连续的平移不变,或者说晶格耗散电子系统的动量,使得电子总动量与质量流不再相等.

- 费米液体的电流为$\vec{j}=e\sum_{k\sigma}\frac{\vec{k}}{m}n_{k\sigma}=e\sum_{k\sigma}\frac{\partial\varepsilon_{k\sigma}}{\partial\vec{k}}n_{k\sigma}$.注意到$m$是裸粒子的质量,也就是说费米液体动量流并没有重整化,这显然也来自于准粒子与裸粒子动量的一一对应.也就是说无论是从裸粒子来计算电流亦或是从准粒子来计算,结果完全是一样的,相互作用导致的电流修正($\varepsilon_{k\sigma}$ 中依赖费米液体相互作用的部分)恰好与准粒子的质量增强抵消.

费米液体的集体模式与Boltzman方程:面对非平衡

当需要讨论系统的动力学或者输运性质时,我们原则上面对的是复杂的非平衡态统计问题.在经典统计的框架内,我们知道定性上对于流体或者气体,我们可采用分子动理学理论来定性讨论体系的简单输运性质,例如气体分子所导致的热导,粒子扩散等.进一步,更定量的处理是由Boltzman提出的微分-积分方程形式,即著名的Boltzman微分−积分方程,简称为Boltzman方程.然而,对于量子系统,其非平衡输运问题形式上更为复杂,特别是对相互作用系统,严格的理论处理仅能针对少数系统进行.因此,实际上处理例如金属在内的许多量子体系输运性质时我们都采用所谓半经典处理,也就是直接采用Boltzman 方程的形式,然后考虑粒子的统计性质,即让粒子分布函数在平衡时等于玻色或者费米分布,在碰撞项的处理中往往采用费米黄金规则以估计粒子分布函数由于粒子发生散射导致的变化.

为了得到Boltzman方程,我们考虑系统中粒子的分布函数$n_{k\sigma}$.我们知道平衡时,费米液体中的粒子分布函数就是标准的费米分布,其是粒子能量的显函数,也就是分布函数与粒子的动量k以及自旋σ有关.另一方面,当我们给系统添加随着时间和空间变化的电磁场时,(或者认为得让系统温度分布不均)分布函数也会显示对于空间位置x,以及时间t的明显依赖,这样我们把粒子的占据数/分布函数$n_{k\sigma}$看作是时间t,空间位置x,动量k以及自旋σ的显函数.即有$n_{k\sigma} = n_{k\sigma}(x,t)$.

现在,让我们考虑分布函数的变化.显然,分布函数既可以因为外场的影响而随着时间变化,也可以因粒子之间的相互作用而发生变化.对于前者,我们发现分布函数随时间的变化可以用$n_{k\sigma}(x,t)$对时间的全导数表示,即有

$$\frac{Dn_{k\sigma}(x,t)}{Dt} = \frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} + \frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial k}\cdot\frac{\partial k}{\partial t} = \frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} + \dot{x}\cdot\nabla_x n_{k\sigma} + \dot{k}\cdot\nabla_k n_{k\sigma} \tag{4.79}$$

另一方面,粒子之间的相互作用,或者说碰撞会使得k态的粒子转化为其他态的粒子,这样自然会使得k 态粒子的分布函数发生变化,我们把这种由于碰撞导致的分布函数变化称为碰撞项,记为$I[\{n_{k\sigma}\}]$,其反映的是单位时间内由于碰撞导致的分布函数变化,当不存在碰撞时,该项自动为零.因此,综合这两部分的效果,我们得到半经典的Boltzman方程为:

$$\boxed{\frac{Dn_{k\sigma}(x,t)}{Dt} = \frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} + \dot{x}\cdot\nabla_x n_{k\sigma} + \dot{k}\cdot\nabla_k n_{k\sigma} = I[\{n_{k\sigma}\}].} \tag{4.80}$$

我们注意到,对于量子粒子而言,动量和位置并不能同时确定,因此上述方程中的分布函数只能看作是粒子所对应的波包的分布函数,这实际上要求波包在实空间扩展的范围远大于原胞,换句话说,对晶格中的电子来说,当其平均自由程远大于晶格尺度时,Boltzman 方程描述才是有效的.

碰撞项

碰撞项一般来说具有如下形式:

$$\boxed{I[\{n_{k\sigma}\}] = -\frac{1}{V}\sum_{k'\sigma'}\left(W_{k\sigma,k'\sigma'}n_{k\sigma}(1-n_{k'\sigma'}) - W_{k'\sigma',k\sigma}n_{k'\sigma'}(1-n_{k\sigma})\right)} \quad (4.81)$$

这里碰撞项说明导致分布函数$n_{k\sigma}$的改变来自于k态的粒子受到散射后成为k'态粒子(上式第一项)以及k'态粒子散射后成为k态粒子(上式第二项).注意到费米液体中的粒子是费米子,其必须满足Pauli不相容原理,因此我们必然要求散射后的状态在散射事件发生之前是没有粒子占据的.这样我们添加了$(1-n_{k\sigma}),(1-n_{k'\sigma'})$类型的因子,当然发生散射的状态本身也是需要有粒子占据的,所以我们也加上了因子$n_{k\sigma},n_{k'\sigma'}$.$W_{k\sigma,k'\sigma}$是单位时间内从$k,\sigma$ 态到k',σ'的跃迁概率,通常用Fermi黄金规则进行近似估计.

在最简单的弛豫时间近似下,碰撞项可以用弛豫时间或者是准粒子的寿命的导数$1/\tau$代替,即

$$I[\{n_{k\sigma}\}] = -\frac{n_{k\sigma}-n^0_{k\sigma}}{\tau_k} \quad (4.82)$$

这里$n^0_{k\sigma}$是平衡时的分布.这里τ_k是弛豫时间或者说是粒子的寿命.在金属当中的平均自由程l就等于(费米面上电子的平均)弛豫时间和费米速度的乘积,即$l = v_F\tau_F$.事实上,如果我们在Boltzman方程中忽略位置与动量的时间依赖,那么就有如下简单形式,

$$\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} = -\frac{n_{k\sigma}-n^0_{k\sigma}}{\tau_k} \quad (4.83)$$

令$n_{k\sigma} = n^0_{k\sigma} + \delta n_{k\sigma}$,那么有$\partial_t\delta n_{k\sigma} = -\delta n_{k\sigma}/\tau_k$. 我们可以解得$\delta n_{k\sigma}(t) = \delta n_{k\sigma}(0)e^{-t/\tau_k}$. 这说明当我们让粒子分布偏离平衡分布$n^0_{k\sigma}$时,相对平衡分布的偏离$\delta n_{k\sigma}$会以指数的方式在$\tau_k$的时间尺度内趋于零,也就是说偏离平衡的系统会在时间τ_k的尺度内返回/弛豫到平衡态,因此我们称τ_k 为弛豫时间,也就是从非平衡返回平衡所需要的特征时间尺度.

杂质散射

对于简单的稀薄杂质散射,根据费米黄金规则可知$W_{k,k'} = \frac{2\pi}{\hbar}n_i|\langle k'|U|k\rangle|^2\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})$,这里$n_i$是杂质密度,$U$是杂质势.

1. 由于δ函数的存在,$W_{k,k'}$仅当$\varepsilon_k = \varepsilon_{k'}$时跃迁概率才不为零.这说明杂质散射是弹性散射,不改变动量大小只改变动量的方向;

2. 杂质散射的$W_{k,k'}$并不依赖于粒子分布函数,这实际上是我们假定粒子之间彼此独立的结果.对于电子-电子相互作用或者电子-声子相互作用,$W_{k,k'}$会显著得依赖粒子的分布函数;

3. $W_{k,k'} = W_{k',k}$,这是细致平衡条件的体现,也就是说微观上粒子在不同态之间的往复跃迁是可逆的.

这样杂质散射的碰撞项可以简化为

$$I[\{n_{k\sigma}\}] = -\frac{1}{V}\sum_{k'\sigma'} W_{k,k'}(n_{k\sigma} - n_{k'\sigma'}) \tag{4.84}$$

进一步,如果ε_k仅依赖于$|k|$,那么可以证明:如果$n_{k\sigma} = n^0_{k\sigma} + \vec{k}\cdot\vec{\alpha}(\varepsilon(k))$,那么碰撞项可以精确化为弛豫时间的形式,此时弛豫时间的逆定义为

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{1}{V}\sum_{k'\sigma'} W_{k,k'}\left(1 - \frac{\vec{k}\cdot\vec{k'}}{|k||k'|}\right) = \frac{1}{V}\sum_{k'\sigma'} W_{k,k'}(1-\cos\theta_{k,k'}) \tag{4.85}$$

注意到这里的实际散射率(也叫做输运散射率)很明显和粒子散射前后的动量夹角$\cos\theta$有关,这表明只有那些动量方向改变很大的散射事件(例如动量直接反向的散射)才会对最后的散射有重要贡献.比如说,在讨论金属电阻时,只有那些让费米面附近电子动量方向大幅改变的散射才会对电阻有大的贡献,而电子动量方向变化很小的散射基本不贡献电阻.

无碰撞Boltzman方程与零声

我们知道,在正常的流体中存在碰撞主导的声波模式,其频率ω与准粒子寿命τ满足

$$\omega \ll \frac{1}{\tau} \Rightarrow \omega\tau \ll 1 \tag{4.86}$$

而对于Landau费米液体还存在一种所谓的零声模式,其存在条件是

$$\omega \gg \frac{1}{\tau} \Rightarrow \omega\tau \gg 1 \tag{4.87}$$

即在该类模式中碰撞效应是可以忽略的.

另一方面,根据经典的哈密顿力学形式,我们知道系统中粒子的运动满足以下两个哈密顿方程

$$\dot{x} = \nabla_k\varepsilon_k, \quad \dot{k} = -\nabla_x\varepsilon_k \tag{4.88}$$

代入这两个关系有

$$\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} + \nabla_k\varepsilon_k\cdot\nabla_x n_{k\sigma} - \nabla_x\varepsilon_k\cdot\nabla_k n_{k\sigma} = I[\{n_{k\sigma}\}] \tag{4.89}$$

令分布函数$n_{k\sigma}(x,t) = f_F(\varepsilon^0_k) + e^{iqx-i\omega t}\alpha_{k\sigma}$, 这里的$\alpha_{k\sigma}$是关于$k$的缓慢变化的函数,这意味着$\nabla_k\alpha_{k\sigma} \simeq 0$.当$\omega \gg 1/\tau$ 时碰撞项$I[\{n_{k\sigma}\}]$可以忽略,则有

$$\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} + \nabla_k\varepsilon_k\cdot\nabla_x n_{k\sigma} - \nabla_x\varepsilon_k\cdot\nabla_k n_{k\sigma} = 0 \tag{4.90}$$

这就是所谓的无碰撞Boltzman方程.代入分布函数的形式可得:

$$\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t} + \nabla_k\varepsilon_k\cdot\nabla_x n_{k\sigma} = -i\omega e^{iqx-i\omega t}\alpha_{k\sigma} + i\vec{v}^*_F\cdot\vec{q}e^{iqx-i\omega t}\alpha_{k\sigma} = -i(\omega - \vec{v}^*_F\cdot\vec{q})e^{iqx-i\omega t}\alpha_{k\sigma} \tag{4.91}$$

这里

$$\nabla_k \varepsilon_k = \nabla_k \varepsilon_k^0 + \Sigma_{k'\sigma'} \nabla_k f_{k\sigma,k'\sigma'} \delta n_{k'\sigma'} \simeq \nabla_k \varepsilon_k^0 = \vec{v}_F^* \tag{4.92}$$

同时我们有

$$\nabla_x \varepsilon_k = iqe^{iqx-i\omega t} \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'} \alpha_{k'\sigma'} \tag{4.93}$$

$$\nabla_k n_{k\sigma} = \nabla_k f_F(\varepsilon_k^0) + e^{iqx-i\omega t} \nabla_k \alpha_{k\sigma} = v_F^* \frac{\partial f_F(\varepsilon_k^0)}{\partial \varepsilon_k^0} \tag{4.94}$$

代入这几项可得

$$(\omega - \vec{v}_F^* \cdot \vec{q}) \alpha_{k\sigma} + \vec{q} \cdot \vec{v}_F^* \frac{\partial f_F(\varepsilon_k^0)}{\partial \varepsilon_k^0} \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'} \alpha_{k'\sigma'} = 0 \tag{4.95}$$

令$\omega = sv_F^* q$,$\vec{q} \cdot \vec{v}_F^* = v_F^* q \cos\theta_k$ 可得

$$(s - \cos\theta_k) \alpha_{k\sigma} + \cos\theta_k \frac{\partial f_F(\varepsilon_k^0)}{\partial \varepsilon_k^0} \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'} \alpha_{k'\sigma'} = 0 \tag{4.96}$$

再令$\alpha_{k\sigma} = \eta_\sigma(\hat{k}) \frac{\partial f_F(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}$可得

$$(s - \cos\theta_k) \eta_\sigma(\hat{k}) + \cos\theta_k \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'} \eta_{\sigma'}(\hat{k}') \frac{\partial f_F(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'} = 0 \tag{4.97}$$

其中

$$\begin{aligned} -\sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'} \eta_{\sigma'}(\hat{k}') \frac{\partial f_F(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'} &= \sum_{\sigma'} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \int d\varepsilon \frac{N^*(\varepsilon)}{2} f_{k\sigma,k'\sigma'} \eta_{\sigma'}(\hat{k}') \delta(\varepsilon') \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma'} N^*(0) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} f_{\sigma,\sigma'}(\cos\theta_{k,k'}) \eta_{\sigma'}(\hat{k}') \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma'} N^*(0) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} f^s(\cos\theta_{k,k'}) \eta_{\sigma'}(\hat{k}') \end{aligned}$$

为简单起见,我们假定一个各向同性相互作用且考虑自旋无关的情况,此时$N^*(0) f^s(\cos\theta_{k,k'})$ 若用勒让德多项式展开仅会包含$l = 0$项,因此有$N^*(0) f^s(\cos\theta_{k,k'}) = F_0^s$,(回忆$F^s(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) F_l^s P_l(\cos\theta)$) 同时$\eta_\sigma(\hat{k}) = \eta(\hat{k})$,我们得到

$$-\sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'} \eta_{\sigma'}(\hat{k}') \frac{\partial f_F(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'} = F_0^s \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \eta(\hat{k}') \tag{4.98}$$

则有

$$\eta_\sigma(\hat{k}) = \frac{\cos\theta_k}{s - \cos\theta_k} F_0^s \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \eta(\hat{k}') \tag{4.99}$$

上式两边同乘以角度积分并消去相同的形式可得

$$1 = F_0^s \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\cos\theta_k}{s - \cos\theta_k} = F_0^s \left(\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 \right) \tag{4.100}$$

即有

$$\boxed{\frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1}-1=\frac{1}{F_0^s}} \tag{4.101}$$

当$F_0^s \gg 1$时有$s \approx \sqrt{\frac{F_0^s}{3}}$,这样我们发现体系的该类声波(零声模式)的波速是(注意到我们在讨论开始时假设了波动解$n_{k\sigma}(x,t)=f_F(\varepsilon_k^0)+e^{iqx-i\omega t}\alpha_{k\sigma}$, 这个波动解的色散关系为$\omega = sv_F^* q$)

$$u = sv_F^* \approx v_F^*\sqrt{\frac{F_0^s}{3}} > v_F^* \tag{4.102}$$

是一个比费米速度还要大的波速,(ln函数中出现的$s-1$因子自然要求$s>1$)其已经被中子和X射线散射所观察到.

- 零声模式来自于分布函数在时空上的振荡/波动行为,可以看作是费米液体中的费米球的集体运动,它与费米液体的准粒子激发是全然不同的.
- 作为比较,我们知道Coulomb电子气的集体模式是等离激元,但等离激元需要eV级别的能量才可能激发,而这里的零声模式是无能隙的低能激发.

如果我们考虑费米液体的准粒子具有自旋,那么通过类似的Boltzman方程推导可知费米液体也会有自旋密度波,这在一些非磁性金属中已经观测到.

零声的另一种推导

我们已经利用无碰撞Boltzman方程得到了费米液体中的零声模式.既然费米液体源自相互作用费米子系统,那么我们也可以用更为传统的多体物理语言来得到同样的零声激发.

回忆Coulomb电子气的讨论,我们知道由于相互作用的存在,电子之间的相互作用会受到屏蔽效应的影响.我们用介电函数$\varepsilon(q,\omega)=1+\frac{4\pi e^2}{q^2}\chi(q,\omega)$描述屏蔽效应,而$\varepsilon(q,\omega)=0$给出集体激发.由于Coulomb 力的长程特性,此时的集体激发是具有eV激发能隙的等离激元.

类似的,对于一般相互作用费米子体系,若设相互作用为V_q,[29]那么介电函数可以写成$\varepsilon(q,\omega)=1+V_q\chi(q,\omega)$.既然我们主要关心的是长波极限下可能存在的集体激发,那可以设$q\to 0$,这样$V_q \to V_0$.若用无相互作用体系的χ_0代替χ,则在$q\to 0$ 下有

$$\begin{aligned}
\chi_0(q,\omega) &= \frac{1}{V}\sum_k \frac{f_F(\varepsilon_{k+q})-f_F(\varepsilon_k)}{\omega-\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_k} \simeq \frac{1}{V}\sum_k \frac{(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\cdot\frac{\partial f_F(\varepsilon_k)}{\partial\varepsilon_k}}{\omega-\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_k} \\
&\simeq -\frac{1}{V}\sum_k \delta(\varepsilon_k)\frac{\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k}{\omega-\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_k} \simeq \int d\varepsilon N(\varepsilon)\delta(\varepsilon)\int\frac{d\Omega}{4\pi}\frac{\vec{v}_F\cdot\vec{q}}{\omega-\vec{v}_F\cdot\vec{q}} \\
&= N(0)\int_{-1}^{1}\frac{d\cos\theta}{2}\frac{v_F q\cos\theta}{\omega-v_F q\cos\theta} = \frac{N(0)}{2}\left[2-\frac{\omega}{v_F q}\ln\frac{\omega+v_F q}{\omega+v_F q}\right]
\end{aligned} \tag{4.103}$$

[29]相应的无自旋哈密顿量是$\hat{H}=\sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \frac{1}{2}\sum_{k,k',q} V_q \hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_{k'-q}\hat{c}_{k'}\hat{c}_k$.

设$\omega = sv_F q$,我们发现$\chi_0 \simeq N(0)\left[1 - \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1}\right]$.结合$\varepsilon(q,\omega) = 1 + V_0\chi(q,\omega) = 0$就得到

$$1 + V_0 N(0)\left[1 - \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1}\right] = 0.$$

再令$F_0^s \equiv V_0 N(0)$,我们就得到$\frac{1}{F_0^s} = \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1} - 1$.注意到这个结果与Boltzman方程所得一致,这说明我们可以通过介电函数的零点得到一般相互作用体系的集体激发模式.

- 介电函数$\varepsilon(q,\omega) = 0$给出相互作用体系的集体激发,例如电子气中的等离激元和费米液体中的零声.

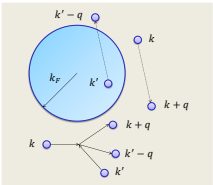


Figure 4.7: 费米液体准粒子之间的最低阶散射过程,一个准粒子与准空穴散射后转变为两个准粒子.

费米液体准粒子的散射率:黄金规则定乾坤

最后,我们考虑准粒子的散射率,也就是一个动量为k,能量为ε_k^0 的准粒子衰变至其他态的概率.我们考虑这个准粒子原先在费米面之上,这样散射前的态是$|i\rangle = \hat{c}_k^\dagger|FS\rangle$, 注意到一般的四费米子相互作用导致从$k,k'$ 态散射至$k+q,k'-q$,

$$\hat{H}_{int} = \sum_{k,k',q} V_q \hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_{k'-q}^\dagger \hat{c}_{k'}\hat{c}_k \tag{4.104}$$

那么散射后的态$|f\rangle = \hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_{k'-q}^\dagger \hat{c}_{k'}|FS\rangle$ 包含两个准粒子态和一个准空穴态,动量为$k+q,k'-q,k'$,能量为$\varepsilon_{k+q},\varepsilon_{k'-q},-\varepsilon_{k'}$. 那么根据费米黄金定则可得准粒子态$k$的散射概率:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau_k} &= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_f |\langle f|\hat{H}_{int}|i\rangle|^2\delta(E_f-E_i) \\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{k',q} |V_q\langle FS|\hat{c}_{k'}^\dagger\hat{c}_{k'-q}\hat{c}_{k+q}\hat{c}_{k+q}^\dagger\hat{c}_{k'-q}^\dagger\hat{c}_{k'}\hat{c}_k\hat{c}_k^\dagger|FS\rangle|^2\delta(\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_{k'-q}-\varepsilon_{k'}-\varepsilon_k) \\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{k',q} |V_q(1-n_{k+q})(1-n_{k'-q})n_{k'}(1-n_k)|^2\delta(\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_{k'-q}-\varepsilon_{k'}-\varepsilon_k)
\end{aligned}$$

注意到我们假设的动量为k态在费米球外,故而零温时其费米球占据数n_k为零,而其他占据数为零或一,则可以把它们写到模方外面,则有

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau_k} &= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_f |\langle f|\hat{H}_{int}|i\rangle|^2\delta(E_f-E_i) \\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{k',q} |V_q|^2 n_{k'}(1-n_{k+q})(1-n_{k'-q})\delta(\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_{k'-q}-\varepsilon_{k'}-\varepsilon_k)
\end{aligned}$$

定性而言,我们知道要使得散射发生,对于散射后的准粒子有$\varepsilon_{k+q},\varepsilon_{k'-q} > E_F$,由能量守恒可知$\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_{k'} > 2E_F$即$\varepsilon_{k+q}-E_F > E_F-\varepsilon_{k'}$.这说明能够与$k$态准粒子发生散射的粒子$k'$ 的能量范围是$(0,\varepsilon_k-E_F)$,也就是费米面下$\frac{\varepsilon_k-E_F}{E_F}$ 的那些占据态对散射有贡献.另一方面,散射后的准粒子态能量范围也在$(0,\varepsilon_k-E_F)$,

因此也有同样的贡献因子$\frac{\varepsilon_k-E_F}{E_F}$,那么我们得到

$$\frac{1}{\tau_k}\propto\frac{(\varepsilon_k-E_F)^2}{E_F} \tag{4.105}$$

即有准粒子散射率正比于准粒子能量相对于费米能差值的平方,也就是所谓的能量二次方依赖.更一般地,在有限温度,我们有[30]

$$\boxed{\frac{1}{\tau_k}=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{w^2}{32E_F}[(\varepsilon_k-E_F)^2+(\pi k_BT)^2],\quad w\sim\langle V_q\rangle} \tag{4.106}$$

如果准粒子的散射主导低温的电阻,并且我们假定电阻满足标准的Drude公式形式,[31] 则有

$$\boxed{\rho\approx\frac{m^*}{ne^2\tau}\propto\left(\frac{1}{E_F}\right)^2T^2\equiv AT^2,\quad A\propto\left(\frac{1}{E_F}\right)^2} \tag{4.107}$$

对于通常的金属系统,其费米能都是eV量级,因此相比于声子对电阻的贡献,电子相互作用的T^2很难观察到.[32]但是对于能带比较窄(费米能小)的$3d$过渡金属和重费米子金属($E_F\sim 1meV$),T^2关系可以较为容易得在低温下观测到.我们知道比热系数$\gamma^*\propto m^*\propto\frac{1}{E_F}$,那么可以发现

$$\frac{A}{(\gamma^*)^2}\propto\mathcal{O}(1) \tag{4.108}$$

也就是Kadowaki-Woods比率,实验上发现很多重费米子材料在低温下也满足这个比率.

准粒子概念的推广

在费米液体中,准粒子是相互作用修饰的自由费米子,其系统能量满足Landau能量泛函.如果更广义地定义准粒子,即多体系统的低能激发对能量的贡献可以写成是如下可叠加形式,那么这些激发对应的粒子$\{n_\alpha\}$也称为准粒子:

$$E=\sum_\alpha\varepsilon_\alpha n_\alpha+\sum_{\alpha\beta}F_{\alpha\beta}n_\alpha n_\beta \tag{4.109}$$

可以看到这个形式是Landau能量泛函的推广,不仅费米液体满足该形式,以下这些典型凝聚态系统也满足:

[30]费米面上准粒子的寿命$\tau_k\sim\frac{E_F}{T^2}$或者说准粒子间的散射会使系统达到热平衡,达到热平衡的时间即是τ_k.此外,下面结果的详细计算可以参考Coleman书的6.7 节.

[31]一般金属的电阻可用包含碰撞项的Boltzman方程进行近似计算,例如声子导致的有限电子电阻.当然,严格来说$1/\tau_k$实际上是单粒子的散射率而非电阻或光学电导所直接涉及的输运散射率$1/\tau_{tr}$,详细的研究表明$1/\tau_{tr}\propto\omega^2+b\pi^2T^2$,这里$1\le b<\infty$而标准的费米液体结果是$b=4$(利用Kubo公式可以直接得到).[Maslov and Chubukov,Phys.Rev.B **86**,155137 (2012).]

[32]声子导致金属中电阻在低温和高温下分别具有T^5和T的温度依赖

- 绝缘体和半导体;
- 常规超导体(超导准粒子);
- 无序金属和绝缘体;
- Luttinger液体(集体激发的电荷与自旋密度波);
- 分数量子Hall效应(任意子);

因此,大量凝聚态系统其低能物理都由准粒子描述.

费米液体的微观基础:场论方法初显神威*

历史上,在费米液体理论的唯象形式提出以后,人们从量子场论的角度重新审视了该理论,其主要结论是费米液体在大于等于二维的空间时在弱相互作用下总是稳定的.[33]在微观上,费米液体的特点是其(推迟)Green函数具有非零的准粒子权重$0 < Z \leq 1$,[34]在光谱类型的实验(例如角分辨光电子谱)中可以探测到比较锋锐的峰,即所谓的准粒子相干峰,另外准粒子权重还体现在费米子分布函数在费米能处有阶跃行为,阶跃的程度由Z确定.

对于相互作用的电子/费米子系统,其单粒子(推迟)Green函数具有以下的一般形式:

$$G(k,\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma(k,\omega)} \tag{4.110}$$

这里ε_k是无相互作用时的色散关系,而$\Sigma(k,\omega)$代表相互作用的修正,即所谓的自能函数,简称为自能.根据费米液体理论,我们知道相互作用的费米子系统与无相互作用的费米子系统有相同的费米面结构,也就是说有相同的费米动量.那么我们把自能函数在费米面附近展开可得(自能可以写成实部与虚部$\Sigma = \mathrm{Re}\Sigma + i\mathrm{Im}\Sigma$,对费米液体而言虚部都是动量和频率的高次函数,因而在低阶展开中可以忽略虚部的贡献)

$$\Sigma(k,\omega) = \Sigma(k_F,0)+(k-k_F)\partial_k\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0}+\omega\partial_\omega\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0}+\mathcal{O}(k^2,\omega^2) \tag{4.111}$$

忽略自能中的关于能量动量依赖的高阶项可得

$$\begin{aligned} G(k,\omega) &= \frac{1}{\omega - v_F(k-k_F) - \Sigma(k_F,0) - (k-k_F)\partial_k\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0} - \omega\partial_\omega\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0}} \\ &= \frac{1}{\omega(1-\partial_\omega\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0}) - (v_F + \partial_k\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0})(k-k_F)} \end{aligned} \tag{4.112}$$

这里已经令$\Sigma(k_F,0) = 0$以固定费米能等于零.定义准粒子权重Z_ω为

$$Z_\omega = \frac{1}{1-\partial_\omega\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0}} \tag{4.113}$$

和准粒子费米子速度v_F^*

$$v_F^* = Z_\omega(v_F + \partial_k\Sigma(k,\omega)|_{k=k_F,\omega=0}) \tag{4.114}$$

我们得到

$$G(k,\omega) = \frac{Z_\omega}{\omega - v_F^*(k-k_F)} \tag{4.115}$$

注意到这个Green函数与自由费米子是几乎相同的,唯一的区别在于准粒子权重Z_ω,当准粒子权重Z_ω的动量依赖并不显著时,[35]我们可以写为$Z_\omega = Z$,则有

$$G(k,\omega) = \frac{Z}{\omega - v_F^*(k-k_F)} + G_{incoherent} \tag{4.116}$$

[33]除了唯一的BCS超导不稳定性以外

[34]在量子场论中也称为波函数重整化因子

[35]原则上费米面可以不是简单的球型,则不同方向的费米波矢k_F 并不相同,而是依赖于取向

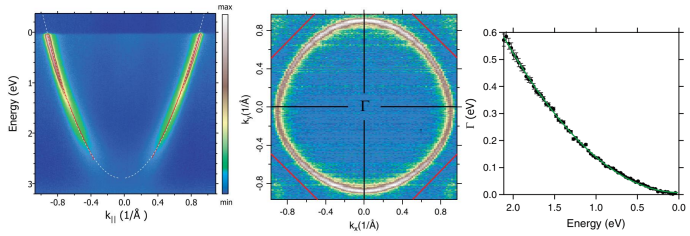


Figure 4.8: 金属Na的ARPES实验结果.(a)电子色散关系随$k_{\|}=k_y$的变化;(b)(110)方向测量到的费米面;(c)电子的散射率Γ随能量的变化.

这里我们重新引入了除相干的准粒子部分以外的非相干部分,非相干部分通常作为背景出现,并不导致物理量的奇异修正.

- 根据上述电子Green函数的形式,我们看到Z衡量了相互作用电子系统中的电子在多大程度上可以看作近似的无相互作用费米子($\frac{1}{\omega-v_F^*(k-k_F)}$代表费米速度为$v_F^*$的无相互作用费米子);
- 可以证明,这种形式的Green函数在微扰论框架内是系统的自洽解.[36]

光电子谱可以测量电子的谱函数$A(k,\omega)$[37]

$$\boxed{A(k,\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(k,\omega)=Z\delta(\omega-v_F^*(k-k_F))+A_{incoherent}} \tag{4.117}$$

一般来说,谱函数$A(k,E=\hbar\omega)$可以写成$A(k,E)=\frac{-\mathrm{Im}\Sigma(k,E)}{(\omega-\varepsilon_k-\mathrm{Re}\Sigma(k,E))^2+\mathrm{Im}\Sigma(k,E)}$,如果其可以用Lorentz型(形如$\frac{\Gamma}{x^2+\Gamma^2}$)进行拟合,那么谱函数的极大值位置对应着电子的色散关系,例如图4.5(a)给出了金属Na在ARPES实验中测得的色散关系,[38]其对应着漂亮的动量二次依赖关系($\varepsilon_{k_x,k_y,k_z}\simeq\varepsilon_{k_x,0,k_z}+\frac{\hbar^2k_y^2}{2m^*}$).(b)给出了(110)方向的费米面,其费米波矢为$k_F=0.911/\mathring{A}$.(c)则给出了电子的散射率,其显示费米液体理论所预言的能量平方关系($\Gamma(E)=\alpha E^2$.[39]

显然非零的准粒子权重Z导致锋锐(δ函数)的准粒子峰,而根据谱定理可得费米子分布函数在费米能附近的形式

$$n(k\to k_F)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_F(\omega)A(k\to k_F,\omega)\simeq Zf_F(v_F^*(k-k_F)) \tag{4.118}$$

[36]参看附录4.7.2

[37]严格来说是谱函数与费米分布函数的乘积,即$A(k,\omega)f_F(\omega)$

[38][Potorochin et al.,Lifetime of quasiparticles in the nearly free electron metal sodium,Phys.Rev.B **106**,125138(2022)]

[39]这里实验拟合出的$\alpha=0.13$远大于RPA近似给出的$\alpha=0.076$的结果,这说明金属Na性质的定量理解需要超越简单的RPA理论,例如GW近似或局域场修正

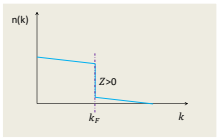


Figure 4.9: 费米液体中费米子的动量分布函数,注意费米动量处的有限阶跃Z.

在零温时有

$$\boxed{n(k \to k_F) \simeq Z\theta(k - k_F)} \tag{4.119}$$

这表明相互作用费米子的分布函数在k_F处依然有限跃变Z.

- 换句话说,费米面上的有限越变$Z(0 < Z \leq 1)$是费米液体存在的重要特征.

Luttinger定理*

Luttinger通过对微扰级数的分析证明费米液体满足Luttinger定理[40]:

$$\boxed{n = \int^{k_F} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} = \frac{\mathcal{V}_{FS}}{(2\pi)^d}} \tag{4.120}$$

即费米液体中的费米子数密度等于其费米面包围的体积除以动量空间因子.换句话说,动量空间中每个费米子占据的体积是$(2\pi)^d/V$, 那么N个费米子占据的总体积就是$V_N = N(2\pi)^d/V$,这样$n = \frac{N}{V} = \frac{V_N}{(2\pi)^d}$.基态时费米子所占据的体积就是费米球的体积$V_N = V_{FS}$,这样我们重新得到Luttinger定理.

理论上可以用系统是否满足Luttinger定理来判断系统是否是费米液体.当然,需要指出,一维Luttinger液体虽然并不是费米液体态,但其满足Luttinger定理.其物理原因是Luttinger液体理论在构造的时候便假设相互作用不改变费米点的位置,所有的相互作用只是修正向前散射,这样的效果是费米速度被修正而费米点不改变.

费米液体的序参量*

作为本章的结束,我们考虑一个简单的问题,即凝聚态物理中无能隙模式通常来自于系统的连续对称被自发破缺,但是我们知道费米气体或者说费米液体,其也具有无能隙的准粒子激发和零声模式,那么我们可以把正常费米液体看作一种有序态吗?

[40]详细说明请参看附录4.7.3

这个问题的答案事实上目前仍然在争议之中,在这里我们仅考虑一个简单的可能性. [41]无论是费米液体还是费米气体,其基态都是填满的费米海,这个有良好定义的状态的熵为零,也就表明系统高度有序,可以看作是一类有序态.既然是有序态,那么它的序参量又是什么？一个可能的回答是序参量就是费米面自身.费米面是动量空间中锋利的曲面,它破坏了平移任意动量的连续变化.因此,费米液体可以看作是动量空间中的有序态.在数学上,我们可以用非零的准粒子权重Z来作为实际的费米液体序参量.在这个意义上,因费米面形状振荡导致的零声模式可以看作是系统倾向于恢复动量空间平移不变性而产生的Goldstone模式.

本章小结与进一步阅读

本章小结 相互作用费米子系统的低能物理由费米液体描述;费米液体的激发包括准粒子和集体模式,前者决定热力学与输运性质;相互作用影响准粒子有效质量以及各类极化率.

本章关键词 费米液体;准粒子;绝热性;零声;准粒子散射率;准粒子权重;Luttinger定理

进一步阅读 郝柏林院士写的纪念文章《朗道百年》;G.Baym和C.Pethick的《Landau Fermi-liquid theory:concepts and applications》第一章;P.Coleman的《Introduction to Many-Body Physics》第六章

[41]Khomskii,Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids,第十章

附录

带电费米液体:Landau-Silin理论

对于实际的电子流体,比如最常见的金属电子气体,电子间存在长程的库伦相互作用,这与费米液体中的几乎短程的相互作用函数$f_{k\sigma,k'\sigma'}$有很大的区别,为了解决这个问题,提出了所谓的Landau-Silin理论,即把库伦势吸收进Landau相互作用函数的定义中:

$$f_{k\sigma,k'\sigma'}(q)=\frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2}+f_{k\sigma,k'\sigma'} \tag{4.121}$$

注意到库伦势部分是各向同性的相互作用,那么再Legendra函数展开式仅仅改变$l=0$的对称部分s的Landau参数,

$$F_l^s(q)=\frac{e^2N^*(0)}{\varepsilon_0 q^2}\delta_{l,0}+F_l^s \tag{4.122}$$

那么自旋相关的物理量不受影响,而电荷磁化率则变为

$$\chi_s(q)=\frac{N^*(0)}{1+F_0^s(q)}=\frac{N^*(0)}{1+\frac{e^2N^*(0)}{\varepsilon_0 q^2}+F_0^s} \tag{4.123}$$

费米液体作为自洽解

作为一个自洽的理论,我们需要让假设的Green函数是一个自洽的解,也就是我们假设的准粒子形式在代入自能后依然具有假设的形式.为了明确起见,我们考虑如下的无自旋费米子哈密顿量:

$$\hat{H}=\sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k+\sum_{k,k',q} V_q c_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c_{k'}c_k \tag{4.124}$$

这样对应的自由Green函数是(用实线表示,如图4.10所示)

$$G^{(0)}(k,\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k} \tag{4.125}$$

同时四费米子相互作用的顶角是$-V_q$,(虚线表示)在最低阶近似下的单粒子Green函数是

$$G(k,\omega_n)=\frac{1}{(G^{(0)}(k,\omega_n))^{-1}-\Sigma^{(1)}(k,\omega_n)} \tag{4.126}$$

$$\begin{aligned}
\Sigma^{(1)}(k,\omega_n) &= -T\sum_{\omega_{n'}}\sum_{k'}(-V_0)G^{(0)}(k',\omega_{n'})-T\sum_{\Omega_n}\sum_q V_q G^{(0)}(k+q,\omega_n+\Omega_n)\\
&= T\sum_{\omega_{n'}}\sum_k \frac{V_0}{i\omega_{n'}-\varepsilon_{k'}}-T\sum_{\Omega_n}\sum_q \frac{V_q}{i\omega_n+i\Omega_n-\varepsilon_{k+q}}\\
&= V_0\sum_{k'} f_F(\varepsilon_{k'})+\sum_q f_B(\varepsilon_{k+q}-i\omega_n)V_q = V_0\sum_{k'} f_F(\varepsilon_{k'})-\sum_q V_q f_F(\varepsilon_{k+q})\\
&= V_0\sum_{k'} f_F(\varepsilon_{k'})-\sum_{k'} V_{k'-k} f_F(\varepsilon_{k'})
\end{aligned} \tag{4.127}$$

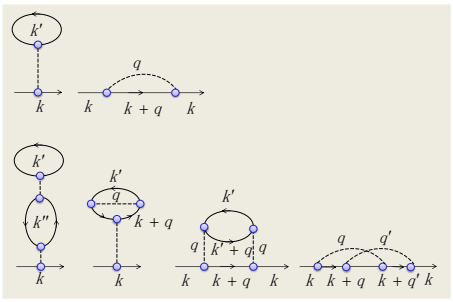


Figure 4.10: 相互作用费米子的一阶(第一行)和二阶自能图(第二行).

注意$-V_0$的负号来自费米子形成的圈,每一个交点处满足动量–能量守恒,然后所有的内部变量如k', k'', q都需要求和或积分.可以看到一阶自能修正是频率无关的,并且如果把它归并于费米子色散,则有$\varepsilon_k^* = \varepsilon_k + V_0 \sum_{k'} f_F(\varepsilon_{k'}) - \sum_{k'} V_{k'-k} f_F(\varepsilon_{k'})$, 回忆Coulomb 电子气在Hartree-Fock近似下的单电子能量,我们发现一阶自能修正就是常用的Hartree-Fock近似.因此,为了得到频率依赖的自能,我们需要考虑二阶自能的修正.(proper) 二阶自能总计有四个,其中最主要的是相互作用被单个费米子圈图修正的那一个,即

$$\begin{aligned}
\Sigma^{(2s)}(k,\omega_n) &= T\sum_{\Omega_n}\sum_{q}\left[V_q^2 G^{(0)}(k+q,\omega_n+\Omega_n)(-T)\sum_{\omega_{n'}}\sum_{k'} G^{(0)}(k',\omega_{n'})G^{(0)}(k'+q,\omega_{n'}+\Omega_{n'})\right] \\
&= T\sum_{\Omega_n}\sum_{q}\left[\frac{V_q^2}{i\omega_n + i\Omega_n - \varepsilon_{k+q}}(-)\sum_{k'}\frac{f_F(\varepsilon_{k'}) - f_F(\varepsilon_{k'+q})}{i\Omega_n - \varepsilon_{k'+q} + \varepsilon_{k'}}\right] \\
&= \sum_{k',q}\frac{-V_q^2}{i\omega_n + \varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k+q}}(f_F(\varepsilon_{k+q}) + f_B(\varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'}))(f_F(\varepsilon_{k'}) - f_F(\varepsilon_{k'+q}))
\end{aligned}$$

当$T = 0$时有

$$\Sigma^{(2s)}(k,\omega_n) = \sum_{k',q}\frac{-V_q^2}{i\omega_n + \varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k+q}}(\theta(-\varepsilon_{k+q}) - \theta(\varepsilon_{k'+q} - \varepsilon_{k'}))(\theta(-\varepsilon_{k'}) - \theta(-\varepsilon_{k'+q}))$$

通过数值积分可以发现$\Sigma^{(2s)}(k,\omega_n)$的关于$\omega_n$和$k - k_F$的展开是非奇异的,也就是说我们有 $\Sigma^{(2s)}(k,\omega_n) = \Sigma^{(2s)}(k_F,0) + (k-k_F)\partial_k\Sigma^{(2s)}(k_F,0) + i\omega_n\partial_{\omega_n}\Sigma^{(2s)}(k_F,0) + \ldots$. 换句话说,如果我们把准粒子Green函数$G = \frac{Z}{i\omega_n - \varepsilon_k}$ 代入自能的表达式,那么所得到的自能恰好是假定的自能形式,这样整个理论是自洽的.

当然如果我们做一些近似可以更清晰地看到费米液体行为的自洽性.这一次,采用$G=\frac{Z}{i\omega_n-\varepsilon_k}$,这样二阶自能$\Sigma^{(2s)}$是

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2s)}(k,\omega_n) &= T\sum_{\Omega_n}\sum_q\left[V_q^2G(k+q,\omega_n+\Omega_n)(-T)\sum_{\omega_{n'}}\sum_{k'}G(k',\omega_{n'})G(k'+q,\omega_{n'}+\Omega_{n'})\right]\\ &= T\sum_{\Omega_n}\sum_q\left[\frac{-Z^3V_q^2}{i\omega_n+i\Omega_n-\varepsilon_{k+q}}\sum_{k'}\frac{f_F(\varepsilon_{k'})-f_F(\varepsilon_{k'+q})}{i\Omega_n-\varepsilon_{k'+q}+\varepsilon_{k'}}\right]\end{aligned}\tag{4.128}$$

现在考虑零温并假定q是一个小量,那么有

$$f_F(\varepsilon_{k'})-f_F(\varepsilon_{k'+q})\simeq-(\varepsilon_{k'+q}-\varepsilon_{k'})\frac{\partial f_F(\varepsilon_{k'})}{\partial\varepsilon_{k'}}\simeq(\varepsilon_{k'+q}-\varepsilon_{k'})\delta(\varepsilon_{k'})=v_F^*q\cos\theta\delta(\varepsilon_{k'})\tag{4.129}$$

这样

$$\begin{aligned}\sum_{k'}\frac{f_F(\varepsilon_{k'})-f_F(\varepsilon_{k'+q})}{i\Omega_n-\varepsilon_{k'+q}+\varepsilon_{k'}} &\simeq \int d\varepsilon_{k'}N^*(\varepsilon_{k'})\int\frac{d\theta}{2\pi}\frac{v_F^*q\cos\theta\delta(\varepsilon_{k'})}{i\Omega_n-v_F^*q\cos\theta}=N^*(0)\int\frac{d\theta}{2\pi}\frac{v_F^*q\cos\theta}{i\Omega_n-v_F^*q\cos\theta}\\ &= -N^*(0)\int\frac{d\theta}{2\pi}\left[1-\frac{i\Omega_n}{i\Omega_n-v_F^*q\cos\theta}\right]\\ &= -N^*(0)\left[1-\frac{|\Omega_n|}{\sqrt{\Omega_n^2+(v_F^*q)^2}}\right]\end{aligned}\tag{4.130}$$

在积分时我们考虑了二维的情况,三维的情况也是完全类似的.这样自能形式简化为

$$\Sigma^{(2s)}(k,\omega_n)=T\sum_{\Omega_n}\sum_q\left[\frac{Z^3N^*(0)V_q^2}{i\omega_n+i\Omega_n-\varepsilon_{k+q}}\left(1-\frac{|\Omega_n|}{\sqrt{\Omega_n^2+(v_F^*q)^2}}\right)\right]$$

在零温时对频率的求和可以换成对频率的积分,即$T\sum_{\Omega_n}\to\int\frac{d\Omega}{2\pi}$

$$\Sigma^{(2s)}(k,\omega_n)=\sum_q\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\frac{Z^3N^*(0)V_q^2}{i\omega_n+i\Omega-\varepsilon_{k+q}}\left(1-\frac{|\Omega|}{\sqrt{\Omega^2+(v_F^*q)^2}}\right)\right]$$

首先计算$k=k_F$,q是小量且频率ω_n为有限小量的情况,此时有$V_q\simeq V$(假设相互作用是非奇异的)

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2s)}(k_F,\omega_n) &\simeq \int\frac{d\theta}{2\pi}\frac{qdq}{2\pi}\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\frac{Z^3N^*(0)V^2}{i\omega_n+i\Omega-v_F^*q\cos\theta}\left(1-\frac{|\Omega|}{\sqrt{\Omega^2+(v_F^*q)^2}}\right)\right]\\ &= Z^3N^*(0)V^2\int\frac{qdq}{2\pi}\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\frac{-i\mathrm{sgn}(\omega_n+\Omega)}{\sqrt{(\omega_n+\Omega)^2+(v_F^*q)^2}}\left(1-\frac{|\Omega|}{\sqrt{\Omega^2+(v_F^*q)^2}}\right)\right]\end{aligned}$$

当Ω很大时($\Omega \gg \omega_n, v_F^* q$),由于关于Ω积分是奇函数,因此积分为零,所以我们考虑小Ω的情况($\Omega, \omega_n \ll v_F^* q$),

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2s)}(k_F,\omega_n) &\simeq \frac{-iZ^3N^*(0)V^2}{v_F^*}\int_0^{k_F}\frac{dq}{2\pi}\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\mathrm{sgn}(\omega_n+\Omega)\left(1-\frac{|\Omega|}{v_F^*q}\right)\right]\\ &= \frac{-iZ^3N^*(0)V^2}{v_F^*}\left[\frac{k_F\omega_n}{2\pi^2}-\frac{1}{v_F^*}\int_{\omega_n/v_F^*}^{k_F}\frac{dq}{4\pi^2}\frac{\omega_n^2\mathrm{sgn}(\omega_n)}{q}\right]\\ &= \frac{-iZ^3N^*(0)V^2}{v_F^*}\left[\frac{k_F\omega_n}{2\pi^2}-\frac{\ln(v_F^*k_F/\omega_n)}{4\pi^2v_F^*}\omega_n^2\mathrm{sgn}(\omega_n)\right] \quad (4.131)\end{aligned}$$

最后我们做解析延拓$i\omega_n \to \omega + i0^+$

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2s)}(k_F,\omega) &= \frac{-Z^3N^*(0)V^2}{v_F^*}\left[\frac{k_F\omega}{2\pi^2}+\frac{\ln(v_F^*k_F/-i\omega)}{4\pi^2v_F^*}i\omega^2\right]\\ &= \frac{-Z^3N^*(0)k_FV^2}{2\pi^2v_F^*}\omega+\frac{-Z^3N^*(0)V^2}{v_F^*}\frac{\ln(v_F^*k_F/-i\omega)}{4\pi^2v_F^*}i\omega^2\end{aligned}$$

注意到当自能的动量依赖比较弱时有$v_F^* = Zv_F$而$N^*(0) = N(0)/Z$

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2s)}(k_F,\omega) &= \frac{-ZN(0)k_FV^2}{2\pi^2v_F}\omega+\frac{-N(0)V^2}{v_F}\frac{\ln(v_F^*k_F/-i\omega)}{4\pi^2v_F}i\omega^2\\ &\sim -Z\alpha\omega - i\beta\omega^2\ln(v_F^*k_F/-i\omega), \alpha=\frac{V^2}{v_F^2}\quad \beta=\frac{V^2}{4\pi^2k_Fv_F^3}\end{aligned}$$

这样自能的实部是频率的一次方,而虚部是频率的二次,这样由准粒子权重的定义可知

$$Z=\frac{1}{1-\partial_\omega\Sigma^{(2s)}(k_F,0)}=\frac{1}{1+Z\alpha}\Rightarrow Z\sim\frac{1}{1+\alpha}\ (\alpha\ll1), Z\sim\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\ (\alpha\gg1) \quad (4.132)$$

显然,我们发现自能的形式与先前的假设形式是一样的,并且我们也得到了关于准粒子权重与相互作用的明确依赖关系.

- 费米液体解是相互作用费米系统的自洽解,在弱耦合时准粒子权重$Z \sim \frac{1}{1+\alpha}$而在强耦合时有$Z \sim \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$.
- 强耦合解的权重是个小量,此时对应的准粒子具有大的有效质量,也就是说强相互作用下准粒子有效质量会很大,产生重准粒子.

最后我们检视$\omega_n = 0$，$|k - k_F| \ll k_F$的情形.

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2s)}(k,0) &= Z^3N^*(0)V^2\sum_q\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\frac{1}{i\Omega-\varepsilon_{k+q}}\left(1-\frac{|\Omega|}{\sqrt{\Omega^2+(v_F^*q)^2}}\right)\right]\\ &= -Z^3N^*(0)V^2\sum_q\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\frac{i\Omega+\varepsilon_{k+q}}{\Omega^2+\varepsilon_{k+q}^2}\left(1-\frac{|\Omega|}{\sqrt{\Omega^2+(v_F^*q)^2}}\right)\right]\end{aligned}$$

这样自能的实部是

$$\mathrm{Re}\Sigma^{(2s)}(k,0)=-Z^3N^*(0)V^2\sum_q\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\frac{\varepsilon_{k+q}}{\Omega^2+\varepsilon_{k+q}^2}\left(1-\frac{|\Omega|}{\sqrt{\Omega^2+(v_F^*q)^2}}\right)\right]$$

同样考虑$\Omega\ll v_F^*q$则有

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\Sigma^{(2s)}(k,0) &= -Z^3N^*(0)V^2\sum_q\int\frac{d\Omega}{2\pi}\left[\frac{\varepsilon_{k+q}}{\Omega^2+\varepsilon_{k+q}^2}\left(1-\frac{|\Omega|}{v_F^*q}\right)\right]\\ &= -Z^3N^*(0)V^2\sum_q\left[\int\frac{d\Omega}{2\pi}\arctan\frac{\Omega}{\varepsilon_{k+q}}-\int\frac{d\Omega}{2\pi}\frac{\varepsilon_{k+q}}{\Omega^2+\varepsilon_{k+q}^2}\frac{|\Omega|}{v_F^*q}\right]\\ &= -Z^3N^*(0)V^2\sum_q\left[\frac{1}{2}-\frac{\varepsilon_{k+q}}{2\pi v_F^*q}\ln\frac{(v_F^*q)^2+\varepsilon_{k+q}^2}{\varepsilon_{k+q}^2}\right]\\ &\simeq -Z^3N^*(0)V^2\sum_q\left[\frac{1}{2}-\frac{\varepsilon_{k+q}}{2\pi v_F^*q}\ln\frac{(v_F^*q)^2}{\varepsilon_{k+q}^2}\right]\end{aligned}\tag{4.133}$$

这里第二项的能量积分的上限是v_F^*q,注意到第一项并没有动量依赖,因此我们考虑第二项

$$\mathrm{Re}\Sigma^{(2s)}(k,0)\sim -Z^3N^*(0)V^2\sum_q\left[-\frac{\varepsilon_{k+q}}{2\pi v_F^*q}\ln\frac{(v_F^*q)^2}{\varepsilon_{k+q}^2}\right]\tag{4.134}$$

考虑$k=(k_x,0)$,而典型的动量$q_x\le\frac{q_y^2}{k_F}$(这里x方向表示费米面的法向方向,动量相对于费米面取值),这样有

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\Sigma^{(2s)}(k,0) &\sim \frac{Z^3N^*(0)V^2}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F}dq_y\int_0^{q_y^2/k_F}dq_x\left[\frac{k_x+q_x}{q_y}\ln\frac{q_y^2}{(k_x+q_x)^2}\right]\\ &= \frac{Z^3N^*(0)V^2}{(2\pi)^3k_F}\int_0^{k_F}dq_yk_x(q_y-q_y\ln q_y-q_y)\\ &\sim Z^2N(0)V^2k_Fk_x\propto k_x.\end{aligned}\tag{4.135}$$

Luttinger定理

Luttinger-Ward泛函

在介绍Luttinger定理前,作为准备,这里先讨论所谓的Luttinger-Ward泛函.为了计算量子多体系统平衡态的热力学性质,Luttinger和Ward把系统的热力学势Ω(自由能)与电子的Green函数G直接联系在了一起,即[42]

$$\Omega[G]=-T\sum_n\sum_k e^{i\omega_n0^+}\left[\ln(-i\omega_n+\varepsilon_k+\Sigma(k,i\omega_n))+\Sigma(k,i\omega_n)G(k,i\omega_n)\right]+\Phi[G]\tag{4.136}$$

[42][Luttinger,Ward, Ground-State Energy of a Many-Ferraion System.II, Phys.Rev. **118**,1417(1960)]

这里ε_k是无相互作用时电子的色散,$\Sigma(k,i\omega_n)$,$G(k,i\omega_n)$分别是电子的自能和Green函数.$\Phi[G]$就是Luttinger-Ward泛函,也就是Φ仅明显地依赖于G而非其他量.进一步,Ω对于物理上正确的自能和Green函数求导都为零,即有

$$\frac{\partial\Omega[G]}{\partial\Sigma(k,i\omega_n)}=0\Rightarrow G(k,i\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k-\Sigma(k,i\omega_n)} \tag{4.137}$$

这就是熟悉的Dyson方程.同时有

$$\frac{\partial\Omega[G]}{\partial G(k,i\omega_n)}=0\Rightarrow \Sigma(k,i\omega_n)=\frac{1}{T}\frac{\partial\Phi[G]}{\partial G(k,i\omega_n)} \tag{4.138}$$

这个关系定义了Luttinger-Ward泛函与自能的关系.

根据平衡态热力学,我们知道电子数N与热力学势Ω的关系是$N=-\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}$.在$\Omega[G]$中,化学势一般吸收到色散关系$\varepsilon_k$中,即可以做替换$\varepsilon_k\to\varepsilon_k-\mu$.这样有

$$N=-\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}=-\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_\Sigma-\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\Sigma}\right)_\mu\frac{\partial\Sigma}{\partial\mu}=\sum_n\sum_k\left[\frac{T}{i\omega_n-\varepsilon_k-\Sigma(k,i\omega_n)}e^{i\omega_n0^+}+\frac{\partial\Omega[G]}{\partial\Sigma(k,i\omega_n)}\frac{\partial\Sigma(k,i\omega_n)}{\partial\mu}\right] \tag{4.139}$$

这里第一项来自对数项对化学势的导数.利用$\partial\Phi/\partial\Sigma=0$(对于固定的$\mu$)可知

$$N=T\sum_n\sum_k G(k,i\omega_n)e^{i\omega_n0^+} \tag{4.140}$$

当然,根据粒子数的定义,我们也可以得到相同的表达式:

$$N=\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\rangle=-\sum_k\lim_{\tau\to0^-}\langle T_\tau\hat{c}_k\hat{c}_k^\dagger(\tau)\rangle=\sum_k G(k,0^-)=T\sum_n\sum_k e^{-i\omega_n0^-}G(k,i\omega_n) \tag{4.141}$$

由于$0^-=-0^+$,这样我们就利用定义得到了正确的表达式.

在$T\to0$,也就是考虑零温极限时,对频率的求和可以转化为积分,此时$i\omega_n\to z$,复数$z\in(-i\infty,i\infty)$而

$$T\sum_n F(i\omega_n)\to\int_{-i\infty}^{i\infty}\frac{dz}{2\pi i}F(z). \tag{4.142}$$

这样我们发现零温的电子数可以表示为如下积分,

$$N=\sum_k\int\frac{dz}{2\pi i}G(k,z)e^{z0^+} \tag{4.143}$$

利用关系$\frac{\partial}{\partial z}\ln G^{-1}(k,z)=G(k,z)(1-\frac{\partial}{\partial z}\Sigma(k,z))$则有

$$N=\sum_k\int\frac{dz}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}\ln G^{-1}(k,z)+\sum_k\int\frac{dz}{2\pi i}G(k,z)\frac{\partial}{\partial z}\Sigma(k,z) \tag{4.144}$$

现在,我们对上式第二项做分部积分有

$$\begin{aligned}\int dzG(k,z)\frac{\partial}{\partial z}\Sigma(k,z) &= \int dz\frac{\partial}{\partial z}\left(G(k,z)\Sigma(k,z)\right)-\int dz\Sigma(k,z)\frac{\partial}{\partial z}G(k,z)\\ &= \left(G(k,z)\Sigma(k,z)\right)|_{-\infty}^{\infty}-\int dz\lim_{T\to0}\frac{1}{T}\frac{\partial\Phi[G]}{\partial G(k,z)}\frac{\partial G(k,z)}{\partial z}\\ &= \left(G(k,z)\Sigma(k,z)\right)|_{-i\infty}^{i\infty}-\lim_{T\to0}\frac{1}{T}\Phi[G]|_{-i\infty}^{i\infty}\end{aligned} \tag{4.145}$$

这里已经利用了关系$\Sigma(k,i\omega_n) = \frac{1}{T}\frac{\partial\Phi[G]}{\partial G(k,i\omega_n)}$并假设当$T \to 0$时其可替换为$\Sigma(k,z) = \lim_{T\to 0}\frac{1}{T}\frac{\partial\Phi[G]}{\partial G(k,z)}$.我们知道Green函数在$|z| \to \infty$时的渐进行为是$G \sim \frac{1}{z}$而自能$\Sigma \to 0$或非零的常数,因此$(G(k,z)\Sigma(k,z))\,|_{-i\infty}^{i\infty} = 0$.另一方面,(假设)$\Phi[G]$在$|z| \to \infty$为零以避免奇异性,这样这一项也是零.综合这两个结果,我们发现

$$\int dz G(k,z)\frac{\partial}{\partial z}\Sigma(k,z) = 0, \tag{4.146}$$

这样零温时的电子数可以表示为

$$N = \sum_k \int \frac{dz}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}\ln G^{-1}(k,z) \tag{4.147}$$

Luttinger定理

对于费米液体,其费米面所包围的动量空间体积正比于总费米子数,这就是著名的Luttinger定理. [43]根据上一节的讨论,我们知道零温时费米子数密度可以通过相应的单粒子Green 函数来表示:

$$N = \sum_k \int \frac{dz}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}\ln G^{-1}(k,z) \tag{4.148}$$

这里积分沿着虚轴进行.现在,让我们在复平面的左半边做一个无穷大半圆并与虚轴连在一起成为闭合回路,这样如果假设被积函数$\ln G$ 的奇异性仅来自对数所导致的支点和割线(branch cut),$((-\infty,0))$那么我们可以把积分回路形变为沿着割线上的路径$((0,-\infty)+i0^+)$ 和割线下的路径$((-\infty,0)-i0^+)$.对于Green函数$G(k,z)$,这相当于是把虚轴上半轴解析延拓为推迟Green函数$G(k,z) \to G(k,\omega+i0^+ = G^R(k,\omega))$而虚轴下半轴延拓为超前Green 函数$G(k,z) \to G(k,\omega - i0^+) = G^A(k,\omega)$.因此我们发现费米子(数)密度$n = N/V$是

$$\begin{aligned} n &= -\frac{1}{V}\sum_k \frac{1}{2\pi i}\left(\int_0^{-\infty} d\omega\frac{\partial}{\partial\omega}\ln G^R(k,\omega) + \int_{-\infty}^0 d\omega\frac{\partial}{\partial\omega}\ln G^A(k,\omega)\right) \\ &= \frac{1}{V}\sum_k \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^0 d\omega\frac{\partial}{\partial\omega}\ln\frac{G^R(k,\omega)}{G^A(k,\omega)} \end{aligned} \tag{4.149}$$

这样我们发现粒子数密度与推迟和超前Green函数比值的对数相关.事实上,这个结果也可以通过虚频Green直接得到,这对于我们理解温度效应对Luttinger定理的影响至关重要,因此我们这里给出简单的推导.首先,我们的出发点自然是$n = T\sum_n \frac{1}{V}\sum_k G(k,i\omega_n)e^{i\omega_n 0^+}$.然后假设我们对分立的虚频率$i\omega_n$也可以做导数操作,那么自然有$\frac{\partial}{\partial i\omega_n}\ln G^{-1}(k,i\omega_n) = G(k,i\omega_n)(1 - \frac{\partial}{\partial i\omega_n}\Sigma(k,i\omega_n))$,这样有$n = \frac{T}{V}\sum_k\sum_n \frac{\partial}{\partial i\omega_n}\ln G^{-1}(k,i\omega_n) + \frac{T}{V}\sum_k\sum_n G(k,i\omega_n)\frac{\partial}{\partial i\omega_n}\Sigma(k,i\omega_n)$,与先前讨论一样,第二项为零,只不过此时我们无需考虑有可能带来奇异性的

[43][Luttinger,Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a System of Interacting Fermions,Phys.Rev.**119**,1153(1960)]

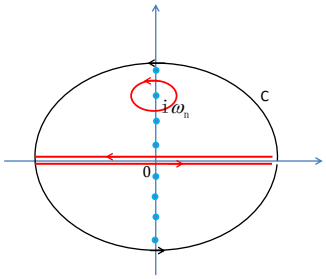


Figure 4.11: Green函数对数的频率求和所用的积分回路.黑线为无穷大的圆形回路,红线表示非零贡献的奇点.

零温极限.这样粒子数密度就由$n = \frac{T}{V}\sum_k \sum_n \frac{\partial}{\partial i\omega_n} \ln G^{-1}(k, i\omega_n)$决定.回忆虚频Green函数的Lehmann谱表示,我们知道$G(k, i\omega_n)$只在实轴上有奇异性而在上下复平面都解析,因此仿照$T\sum_n \frac{1}{i\omega_n - a}$的计算,我们可以构造复函数$F(z) = \frac{1}{e^{z/T}+1}\partial_z \ln G^{-1}(k, z)$.我们考虑以$z$为中心,半径为无穷大的圆包围费米分布函数$\frac{1}{e^{z/T}+1}$的极点$i\omega_n$以及$\partial_z \ln G^{-1}(z)$在实轴上的奇点/支点/割线,(如图4.11)那么根据柯西定理,挖去这些奇点的无穷大圆形回路的积分为零,即$\oint_c dzF(z) = 0$,同时由留数定理可知$\oint_c dzF(z) = 2\pi i \sum_n \mathrm{Res}F(z = i\omega_n) + \int_{\infty+i0^+}^{-\infty+i0^+} dzF(z) + \int_{-\infty-i0^+}^{\infty-i0^+} dzF(z)$, 即有

$$\int_{\infty+i0^+}^{-\infty+i0^+} dzF(z) + \int_{-\infty-i0^+}^{\infty-i0^+} dzF(z) = -2\pi i \sum_n \mathrm{Res}F(z = i\omega_n) \tag{4.150}$$

代入$F(z = i\omega_n)$的具体形式并展开费米分布函数的指数可得$\mathrm{Res}F(i\omega_n) = -T\partial_{i\omega_n} \ln G^{-1}(k, i\omega_n)$, 即有[44]

$$T\sum_n \frac{\partial}{\partial i\omega_n} \ln G^{-1}(k, i\omega_n) = \left(\int_{\infty+i0^+}^{-\infty+i0^+} + \int_{-\infty-i0^+}^{\infty-i0^+}\right) \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{e^{z/T}+1} \partial_z \ln G^{-1}(k, z) \tag{4.151}$$

[44]如果把下面的积分限合在一起考虑,那么相当于对围绕实轴无限扁平的回路积分,这样有$n = \frac{1}{V}\sum_k \oint \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{e^{z/T}+1} \partial_z \ln G^{-1}(k, z)$.

显然,右边第一个积分相当于是解析延拓为推迟Green函数,而第二个积分则是超前Green函数,于是有

$$T\sum_n \frac{\partial}{\partial i\omega_n}\ln G^{-1}(k,i\omega_n) = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi i}\frac{1}{e^{\omega/T}+1}\partial_\omega(\ln G^{-1,R}(k,\omega)-\ln G^{-1,A}(k,\omega)) \tag{4.152}$$

这就是有限温度的形式.[45]如果设$T=0$,那么费米分布函数就使得积分上限为零而得到先前的结果.如果我们考虑零温的自由费米子系统,那么上式成为

$$\begin{aligned} T\sum_n \frac{\partial}{\partial i\omega_n}\ln(i\omega_n-\varepsilon_k) &= -\int_{-\infty}^{0}\frac{d\omega}{2\pi i}\partial_\omega(\ln(\omega+i0^+-\varepsilon_k)-\ln(\omega-i0^+-\varepsilon_k)) \\ &= -\int_{-\infty}^{0}\frac{d\omega}{2\pi i}\left(\frac{1}{\omega+i0^+-\varepsilon_k}-\frac{1}{\omega-i0^+-\varepsilon_k}\right) \\ &= -\int_{-\infty}^{0}\frac{d\omega}{2\pi i}\left(\frac{1}{\omega-\varepsilon_k}-i\pi\delta(\omega-\varepsilon_k)-\frac{1}{\omega-\varepsilon_k}-i\pi\delta(\omega-\varepsilon_k)\right) \\ &= \int_{-\infty}^{0}d\omega\delta(\omega-\varepsilon_k)=\theta(-\varepsilon_k) \end{aligned} \tag{4.153}$$

这就是熟悉的零温自由费米子的分布函数.

无论何种方式,我们得到如下粒子数密度与推迟/超前Green函数对数的显式关系:

$$n=\frac{1}{V}\sum_k\frac{1}{2\pi i}\left[\ln\frac{G^R(k,0)}{G^R(k,-\infty)}-\ln\frac{G^A(k,0)}{G^A(0,-\infty)}\right] \tag{4.154}$$

这样

$$\ln\frac{G^R(k,0)}{G^R(k,-\infty)}=\ln\frac{-\infty}{-\varepsilon_k-\Sigma(k,0)}=\ln\infty+i\pi\theta(-\varepsilon_k-\Sigma(k,0)) \tag{4.155}$$

由于推迟和超前Green函数互为复共轭$G^R=(G^A)^*$,因此$\ln\frac{G^A(k,0)}{G^A(0,-\infty)}=\ln\infty-i\pi\theta(-\varepsilon_k-\Sigma(k,0))$,我们有

$$n=\frac{1}{V}\sum_k\frac{1}{2\pi i}2\pi i\theta(-\varepsilon_k-\Sigma(k,0))=\frac{1}{V}\sum_k\theta(-\varepsilon_k-\Sigma(k,0)) \tag{4.156}$$

注意到对k的求和可以换成积分并且$\theta(-\varepsilon_k-\Sigma(k,0))=\theta(\mathrm{Re}G(k,0))$,那么

$$n=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\theta(\mathrm{Re}G(k,0))=\int_{\mathrm{Re}G(k,0)>0}\frac{d^dk}{(2\pi)^d} \tag{4.157}$$

这个公式称为广义Luttinger定理.

当然,上述广义Luttinger定理也可以直接由推迟Green函数得到.首先,利用虚频Green函数的谱表示$G(k,i\omega_n)=\int d\omega\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R(k,\omega)}{i\omega_n-\omega}$并对频率$\omega_n$求和可得

$$n=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_F(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(k,\omega)\right] \tag{4.158}$$

[45]研究有限温度对Luttinger定理的效应可用这个公式.

当系统处于零温时,$f_F(\omega)=\theta(-\omega)$,这样频率积分的上限截断为0,则有

$$n=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{-\infty}^{0}d\omega\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(k,\omega)\right] \tag{4.159}$$

利用$\partial_\omega\ln G^{-1}(k,\omega)=G(k,\omega)(1-\partial_\omega\Sigma(k,\omega))$可得

$$n=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{-\infty}^{0}d\omega\left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left[\partial_\omega\ln G^{-1}(k,\omega)+G(k,\omega)\partial_\omega\Sigma(k,\omega)\right]\right) \tag{4.160}$$

上式第一项的积分,记作I_1,而第二项积分记作I_L,一般称作Luttinger积分:

$$\begin{aligned}I_1&=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{-\infty}^{0}d\omega-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left(\partial_\omega\ln G^{-1}(k,\omega)\right)\\ I_L&=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{-\infty}^{0}d\omega-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left(G(k,\omega)\partial_\omega\Sigma(k,\omega)\right)\end{aligned} \tag{4.161}$$

注意到I_L形式上与上一节讨论的Lutinger-Ward泛函中的积分$\int dzG(k,z)\frac{\partial}{\partial z}\Sigma(k,z)$相同,而这个积分值只要Luttinger-Ward泛函存在且非奇异,那么其取值为零.因此,在这样的条件下有$I_L=0$.

- 需要指出,基于弱耦合微扰展开而构造的Luttinger-Ward泛函在强耦合时不一定存在.[46]因此,这可能导致$I_L=0$不成立.

- 根据单粒子Green函数的解析性质(特别是Green函数可以写成极点和零点的有理分式形式),Seki和Yunoki证明当存在粒子−空穴对称性时$I_L=0$.[47]

那么有

$$n=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left[\ln\frac{G(k,-\infty)}{G(k,0)}\right]\right)=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left[\ln\frac{\varepsilon_k+\Sigma(k,0)}{\infty}\right]\right) \tag{4.162}$$

[46][Kozik,Ferrero,Georges,Nonexistence of the Luttinger-Ward Functional and Misleading Convergence of Skeleton Diagrammatic Series for Hubbard-Like Models,Phys.Rev.Lett.**114**,156402(2015)]

[47]Seki,Yunoki,Topological interpretation of the Luttinger theorem,Phys.Rev.B **96**,085124(2017).他们证明的核心点是单粒子Green函数及其行列式$\det G(z)$可写成极点和零点的多项式,即$\det G(z)=\frac{\prod_{l=1}^{Z_{\det}}(z-\tilde{\xi}_l)}{\prod_{m=1}^{P_{\det}}(z-\tilde{\omega}_m)}$.$Z_{\det},P_{\det}$分别是零点和极点的总个数并满足$P_{\det}-Z_{\det}=L_s$($L_s$是构造单粒子Green函数单粒子态的个数).由围道积分表示$n=\frac{1}{V}\sum_k\oint\frac{dz}{2\pi i}f_F(z)\partial_z\ln G^{-1}(k,z)$,($f_F(z)=\frac{1}{e^{z/T}+1}$)可知粒子数可改写为$N=\oint\frac{dz}{2\pi i}f_F(z)\partial_z\ln\det G^{-1}(z)$,代入行列式的多项式形式并利用留数定理有$N=\sum_{m=1}^{P_{det}}f_F(\tilde{\omega}_m)-\sum_{l=1}^{Z_{det}}f_F(\tilde{\xi}_l)$. 对粒子−空穴对称系统,其能谱关于零对称,这样零点和极点也关于零对称,因此必有$f_F(\tilde{\omega}_m)+f_F(-\tilde{\omega}_m)=1$(零点也一样),这样有$N=\frac{1}{2}(P_{\det}-Z_{\det})=\frac{L_s}{2}$.注意粒子空穴对称的无相互作用体系的粒子数$N_0$必然与单粒子态数目一致,(Hubbard模型中电子数目为考虑自旋简并后的格点数目)即有$N_0=L_s/2$.这样$N=N_0$,而I_L必为零,因此Luttinger定理成立.

注意到分母的无穷大,那么自能的有限虚部总是可以忽略,但是对数函数在自变量小于零时会有$-i\pi$的虚部,这意味着当$\varepsilon_k + \mathrm{Re}\Sigma(k,0) < 0$ 时会贡献$-i\pi$的虚部,这样我们重新得到广义Luttinger定理

$$n = I_1 = \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\theta(-\varepsilon_k - \mathrm{Re}\Sigma(k,0)) = \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\theta(\mathrm{Re}G(k,0)) = \int_{\mathrm{Re}G(k,0)>0} \frac{d^dk}{(2\pi)^d} \tag{4.163}$$

这样广义Luttinger定理成立意味着粒子数密度与I_1积分相等,即$n = I_1$.

注意到对I_1积分有贡献的是零频Green函数实部大于零的部分,因此若假定动量空间中可分为$\mathrm{Re}G(k,0) > 0$与$\mathrm{Re}G(k,0) < 0$的区域,那么两者的分界面可以是$\mathrm{Re}G(k,0)$从$\mathrm{Re}G(k,0) < 0$经过$\mathrm{Re}G(k,0) = 0$改变符号变为$\mathrm{Re}G(k,0) > 0$,也可以是$\mathrm{Re}G(k,0)$从$-\infty$ 跳变至$+\infty$.我们把$\mathrm{Re}G(k,0) = 0$或∞所对应的动量称为Luttinger动量k_L,而由Luttinger动量所包围的曲面称为Luttinger面.在Dzyaloshinskii的原文中,[48]他对Luttinger面的定义是:

Luttinger面 零频Green函数实部$\mathrm{Re}G(k,0)$通过零或无穷大改变负号的所有k对应的曲面为Luttinger面,这些动量称为Luttinger动量.

简言之,Luttinger面就是$\mathrm{Re}G(k,0)$大于零和小于零的分界面.

- 至于Luttinger面如何直接观测则是一个有价值的问题.Green函数零点所对应的Luttinger面通常意味着费米面附近谱函数的抑制,这可能与模型计算以及铜氧化物材料中发现的赝能隙现象有关.[49]

对于费米液体,我们知道$\varepsilon_{k_F} + \mathrm{Re}\Sigma(k_F,0) = 0$定义了费米面所在的费米动量$k_F$,(即$\mathrm{Re}G(k_F,0) = \infty$,也就是零频推迟Green函数的发散点定义了费米面)那么θ函数相当于把对动量k的积分限制在$k < k_F$的费米球内部,($\mathrm{Re}G(k,0) > 0$定义为曲面的内部)因此有

$$\boxed{n = \int^{k_F} \frac{d^dk}{(2\pi)^d} = \frac{\mathcal{V}_{FS}}{(2\pi)^d}} \tag{4.164}$$

这就是标准Luttinger定理的数学形式,即费米液体中的费米子数密度等于其费米面包围的体积除以动量空间因子.

- Oshikawa基于费米液体的唯象讨论曾给出了一个非微扰的证明,即所谓拓扑讨论,此后该证明也被推广到Z_2分数化模型和$SU(N)$近藤晶格体系. [50]

[48][Dzyaloshinskii,Some consequences of the Luttinger theorem: The Luttinger surfaces in non-Fermi liquids and Mott insulators,Phys.Rev.B**68**,085113(2003)]

[49][Stanescu,Kotliar,Fermi arcs and hidden zeros of the Green function in the pseudogap state,Phys.Rev.B**74**,125110(2006)]这个团簇动力学平均场计算研究了Hubbard模型赝能隙态的Luttinger面.

[50][Oshikawa,Topological Approach to Luttinger's Theorem and the Fermi Surface of a Kondo Lattice,Phys.Rev.Lett.**84**,3370(2000);Paramekanti,Vishwanath,Extending Luttinger's theorem to Z_2 fractionalized phases of matter,Phys.Rev.B**70**,245118(2004);Hazra,Coleman,Luttinger sum rules and spin fractionalization in the $SU(N)$ Kondo lattice,Phys.Rev.Research**3**,033284(2021)]

- 更有趣的一些工作指出Luttinger定理与Atiyah-Singer指标定理的联系 [51]

理论上,通常我们可以通过一个系统是否满足Luttinger定理来判断系统是否为费米液体.具体而言,我们计算积分I_1的取值是否等于粒子数密度n,对于典型的费米液体,其Green函数近似为

$$G(k,\omega)=\frac{Z}{\omega-\varepsilon_k} \tag{4.165}$$

我们发现$\mathrm{Re}G(k,0)=\frac{Z}{-\varepsilon_k}$,因此$\varepsilon_k<0$对$I_1$有贡献,即有

$$I_1=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\theta(-\varepsilon_k)=S_d\int_0^{k_F}\frac{k^{d-1}dk}{(2\pi)^d}=\frac{\mathcal{V}_{FS}}{(2\pi)^d} \tag{4.166}$$

这里$\omega=\varepsilon_{k_F}=0$确定了Green函数的极点位置.

- 当然,某些特殊的费米液体态并不满足Luttinger定理,例如双杂质问题中当杂质间反铁磁耦合主导时的费米液体态. [52]

luttinger液体与Luttinger定理的拓扑讨论

我们知道一维Luttinger液体是最典型也最熟悉的非费米液体,不过由于低能下Luttinger液体满足粒子-空穴对称,因此它们满足Luttinger定理.

从Green函数的角度来说,一维费米气体的电子Green函数可写成$G(k,\omega)\sim\frac{1}{\omega-v_F(k-k_F)}$,(注意在$-k_F$附近也有类似的表达式)而处于Luttinger液体态时电子的Green函数成为

$$G(k,\omega)\sim\frac{1}{(\omega-v_F^*(k-k_F))^{1-\alpha}} \tag{4.167}$$

可以看到相互作用的主要效果是修正费米速度($v_F\to v_F^*$)并使电子Green函数原先的极点结构转变为支点结构,而费米点k_F并未改变.此时把零频Green函数的实部代入广义Luttinger定理有

$$I_1=2\int\frac{dk}{2\pi}\theta((v_F^*(k_F-k))^{1-\alpha})=\frac{k_F}{\pi} \tag{4.168}$$

我们知道一维自由费米子的密度与k_F满足$n=\frac{2k_F}{2\pi}$,这样有$n=I_1=\frac{k_F}{\pi}$,这说明Luttinger定理对于Luttinger定理成立. [53]

- 需要指出,Yamanaka,Oshikawa,Affleck推广了自旋链的Lieb-Schultz-Mattis定理给出了Luttinger液体满足Luttinger定理的证据. [54]

[51] Heath,Bedell,Necessary and sufficient conditions for the validity of Luttinger's theorem,New.J.Phys.**22**,063011(2020).

[52] Curtin,Nishikawa,Hewson,Crow,Fermi Liquids and the Luttinger Integral,J.Phys.Commun.**2**,031001(2018).

[53] 更仔细的计算可参考[Blagoev,Bedell,Luttinger Theorem in One Dimensional Metals,Phys.Rev.Lett.**79**,1106(1997)]

[54] [Yamanaka,Oshikawa,Affleck,Nonperturbative Approach to Luttinger's Theorem in One Dimension,Phys.Rev.Lett.**79**,1110(1997)]这篇文章也论证了Kondo晶格模型的费米面包含局域自旋的贡献.

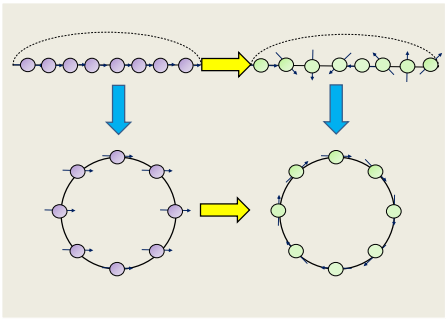


Figure 4.12: 一维$S=1/2$自旋链的扭转,这里显示的是完全极化铁磁态(紫色)扭转为一个类涡旋结构的磁性态(绿色).

这里,我们简要介绍Yamanaka等人的论证过程.首先,让我们考虑一个一般性的一维无自旋费米子模型(考虑周期边界条件$\hat{c}_m=\hat{c}_{m+N_s}$):

$$H=\overbrace{\sum_{mn}t_{mn}\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_n}^{H_K}+\overbrace{\sum_{mn}V_{mn}\hat{n}_m\hat{n}_n}^{H_V},\qquad \hat{n}_m=\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_m \tag{4.169}$$

让我们定义系统的基态为$|\Psi_0\rangle$,然后再定义所谓的扭转算符:

$$\boxed{U=e^{i2\pi\sum_{j=1}^{N_s}\frac{j}{N_s}\hat{n}_j}} \tag{4.170}$$

那么扭转算符有什么样的物理意义呢?[55]从费米子来看其意义并不显而易见,但是我们知道利用Jordan-Wigner 变换($\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j=\hat{S}_j^z+\frac{1}{2}$) 可把无自旋费米子改写为$S=1/2$ 自旋,那么此时扭转算符成为(忽略1/2 因子导致的常数项)

$$U=e^{i2\pi\sum_{j=1}^{N_s}\frac{j}{N_s}\hat{S}_j^z}=\prod_{j=1}^{N_s}e^{i2\pi\frac{j}{N_s}\hat{S}_j^z}=\prod_{j=1}^{N_s}e^{i\theta_j\hat{S}_j^z} \tag{4.171}$$

显然,扭转算符相当于把每个自旋绕着z轴转动$\theta_j=2\pi\frac{j}{N_s}$角度且相邻自旋转角相差$2\pi/N_s$.对于满足周期边界条件的$S=1/2$自旋链,如果基态是完全极化的铁磁态$|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow...\rangle$,那么作用扭转算符后的态就是如图4.12所示的扭转态.

现在,让我们回到费米子问题.把扭转算符U作用于基态$|\Psi_0\rangle$可得扭转后的态$|\Psi_U\rangle=U|\Psi_0\rangle$.这样我们可以计算这两个态的能量差:

$$\Delta E=\langle\Psi_U|H|\Psi_U\rangle-\langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle=\langle\Psi_0|U^{-1}HU-H|\Psi_0\rangle \tag{4.172}$$

[55]回忆经典体系的电极化矢量定义为$\hat{P}=\sum_j\vec{r}_jq_j$,$q_j$是粒子所带电荷,$\vec{r}_j$是粒子的坐标.这样一维晶格上电子的电极化矢量就是$\hat{P}=(-e)\sum_j x_j\hat{n}_j$($x_j=ja$,$a$是晶格间距),因此扭转算符直接与一维电子体系的电极化矢量P相联系:$U=e^{-i\frac{2\pi}{eL}P}$($L=aN_s$是体系的尺度).

注意到扭转算符U用粒子数算符$\hat{n}_j$定义因而其与哈密顿量的相互作用项H_V对易,这样我们仅需考虑动能项H_K,即$U^{-1}HU = U^{-1}H_KU+H_V$.为了计算$U^{-1}H_KU$,我们考虑单个费米子算符在扭转算符作用下的形式,即

$$U^{-1}\hat{c}_m^\dagger U = e^{-i2\pi\frac{m}{N_s}\hat{n}_m}\hat{c}_m^\dagger e^{i2\pi\frac{m}{N_s}\hat{n}_m} \tag{4.173}$$

把上述形式作用于$\hat{n}_m$的本征态$|n_m=0\rangle$和$|n_m=1\rangle$可以发现$U^{-1}\hat{c}_m^\dagger U$的作用恰好可以用$e^{-i2\pi\frac{m}{N_s}}\hat{c}_m$表示,也就是

$$U^{-1}\hat{c}_m^\dagger U = e^{-i2\pi\frac{m}{N_s}}\hat{c}_m^\dagger \tag{4.174}$$

取共轭可得$U^{-1}\hat{c}_mU = e^{i2\pi\frac{m}{N_s}}\hat{c}_m$,因此

$$U^{-1}H_KU = \sum_{mn}t_{mn}U^{-1}\hat{c}_m^\dagger UU^{-1}\hat{c}_nU = \sum_{mn}e^{-i2\pi\frac{m-n}{N_s}}t_{mn}\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_n. \tag{4.175}$$

由此,我们发现能量差($\langle...\rangle_0 = \langle\Psi_0|...|\Psi_0\rangle$)

$$\Delta E = \sum_{mn}(e^{-i2\pi\frac{m-n}{N_s}}-1)t_{mn}\langle\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_n\rangle_0 \tag{4.176}$$

现在,[56]让我们假设哈密顿量具有平移不变性,这意味着$t_{mn} = t_{m-n}$. 同时,哈密顿量若具有空间反演对称则有$t_{m-n} = t_{n-m}$. 当然,在平移变换$T = e^{-i\hat{P}}$($\hat{P}$为总动量算符)下费米子算符变为$T\hat{c}_mT^{-1} = \hat{c}_{m+1}$,在空间反射变换下则有$P_{in}\hat{c}_mP_{in}^{-1} = \hat{c}_{-m}$.进一步,假设基态$|\Psi_0\rangle$具有平移和空间反射对称,($T|\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle, P_{in}|\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle$)那么

$$\begin{aligned}\langle\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_n\rangle_0 &= \langle T^n\hat{c}_{m-n}^\dagger T^{-n}T^n\hat{c}_0T^{-n}\rangle_0 = \langle\hat{c}_{m-n}^\dagger\hat{c}_0\rangle_0 \\ &= \langle P_{in}\hat{c}_{n-m}^\dagger P_{in}^{-1}P_{in}\hat{c}_0P_{in}^{-1}\rangle_0 = \langle\hat{c}_{n-m}^\dagger\hat{c}_0\rangle_0\end{aligned} \tag{4.177}$$

因而

$$\begin{aligned}\Delta E &= \sum_{mn}(e^{-i2\pi\frac{m-n}{N_s}}-1)t_{m-n}\langle\hat{c}_{m-n}^\dagger\hat{c}_0\rangle_0 \\ &= \sum_{m=1}^{N_s}\sum_{\delta}(e^{-i2\pi\frac{\delta}{N_s}}-1)t_\delta\langle\hat{c}_\delta^\dagger\hat{c}_0\rangle_0 \\ &= \sum_{m=1}^{N_s}\sum_{\delta>0}\Big((e^{-i2\pi\frac{\delta}{N_s}}-1)t_\delta\langle\hat{c}_\delta^\dagger\hat{c}_0\rangle_0 + (e^{i2\pi\frac{\delta}{N_s}}-1)t_{-\delta}\langle\hat{c}_{-\delta}^\dagger\hat{c}_0\rangle_0\Big) \\ &= \sum_{m=1}^{N_s}\sum_{\delta>0}\Big((e^{-i2\pi\frac{\delta}{N_s}}-1)t_\delta\langle\hat{c}_\delta^\dagger\hat{c}_0\rangle_0 + (e^{i2\pi\frac{\delta}{N_s}}-1)t_\delta\langle\hat{c}_\delta^\dagger\hat{c}_0\rangle_0\Big) \\ &= \sum_{m=1}^{N_s}\sum_{\delta>0}\Big((e^{-i2\pi\frac{\delta}{N_s}}+e^{i2\pi\frac{\delta}{N_s}}-2)t_\delta\langle\hat{c}_\delta^\dagger\hat{c}_0\rangle_0\Big)\end{aligned} \tag{4.178}$$

[56]Gagliardini,Haas,Rice,Generalization of the Luttinger theorem for fermionic ladder systems,Phys.Rev.B**58**,9603(1998)

如果我们假设体系仅有短程跃迁,也就是t_δ随着δ增加快速趋于零,那么对于大系统$N_s >> 1$就可以对$e^{\pm i2\pi\frac{\delta}{N_s}}$做展开:

$$\Delta E \simeq \sum_{m=1}^{N_s}\sum_{\delta>0}\left(\overbrace{(1-i2\pi\frac{\delta}{N_s}+1+i2\pi\frac{\delta}{N_s}-2)}^{=0}t_\delta\langle\hat{c}_\delta^\dagger\hat{c}_0\rangle_0\right)=0. \quad (4.179)$$

这样我们发现$\Delta E\sim O(1/N_s)$.这说明在热力学极限下体系至少有一个与基态能量足够接近的低能激发态.[57]

- 对于1维系统,上述关于$\Delta E\sim O(1/N_s)$的讨论在短程跃迁下成立.但对于高维系统,例如二维长方晶格,我们可以把体系看作是有N_y条长度为N_x格点的一维链的集合.然后仍在x方向扭转体系,这样有$\Delta E=\sum_{m,n,\lambda}(e^{-i2\pi\frac{m-n}{N_x}}-1)t_{mn}\langle\hat{c}^\dagger_{m,\lambda}\hat{c}_{n,\lambda}\rangle_0$. 注意到$e^{-i2\pi\frac{m-n}{N_x}}-1$部分仍有$O(1/N_x)$贡献但关于链个数$\lambda$的求和给出额外的$N_y$因子,因此$\Delta E\sim O(N_y/N_x)\sim O(1)\gg O(1/N_x)$,显然用扭转算符已经无法证明体系的低能激发态是在热力学极限下是否存在能隙,这也解释了四十年之后LSM定理的高维推广才出现.

- 基于扭转态与未扭转态的联系,文献中用$\tilde{\lambda}^2\equiv-(N_s/(2\pi))^2\ln|z|^2(z=\langle\Psi_0|U|\Psi_0\rangle)$判断一维体系是金属($\bar{\lambda}\to\infty$)还是绝缘体.[58]

- 对扭转算符适当改造后也可用以区分拓扑绝缘体与拓扑平庸绝缘体.[59]

同时,我们可以计算扭转态$|\Psi_U\rangle$相对于基态的动量差.注意到扭转算符U满足

$$\begin{aligned}TUT^{-1} &= e^{i2\pi\sum_{j=1}^{N_s}\frac{j}{N_s}U\hat{c}_j^\dagger U^{-1}U\hat{c}_jU^{-1}}=e^{i2\pi\sum_{j=1}^{N_s}\frac{j+1-1}{N_s}\hat{c}_{j+1}^\dagger\hat{c}_{j+1}}\\ &= Ue^{i2\pi\sum_{j=1}^{N_s}\frac{-1}{N_s}\hat{c}_{j+1}^\dagger\hat{c}_{j+1}}=Ue^{-i2\pi\hat{n}} \quad (4.180)\end{aligned}$$

这里定义了粒子密度算符$\hat{n}=\frac{1}{N_s}\sum_{j=1}^{N_s}\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j$而基态的粒子数密度是$n_0$.($\hat{n}|\Psi_0\rangle=n_0|\Psi_0\rangle$,设基态动量为$P_0$则$T|\Psi_0\rangle=e^{-iP_0}|\Psi_0\rangle$)这样

$$T|\Psi_U\rangle=TU|\Psi_0\rangle=UTe^{-i2\pi\hat{n}}|\Psi_0\rangle=e^{-i2\pi n_0}UT|\Psi_0\rangle=e^{-i2\pi n_0}e^{-iP_0}|\Psi_U\rangle \quad (4.181)$$

这表明扭转态是相对基态具有动量$2\pi n_0$的动量本征态,只要n_0不为整数,那么扭转态与基态正交.

[57]把这个结果翻译回$S=1/2$自旋链就意味着$S=1/2$自旋链的自旋激发能隙上限为$1/N_s$量级.更一般的,对于长度为N_s,S为半整数的一维自旋链(满足周期边界条件),其自旋能隙上限为$1/N_s$量级,这就是著名的Lieb-Schultz-Mattis(LSM)定理.[Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain,Annals of Phys.(N.Y.) **16**,407(1961)]LSM 定理的高维推广由Hastings实现.[Hastings,Lieb-Schultz-Mattis in higher dimensions,Phys.Rev.B **69**,104431(2004)]

[58][Resta,Sorella,Electron Localization in the Insulating State,Phys.Rev.Lett.**82**,370(1999)]

[59][Gilardoni,Becca,Marrazzo,Parola,A real-space many-body marker for correlated Z_2 topological insulators,Phys.Rev.B **106**,L161106(2022).]

- 当粒子密度为公度时,即$n_0 = \frac{p}{g}(p,q$为互质的正整数,例如$n_0 = 1/3, 1/4)$,可以看到$|\Psi_0\rangle$,U$|\Psi_0\rangle, U^2|\Psi_0\rangle ..., U^{q-1}|\Psi_0\rangle$这$q$个态都是系统的低能态且互相正交(不同动量的本征态,相对$|\Psi_0\rangle$的动量分别为$0, 2\pi\frac{p}{q}, 2\pi\frac{2p}{q}...2\pi\frac{p(q-1)}{q}$).这说明系统低能激发可能是无能隙的或者是自发破缺平移对称的对称破缺态.对于后者,既然q个低能态有不同的动量,那么它们与(晶体中的分立)平移不变性相联系,在热力学极限下只会在平移q个格点下不变.需要指出,这种破缺平移不变性的情况体系可以存在能隙.

当然,扭转态与基态具有同样粒子数密度,这样如果在基态产生密度激发就会使得基态与扭转态发生联系,两个态的动量变化是$2\pi n_0$.

我们知道Luttinger液体的密度激发的特征动量是$q = 2k_F$,也就是Luttinger液体密度激发的产生伴随$2k_F$ 动量的变化,如果我们把$2k_F$变化后的态等价于扭转态,那么两者相对基态的变化自然相同,也就是有

$$2\pi n_0 = 2k_F \Rightarrow n_0 = \frac{k_F}{\pi} \tag{4.182}$$

这就是Luttinger定理所要求的结果,也就是我们给出了Luttinger液体满足Luttinger定理的一个证明(更像是说明).我们也可以通过玻色化理论来理解.在玻色化中,体系的能隙由相关算符产生,例如电子相互作用导致的倒逆散射.如果用玻色型的场ϕ代表低能激发,那么$n_0 = p/q$时包含相关算符的拉式量是$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2 + g\cos(q\phi/R)$($R$是所谓的紧致化半径,其表示$\phi$与$\phi+2\pi R$的等价性).$\cos(q\phi/R)$有$q$个极小值的势,其会导致$q$重简并的对称破缺态.显然,这与扭转算符的讨论是一致的.

对于有自旋的情况,例如守恒电子数和自旋的Hubbard模型,$H = -t\sum_{m,\sigma}(\hat{c}^\dagger_{m\sigma}\hat{c}_{m+1\sigma} +$ H.c.$) + U\sum_m \hat{n}_{m\uparrow}\hat{n}_{m\downarrow}$, 我们仿照无自旋费米子的情况定义自旋依赖的扭转算符:

$$U_\sigma = e^{i2\pi\sum_{j=1}^{N_s}\frac{j}{N_s}\hat{n}_{j\sigma}}, \tag{4.183}$$

假设基态$|\Psi_0\rangle$电子密度为$n_0 = n_\uparrow + n_\downarrow$,自旋密度为$m_0 = n_\uparrow - n_\downarrow$.这样扭转态就是$U_\sigma|\Psi_0\rangle$,其相对于基态的动量就是$2\pi n_\sigma$.定义电荷扭转算符$U_c = U_\uparrow U_\downarrow$,由此可知 $U_c|\Psi_0\rangle$相对于基态的动量是$2\pi n_0$,这样n_0非整数意味着体系是无能隙的,而$n_0 = 0, 1, 2$对应着绝缘态.当然,我们知道一维Hubbard模型在$n_0 = 0, 2$时就是平凡的(能带)绝缘体而$U > 0$下$n_0 = 1$就是Mott绝缘体,这与上述扭转算符的讨论相符合.

最后,让我们考虑扭转算符对费米子的物理涵义.由于我们的费米子模型具有周期边界,那么其等价于定义在一维圆环上.如果我们在圆环中心插入一个单位磁通量$\Phi_0 = h/e$,那么费米子自然会由于AB效应而获得相位上的影响,这相当于跃迁系数t_{mm}需要修改为$t_{mn}e^{-iA_{mn}}$.一个简单的选择是$A_{mn} = \frac{e}{\hbar}(m - n)\frac{\Phi_0}{N_s}$,(连续极限下对应均匀矢量势$A_x = \Phi_0/L, L = N_s a$,$a$为晶格间距)这样系统哈密顿量的动能部分成为$\tilde{H}_K = \sum_{mn} t_{mn}e^{-i2\pi\frac{m-n}{N_s}}\hat{c}^\dagger_m\hat{c}_n$.显然,我们恰好可以

用扭转算符把$\tilde{H}_K$还原为无磁通时的哈密顿量动能H_K,即$U\tilde{H}_K U^{-1} = H_K$.这样$U\tilde{H}U^{-1} = H$,($\tilde{H} = \tilde{H}_K + H_V$)也就是加磁通前后的体系通过扭转算符相联系,一般来说这种相位因子变换又称为规范变换,因此这里引入的费米子扭转算符就是体系消除单位磁通影响而引入的规范变换算符.换句话说,扭转算符可看作是圆环上电子系统插入单位磁通的操作.

现在,让我们假设系统从无磁通的状态绝热演化至单位磁通的情况,此时系统的基态从$|\Psi_0\rangle$演化为$|\tilde{\Psi}_0\rangle$而哈密顿量从H变为$\tilde{H}$.我们注意到系统的动量实际上依赖与矢量势的选择,为了比较绝热演化前后体系动量的变化,我们需要让绝热演化后的系统磁通消失,这可以通过作用先前讨论的扭转算符(规范变换)实现($U\tilde{H}U^{-1} = H$).若$\tilde{H}$与其基态$|\tilde{\Psi}_0\rangle$满足本征方程$\tilde{H}|\tilde{\Psi}_0\rangle = \tilde{E}_0|\tilde{\Psi}_0\rangle$,那么

$$U\tilde{H}U^{-1}U|\tilde{\Psi}_0\rangle = \tilde{E}_0 U|\tilde{\Psi}_0\rangle \Rightarrow HU|\tilde{\Psi}_0\rangle = \tilde{E}_0 U|\tilde{\Psi}_0\rangle \tag{4.184}$$

这说明绝热演化后(同时系统磁通通过规范变换消去),物理基态是$U|\tilde{\Psi}_0\rangle$.既然绝热演化前基态$|\Psi_0\rangle$的动量为P_0,那么

$$TU|\tilde{\Psi}_0\rangle = UTe^{-i2\pi\hat{n}}|\tilde{\Psi}_0\rangle \tag{4.185}$$

在绝热演化时,若基态唯一(非简并),那么基态的动量与粒子数都不发生变化,因此$|\tilde{\Psi}_0\rangle$与$|\Psi_0\rangle$有相同的粒子数密度n_0 和动量P_0,所以有 $TU|\tilde{\Psi}_0\rangle = e^{-iP_0}e^{-i2\pi n_0}U|\tilde{\Psi}_0\rangle$.这说明$U|\tilde{\Psi}_0\rangle$相对于基态$|\Psi_0\rangle$的动量变化是$\Delta P = 2\pi n_0$.同时,如果体系处于费米气体态,那么添加均匀矢量势A_x相当于在哈密顿量中把p_x换为$p_x + eA_x$,也就是说每一个粒子的动量改变了$eA_x = e\frac{\Phi_0}{L} = \frac{2\pi}{L}$(设$\hbar = 1$).因此,一维费米气体总动量变化是$\Delta P_{FG} = \frac{2\pi}{L}\rho L = 2\pi\frac{k_F}{\pi} = 2k_F$.($k_F/\pi = \rho$对一维无自旋费米气体成立)对于同一个体系,显然$\Delta P = \Delta P_{FG}$,这样有$n_0 = \frac{k_F}{\pi}$,这就是一维费米气体的Luttinger定理,如果考虑二维或者三维,情况也完全一样.[60]同时,如果假设体系是费米液体,那么注意到费米液体准粒子与费米气体有同样的动量和电荷,因此其动量变化ΔP_{FL}等于ΔP_{FG},这样我们发现费米液体也满足Luttinger定理,这就是前面提及的由Oshikawa所提出的Luttinger定理的拓扑讨论(topological argument).

- 需要指出,拓扑讨论的正确性主要依赖于我们对已知物态(Luttinger液体,费米液体)性质的了解,对于本质并不清楚的新奇物态,拓扑讨论的可靠性便无法保证.

[60]例如考虑一个$N_s = N_x \times N_y$ 的二维晶格体系,若x方向有周期边界,那么相对于把体系沿着x方向卷成一个圆柱面.此时单位磁通沿着圆柱的轴向穿过,这相当于把二维系统看成是N_y个一维链,每个链都感受到单位磁通.相应的扭转算符可以看作是每条链的叠加,即$U^x = \prod_{j_y=1}^{N_y} U^x_{j_y} = e^{i\sum_{j_y=1}^{N_y}\sum_{j_x=1}^{N_x}\frac{2\pi}{N_x}j_x\hat{n}_{j_x,j_y}}$. 这样动量的变化是$2\pi\frac{N}{N_x}$($N$是总电子数).而对于费米气体,其动量变化必然是$\frac{2\pi}{N_x}N = \frac{2\pi}{N_x}N_s\frac{A_{FS}}{(2\pi)^2} = 2\pi N_y\frac{A_{FS}}{(2\pi)^2}$($A_{FS}$ 是二维费米面所包围的面积),与扭转算符所得动量变化对比可得$\frac{N}{N_s} = N_y\frac{A_{FS}}{(2\pi)^2}$,即$n = \frac{A_{FS}}{(2\pi)^2}$.

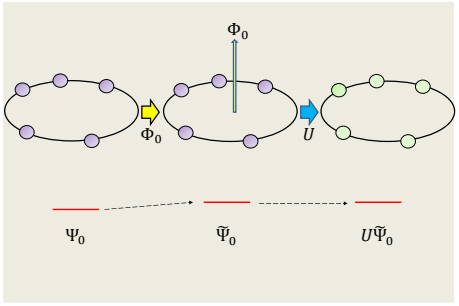


Figure 4.13: 一维费米子体系Luttinger定理的拓扑讨论.

Luttinger定理的失效

当$I_1 \neq n$时,Luttinger定理失效,自然,$I_1 \neq n$意味着积分$I_L \neq 0$.一般认为,Luttinger定理失效对无能隙费米型量子流体而言暗示体系可能是非费米液体.这类情况一般出现在Mott绝缘体或掺杂的Mott绝缘体系统, [61]最知名的当属空穴掺杂的铜氧化物材料的欠掺杂区. [62]

受到Luttinger液体Green函数形式的启发,Dzyaloshinskii文章研究了一类非费米液体模型,其单粒子Green函数是

$$G(k,\omega) = \frac{1}{\omega^{1-\alpha}} f\left(\frac{|k| - k_L}{\omega^{1/\kappa}}\right) \tag{4.186}$$

这里标度函数$f(x \to 0) \sim const.$, $f(x \to \infty) \sim x^{\kappa(\alpha-1)}$.显然,由于上述Green函数具有粒子–空穴对称性,因此其必然满足广义Luttinger定理.[63]

对于一般的晶格模型以及二维和三维情况,目前还不存在一般性的证明以说明Luttinger定理失效.[64]下面我们列举一些模型的研究:

1. 对于一维$t-V$模型,如果计入次近邻跃迁以破坏粒子空穴对称,精确对角化计算显示其Mott绝缘态并不满足广义Luttinger定理,也就是Green函数零点

[61][Stanescu,Phillips,Choy,Theory of the Luttinger surface in doped Mott insulators,Phys.Rev.B**75**,104503(2007)]这个工作分析了强耦合下的Hubbard模型并指出Luttinger-Ward 泛函的奇异性导致了非粒子–空穴对称体系Luttinger定理失效.而铜氧化物中费米弧是Green函数零点的直接结果.

[62]Dave,Phillips,Kane,Absence of Luttinger's Theorem due to Zeros in the Single-Particle Green Function,Phys.Rev.Lett.**110**,090403(2013).

[63][Limtragool,Leong,Phillips,Absence of Luttinger's theorem for fermions with power-law Green functions,SciPost Phys.**5**,049(2018);Heath,Landau Quasiparticles in Weak Power-Law Liquids,Journal of Low Temperature Physics**201**,200(2020)]进一步分析了具有类似幂律行为Green函数的行为.

[64]Rosch认为构造Luttinger-Ward 泛函时骨架图(skeleton expansion)展开中奇异性导致了定理的失效.[Rosch,Breakdown of Luttinger' s theorem in two-orbital Mott insulators,Eur.Phys.J.B**59**,495(2007)]这篇文章附录B关于Luttinger定理的证明与讨论值得一读.

位置偏离$k_F = \pi/2$.[65]这说明破坏粒子-空穴对称性对对于研究Luttinger定理失效的重要性.

2. 对于$t-J$模型,精确对角化和高温级数展开都指出其在一维和二维时存在对Luttinger定理的违背. [66]

3. 涨落交换近似,精确对角化,强耦合展开和量子蒙特卡洛的计算同样说明Hubbard模型也存在Luttinger定理失效的情况. [67]

对于Hubbard模型,动力学平均场解得的Mott态具有I_L类型的积分,其积分满足:[68]

$$I_L = 2\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{-\infty}^{0} d\omega \left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(k,\omega)\partial_\omega\Sigma(\omega)\right) = 2\int_{-\infty}^{0} d\omega \left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(\omega)\partial_\omega\Sigma(\omega)\right) = \begin{cases} 1, \\ 0, \end{cases} \tag{4.187}$$

这里考虑了自旋简并因子2,动力学平均场的自能仅是频率的函数以及$G(\omega)$是动量平均后的Green函数,或者说是空间平均的Green函数.其中$I_L = 0$对于费米液体态和粒子-空穴对称的Mott态成立,而$I_L = 1$对不具有粒子−空穴对称的Mott态成立.因此不具有粒子-空穴对称的Mott绝缘态显然违反Luttinger定理.

因此,就目前的研究情况来看,如果要寻找Luttinger定理失效的情况,我们可以选择不具有粒子−空穴且处于强耦合的体系,例如Mott绝缘态或者掺杂的Mott态,就模型系统而言,$t-J$模型以及强耦合的Hubbard模型是比较典型的适合研究的系统.

---

[65][Kokalj,Prelovsek,Breakdown of the Luttinger sum rule within the Mott-Hubbard insulator,Phys.Rev.B**78**,153103(2008)]

[66][Putikka,Luchini,Singh,Violation of Luttinger's Theorem in the Two-Dimensional $t-J$ Model,Phys.Rev.Lett.**81**,2966(1998)]这个工作采用级数展开加上Padé近似计算了电子密度$n = 0.8$时二维$t-J$模型的费米面,需要注意的是他们采用$n_k = 1/2$, $\frac{dn_k}{dT} = 0$以及$|\nabla_k n_k|$的极大值点作为费米面位置的判据(n_k是电子占据数的平均值,他们认为最可靠的判断方式是利用$|\nabla_k n_k|$的极大值点).[Kokalj,Prelovsek,Luttinger sum rule for finite systems of correlated electrons,Phys.Rev.B**75**,045111(2007)]

[67][Schmalian,Langer,Grabowski,Bennemann,Theory for dynamical short-range order and Fermi surface volume in strongly correlated systems,Phys.Rev.B**54**,4336(1996)]这个涨落交换近似研究仅显示对于Luttinger定理非常小的偏离$(0.01-0.02)$[Grober,Eder,Hanke,Anomalous low-doping phase of the Hubbard model,Phys.Rev.B**62**,4336(2000)]的量子蒙特卡洛计算显示低空穴掺杂时对Luttinger的明显偏离,同时也说明了Hubbard-I近似在强耦合高温区适用.[Kokalj,Prelovsek,Violation of the Luttinger sum rule within the Hubbard model on a triangular lattice,Eur.Phys.J.B**63**,431 (2008)]这个工作把零频Green函数转化为对矩(费米子算符与哈密顿量的对易关系)的求和.[Ortloff,Balzer,Potthoff,Non-perturbative conserving approximations and Luttinger's sum rule,Eur.Phys.J.B**58**,37(2007);Osborne,Paiva,Trivedi,Broken Luttinger theorem in the two-dimensional Fermi-Hubbard model,Phys.Rev.B**104**,235122(2021)]

[68][Logan,Galpin,J.Phys.:Condens.Matter**28**,025601(2015)]

边缘费米液体

为了唯象描述铜氧化物高温超导体在最佳掺杂附近正常态的电子行为,Varma等人提出了著名的边缘费米液体理论(marginal Fermi liquid).[69]在这个理论中,Varma 等人假定电子的极化函数是近似动量无关的函数:

$$\mathrm{Im}\chi(q,\omega)=\begin{cases}-N(0)\frac{\omega}{T}, & \omega<<T;\\ N(0), & T<<\omega<<\omega_c.\end{cases} \tag{4.188}$$

这里我们仅写出极化函数χ的虚部,其实部可通过Kramer-Kronig关系直接得到,($\mathrm{Re}\chi\sim N(0)\ln\frac{\omega}{T}$)另外$N(0)$是费米面上的态密度,$\omega_c$是远小于费米能的截断能量尺度.利用极化函数并考虑自由费米子的Green 可得电子自能为

$$\boxed{\Sigma(\omega)=\lambda\omega\left[\ln\frac{x}{\omega_c}+i\frac{\pi}{2}x\mathrm{sign}(\omega)\right],\quad x=\max(\omega,T).} \tag{4.189}$$

这样,电子的权重因子

$$Z_\omega=\frac{1}{1-\partial_\omega\mathrm{Re}\Sigma(\omega)}\sim\frac{1}{1-\lambda\ln\frac{x}{\omega_c}},\quad x=\max(\varepsilon_k,T) \tag{4.190}$$

因此,当电子接近费米面时,其准粒子权重趋于零,这说明在相互作用情况下费米面附近并没有定义良好的准粒子.同时,自能虚部给出的电子散射率正比于能量或者温度的一次方,如果电阻的散射率与该散射率直接相关,那么这就可以用来理解铜氧化物正常态的线性电阻行为.

[69]Varma, Littlewood,Schmitt-Rink,Abrahams,Ruckenstein,Phys.Rev.Lett.**63**,1996(1989).这篇文章已经成为奇异金属和非费米液体研究的经典论文.

第四章习题

习题1:一些概念

Q1:费米液体的费米面相比于其对应的无相互作用费米气体是否有变化.

Q2:费米液体的热容以及电阻随温度依赖关系为何.

Q3:当存在长程相互作用时费米液体还能使用吗?

习题2:Boltzmann方程

Q:在弛豫时间近似下,Boltzmann方程具有如下形式

$$\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t}+\nabla_k\varepsilon_k\cdot\nabla_x n_{k\sigma}-\nabla_x\varepsilon_k\cdot\nabla_k n_{k\sigma}=-\frac{n_{k\sigma}-n^0_{k\sigma}}{\tau} \tag{4.191}$$

这里$n^0_{k\sigma}$是平衡时的分布,其不含时空依赖.先假设给该费米液体系统加上x方向的均匀电场E,试利用上述方程计算Drude电导$\sigma=\frac{ne^2\tau}{m}$.

习题3:临界准粒子

Q1:在费米液体理论中,准粒子权重Z是大于零小于一的常数.若假定自能实部$\mathrm{Re}\Sigma(\omega)=-a\omega^{1-\eta},(a>0,\eta>0)$按照定义证明频率依赖的准粒子权重$Z(\omega)\sim\omega^{\eta}$.(提示:考虑$\omega\to 0$下的形式)

Q2:在有限温度时,Z关于温度的依赖与频率依赖类似,则有$Z(T)\sim T^{\eta}$.利用该结果估计这类费米型准粒子系统的低温热容(提示:利用$C_v\sim Z^{-1}(T)T$).

Bibliography

[1] 郝柏林,朗道百年, 物理37卷(2008)年9期

[2] Piers Coleman, Introduction to Many-Body Physics, 第六章

[3] Philip Phillips, Advanced Solid State Physics, 第十二章

[4] Gordon Baym and Christopher Pethick, Landau Fermi-Liquid Theory:Concepts and Applications, 第一章

Chapter 5

相变和对称破缺:Landau的再一次探险

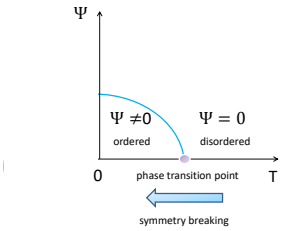


Figure 5.1: 温度变化下物态发生相变,序参量Ψ变化显著且相变前后对称性发生破缺.

相变和对称破缺:不对称的世界

在这一讲中,我们将讨论相变和对称性破缺.

首先,物质的状态各式各样,千奇百怪,那么物质状态如何来刻画呢?在《热力学》中,我们通常用一些宏观量来表征物质状态,例如用体积,温度和压力以及相关的物态方程刻画气体,用磁场强度,磁化强度描述磁体.然而,这些宏观描述并不能有效揭示物质状态的内在差异,因此我们需要一种更直接并且有效的描述物质状态的方式,这就是Landau 的相变理论.在Landau看来(1933年),物质状态的不同实际上反映物质本身有序性的不同,也就是:

- 物质状态=有序性.

例如固体中的原子具有高度有序的规则排列,形成晶体结构,而气体分子之间并没有形成明显的规则结构,相对而言是比较混乱或者无序的.因此组成物质的原子/分子是否具有规则排列成为区别固体和气体的重要依据.当然,液体和气体一样也没有规则结构,这两者的差别在于短程有序性.也就是液体中原子和临近原子之间相对位置具有一定的规则结构,但与更远处的原子相对位置就没有明显规律了.而气体则是不论近距离还是远距离都没有明显的规则结构,这样两者通过短程有序得以区分.相比于气体与液体,固体中原子之间相隔很远,其位置结构也有明显规则,这也称为长程序(long-ranged-order).Landau相变理论讨论的有序性指的主要是这类长程序,这是在下面的讨论中默认的.

既然物理学是高度定量的科学,那么我们需要明确的数学描述:即序参量(order parameter), 也就是描述有序性强弱和有无的量.我们规定,在有序态,序参量非零,而在无序态,序参量为零.序参量可以是一个数,亦可以是时空依赖的某个函数或者更复杂的量,其选取依赖于具体的系统.例如:对于铁磁相,通常选取块体磁化作为序参量,这类序参量一般而言是矢量.而对于超导和超流态,它们的序参量则是一类复函数,即所谓宏观波函数.

根据定义,当物质发生相变时,序参量发生显著变化(零到非零的变化),同时

系统对称性也发生变化.无序态时系统拥有高对称性,而在有序态,体系对称性降低,显示出对称性的破缺(symmetry breaking).(图5.1)例如铁磁体在高温时是顺磁态,宏观磁化为零,系统的微观磁矩取各个方向概率均等,因此具有自旋的旋转对称性.低温下,系统进入铁磁态,宏观磁化非零,同时微观自旋平均而言具有确定的取向,这样自旋旋转对称得以破坏.

- 相变=对称性破缺.

那么可以破缺的对称性有哪些呢?我们知道对称性可以是整体对称性也可以是局域对称性.局域对称性指的是系统每一个局部的对称性,而整体对称就是系统作为一个单一对象的对称性.比如说系统中每一个粒子的坐标平移相同的距离,此时若系统状态不变,这就是整体对称性.而如果每一个粒子的坐标可以各自自由平移任意距离而系统状态不变,这就是局域对称.换句话说,对称性的局域版本相比其整体版本是更强的对称,当然这也意味着物理上要实现的难度会更高.另一方面,对称性可以是分立的也可是连续的.分立的指的是该对称性所对应的操作只能分立的,而连续对称就是我们可以连续地变化或者操作.比如说,时间反演,宇称等对称性都是分立的对称性,而平移旋转等是连续的对称.相变理论关心的是整体的对称性,我们简单列举如下:

- 空间平移:晶态固体(crystal solid)
- 空间旋转:液晶(liquid crystal)
- 自旋旋转:磁体,铁磁(ferromagnetism),反铁磁(antiferromagnetism)
- 规范对称:超导(superconductivity),超流(superfluid)
- 时间反演:手型超导(chiral superconductivity),手性自旋液体(chiral spin liquid),圈电流(loop current)
- 轨道对称:锰氧化物和铁基超导的轨道有序
- 时间平移:时间晶体(time crystal),由Wilczek建议.[1]

可以看到每当破缺一个对称性时,就有相应的新物态产生,那么如何来理解相变的一般行为呢,这就是相变的Landau理论的内容.

几点说明: 在自由空间中,在任意一点观察看到的东西一模一样,也就是空间是各向同性并且是均匀的.如果有一个函数$w(x)$是空间位置x的函数,那么空间中平移不变性指的就是,对于任意a,$w(x+a)=w(x)$.但是在晶态固体中,完全的平移不变性被破坏,体系仅在晶格平移矢量R的操作下不变,即$w(x+R)=w(x)$.

[1]当然,理论上已经证明热平衡下时间晶体并不存,因此时间晶格严格来说并不是稳定的热力学相,目前研究比较清楚的是在周期驱动下产生的时间晶体,它破坏了原先的时间周期性.例如外加周期性驱动的周期是t,如果时间平移不变性保持,那么$2t$周期与t周期内的物理应该一致,但若发生对称破缺,那么$2t$与t周期内的物理就不同了,这就是所谓的分立时间晶体.

对于液晶中的棒状分子而言,它们在高温时完全无序分布,因而总体来看体系在空间是各向同性的,即具有空间旋转对称性,但是在低温时,棒状分子自发地沿某个方向排列,这样体系的各个方向就不等价了,也就是说空间旋转对称性破缺了.

规范对称性,简单来说就是波函数(场算符)在相因子变换下系统的Schödinger方程(哈密顿量)不变.在超导和超流理论中,高温时序参量平均值为零,自然添加任意相因子不会改变系统的宏观行为,但是在低温时,序参量自发地取某个确定的值,此时我们已经不能再添加任意的相位因子,也就是说低温下规范对称性破缺了.

对于时间反演对称性,数学上指的是把时间反向,也就是令$t \to -t$时,如果描述系统的方程形式不变,那么就说系统具有时间反演对称性.物理上来看,如果一个粒子沿着一个轨道运动,然后如果它的运动满足时间反演不变性,那么当我们逆着时间方向去看粒子运动,这时粒子会沿着原先的轨道逆向运动.也即是说粒子运动的时间方向上是可逆的,即时间反演物理上等价于运动反演.对于经典力学系统,速度$\vec{v} = d\vec{r}/dt$在时间反演下改变符号,即$\vec{v} \to -\vec{v}$,同理动量$\vec{p} = m\vec{v}$也会改变符号.角动量$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$, 那么角动量也改变符号.让我们考虑继续经典的牛顿运动方程,即$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}$.首先,可以看到如果力$\vec{F}$不显含时间,当我们令$t \to -t$时,由于对时间$t$求的是两次导数,牛顿方程完全不变,此时我们说系统具有时间反演对称性.一个最简单的例子是自由粒子.此时粒子的位置满足匀速直线运动的关系$\vec{r}(t) = \vec{v}_0 t$.现在让我们做时间反演操作,也就是让速度反号$\vec{v}_0 \to -\vec{v}_0$,这样我们发现粒子的位置是$\vec{r}_{tr}(t) = -\vec{v}_0 t$.因此,时间反演后粒子在$t$时刻的位置等于反演前粒子在$-t$ 时刻的位置,这说明系统满足时间反演不变性.

当我们考虑电磁场中运动的粒子时,牛顿方程变为 $m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = q\vec{E} + q\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B}$. 此时如果电荷$q$,电场强度$\vec{E}$与磁感应强度$\vec{B}$都不含时间,那么在时间反演变换$t \to -t$下运动方程变为$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = q\vec{E} - q\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B}$.回忆静态电场来自于大量电荷的Coulomb 作用力总和,显然其在时间反演下不会改变.静态磁场来自于运动电荷产生的稳恒电流,而电流的经典表达式是$\vec{j} = nq\vec{v}$,那么根据毕奥– 萨法尔定律$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int dr' \frac{\vec{j}(\vec{r}') \times (\vec{r} - \vec{r}')}{(\vec{r} - \vec{r}')^3}$, 显然有$\vec{B} \to -\vec{B}$.因此我们发现电磁场中的粒子在Lorentz力下的运动也满足时间反演不变.注意到这里之所以满足时间反演不变是因为我们也让电磁场做了时间反演操作,(整个系统做时间反演)如果我们仅让粒子本身做时间反演而电磁场不变,那么自然粒子的运动就不具有时间反演不变.例如经典霍尔效应中粒子在均匀磁场中运动,粒子运动是圆形轨道,现在我们对粒子运动做时间反演,那么由于粒子速度反号,根据Lorentz力公式,粒子的运动将是一个新的圆形轨道.这样霍尔效应中的粒子运动不满足时间反演不变.

Landau平均场理论:临界点的故事

我们知道,热力学系统的基本热力学性质由其自由能确定,因此讨论相变的出发点便是对系统自由能的讨论.对于一般的体系,自由能显然是温度和其他系统参数的复杂函数,并不好研究.因此Landau 提出我们可以简单假设自由能是序参量的函数,序参量在有序态非零而在无序态为零,在相变点附近,序参量是个趋于零的小量,这样我们可以把自由能密度f_L(单位体积的自由能)展开为序参量Ψ的幂级数,展开的参考点就是序参量为零的情况,于是有如下形式:

$$\boxed{f_L[\Psi]=\frac{F[\Psi]}{V}=f_0+\frac{r}{2}\Psi^2+\frac{u}{4}\Psi^4+...} \tag{5.1}$$

在这里序参量Ψ是与位置时间等都无关的常函数,并且我们先考虑其为单分量实数的情况:$\Psi^*=\Psi$.f_0代表正常态的贡献,一般可以当做常数而忽略.r 和u是两个参数,通常假设r是温度的函数,而$u>0$(保证体系的稳定性)并且忽略所有高阶项的贡献.(例如Ψ^6和Ψ^{82})

$$r=a(T-T_c),(a>0) \tag{5.2}$$

这样,当温度高于相变温度T_c时,$r>0$,而当温度低于临界温度时,$r<0$.此外,如果体系本身是序参量的偶函数,即$F[\Psi]=F[-\Psi]$,那么我们说体系具有整体的Z_2对称性.此时,在自由能关于序参量的展开中就必定不会有奇数次项,例如Ψ^3和Ψ^5.

通常情况下,系统稳定时其自由能取极小值,那么此时自由能对序参量求导数必定为零:

$$\frac{\partial f_L[\Psi]}{\partial\Psi}=0\Rightarrow\Psi(r+u\Psi^2)=0 \tag{5.3}$$

当$T>T_c$,即$r>0$时,物理上成立的解是:$\Psi=0$.也就是说我们研究的系统在高温时是处于无序态,序参量为零.

当$T<T_c$,即$r<0$时,方程解有两个,即$\Psi=0$和$\Psi=\pm\sqrt{\frac{-r}{u}}$.显然,序参量非零的解代表有序态.为了确定到底哪一个态是此时体系的自由能最小态,可以代入序参量的解于自由能密度的表达式,我们发现:

$$f_L[\Psi=0]=0 \tag{5.4}$$

$$f_L[\Psi\neq0]=-\frac{r^2}{4u} \tag{5.5}$$

显然,$f_L[\Psi\neq0]<f_L[\Psi=0]$,也就是说在$T<T_c$时序参量取值非零,系统进入有序态.

- 我们通常说相变发生时系统对称性会降低或者破缺,在当前的Landau理论中,一旦进入有序态,体系的序参量只会在 $\pm\sqrt{\frac{-r}{u}}$两个取值中取某一个.这样的话,状态本身$\Psi\leftrightarrow-\Psi$之间的Z_2(Ising)对称性就被破坏了(注意到自由能或者哈密顿量还是不变的).也就是说,相变导致物理系统状态的对称性小于系统哈密顿量的对称性,这就是对称破缺的真正含义.

[2]忽略高阶项的原因一方面是相变附近序参量本身就是小量,另一方面在于Wilson的重整化群理论表明高阶项要么不重要,要么可以由低阶项诱导产生,因此我们可以在此仅考虑低阶项.

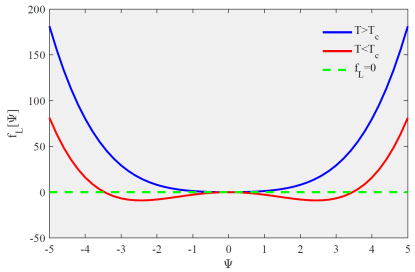


Figure 5.2: Landau自由能在相变前后的变化,可以看到低温下产生额外的两个序参量非零的极小值,这对应稳定的对称破缺态.

另外,我们注意到,这里的对称性破缺实际上是在没有加入外场的情况下出现的,也就是系统自己自发地破坏自身的对称性,这被称为自发对称性破缺或对称性自发破缺(spontaneous symmetry breaking).

1. 对于可以用序参量描述的相变,高温时序参量为零,系统处于无序态;低温时,序参量非零,系统是有序态;而在相变点,序参量从零开始变化.
2. 没有外场存在时序参量自发地从零变至非零,系统发生自发对称性破缺.

Landau平均场理论的可观测量

让我们进一步考虑前一节中Landau理论会给出什么样的物理可观测量?

首先,我们考虑热容: 在$T > T_c$时,$f_L = 0$,所以$C_V = 0$;而当$T < T_c$时:

$$f_L = -\frac{r^2}{4u} = -\frac{(T-T_c)^2}{4u} \Rightarrow \frac{\partial f_L}{\partial T} = -\frac{T-T_c}{2u}, \quad \frac{\partial^2 f_L}{\partial T^2} = -\frac{1}{2u} \tag{5.6}$$

此时,体系的(单位体积)热容是:

$$C_V = -T\frac{\partial^2 f_L}{\partial T^2} = \frac{T}{2u} \tag{5.7}$$

在相变点,我们发现热容的跳变(jump)是:

$$\Delta C_V|_{T_c} \equiv C_V|_{T\to T_c^-} - C_V|_{T\to T_c^+} = \frac{T_c}{2u} \tag{5.8}$$

显然,这当前的理论中,相变温度以上热容为零,这是Landau平均场理论完全忽略涨落效应的导致的错误结果,在应用时应当注意.[3]

接下来,我们考虑外场下的物理量,例如对于磁性系统计入外磁场的效应,此时,相当于在自由能中加入一个磁场项$-h\Psi$:

$$f_L[\Psi] = \frac{r}{2}\Psi^2 + \frac{u}{4}\Psi^4 - h\Psi \tag{5.9}$$

[3]经典统计力学告诉我们任何物体它的热容在高温下总会趋于饱和,即Dulong-Petit定律.

这里h代表均匀的外场,对于简单的磁性系统可理解为磁场.通过自由能对序参量取极值,可以发现:

$$\frac{\partial f_L}{\partial \Psi} = 0 \Rightarrow \ r\Psi + u\Psi^3 = h \tag{5.10}$$

这样我们得到关于Ψ的一元三次方程$\Psi^3 + \frac{r}{u}\Psi - \frac{h}{u} = 0$,利用一元三次方程的求根公式可得三个根.当然根的形式还是比较复杂.但是,在相变点附近,Ψ^3相比于Ψ是一个小量,因此我们忽略Ψ^3项,由此得到简单的结果,即

$$\Psi = \frac{h}{r} \tag{5.11}$$

那么相应的序参量磁化率(susceptibility)则是[4]:

$$\chi = \frac{d\Psi}{dh} = \frac{1}{r} = \frac{1}{T - T_c} \tag{5.12}$$

同时,当体系在相变点时,$T = T_c$ $(r = 0)$(序参量的一次项为零),因此有$u\Psi^3 = h$,我们解得:

$$\Psi = \left(\frac{h}{u}\right)^{1/3} \tag{5.13}$$

Landau平均场理论得到的物理量分别是

$$\Psi = \pm\sqrt{\frac{-r}{u}} \ (T < T_c), \Psi = 0 \ \ (T > T_c) \tag{5.14}$$

$$C_V = \frac{T}{2u} \quad (T < T_c), C_V = 0 \ \ (T > T_c) \tag{5.15}$$

$$\chi = \frac{d\Psi}{dh} = \frac{1}{r} = \frac{1}{T - T_c} \tag{5.16}$$

$$\Psi = \left(\frac{h}{u}\right)^{1/3} \ \ (T = T_c) \tag{5.17}$$

临界指数与标度律

在上一节的内容中,我们看到在相变点附近,各类物理量显示出显著的幂律(power-law) 行为,一般而言,在相变点附近,我们可以写出以下的一般形式:

$$C_V \propto |T - T_c|^{-\alpha} \tag{5.18}$$

$$\Psi \propto |T - T_c|^{\beta} \tag{5.19}$$

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma} \tag{5.20}$$

$$\Psi \propto |h|^{1/\delta}, (T = T_c) \tag{5.21}$$

在这里,$\alpha, \beta, \gamma, \delta$称为相应量的临界指数(critical exponent). 实际上,不同物理系统的临界指数可以完全相同,这就是普适类(universality class) 的概念,也就是说虽然物理系统的微观结构和宏观物理不尽相同,但是当它们接近临界点时,只

[4]若Ψ代表系统的宏观磁矩,那么它对外磁场h 的一阶导数给出磁化率

类型	α	β	γ	δ	ν	η
Landau平均场	0	$\frac{1}{2}$	1	3	$\frac{1}{2}$	0
高斯理论	$2-\frac{d}{2}$	$\frac{d-2}{4}$	1	$\frac{d+2}{d-2}$	$\frac{1}{2}$	0
二维Ising模型	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15	1	$\frac{1}{4}$
三维Ising模型	0.110(1)	0.3265(3)	1.2372(5)	4.789(2)	0.6301(4)	0.0364(5)

Table 5.1: 一些典型理论或模型的临界指数.

要其序参量的维数,对称性以及系统空间维度相同,那么它们的相变行为是类似的,具有相同的临界指数.例如液氦超流相变与三维材料的超导相变具有相同的临界指数,尽管各自的序参量(氦原子体系的宏观波函数与Cooper对超导波函数)并不相同.

显然,对比于上一节的Landau理论的结果,可以发现Landau平均场的临界指数是:

$$\boxed{\alpha=0,\quad \beta=\frac{1}{2},\quad \gamma=1,\quad \delta=3} \tag{5.22}$$

实际上,人们发现(基于实验数据的分析)这些临界指数之间并不是彼此独立的,而是通过所谓的标度律(关系)联系在一起(scaling law/relation):

$$\boxed{\alpha+2\beta+\gamma=2} \tag{5.23}$$

$$\boxed{\gamma=\beta(\delta-1)} \tag{5.24}$$

$$\boxed{(2-\eta)\nu=\gamma} \tag{5.25}$$

第一,第二和第三个标度律分别称为Rushbrooke,Griffiths和Fisher标度律.[5]这些关系对于任何连续相变体系都是成立的.在这里,我们还引入了关联长度ξ(correlation length)的临界指数ν 以及关联函数的反常维度η(anomalous dimension),它们的具体形式以及内容在后续讨论中都会涉及.

可以看到,Landau平均场理论所得到的临界指数满足以上的标度律.然而我们发现Landau 理论的临界系数看起来与系统的空间维度没有关系,但是实际系统在不同空间维度时的表现其实是很不一样的,这就表明空间维度与临界指数应该有某种联系.

对于一些系统(也就是空间维度小于上临界维度的体系),以下所谓超标度(hyperscaling)关系也是存在的:

$$\boxed{2-\alpha=\nu d} \tag{5.26}$$

这里d代表的是系统的空间维数,超标度关系也称为Josephson标度律.很显然的是,对于Landau理论,一般来说超标度关系是不成立的,当且仅当空间维度$d=4$时,超标度关系才成立.(这里我们提前用到了$\nu=1/2$的Landau平均场结果)

[5]在研究早期人们只是得到一系列的不等式,在实验精度提高后则发现实际上是等式

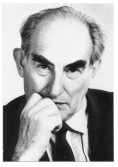


Figure 5.3: Vitaly L. Ginzburg(1916 – 2009).Ginzburg因对超导和超流理论的开创性贡献荣获2003年诺贝尔物理学奖.

- 相变点附近物理量显示幂律行为,可由临界指数刻画,并且这些指数满足相应的称为标度律的等式关系.然而Landau平均场的临界系数除在空间维度为4 时,并不满足超标度关系.

Ginzburg-Landau理论:非均匀序参量

实际物理系统中,体系的序参量并不一定是完全均匀的,可以有时间或者空间上的变化.对于空间变化的序参量,Ginzburg和Landau给出了更一般的自由能表达式,即Ginzburg-Landau理论:[6]

$$F_{GL} = \int d^d x f_{GL}[\Psi(x)] \tag{5.27}$$

$$f_{GL}[\Psi] = \frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2 + \frac{r}{2}\Psi^2 + \frac{u}{4}\Psi^4 - h\Psi \tag{5.28}$$

此时,序参量$\Psi(x)$是空间位置x的函数,而系统的自由能则是对自由能密度在全空间的积分.$\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2$表示序参量在空间变化会消耗能量,$s>0$是常系数.[7]

那么根据$\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2$与$\frac{r}{2}\Psi^2$,可以定义一个长度量纲的量,即关联长度:

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{s}{|r|}} = \sqrt{\frac{s}{|T-T_c|}} \propto |T-T_c|^{-1/2} \tag{5.29}$$

一般性的,关联长度在相变点附近满足关系$\xi \propto |T-T_c|^{-\nu}$,这说明,在Ginzburg-Landau 理论中关联长度的临界指数$\nu = 1/2$.注意到,对于$\nu > 0$,当系统接近相变

[6]Vitaly Lazarevich Ginzburg(1916 – 2009)生于莫斯科的一个犹太工程师家庭,是俄国著名的理论物理学家,天文学家并于2003年荣获诺贝尔物理学奖.他毕业于莫斯科国立大学并师从俄国著名物理学家Igor Tamm, 于1944年加入苏联共产党.他的学术成就主要包括超导电性的Ginzburg-Landau唯像理论,等离子体中的电磁波传播以及宇宙射线的起源.他还是苏联的氢弹研究之父(之一)并且作为生物学家之一把现代基因学带回苏联.

[7]若$s<0$,那么空间均匀的解就会不稳定.此时,我们需要加入更高阶的空间导数项,例如$(\nabla^2\Psi)^2$.设系统的自由能密度为$f = \frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2 + \frac{w}{2}(\nabla^2\Psi)^2$, 那么做傅里叶变换后则有$f = \frac{s}{2}q^2\Psi^2 + \frac{w}{2}q^4\Psi^2$. 令$\partial f/\partial q = 0$可得$q = -\frac{s}{2w}$.这样,当$s<0, w>0$时,系统的解为序参量具有空间调制结构的解,即$\Psi \sim e^{iqx}$. 一般而言,这种结构的波长$\lambda = 2\pi/q$与晶格并不匹配,这样就是所谓的非公度情况.文献中,把s恰好改变符号,并且系统从均匀有序变到非均匀序的点称为Lifshits点.这在磁场下的$CuGeO_3$系统中可以观察到.

点时,关联长度将会发散,此时系统唯一的长度尺度就是关联函数本身,而这一点将会对相变问题的理论研究带来极大地简化.

与均匀系统类似,体系稳定时,其自由能取极小值,也就是自由能F对序参量Ψ的变分为零:[8]

$$\delta F_{GL} = \int d^d x \delta f_{GL}[\Psi(x)] = \int d^d x \frac{\partial f_{GL}[\Psi(x)]}{\partial \Psi} \delta\Psi(x) = 0 \tag{5.30}$$

对于任意$\delta\Psi(x)$上式成立的条件是$\frac{\partial f_{GL}[\Psi(x)]}{\partial \Psi} = 0$. 为了便于进一步的计算,我们可以对自由能$F$ 做分部积分并假定无穷远边界上序参量的空间梯度为零,那么有

$$f_{GL}[\Psi] = -\frac{s}{2}\Psi\nabla^2\Psi + \frac{r}{2}\Psi^2 + \frac{u}{4}\Psi^4 - h\Psi \tag{5.31}$$

这样,我们有:

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi} = -s\nabla^2\Psi + r\Psi + u\Psi^3 - h = 0 \tag{5.32}$$

注意在对$\Psi\nabla^2\Psi$求Ψ导数时需要把前后两个序参量当做两个不同的来处理,这样分别求一次导数,刚好抵消前面的$1/2$系数.由于Ψ^3的存在, $-s\nabla^2\Psi + r\Psi + u\Psi^3 - h = 0$是一个非线性偏微分方程,其不能用我们熟悉的分离变量法求解,一般而言只能通过数值方法来得到数值解.

当$T \to T_c$时,$u\Psi^3$项足够小,那么有:

$$-s\nabla^2\Psi + r\Psi = h \tag{5.33}$$

此时,为了求解方便可对序参量Ψ和外场h分别做傅里叶变换:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}\Psi_k, \quad h(x) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}h_k \tag{5.34}$$

这里k是动量,Ψ_k和h_k分别是傅里叶变换后的序参量和外场.把上述结果代入方程可得,

$$\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}(-s)(ik)^2\Psi_k + \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}r\Psi_k = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}h_k \tag{5.35}$$

比较两边系数(傅里叶变换基矢e^{ikx}的系数)可得:

$$(sk^2 + r)\Psi_k = h_k \Rightarrow \Psi_k = \frac{h_k}{(sk^2 + r)} \tag{5.36}$$

如果定义动量依赖的磁化率为$\chi_k = \frac{\Psi_k}{h_k}$,则有:

$$\chi_k = \frac{1}{(sk^2 + r)} = \frac{1}{s(k^2 + \xi^{-2})}, (T > T_c) \tag{5.37}$$

[8]当然更一般性的计算变分为零的方法演示如下: $\delta F_{GL} = \int d^d x (f_{GL}[\Psi + \delta\Psi] - f_{GL}[\Psi]) = \int d^d x (\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi}\delta\Psi + \frac{\partial f_{GL}}{\partial \nabla\Psi}\delta(\nabla\Psi))$. 然后对第二项做分部积分有$\int d^d x \frac{\partial f_{GL}}{\partial \nabla\Psi}\delta(\nabla\Psi) = -\int d^d x (\nabla\frac{\partial f_{GL}}{\partial \nabla\Psi})\delta\Psi + \int d^d x \nabla(\frac{\partial f_{GL}}{\partial \nabla\Psi}\delta\Psi)$. 注意到后面这个是表面项,一般为零,则有$\delta F_{GL} = \int d^d x [\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi} - \nabla\frac{\partial f_{GL}}{\partial \nabla\Psi}]\delta\Psi = 0$. 既然要求该式对任意$\delta\Psi$都成立,那么我们得到相应的Lagragian方程是$\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi} - \nabla\frac{\partial f_{GL}}{\partial \nabla\Psi} = 0$, 代入具体的自由能密度$f_{GL}$就得到要求的方程.

在这里,关联长度是$\xi = \sqrt{s/|r|}$,与先前的量纲分析完全一致. 在先前讨论中,外场是完全均匀的,这对应于此处$k = 0$的零动量部分并且 $\chi_{k=0} = \frac{1}{r}$.

当$T = T_c$时,关联长度发散($\xi^{-1} \to 0$),并且磁化率具有以下幂律形式:

$$\chi_k = \frac{1}{sk^2} \propto \frac{1}{k^2} \tag{5.38}$$

更一般地,在相变点,我们有

$$\chi_k \propto \frac{1}{k^{2-\eta}} \tag{5.39}$$

η是所谓的反常维度.[9]在Ginzurg-Landau理论中,可以看到反常维度$\eta = 0$. 对于其他物理系统,反常维度会大于零.

回忆上一节中的一个标度关系$(2-\eta)\nu = \gamma$,可以看到平均场理论的临界系数$\eta = 0,\ \nu = 1/2,\ \gamma = 1$ 确实满足这个标度律.

- 在实际使用中,我们不明确区分序参量均匀下的Landau理论以及非均匀时的Ginzburg-Landau 理论, 一般可以直接称作Landau相变理论或平均场理论.

- 对于方程$-s\nabla^2\Psi + r\Psi + u\Psi^3 - h = 0$,当$u \neq 0$时,实际上还存在很多非平面波解,例如一维情况下对$-s\partial_x^2\Psi + r\Psi + u\Psi^3 = 0$(令$h = 0$)有孤子(soliton)解:$\Psi = \Psi_0 \tanh \frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi}$.

我们可以把孤子解代入方程可得,($\partial_x^2 \tanh x = 2\tanh^3 x - 2\tanh x, \xi^2 = s/(-r) (T < T_c)$)

$$\begin{aligned}
&-s\Psi_0\partial_x^2 \tanh\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} + r\Psi_0 \tanh\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} + u\Psi_0^3 \tanh^3\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} = 0 \\
&\Rightarrow -s\xi^{-2}\Psi_0\left(\tanh^3\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} - \tanh\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi}\right) + r\Psi_0\tanh\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} + u\Psi_0^3\tanh^3\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} = 0 \\
&\Rightarrow r\tanh^3\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} + u\Psi_0^2\tanh^3\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} = 0
\end{aligned} \tag{5.40}$$

再利用Landau理论中$\Psi_0^2 = \frac{-r}{u}$得到上式为零,这说明孤子解$\Psi(x) = \Psi_0 \tanh \frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi}$是一维方程的解.注意到$x >> x_0$时$\Psi(x) \to \Psi_0$而$x << x_0$时则有$\Psi(x) \to -\Psi_0$.在$x \sim x_0$的附近,宽度为$\xi$的范围内,$\Psi(x)$从$-\Psi_0$跳变为$\Psi_0$.

- 非均匀序参量由Ginzburg-Landau理论描述,序参量空间变化的特征长度尺度是关联长度ξ,其在相变点发散.

[9]一般来说反常维度反映的是量纲分析所得维度与实际结果的偏差,通常相互作用效果显著的相变其反常维度越大

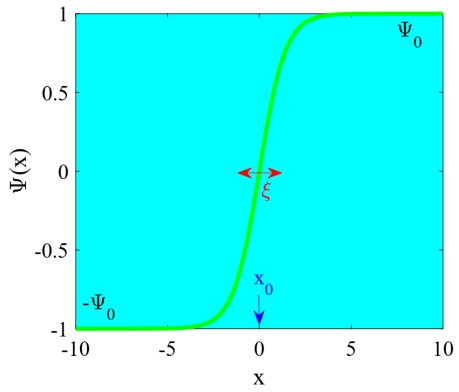


Figure 5.4: 一维方程的孤子解$\Psi(x)=\Psi_0\tanh\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi}$.

Landau平均场理论的正确性

根据先前几节的讨论,我们知道Landau理论给出的临界系数分别是

$$\boxed{\alpha=0,\quad \beta=\frac{1}{2},\quad \gamma=1,\quad \delta=3,\quad \nu=1/2,\quad \eta=0} \tag{5.41}$$

但是二维(经典)Ising模型的精确解则表明:[10]

$$\boxed{\alpha=0,\quad \beta=\frac{1}{8},\quad \gamma=7/4,\quad \delta=15,\quad \nu=1,\quad \eta=1/4} \tag{5.42}$$

此外三维Ising模型的蒙特卡洛数值模拟给出:

$$\boxed{\alpha=0.110(1),\quad \beta=0.3265(3),\quad \gamma=1.2372(5),\quad \delta=4.789(2),\quad \nu=0.6301(4),\quad \eta=0.0364(5)}$$

可以看到Landau平均场与Ising模型临界指数相差很大.(注意Ising模型精确解的临界指数满足超标度律.)随着空间维度的升高,临界指数逐渐接近Landau平均场理论的结果.

显然,由统计物理的一般知识,我们知道宏观(大尺度下的)物理量总存在着涨落,而在Landau相变理论中完全没有考虑涨落效应,序参量只取确定值.因而有理由相信,正是由于没有考虑序参量的涨落效应,才导致Landau理论与Ising 模型精确解以及数值解不符.

平均场上的涨落效应I

为简单起见,我们考虑相对于均匀序参量的涨落,即$\Psi(x)=\Psi_0+\delta\Psi$,$\Psi_0$代表Landau平均场理论中的均匀序参量,其大小由自由能极值给出,$\delta\Psi(x)$是空间依

[10] Onsager,Phys.Rev.**65**,117(1944)给出了二维Ising著名的Onsager解;Yang,Phys.Rev.**85**,808(1952)中杨振宁计算了磁化的温度依赖以及相应的临界指数$\beta=1/8$.用老杨自己的话说,这个工作是他职业生涯中做过的最长的计算.

赖的序参量涨落.那么,自由能密度可以写为:

$$\begin{aligned} f_{GL} &= \frac{s}{2}(\nabla\delta\Psi)^2+\frac{r}{2}(\Psi_0+\delta\Psi)^2+\frac{u}{4}(\Psi_0+\delta\Psi)^4 \\ &= \frac{r}{2}\Psi_0^2+\frac{u}{4}\Psi_0^4+(r\Psi_0+u\Psi_0^3)\delta\Psi+\frac{s}{2}(\nabla\delta\Psi)^2+\left(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2\right)(\delta\Psi)^2+\frac{u}{4}(4\Psi_0\delta\Psi^3+\delta\Psi^4) \end{aligned}$$

利用Landau平均场的结果$r\Psi_0+u\Psi_0^3=0$,则以上自由能密度的涨落一阶项为零.当我们只考虑到涨落的二次项时(也称为Guass涨落),以上自由能密度可写为:

$$f_{GL}=\frac{r}{2}\Psi_0^2+\frac{u}{4}\Psi_0^4+\frac{s}{2}(\nabla\delta\Psi)^2+\left(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2\right)(\delta\Psi)^2+\mathcal{O}(\delta\Psi^3) \tag{5.43}$$

此时,如果我们认为体系在不同涨落下的自由能分布满足Boltzman分布,那么系统的等效配分函数是:

$$\mathcal{Z}=\int D\delta\Psi e^{-F_{GL}},\quad F_{GL}=\int d^dx f_{GL} \tag{5.44}$$

$$\mathcal{Z}=e^{-(\frac{r}{2}\Psi_0^2+\frac{u}{4}\Psi_0^4)L^d}e^{-\Delta F_{GL}}=e^{-(\frac{r}{2}\Psi_0^2+\frac{u}{4}\Psi_0^4)L^d}\int D\delta\Psi e^{-\int d^dx[\frac{s}{2}(\nabla\delta\Psi)^2+(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2)(\delta\Psi)^2]}$$

为了算出上述积分,我们先对自由能密度的涨落部分做傅里叶变换:

$$\delta\Psi(x)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}\delta\Psi(k) \tag{5.45}$$

那么我们得到:

$$\int D\delta\Psi e^{-\int d^dx[\frac{s}{2}(\nabla\delta\Psi)^2+(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2)(\delta\Psi)^2]}=\int\prod_k d\delta\Psi(k)e^{-\sum_k[\frac{s}{2}k^2+(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2)]\delta\Psi(k)\delta\Psi(-k)}$$

注意由于$\delta\Psi(x)$为实函数,其必定满足$\delta\Psi(-k)=\delta\Psi^*(k)$. 这表明对于$\delta\Psi(k)$,其每个分量并不是独立的.这提示我们更好的傅里叶变换是明确分离$k>0$与$k<0$部分:

$$\begin{aligned} \delta\Psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k>0}e^{ikx}\delta\Psi(k)+\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k<0}e^{ikx}\delta\Psi(k)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k>0}(e^{ikx}\delta\Psi(k)+e^{-ikx}\delta\Psi(-k)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k>0}(e^{ikx}\delta\Psi(k)+e^{-ikx}\delta\Psi^*(k)) \end{aligned} \tag{5.46}$$

此时,每一个$\delta\Psi(k),\delta\Psi^*(k)$就是独立的复函数,其实部与虚部可独立处理.同时,积分测度也具有如下形式:

$$D\delta\Psi(x)\to\left(\prod_{k>0}d\delta\Psi(k)\right)\left(\prod_{k<0}d\delta\Psi(k)\right)=\prod_{k>0}d\delta\Psi(k)d\delta\Psi^*(k)=\prod_{k>0}2d\mathrm{Re}\delta\Psi(k)d\mathrm{Im}\delta\Psi(k)$$

进一步,需要Gauss积分:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ax^2}=\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty}dxdye^{-a(x^2+y^2)}}=\sqrt{\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\infty}rdre^{-ar^2}}=\sqrt{\pi\int_0^{\infty}dr^2e^{-ar^2}}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$
\begin{aligned}
&\int \prod_k d\delta\Psi(k) e^{-\sum_k [\frac{s}{2}k^2+(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2)]\delta\Psi(k)\delta\Psi(-k)} \\
&= \prod_k \int_{-\infty}^{\infty} d\delta\Psi(k) e^{-[\frac{s}{2}k^2+(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2)]|\delta\Psi(k)|^2} \\
&= \prod_{k>0} \int_{-\infty}^{\infty} 2d\mathrm{Re}\delta\Psi(k) d\mathrm{Im}\delta\Psi(k) e^{-2[\frac{s}{2}k^2+(\frac{r}{2}+\frac{u}{4}6\Psi_0^2)][(\mathrm{Re}\delta\Psi(k))^2+(\mathrm{Im}\delta\Psi(k))^2]} \\
&= \prod_{k>0} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{sk^2+(r+3u\Psi_0^2)}} \right)^2 \\
&= \prod_k \sqrt{\frac{2\pi}{sk^2+(r+3u\Psi_0^2)}} \\
&= e^{\frac{1}{2}\sum_k \ln \frac{2\pi}{sk^2+r+3u\Psi_0^2}}
\end{aligned} \tag{5.47}
$$

这样,我们发现序参量涨落导致的自由能修正是:

$$
\Delta F_{GL} = -\frac{1}{2}\sum_k \ln \frac{2\pi}{sk^2+r+3u\Psi_0^2} = \frac{1}{2}\sum_k \ln(sk^2+r+3u\Psi_0^2) - \frac{1}{2}\sum_k \ln 2\pi
$$

那么体系的总自由能是

$$
F = F_{GL} + \Delta F_{GL} = \left(\frac{r}{2}\Psi_0^2 + \frac{u}{4}\Psi_0^4\right) L^d + \frac{1}{2}\sum_k \ln(sk^2+r+3u\Psi_0^2) \tag{5.48}
$$

在此,我们已经忽略了常数项的贡献并且空间体积$V = L^d$.

对自由能求序参量Ψ_0的极值,可以得到:

$$
\frac{\partial F}{\partial \Psi_0} = (r\Psi_0 + u\Psi_0^3) + \frac{1}{2V}\sum_k \frac{6u\Psi_0}{sk^2+r+3u\Psi_0^2} = 0 \tag{5.49}
$$

当体系存在非零的序参量时,上式可化为

$$
r + u\Psi_0^2 + \frac{1}{2V}\sum_k \frac{6u}{sk^2+r+3u\Psi_0^2} = 0 \tag{5.50}
$$

当系统在相变点时$\Psi_0 \to 0$,上式右边的求和在热力学极限下可化为对动量的积分:

$$
\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{3u/s}{k^2} = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{3u}{s}\int_0^\Lambda k^{d-3}dk = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{3u}{s}\frac{k^{d-2}|_0^\Lambda}{d-2} \tag{5.51}
$$

这里Λ是动量的截断尺度或者最大允许值,物理上可以理解为当前理论适用的最大范围.S_d是d维时空中单位球的球面积,通常出现在d维积分$I = \int_{-\infty}^{\infty} d^dk f(k^2) = S_d \int_0^\infty k^{d-1}dk f(k^2)$ 中,例如二维时空中的球就是单位圆形,其面积S_2就是单位圆的周长,即$S_2 = 2\pi$.三维时空中的单位球面积就是熟悉的$S_3 = 4\pi$,也就是对z轴和极角积分的结果($S_3 = \int_0^\pi d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta$).一般地,我们有$S_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$,其中$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t}t^{x-1}dt, (x>0)$是实变量Gamma函数.

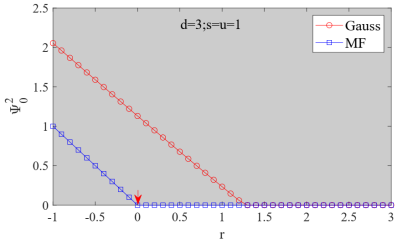


Figure 5.5: 序参量Ψ_0^2在Gauss近似(红线)和平均场(蓝线)下随r的变化.

- 注意到对于$d \leq 2$,积分结果在积分下限$k = 0$处发散,这表明小的Gauss涨落会导致低维系统的(长程)有序性被破坏.

更一般的,有序在低维系统的消失实际上对应Mermin-Wagner-Hohenberg定理.[11]

- Mermin-Wagner-Hohenberg定理:具有连续对称序参量的二维(及以下)系统在有限温度时不会出现真正的长程有序.

也就是说,在这类系统中序参量总是零.当然如果存在长程相互作用,则可以不遵守该定理的限制.通常把长程序不能存在的临界维度称作下临界维度(lower critical dimension),记为d_L.在这里,$d_L = 2$表明二维及以下系统不会有长程有序.[12]

当然,如果我们需要明确的相变信息,那么就必须(数值)求解方程5.50.[13]图5.5显示了三维空间时,参数$s = u = 1, \Lambda = 10$下序参量的平方Ψ_0^2随r的变化,可以看到平均场的相变点是$r = 0$而考虑Gauss涨落后则移动至$r \simeq 1.3$处.这说明计入Gauss涨落实际上使得系统更容易相变而进入有序态.同时,我们发现ϕ_0^2与r的关系总是线性的,但计入Gauss涨落使得线性的斜率相比平均场斜率$-1/u$有偏离.

平均场上的涨落效应II

现在,为了简单起见,我们考虑$T > T_c$ ($\Psi_0 = 0$),此时涨落导致的自由能修正

[11]在场论研究中,S.Coleman也得到了类似的结果,因此也称为Coleman-Mermin-Wagner-Hohenberg定理.

[12]但是为什么很多二维系统还是可以稳定存在,比如说石墨烯(graphene)?因为实际系统总是三维,即便是单层的石墨烯,其单原子层在显微镜下也是高低起伏的,因此材料的三维性使得他们等效的二维或者一维结构得以稳定.

[13]用Matlab语言并调用fsolve函数和integral函数就可求得该方程的数值解.不过注意到过于负的r使得方程无解,这说明该方程仅在相变点附近有效.

如下(令$s=1$):

$$\Delta F_{GL}=\frac{1}{2}\sum_k \ln(k^2+r)=\frac{1}{2}V\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\ln(k^2+r)=\frac{S_d}{2(2\pi)^d}V\int k^{d-1}dk\ln(k^2+r)$$

这里关于k的积分可利用分步积分改写为

$$\int k^{d-1}dk\ln(k^2+r)=\int_0^\Lambda d(k^d\ln(k^2+r))-2\int_0^\Lambda\frac{k^{d+1}dk}{k^2+r}=\Lambda^d\ln(\Lambda^2+r)-2\int_0^\Lambda\frac{k^{d+1}dk}{k^2+r}$$

注意到第一项在$\Lambda >> r$时仅依赖于Λ,而第二项在忽略对数项修正的情况下可以近似为

$$\int_0^\Lambda\frac{k^{d+1}dk}{k^2+r}\simeq\int_{\sqrt{r}}^\Lambda k^{d-1}dk=\frac{1}{d}(\Lambda^d-r^{d/2}) \tag{5.52}$$

因此,自由能可以写成

$$\Delta F_{GL}\simeq\frac{S_d}{2(2\pi)^d}V\left[2\Lambda^d\ln\Lambda-\frac{2}{d}(\Lambda^d-r^{d/2})\right]\propto r^{d/2}\propto(T-T_c)^{\frac{d}{2}} \tag{5.53}$$

与之相对,Landau平均场的自由能为

$$F_L=\left(\frac{r}{2}\Psi_0^2+\frac{u}{4}\Psi_0^4\right)L^d\propto\frac{r^2}{u}\propto(T-T_c)^2 \tag{5.54}$$

- 可以看到,当体系空间维度$d>4$时,平均场对自由能的贡献是主要的,也就是说在大于四维的空间中,Landau平均场是基本正确的.
- 而当$d<4$时,涨落修正的贡献会大于平均场部分,此时涨落效应不能被忽略,我们必须更加严格地考虑涨落对相变行为的影响.
- 而当$d=4$时,两者贡献相当,不可区分,也就说平均场基本抓住了物理,但对于具体的细节,涨落效应仍然有影响,在一般讨论中,我们也认为$d=4$也是平均场可以正确描述相变的维度.通常称该维度为上临界维度(upper critical dimension),记为d_u,表示平均场在该维度以及以上可以正确描述相变物理.

当$d=4$时,$\Delta F_{GL}=\frac{1}{2}V\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\ln(k^2+r)=\frac{VS_4}{8(2\pi)^4}\int_0^\Lambda dk^4\ln(k^2+r)=\frac{VS_4}{8(2\pi)^4}[\frac{\Lambda^4-r^2}{2}\ln(\Lambda^2+r)+\frac{2r\Lambda^2-\Lambda^4}{4}+\frac{\Lambda^2}{2}\ln(\frac{r}{\Lambda^2+r})]\simeq\frac{VS_4}{8(2\pi)^4}[\frac{\Lambda^4}{4}(2\ln\Lambda^2-1)+\frac{r\Lambda^2+r^2\ln\frac{r}{\Lambda^2}}{2}]\propto r^2\ln\frac{r}{\Lambda^2}$.可以看到,此时涨落修正除了$r^2$以外还有额外的对数修正部分$\ln r$. 此种对数依赖会对热容有对数贡献,即$C_V\propto T\ln(T-T_c)$,这表明即使在上临界维,涨落依然有可观测的影响.

虽然$d=1,2$时系统并不存在有序态,但是可以看成是相变温度$T_c=0$的情况.此时,$\int_0^\Lambda\frac{k^2dk}{k^2+r}=\int_0^\Lambda(1-r/(k^2+r))dk=\Lambda-\sqrt{r}\arctan\frac{\Lambda}{\sqrt{r}}=\Lambda-\frac{\pi}{2}\sqrt{r}$, 涨落导致的自由能是 $\Delta F_{GL}^{d=1}/V=\frac{1}{2\pi}(\Lambda^d\ln\Lambda-(\Lambda-\frac{\pi}{2}\sqrt{r}))\propto\sqrt{r}\propto\sqrt{T}$. 同理,$\int_0^\Lambda\frac{k^3dk}{k^2+r}=\frac{1}{2}(\Lambda^2-r\ln\frac{\Lambda^2+r}{r})$,$\Delta F_{GL}^{d=2}/V\propto r\ln\frac{\Lambda^2}{r}\propto T\ln\frac{\Lambda^2}{T}$.

在当前问题中,$d_c = 4$,但在一些无序相关的问题中,$d_c = \infty$,这表明对于那些系统,平均场理论总是不正确的,涨落效应在任何情况下都是重要的.

如果我们假定在$2 < d < 4$时Gauss涨落主导体系的相变行为,那么由于$\Delta F_{GL} \propto (T - T_c)^{\frac{d}{2}}$,此时有$2 - \alpha = d/2$,也就是有$\alpha = 2 - d/2$.此外,因为动量依赖磁化率的倒数实际上就是$sk^2 + r$,那么相应的关联长度临界指数与平均场理论一致,即$\nu = 1/2$. 其他几个临界指数可以利用标度律获得,我们把这些Gauss临界指数总结如下:

$$\boxed{\alpha = 2 - \frac{d}{2}, \quad \beta = \frac{d-2}{4}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = \frac{d+2}{d-2}, \quad \nu = \frac{1}{2}, \quad \eta = 0} \tag{5.55}$$

然而,当我们把Gauss临界指数与Ising模型精确解比较时,两者依然有很大差别,这表明至少简单的Gauss 涨落并不能很好地解释实际的临界行为.进一步的微扰理论计算实际上依然无法消除这种差异,历史上人们利用标度以及重整化群的观念重新审视相变现象,最终较好得解决了经典相变的临界行为的计算问题.

- $d \geq 4$时Landau理论正确;$2 < d < 4$涨落效应对于相变描述很重要;$d \leq 2$有序性消失.

多分量情况:越多越好

当我们考虑更一般的系统时,单分量序参量需要推广至多分量的情况,对于具有N个实分量构成的矢量序参量,其最简单的Landau自由能密度可以写为:

$$f_L[\vec{\Psi}] = \frac{r}{2}\left(\vec{\Psi}\cdot\vec{\Psi}\right) + \frac{u}{4}\left(\vec{\Psi}\cdot\vec{\Psi}\right)^2 \tag{5.56}$$

其中$\vec{\Psi} = (\Psi_1, \Psi_2, ..., \Psi_N)$是有$N$个实分量的矢量序参量.注意以上自由能密度在矢量的正规转动(用$N \times N$ 的正交矩阵(orthogonal) 表示这个操作)下保持不变,因而也称为$O(N)$不变理论.O代表正交矩阵的缩写,N表示矩阵是$N \times N$的正方矩阵.进一步,当正交矩阵行列式为+1时,该矩阵称为特殊(special)正交矩阵,相应的理论称为$SO(N)$理论,S是特殊这个单词的简写.同理,具有N个复数分量组成的矢量序参量理论若在$N \times N$的幺正(unitary)矩阵转动下不变,则称为$U(N)$不变理论,特别是当幺正矩阵的行列式为+1时即为$SU(N)$理论.[14]

最常见的$O(N)$理论是$O(2)$以及$O(3)$理论,前者对应于超导或者超流的有效自由能,而后者则对应于Heisenberg经典磁性模型系统.最简单的$O(2)$不变理论具有如下形式:

$$f_L[\vec{\Psi}] = r\left(\Psi_1^2 + \Psi_2^2\right) + \frac{u}{2}\left(\Psi_1^2 + \Psi_2^2\right)^2 \tag{5.57}$$

而相应的$O(2)$转动操作$\mathcal{O}_{2\times 2}$是对$\vec{\Psi}$的两个分量Ψ_1, Ψ_2 所构成的二维空间的转动,即把矢量$\vec{\Psi}$旋转为新矢量$\vec{\Psi}'$并保持矢量的大小不变:

$$\vec{\Psi}' = \mathcal{O}_{2\times 2}\vec{\Psi} \Rightarrow \begin{pmatrix} \Psi_1' \\ \Psi_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \tag{5.58}$$

这里α是任意的转动角度.上述的操作相当于把矢量绕着z轴转动α角度.把以上形式代入$O(2)$ 理论的自由能自然会看到该理论是$O(2)$不变的,即$f_L[\vec{\Psi}] = f_L[\mathcal{O}_{2\times 2}\vec{\Psi}]$.

对于$O(2)$模型,一般也可写为复数序参量的形式,即引入$\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2 = |\Psi|e^{i\theta}$:

$$f_L[\Psi] = r|\Psi|^2 + \frac{u}{2}(|\Psi|^2)^2 \tag{5.59}$$

对于该模型,$O(2)$转动实际上对应于相因子变换,即$\Psi \to e^{i\alpha}\Psi$,$f_L[\Psi] = f_L[e^{i\alpha}\Psi]$.注意到,相因子变换也称为规范变换,并且此处所有空间位置的序参量都变化相同的相因子,这实际上就是整体规范变换不变性.同时,相因子变换相当于是最简单的幺正转动,即$U(1)$操作,换句话说,$O(2)$理论和$U(1)$理论是等价的.

[14] $O(N)$,$SO(N)$,$U(N)$ 和$SU(N)$都代表广义上的转动操作,在给定基矢下可用正交和幺正矩阵表示.这些操作本身构成一个封闭的数学结构,即群.因此这些记号也是相应的群论记号.若$\mathcal{O}$为正交矩阵,其每个矩阵元都为实数并满足$\mathcal{O}^{-1} = \mathcal{O}^T$, 也就是矩阵的逆与其转置相等.若$\mathcal{U}$为幺正矩阵,那么它的矩阵元原则上是复数,并有$\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}^\dagger$, 即矩阵的逆等于它的厄密共轭.

当考虑自由能对序参量取极值时,可以发现

$$\frac{\partial f_L}{\partial \Psi^*} = r\Psi + u|\Psi|^2\Psi = 0 \tag{5.60}$$

这说明

$$|\Psi|^2 = \left\{ \begin{array}{c} 0, \quad T > T_c \\ -r/u, \quad T < T_c \end{array} \right\} \tag{5.61}$$

当我们考虑空间变化的序参量时,相应的自由能密度可以写为

$$f_{GL}[\Psi] = \frac{1}{2m}|\nabla\Psi|^2 + r|\Psi|^2 + \frac{u}{2}(|\Psi|^2)^2 = -\frac{1}{2m}\Psi^*\nabla^2\Psi + r\Psi^*\Psi + \frac{u}{2}(\Psi^*\Psi)^2$$

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi^*} = -\frac{1}{2m}\nabla^2\Psi + r\Psi + u|\Psi|^2\Psi = 0 \tag{5.62}$$

更一般地,当序参量随时间还有变化时,其运动由著名的Gross-Pitaevski方程描述

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + r\Psi + u|\Psi|^2\Psi} \tag{5.63}$$

在这类方程中,序参量实际上是微观的Bose场算符的统计平均值,即$\Psi = \langle\hat{\Psi}\rangle$,玻色场代表He-4原子,玻色型的超冷原子,或者He-3超流以及通常超导体中的Cooper对.

$O(2)$模型中的相位模式

让我们继续研究$O(2)$不变理论的性质:

$$\boxed{f_{O(2)} = |\nabla\Psi|^2 + r|\Psi|^2 + \frac{u}{2}(|\Psi|^2)^2} \tag{5.64}$$

令$\Psi = \sqrt{\rho}e^{i\theta}$,其中$\theta$代表相位自由度,而$\rho$表示振幅自由度,在很多情况下也表示粒子数密度.把这个振幅-相位分解带入$O(2)$模型的自由能密度可得:

$$f_{O(2)} = (\nabla\sqrt{\rho})^2 + \rho(\nabla\theta)^2 + r\rho + \frac{u}{2}\rho^2 \tag{5.65}$$

在推导中,我们使用了$\nabla\Psi = e^{i\theta}(\nabla\sqrt{\rho} + i\sqrt{\rho}\nabla\theta)$ 以及$|\Psi|^2 = \rho$.

当$T < T_c$时,序参量获得非零的平均值,即$|\Psi_0| = \sqrt{-r/u}$或$\rho_0 = -r/u$. 此时$O(2)$模型约化为

$$f_{O(2)}^{T<T_c} = \rho_0(\nabla\theta)^2 + r\rho_0 + \frac{u}{2}\rho_0^2 \tag{5.66}$$

可以看到,当相位的变化足够小时,其消耗的能量$\rho_0(\nabla\theta)^2$也足够小,也就是说相位模式是无能隙模式.

注意到在这个问题中,仅当振幅模式ρ获得非零期望值时,相位模式才变得无能隙.这实际上就是粒子物理标准模型中所谓的Goldstone模式.



Figure 5.6: Yoichiro Nambu(南部阳一郎)(1921 – 2015).Nambu因关于亚原子物理中自发破缺对称性机制的研究荣获2008年诺贝尔物理学奖.

- Goldstone机制:连续对称的自发破缺会产生无能隙的Nambu-Goldstone模式.[15]

在O(2)模型中,振幅模式ρ获得非零值导致连续相位变换的破缺,这产生了无能隙的Goldstone模式(相位模式θ).如果计数Goldstone模式,一般而言一个系统破缺连续对称,会产生Goldstone模式,以$O(N)$模型为例,我们选择一个方向,在该方向序参量取有序值,则该方向的激发模式,即Higgs模式,是有能隙的,而另外$N-1$ 个垂直于该方向的激发模式都是无能隙的,也就是有$N-1$个Goldstone模式.

最后,我们指出并不是所有的无能隙模式都由破缺连续对称性导致,例如电磁场的量子,即光子,并没有破缺什么明显的连续对称性但却是无质量的激发.

Anderson-Higgs机制

在$O(2)$模型的基础上,让我们考虑序参量与简单的$U(1)$规范场,即电磁场的耦合.

$$\boxed{f_{GL}=|(\nabla-iq\vec{A})\Psi|^2+r|\Psi|^2+\frac{u}{2}(|\Psi|^2)^2+\frac{1}{2}(\nabla\times\vec{A})^2} \tag{5.67}$$

在这里,我们采用了所谓的最小耦合,即$\partial_\mu\to\partial_\mu-iqA_\mu$,当只考虑空间部分时就成为上述方程中的形式.

历史上,Ginzburg和Landau最早引入该模型描述超导电性的宏观(唯像)物理并取得成功.$\vec{A}$是电磁矢量势.在BCS理论出现后,Gorkov从该理论出发在临界区导出了上述Ginzburg-Landau模型,重要的结果是序参量Ψ是Cooper 对算符的统计平均值,而电荷$q=2e$表明序参量实际上是电子对而非单个电子.

[15] Yoichiro Nambu(南部阳一郎)(1921 – 2015)生于日本东京,在东京大学学习物理,先后任职于大阪城市大学和芝加哥大学,是日本裔美国籍物理学家.他因为60年代关于亚原子物理中自发破缺对称性机制的研究荣获2008 年诺贝尔物理学奖.他的学术成就主要包括粒子物理中对称性自发破缺的早期理论,量子色动力学中的色核的建议以及弦的量子理论(Nambu-Goto 作用量).他被认为是弦理论的发现者之一.



Figure 5.7: Lev Gor'kov是俄国著名的理论物理学家,他也是Landau学派的代表性人物,其与Alexei Abrikosov和Igor Dzyaloshinskii所合著的多体教科书《Quantum field theory methods in statistical physics》 培养了好几代凝聚态理论研究者.

与上一节讨论类似,我们考虑序参量的振幅-相位分解,那么其导致的自由能密度是

$$f_{GL} = (\nabla\sqrt{\rho})^2 + \rho(\nabla\theta - q\vec{A})^2 + r\rho + \frac{u}{2}\rho^2 + \frac{1}{2}(\nabla\times\vec{A})^2 \tag{5.68}$$

对于矢量势$\vec{A}$,由于物理可观测量是电场强度$\vec{E}$和磁感应强度$\vec{B}$,因而其存在一定的任意性或者说自由度.利用这种任意性,如果我们定义新的矢量势$\widetilde{\vec{A}} = \vec{A} - \frac{1}{q}\nabla\theta$, 那么会发现 $\nabla\times\widetilde{\vec{A}} = \nabla\times\vec{A} - \frac{1}{q}\nabla\times\nabla\theta$. 对于非奇异的标量$\theta$,其梯度必定是无旋的,那么$\nabla\times\widetilde{\vec{A}} = \nabla\times\vec{A}$, 同时自由能密度变为

$$f_{GL} = (\nabla\sqrt{\rho})^2 + q^2\rho(\widetilde{\vec{A}})^2 + r\rho + \frac{u}{2}\rho^2 + \frac{1}{2}(\nabla\times\widetilde{\vec{A}})^2 \tag{5.69}$$

- 可以看到,在我们做规范变换之后,原始序参量Ψ的相位自由度θ 已经被完全移除.

进一步,我们假定$T < T_c$,$\Psi = \Psi_0$,即$\rho = \Psi_0^2$ =常数.

$$f_{GL} = q^2\Psi_0^2\vec{A}^2 + r\Psi_0^2 + \frac{u}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2}(\nabla\times\vec{A})^2 \tag{5.70}$$

为简化符号,我们已经设$\widetilde{\vec{A}} = \vec{A}$.

当对自由能取极小值时,我们有

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial\Psi_0} = 0 \Rightarrow\ q^2\vec{A}^2 + r + u\Psi_0^2 = 0 \tag{5.71}$$

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial A_i} = 0 \Rightarrow\ q^2\Psi_0^2 A_i - \frac{1}{2}\nabla^2 A_i = 0 \tag{5.72}$$

在推导以上公式时,我们使用了$(\nabla\times\vec{A})^2 = \nabla^2\vec{A}^2 - (\nabla\cdot\vec{A})^2 = \nabla^2\vec{A}^2$ 以及Coulomb规范$\nabla\cdot\vec{A} = 0$.

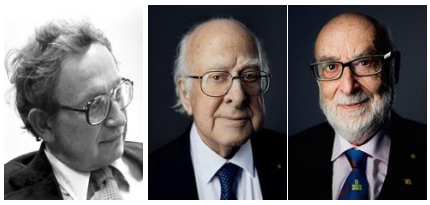


Figure 5.8: Philip Warren Anderson(1923 − 2020),Peter W. Higgs(1929−)和Francois Englert(1932−).Anderson因磁性和无序系统的电子结构的基础性理论研究荣获1977年诺贝尔物理学奖.Higgs和Englert因对我们理解亚原子粒子质量起源的机制研究荣获2013诺贝尔物理学奖.

$$r + u\Psi_0^2 + q^2\vec{A}^2 = 0 \tag{5.73}$$

$$2q^2\Psi_0^2\vec{A} - \nabla^2\vec{A} = 0 \tag{5.74}$$

这两个方程称为Ginzburg-Landau方程.

考虑一个指数衰减的解:$\vec{A}(x) = \vec{A}_0 e^{-x/l}$,$l = 1/\sqrt{2q^2\Psi^2}$ 代表London穿透深度(penetration depth),表征电磁场在超导体中衰减的特征长度.同时,这代表电磁场在有序态(超导态)获得了有限的质量(能隙)$m^2 = q^2\Psi_0^2$,这就是所谓的Anderson-Higgs机制.

- Anderson-Higgs机制:当Higgs粒子凝聚时,规范场吃掉无质量的Goldstone模式获得有限质量.

在当前的凝聚态GL模型中,AH机制表明振幅模式具有有限值时,电磁场吸收掉相位模式而获得有限激发能隙,产生Meissner效应.在凝聚态物理中,使规范场获得能隙的方案还有Chern-Simons机制,此时体系破坏时间反演与空间反演对称性,这实际上导致整数与分数量子霍尔效应.

一级相变与电磁场涨落诱导的一级相变:避开临界点*

在先前的讨论中,我们利用Landau相变理论研究了连续相变,或者说二级相变的基本性质,我们发现序参量在相变点附近连续变化.但是,我们知道像水的气–液相变就是一类一级相变.通常,若一级相变存在序参量,那么序参量在相变点附近会显示跳变行为,这与二级相变明显不同.进一步,一级相变点可以形成一级相变线,这条曲线可以在一个特殊点终结,也就是一级相变的临界终点.在这个点以上,原先由相变线分开的两个相可以连续过渡.这类例子首先在气–液相变中观察到,在固体系统中,Ce元素的$\gamma-\alpha$ 相变以及过渡金属氧化物V_2O_3在有限温度时的金属-绝缘体(Mott相变)也有类似性质.下面我们考虑一级相变的一个非寻常例子,即电磁场涨落诱导的一级相变.

电磁场涨落诱导的一级相变*

实际上,在量子场论中电磁场是涨落的量子场,现在我们假定其空间涨落是经典的,那么相应的有效统计模型可写为:

$$\mathcal{Z}=\int D\vec{A}e^{-\int d^3x f_{GL}} \tag{5.75}$$

$$f_{GL}=r\Psi_0^2+\frac{u}{2}\Psi_0^4+q^2\Psi_0^2\vec{A}^2+\frac{1}{2}(\nabla\times\vec{A})^2 \tag{5.76}$$

在这里我们只考虑空间均匀的序参量并且仅涉及$d=3$的情况.

$$\int D\vec{A}e^{-\int d^3x[q^2\Psi_0^2\vec{A}^2+\frac{1}{2}(\nabla\times\vec{A})^2]}=\int D\vec{A}\prod_j e^{-\sum_{k>0}(2q^2\Psi_0^2+k^2)|A_j(k)|^2}=\prod_{k,j}\sqrt{\frac{2\pi}{2q^2\Psi_0^2+k^2}}$$

$$=e^{\frac{3}{2}\sum_k \ln\frac{2\pi}{2q^2\Psi_0^2+k^2}}$$

这样,我们得到考虑电磁场涨落之后的自由能密度

$$f_{GL}=r\Psi_0^2+\frac{u}{2}\Psi_0^4+\frac{3}{2}\frac{1}{V}\sum_k\ln(2q^2\Psi_0^2+k^2)=r\Psi_0^2+\frac{u}{2}\Psi_0^4+\frac{3}{2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\ln(2q^2\Psi_0^2+k^2)$$

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial\Psi_0}=0=2r\Psi_0+2u\Psi_0^3+6q^2\Psi_0\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{2q^2\Psi_0^2+k^2} \tag{5.77}$$

为了计算上式中右边的积分,我们有

$$\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{2q^2\Psi_0^2+k^2}=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[\frac{1}{k^2}-\frac{2q^2\Psi_0^2}{k^2(2q^2\Psi_0^2+k^2)}\right]=\frac{\Lambda}{2\pi}-2q^2\Psi_0^2\frac{\arctan\Lambda/(\sqrt{2}q\Psi_0)}{2\pi^2\sqrt{2}q\Psi_0}$$

$$\simeq\frac{\Lambda}{2\pi}-\frac{\sqrt{2}q\Psi_0}{4\pi}$$

这里,积分上限为Λ是一个大量.我们发现相应的方程简化为

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi_0} = \left(2r + \frac{6q^2\Lambda}{2\pi^2}\right)\Psi_0 + 2u\Psi_0^3 - \frac{6\sqrt{2}q^3\Psi_0^2}{4\pi} = 0 \tag{5.78}$$

对该方程两边对Ψ_0积分可得:

$$f_{GL} = \left(r + \frac{6q^2\Lambda}{4\pi^2}\right)\Psi_0^2 + \frac{u}{2}\Psi_0^4 - \frac{2\sqrt{2}q^3\Psi_0^3}{4\pi} \tag{5.79}$$

为了简化计算,定义$\tilde{r} = r + \frac{6q^2\Lambda}{4\pi^2}, \tilde{u} = 2u, T_0 = 6\sqrt{2}q^3/(4\pi)$, 那么自由能密度简化为

$$f_{GL} = \tilde{r}\Psi_0^2 + \frac{\tilde{u}}{4}\Psi_0^4 - \frac{T_0}{3}\Psi_0^3 \tag{5.80}$$

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi_0} = 0 \Rightarrow \Psi_0 = 0,\ \frac{T_0 \pm \sqrt{T_0^2 - 4\tilde{u}\tilde{r}}}{2\tilde{u}}, \tag{5.81}$$

由于解包含根式,这表明当$\tilde{r} > \frac{T_0^2}{4\tilde{u}}$时,此时唯一的物理解是$\Psi_0 = 0$, 对应的自由能为零.当$\tilde{r} < \frac{T_0^2}{4\tilde{u}}$时,物理的解共有三个. 比较相应解的能量可以发现,当$\tilde{r}$减小至某个临界值时,三个解中有两个解对应的自由能恰好为零,注意到零解是其中一个解,那么说明当系统自高温态演化至低温时,序参量从零直接跳变至有限值,显示出不连续行为,这就是一级相变.

如果T_0足够小,那么这个临界值很接近$\tilde{r} = 0$此时体系的两个的解是$\Psi_0 = 0$和$\Psi_0 = T_0/\tilde{u}$.在物理上,这表明当体系从高温态演化至相变点时,序参量直接从$\Psi_0 = 0$跳变至有限的取值$\Psi_0 = T_0/\tilde{u}$,该有限值对应的自由能为$-\frac{T_0^4}{12\tilde{u}^3} < 0$.

- 注意到当电磁场涨落不存在时体系只有二级(连续)相变,因此这里的相变又称为涨落诱导的一级相变.
- 形式上来看,我们注意到自由能密度中序参量三次方项的出现导致了一级相变发生.
- $\tilde{r} = 0$时$f_{GL} = \frac{\tilde{u}}{4}\Psi_0^4 - \frac{T_0}{3}\Psi_0^3$, 为了取能量极小值,$\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi_0} = 0 \Rightarrow \Psi_0 = T_0/\tilde{u}$.
- 当T_0很小时,一级相变是很弱的并会显示出类似连续相变的临界奇异性.

当然,一般的凝聚态物理系统中,电磁场都是当作经典场对待,因此这里的电磁场涨落诱导的一级相变并不能直接观察到.对于等效的电磁场,那么该一级相变可以在某些物理系统中探测到.

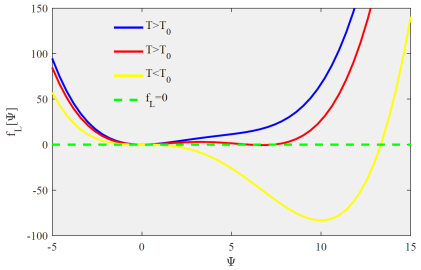


Figure 5.9: 一级相变前后Landau自由能的变化,可以看到序参量在$T = T_0$ 附近的突变行为.

一级相变的其他例子*

对于某些系统,其序参量的四次方的系数u可以小于零,此时我们需要加上序参量的六次方项:[2]

$$f = r\Psi_0^2 + \frac{u}{2}\Psi_0^4 + w\Psi_0^6, \qquad w > 0 \tag{5.82}$$

这会使得系统的相变从二级变为一级.当二次与四次项系数r, u都为零时,系统的二级相变点变为一级相变,这称为三临界点(tricritical).

现在,让我们考虑两个序参量Ψ_0, φ耦合的模型:[2]

$$f = r\Psi_0^2 + \frac{u}{2}\Psi_0^4 + A\varphi^2 + B\Psi_0^2\varphi, \qquad u > 0 \tag{5.83}$$

注意到该模型最后一项的可用于理解磁性相变中的磁弹性耦合.由自由能密度对φ取极值可得$\varphi = -\frac{B}{2A}\Psi_0^2$.把这个结果重新代入$f$ 有

$$f = r\Psi_0^2 + \frac{u}{2}\Psi_0^4 + A\left(-\frac{B}{2A}\Psi_0^2\right)^2 + B\Psi_0^2\left(-\frac{B}{2A}\right)\Psi_0^2 = r\Psi_0^2 + \left(\frac{u}{2} - \frac{B^2}{4A}\right)\Psi_0^4. \tag{5.84}$$

这说明,当φ无序时,$(A > 0)\Psi_0$的四次项系数可以为负,这会导致Ψ_0的相变从二级转变为一级.一般而言,序参量与其他无序自由度耦合常常会导致一级相变.

本章小结和进一步阅读

本章小结 相变伴随对称性变化且由序参量描述;连续对称破缺导致Goldstone模式;规范场吃掉Goldstone模式获得质量.

本章关键词 序参量;对称破缺;Landau理论;临界指数;标度律;Ginzburg-Landau理论;Mermin-Wagner-Hohenberg定理;上临界维度;下临界维度;Anderson-Higgs机制;涨落诱导的一级相变

进一步阅读 Lancaster和Blundell合著的《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》第二十六章;H.Nishimori和G.Ortiz的《Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena》第一章和第二章

附录

一点群论知识

作为一类特殊的数学结构,群(group)的观念在物理学研究中发挥着重要的作用,特别是对量子力学诞生后的现代物理,例如粒子物理标准模型的理论构建.尽管物理学中对称性考虑总是重要的,然而群论直到量子力学创立之后才变得不可替代.Eugene Wigner在1963年所获得的诺贝尔奖主要归功于他在物理学中群论的使用.需要指出,包括Einstein,Schödinger在内的老一辈物理学家当时很抵触群论的使用,而Wigner的小伙伴von Neumann则支持他的工作.不过考虑到那是人们觉得量子力学的数学形式已经很古怪了,那么群论这个更古怪的东西被大家抵触也就正常了.

数学上,群定义为满足一些规则的元素的集合体,若群G的元素为g_α,那么有$G = \{g_\alpha\}$.群中的任意两个元素g_α, g_β的复合或者说乘积记为$g_\alpha \cdot g_\beta$,其也是G中的元素,即$g_\gamma = g_\alpha \cdot g_\beta$.群的乘法满足所谓的结合律,

$$(g_\alpha \cdot g_\beta) \cdot g_\gamma = g_\alpha \cdot (g_\beta \cdot g_\gamma), \tag{5.85}$$

此外存在单位元素I(有时也写成g_0),也就是任意群元与它相乘不变,

$$I \cdot g_\alpha = g_\alpha \cdot I = g_\alpha. \tag{5.86}$$

最后,对于任意一个群元g_α,存在逆元g_α^{-1}使得

$$g_\alpha \cdot g_\alpha^{-1} = g_\alpha^{-1} \cdot g_\alpha = I. \tag{5.87}$$

需要指出,

- 一般而言$g_\alpha \cdot g_\beta \neq g_\beta \cdot g_\alpha$,这时的群叫做非阿贝尔群(non-abelian group).如果$g_\alpha \cdot g_\beta = g_\beta \cdot g_\alpha$,这时候群元彼此对易(量子力学的说法),这时我们称这类群为阿贝尔群(abelian group);

- 群元数目有限的群称为有限群(finite group),反之,有无穷多群元素的群就是无限群(infinite group);

- 如果群元g_α中的参数α可以连续变化(比如三维空间中的角度),那么这个群就是所谓连续群(continuous group).与之相对,α只能取分立的取值的群就是分立群(discrete group).

下面我们列举一些典型的例子.

- 三维(欧几里得)空间中的转动.($SO(3)$群)

如果设空间的单位向量是

$$\vec{e}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{5.88}$$

那么三维空间中的转动可以看作是对这些单位向量或者说基矢的转动,数学上可以用3×3的正交矩阵(矩阵元为实数,且矩阵的转置与逆相同)描述(并且它们的行列式为1).这些转动操作在数学上构成的群称为$SO(3)$群.

- 二维(欧几里得)空间中的转动.($SO(2)$群)

二维空间中的转动指的是绕着垂直于二维平面的轴的转动,假设转动角度为$\phi\phi$的转动操作用$R(\phi)$表示,它们形成的群是$SO(2)$群.物理上我们发现,$R(\phi_1)R(\phi_2) = R(\phi_1 + \phi_2) = R(\phi_2)R(\phi_1)$,这说明$SO(2)$群是阿贝尔群.

- 置换群S_4.

置换群S_4指的是把任意四个对象做置换操作所形成的群.这四个对象可以写成A, B, C, D或者$1, 2, 3, 4$.一个典型的置换操作是$1 \to 3, 2 \to 4, 3 \to 2, 4 \to 1$.显然,$1, 2, 3, 4$四个数的排列方式有4!种,这说明置换群$S_4$的群元有4!个.一般而言,$n$阶置换群$S_n$有$n!$个群元.

- 两个元素形成的群称为Z_2群,记为$Z_2 = \{1, -1\}$.

类似的,$1, e^{i2\pi/3}, e^{i4\pi/3}$形成所谓的$Z_3$群.更一般的$Z_N$群是$Z_N = \{1, e^{i2\pi/N}, e^{i4\pi/N}...e^{i2\pi j/N}...e^{i2\pi(N-1)/N}$

- 所有模为1的复数$e^{i\phi}$构成$U(1)$群.

$U(1)$群乘法是这些复数的相乘$e^{i\phi_1}e^{i\phi_2} = e^{i(\phi_1+\phi_2)}$,这是一类阿贝尔群.既然$e^{i(\phi+2\pi)} = e^{i\phi}$,这说明我们可以把$\phi$限制到$[0, 2\pi]$范围内,这是我们称之为紧致群(compact group).此外,$U(1)$群可以看作是Z_N群在$N \to \infty$的极限,此时$e^{i2\pi j/N} \to e^{i\phi}$.

- 所有行列式为1的$n \times n$矩阵组成的$SL(n)$群.

$SL(n)$群的乘法就是矩阵的乘法.如果矩阵都是实数矩阵,那么相应的群记为$SL(n, R)$,若为矩阵元为复数,则对应$SL(n, C)$群.

- 二面体群(dihedral group),记为D_n.

保持规则n边形多面体不变的群就是二面体群.这个群的元素有相对多面体中心转动$2\pi/n$角度的转动R以及镜面反射r.显然,$R^n = I$,$r^2 = I$,$rRr = R^{-1}$.这样D_n就有$2n$个元素$\{I, R, R^2, ..., R^{n-1}, r, Rr, R^2r, ..., R^{n-1}r\}$.

子群

当然,一些群之间实际上有所属关系,例如子群(subgroup)关系.若$G = \{g_\alpha\}$,而G中的一些元素$\{h_\beta\}$也形成一个群,记为H,那么我们说H是G的子群,记为$H \subset G$.比较直接的例子是$SO(2) \subset SO(3), Z_2 \subset Z_4, SO(3) \subset SL(3,R)$.对于$SO(2) \subset SO(3)$,我们可以理解为在三维空间转动中仅仅做平面内转动.通过观察$Z_2 = \{1,-1\}, Z_4 = \{1, e^{i\pi/2}, -1, e^{i3\pi/2}\}$自然有$Z_2 \subset Z_4$,类似的我们发现$Z_2$并不是$Z_5$的子群,因为后者不包含$-1$这个群元.

一类特殊的子群是所谓的循环子群(cyclic subgroup),这可以通过任选(有限)群G中的元素g然后让g不断自乘实现,即有$\{g, g^2, g^3...\}$.如果这些元素构成一个群,那么必有$g^k = I$,此时我们可以把这个子群写成$\{I, g, g^2...g^{k-1}\}$,这实际上就是Z_k群.

- 此外,Lagrange定理表明若G有n个群元而其子群H有m个群元,那么必有n/m为整数.

根据这个定理,我们可以容易的判断既然Z_5有5个元素,Z_2有2个元素,那么5/2不为整数,这说明Z_2必定不是Z_5的子群.

群的直乘

当然,对一个物理系统而言,我们所施加的操作可以是不同类型的,这些不同类型的操作所形成的群最简单的就是所谓的群的直乘(direct product).让我们考虑两个群F和G,群元分别为f和g.我们定义新的群$H \equiv F \otimes G$,$\otimes$称为群的直乘,而群H的元素是$h = (f, g)$.这样H中两个元素的乘积为$(f,g)(f',g') = (ff', gg')$.显然,$H$的单位元是$(I, I)$,逆元是$(f^{-1}, g^{-1})$.若$F, G$群元分别有$m, n$个,则$H$有$m \times n$个元素.

让我们考虑群直乘的例子,即$Z_2 \otimes Z_2$,这可以看作是最简单的群直乘.既然每一个Z_2群包含元素$1, -1$,那么$Z_2 \otimes Z_2$群的四个元素可以写成

$$I = (1,1), \quad A = (-1,1), \quad B = (1,-1), \quad C = (-1,-1). \tag{5.89}$$

当然,我们需要指出虽然群元(a, b)中a, b的取值为± 1,但其含义可以完全不同,例如a取± 1是通常的整数,而b中的1代表$d \times d$单位矩阵I_d,-1代表-1乘以单位矩阵.因此在这种情况下我们可以把这个直乘群写成$\{1,-1\} \otimes \{I_d, -I_d\}$.

现在,让我们计算直乘群元素的相乘,根据直乘群元相乘的一般规则有$AB = (-1,1)(1,-1) = (-1\times 1, 1\times -1) = (-1,-1) = C$.另外,我们可以看到$Z_2 \otimes I = \{I, A\}, I \otimes Z_2 = \{I, B\}$都是$Z_2 \otimes Z_2$的子群.

群的同态和同构

若设群G和G'之间存在映射关系$f: G \to G'$,那么G中的元素g_1, g_2在G'中对应的元素是$f(g_1), f(g_2)$.现在如果G中的乘法结构$g_1 g_2$在G'中体现为$f(g_1)f(g_2)$,那

么我们说G和G'同态(homomorphism).若映射是一一对应的,那么这个同态关系又称为同构(isomorphism).

最简单的同构关系是$SO(2)$与$U(1)$群,两者间的映射是$f(R(\phi)) = e^{i\phi}$,此时$SO(2)$中的元素$R(\phi_1), R(\phi_2)$对应$U(1)$元素$e^{i\phi_1}, e^{i\phi_2}$,这样$R(\phi_1)R(\phi_2)$对应于$f(R(\phi_1))f(R(\phi_2)) = e^{i\phi_1}e^{i\phi_2}$.

另一个例子是$Z_2 \otimes Z_2$与Z_4同构,前者的四个元素A, B, C, D可以一一对应于后者的四个元素$1, i, -1, -i$.更一般的是,Z_p与Z_q群的直乘$Z_p \otimes Z_q$与Z_{pq}同构.

不变子群

设$H = \{h_\beta\}$是$G = \{g_\alpha\}$的子群,取任意非H的元素g,然后用g^{-1}, g乘遍H的每一个元素,那么如果此时所得的群仍然是H本身,我们称H是G的不变子群(invariant subgroup,即$g^{-1}Hg = H$),记为$H \triangleleft G$或$G \triangleright H$.

显然,若$G = E \otimes F$,那么$E \otimes I$和$I \otimes F$分别是G的不变子群.对于$E \otimes I$而言,其任意元素是(e, I),然后我们从G中选取任意元素(I, f),则有

$$(I, f)^{-1}(e, I)(I, f) = (I, f^{-1})(e, I)(I, f) = (e, f^{-1})(I, f) = (e, f^{-1}f) = (e, I). \tag{5.90}$$

这说明$E \otimes I$确实是不变子群,类似的$I \otimes F$也是不变子群.换句话说,群直乘中的群必然不变子群.

此外,我们容易看到$Z_2 = \{1, -1\}$群是$Z_4 = \{1, i, -1, -i\}$群的不变子群,这是因为直接计算发现

$$-i\{1, -1\}i = 1, -1, \quad i\{1, -1\}(-1) = \{1, -1\}. \tag{5.91}$$

此外我们知道$Z_2 \otimes Z_2 = Z_4$,根据直乘群的构成群必然是不变子群的结构,Z_2是Z_4的不变子群.

陪集和商群

利用不变子群,我们可以定义所谓的陪集(coset).具体而言,任意取G中的元素g,让g乘遍不变子群H的每一个元素,此时我们得到集合$gh_1, gh_2...$,记为gH.如果我们取遍G中所有的元素g,那么就得到一些列集合,

$$g_1H = g_1h_1, g_1h_2..., \quad g_2H = g_2h_1, g_2h_2..., \quad g_3H = g_3h_1, g_3h_2..... \tag{5.92}$$

这些集合就构成了陪集.可以证明陪集也是群.比如说,我们可以任取陪集中的两个元素$g_\alpha h_\beta, g_\gamma h_\delta$,它们的乘积是

$$g_\alpha h_\beta g_\gamma h_\delta = g_\alpha(g_\gamma g_\gamma^{-1})h_\beta g_\gamma h_\delta = g_\alpha g_\gamma(g_\gamma^{-1}h_\beta g_\gamma)h_\delta = g_\alpha g_\gamma h_\eta h_\delta = g_\alpha g_\gamma h_\theta \tag{5.93}$$

这说明陪集满足乘法规则$(g_\alpha H)(g_\gamma H)=g_\alpha g_\gamma H$而单位元是$IH=H$,也就是说不变子群$H$是陪集的单位元.另外$gH$的逆元是$g^{-1}H((g_\alpha H)(g_\alpha^{-1}H)=g_\alpha g_\alpha^{-1}H=IH=H$).由此,我们看到陪集实际上是以群作为群元素的一类群.

另一方面,由G的不变子群H,我们可以定义商群(quotient group),即$Q=G/H$.如果G有$N(G)$个元素,H有$N(H)$个元素,那么商群Q的元素个数是$N(G)/N(H)$.举例来说,我们知道$Z_2=\{1,-1\}$群是$Z_4=\{1,i,-1,-i\}$群的不变子群.这样我们可以找到4个陪集,即

$$A=\{1,-1\},\quad B=i\{1,-1\}=\{i,-i\},\quad C=-1\{1,-1\}=\{1,-1\},\quad D=-i\{1,-1\}=\{i,-i\}. \tag{5.94}$$

当然,注意到$A=C,B=D$,这样陪集数实际上是2.然后由A,B作为群元所构成的群就是Z_4/Z_2的商群,即$\{A,B\}=Z_4/Z_2$.由于$\{A,B\}$是一个Z_2 群,[16]因此有$Z_2=Z_4/Z_2$.当然,我们也知道Z_4与$Z_2\otimes Z_2$同构,因此把商群的写法逆过来就是$Z_4=Z_2\otimes Z_2$.

二维平面中的转动

现在,让我们考虑二维平面(欧氏空间)中的转动,这可以看成是把二维空间中的直角坐标系以坐标原点为中心绕着垂直平面的z轴做转动,例如逆时针旋转θ角度.这样在转动前某点(记作P)的坐标若为(x,y),那么这一点在转动后坐标系中的坐标记为(x',y'),由几何关系可得$x'=x\cos\theta+y\sin\theta,y'=-x\sin\theta+y\cos\theta$,写成矩阵形式则有

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\-\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}. \tag{5.95}$$

这个结果也可以简写为$\vec{r}'=R(\theta)\vec{r}$,$R(\theta)$就是$2\times 2$的转动矩阵.显然,$P$相对于原点的距离分别可以表示为$\sqrt{x^2+y^2},\sqrt{x'^2+y'^2}$.物理上既然只是坐标轴的转动,那么这个距离无论在转动前后都是一样的,也就是$\sqrt{x^2+y^2}=\sqrt{x'^2+y'^2}$,直接代入上述矩阵变换关系可以说明这个结果确实正确.

可以发现,所有不同角度θ所对应的旋转矩阵$\{R(\theta)\}$构成一个群,就是$SO(2)$群.群的乘法规则就是矩阵的乘法.这里O是英文orthogonal的缩写,说明R 矩阵是正交矩阵,即$R^TR=I$,而S是英文special的缩写,意思是特殊,也就是说R的行列式为1($\det(R)=1$).这样满足$SO(2)$群要求的R矩阵就是行列式为1 的正交矩阵,它们的矩阵元都是实数.

更一般的,如果我们不要求行列式为1,那么满足正交条件$O^TO=I$的所有2×2的O矩阵构成$O(2)$群.对于这个群,如果计算行列式会发现

$$\det(O^TO)=\det(O^T)\det(O)=\det(O)\det(O)=\det(I)=1\Rightarrow\det(O)=\pm 1. \tag{5.96}$$

[16]这个群的乘法是把群元的元素都以数的乘法乘在一起,例如$AA=\{1,-1\}\{1,-1\}=\{1,-1\}=A$.

这说明$O(2)$群里面的矩阵可以按照行列式取值分为两类,即$\det(O)=1$和$\det(O)=-1$.前一类就是我们已经讨论的$SO(2)$群,那么后一类是什么呢?

我们知道如果让y轴变成$-y$轴,我们就可以得到(相对于$x=0$的镜面)反射操作,这可以用矩阵$P_y=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$实现.显然$P_y$是正交矩阵但其行列式为$-1$,因此$P$并不是$SO(2)$群的元素而$O(2)$群的元素.类似的,对于$y$轴镜面反射由下面的矩阵描述: $P_x=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$.当然,$P_x=P_yR(\pi)$.因此,我们发现完整的$O(2)$群可以用转动$R$,反射$P_y$以及两者的结合$P_yR$组成,即$O(3)=\{R,P_y,P_yR(\theta)\}$.这样$SO(2)=\{R\}$自然是$O(2)$的子群.

此外,如果用2×2单位矩阵I_2和P_y就可以构造一个$Z_2=\{I_2,P_x\}$群.由这个Z_2群与$SO(2)$群就可以得到所有的$O(2)$群(的矩阵),这说明$SO(2)\otimes Z_2$的直乘群同构于$O(2)$(记为$O(2)=SO(2)\otimes Z_2$),或者或者说$O(2)$与Z_2的商群是$SO(2)=O(2)/Z_2$.

另一方面,我们可以用更加理论化的方式得到转动矩阵$R(\theta)$的具体形式.这种方式是构造转动群的一般方式.我们知道当不进行转动操作时,也就是$\theta=0$时必有$R(\theta=0)=I$(单位矩阵).现在让我们假设转动的角度θ足够小,这样就可以对$R(\theta)$做泰勒展开:[17]

$$R(\theta)=I+\theta\mathcal{J}+\mathcal{O}(\theta^2) \tag{5.97}$$

这里$\mathcal{J}$是某个明确的矩阵.然后把上述关系代入正交矩阵的定义$R^TR=I$,可得

$$(I+\theta\mathcal{J}^T)(I+\theta\mathcal{J})=I+\theta\mathcal{J}^T+\theta\mathcal{J}+\mathcal{O}(\theta^2)=I \tag{5.98}$$

这说明$\mathcal{J}^T=-\mathcal{J}$,也就是说$\mathcal{J}$是反对称矩阵.既然我们考虑的是2维空间的转动,那么$\mathcal{J}$可以选为

$$\mathcal{J}=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}, \tag{5.99}$$

因此转动角度很小时的转动矩阵可以写成

$$R(\theta)=I+\theta\mathcal{J}=\begin{pmatrix}1&\theta\\-\theta&1\end{pmatrix}+\mathcal{O}(\theta^2). \tag{5.100}$$

我们通常把$\mathcal{J}$称作转动的生成元(generator),因为可以用它实现转动操作.当θ为有限大小时,我们可以认为的把它写分为N等分,即有$\theta=N\delta\theta(\delta\theta=\theta/N)$.这样尽管每一个转动小角度$\delta\theta$,但转动$N$次以后等价于我们直接旋转$\theta$角度:

$$R(\theta)=\lim_{N\to\infty}(R(\delta\theta))^N=\lim_{N\to\infty}\left(1+\frac{\theta}{N}\mathcal{J}\right)^N=\lim_{N\to\infty}(e^{\frac{\theta}{N}\mathcal{J}})^N=e^{\theta\mathcal{J}}. \tag{5.101}$$

[17] 虽然$R(\theta)$是关于θ的矩阵函数,但对于做物理的人而言这无法阻挡我们做泰勒展开!

接下来,让我们对$e^{\theta\mathcal{J}}$做泰勒展开:

$$\begin{aligned} R(\theta) &= e^{\theta\mathcal{J}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\theta^n}{n!}\mathcal{J}^n \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\theta^{2k}}{(2k)!}\mathcal{J}^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\theta^{2k+1}}{(2k+1)!}\mathcal{J}^{2k+1} \\ &= I\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\theta^{2k}}{(2k)!} + \mathcal{J}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\theta^{2k+1}}{(2k+1)!} \\ &= I\cos\theta + \mathcal{J}\sin\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{5.102}$$

这样我重新得到了二维空间转动的具体形式.

$SO(3)$群与转动

对于三维欧式空间,我们也可以定义相应的转动,这类操作实际上保持矢量内积的不变性,即$\vec{\phi}\cdot\vec{\eta} = \sum_j \phi_j\eta_j$在转动下变为$\vec{\phi}'\cdot\vec{\eta}' = \sum_j \phi'_j\eta'_j = \sum_{i,k,j} R^T_{ki}R_{ji}\phi_k\eta_i = \sum_i \phi_i\eta_i$. 这样转动矩阵$R$满足正交条件$R^TR = I$.与二维空间转动相比,此时的转动描述需要三个角度,一般来说是x,y,z轴转动的角度$(\theta_x,\theta_y,\theta_z)\equiv\vec{\theta}$. 对于这三个转动,对应的生成元$\vec{\mathcal{J}} = (\mathcal{J}_x,\mathcal{J}_y,\mathcal{J}_z)$(都是反对称矩阵):

$$\mathcal{J}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J}_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.103}$$

这样任意的转动可以表示为$R(\vec{\theta}) = e^{\theta_x\mathcal{J}_x+\theta_y\mathcal{J}_y+\theta_z\mathcal{J}_z} = e^{\vec{\theta}\cdot\vec{\mathcal{J}}}$. 所有$R(\vec{\theta})$矩阵构成$SO(3)$群,群的乘法就是矩阵的乘法.当然,在量子力学中我们知道空间旋转与轨道角动量$\vec{J}$(算符)直接相关,因此我们可以定义$\vec{J} = -i\vec{\mathcal{J}}$,这样有$R(\vec{\theta}) = e^{i\vec{\theta}\cdot\vec{J}}$.同时,通过$\mathcal{J}_{x,y,z}$的具体形式,我们可以得到对易关系$[J_i,J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k$,($\varepsilon_{ijk}$是全反对称张量)这就是量子力学中角动量的对易关系.此外,角动量的平方$J^2 = J_x^2 + J_2^y + J_z^2$称为$SO(3)$代数Casimir不变量.

Lie群与Lie代数

假设一个群的元素用$g(\vec{\theta}) = g(\theta_1,\theta_2...)$表示,而$\vec{\theta}$是连续变化的参数,并且$g(0,0...0) = I$(单位元),那么由$g(\vec{\theta})$构成的群称为Lie群.例如前面讨论的$SO(3)$群就是典型的Lie群,此时参数是三个角度$\theta_x,\theta_y,\theta_z$.

对于Lie群,我们首先把群元在单位元附近展开,即$g = I + A$.然后把A写成生成元T_a的线性叠加,$A = i\sum_a \theta_aT_a$.接下来,任选两个群元$g_1 = I + A, g_2 = I + B$,这样有$g_1g_2g_1^{-1} \simeq I + B + [A, I + B] = I + B + [A,B]$.这样对易关

系$[A,B]$就抓住了群元在接近单位元时的基本性质. 最后代入$B=\sum_b \theta'_b T_b$,并且注意到$g_1 g_2 g_1^{-1} \simeq I$,这样可以得到$[T_a,T_b]=if_{abc}T_c$.这个对易关系又称为Lie代数(Lie algebra),而因子f_{abc}叫做Lie代数的结构常数(structure constants).这些结构常数决定了Lie代数进而决定了整个Lie群.

$SO(4)$Lie代数

现在,让我们考虑$SO(4)$,类似于$SO(3)$群的讨论,体系总计有$3\times 4/2=6$个生成元J_{ab},一般记作$J_{12},J_{23},J_{31},J_{14},J_{24},J_{34}$.这里的指标$ab$指的是在$ab$平面内的转动.显然,$J_{12},J_{23},J_{31}$可以看作是四维欧式空间中三维空间里面相对于$x,y,z$轴的转动,也把它们写成$J_3=J_{12},J_1=J_{23},J_2=J_{31}$.对与涉及第四个维度的旋转$J_{14},J_{24},J_{34}$,我们也把它们记为$K_1=J_{14},K_2=J_{24},K_3=J_{34}$.这些生成元满足如下的对易关系:

$$\begin{aligned}[J_i,J_j]&=i\varepsilon_{ijk}J_k\\ [J_i,K_j]&=i\varepsilon_{ijk}K_k\\ [K_i,K_j]&=i\varepsilon_{ijk}J_k.\end{aligned}\tag{5.104}$$

这就是$SO(4)$群的Lie代数,可以看到这个代数的结构常数就是熟悉的全反对称张量.注意到$[J_i,J_j]=i\varepsilon_{ijk}J_k$是$SO(3)$群的Lie代数,这自然说明$SO(3)$代数是$SO(4)$Lie代数的子代数.

此外,注意到在$J_i\to J_i,K_i\to -K_i$变换下$SO(4)$代数是不变的,这相当于我们对第四个坐标轴做反射变换$x_4\to x_4$而其他轴保持不变.(也可以让前三个坐标轴做反射变换而第四个轴不变)

如果定义$J_{\pm,i}=\frac{1}{2}(J_i\pm K_i)(i=1,2,3)$,那么就有$[J_{+,i},J_{-,j}]=0$,这说明$SO(4)$代数实际上可以拆分为两个独立的$SO(3)$子代数,

$$[J_{+,i},J_{+,j}]=i\varepsilon_{ijk}J_{+,k},\quad [J_{-,i},J_{-,j}]=i\varepsilon_{ijk}J_{-,k}.\tag{5.105}$$

在分立变换$J_i\to J_i,K_i\to -K_i$下$J_{+,i},J_{-,i}$彼此交换.

最后,我们一般会说$SO(4)$群局域同构与$SO(3)\otimes SO(3)$,这实际上是指这两个群在单位元附近是相同的.

群的表示

根据群的定义,群元实际上都是抽象的对象.但是在实际使用,特别是计算中,我们会把群元用矩阵来表示,这就叫做群的矩阵表示,简称群表示(representation of group). 具体而言,设群$G=\{g_\alpha\}$的任意群元g_α对应的矩阵是$D(g_\alpha)$,矩阵D的维度都是$d\times d$,如果

$$D(g_\alpha)D(g_\beta)=D(g_\alpha g_\beta)\tag{5.106}$$

对任意g_α, g_β都成立,我们就得到了一个群的矩阵表示.(g_α的逆g_α^{-1}对应的矩阵是$D(g_\alpha^{-1}) = D(g_\alpha)^{-1}$)这里矩阵维度$d$叫做群表示的维度,$D_d(g)$可以理解为群元$G$的$d$维表示.这个关系实际上说明群元素相乘已经转化为相应的矩阵相乘,这样我们就可以通过研究矩阵的性质反过来得到群的性质.例如,之前已经讨论过的$SO(2), SO(3)$群实际上就是分别用2×2和3×3的正交矩阵表示.

现在我们知道了群表示的含义,那么我们自然会问一些问题,例如:

1. 群都有矩阵表示吗?
2. 一个群有多少个表示,有限还是无限?
3. 群表示的一般性质是什么?
4. 如何表征和区分不同的群表示?

对于第一个问题,我们通常认为物理研究中涉及的群都有矩阵表示,这自然是十分合理的想法.对于第二个问题,很明显的,如果我们让群的每个元素都用单位矩阵来表示,那么这个表示自然是成立的,只不过太过于普通,这一般叫做群的平凡表示(trivial representation).如果每个群元素都和相应的矩阵一一对应,这种表示就叫做faithful表示,这实际上就是群同构的意思,也就是一个抽象的群和矩阵所组成的群有一一对应关系.

既然一个群有不同的表示,那么就可以把表示矩阵写成$D^(r)(g)$,这个意思是群元g在r这个表示下的矩阵是$D^{(r)}(g)$.对于$D^(r)(g)$,我们可以计算它的迹:

$$\chi^{(r)}(g) \equiv \mathrm{Tr} D^{(r)}(g) \tag{5.107}$$

这里$\chi^{(r)}(g)$称为群的特征标(character).字面上来说,特征标既依赖于群元g也依赖于表示r.但是,如果群元g_1, g_2之间满足$g_1 = f^{-1}g_2 f$,(这里f是群G中的某个元素)我们说g_1, g_2之间是等价的,所有等价的群元就组成了所谓的等价类(equivalence class).这样,我们发现,

$$\begin{aligned}\chi^{(r)}(g_1) &= \mathrm{Tr} D^{(r)}(g_1) = \mathrm{Tr} D^{(r)}(f^{-1}g_2 f) = \mathrm{Tr} D^{(r)}(f^{-1})D^{(r)}(g_2)D^{(r)}(f)\\ &= \mathrm{Tr} D^{(r)}(f)D^{(r)}(f^{-1})D^{(r)}(g_2) = \mathrm{Tr} D^{(r)}(f)(D^{(r)}(f))^{-1}D^{(r)}(g_2)\\ &= \mathrm{Tr} D^{(r)}(g_2) = \chi^{(r)}(g_2).\end{aligned} \tag{5.108}$$

这说明等价群元的特征标相同,因此我们发现同一个等价类实际上有相同的特征标,这可以写成$\chi^{(r)}(c) = \mathrm{Tr} D^{(r)}(g), g \in c$($c$表示等价类).这样我们可以说特征标是等价类的函数.

接下来,让我们考虑两个表示$D(g)$和$D'(g)$.由于$D(g), D'(g)$都是矩阵,那么线性代数课程告诉我们如果存在一个矩阵S使得$D'(g) = S^{-1}D(g)S$,那么$D(g)$和$D'(g)$是等价的.如果对于任意g这个结果都成立,那么我们会说这两个表示实际上是等价的.

当然,更简单判断两个表示是否等价的方式是考虑它们的特征标.假设$D'(g)=S^{-1}D(g)S$,直接计算有

$$\chi'(c)=\mathrm{Tr}D'(g)=\mathrm{Tr}S^{-1}D(g)S=\mathrm{Tr}D(g)=\chi(c). \tag{5.109}$$

这说明如果同一个等价类c的两个表示的特征标不同,那么相应的表示是不等价的.反之,如果对于所有的等价类,两个表示的特征标都相等,那么我们说这两个表示确实是等价的.因此,考查等价类在不同表示下的特征标是判断不同表示的重要依据.

可约与不可约表示

对于$SO(3)$群,我们知道它存在平凡表示$D^{(1)}(g)=1$,同时我们也用3×3正交矩阵表示它们,这也叫做$SO(3)$群的基本表示(fundamental representation),记为$D^{(3)}(g)$.利用这两个表示,如果我们把它们堆叠在一起就可以给$SO(3)$群构造出一个8维表示(这样构造表示的方式称为堆叠表示(stacking representation)):

$$D^{(8)}(g)=\begin{pmatrix} D^{(1)}(g) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D^{(1)}(g) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D^{(3)}(g) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D^{(3)}(g) \end{pmatrix}. \tag{5.110}$$

注意到这个表示矩阵写成了分块对角的形式,我们把这种表示称为可约表示.反之如果表示矩阵无论如何也无法写成分块对角形式,我们便把相应的表示叫做不可约表示.我们通常把这里可约的8维表示写成直和的形式,即$D^{(8)}(g)=D^{(1)}(g)\oplus D^{(1)}(g)\oplus D^{(3)}(g)\oplus D^{(3)}(g)$.因此这里的堆叠表示又叫做直和表示(direct sum representation).显然,从这个例子可以看到我们可以构造无穷多的可约表示,因此真正重要的应该是研究不可约表示.对于群表示理论而言,其中一个重要的目标是找到如何判断一个给定的表示是否可约的判据并且得到所有可能的不可约表示.

- 群表示理论中一个重要的结果是,对于有限群(群元素有限)的表示是幺正表示,也就是说我们总可以用幺正矩阵($D^{\dagger}(g)D(g)=I$)来表示群元.换句话说,通过检验表示矩阵是否幺正就可以判断是一些表示是否是可靠的表示.

除了直和表示,我们也可以把两个表示利用矩阵的直乘乘在一起,这就是直乘表示.具体而言,给定两个维度分别为d_r和d_s的表示,其表示矩阵是$D^{(r)}(g)$和$D^{(s)}(g)$,我们用矩阵的直乘定义直乘表示:

$$D(g)=D^{(r)}(g)\otimes D^{(s)}(g) \tag{5.111}$$

这样矩阵$D(g)$的维度是$d_rd_s\times d_rd_s$,写成矩阵元的话则有

$$D(g)_{a\alpha,b\beta}=D^{(r)}(g)_{ab}D^{(s)}(g)_{\alpha\beta}. \tag{5.112}$$

这里$a,b=1,2...d_r$,$\alpha,\beta=1,2...d_s$.这样直乘表示下的两个矩阵相乘就是

$$\begin{aligned} D(g)D(g') &= (D^{(r)}(g)\otimes D^{(s)}(g))(D^{(r)}(g')\otimes D^{(s)}(g')) \\ &= (D^{(r)}(g)D^{(r)}(g'))\otimes(D^{(s)}(g)D^{(s)}(g')) \\ &= D^{(r)}(gg')\otimes D^{(s)}(gg') = D(gg'). \end{aligned} \tag{5.113}$$

如果我们要计算$D(g)$的特征标,那么我们只需要在$D(g)$的矩阵元中令$\alpha=\beta,a=b$并对a,α求和即可:

$$\chi(c)=\mathrm{Tr}D(g)=\sum_{a,\alpha}D(g)_{a\alpha,a\alpha}=\left(\sum_a D^{(r)}(g)_{aa}\right)\left(\sum_\alpha D^{(s)}(g)_{\alpha\alpha}\right)=\chi^{(r)}(c)\chi^{(s)}(c) \tag{5.114}$$

这说明直乘表示下的特征标是构成这个表示的两个表示特征标的乘积.(如果算直和表示会发现结果是特征标的求和)

- Schur引理:若$D(g)$是有限群G的不可约表示,如果存在矩阵A使得$AD(g)=D(g)A$对所有g都成立,那么A只能是单位矩阵的倍数,也就是$A=\lambda I$.

换句话说,Schur引理告诉我们对于不可约表示而言不存在与所有表示矩阵都对易的非平凡矩阵.因此若一个表示可以找到与所有矩阵都对易的非平凡矩阵,那说明这个表示必定是可约的.

伟大正交定理

在群表示理论中,最核心的一个定理是伟大正交定理(great orthogonality theorem).这个定理是说,对于有限群G的d维不可约表示$D(g)$存在以下关系:

$$\sum_g D^\dagger(g)_{ij}D(g)_{kl}=\frac{N(G)}{d}\delta_{il}\delta_{kj} \tag{5.115}$$

这里$N(G)$是群G的群元个数.这个结果的重要推论是,

$$\sum_g (D^{(r)}(g))^\dagger_{ij}D^{(s)}(g)_{kl}=\frac{N(G)}{d_r}\delta_{rs}\delta_{il}\delta_{kj} \tag{5.116}$$

这说明有限群的不等价表示乘积在对所有群元求和后为零.在这个结果的基础上,如果我们令$i=j,k=l$并对i,k求和就得到

$$\sum_g\sum_i(D^{(r)}(g))^\dagger_{ii}\sum_k D^{(s)}(g)_{kk}=\sum_g(\chi^{(r)}(g))^*\chi^{(s)}(g)=\sum_c n_c(\chi^{(r)}(c))^*\chi^{(s)}(c)=\frac{N(G)}{d_r}\delta_{rs}\sum_i\sum_k\delta_{ik}=N(G)\delta_{rs}. \tag{5.117}$$

也就是$\sum_c n_c(\chi^{(r)}(c))^*\chi^{(s)}(c)=N(G)\delta_{rs}$.($n_c$是每一个等价类$c$包含的群元数目)

进一步,可以发现如下两个结果:

$$N(C)=N(R),\quad \sum_r d_r^2=N(G). \tag{5.118}$$

第一个结果说明有限群中等价类的数目($N(C)$)等于这个群不可约表示的数目($N(R)$).第二个结果则告诉我们所有不可约表示维度平方(d_r^2)的求和等于群元的数目.这样,我们说知道群的结构等价于知道群元分为等价类的情况,特别是等价类的数目$N(C)$.通过$N(C) = N(R)$我们就知道了不可约表示的数目$N(R)$,有了这个这个你就知道求和$\sum_r$中需要求几项.当$N(G)$比较小时,我们可以直接写出所有可能的结果.例如,对于所谓的A_4群,它有4个等价类,12个群元,这样有d_0, d_1, d_2, d_3,这分别代表四个不可约表示的维数,其中$d_0 = 1$表示平凡表示的维数.代入$\sum_r d_r^2 = N(G)$则有$1^2 + d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = 12$.这个关系的解是$d_1, d_2, d_3$中有两个等于1,另一个等于3.这说明$A_4$群有三个不等价的一维不可约表示以及一个3维不可约表示.

$SU(N)$和表示

我们首先回顾特殊正交群$SO(N)$.$SO(N)$群指的是N维空间中的转动可以用所有$N \times N$实矩阵O表示,这些矩阵满足正交性条件 $O^T O = I$并且行列式为$\det(O) = 1$.前一个条件确保N维矢量v的长度平方$v^T v$在$v \to v' = Ov$ 的变换下保持不变.通过把转动展开为$R = I + A$.然后一阶近似下可得$A^T - A = 0$,这样最一般性的A可以写成$N(N-1)/2$个反兑成矩阵的线性叠加.

经典物理中我们采用实数,但在量子力学出现后,复数形式变得重要.例如量子力学中的波函数就需要用复数表示.因此,我们希望推广$SO(N)$群来描述涉及复数的广义转动.设复的矢量$\psi = \psi^j, j = 1, ..., N$由$N$个复数表示.我们要求线性变换$\psi \to \psi' = U\psi$使得 $\psi^\dagger \psi = \sum_j (\psi^j)^* \psi^j$保持不变.对于任意两个复矢量$\zeta, \psi$,它们的乘积$\zeta^\dagger \psi$以及$\psi^\dagger \zeta$在$\zeta \to \zeta' = U\zeta, \psi \Rightarrow \psi' = U\psi$不变.这意味着$U^\dagger U = I$,也就是说$U$是幺正矩阵.

- 满足$U^\dagger U = I$的所有$N \times N$矩阵构成了$U(N)$群.

对于正交矩阵,通过$\det(O^T O) = (\det(O))^2 = 1$,我们知道$\det O = \pm 1$.选择$\det O = 1$排除了所有的反射变换.对于幺正矩阵,类似操作可得

$$\det(U^\dagger U) = \det(U^\dagger)\det(U) = (\det(U))^* \det(U) = |\det(U)|^2 \tag{5.119}$$

这样我们就有$|\det(U)|^2 = 1$,这说明$\det U = e^{i\alpha} (0 \le \alpha < 2\pi)$.这说明幺正矩阵的行列式是模为1的复数.此时如果施加条件$\det(U) = 1$就消去了所有行列式为复数的贡献.我们把满足$U^\dagger U = I, \det(U) = 1$的所有$N \times N$复矩阵构成的群称为$SU(N)$群,自然$SU(N) \subset U(N)$.

注意到$U(N)$群包含$e^{i\alpha} I$这样的元素,它是$U(N)$群的子群,而$SU(N)$群也是$U(N)$群的元素.接下来,让我们在单位元附近展开$U = I + iH$.把这个结果代入$U^\dagger U = I$可得$H^\dagger = H$,这说明H是厄密矩阵.类似于$SO(2), SO(3)$的情况,我们有$U = e^{iH}$.另一方面,我们可以计算$\det(U) = \det(e^{iH}) = e^{i\mathrm{Tr}H}$,由$\det(U) = 1$得到$\mathrm{Tr}H = 0$,这说明我们需要考虑$N \times N$厄密且无迹的矩阵.

在$N=2$时,我们可以设矩阵的一般形式是

$$H=\begin{pmatrix} u & w \\ z & v \end{pmatrix}. \tag{5.120}$$

这样由厄密性可知

$$H^\dagger=H\Rightarrow\begin{pmatrix} u^* & z^* \\ w^* & v^* \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} u & w \\ z & v \end{pmatrix}, \tag{5.121}$$

这样u,v为实数,z,w互为共轭.由$\mathrm{Tr}H=0$发现$v=-u$,这样我们可以把H写成

$$H=\begin{pmatrix} u & z^* \\ z & -u \end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} \theta_3 & \theta_1-i\theta_2 \\ \theta_1+i\theta_2 & -\theta_3 \end{pmatrix}=\frac{1}{2}(\theta_1\sigma_1+\theta_2\sigma_2+\theta_3\sigma_3)=\frac{1}{2}\sum_{a=1}^{3}\theta_a\sigma_a. \tag{5.122}$$

这里$\theta_1,\theta_2,\theta_3$是三个实参数,$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3$是熟悉的三个Pauli矩阵.

$$\sigma_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5.123}$$

因此$SU(2)$群的任意群元可以写成$U=e^{i\theta_a\sigma_a/2}$.此外Pauli矩阵满足如下关系:

$$\sigma_a\sigma_b=\delta_{ab}I+i\varepsilon_{abc}\sigma_c,\quad \mathrm{Tr}\sigma_a\sigma_b=2\delta_{ab},\quad \{\sigma_a,\sigma_b\}=2\delta_{ab},\quad [\sigma_a,\sigma_b]=2i\varepsilon_{abc}\sigma_c. \tag{5.124}$$

对于$N=3$的情况,我们发现H由8个Gell-Mann矩阵构成,即$H=\theta_a\lambda_a/2$,因此群元是$U=e^{i\theta_a\lambda_a/2}$.这里Gell-Mann矩阵定义为

$$\lambda_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad \lambda_2=\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad \lambda_3=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad \lambda_4=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_5=\begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad \lambda_6=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \lambda_7=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},\quad \lambda_8=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

这里σ_a,λ_a称为$SU(2),SU(3)$群的生成元,($\mathrm{Tr}\lambda_a\lambda_b=2\delta_{ab}$)分别有3和8个.对于一般的$SU(N)$群,其生成元个数是$N^2-1$, 因而其群元表示为$U=e^{\sum_{a=1}^{N^2-1}\theta_a\lambda_a/2}$.

$SU(2)$与$SO(3)$局域同构

现在,让我们来考查$SU(2)$群与$SO(3)$群的关系.根据前面的讨论,我们知道任意2×2厄密且迹为零的矩阵都可以表示成三个Pauli矩阵的线性叠加,即$X=\sum_{a=1}^{3}x_a\sigma_a=\vec{x}\cdot\vec{\sigma}$.这里$x_1,x_2,x_3$是三个实参数,但是它们也可以看作是矢量$\vec{x}=(x_1,x_2,x_3)$的三个分量.直接计算$X$行列式则有$\det(X)=-(x_1^2+x_2^2+x_3^3)=-\vec{x}^2$.这自然说明$X$的行列式是矢量$\vec{x}$长度平方.

接下来,让我们任取$SU(2)$的群元U,这样可以构造$X' = U^\dagger XU$.容易发现X'也是厄密和无迹的($(X')^\dagger = (U^\dagger XU)^\dagger = U^\dagger X^\dagger U = U^\dagger XU = X'$,$\mathrm{Tr}X' = \mathrm{Tr}U^\dagger XU = \mathrm{Tr}UU^\dagger X = \mathrm{Tr}X = 0$). 这样我们也可以把$X'$写成$X' = \vec{x}' \cdot \vec{\sigma}$,这里引入了矢量$x' = (x'_1, x'_2, x'_3)$.由此我们发现

$$X' = U^\dagger XU \Rightarrow \vec{x}' \cdot \vec{\sigma} = U^\dagger \vec{x} \cdot \vec{\sigma} U, \tag{5.125}$$

这说明x', x之间存在线性关系.注意到

$$(X')^2 = (\vec{x}' \cdot \vec{\sigma})(\vec{x}' \cdot \vec{\sigma}) = (\vec{x}')^2 I \tag{5.126}$$

$$(X')^2 = (U^\dagger \vec{x} \cdot \vec{\sigma} U)(U^\dagger \vec{x} \cdot \vec{\sigma} U) = U^\dagger \vec{x} \cdot \vec{\sigma} \vec{x} \cdot \vec{\sigma} U = (\vec{x})^2 U^\dagger U = (\vec{x})^2 I, \tag{5.127}$$

这说明$(\vec{x}')^2 = (\vec{x})^2$,也就是说在$U$变换下,三维矢量$\vec{x}$变为$\vec{x}'$但保证矢量平方不变,这说明$SU(2)$群中$U$的作用与$SO(3)$中的$R$相同,因此我们期待$SU(2)$与$SO(3)$同构.但是,注意到$-U$也同样使得矢量平方不变,这说明$SU(2)$与$SO(3)$之间并不是一一对应而是二对一,即$(U, -U)$对应一个$R$. 因此$SU(2)$与$SO(3)$并不同构.如果我们只关心单位元附近的转动,那么$-U$并不能用$U = I + A$表示,这说明此时$-U$是无关的,在这种情况下$U$与$R$可以一一对应,我们把这种在单位元附近两个群元一一对应的情况叫做局域同构.因此,我们称$SU(2)$与$SO(3)$局域同构.类似的,$SO(4)$局域同构于$SU(2 \otimes SU(2))$.

$U(N)$与$SU(N)$的关系

我们已经知道$U(N)$群包含两类元素,第一类是$e^{i\alpha}I$,这构成了$U(1)$群,第二类则是行列式为1的$N \times N$ 幺正矩阵所组成的$SU(N)$群.看起来,$U(N)$应该是$SU(N)$与$U(1)$的直乘群.但是,这个感觉是不正确的.

实际上,$SU(N)$与$U(1)$群的元素有重叠.注意到$U(1)$群中有元素$e^{i2\pi k/N}I (k = 1, ..., N)$,这些元素组成了$Z_N$群并且行列式为1,因此这些元素实际上存在于$SU(N)$中,如果我们要用$SU(2), U(1)$构造$U(N)$就必须排斥它们的影响,最简单的就是考虑商群$SU(N)/Z_N$.这个商群与$U(1)$群不再有重叠,因此我们可以得到直乘群表示$(SU(N)/Z_N) \otimes U(1) = U(N)$.

在这里,商群$SU(N)/Z_N$的元素是$e^{i2\pi k/N}U (k = 1, ..., N$,$U$为行列式为1的幺正矩阵).当$N = 2$时,其元素为$U, -U$,而我们知道这其实对应$SU(2)/Z_2 = SO(3)$.

辛群

让我们考虑如下$2n \times 2n$反对称矩阵,

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \tag{5.128}$$

这里I是$n \times n$的单位矩阵.如矩阵R满足$R^T JR = J$,那么所有这些R矩阵构成所谓的辛群(symplectic group), 记为$Sp(2n, R)$.注意到这里R并不代表转动,而是

表示实矩阵.很明显,R矩阵并不是正交矩阵,但是$\det R = 1$.由$\det R = 1$可知矩阵R共有$n(2n+1)$个独立的实参数.

进一步,如果复矩阵C满足$C^T JC = J$,那么C矩阵组成复辛群,记为$Sp(2n, C)$.与$Sp(2n, R)$类似,$Sp(2n, C)$会有$n(2n+1)$个独立的复参数,也就是有$2n(2n+1)$个实参数.

有一类辛群叫做$USp(2n)$,它指的是幺正矩阵U同时满足幺正条件和$U^T JU = J$.如果我们把U写成$U = I + iH$,(H为厄密矩阵)那么$U^T JU = J$给出

$$(I + iH^T)J(I + iH) = J \Rightarrow H^T J + JH = 0 \Rightarrow H^T = JHJ. \tag{5.129}$$

这里用到了$J^2 = -I$.这样,我们可以把矩阵H写成如下一般形式:

$$H = \begin{pmatrix} P & W^* \\ W & -P^T \end{pmatrix} \tag{5.130}$$

P都是$n \times n$的厄密矩阵,W是$n \times n$的对称复矩阵.前者有n^2个实参数,后者有$n^2 + n$个实参数,因此H共有$2n^2 + n$个实参数.

在量子场论中,如果我们考虑$2n$个分量组成的实费米子场,也就是Majorana费米场$\Psi = (\chi, \xi)^T$,(χ, ξ都是n分量的实场)那么可以构造

$$\Psi^T J \Psi = \begin{pmatrix} \chi^T & \xi^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \xi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\xi^T & \chi^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \xi \end{pmatrix} = \chi^T \xi - \xi^T \chi. \tag{5.131}$$

如果我们做变换$\Psi \to \Psi' = U\Psi$,($U \subset USp(2n)$)那么我们发现$\Psi'^T J \Psi' = \Psi^T J \Psi$.这实际上告诉我们可以选择适当的辛群矩阵让包含双线性Majorana费米场的体系(哈密顿量)对角化.

最后,让我们考虑辛群$USp(2n)$的Lie代数.首先,反对称的J矩阵可以用矩阵直乘写成$J = I \otimes i\sigma_2$.(I是$n \times n$的单位矩阵)接下来考虑如下四个$2n \times 2n$厄密无迹矩阵:

$$iA \otimes I_2 = \begin{pmatrix} iA & 0 \\ 0 & iA \end{pmatrix}, \quad S_1 \otimes \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & S_1 \\ S_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2 \otimes \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -iS_2 \\ iS_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_3 \otimes \sigma_3 = \begin{pmatrix} S_3 & 0 \\ 0 & -S_3 \end{pmatrix}. \tag{5.132}$$

这里A是$n \times n$的实反对称矩阵,S_1, S_2, S_3是$n \times n$的实对称矩阵.这些矩阵就是$USp(2n)$的Lie代数.可以验证,由这四个矩阵组合出的$H = iA \otimes I_2 + S_1 \otimes \sigma_1 + S_2 \otimes \sigma_2 + S_3 \otimes \sigma_3$满足$H^T = JHJ$.这样$U = e^{iU}$表明这些矩阵是$USp(2n)$的生成元.

Lie代数的分类

E.Cartan的研究表明,对于紧致Lie群,其相应的Lie代数可以分为四类以及所谓的例外代数(exceptional algebra),数学上把它们记为A, B, C, D, E, F, G.前四

个对应的是幺正,正交和辛群的Lie代数,具体而言是

$$A_n : SU(n+1)$$
$$B_n : SO(2n+1)$$
$$C_n : Sp(2n)$$
$$D_n : SO(2n)$$

E_6, E_7, E_8, F_4, G_2是例外代数.

Gauss积分相关的公式

在统计物理和场论研究中,Gauss类型的积分是是十分重要的.这里,我们列出一些重要的结果.首先,我们有基本关系

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2} = \sqrt{2\pi} \tag{5.133}$$

然后令$x \to \sqrt{a}x$可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \tag{5.134}$$

这是单变量Gauss积分的结果.接下来,我们有

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2+Jx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{J^2}{2a}} \tag{5.135}$$

若令$J \to iJ$可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2+iJx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{-\frac{J^2}{2a}} \tag{5.136}$$

而$a \to -ia$有

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{1}{2}iax^2+iJx} = \sqrt{\frac{2\pi i}{a}} e^{-i\frac{J^2}{2a}}. \tag{5.137}$$

下面,我们把单变量推广到N个实变量的情况,即$x \to \vec{x} = (x_1, x_2, x_3 ... x_N)$.而$a$则变成$N \times N$矩阵$A_{ij}$,$(A_{ij} = A_{ji})$这样有

$$\mathcal{Z}[J] = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_N e^{-\frac{1}{2}\sum_{ij} x_i A_{ij} x_j + J_j x_j} = \int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T + \vec{J}\cdot\vec{x}^T} = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det(A)}} e^{\frac{1}{2}\vec{J}\cdot A^{-1}\cdot\vec{J}}$$

这里$\vec{J}$代表所谓的源场项,其最早由J.Schwinger引入场论的研究当中,相应的方法称为源场方法.其优点是可以容易地证明某些恒等式或计算关联函数,例如

$$\langle x_i x_j \rangle_{J=0} = \frac{\int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T} x_i x_j}{\int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T}} = \frac{1}{\mathcal{Z}[0]} \int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T} x_i x_j \tag{5.138}$$

实际上可以让$\ln \mathcal{Z}[J]$对J_i和J_j分别求导,然后再令$\vec{J} = 0$得到.具体而言,我们有

$$\frac{\delta \ln \mathcal{Z}[J]}{\delta J_i} = \frac{1}{\mathcal{Z}[J]} \int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T + \vec{J}\cdot\vec{x}^T} x_i \tag{5.139}$$

$$\frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}[J]}{\delta J_i \delta J_j} = \frac{1}{\mathcal{Z}[J]} \int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T + \vec{J}\cdot\vec{x}^T} x_i x_j - \frac{1}{\mathcal{Z}^2[J]} \int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T + \vec{J}\cdot\vec{x}^T} x_i \int \mathcal{D}\vec{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T + \vec{J}\cdot\vec{x}^T} x_j$$

令上式$\vec{J}=0$并考虑到$\langle x_i\rangle_{J=0} = \langle x_i\rangle_{J=0} = 0$则有$\langle x_i x_j\rangle_{J=0} = \frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}[J]}{\delta J_i \delta J_j}|_{J=0}$.利用$\mathcal{Z}[J]$的具体形式可得

$$\ln \mathcal{Z}[J] = \ln \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det(A)}} + \frac{1}{2} J_m (A^{-1})_{mn} J_n$$

这样

$$\frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}[J]}{\delta J_i \delta J_j} = \frac{\delta}{\delta J_j} \frac{(A^{-1})_{in} J_n + J_m (A^{-1})_{mi}}{2} = \frac{(A^{-1})_{ij} + (A^{-1})_{ji}}{2} = (A^{-1})_{ij}$$

上面用到了A为对称矩阵的条件$A_{ij} = A_{ji}$.因此,我们发现$\langle x_i x_j\rangle_{J=0} = \frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}[J]}{\delta J_i \delta J_j}|_{J=0} = (A^{-1})_{ij}$. 同理可得更一般的结果,

$$\langle x_i x_j ... x_k x_l\rangle_{J=0} = \sum (A^{-1})_{ab} ... (A^{-1})_{cd} \tag{5.140}$$

这里$abcd$指的是各种指标$ijkl$的配对组合,比如

$$\langle x_i x_j x_k x_l\rangle_{J=0} = (A^{-1})_{ij}(A^{-1})_{kl} + (A^{-1})_{ik}(A^{-1})_{jl} + (A^{-1})_{il}(A^{-1})_{jk}. \tag{5.141}$$

最后,对于如下形式的配分函数

$$\mathcal{Z}[J] = \int \mathcal{D}\varphi e^{-\int d^d x (\frac{1}{2}\varphi(-\partial^2 + r)\varphi - J\varphi)} \tag{5.142}$$

我们可以把它理解成分立形式$\mathcal{Z}[J] = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_N e^{-\frac{1}{2}\sum_{ij} x_i A_{ij} x_j + J_j x_j}$在连续极限下的形式,这样对空间每个位置$x$处$\varphi(x)$的积分相当于对$x_j$的积分,因此有积掉$\varphi$得到的$\det A$是$\det(-\partial^2 + r)$而$A^{-1}$是$(-\partial^2 + r)^{-1}$,也就是有

$$AA^{-1} = 1 \to A_{ij}(A^{-1})_{jk} = \delta_{ik} \to (-\partial^2 + r)G(x-y) = \delta(x-y) \tag{5.143}$$

这样A^{-1}由Green函数$G(x-y)$代替.对上式两边做傅里叶变换有

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} (k^2 + r) e^{ik(x-y)} G(k) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{ik(x-y)} \tag{5.144}$$

这样可得$G(k) = \frac{1}{k^2+r}$,而$G(x-y) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{ik(x-y)}}{k^2+r}$.对比分立形式可得

$$\mathcal{Z}[J] = \sqrt{\det(-\partial^2 - m^2)^{-1}} e^{\frac{1}{2}\int d^d x \int d^d y J(x) G(x-y) J(y)} = \mathcal{Z}[0] e^{\frac{1}{2}\int d^d x \int d^d y J(x) G(x-y) J(y)}. \tag{5.145}$$

而关联函数

$$\langle \varphi(x)\varphi(y)\rangle_{J=0} = \frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}[J]}{\delta J(x) \delta J(y)}|_{J=0} = G(x-y) \tag{5.146}$$

在统计物理中,我们知道$\mathcal{Z}=e^{-F/T}$,对比$\mathcal{Z}[J]=\mathcal{Z}[0]e^{\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dyJ(x)G(x-y)J(y)}$可以看到在有源$J$ 的情况下,系统自由能的变化是

$$\Delta F=-\frac{T}{2}\int d^dx\int d^dyJ(x)G(x-y)J(y). \tag{5.147}$$

设源$J(x)=q_1\delta(x-x_1)+q_2\delta(x-x_2)$,这表示在空间位置$x_1,x_2$处有带'电荷'为$q_1,q_2$的粒子.这样两个粒子之间的能量就是

$$\Delta F_{12}=-Tq_1q_2G(x_1-x_2). \tag{5.148}$$

直接的计算表明$G>0$,因此当带同号电荷的粒子之间的能量小于零,物理上这说明同号电荷的粒子之间通过交换φ场(粒子)而互相吸引.(G是φ的Green函数)注意到这个结果与量子场论中的一般结果吻合.当然,如果同号电荷之间交换的是如同电磁场一般的自旋为1的矢量场粒子,粒子之间自然是排斥的,而参与交换的是自旋为2的引力子,结果又是吸引的.[18]

关联函数的细节

在这一部分,我们将计算自由场以及Ψ^4模型的关联函数,对于后者,采用的方法是微扰展开方法,也就是假定相互作用参数是小量,对其进行展开,然后逐阶计算相应的修正.一般而言,这种微扰计算需要明确使用Feynman图形技术,因而对初学者而言可能有些困难,在这里我们采用直接的展开和配对的方式,而不明确引进Feynman图,不过实际上我们会遇到Wick定理,相连集团定理以及Dyson方程等量子场论中图形微扰的核心观念,但是其形式极其简单,因而不需担心数学的复杂性,从头到尾只用Gauss积分而已.另一个难点是如何确定配对项的系数.在下面的例子中我们会详细地讨论每一个系数的来源,但是实际上并不用太关心系数的问题,因为实际用的并不多.

自由场/Gauss作用量中关联函数的计算

现在我们讨论序参量关联函数的细节内容. 首先我们定义关联函数$G(x)=\langle\Psi(x)\Psi(0)\rangle$,其中$\langle...\rangle$ 代表统计平均,即

$$\langle...\rangle\equiv\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\Psi(...)e^{-F} \tag{5.149}$$

对于一般的相互作用系统,相应的统计平均是难于求出的,这里我们具体讨论Gauss理论下的关联函数.

$$\mathcal{Z}=\int D\Psi e^{-\int d^dx[\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2]}=\int D\Psi e^{-\sum_{k>0}(sk^2+r)|\Psi(k)|^2}=\prod_{k>0}\frac{2\pi}{sk^2+r} \tag{5.150}$$

[18]更详细的讨论请参考A.Zee书《Quantum Field Theory in a Netshell》的I.5节.

那么

$$\begin{aligned}&\int D\Psi\Psi(k_1)\Psi(k_2)e^{-\sum_{k>0}(sk^2+r)|\Psi(k)|^2}\\&=\delta_{k_1+k_2=0}\int D\Psi|\Psi(k_1)|^2e^{-\sum_{k>0}(sk^2+r)|\Psi(k)|^2}\\&=\delta_{k_1+k_2=0}\prod_{k\neq k_1>0}\frac{2\pi}{sk^2+r}\int d\Psi^*(k_1)d\Psi(k_1)|\Psi(k_1)|^2e^{-(sk_1^2+r)|\Psi(k_1)|^2}\end{aligned}$$

回忆复数的Gauss积分

$$\int d\bar{z}dz(\bar{z}z)e^{-a\bar{z}z}=2\times2\pi\int_0^\infty rdrr^2e^{-ar^2}=2\pi\int_0^\infty dyye^{-ay}=2\pi\frac{d}{d(-a)}\int_0^\infty dye^{-ay}=\frac{2\pi}{a^2}\tag{5.151}$$

可以发现

$$\int d\Psi^*(k_1)d\Psi(k_1)|\Psi(k_1)|^2e^{-(\frac{s}{2}k_1^2+\frac{r}{2})|\Psi(k_1)|^2}=\frac{2\pi}{(sk_1^2+r)^2}\tag{5.152}$$

这样我们得到

$$\begin{aligned}\langle\Psi(k_1)\Psi(k_2)\rangle_0&=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\Psi\Psi(k_1)\Psi(k_2)e^{-\sum_{k>0}(sk^2+r)|\Psi(k)|^2}\\&=\delta_{k_1+k_2=0}\frac{2\pi}{(sk_1^2+r)^2}\frac{\prod_{k\neq k_1>0}\frac{2\pi}{sk^2+r}}{\prod_{k>0}\frac{2\pi}{sk^2+r}}=\delta_{k_1+k_2=0}\frac{\frac{2\pi}{(sk_1^2+r)^2}}{\frac{2\pi}{sk_1^2+r}}=\delta_{k_1+k_2=0}\frac{1}{sk_1^2+r}\end{aligned}$$

即有如下重要的结果

$$\boxed{\langle\Psi(k)\Psi(k')\rangle_0=\frac{1}{sk^2+r}\delta_{k+k'=0}}\tag{5.153}$$

最后，实空间的关联函数

$$G(x)=\langle\Psi(x)\Psi(0)\rangle=\frac{1}{V}\sum_{k,k'}e^{ikx}\langle\Psi(k)\Psi(k')\rangle=\frac{1}{V}\sum_k e^{ikx}\frac{1}{sk^2+r}=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{e^{ikx}}{sk^2+r}\propto\frac{\Pi(x/\sqrt{s/r})}{x^{d-2}}$$

具体而言，我们有

$$\begin{aligned}G^{d=1}(x)&=\int\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ikx}}{sk^2+r}=\int_{-\infty}^\infty\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ikx}/s}{k^2+r/s}=\int_{-\infty}^\infty\frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ikx}/s}{(k+i\sqrt{r/s})(k-i\sqrt{r/s})}\\&=\oint\frac{dz}{2\pi}\frac{e^{izx}/s}{(z+i\sqrt{r/s})(z-i\sqrt{r/s})}=i\oint\frac{dz}{2\pi i}\frac{e^{izx}/(sz+is\sqrt{r/s})}{(z-i\sqrt{r/s})}\\&=i\frac{e^{iz|x|}}{sz+is\sqrt{r/s}}|_{z=i\sqrt{r/s}}=\frac{e^{-\sqrt{r/s}|x|}}{2s\sqrt{r/s}}=\frac{e^{-(r/s)^{1/2}|x|}}{2s(r/s)^{1/2}}\end{aligned}\tag{5.154}$$

这里的计算用到了将实轴积分解析延拓至复数积分,然后转化为可以用柯西积分公式计算的形式.[19]$|x|$的出现实际上是为了保证无穷远处非奇异部分函数值为零.

[19]对解析函数$f(z)$,$\oint\frac{dz}{2\pi i}\frac{f(z)}{z-a}=f(a)$当回路逆时针包围极点$a$时成立,否则积分为零.

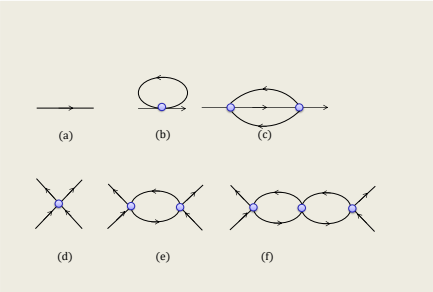


Figure 5.10: Ψ^4理论中的低阶图形,(a)表示无相互作用时的关联函数$G^{(0)}$;(b)是对$G^{(0)}$的最低阶修正;(c)是对$G^{(0)}$的二阶修正;(e)代表裸的顶角函数$\Gamma^{(1)}$;(e)是对$\Gamma^{(1)}$的最低阶修正,即$\Gamma^{(2)}$;(f)是对$\Gamma^{(0)}$的二阶修正;

$$G^{d=2}(x)=\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{e^{ikx}}{sk^2+r}=\frac{1}{2\pi s}K_0(\sqrt{r/s}|x|)=\begin{cases}-\frac{1}{2\pi s}\ln\frac{\sqrt{r/s}|x|}{2}, & |x|<<1/\sqrt{r/s}\\ +\frac{1}{2s}(2\pi\sqrt{r/s}|x|)^{-1/2}e^{-\sqrt{r/s}|x|}, & |x|>>1/\sqrt{r/s}\end{cases}$$

$$\begin{aligned}G^{d=3}(x) &= \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{e^{ikx}}{sk^2+r}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-1}^{1}d\cos\theta\int_0^{\infty}k^2dk\frac{e^{ik|x|\cos\theta}}{sk^2+r}\\ &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-1}^{1}d\cos\theta\int_0^{\infty}k^2dk\frac{e^{ik|x|\cos\theta}}{sk^2+r}=\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}k^2dk\frac{1}{ik|x|}\frac{e^{ik|x|}-e^{-ik|x|}}{sk^2+r}\\ &= \frac{1}{(2\pi)^2s|x|}\int_{-\infty}^{\infty}dk\frac{k\sin(k|x|)}{k^2+r/s}=\frac{\pi}{(2\pi)^2s|x|}\oint\frac{dz}{2\pi i}\frac{z(e^{iz|x|}-e^{iz|x|})}{(z+i\sqrt{r/s})(z-i\sqrt{r/s})}\\ &= \frac{\pi}{(2\pi)^2s|x|}e^{-\sqrt{r/s}|x|}=\frac{\pi}{4\pi s|x|}e^{-\sqrt{r/s}|x|}\end{aligned}\tag{5.155}$$

Ψ^4理论中关联函数的微扰计算

在这一节,我们将要利用微扰理论计算Ψ^4模型的关联函数$\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle$,其定义为

$$G(k)=\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle\equiv\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\Psi\Psi(k)\Psi(-k)e^{-F},\ F=\int d^dx\left[\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2+\frac{u}{4}\Psi^4\right]\tag{5.156}$$

为了便于计算,我们把自由能/作用量变换至动量空间,即有

$$\begin{aligned}&F=F_0+F_{int}\\ &F_0=\sum_k\frac{1}{2}(sk^2+r)\Psi(k)\Phi(-k)\\ &F_{int}=\frac{u}{4}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\Psi(k_1)\Psi(k_2)\Psi(k_3)\Psi(k_4)\delta_{k_1+k_2+k_3+k_4=0}\end{aligned}\tag{5.157}$$

这里已经假定空间体积$V=1$以简化符号表示.然后代入关联函数的定义可得

$$\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\Psi\Psi(k)\Psi(-k)e^{-F_0}e^{-F_{int}}=\frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}}\langle\Psi(k)\Psi(-k)e^{-F_{int}}\rangle_0 \tag{5.158}$$

这里$\mathcal{Z}_0$是Gauss部分的配分函数,而$\langle...\rangle_0$表示对Gauss自由能即相互作用$u=0$的部分求统计平均

$$\langle...\rangle_0=\frac{1}{\mathcal{Z}_0}\int D\Psi...e^{-F_0}=\frac{\int D\Psi...e^{-F_0}}{\int D\Psi e^{-F_0}} \tag{5.159}$$

通过上一小节的计算我们已经知道

$$G^{(0)}(k)=G^{(0)}(-k)=\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle_0=\frac{1}{sk^2+r} \tag{5.160}$$

如果相互作用u 是小量,那么我们可以展开e指数然后利用$\langle\Psi(k)\Psi(k')\rangle_0=\frac{1}{sk^2+r}\delta_{k+k'=0}$ 进行计算.

现在,展开$e^{-F_{int}}$可得

$$\begin{aligned}\langle\Psi(k)\Psi(-k)e^{-F_{int}}\rangle_0 &= \langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle_0-\frac{u}{4}\sum_{1,2,3,4}\langle\Psi(k)\Psi(-k)\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0\delta_{1+2+3+4=0}\\ &+ \left(-\frac{u}{4}\right)^2\sum_{1,2,3,4}\sum_{1',2',3',4'}\langle\Psi(k)\Psi(-k)\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\Psi(1')\Psi(2')\Psi(3')\Psi(4')\rangle_0\\ &\times \delta_{1+2+3+4=0}\delta_{1'+2'+3'+4'=0}+...\end{aligned} \tag{5.161}$$

这里为了简化表达已经用$1,2,3,4$等数字表示相应的动量k_1,k_2,k_3,k_4.这个展开是关于相互作用u 的级数展开,原则上可以展开到无穷多阶,但是对于解析计算而言能够处理的只是最低的几阶,要包含高阶求和需要用到所谓的图形蒙特卡洛技术.

作为一个非平凡的例子,让我们计算一阶修正的效应,即

$$\Delta G^{(1)}=-\frac{u}{4}\sum_{1,2,3,4}\langle\Psi(k)\Psi(-k)\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0\delta_{1+2+3+4=0} \tag{5.162}$$

这一项如何计算呢?注意到对于Gauss积分而言,只有配对出现的量其积分值才会非零,(这实际上就是量子场论中所谓的Wick定理)最简单的例子就是$\langle\Psi(k)\Psi(k')\rangle_0=\frac{1}{sk^2+r}\delta_{k+k'=0}$, 在当前的问题中,我们有六个场可以配对,则可以看到配对方式总共有$3+12=15$种:

$$3:\quad \langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle_0\left[\langle\Psi(1)\Psi(2)\rangle_0\langle\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0+\langle\Psi(1)\Psi(3)\rangle_0\langle\Psi(2)\Psi(4)\rangle_0+\langle\Psi(1)\Psi(4)\rangle_0\langle\Psi(2)\Psi(3)\rangle_0\right] \tag{5.163}$$

注意到这三种方式其实在数值上是完全等价的(因为每一个场的地位是完全相同的,最后对动量求和后的值理应相同),这样我们可以简记为

$$3\times\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle_0\langle\Psi(1)\Psi(2)\rangle_0\langle\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0 \tag{5.164}$$

注意到在这种配对方式中目标场$\Psi(k),\Psi(-k)$是直接配在一起的.

同理,我们有剩下的12种配对,其数值完全一般,故直接记为

$$12\times\langle\Psi(k)\Psi(1)\rangle_0\langle\Psi(-k)\Psi(2)\rangle_0\langle\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0 \tag{5.165}$$

12的来源是我们让$k,-k$场分别与剩下的4个场配对,当k配对时有4种等价选择,即分别与k_1,k_2,k_3,k_4配对,配完以后,$-k$只能与剩下的三个场配对,配完后剩下的两个场只能配对,故而等价的配对方式有$4\times3=12$种.

这样我们得到

$$\begin{aligned}\Delta G^{(1)} &= -\frac{u}{4}\sum_{1,2,3,4}[3\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle_0\langle\Psi(1)\Psi(2)\rangle_0\langle\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0\\ &\quad +12\langle\Psi(k)\Psi(1)\rangle_0\langle\Psi(-k)\Psi(2)\rangle_0\langle\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0]\delta_{1+2+3+4=0}\\ &= -\frac{u}{4}\left[3G^{(0)}(k)\sum_1 G^{(0)}(1)\sum_3 G^{(0)}(3)+12G^{(0)}(k)G^{(0)}(k)\sum_3 G^{(0)}(3)\right]\end{aligned}$$

然而我们注意到$\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle$的定义中还包含因子$\frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}}$, 与关联函数的微扰展开计算类似,我们得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}_0} &= 1-\frac{u}{4}\sum_{1,2,3,4}3\langle\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0\delta_{1+2+3+4=0}+...\\ &= 1-\frac{u}{4}3\sum_{1,2,3,4}\langle\Psi(1)\Psi(2)\rangle_0\langle\Psi(3)\Psi(4)\rangle_0\delta_{1+2+3+4=0}+...\\ &= 1-\frac{u}{4}3\sum_1 G^{(0)}(1)\sum_3 G^{(0)}(3)+...\end{aligned} \tag{5.166}$$

那么有

$$\frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}}=\frac{1}{1-\frac{u}{4}3\sum_1 G^{(0)}(1)\sum_3 G^{(0)}(3)+...}=1+\frac{u}{4}3\sum_1 G^{(0)}(1)\sum_3 G^{(0)}(3)+ \tag{5.167}$$

结合先前的计算,我们发现

$$\begin{aligned}G(k) &= \frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}}\langle\Psi(k)\Psi(-k)e^{-F_{int}}\rangle_0=\left(1+\frac{u}{4}3\sum_1 G^{(0)}(1)\sum_3 G^{(0)}(3)+...\right)\left(G^{(0)}(k)+\Delta G^{(1)}+...\right)\\ &= G^{(0)}(k)+\frac{u}{4}3\sum_1 G^{(0)}(1)\sum_3 G^{(0)}(3)\\ &\quad -\frac{u}{4}\left[3G^{(0)}(k)\sum_1 G^{(0)}(1)\sum_3 G^{(0)}(3)+12G^{(0)}(k)G^{(0)}(k)\sum_3 G^{(0)}(3)\right]+...\end{aligned}$$

注意到来在于配分函数的第二项与来自关联函数展开计算的第三项互相抵消,我们得到

$$G(k)=G^{(0)}(k)-\frac{u}{4}12G^{(0)}(k)G^{(0)}(k)\sum_3 G^{(0)}(3)+...$$

- 这里的抵消实际上就是场论中的相连集团定理的体现,也就是微扰展开计算关联函数时,唯一有贡献的是联通图,也就是目标场本身并不配对,而是和其他来自由相互作用展开的场配对.

- 在当前问题中,一阶展开的12种配对就是所谓的连通图对应的贡献,而被抵消的来自于3种目标场自身直接配对的项.当我们计算高阶微扰时,利用相连集团定理可以简化计算,也就是我们只考虑连通图的贡献就可以了.

- 如果我们需要计算系统的热力学量,那么就需要知道配分函数,而配分函数的展开对应场论中的真空图,此时相连集团定理并不适用,因为此时都是非联通图.

如果我们定义自能函数

$$\Sigma(k) = -\frac{u}{4}12\sum_{3} G^{(0)}(3) + ... \tag{5.168}$$

那么关联函数可以写为一个无穷求和形式

$$G(k) = G^{(0)}(k) + G^{(0)}(k)G^{(0)}(k)\Sigma(k) + ... \tag{5.169}$$

加入后面的项形成几何级数,那么我们可以求和得到完整的形式,即有

$$G(k) = \frac{G^{(0)}(k)}{1 - G^{(0)}(k)\Sigma(k)} = \frac{1}{(G^{(0)}(k))^{-1} - \Sigma(k)} \tag{5.170}$$

实际上,这个形式是精确的,在量子场论中称为Dyson方程,实际上是把关联函数表示为自能函数的紧凑形式,在形式上是精确的,但是我们对于自能的计算总是不精确的,故而其实际价值是提供一种重组微扰理论结构的方式.

在当前的模型中,如果我们忽略所有$O(u^2)$阶的自能修正,那么关联函数的结果是

$$G(k) \simeq \frac{1}{sk^2 + r + \frac{u}{4}12\sum_{k'} \frac{1}{sk'^2+r}} \tag{5.171}$$

显然,在这一级的近似下自能部分是动量无关的,这说明我们可以把自能看做是对相变调节参数r的修正,即可以定义新的$\tilde{r}$,

$$\boxed{\tilde{r} = r + \frac{u}{4}12\sum_{k'} \frac{1}{sk'^2 + r} = r + \frac{u}{4}12\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{sk'^2 + r}} \tag{5.172}$$

注意到在临界点附近,与自由能的涨落修正讨论类似,我们发现$\frac{1}{sk'^2}$的积分在$d \leq 2$是发散的,这体现了涨落抑制低维系统的有序产生,另一方面,$d > 2$时微扰修正涉及能量截断,这说明临界点附近的涨落很强,直接的微扰实际上会倾向于发散,也就是说我们需要超越微扰计算的方式来理解和处理相变问题.

- 注意到上述结果,尤其是自能修正可以通过Feynman图更直接的获得,例如图5.10(b) 和(c) 分别代表一阶和二阶自能,(a)代表无相互作用的关联函数$G^{(0)}$,(d)代表裸相互作用顶角,其取值为$-u/4$(负号来自自由能指数的一阶展开).

考虑到在图5.10(b)有四个中间场,它们中任意选两个配对成为内部关联函数的方式有$C_4^2 = 6$ 种,然后剩下两个场与外面的两个场配对的方式有2种,因此有$\Sigma(k) = -\frac{u}{4} \times 6 \times 2 \sum_k G^{(0)}(k)$,这个结果与之前得到完全相同.进一步,图5.10(c)的贡献是

$$\Sigma^{(2)}(k) = \left(-\frac{u}{4}\right)^2 (C_4^1 C_4^1) \times 6 \times 2 \sum_{q,k'} G^{(0)}(k') G^{(0)}(k'+q) G^{(0)}(k+q)$$
$$= \frac{u^2}{16} 192 \sum_{q,k'} G^{(0)}(k') G^{(0)}(k'+q) G^{(0)}(k+q) \tag{5.173}$$

这里两个C_4^1来自从不同时空的内部点各自选一个场与外部的场配对,因子6 是每个内部点剩下的三个场分别与另一个点的场配对,最后的因子2是因为外部场有等价的两个.

更多的微扰计算

接下来,我们考虑二阶修正

$$\Delta G^{(2)} = \left(-\frac{u}{4}\right)^2 \sum_{1,2,3,4} \sum_{1',2',3',4'} \langle \Psi(k)\Psi(-k)\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\Psi(1')\Psi(2')\Psi(3')\Psi(4')\rangle_0$$
$$\times \delta_{1+2+3+4=0} \delta_{1'+2'+3'+4'=0} \tag{5.174}$$

首先是非连通图部分,此时目标场$\Psi(k), \Psi(-k)$已经配对,剩下的部分是

$$\langle \Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\Psi(1')\Psi(2')\Psi(3')\Psi(4')\rangle_0 \tag{5.175}$$

仔细观察可以发现,这八个场配对的基本方式有两种,第一种是$1,2,3,4$和$1',2',3',4'$内部互相配对,之间不会有配对,这样得到的等价的项共有$3 \times 3 = 9$ 种,($1,2,3,4$内部配对有3种方式,$1',2',3',4'$也有三种)记为

$$(3 \times \langle \Psi(1)\Psi(2)\rangle_0 \langle \Psi(3)\Psi(4)\rangle_0)\,(3 \times \langle \Psi(1')\Psi(2')\rangle_0 \langle \Psi(3')\Psi(4')\rangle_0)$$
$$= 9 G^{(0)}(1) G^{(0)}(3) G^{(0)}(1') G^{(0)}(3') \delta_{1+2=0} \delta_{3+4=0} \delta_{1'+2'=0} \delta_{3'+4'=0}$$

第二种基本方式是$1,2,3,4$和$1',2',3',4'$彼此之间有配对,显然配对分为完全配对和不完全配对.完全配对指的是每一个$1,2,3,4$中的场都与$1',2',3',4'$中相应的场配对,其数目是$4 \times 3 \times 2 = 4! = 24$(第一个配对有4种可能,第二个配对时有三种可能选择,到第三个配对时只有两种可能,故有24种配对可能.)记为

$$24 \times \langle \Psi(1)\Psi(1')\rangle_0 \langle \Psi(2)\Psi(2')\rangle_0 \langle \Psi(3)\Psi(3')\rangle_0 \langle \Psi(4)\Psi(4')\rangle_0$$
$$= 24 G^{(0)}(1) G^{(0)}(2) G^{(0)}(3) G^{(0)}(4) \delta_{1+1'=0} \delta_{2+2'=0} \delta_{3+3'=0} \delta_{4+4'=0}$$

不完全配对实际上只有$1,2,3,4$中两个配对,然后剩下两个和$1',2',3',4'$分别配对,注意到$1,2,3,4$ 中挑出两个来配对的可能选择有6种,对于每一种选定的配对方式,剩下的两个场会与$1',2',3',4'$配对,其配对数在计算一阶展开是已经知道,就是$4\times 3=12$,所以不完全配对的等价配对数目是$6\times 12=72$,记为

$$\begin{aligned}&(6\times\langle\Psi(1)\Psi(2)\rangle_0)(12\times\langle\Psi(3)\Psi(1')\rangle_0\langle\Psi(4)\Psi(2')\rangle_0\langle\Psi(3')\Psi(4')\rangle_0)\\&=72G^{(0)}(1)G^{(0)}(3)G^{(0)}(4)G^{(0)}(3')\delta_{1+2=0}\delta_{3+1'=0}\delta_{4+2'=0}\delta_{3'+4'=0}\end{aligned}$$

这105项代表了真空图在二阶展开时的所有可能情况,对于关联函数计算而言则是贡献非连通图,故而可以舍去不管.对于连通图部分我们可以用类似的方式去得到所有的贡献项,不过过程已经比较复杂,具体的结果可以参考Altland-Simons书的202-204页的讨论,特别是图5.2.[3](一个简单的方法是我们可以剪断真空图的任意条连线来直接得到连通图的贡献.)

一般而言,我们也关心多点关联函数,例如四点关联函数的信息,如果四点关联函数恰好是系统相互作用项,那么也称其为相互作用顶角函数,简称顶角函数.对于当前的问题,顶角函数是$\Gamma(k_1,k_2,k_3,k_4)$

$$\begin{aligned}\Gamma(k_1,k_2,k_3,k_4)&=\langle\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\rangle-\langle\Psi(1)\Psi(2)\rangle\langle\Psi(3)\Psi(4)\rangle-\langle\Psi(1)\Psi(3)\rangle\langle\Psi(2)\Psi(4)\rangle\\&\quad-\langle\Psi(1)\Psi(4)\rangle\langle\Psi(2)\Psi(4)\rangle\end{aligned}\tag{5.176}$$

在这里的定义中我们为了突出四场相互作用而事先消掉非联通的关联函数的部分.那么仿照先前的讨论,我们展开相互作用可得顶角函数的一阶项和二阶项:

$$\Gamma^{(1)}(k_1,k_2,k_3,k_4)=-\frac{u}{4}\sum_{1',2',3',4'}\langle\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\Psi(1')\Psi(2')\Psi(3')\Psi(4')\rangle_0\delta_{1'+2'+3'+4'=0}\tag{5.177}$$

$$\begin{aligned}\Gamma^{(2)}(k_1,k_2,k_3,k_4)&=\left(-\frac{u}{4}\right)^2\sum_{1',2',3',4'}\sum_{1'',2'',3'',4''}\langle\Psi(1)\Psi(2)\Psi(3)\Psi(4)\Psi(1')\Psi(2')\Psi(3')\Psi(4')\\&\quad\Psi(1'')\Psi(2'')\Psi(3'')\Psi(4'')\rangle_0\delta_{1'+2'+3'+4'=0}\delta_{1''+2''+3''+4''=0}\end{aligned}$$

对于$\Gamma^{(1)}$而言,联通图对应的是每一个目标场与对应的非目标场配对,那么可能的总数是$4\times 3\times 2=4!=24$,记为

$$\Gamma^{(1)}(k_1,k_2,k_3,k_4)=-\frac{u}{4}24G^{(0)}(1)G^{(0)}(2)G^{(0)}(3)G^{(0)}(4)\tag{5.178}$$

对于二阶项$\Gamma^{(2)}$,连通图指的是从$1,2,3,4$中各取两个场分别与$1',2',3',4'$和$1',2',3',4'$配对,这样从$1,2,3,4$中各取两个场的取法有$C_4^2=6$ 种,对于确定的取法,那么分别与$1',2',3',4'$或$1',2',3',4'$配对的方式都是$4\times 3=12$种,则总的可能配对方式有$6\times 12\times 12=864$ 种,记为

$$\begin{aligned}\Gamma^{(2)}(k_1,k_2,k_3,k_4)&=\left(-\frac{u}{4}\right)^2 864G^{(0)}(1)G^{(0)}(2)G^{(0)}(3)G^{(0)}(4)\sum_{3',4'}G^{(0)}(3')G^{(0)}(4')\\&\times\delta_{-1-2+3'+4'=0}\delta_{-3-4-3'-4'=0}\end{aligned}\tag{5.179}$$

那么有

$$\Gamma(k_1,k_2,k_3,k_4) = -\frac{u}{4}24G^{(0)}(1)G^{(0)}(2)G^{(0)}(3)G^{(0)}(4)$$
$$\times\left(1-\frac{u}{4}36\sum_{3',4'}G^{(0)}(3')G^{(0)}(4')\delta_{-1-2+3'+4'=0}\delta_{-3-4-3'-4'=0}+...\right)$$

与相变调节参数r类似,我们也可以定义一个新的相互作用参数$\tilde{u}$,

$$\boxed{\tilde{u}=u-\frac{u^2}{4}36\sum_{k'}\frac{1}{(sk'^2+r)^2}=u-\frac{u^2}{4}36\int\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\frac{1}{(sk'^2+r)^2}} \tag{5.180}$$

这样我们通过微扰理论的计算得到了新的耦合常数$\tilde{r}$和$\tilde{u}$,在临界点附近涨落贡献大增导致这些量的发散,因而我们认为直接的微扰计算并不能适用于相变点附近.但是我们将会发现耦合常数与微扰修正量的函数关系在Wilson微扰重整化理论计算中是核心的量,在那里我们只需要进行重标,就可以得到重整化群方程,有了重整化方程,临界指数就可以简单地获得.

我们也可以用图形方法快速得到顶角部分的数值因子.例如根据图5.10(d),一阶顶角的系数是$-\frac{u}{4}\times 4!=-\frac{u}{4}24$.因子24 来自于四个外场例如$a,b,c,d$需要与4个内场配对,配对的总数相当于固定$a,b,c,d$的次序然后让所有可能的内场进行排列,即4!.进一步,图5.10(e)给出的二阶顶角的系数是$(-\frac{u}{4})^2\times(C_4^2C_4^2)\times 24$.两个$C_4^2$来自在不同时空点的内场各选两个与另一个点处的场配对,24与一阶顶角情况一样,就是剩下四个内场所做的排列数.

从Ising模型到Ψ^4模型

作为统计物理最为重要的模型,即所谓的Ising模型,是定义在晶格格点上的一些列经典自旋相互耦合而形成的模型,其经典能量或者说哈密顿量一般有如下形式:

$$H=-\sum_{ij}J_{ij}\sigma_i\sigma_j \tag{5.181}$$

这里经典自旋$\sigma_j=\pm 1$,只取两个值并定义在格点j上..J_{ij}是i,j格点间的耦合,最通常是考虑最近邻自旋间的铁磁耦合,那么模型简化为

$$H=-J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j,\quad J>0 \tag{5.182}$$

这样,体系的所有热力学性质都可以由配分函数定出

$$\mathcal{Z}=\sum_{\{\sigma\}}e^{-\beta H}=\sum_{\{\sigma\}}e^{\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j},\quad \beta=1/T \tag{5.183}$$

配分函数包含对所有可能自旋位形贡献的求和,一旦求和可以求出,那么配分函数就被确定,并且通过自由能$F=-T\ln\mathcal{Z}$可求得想要的物理量.

通常,为了解析研究的方便,我们会把对分离变量的求和转化为对连续变量的积分,在这里则是把σ_i看做是取值在$(-\infty,\infty)$的实变量,并且计入约束条件$\sigma_i^2=1$.那么我们得到

$$\mathcal{Z}=\prod_i\int_{-\infty}^{\infty}d\sigma_i\delta(\sigma_i^2-1)e^{\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j} \tag{5.184}$$

进一步,如果我们关心的物理的特征尺度远大于晶格间距的尺度,那么我们会采取连续近似,数学上是相当于把差分换成微分,例如

$$\sigma_j\simeq\sigma_i+a\nabla\sigma_i+\frac{1}{2}a^2\nabla^2\sigma_i+\mathcal{O}(a^3)\to\sigma(x)+a\nabla\sigma(x)+\frac{1}{2}a^2\nabla^2\sigma(x) \tag{5.185}$$

我们这里假定体系定义在一个d维的超立方体上,晶格间距是a.同时有$\sigma_i\to\sigma(x),\sum_i\to\frac{1}{a^d}\int d^dx$, 这样哈密顿量变为

$$H=\frac{-J}{a^d}\int d^dx\left[\sigma^2(x)+a\sigma(x)\nabla\sigma(x)+\frac{1}{2}a^2\sigma(x)\nabla^2\sigma(x)\right] \tag{5.186}$$

注意到$\sigma^2(x)=1$,$\sigma(x)\nabla\sigma(x)=\frac{1}{2}\nabla\sigma^2(x)=\frac{1}{2}\nabla1=0$, 我们得到

$$H=\int d^dx\left[-\frac{Ja^2}{2a^d}\sigma(x)\nabla^2\sigma(x)\right] \tag{5.187}$$

最后利用分步积分并假定无穷远处为零自旋变化为零可得

$$H=\int d^dx\frac{Ja^2}{2a^d}(\nabla\sigma(x))^2 \tag{5.188}$$

令$Ja^{2-d}=s$，$\sigma(x)=\Psi$,我们发现

$$H=\int d^dx\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2 \tag{5.189}$$

而系统的配分函数是

$$\mathcal{Z}=\prod_x\int_{-\infty}^{\infty}d\Psi(x)\delta(\Psi^2(x)-1)e^{-\beta H}=\int D\Psi\delta(\Psi^2-1)e^{-\beta\int d^dx\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2} \tag{5.190}$$

我们一般称δ函数型的约束为所谓的硬约束,为了理论处理的方便,也可以采用所谓的软约束,就是扔掉约束项,但是在哈密顿量中添加关于场Ψ(我们已经把格点上的自旋转化为在空间连续分布的场)合适的二次和四次项,这样我们得到最终的形式

$$\mathcal{Z}=\int D\Psi e^{-\beta\int d^dx[\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2+\frac{u}{4}\Psi^4]} \tag{5.191}$$

这就是所谓的Ψ^4模型,如果我们仅仅关心确定的场分布,那么就得到非均匀序参量情况下的Ginzburg-Landau 模型.而如果进一步忽略空间变化,那么我们得到的就是Landau平均场模型.

我们也可以用另一种方法进行推导.我们的出发点是配分函数

$$\mathcal{Z}=\sum_{\{\sigma\}}e^{-\beta H}=\sum_{\{\sigma\}}e^{\beta\sum_{i,j}J_{ij}\sigma_i\sigma_j},\quad \beta=1/T \tag{5.192}$$

在每一个格点都引入新的连续自由度y_i,根据高斯积分有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy_i}{\sqrt{\pi/b}}e^{-by_i^2}=1,\qquad b>0 \tag{5.193}$$

这样我们把配分函数乘以这些积分可得

$$\mathcal{Z}=\prod_i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy_i}{\sqrt{\pi/b}}\sum_{\{\sigma\}}e^{\beta\sum_{i,j}J_{ij}\sigma_i\sigma_j-b\sum_i y_i^2}. \tag{5.194}$$

既然y_i取值在正负无穷,这样对其做替换不改变积分值,因此令$y_i\to y_i+\sum_j c_{ij}\sigma_j$,则有

$$\beta\sum_{i,j}J_{ij}\sigma_i\sigma_j-b\sum_i y_i^2\to\beta\sum_{i,j}J_{ij}\sigma_i\sigma_j-b\sum_i y_i^2-b\sum_{i,j,k}c_{ki}\sigma_i c_{kj}\sigma_j-2b\sum_{i,j}c_{ij}\sigma_j y_i \tag{5.195}$$

若令$b\sum_k c_{ki}c_{kj}=\beta J_{ij}$,那么$\sigma$的平方项就会被消去,这样有

$$\mathcal{Z}=\prod_i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy_i}{\sqrt{\pi/b}}\sum_{\{\sigma\}}e^{-b\sum_i y_i^2-2b\sum_{i,j}c_{ij}\sigma_j y_i}. \tag{5.196}$$

注意到此时σ_j彼此退耦,这样我们可对每个σ_j求和,即

$$\prod_j\sum_{\sigma_j=\pm1}e^{-2b\sum_i c_{ij}\sigma_j y_i}=\prod_j(e^{-2b\sum_i c_{ij}y_i}+e^{+2b\sum_i c_{ij}y_i})=\prod_j\left(2\cosh(2b\sum_i c_{ij}y_i)\right) \tag{5.197}$$

我们发现系统的配分函数是

$$\mathcal{Z}=\prod_i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy_i}{\sqrt{\pi/b}}e^{-b\sum_i y_i^2+\sum_j(\ln 2+\ln\cosh(2b\sum_i c_{ij}y_i))}. \tag{5.198}$$

让我们假设b是小量,那么$\ln\cosh$部分可以根据下式展开:

$$\ln\cosh x\simeq\ln\left(1+\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{24}\right)\simeq\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{24}-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{24}\right)^2\simeq\frac{x^2}{2}-\frac{x^4}{12}+\mathcal{O}(x^6) \tag{5.199}$$

那么我们得到

$$e^{-b\sum_i y_i^2+\sum_j(\frac{(2b\sum_i c_{ij}y_i)^2}{2}-\frac{(2b\sum_i c_{ij}y_i)^4}{12})}\equiv e^{-\beta H} \tag{5.200}$$

这里定义了新的哈密顿量:

$$H=\frac{b}{\beta}\sum_i y_i^2-\frac{1}{\beta}\sum_j\left(\frac{(2b\sum_i c_{ij}y_i)^2}{2}-\frac{(2b\sum_i c_{ij}y_i)^4}{12}\right) \tag{5.201}$$

采取连续近似,即

$$y_j \simeq y_i + a\nabla y_i + \frac{1}{2}a^2\nabla^2 y_i + \mathcal{O}(a^3) \to y(x) + a\nabla y(x) + \frac{1}{2}a^2\nabla^2 y(x) \quad (5.202)$$

这样仅保留到y^4的哈密顿量是

$$H = \frac{1}{\beta a^d}\int d^d x \left[C_1 y^2(x) + C_2(\nabla y(x))^2 + C_3 y^4(x)\right] \quad (5.203)$$

注意到我们重新定义$y = \Psi$以及参数C_1, C_2, C_3就得到了Ψ^4模型.

量子力学中的对称性

宇称/空间反演

宇称(parity)可以理解为空间反演(space inversion),我们简称其为P操作.在经典力学中,若粒子坐标为$\vec{x}$,那么P操作意味着

$$P: \qquad \vec{x} \to -\vec{x} \quad (5.204)$$

也就是把粒子的坐标反号,有时也称为中心反射.注意到粒子的速度$\vec{v} = \dot{\vec{x}}$,动量$\vec{p} = m\dot{\vec{x}}$,角动量$\vec{l} = \vec{x} \times \vec{p}$, 那么在$P$操作下有

$$\begin{aligned} P: \qquad & \vec{v} \to -\vec{v} \\ & \vec{p} \to -\vec{p} \\ & \vec{l} \to \vec{l}. \end{aligned} \quad (5.205)$$

在量子力学中,我们用幺正算符$\hat{\pi}$表示P操作.($\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}^{-1}$)对于任意的量子态$|\alpha\rangle$,其空间反演后的态是$\hat{\pi}|\alpha\rangle$,即

$$\boxed{P: \qquad |\alpha\rangle \to \hat{\pi}|\alpha\rangle}. \quad (5.206)$$

我们知道粒子坐标在经典力学中的P操作下改变符号,那么在量子力学中,我们要求粒子的坐标算符$\hat{x}$ 在$|\alpha\rangle$态以及P操作后的$\hat{\pi}|\alpha\rangle$的期望值相反,即

$$P: \quad \vec{x} \to -\vec{x} \Rightarrow \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\hat{\pi}^\dagger\hat{x}\hat{\pi}|\alpha\rangle \quad (5.207)$$

要使上式恒成立,那么必有

$$\hat{x} = -\hat{\pi}^\dagger\hat{x}\hat{\pi} = -\hat{\pi}^{-1}\hat{x}\hat{\pi} \quad (5.208)$$

这里已经利用了幺正算符的性质$\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}^{-1}$.对上式两边同时左乘$\hat{\pi}$ 可得

$$\boxed{\hat{\pi}\hat{x} = -\hat{x}\hat{\pi}} \quad (5.209)$$

这说明坐标算符与宇称算符反对易.

让我们考虑粒子位于x'处位置的本征态$|x'\rangle$,那么这个态在空间反演后是什么呢,即$\hat{\pi}|x'\rangle$ =?.让我们尝试

$$\hat{x}\hat{\pi}|x'\rangle = -\hat{\pi}\hat{x}|x'\rangle = -\hat{\pi}x'|x'\rangle = (-x')\hat{\pi}|x'\rangle \tag{5.210}$$

这说明P操作后的态$\hat{\pi}|x'\rangle$也是$\hat{x}$的本征态,并且本征值是$-x'$,因此$\hat{\pi}|x'\rangle$代表粒子在$-x'$处的状态,即$\hat{\pi}|x'\rangle \sim |-x'\rangle$或者$\hat{\pi}|x'\rangle = e^{i\delta}|-x'\rangle$.若选取相位$\delta = 0$,那么有:

$$\boxed{\hat{\pi}|x'\rangle = |-x'\rangle} \tag{5.211}$$

物理上这说明P操作下,x'处的粒子会被照镜子一样映到$-x'$处.

同时,我们发现

$$\hat{\pi}^2|x'\rangle = \hat{\pi}|-x'\rangle = |x'\rangle \tag{5.212}$$

即$\hat{\pi}^2 = 1$,$(\hat{\pi} = \hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}^{-1})$ 这说明$\hat{\pi}$的本征值为± 1.那么$\hat{\pi}$本征值的意义是什么呢? 考虑任意态$|\alpha\rangle$,则有$\psi_\alpha(x') = \langle\alpha|x'\rangle$,

$$\langle x'|\hat{\pi}|\alpha\rangle = (\hat{\pi}|x'\rangle)^\dagger|\alpha\rangle = (|-x'\rangle)^\dagger|\alpha\rangle = \langle -x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(-x') \tag{5.213}$$

因此P操作下,

$$P: \qquad \psi_\alpha(x') \to \psi_\alpha(-x'). \tag{5.214}$$

此时,若$|\alpha\rangle$是$\hat{\pi}$的本征态,则有$\hat{\pi}|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle$,那么

$$\psi_\alpha(-x') = \langle x'|\hat{\pi}|\alpha\rangle = \pm\langle x'|\alpha\rangle = \pm\psi_\alpha(x') \tag{5.215}$$

因此有

$$\psi_\alpha(x') = \pm\psi_\alpha(-x'). \tag{5.216}$$

这说明$|\alpha\rangle$是π的本征态意味着相应的波函数是坐标x的奇函数或者偶函数.

接下来,我们需要考虑动量和角动量算符在P操作或则算符$\hat{\pi}$下的变化.在考虑动量$\hat{p}$ 之前,让我们用算符$\hat{T}_a$表示平移操作,(用T表示)即把x'处的粒子移动至$x' + a$处:

$$T: \qquad |x'\rangle \to |x' + a\rangle = \hat{T}_a|x'\rangle \tag{5.217}$$

假设$a \to 0$,也即是我们考虑一个无穷小的平移,此时可以把$|x' + a\rangle$ 展开为$|x' + a\rangle \simeq |x'\rangle + a\partial_{x'}|x'\rangle$,那么有

$$\hat{T}_a|x'\rangle = |x' + a\rangle \simeq |x'\rangle + a\partial_{x'}|x'\rangle = (1 + a\partial_{x'})|x'\rangle \tag{5.218}$$

因此,对一个无穷小平移,我们发现平移算符的形式为

$$\hat{T}_{a\to 0} = 1 + a\partial_{x'} \tag{5.219}$$

回忆动量算符在坐标表示下为$\hat{p} = -i\hbar\partial_x$,那么有$\hat{T}_{a\to 0} = 1 + ia\hat{p}/\hbar$.对有限平移,显然我们有

$$\hat{T}_a = \lim_{N\to\infty}\left(1 + \frac{ia\hat{p}}{N\hbar}\right)^N = \lim_{N\to\infty}(e^{\frac{ia\hat{p}}{N\hbar}})^N = \lim_{N\to\infty}(\hat{T}_{a/N})^N = e^{ia\hat{p}/\hbar} \tag{5.220}$$

这样我们就得到了有限平移时平移算符$\hat{T}_a$的表达式.

现在,我们从$|x'\rangle$出发,考虑$\hat{T}_a\hat{\pi}|x'\rangle$和$\hat{\pi}\hat{T}_{-a}|x'\rangle$两个过程,我们发现

$$\hat{T}_a\hat{\pi}|x'\rangle = \hat{T}_a|-x'\rangle = |-x'+a\rangle \tag{5.221}$$

$$\hat{\pi}\hat{T}_{-a}|x'\rangle = \hat{\pi}|x'-a\rangle = |-x'+a\rangle \tag{5.222}$$

因此有

$$\hat{T}_a\hat{\pi} = \hat{\pi}\hat{T}_{-a} \tag{5.223}$$

考虑$a\to 0$的极限,则有

$$(1+ia\hat{p}/\hbar)\,\hat{\pi} = \hat{\pi}\,(1-ia\hat{p}/\hbar) \Rightarrow \boxed{\hat{p}\hat{\pi} = -\hat{\pi}\hat{p}} \tag{5.224}$$

因此动量算符$\hat{p}$与$\hat{\pi}$是反对易.同理,角动量算符$\hat{L} = \hat{x}\times\hat{p}$与$\hat{\pi}$ 对易,这可以由下面的讨论得到:

$$\hat{\pi}\hat{L}\hat{\pi} = \hat{\pi}(\hat{x}\times\hat{p})\hat{\pi} = (\hat{\pi}\hat{x}\hat{\pi})\times(\hat{\pi}\hat{p}\hat{\pi}) = (-\hat{x})\times(-\hat{p}) = \hat{L} \Rightarrow \boxed{\hat{\pi}\hat{L} = \hat{L}\hat{\pi}}. \tag{5.225}$$

在原子物理常用的球谐函数$Y_{l,m} = \langle\theta,\varphi|l,m\rangle$来表示角动量的本征函数,我们有

$$\begin{aligned}\hat{\pi}|l,m\rangle &= \hat{\pi}\int\frac{d\Omega}{4\pi}|\theta,\varphi\rangle\langle\theta,\varphi|l,m\rangle = \int\frac{d\Omega}{4\pi}|\pi-\theta,\pi+\varphi\rangle\langle\theta,\varphi|l,m\rangle = \int\frac{d\Omega}{4\pi}|\theta,\varphi\rangle\langle\pi-\theta,\varphi+\pi|l,m\rangle \\ &= \int\frac{d\Omega}{4\pi}|\theta,\varphi\rangle(-1)^l Y_{l,m} = (-1)^l|l,m\rangle\end{aligned} \tag{5.226}$$

这说明球谐函数在空间反演下的变换与其角动量有关.

现在,我们已经知道基本力学量算符与宇称算符的对易关系.对于一般的哈密顿量$\hat{H}$,如果$\hat{\pi}$与$\hat{H}$对易,则我们说以$\hat{H}$描述的系统满足空间反演对称性,即

$$[\hat{\pi},\hat{H}] = 0. \tag{5.227}$$

此时,我们考虑定态Schödinger方程$\hat{H}|\alpha\rangle = E|\alpha\rangle$, 那么$|\alpha\rangle$ 的空间反演态$\hat{\pi}|\alpha\rangle$满足

$$\hat{H}\hat{\pi}|\alpha\rangle = \hat{\pi}\hat{H}|\alpha\rangle = \hat{\pi}E|\alpha\rangle = E\hat{\pi}|\alpha\rangle \tag{5.228}$$

这说明,对于具有空间反演的系统,本征态的时间反演态也是具有同样能量的本征态.这说明空间反演可导致能级的简并.例如自由粒子有$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, 显然满足对易关系$[\hat{\pi},\hat{H}] = 0$.这样能量为$E = (hk)^2/2m$的本征态$|k\rangle$的空间反演态为$\hat{\pi}|k\rangle$,

$$\hat{\pi}|k\rangle = \int dx'\hat{\pi}|x'\rangle\langle x'||k\rangle = \int dx'|-x'\rangle\langle x'|k\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle -x'|k\rangle = \int dx'|x'\rangle\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-ikx'} \tag{5.229}$$

注意到上式右边恰好是$|-k\rangle$的傅里叶变换,则有

$$\boxed{\hat{\pi}|k\rangle = |-k\rangle} \tag{5.230}$$

这说明动量本征态的空间反演态是同样能量但动量相反的本征态.

对于动量空间中对角化的二次量子化形式哈密顿量$\hat{H}=\sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$,我们知道其在单粒子基矢下可以写成

$$\hat{H}=\sum_k \varepsilon_k |k\rangle\langle k| \tag{5.231}$$

上式两边作用$\hat{\pi}$可得

$$\hat{\pi}\hat{H}\hat{\pi}=\sum_k \varepsilon_k \hat{\pi}|k\rangle\langle k|\hat{\pi}=\sum_k \varepsilon_k |-k\rangle\langle -k|=\sum_k \varepsilon_{-k}|k\rangle\langle k| \tag{5.232}$$

因此,如果色散$\varepsilon_{-k}=\varepsilon_k$,那么$\hat{H}$就与$\hat{\pi}$对易,也就是空间反演对称性要求$\varepsilon_{-k}=\varepsilon_k$,即色散关系是$k$的偶函数.同时,对于产生湮灭算符有$\hat{\pi}\hat{c}_k\hat{\pi}=\hat{\pi}|0\rangle\langle k|\hat{\pi}=|0\rangle\langle -k|=\hat{c}_{-k}$,即

$$P:\qquad \hat{c}_k\to\hat{c}_{-k},\hat{c}_k^\dagger\to\hat{c}_{-k}^\dagger,\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\to\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_{-k}^\dagger\hat{c}_{-k}. \tag{5.233}$$

- 空间反演操作P或者说算符$\hat{\pi}$会与算符和态矢量作用,但不会改变其他系数,例如上面例子中的色散关系ε_k.
- 场算符在P操作下有$\hat{\psi}(x)\to\hat{\pi}\hat{\psi}(x)\hat{\pi}=\hat{\pi}|0\rangle\langle x|\hat{\pi}=|0\rangle\langle -x|=\hat{\psi}(-x)$,即$P:\hat{\psi}(x)\to\hat{\psi}(-x)$.
- 关于量子力学中空间反演的进一步讨论可以参考Sakurai书《Modern Quantum Mechanics》 第四章$p269-279$.

最后,仿照空间反演的处理,我们可得平移操作对场算符的作用

$$\hat{T}_a\hat{\psi}(x)\hat{T}_a^{-1}=\hat{T}_a|0\rangle\langle x|\hat{T}_a^{-1}=|0\rangle(\hat{T}_a|x\rangle)^\dagger=|0\rangle\langle x+a|=\hat{\psi}(x+a) \tag{5.234}$$

因此平移操作使得$\hat{\psi}(x)\to\hat{\psi}(x+a)$.对于动量空间的湮灭算符有

$$\hat{T}_a\hat{c}_k\hat{T}_a^{-1}=\hat{T}_a|0\rangle\langle k|\hat{T}_a^{-1}=|0\rangle(\hat{T}_a|k\rangle)^\dagger=|0\rangle\langle k|e^{-ika}=e^{-ika}\hat{c}_k \tag{5.235}$$

即$\hat{c}_k\to e^{-ika}\hat{c}_k,\hat{c}_k^\dagger\to e^{ika}\hat{c}_k^\dagger$.这样,哈密顿量$\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k$在空间平移操作下不变,而

$$\hat{H}=\int dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}(x)+\int dx\int dx'\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x')V(x-x')\hat{\psi}(x')\hat{\psi}(x) \tag{5.236}$$

在平移操作下成为

$$\hat{H}_T=\int dx\hat{\psi}^\dagger(x+a)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}(x+a)+\int dx\int dx'\hat{\psi}^\dagger(x+a)\hat{\psi}^\dagger(x'+a)V(x-x')\hat{\psi}(x'+a)\hat{\psi}(x+a) \tag{5.237}$$

对无穷大系统,我们做坐标变换$x\to x-a$,则上式为

$$\hat{H}_T=\int dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(x-a)\right)\hat{\psi}(x)+\int dx\int dx'\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x')V(x-x')\hat{\psi}(x')\hat{\psi}(x) \tag{5.238}$$

因此,当势能$U(x)=U(x-a)$时上式对平移距离a的操作不变($\hat{H}_T=\hat{H}$).显然这个条件等价于势能是以a为周期的周期函数.如果进一步要求对任意平移a都满足平移不变性,那么这意味着$U(x)$与坐标无关,也就是势能为常数.同理,如果我们要求$\hat{H}$具有空间反演对称性,那么必须有$U(x)=U(-x), V(x-x')=V(x'-x)$.($P$操作使得$\hat{H}$中场算符的坐标$x\to -x$,然后令$\hat{H}$ 中所有坐标取反号,再让此时的哈密顿等于$\hat{H}$ 就可得这两个条件)

作为一个简单的应用,让我们考虑一维费米子.我们知道一维费米子的场算符常常在左右两个费米点附近展开,即

$$\hat{\psi}(x)=\hat{\psi}_R(x)e^{ik_F x}+\hat{\psi}_L(x)e^{-ik_F x} \tag{5.239}$$

在空间反演操作下,$\hat{\psi}(x)\to\hat{\psi}(-x)$,那么我们自然会要求$\hat{\psi}_{L/R}(x)\to\hat{\psi}_{L/R}(-x)$,此时

$$\hat{\psi}(x)\to\hat{\psi}_R(-x)e^{ik_F x}+\hat{\psi}_L(-x)e^{-ik_F x}\neq\hat{\psi}(-x)=\hat{\psi}_R(-x)e^{-ik_F x}+\hat{\psi}_L(-x)e^{ik_F x} \tag{5.240}$$

对比上式两边,空间反演下正确的变换规则要求$x\to -x$的同时,左右费米子也需要交换,即有

$$P:\quad \hat{\psi}_{L/R}(x)\to\hat{\psi}_{R/L}(-x). \tag{5.241}$$

这样,我们发现如下的手性费米子模型(可作为整数霍尔效应边界态的模型)自然破坏了空间反演对称性:

$$\hat{H}=\int dx\hat{\psi}_R^\dagger(x)(-i\hbar\partial_x)\hat{\psi}_R(x). \tag{5.242}$$

时间反演

在经典物理中,时间反演,记为T操作,意味着把粒子的时间t替换为$-t$.这样,我们发现$\vec{x}\to\vec{x},\vec{p}\to-\vec{p},\vec{l}=-\vec{l}.$ 也就是粒子的坐标不变,而动量和角动量改变符号.

在量子力学中,如果$\psi(x,t)$是Schödinger方程的解,那么直观上我们会认为$\psi(x,-t)$也是方程的解,但是直接代如方程有

$$i\hbar\partial_t\psi(x,-t)=-i\hbar\partial_{-t}\psi(x,-t)=-\left(\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V\right)\psi(x,-t)\neq\left(\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V\right)\psi(x,-t) \tag{5.243}$$

这说明$\phi(x,-t)$并不是$\psi(x,t)$在时间反演后的对应解.但是我们注意到,只要对上式整体取复共轭,那么$\psi^*(x,-t)$满足Schödinger方程,这说明$\psi^*(x,-t)$是$\psi(x,t)$在时间反演后对应的正确解.也就是在T操作下有

$$\boxed{T:\qquad \psi(x,t)\to\psi^*(x,-t)} \tag{5.244}$$

这说明时间反演操作需要包含复共轭的操作.现在,我们用反幺正算符$\hat{\Theta}$表示时间反演操作.这里的反幺正算符的意思是算符不仅满足幺正算符的特

性,$\hat{\Theta}^{-1} = \hat{\Theta}^{\dagger}$,还对包含额外的复共轭操作,为简单起见我们设复共轭操作仅对$\hat{\Theta}$右边的态或者系数起作用.例如,

$$\hat{\Theta}(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\hat{\Theta}|\alpha\rangle + c_2^*\hat{\Theta}|\beta\rangle \tag{5.245}$$

也就是说当把时间反演算符换到数的右边时,我们需要对这个数取复共轭.

另一方面,对于通常的幺正算符$\hat{U}$,下面的等式成立,

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle = (\langle\alpha|\hat{U}^{\dagger})(\hat{U}|\beta\rangle) = \langle\alpha|\hat{U}^{-1}\hat{U}|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \tag{5.246}$$

也就是变换前$|\alpha\rangle$和变换后的状态$\hat{U}|\alpha\rangle$之间的重叠度不变.但是对于类似$\hat{\Theta}$的反幺正算符,我们有

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle = (\langle\alpha|\hat{\Theta}^{\dagger})(\hat{\Theta}|\beta\rangle) = \langle\alpha|\hat{\Theta}^{-1}\hat{\Theta}|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{\Theta}^{-1}\hat{\Theta}\sum_n|n\rangle\langle n||\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{\Theta}^{-1}\sum_n\hat{\Theta}\langle n|\beta\rangle|n\rangle \tag{5.247}$$

注意到$\langle n|\alpha\rangle$是态矢量$|n\rangle$的系数,那么把$\hat{\Theta}$移动其右边需要对其取复共轭,即有

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle = \langle\alpha|\hat{\Theta}^{-1}\sum_n\langle n|\beta\rangle^*\hat{\Theta}|n\rangle \tag{5.248}$$

现在,我们假设$|n\rangle$是相应的基矢,那么$\hat{\Theta}$并不改变$|n\rangle$, 则有

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle = \langle\alpha|\hat{\Theta}^{-1}\sum_n\langle n|\beta\rangle^*|n\rangle \tag{5.249}$$

对于$\langle\alpha|\hat{\Theta}^{-1} = (\hat{\Theta}|\alpha\rangle)^{\dagger}$, 我们有

$$\langle\alpha|\hat{\Theta}^{-1} = \left(\sum_{n'}\langle n'|\alpha\rangle^*|n'\rangle\right)^{\dagger} = \sum_{n'}\langle n'|\langle n'|\alpha\rangle \tag{5.250}$$

那么有

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle = \sum_{n,n'}\langle n'|n\rangle\langle n'|\alpha\rangle\langle\beta|n\rangle = \sum_{n,n'}\delta_{n,n'}\langle\beta|n\rangle\langle n'|\alpha\rangle = \sum_n\langle\beta|n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle \tag{5.251}$$

显然反幺正算符与幺正算符的结果并不相同.

现在,让我们讨论时间反演算符与坐标,动量以及角动量算符的关系.显然,根据经典力学的结果,我们必须要求如下等式对任意量子态$|\alpha\rangle$成立:

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{\Theta}^{\dagger}\hat{x}\hat{\Theta}|\alpha\rangle \tag{5.252}$$

$$\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\hat{\Theta}^{\dagger}\hat{p}\hat{\Theta}|\alpha\rangle \tag{5.253}$$

$$\langle\alpha|\hat{L}|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\hat{\Theta}^{\dagger}\hat{L}\hat{\Theta}|\alpha\rangle \tag{5.254}$$

那么有

$$\hat{\Theta}^{-1}\hat{x}\hat{\Theta} = \hat{x} \quad \hat{\Theta}^{-1}\hat{p}\hat{\Theta} = -\hat{p} \quad \hat{\Theta}^{-1}\hat{L}\hat{\Theta} = -\hat{L} \tag{5.255}$$

这说明坐标算符与时间反演算符对易,而动量和角动量都与时间反演反对易.即时间反演变化下有

$$\boxed{T: \qquad \hat{x} \to \hat{x} \quad \hat{p} \to -\hat{p} \quad \hat{L} \to -\hat{L}} \tag{5.256}$$

由此,我们发现位置空间的状态$|x'\rangle$的时间反演态是其本身,即$\hat{\Theta}|x'\rangle = |x'\rangle$.这个结果可由下面讨论得到

$$\hat{x}\hat{\Theta}|x'\rangle = \hat{\Theta}\hat{x}|x'\rangle = x'\hat{\Theta}|x'\rangle \Rightarrow \boxed{\hat{\Theta}|x'\rangle = |x'\rangle} \tag{5.257}$$

同理,对于动量本征态$|k\rangle$,我们有

$$\hat{p}\hat{\Theta}|k\rangle = -\hat{\Theta}\hat{p}|k\rangle = -k\hat{\Theta}|k\rangle \Rightarrow \boxed{\hat{\Theta}|k\rangle = |-k\rangle} \tag{5.258}$$

对于二次量子化相关的场算符,我们有

$$\hat{\Theta}\hat{\psi}(x)\hat{\Theta}^{-1} = \hat{\Theta}|0\rangle\langle x|\hat{\Theta}^{-1} = |0\rangle\langle x| = \hat{\psi(x)} \tag{5.259}$$

即有

$$\boxed{T: \qquad \hat{\psi}(x) \to \hat{\psi}(x), \quad \hat{\psi}^\dagger(x) \to \hat{\psi}^\dagger(x)} \tag{5.260}$$

而对于湮灭算符$\hat{c}_k$,则有

$$\hat{\Theta}\hat{c}_k\hat{\Theta}^{-1} = \hat{\Theta}|0\rangle\langle k|\hat{\Theta}^{-1} = |0\rangle\langle -k| = \hat{c}_{-k} \tag{5.261}$$

$$\boxed{T: \qquad \hat{c}_k \to \hat{c}_{-k}, \quad \hat{c}_k^\dagger \to \hat{c}_{-k}^\dagger.} \tag{5.262}$$

需要注意,当时间反演算符作用于哈密顿量时,哈密顿量的系数也需要被作用而取复共轭.进一步,对于角动量态$|l,m\rangle$,我们容易得到$\hat{\Theta}|l,m\rangle = (-1)^m|l,m\rangle$.

最后,当我们考虑自旋$S = 1/2$粒子时,时间反演算符需要修改为

$$\hat{\Theta} = \hat{U}K \tag{5.263}$$

这里K是取复共轭操作,而幺正算符$\hat{U} = e^{-i\pi\hat{S}_y/\hbar} = -i\hat{\sigma}_y/\hbar$作用于自旋空间.比如说

$$\hat{\Theta}|\uparrow\rangle = \hat{U}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \quad \hat{\Theta}|\downarrow\rangle = \hat{U}|\downarrow\rangle = -|\uparrow\rangle \tag{5.264}$$

注意$|\uparrow,\downarrow\rangle$都是基矢态,因此取复共轭操作不起作用.注意到此时$\hat{\Theta}^2 = \hat{U}K\hat{U}K = \hat{U}\hat{U}^*K^2 = -K^2 = -1$.

这样,对于$S = 1/2$系统,我们有

$$\boxed{T: \qquad \hat{\psi}_\sigma(x) \to \sigma\hat{\psi}_{-\sigma}(x), \quad \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x) \to \sigma\hat{\psi}_{-\sigma}^\dagger(x)} \tag{5.265}$$

$$\boxed{T: \qquad \hat{c}_{k\sigma} \to \sigma\hat{c}_{-k-\sigma}, \quad \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \to \sigma\hat{c}_{-k-\sigma}^\dagger.} \tag{5.266}$$

第五章习题

习题1:一些概念

Q1:指出晶态固体和反铁磁体主要破缺了哪类对称性.

Q2:写出Landau理论给出的六个临界指数并指出这些指数是否满足超标度关系.

Q3:简述Goldstone机制和Anderson-Higgs机制并判断晶格振动导致的声子以及电磁场的量子即光子是否是Goldstone粒子.

习题2:Ising临界指数

Q:验证二维Ising模型的临界指数$\alpha = 0, \beta = 1/8, \gamma = 7/4, \delta = 15, \nu = 1, \eta = 1/4$满足标度律$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \gamma = \beta(\delta - 1), (2 - \eta)\nu = \gamma, 2 - \alpha = \nu d$

习题3:相竞争

Q:设两个耦合的序参量ϕ_1, ϕ_2满足Landau自由能密度$f_L = \frac{r_1}{2}\phi_1^2 + \frac{r_2}{2}\phi_2^2 + w\phi_1^2\phi_2^2$, 分析参数$r_1, r_2, w$在何种情况下系统稳定时的序参量有非零值.

Bibliography

[1] Piers Coleman, Introduction to Many-Body Physics, 第十二章

[2] Igor Herbut, A Modern Approach to Critical Phenomena, 第一章，第四章

[3] Alexander Altland and Benjamin D. Simons, Condensed Matter Field Theory, 第五章

[4] Daniel Khomskii, Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids, 第二章

[5] J. J. Sakurai and Jim Napolitano, Modern Quantum Mechanics(2nd), 第四章

Chapter 6

标度与重整化:Wilson的传奇

标度与关联长度:幂律形式就是好

在之前关于相变的讨论中,我们知道临界点附近的物理系统其各种热力学量都显示出幂律行为,而幂律的幂次满足几个标度律.那么一个明显的问题是如何理解这些标度律的产生.关于这个问题的初步答案就是本章要讨论的标度假设以及重整化理论.

准备:什么是标度?

标度的英文是scale,也就是尺度的意思.在相变理论中指的是改变系统的大小,那么改变前后系统的物理量满足一定的关系.当这种关系是简单的倍率关系时,系统就具有标度不变性.可以想象,如果一个系统本身具有特征的能量尺度,那么这种固有能量尺度就自然会影响或者限制我们进行的标度变换,会在很大程度上破坏标度不变性.因此标度不变的物理系统一般是没有固有能量尺度的系统.例如,Fermi液体的特征能量尺度为费米能E_F,各类物理量都依赖于这个特征能量尺度.当我们放缩系统大小时,E_F自然成为强烈的限制因素,这导致Fermi液体并不具有标度不变性.[1]

为了定量地讨论标度行为,我们首先看看标度函数的概念.

标度函数的定义

若函数$f(x)$在$x \to \lambda x$变换下满足

$$f(\lambda x) = \lambda^{\alpha} f(x) \tag{6.1}$$

则称$f(x)$为标度函数,而相应的变换为标度变换,简称标度.可以看到,如果λ 是正数,那么它的意义就是对系统的坐标进行缩放.如果一个物理系统在标度变换下显示标度行为,那么我们说这个系统具有标度不变性.最简单的标度函数实际上是幂次函数,即$f(x) = x^{\alpha}$,显然$f(\lambda x) = \lambda^{\alpha} x^{\alpha} = \lambda^{\alpha} f(x)$.

当然,标度函数的概念并不仅限于单变量的情况,例如对两变量函数$f(x, y)$,若满足

$$f(\lambda x, y) = \lambda^{\alpha} f(x, y), \quad f(x, \lambda y) = \lambda^{\beta} f(x, y) \tag{6.2}$$

那么$f(x, y)$就是标度函数,这里系数α, β一般是不相等的常数.进一步,同时对x, y做标度变换有

$$f(\lambda x, \lambda y) = \lambda^{\alpha} f(x, \lambda y) = \lambda^{\alpha} \lambda^{\beta} f(x, y) = \lambda^{\alpha+\beta} f(x, y). \tag{6.3}$$

[1] 例如,根据量子力学中的能量时间不确定关系有$\Delta\tau \Delta E \sim \hbar$.如果$\Delta\tau$代表费米液体中准粒子的寿命,那么相应的散射率为$\frac{1}{\Delta\tau} \sim \frac{\Delta E}{\hbar}$.注意到费米液体的特征能量尺度为$E_F$,而由于相空间效应导致的温度依赖为$T^2$,那么散射率自然是$\frac{1}{\Delta\tau} \sim \frac{T^2}{E_F}$.相反,当$E_F \to 0$时,散射率仅和温度有关,那么由量纲可知最简单的可能是$\frac{1}{\Delta\tau} \sim T$. 物理上这种温度线性关系可能与关联材料中普遍存在的线性电阻行为相关.

为了让上述形式变得更为简单,我们也可以调整y的标度变换形式,即有$f(x,\lambda^{\alpha/\beta}y)=\lambda^{\alpha}f(x,y)$.这样,一般具有$N$个变量的标度函数可以写为

$$f(x_1,x_2,...\lambda^{\alpha_1/\alpha_j}x_j,...x_N)=\lambda^{\alpha_1}f(x_1,x_2,...x_j,...x_N) \tag{6.4}$$

标度不变的物理系统

对于物理系统,我们关心的标度函数通常是一些关联函数或者是自由能密度这样的热力学函数,当然这些量是否具有想要的标度行为是需要具体研究才能判断的,不过以下我们列出明确具有标度行为的例子:

- 处于临界点的系统,也就是处于热力学相变点或者量子相变点的系统,其自由能密度以及序参量关联函数具有标度行为.
- 自由的无质量Dirac费米子系统.
- 共形场论(Conformal Field Theory,CFT),即满足共形不变性的(量子)场论,共形不变性自动包含了标度不变性.[2]

一般d维时空的共形变换包括坐标平移($x\to x'=x+a$),坐标旋转($x\to x'=\Lambda x$),坐标缩放,即标度变换($x\to x'=\lambda x$)以及特殊共形变换($x\to x'=\frac{x+bx^2}{1+2bx+b^2x^2}$).对于$d=2$的二维时空,定义复数坐标$z=x+iy$,那么此时的共形变换就是以$z$或$\bar{z}$为自变量的解析函数$f(z),\bar{f}(\bar{z})$.也就是说,任意一个解析函数$f(z)$都定义了一个二维共形变换,在《数学物理方法》课程中又称为保角变换.[3]

最实用的标度理论:量纲分析*

在整个物理的学习和研究中,量纲分析时一种定性分析物理现象的重要方法,在这里我们将用其讨论统计物理和凝聚态物理关心的具有标度行为的系统,我们将会发现,不用做任何实际的计算,只通过简单的量纲/标度分析就可以得到重要的信息,例如关联函数的幂律行为.

对于配分函数,我们知道其是对作用量或者自由能的Boltzman求和

$$\mathcal{Z}\sim\sum e^{-S} \tag{6.5}$$

显然,作用量S出现在指数上,是一个无量纲的量,具体而言,我们考虑如下作用量

$$S=\int d^dx\frac{1}{2}(\nabla\Psi)^2 \tag{6.6}$$

我们知道积分是对空间求,那么其量纲是长度的d次方,记为$\dim[x^d]=d$,显然$\dim[x]=1$而作用量本身是$\dim[S]=0$.为了使得S是无量纲的,那么我们

[2]对于绝大多数物理上重要的体系,如果它具有标度不变性,那么它自动就会有共形不变性.也就是说标度不变的场论基本上是共形场论.

[3]共形不变性和共形场论的更多讨论可参考本章附录.

必须使得场Ψ的量纲为长度的$-\frac{d-2}{2}$次,即$\dim[\Phi(x)] = -\frac{d-2}{2}$,这样如果我们考虑关联函数$\langle\Psi(x)\Psi(y)\rangle$,那么根据作用量的平移不变性,关联函数必然是$x-y$的函数,而且系统而本身有时旋转不变的,那么关联函数又只能与$x-y$ 的绝对值$|x-y|$.我们已经知道$\dim[\Psi(x)] = -\frac{d-2}{2}$,那么必然有$\dim[\Psi(x)\Psi(y)] = \dim[\Psi(x)] + \dim[\Psi(y)] = -(d-2)$, 换句话说,这提示我们,关联函数最简单的形式是以$|x-y|$为变量幂律函数

$$\langle\Psi(x)\Psi(y)\rangle \sim \frac{1}{|x-y|^{d-2}} \tag{6.7}$$

注意到这个函数确实具有$-(d-2)$次的长度量纲.

当然,我们可以把上述模型变换至动量空间,

$$S = \sum_k \frac{1}{2}k^2\Psi(k)\Psi(-k) \tag{6.8}$$

注意到动量k和空间坐标x通过傅里叶变换因子e^{ikx}联系,那么我们立即得到$\dim[k] = -1$(相因子是无量纲的,因此动量是长度的负一次量纲),同理我们得到$\dim[\Psi(k)] = 1$,(对动量的求和符号不贡献量纲)这样动量空间的关联函数是

$$\langle\Psi(k)\Psi(-k)\rangle \sim \frac{1}{k^2} \tag{6.9}$$

最后,我们讨论量纲分析与标度分析的关系.在量纲分析中,我们要求作用量是无量纲并给定空间的量纲,这样推导出了场的量纲以及关联函数的定性行为.至于标度分析,我们还是以自由标量场模型为例,

$$S = \int d^dx \frac{1}{2}(\nabla\Psi)^2 \tag{6.10}$$

这一次,我们做坐标的标度变换$x \to x' = \lambda x$,[4]这样有

$$S = \int d^dx' \frac{1}{\lambda^{d-2}}\frac{1}{2}(\nabla'\Psi(x'/\lambda))^2 \tag{6.11}$$

我们要求变换后的作用量应与变换前的作用量在形式上完全一致,那么这要求我们定义

$$\Psi'(x') = \frac{1}{\lambda^{\frac{d-2}{2}}}\Psi(x'/\lambda) \tag{6.12}$$

这样有

$$S = \int d^dx' \frac{1}{2}(\nabla'\Psi'(x'))^2 \tag{6.13}$$

观察变换式$x' = \lambda x, \Psi'(x') = \lambda^{-\frac{d-2}{2}}\Psi(x'/\lambda)$我们发现如下重要的关系,即标度变换因子的系数就是相应量的量纲,

$$\boxed{\mathrm{O}'(x') = \lambda^{\dim[\mathcal{O}(x)]}\mathcal{O}(x) \quad (x \to x' = \lambda x)} \tag{6.14}$$

[4]注意到动量的标度变换是$k \to k' = bk$, 由相因子e^{ikx}不变有$b = 1/\lambda$.

通常也把标度变换因子的系数称为相应量的标度维数,即$\dim[\mathcal{O}]$ 是标度维数,代表相应量$\mathcal{O}$在长度下度量的量纲.换句话说,在知道了标度维数后,我们有

$$\boxed{\langle\mathcal{O}(x)\rangle \sim \frac{1}{x^{\dim[\mathcal{O}(x)]}}, \quad \langle\mathcal{O}(x)\mathcal{O}(0)\rangle \sim \frac{1}{x^{2\dim[\mathcal{O}(x)]}}, ...} \tag{6.15}$$

- 警告:对于一般的相互作用理论,简单的量纲分析得到的标度维数并不一定是真正正确的,我们称简单分析得到的标度维数与系统真实标度维数的差为反常维数,通常用记号η表示.

- 对于经典二维Ising模型,我们知道$\eta = 1/4$,这就是说,我们通过量纲分析得到的标度维数如果记为$d_{tr} = -\frac{2-2}{2} = 0$,那么磁化关联函数实际上满足

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d_{tr}+\eta}} = \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \tag{6.16}$$

  也就是说涨落修正后的关联函数在空间的衰减会更快,这也符合我们对涨落效应的认识,即抑制有序性和关联性.当然,为了保证量纲依然是$-(d-2)$,更为正确的关联函数还需要加入代表长度量纲的因子,考虑到Ising 模型的耦合常数是J,那么有(注意时间与能量出现在演化因子e^{-iEt}中,说明能量量纲是长度的负一次,则J 具有长度的量纲的负一次,当然J并不作为动力学量出现,故而没有直接的标度行为)

$$G(r) \sim \frac{J^{-\eta}}{r^{\eta}} = \frac{1}{(Jr)^{1/4}} \tag{6.17}$$

- 可以看到标度维数越大,那么相应的量在空间中衰减的越快,(如果可以定义的话)对于系统的长程行为影响越弱,相反越小的标度维数,特别是标度维数为负数的情况,对系统影响越明显.因此,我们真正要关心的是那种衰减慢的关联对系统的影响.

标度分析的应用

注意到上一节中所研究的问题都是自由场模型,并且可以看到这些自由场模型都是无质量的,(没有质量项)在这一节我们将分析质量项,以及相互作用项的效应.

我们先考虑最简单的质量项,

$$S = \int d^d x \frac{1}{2}[(\nabla\Psi)^2 + r\Psi^2] \tag{6.18}$$

如果我们要求作用量是在$r = 0$时的标度变换下保持标度不变性,那么这等价于要求

$$\dim[r] + 2\dim[\Psi(x)] + \dim[x^d] = 0 \Rightarrow \dim[r] = -2 \tag{6.19}$$

也就是在标度变换下,如果$r \to r' = \lambda^{-2} r$,那么系统依然是标度不变的.我们当然知道该理论的关联函数是$\langle \Psi(k)\Psi(-k)\rangle = \frac{1}{k^2+r}$,变换至实空间可得

$$\langle \Psi(x)\Psi(y)\rangle \sim \frac{e^{-\sqrt{r}|x-y|}}{|x-y|^{d-2}} \tag{6.20}$$

显然由于指数函数的出现,以上关联函数丢失了标度不变性.换句话说,一个非零的r就会导致系统丢失标度不变性,也就是$r=0$是系统的标度不变的点,而r称为该点的相关扰动.

进一步,我们加入相互作用项,

$$S = \int d^d x \left[\frac{1}{2}(\nabla\Psi)^2 + \frac{r}{2}\Psi^2 + \frac{u}{4}\Psi^4\right] \tag{6.21}$$

与质量项一样,我们得到

$$\dim[u] + 4\dim[\Psi(x)] + \dim[x^d] = 0 \Rightarrow \dim[u] = d-4 \tag{6.22}$$

也就是有$u \to u' = \lambda^{d-4} u = b^{4-d} u$.注意到在$d<4$时相互作用的标度维数总是小于零,这说明相互作用在$r=0$的标度不变点总是重要的,而我们知道$r=0$就是相变点,那么这说明相互作用对于$d<4$维系统的相变点总是需要考虑的.至于如何考虑相互作用的效应,标度理论分析给不出答案,这只能通过将要讨论的重整化理论给出明确的回答.

最后考虑$\int d^d x g\Psi^2(\nabla\Psi)^2$项,我们发现$\dim[g] = d-2$,即$g \to g' = \lambda^{d-2} g$,显然在$d>2$时标度维数大于零,也就是说对于高维系统,这类相互作用并不导致强烈的涨落修正,因而是不重要的,这称为无关扰动.既然无关扰动并不改变标度不变点的长程行为,那么当前标度分析的任务就是要找到所有相关扰动,得到一个简单而又包含足够物理内容的模型.注意这里的标度因子λ与下面讲述的重整化理论中用的标度因子b恰好是相反的,即$x' = \lambda x, k' = bk$而$e^{ikx} = e^{ik'x'}$说明$\lambda = 1/b$.[5]

热力学相变的标度理论

在相变点附近,我们知道关联长度满足以下幂律行为

$$T \to T_c:\ \xi \propto |T - T_c|^{-\nu} \tag{6.23}$$

一般而言,$\nu > 0$,则关联长度在相变点发散$\xi \to \infty$.

- 既然关联长度在相变点附近趋于发散,则临界点附近唯一的长度尺度就是关联长度本身.

[5]一个非平凡的应用是费米液体.描述费米液体的简化模型是$d+1$维的作用量$S = \int dt d^d x(\psi^\dagger_\sigma(i\partial_t + i\vec{v}_F\cdot\nabla)\psi_\sigma + g\psi^\dagger_\sigma\psi^\dagger_{\sigma'}\psi_{\sigma'}\psi_\sigma)$. 在$g=0$时$\dim[\psi] = -\frac{d}{2}$,那么$\dim[g] = d-1$即$g' = \lambda^{d-1} g$.这说明一般的四费米子相互作用($g$本身比较小)在$d>1$维时总能够忽略.($g<0$所对应的超导配对不稳定性是例外)因此弱相互作用的费米子体系总是能用自由费米子或者说费米气体理解.

根据最一般的物理常识,我们知道系统的自由能(熵以及其他热力学函数)正比于它的体积,[6]即

$$F \propto L^d. \tag{6.24}$$

同时,既然相变点附近的唯一长度尺度是关联长度ξ,那么自由能的奇异部分完全由关联长度ξ决定,[7]因此,我们假设系统接近相变点时的自由能密度具有如下形式:

$$\boxed{f = \frac{F}{L^d} \propto \xi^{-d} \propto (T - T_c)^{\nu d}} \tag{6.25}$$

这样,我们可以计算热容的温度依赖行为:

$$C_V = -T\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \propto T(T - T_c)^{\nu d - 2} \tag{6.26}$$

对比定义$C_V \propto (T - T_c)^{-\alpha}$可得热容临界指数为$\alpha = 2 - \nu d$.

当考虑序参量以及磁化率时,我们引入与序参量耦合的外场H,此时假定自由能密度具有如下标度形式

$$\boxed{f \propto (T - T_c)^{\nu d}\Phi\left(\frac{H}{(T - T_c)^x}\right)} \tag{6.27}$$

这里的函数$\Phi(x)$是性质良好的函数,即$\Phi(x = 0)$的各阶导数都取有限值.这样,我们发现

$$\frac{\partial f}{\partial H} \propto (T - T_c)^{\nu d - x}\Phi'\left(\frac{H}{(T - T_c)^x}\right) \tag{6.28}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial H^2} \propto (T - T_c)^{\nu d - 2x}\Phi''\left(\frac{H}{(T - T_c)^x}\right) \tag{6.29}$$

那么序参量的温度依赖是

$$\Psi \propto \frac{\partial f}{\partial H}|_{H\to 0} \propto (T - T_c)^{\nu d - x}\Phi'(0) \tag{6.30}$$

对比$\Psi \propto (T - T_c)^{\beta}$可得序参量临界指数$\beta = \nu d - x$.

同时,磁化率具有如下形式

$$\chi \propto \frac{\partial^2 f}{\partial H^2}|_{H\to 0} \propto (T - T_c)^{\nu d - 2x}\Phi''(0) \tag{6.31}$$

对比$\chi \propto (T - T_c)^{-\gamma}$可得磁化率临界指数$\gamma = 2x - \nu d$.

[6]众所周知的事实是黑洞的熵正比于它的视界面积,($S = \frac{A}{4l_p^2} = \frac{A}{4\hbar G/c^3}$,$A$是视界面积,$l_p$是普朗克长度,$G$是牛顿引力常数,$c$是真空光速.)这提示我们黑洞并非寻常的热力学系统.黑洞的这个特性导致t'hooft和Susskind提出著名的全息原理并直接影响了后来的全息对偶理论(Ads/CFT).目前认为,黑洞熵的面积律是量子引力的基本特性,这与自然界中其他相互作用明显不同.

[7]在相变点附近自由能由奇异部分主导,因此我们不区分自由能的奇异部分F_s与完整自由能F 的差别,下面讨论中F实际上理解为自由能的奇异部分.

注意到,利用α,β,γ关于ν,d和x的依赖关系,可以得到

$$\alpha+2\beta+\gamma=2-\nu d+2(\nu d-x)+\nu d-2x=2 \tag{6.32}$$

即我们得到标度律$\alpha+2\beta+\gamma=2$.

临界点处的序参量随外场依赖是

$$\Psi\propto\frac{\partial f}{\partial H}|_{T\to T_c}\propto(T-T_c)^{\nu d-x}\Phi'\left(\frac{H}{(T-T_c)^x}\right)|_{T\to T_c} \tag{6.33}$$

显然,为了使上式在$T=T_c$时没有奇异性,我们假设$\Phi'(y\to\infty)\propto y^{\nu d/x-1}$, 这样分母的温度依赖与$\Phi'$前的系数恰好抵消,我们得到

$$\Psi(H)\propto\frac{\partial f}{\partial H}|_{T\to T_c}\propto H^{\nu d/x-1} \tag{6.34}$$

对比$\Phi(H)\propto H^{1/\delta}$可得序参量随外场变化的临界指数满足$1/\delta=\nu d/x-1$. 结合$x=2-\alpha-\beta$以及$\nu d=2-\alpha$可得$2-\alpha-\beta=\beta\delta$. 再利用$\alpha+2\beta+\gamma=2$,最后得到标度律$\gamma=\beta(\delta-1)$.

我们假定当接近相变点时,序参量关联函数满足以下形式

$$\boxed{\langle\Phi(r)\Phi(0)\rangle=G(r)\propto\frac{\Pi(r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}} \tag{6.35}$$

那么对应的序参量磁化率(均匀部分)是

$$\chi\propto\int d^drG(r)\propto\xi^{2-\eta}\propto(T-T_c)^{-\nu(2-\eta)} \tag{6.36}$$

对比$\chi\propto(T-T_c)^{-\gamma}$可得标度律$\nu(2-\eta)=\gamma$.

- 假定关联长度为相变附近唯一长度尺度,推导出三个普适的标度律.然而这里的标度假设依然无法具体计算临界指数.

那么如何才能计算临界指数呢？历史上采用重整化的方法在原则上成功地解决了这个问题.因此,在下面的内容当中我们将介绍重整化的基本含义并用Ψ^4模型为例简要讨论如何微扰地计算临界指数.当然,严格计算临界指数需要特殊的解析技巧或者数值计算方法.

重整化:按照要求修改参数

重整化的物理含义

在详细讨论重整化之前,让我们先通过几个熟知的例子体会这些例子中暗含的重整化的精神.首先,我们来看先前章节详细讨论过的费米液体理论.在费米液体理论中,我们知道相互作用费米子系统的准粒子激发相当于是无相互作用时粒子激发的对应物,具有相同的动量和电荷,但具有不同的有效质量和能量.换句话说,相互作用的效果是把无相互作用时的裸粒子修正为相互作用之后的实际粒子,实际粒子是裸粒子和以及相互作用诱导的大量粒子-空穴激发结合后的混合物,在这个过程当中,裸粒子的质量经过相互作用修正为实际粒子的有效质量,裸粒子的能量修正为实际粒子的能量,这就是一类典型的重整化的过程,即:

- 把相互作用的效果吸收到系统的参数,例如质量,电荷,磁矩等,的重新定义当中并且不改变系统的基本结构,这就是重整化(renormalization).

在费米液体中这种重整化成立实际上要求实际粒子中裸粒子所占的比例(由准粒子权重Z刻画)大于零,否则质量等的重新定义就是去意义了.

下面,我们来看一个更简单的例子.在Coulomb电子气的讨论中,我们了解到裸的Coulomb 势会导致电子的费米速度发散,而考虑到电子气对电荷的屏蔽效应后,裸的Coulomb势修正为屏蔽Coumlomb势,同时费米速度发散得以消除.另一方面,从空间上看,电子气对电荷的屏蔽是随着距离变化的,这体现在如果我们在中性的电子气中添加一个带单位正电荷的试探电荷,那么这个试探电荷附近的电荷分布是振荡变化的,即Friedel振荡.这说明,当我们在试探电荷附近测量它的电荷时,其电荷接近$+e$.进一步远离该试探电荷会得到更小的电荷,在足够远的地方($>> 1/k_F$),试探电荷完全被电子气屏蔽,此时看到的等效电荷为零.这里,我们发现,近距离只会得到接近$+e$的电荷,远处才有完全的电荷屏蔽.若定义试探电荷在电子气屏蔽后的总有效电荷为Q_{eff},那么Q_{eff}实际上是空间位置的函数,即$Q_{eff}(r)$.因此,我们得到如下重要结果:

- 对于同一个物理对象,在不同长度尺度下观测它会得到不同的物理内容.

- 我们讨论重整化就是研究物理系统在不同尺度(空间,时间,动量,能量...)下其物理性质的变化规律.

在当前的例子中,试探电荷$Q_{eff}(r)$是我们关心的物理量,通过考虑电子气体对试探电荷的屏蔽效应,我们得到了$Q_{eff}(r)$随空间的依赖关系,重整化体现在把电子气对试探电荷的相互作用归并到电荷的重新定义,即Q_{eff}.

我们注意到,系统的重整化(群)理论在历史上提出的动机是为解决量子场论微扰计算中出现的圈图发散问题.在很多场合重整化又称为重整化群(renormalization group), 但实际上重整化操作几乎是不可逆的,因此并不适合

称为群这种数学结构.另一方面,群论与重整化的定义和实施相关性不大,因此我们在下面的讨论中仅称之为重整化.

在量子场论中考虑物理过程,例如高能粒子的散射和碰撞问题,若涉及虚粒子的产生和湮灭,那么就会遇到圈图的计算.例如,在$d=4$的四维时空Ψ^4理论中会遇到如下的积分(图6.1(a))

$$I_1=\frac{1}{(2\pi)^4}\int_0^\Lambda\frac{d^4k}{k^2+r}=\frac{S_4}{(2\pi)^4}\int_0^\Lambda\frac{k^3dk}{k^2+r}=\frac{2\pi^2}{(2\pi)^4}\int_0^\Lambda\frac{\frac{k^2}{2}dk^2}{k^2+r}=\frac{\pi^2}{(2\pi)^4}\left(\Lambda^2-r\ln\frac{\Lambda^2+r}{r}\right), \tag{6.37}$$

这个积分可以看作是对Ψ^4理论中参数r的一阶修正($\tilde{r}=r+3uI_1$),然而该积分在$\Lambda\to\infty$时发散(平方发散(Λ^2)和对数发散($\ln\Lambda$)).为了去除这个非物理的发散,场论的做法是引入抵消项,也就是在有效自由能或作用量中引入适当的项来抵消微扰计算中出现的积分发散部分.对于当前的发散积分,在准确到u的一阶修正的情况下,可以引入系数正比于I_1的场平方项Ψ^2,这样系统的有效自由能为

$$f[\Psi]=\frac{1}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2+\frac{u}{4}\Psi^4-\frac{3uI_1}{2}\Psi^2. \tag{6.38}$$

通过这种方式,计算r的一阶修正所产生的发散被抵消项消除,所得的有限r是物理上更为正确的结果.同理,对u 的二阶修正给出($\tilde{u}=u-9u^2I_2$)(图6.1(b))

$$I_2=\frac{1}{(2\pi)^4}\int_0^\Lambda\frac{d^4k}{(k^2+r)^2}=\frac{S_4}{(2\pi)^4}\int_0^\Lambda\frac{\frac{k^2}{2}dk^2}{(k^2+r)^2}=\frac{\pi^2}{(2\pi)^4}\left(\ln\frac{\Lambda^2+r}{r}-\frac{\Lambda^2}{\Lambda^2+r}\right), \tag{6.39}$$

注意到I_2在$\Lambda\to\infty$时有$I_2=-\frac{1}{16\pi^2}+\frac{1}{16\pi^2}\ln\frac{\Lambda^2}{r}$, 因此$I_2$包含有限部分和对数发散部分,有限部分贡献有物理意义的修正,而发散部分可以添加形如$\ln\frac{\Lambda^2}{r}\Psi^4$的抵消项以消除发散.这样可得新的自由能密度

$$f[\Psi]=\frac{1}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2+\frac{u}{4}\Psi^4-\frac{3uI_1}{2}\Psi^2+\frac{9u^2\frac{1}{16\pi^2}\ln\frac{\Lambda^2}{r}}{4}\Psi^4+... \tag{6.40}$$

当然,由于u的修正已经考虑到u的二阶项,因此r的修正也需要计算到二阶,其具体形式在上述自由能中已省略.(即图6.1(c)的贡献,附录中有简要的讨论)在添加抵消项后,我们发现对u 的二阶修正是一个有限值,即$\delta u=\frac{9u^2}{16\pi^2}$,因此有

$$\lim_{\Lambda\to\infty}\tilde{u}=\lim_{\Lambda\to\infty}\left(u-9u^2I_2+\frac{9u^2}{16\pi^2}\ln\frac{\Lambda^2}{r}\right)+\mathcal{O}(u^3)=u+\left(\frac{9}{16\pi^2}u^2-\infty\cdot u^2\right)+\infty\cdot u^2+\mathcal{O}(u^3)=u+\frac{9}{16\pi^2} \tag{6.41}$$

这里括号中的代表二阶修正的结果,括号外的无穷大部分来自抵消项.当然,这里仅仅是计算到二阶修正的结果,我们可能会担心更高阶的修正会有更多的发散类型(当前情况只有平方和对数发散),也会需要更多的抵消项(目前仅有Ψ^2与Ψ^4项).事实上,四维时空的Ψ^4理论只需要三个抵消项就可以抵消微扰论中任意发散的积分,除了这里已经引入的Ψ^2与Ψ^4项,剩下的第三个抵消项是$(\nabla\Psi)^2$.

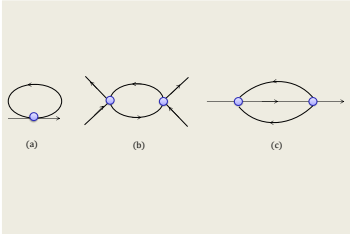


Figure 6.1: 四维Ψ^4理论的发散图形.(a)对r的一阶修正;(b)对λ的一阶修正;(c)对r 的二阶修正,其也会修正动能项$(\nabla\Psi)^2$的系数.

这样,考虑三类抵消项后的Ψ^4理论具有如下一般形式:

$$f[\Psi]=\frac{1}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2+\frac{u}{4}\Psi^4+\frac{C_1}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{C_2}{2}\Psi^2+\frac{C_3}{2}\Psi^4. \tag{6.42}$$

其中系数C_1,C_2,C_3由微扰计算结果决定,例如我们计算到第10阶修正,那么就需要把第一阶到第十阶修正的所有发散都用适当调节的系数C_1,C_2,C_3 来抵消,在抵消发散之后就会得到关于系统参数r,u的有限修正.[8]

- 四维时空的粒子物理标准模型也是可重整的理论,其中研究最清楚的就是电磁相互作用部分,即QED.QED中的圈图发散来自于真空中激发出的具有任意高能量的正负电子对.通过引入抵消项,发散被消除而且可得到有限的辐射修正,例如著名的Lamb移动和电子的反常磁矩[9].

另一方面,我们看到上述理论中的发散实际上来源于大动量的模式,即$\Lambda\to\infty$的那些高能模式.换句话说,当我们接受系统存在一个最大动量模式时,系统参数的修正也会依赖于这个最大动量值.例如当$\Lambda=\Lambda_1$时,我们有$\tilde{r}=r(\lambda_1),\tilde{u}=u(\Lambda_1)$,而考虑另一个尺度$\Lambda_2$ 则有$r(\Lambda_2),u(\Lambda_2)$.这样一个自然的问题就是不同能量尺度下的系统参数有何联系.若Λ可以连续变化,那么我们期待$\tilde{r},\tilde{u}$或$r(\Lambda),u(\Lambda)$也会连续变化,这意味着可以构造如下微分方程:

$$\beta(r)=\frac{dr(\Lambda)}{d\ln\Lambda},\qquad \beta(u)=\frac{du(\Lambda)}{d\ln\Lambda}. \tag{6.43}$$

显然,这些方程告诉我们当系统尺度Λ变化时,系统耦合参数的变化情况.一般我们把它们称为重整化群方程(renormalization group equation),在场论中叫做Gell-Mann Low方程.对于当前的Ψ^4理论,代入之前微扰计算得的$\tilde{r},\tilde{u}$,我们发现

$$\beta(u)=\frac{du}{d\ln\Lambda}=-\frac{9}{8\pi^2}u^2. \tag{6.44}$$

[8]场论中,像四维Ψ^4理论这样仅需要引入有限个抵消项以消除所有圈图积分发散问题的理论称为可重整的理论.

[9]电子的g因子修正为$g=2+\frac{\alpha}{\pi}+\mathcal{O}(\alpha^2)\simeq 2.0023$,$\alpha=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\simeq\frac{1}{137}$

类型	实空间重整化	动量空间重整化	数值重整化
对象	自旋模型	场论	量子杂质问题
精度	低	中	高
例子	一维Ising模型	Ψ^4理论	Kondo模型

Table 6.1: 几类简单的重整化方法.

这里我们已经省略了参数对Λ的依赖.同时,我们注意到临界现象中Λ可取为理论描述的最大允许动量,这实际上对应这种半唯象理论适用的最小空间尺度,一般时体系的晶格尺度.因此高能模式并不导致发散,然而$r = 0$(系统处于临界点)将导致积分I_1, I_2在长波时发散.此时简单的抵消已经不适用,这个红外发散问题将会在下一节讨论的Wilson动量空间重整化理论中得到解决. 在量子场论取得成功之后,KG Wilson认识到场论所采用的重整化手段[10]基本上是处理发散的数学技巧而不能提供对于物理问题的深入理论.他们的理论形式基于Feynman图形的微扰计算,因此仅对相互作用耦合较小的情况适用,对非微扰问题难以奏效.因此,Wilson重新解释了重整化理论并以此来计算相变问题的临界指数和非微扰的Kondo杂质问题,经过许多研究者的共同努力,重整化理论一方面成功计算了临界指数,给出了许多符合实验观测的结果,另一方面也给出了Kondo问题的精确数值解.在接下来的讨论中,我们将着重于重整化理论在凝聚态物理和统计物理系统中的应用.在具体讨论之前,在文献当中实际上会发现很多重整化群相关的技术方法:

1. Kadanoff的实空间重整化(real space renormalization)
2. Wilson动量空间重整化(momentum space renormalization)
3. Wilson数值重整化群(numerical renormalization group)
4. Monte Carlo重整化
5. 密度矩阵重整化群(density matrix renormalization group)
6. 泛函重整化(functional renormalization)
7. 张量网络重整化(tensor network renormalization)

一般而言,(Wilson意义下的)重整化群具有以下三个特点:

- 重组原始模型中的自由度以得到新的低能有效模型;
- 在新模型中高能自由度已经被积掉,其效应被保留;
- 既是一种理解问题的方法也是实际计算的有效工具.

[10]主要归功于Bethe,Schwinger, Tomonaga,Feynman,Dyson等人的努力

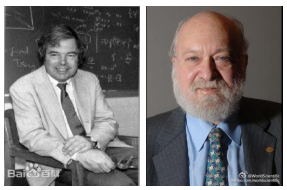


Figure 6.2: Kenneth G. Wilson(1936 – 2013)与Leo P. Kadanoff(1937 – 2015).Wilson因把重正化群的方法用于统计物理学中的临界现象的研究而荣获1982年诺贝尔物理学奖,同时他发明的数值重整化群方法也成功解决了稀磁金属中的Kondo问题.Kadanoff对临界现象最重要的贡献是标度不变形和普适性的概念.统计物理中常用的实空间重整化的decimation(抽取)方案也来自他的早期工作.

需要指出,并不是所有的体系都可以实现高低能自由度的等效退耦,例如满足坐标对易关系$[x^i, x^j] = i\theta^{ij}$的非对易场论就会出现紫外-红外混合现象.这个现象的出现使得Wilson意义下的重整化操作失效.物理研究中,非对易场论已被用于弦论和量子霍尔效应.[11]

从历史的角度来看,早期发展的重整化群主要基于解析型微扰计算,代表性的是$\epsilon = 4 - d$展开. 之后由于计算机计算能力的大幅提高,新一代的重整化群技术从实质上来看都是具体的数值计算算法,其对于一维量子多体问题或弱耦合问题可以得到满意的求解.但对于二维量子多体问题和一般性的强耦合问题,相关的研究仍在进行之中.....

在这里,我们将主要讨论Wilson动量空间重整化的基本内容,而不涉及其他更技术化的问题.在开始讨论动量空间重整化之前,我们先以一维Ising模型为例,简要分析实空间重整化的基本想法.

实空间重整化:Ising自旋链

我们考虑具有$2N$个格点的经典Ising自旋链模型(采用周期边界)[12]

$$H = -J\sum_{j=1}^{2N}\sigma_j\sigma_{j+1} \tag{6.45}$$

每一个Ising自旋被放置在等间距的格点上,记格点间距为a.

现在,让我们重新度量系统,即我们定义一个新的一维晶格,其晶格间距为$b = 2a$,如果假设新系统与旧系统在形式上是一样的,也就是哈密顿量形式是不

[11]关于非对易场论可以参考综述论文[Douglas,Nekrasov,Noncommutative field theory,Rev.Mod.Phys. **73**,977(2001)]

[12]这个一维Ising模型存在精确解,例如可用转移矩阵的方法直接求配分函数.

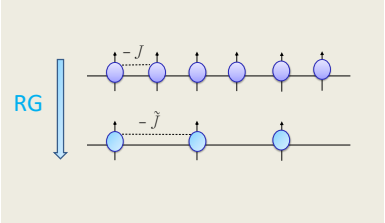


Figure 6.3: 一维经典Ising模型的实空间重整化,随着偶数格点的消除,耦合常数从J重整为$\tilde{J}$.

变,那么最简单的实现方式就是把原先相邻的两个自旋重新定义为一个新的自旋,记为s,相应的哈密顿量应是

$$\tilde{H} = -\tilde{J}\sum_{j=1}^{N} s_j s_{j+1} \tag{6.46}$$

那么$\tilde{J}$与J有何关系呢?可以这样来寻找两者之间的函数关系:首先Ising模型的配分函数是

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} e^{+\beta J\sum_{k=1}^{2N}\sigma_k\sigma_{k+1}} = \sum_{\{\sigma\}} e^{+\beta J\sum_{k=1}^{N}\sigma_{2k}(\sigma_{2k-1}+\sigma_{2k+1})} \tag{6.47}$$

注意指数中对自旋的求和数目前后保持不变.然后我们对偶数格点的Ising自旋求和以消去它们,可以得到

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\sigma}\prod_{k=1}^{N}\sum_{\sigma_{2k}=\pm 1} e^{+\beta J\sigma_{2k}(\sigma_{2k-1}+\sigma_{2k+1})} = \sum_{\sigma}\prod_{k=1}^{N}[e^{+\beta J(\sigma_{2k-1}+\sigma_{2k+1})} + e^{-\beta J(\sigma_{2k-1}+\sigma_{2k+1})}] \\
&= \sum_{\sigma}\prod_{k=1}^{N} 2\cosh(\beta J(\sigma_{2k-1}+\sigma_{2k+1})) = \sum_{\sigma}\prod_{k=1}^{N} e^{\ln[2\cosh(\beta J(\sigma_{2k-1}+\sigma_{2k+1}))]} \\
&= \sum_{\sigma}\prod_{k=1}^{N} e^{\beta\tilde{J}\sigma_{2k-1}\sigma_{2k+1}+c}, \qquad c = \frac{1}{2}\ln[4\cosh(2\beta J)] \\
&= \sum_{\sigma} e^{\beta\tilde{J}\sum_{k=1}^{N}\sigma_{2k-1}\sigma_{2k+1}+\sum_{k=1}^{N}c}, \qquad \tilde{J} = \frac{1}{2\beta}\ln\cosh(2\beta J)
\end{aligned} \tag{6.48}$$

最后我们改写记号可得与原先模型形式完全相同的系统

$$\mathcal{Z} = \sum_{s} e^{\beta\tilde{J}\sum_{j=1}^{N} s_j s_{j+1}+Nc} \tag{6.49}$$

我们发现这里唯一的不同是Ising自旋的耦合常数由J变化成为了$\tilde{J}$

$$\tilde{J} = \frac{1}{2\beta}\ln\cosh(2\beta J) \tag{6.50}$$

注意到在把晶格尺度放大两倍以后(消去偶数格点自旋),晶格自旋减少了一倍,这称为粗粒化操作,也就是把原先的系统不断的舍去细节,得到更为宏观的描述.同时,新自旋间的耦合常数有了上述变化,这称为耦合常数的重整化.可以想象,当我们不断地以2倍的数值放大晶格尺度,耦合常数将不断地以上述方式重整,那么经过无穷多次重整之后耦合常数会如何变化?我们猜测在足够多次重整以后,[13]耦合常数将不会改变,此时上式方程的$\tilde{J} \simeq J$,记为J^*那么有

$$2\beta J^* = \ln\cosh(2\beta J^*) \tag{6.51}$$

当我们以$2\beta J^*$为整体作为变量来分析时,可以发现左边和右边的函数只有一个有限值的交点,(可以用图解法)即$2\beta J^* = 0$, 也就是说系统最后演化的状态是温度为无穷大的状态或者是耦合常数为零的状态,这都对应于完全的无序的状态.物理上,这说明一维经典Ising模型在有限温度下总是处于无序态,没有相变发生.

Wilson动量空间重整化

在具体介绍Wilson动量空间重整化理论之前,我们需要明确一个问题,即相变问题实际上涉及系统的所有能量尺度或空间尺度,我们不能随意扔掉不同尺度的贡献.例如在四维Ψ^4理论中,相互作用u的二阶修正涉及I_2形式的积分,即

$$\int_0^\Lambda \frac{d^4k}{(k^2+r)^2} \sim \ln\frac{\Lambda^2}{r}. \tag{6.52}$$

当$r=0$即系统处于相变点时该积分发散.进一步,我们发现任意能量区间$[\omega, 2\omega]$内的积分

$$\int_\omega^{2\omega} \frac{dk^4}{k^4} = \ln 2. \tag{6.53}$$

这说明任意能量区间的贡献都是相同的,也就是说我们既不能忽略高能的贡献,也不能任意处理低能的贡献,换句话说,相变时所有尺度都有贡献,只有明确处理这个问题才能得到有物理意义的正确的临界行为.[14]

Wilson动量空间重整化所实际考虑的问题是当我们逐步降低系统的能量尺度,也就是系统激发所能处于的能量区间越来越小时,系统耦合参数(例如质量,相互作用强度,外场等)在这种情况下的变化.在降低能量尺度的同时,高能模式的影响也需要计入,理论上可以通过积掉高能模式来实现,实际处理时往往采用微扰

[13]对于有限自旋问题,足够多次重整以后系统可以看做只有两个等效自旋,此时重整化过程停止,分析这两自旋问题就可以得到系统的整体性质,这说明足够多次重整可以得到的是系统的某种宏观状态

[14]另一类例子是Kondo杂质问题中碰到的对数行为$\int_T^D \frac{d\omega}{\omega} = \ln\frac{D}{T}$,这里$D$ 是能带半宽,T是温度.与相变的例子一样,不仅费米能附近的状态有贡献,高能的状态也有同样的贡献,因此把Kondo杂质问题理解为仅由费米面附近电子主导是不正确的.物理上这个著名的对数行为加上声子对电阻的贡献给出了稀磁金属中电阻的极小现象,而$T \to 0$的发散则意味着标准微扰理论的失效,其正确的低温行为由Wilson的数值重整化所解决.

展开的近似处理.积掉高能模式会产生各种相互作用,那些与原始理论一致的相互作用类型可以吸收到系统耦合参数的重新定义当中.进一步,对于临界系统,低能尺度下人们看到的物理应该与高能下看到的至少在形式上是一致的.[15]因此,这要求我们把低能理论重新改写成高能理论形式一致的样子,这通过重新标记动量,耦合参数以及场本身来实现,也就是重整化的操作.经过这类重整化处理,系统新的耦合参数表示为旧参数的函数.若函数性质良好,那么就可以定义该函数对应的微分方程,即前面介绍场论重整化时提到的重整化群方程.该方程提供了耦合参数在我们连续改变能量尺度时的变化情况.

下面,让我们开始动量空间重整化的具体讨论.

Wilson动量空间重整化的第一步:选择研究的系统

对于纯粹的经典统计问题,一般我们直接选择相应的自由能或者能量.而对于量子系统,需要先把量子哈密顿量转化为作用量,[16]研究相应的配分函数.

在这里,我们以单分量Landau理论(场论中称为单分量Ψ^4模型)的自由能为例:

$$\boxed{\mathcal{Z}=\int D\Psi e^{-\int d^dx f_{GL}[\Psi]},\quad f_{GL}[\Psi]=\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2+\frac{u}{4}\Psi^4} \tag{6.54}$$

Wilson动量空间重整化的第二步:划分高低能部分

对序参量Ψ做傅里叶变换有(动量积分上下限理解为动量的绝对值)

$$\Psi(x)=\int_0^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{ikx}\Psi(k)=\int_0^{\Lambda/b}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{ikx}\Psi(k)+\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}e^{ikx}\Psi(k)\equiv\Psi_<(x)+\Psi_>(x) \tag{6.55}$$

在这里,我们首先限制动量最大取值为Λ并引入标度因子$b>1$.然后将所有序参量模式分解为低能部分,即动量范围在$[0,\Lambda/b]$的模式,以及高能模式$k\in[\Lambda/b,\Lambda]$.在实空间,我们用$\Psi_<(x)$和$\Psi_>(x)$分别表示这两种模式.而在动量空间中也有类似的表示形式$\Psi_<(k)$和$\Psi_>(k)$. 这样有

$$\begin{aligned}\int d^dx\left(\frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2+\frac{r}{2}\Psi^2\right) &= \int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{s}{2}k^2+\frac{r}{2}\right)|\Psi(k)|^2\\ &= \int_0^{\Lambda/b}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{s}{2}k^2+\frac{r}{2}\right)|\Psi(k)|^2+\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{s}{2}k^2+\frac{r}{2}\right)|\Psi(k)|^2\\ &= \int d^dx\left(\frac{s}{2}(\nabla\Psi_<)^2+\frac{r}{2}\Psi_<^2\right)+\int d^dx\left(\frac{s}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2\right)\end{aligned} \tag{6.56}$$

事实上,上述结果也可以直接把$\Psi(x)=\Psi_<(x)+\Psi_>(x)$代入并舍去交叉项$\Psi_>\Psi_<$而

[15]非临界的系统则没有这种要求,例如Hubbard模型的低能模型,如$t-J$模型就与原始模型差别甚大.

[16]可以通过路径积分实现

得到,这里舍去交叉项是因为两者傅里叶变换后是

$$\int d^dx\Psi_>(x)\Psi_<(x)=\int d^dx\int_0^{\Lambda/b}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}e^{i(k+k')x}\Psi_>(k')\Psi_<(k) \tag{6.57}$$

对空间坐标x积分后可得$2\pi\delta(k+k')$,但是$|k|\in[0,\Lambda/b]$,而$|k'|\in[\Lambda/b,\Lambda]$,这样$\delta$函数必为零,这导致交叉项为零.同理,$\Psi^4$项展开后包含$\Psi_<$或$\Psi_>$奇数次项也会因为动量不匹配(守恒)而自动为零.

这样,自由能密度可写为如下形式(所有奇数次项如$\Psi_<\Psi_>^3,\Psi_<^3\Psi_>$由于动量守恒并不出现)

$$f_{GL}[\Psi]=\frac{s}{2}(\nabla\Psi_<)^2+\frac{r}{2}\Psi_<^2+\frac{u}{4}\Psi_<^4+\frac{s}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2+\frac{u}{4}\Psi_>^4+\frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2 \tag{6.58}$$

前三项代表低能部分,第四至第六项则是高能部分,最后一项是高能-低能耦合部分.毫无疑问,理论处理的困难就在于最后这个高低能耦合项,如果这一项数值上较小,那么微扰处理是有可能的.

Wilson动量空间重整化的第三步:积掉高能部分

显然,由于耦合项的出现,严格积掉高能自由度是无法完成的任务,实际处理几乎都是采用微扰法来近似估计低阶修正的影响.对于当前而言,我们研究最简单的情况,就是无相互作用,即$u=0$的问题,文献中也称作Gauss模型.

$$\begin{aligned}F_{GL}[\Psi] &= \int d^dx\left[\frac{s}{2}(\nabla\Psi_<)^2+\frac{r}{2}\Psi_<^2+\frac{s}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2\right]\\ &= \int_0^{\Lambda/b}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{s}{2}k^2+\frac{r}{2}\right)|\Psi_<(k)|^2+\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{s}{2}k^2+\frac{r}{2}\right)|\Psi_>(k)|^2\\ &\equiv F_{GL}[\Psi_<]+F_{GL}[\Psi_>]\end{aligned} \tag{6.59}$$

积掉高能模式,我们得到

$$\mathcal{Z}=\int D\Psi_<e^{-F_{GL}[\Psi_<]}\int D\Psi_>e^{-F_{GL}[\Psi_>]}=\int D\Psi_<e^{-F_{GL}[\Psi_<]}\prod_{k=\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{2\pi}{sk^2+r} \tag{6.60}$$

可以看到高能部分仅仅是贡献一个非奇异的常数,因而并不对低能部分有实际的影响.这样,低能下的自由能就是先前高低能分解得到的$F[\Psi_<]$:

$$F_{GL}[\Psi_<]=\int_0^{\Lambda/b}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{s}{2}k^2+\frac{r}{2}\right)|\Psi_<(k)|^2 \tag{6.61}$$

Wilson动量空间重整化的第四步:重标场,动量...

在原始理论中,自由能表达式是

$$F_{GL}[\Psi]=\int_0^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{s}{2}k^2+\frac{r}{2}\right)|\Psi(k)|^2 \tag{6.62}$$

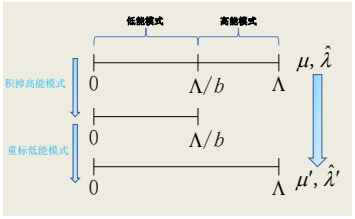


Figure 6.4: 通过积掉高能模式并重标低能模式的操作,动量空间重整化的结果是相当于重标了耦合常数$\mu, \hat{\lambda}$,并导致相关耦合常数随截断b演化的方程,即重整化群流方程.

与$F_{GL}[\Psi_<]$对比,我们发现为了使低能理论的形式与原始理论一致,首先必须重标或者重新定义动量,即 $k = k'/b$,这样对于新动量k'而言其取值范围又成为$[0, \Lambda]$.当然,如果是实空间的坐标x,则需要重标为$x' = \frac{x}{b}$,这在物理上相当于把系统的晶格间距a放大到ab,显然,此时系统的关联长度ξ自然也会重标为$\xi' = \xi/b$.

此时我们有:

$$F_{GL}[\Psi_<] = \int_0^\Lambda \frac{d^d k'}{b^d} \left(\frac{s}{2} \frac{k'^2}{(2\pi)^d b^2} + \frac{r}{2} \right) \left| \Psi_< \left(\frac{k'}{b} \right) \right|^2 \tag{6.63}$$

进一步,我们假定参数s并不需要重标,那么此时如果定义$r' = b^2 r$以及

$$\Psi_<(k) = \Psi_< \left(\frac{k'}{b} \right) = b^{\frac{d+2}{2}} \Psi'_<(k') \tag{6.64}$$

那么重标以后的自由能为

$$F_{GL}[\Psi_<] = \int_0^\Lambda \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} \left(\frac{s}{2} k'^2 + \frac{r'}{2} \right) |\Psi_<(k')|^2 \tag{6.65}$$

注意到此时重标的低能自由能与原始理论一致,只不过动量k,常数r和序参量场$\Psi_<$重标为 k', r'和$\Psi'_<$.

- 这种重标实际上就是重整化的体现,即考虑高能自由度的影响后,低能物理模型的参数会有相应的修改,也就是对参数进行重整化.

Wilson动量空间重整化的第五步:分析标度行为与重整化方程

在积掉高能模式后,对于参数r的重整化是

$$r' = b^2 r \tag{6.66}$$

这表明当我们不断的积掉高能自由度时,体系的参数r会不断发生改变.由于标度因子$b > 1$,对于当前的问题而言初始时一个正的r会向$+\infty$不断接近;而一个

负的r 则在重整化变换下流向$-\infty$. 我们已经知道$r' \to +\infty$对应高温的无序态,而$r' \to -\infty$对应低温的有序态.显然初始的$r = 0$ 是一个临界点,对应的就是相变点.注意到任何$r = 0$附近的点都会离开这个临界点,我们一般称这样的点为重整化群的不稳定不动点(unstable fixed point), 而像$\pm\infty$这样的点,在其附近都会流向该点,故而又称为稳定的不动点(stable fixed point).

另一方面,为了便于理论分析,我们将推导重整化群方程.首先,我们有

$$r' = b^2 r = e^{2\ln b} r \simeq (1 + 2\ln b) r \tag{6.67}$$

定义所谓的β函数

$$\beta(r) = \frac{dr'}{d\ln b} = 2r \tag{6.68}$$

显然如果系统有更多重整化的参数,那么对每一个都应有相应的重整化群方程或β 函数.

当$\beta(r) = 0$时,此时得到的是有限值下的重整化群不动点,对于当前问题,就是$r^* = 0$.为了分析不动点的稳定性,需要在不动点附近展开β函数:

$$\boxed{\beta(r) = \frac{dr'}{d\ln b} \simeq \beta(r^*) + (r - r^*)\frac{\partial\beta(r)}{\partial r}|_{r=r^*} = (r - r^*)\frac{\partial\beta(r)}{\partial r}|_{r=r^*}} \tag{6.69}$$

对于这里的情况,我们考虑$r^* = 0$的稳定性,则有

$$\beta(r) = \frac{dr}{d\ln b} \simeq 2r \tag{6.70}$$

当b逐渐增加时,r不断增大,即远离这个不动点,表明不动点是不稳定不动点.

既然我们已经断定$r^* = 0$是相变点,那么在这附近对β函数积分有:

$$\frac{dr}{d\ln b} \simeq 2r \Rightarrow \frac{dr}{r} = 2d\ln b \Rightarrow \int_{r(b=1)=r_0}^{r(b)=\tilde{r}} \frac{dr}{r} = \int_{b=1}^{b} 2d\ln b \tag{6.71}$$

我们发现

$$\ln\frac{\tilde{r}}{r_0} = 2\ln b \Rightarrow \tilde{r} = r_0 b^2 \tag{6.72}$$

注意到标度因子$b = \xi/\tilde{\xi}$,ξ是未作重整化的原始理论的关联长度,那么有

$$\xi \propto (\tilde{r}/r_0)^{1/2} \propto r_0^{-1/2} \tag{6.73}$$

注意到r_0表示原始理论中相对于相变点$r^* = 0$的偏离,($r_0 \sim T - T_c$)那么根据关联长度的定义$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}$有 $\nu = 1/2$.

- 我们说一个系统是否在相变附近是基于裸的,也就是原始理论来讲的,而不是重整化之后的低能理论.

由于体系实际上是一个自由理论,那么其反常维度自然为零$\eta = 0$.对于其他临界系数,例如δ, 可以在原始自由能密度中加入外场项$-h\Psi$,即

$$-h\int d^d x\Psi = -h\Psi(k = 0) \tag{6.74}$$

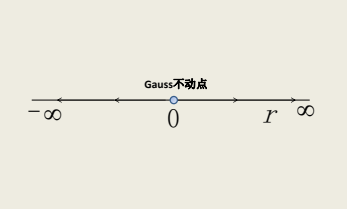


Figure 6.5: Gauss不动点附近的流图,不动点位于$r=0$处,重整化群流从该不稳定不动点流向$r=\pm\infty$的稳定不动点.

由于是自由理论,那么外场部分在积掉高能模式后形式不变,唯一的差别在于$\Psi(k=0)$是低能模式,这样我们只需要把这一项重标即可,即有

$$-h\Psi(k=0)=-hb^{\frac{d+2}{2}}\Psi'_<(k'=0)=-h'\Psi'_<(k'=0) \tag{6.75}$$

这里定义了$h'=b^{\frac{d+2}{2}}h$,对应的β函数是

$$\beta(h)=\frac{dh'}{d\ln b}=\left(1+\frac{d}{2}\right)h \tag{6.76}$$

此时,整个理论(包含$\beta(r)$)的有限值不动点是$(r^*=0,h^*=0)$,这显然是不稳定不动点.在该点附近展开并积分有

$$\frac{h}{h_0}=b^{\frac{d+2}{2}}\Rightarrow h\propto\xi^{\frac{d+2}{2}}\propto(T-T_c)^{-v(d+2)/2}=(T-T_c)^{-x}\Rightarrow x=\frac{d+2}{4} \tag{6.77}$$

在以上推导中,我们已使用了推导标度律时假设的关系$h/(T-T_c)^x\sim 1$,这样利用x可以得到其他临界指数:

$$\alpha=\frac{4-d}{2},\quad \beta=\frac{d-2}{4},\quad \gamma=1,\quad \delta=\frac{d+2}{d-2} \tag{6.78}$$

- 通过Wilson动量空间重整化引入了稳定与不稳定不动点以及重整化群方程,分析这些方程可以获得临界指数的具体数值.

Ψ^4模型与$\epsilon=4-d$展开

现在,让我们考虑$u\neq 0$的情况,此时高低能模式分离后的有效自由能密度为

$$f_{GL}[\Psi]=\frac{1}{2}(\nabla\Psi_<)^2+\frac{r}{2}\Psi_<^2+\frac{u}{4}\Psi_<^4+\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2+\frac{u}{4}\Psi_>^4+\frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2 \tag{6.79}$$

显然,为了得到高能模式对低能模式的贡献,我们需要积掉$\Psi_>$部分.但是由于Ψ^4项的存在,我们只能微扰得处理.我们从配分函数出发,

$$\mathcal{Z}=\int D\Psi_< e^{-F_{GL}[\Psi_<]}\int D\Psi_> e^{-F_{GL}[\Psi_>]} \tag{6.80}$$

这里

$$F_{GL}[\Psi_<] = \int d^dx \left[\frac{1}{2}(\nabla\Psi_<)^2 + \frac{r}{2}\Psi_<^2 + \frac{u}{4}\Psi_<^4\right] \tag{6.81}$$

$$F_{GL}[\Psi_>] = \int d^dx \left[\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2 + \frac{r}{2}\Psi_>^2 + \frac{u}{4}\Psi_>^4 + \frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2\right]. \tag{6.82}$$

让我们对$e^{-F_{GL}[\Psi_>]}$关于u展开:

$$\begin{aligned} e^{-F_{GL}[\Psi_>]} &= e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)} e^{-\int d^dx(\frac{u}{4}\Psi_>^4+\frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2)} \\ &= e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)} \times (1 - \int d^dx \left(\frac{u}{4}\Psi_>^4 + \frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2\right) \\ &\quad + \frac{1}{2}\int d^dx \left(\frac{u}{4}\Psi_>^4 + \frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2\right)\int d^dy \left(\frac{u}{4}\Psi_>^4 + \frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2\right) + ...) \\ &= e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)} \times (1 + \mathcal{O}(u) + \mathcal{O}(u^2) + ...) \end{aligned} \tag{6.83}$$

这样得到了关于u的展开.首先让我们考虑u的零级项.显然,零级项不包含低能模式$\Psi_<$,因此低能部分形式不发生变化,对其做傅里叶变换有

$$\begin{aligned} F_{GL}[\Psi_<] &= \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{k^2}{2} + \frac{r}{2}\right)|\Psi_<(k)|^2 + \frac{u}{4}\int \frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\int \frac{d^dk_2}{(2\pi)^d}\int \frac{d^dk_3}{(2\pi)^d}\int \frac{d^dk_4}{(2\pi)^d} \\ &\quad \times \int d^dx e^{i(k_1+k_2+k_3+k_4)x}\Psi_<(k_1)\Psi_<(k_2)\Psi_<(k_3)\Psi_<(k_4) \end{aligned} \tag{6.84}$$

让我们仿照$u=0$的情况进行重标,即$k' = bk, x' = x/b, r' = b^2r, \Psi = b^{\frac{d+2}{2}}\Psi'$,这样可得:

$$\begin{aligned} F_{GL}[\Psi_<] &= \int \frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\left(\frac{k'^2}{2} + \frac{r'}{2}\right)|\Psi'_<(k')|^2 + \frac{u}{4}\frac{1}{b^{4d}}b^db^{2(d+2)}\int \frac{d^dk'_1}{(2\pi)^d}\int \frac{d^dk'_2}{(2\pi)^d}\int \frac{d^dk'_3}{(2\pi)^d}\int \frac{d^dk'_4}{(2\pi)^d} \\ &\quad \times \int d^dx' e^{i(k'_1+k'_2+k'_3+k'_4)x'}\Psi'_<(k'_1)\Psi'_<(k'_2)\Psi'_<(k'_3)\Psi'_<(k'_4) \end{aligned} \tag{6.85}$$

这样只要重新定义u为新的u',

$$u' = \frac{1}{b^{4d}}b^db^{2(d+2)}u = b^{4-d}u. \tag{6.86}$$

现在,让我们考虑对u的一阶项,

$$\int D\Psi_> e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)} \times \left(-\int d^dx \left(\frac{u}{4}\Psi_>^4 + \frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2\right)\right)$$

注意到括号中的第一项不含低能模式,因此其仅贡献常数而在计算r, u修正时可以忽略,这样我们需要考虑第二项:

$$\int D\Psi_> e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)} \left(-\int d^dx \frac{u}{4}6\Psi_<^2\Psi_>^2\right) = -\int d^dx \frac{u}{4}6\Psi_<^2\langle\Psi_>^2\rangle_0\mathcal{Z}_0$$

这里定义了

$$\mathcal{Z}_0 = \int D\Psi_> e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)} \tag{6.87}$$

以及平均$\langle ...\rangle_0 = \int D\Psi_> e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)}(...)/\int D\Psi_> e^{-\int d^dx(\frac{1}{2}(\nabla\Psi_>)^2+\frac{r}{2}\Psi_>^2)}$.
这样有

$$\begin{aligned}-\int d^dx\frac{u}{4}6\Psi_<^2\langle\Psi_>^2\rangle_0\mathcal{Z}_0 &= \mathcal{Z}_0\int\frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_3}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_4}{(2\pi)^d}\frac{-u}{4}6\int d^dxe^{i(k_1+k_2)x}e^{i(k_3+k_4)x}\\ &\times\Psi_<(k_1)\Psi_<(k_2)\langle\Psi_>(k_3)\Psi_>(k_4)\rangle_0 \qquad (6.88)\end{aligned}$$

注意到上式中出现对高能模式的平均,其平均实际上是Gauss积分,容易得到

$$\langle\Psi_>(k_3)\Psi_>(k_4)\rangle_0 = \frac{1}{k_3^2+r}(2\pi)^d\delta(k_3+k_4) \qquad (6.89)$$

这样对k_4的积分可以消去,同时对x的积分给出$(2\pi)^d\delta(k_1+k_2)$,这样对k_2的积分也可以消去,我们得到

$$-\int d^dx\frac{u}{4}6\Psi_<^2\langle\Psi_>^2\rangle_0\mathcal{Z}_0 = \mathcal{Z}_0\int\frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\left(\frac{-u}{4}6\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk_3}{(2\pi)^d}\frac{1}{k_3^2+r}\right)\Psi_<(k_1)\Psi_<(-k_1)$$

注意到我们明确地写出对k_3的积分是高能模式的积分.这样如果我们把这一项看作是e指数展开的一阶项,那么重新指数化后有

$$\mathcal{Z}_0 e^{-\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{u}{4}6\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\frac{1}{k'^2+r}\right)|\Psi_<|^2}$$

把这一部分与低能模式$e^{-F_{GL}[\Psi_<]}$结合在一起可以看到,我们可以把这一项看作是$r/2|\Psi_<|^2$项的修正,这样相当于重新定义$\tilde{r}$:

$$\tilde{r} = r + \frac{u}{4}12\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\frac{1}{k'^2+r}. \qquad (6.90)$$

同理,我们也可以计算对u的修正,此时需要考虑的是展开中的u^2项,并且需要包含$\Psi_<^4$,那么相应的项为

$$\begin{aligned}&\frac{\mathcal{Z}_0}{2}\int d^dx\left(\langle\frac{u}{4}6\Psi_<^2(x)\Psi_>^2(x)\right)\int d^dy\left(\frac{u}{4}6\Psi_<^2(y)\Psi_>^2(y)\rangle_0\right)\\ &=\frac{\mathcal{Z}_0}{2}\int d^dxd^dy\frac{u^2}{4^2}6^2\langle\Psi_>^2(x)\Psi_>^2(y)\rangle_0\Psi_<^2(x)\Psi_<^2(y)\\ &=\frac{\mathcal{Z}_0}{2}\int d^dxd^dy\frac{u^2}{4^2}6^2\int\frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_3}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_4}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_1'}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2'}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_3'}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_4'}{(2\pi)^d}\\ &\times e^{i(k_1+k_2+k_3+k_4)x}e^{i(k_1'+k_2'+k_3'+k_4')y}\\ &\times\Psi_<(k_1)\Psi_<(k_2)\Psi_<(k_1')\Psi_<(k_2')\langle\Psi_>(k_3)\Psi_>(k_4)\Psi_>(k_3')\Psi_>(k_4')\rangle_0\end{aligned}$$

注意到四场的平均值可以分解为三项,

$$\begin{aligned}&\langle\Psi_>(k_3)\Psi_>(k_4)\Psi_>(k_3')\Psi_>(k_4')\rangle_0 = \langle\Psi_>(k_3)\Psi_>(k_4)\rangle_0\langle\Psi_>(k_3')\Psi_>(k_4')\rangle_0\\ &+\langle\Psi_>(k_3)\Psi_>(k_3')\rangle_0\langle\Psi_>(k_4)\Psi_>(k_4')\rangle_0+\langle\Psi_>(k_3)\Psi_>(k_4')\rangle_0\langle\Psi_>(k_4)\Psi_>(k_3')\rangle_0\end{aligned}$$

这样可以消去两个对动量的积分,注意到第一项使得$k_3+k_4=0$,这样关于x的指数因子与低能模式的$F_{GL}[\Psi_<]$不相同,因此该项舍去.剩下两项贡献相同,这样我们有

$$\begin{aligned}&\frac{\mathcal{Z}_0}{2}\int d^dx\left(\langle\frac{u}{4}6\Psi_<^2(x)\Psi_>^2(x)\right)\int d^dy\left(\frac{u}{4}6\Psi_<^2(y)\Psi_>^2(y)\rangle_0\right)\\&=\frac{\mathcal{Z}_0}{2}\int d^dxd^dy\frac{u^2}{4^2}6^22\int\frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_3}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_4}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_1'}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2'}{(2\pi)^d}\\&\times e^{i(k_1+k_2+k_3+k_4)x}e^{i(k_1'+k_2'-k_3-k_4)y}\Psi_<(k_1)\Psi_<(k_2)\Psi_<(k_1')\Psi_<(k_2')\frac{1}{k_3^2+r}\frac{1}{k_4^2+r}\end{aligned}$$

对y积分消去k_4可得

$$\begin{aligned}&\frac{\mathcal{Z}_0}{2}\int d^dx\left(\langle\frac{u}{4}6\Psi_<^2(x)\Psi_>^2(x)\right)\int d^dy\left(\frac{u}{4}6\Psi_<^2(y)\Psi_>^2(y)\rangle_0\right)\\&=\mathcal{Z}_0\int d^dx\frac{u^2}{4^2}6^2\int\frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_1'}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2'}{(2\pi)^d}\\&\times e^{i(k_1+k_2-k_1'-k_2')x}\Psi_<(k_1)\Psi_<(k_2)\Psi_<(k_1')\Psi_<(k_2')\int\frac{d^dk_3}{(2\pi)^d}\frac{1}{k_3^2+r}\frac{1}{(k_1'+k_2'-k_3)^2+r}\end{aligned}$$

令$k_3=k'$并且分母中的$k_1'+k_2'=0,k_1'\to-k_1',k_2'\to-k_2'$ 则有

$$\begin{aligned}&\frac{\mathcal{Z}_0}{2}\int d^dx\left(\langle\frac{u}{4}6\Psi_<^2(x)\Psi_>^2(x)\right)\int d^dy\left(\frac{u}{4}6\Psi_<^2(y)\Psi_>^2(y)\rangle_0\right)\\&=\mathcal{Z}_0\int d^dx\frac{u^2}{4^2}36\int\frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_1'}{(2\pi)^d}\frac{d^dk_2'}{(2\pi)^d}\\&\times e^{i(k_1+k_2+k_1'+k_2')x}\Psi_<(k_1)\Psi_<(k_2)\Psi_<(k_1')\Psi_<(k_2')\int\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\frac{1}{(k'^2+r)^2}\end{aligned}$$

然后把上式除$\mathcal{Z}_0$外重新指数化,可以看到其效果相当于重新定义u,

$$\tilde{u}=u-\frac{u^2}{4}36\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\frac{1}{(k'^2+r)^2}\tag{6.91}$$

这样我们发现考虑$u\neq0$的修正后的低能模式为

$$\begin{aligned}F_{GL}[\Psi_<]\quad=\quad&\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{k^2}{2}+\frac{\tilde{r}}{2}\right)|\Psi_<(k)|^2+\frac{\tilde{u}}{4}\int\frac{d^dk_1}{(2\pi)^d}\int\frac{d^dk_2}{(2\pi)^d}\int\frac{d^dk_3}{(2\pi)^d}\int\frac{d^dk_4}{(2\pi)^d}\\&\times\int d^dxe^{i(k_1+k_2+k_3+k_4)x}\Psi_<(k_1)\Psi_<(k_2)\Psi_<(k_3)\Psi_<(k_4)\end{aligned}\tag{6.92}$$

最后我们重标$k,\tilde{r},\tilde{u},\Psi$可得

$$r'=b^2\tilde{r}=b^2\left(r+\frac{u}{4}12\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\frac{1}{k'^2+r}\right),\tag{6.93}$$

$$u'=b^{4-d}\tilde{u}=b^{4-d}\left(u-\frac{u^2}{4}36\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk'}{(2\pi)^d}\frac{1}{(k'^2+r)^2}\right).\tag{6.94}$$

注意上式中的b的幂次因子来自于重标,而积分部分来自微扰地排除高能模式.因此,与高能模式地耦合实际上改变了低能模式的耦合参数.这样,我们通过标准的Wilson方法得到了耦合参数r,u 的迭代关系.当然,更直接的是利用费曼图进行计算并注意到圈图部分仅涉及高能模式(相关的计算涉及图 6.1(a)和(b)类型的图形)

现在,让我们直接计算迭代关系中的积分,既然主要关心的是临界点附近的行为,那么积分中的r可以取为零,则有:

$$\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2}=\frac{S_d}{(2\pi)^d}\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}dkk^{d-1}\frac{1}{k^2}=\frac{S_d}{(2\pi)^d}\left(\frac{\Lambda^{d-2}}{d-2}(1-b^{2-d})\right)=\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d}\frac{1-e^{(2-d)\ln b}}{d-2}$$

在上式中我们对e指数进行展开,则有

$$\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2}\simeq\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d}\frac{1-1-(2-d)\ln b}{d-2}=\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d}\ln b \tag{6.95}$$

同理有

$$\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{(k^2)^2}=\frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{\Lambda^{d-4}}{d-4}(1-b^{4-d})\approx\frac{S_d\Lambda^{d-4}}{(2\pi)^d}\ln b. \tag{6.96}$$

因此迭代关系简化为

$$r'=b^2\left(r+3u\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d}\ln b\right), \tag{6.97}$$

$$u'=b^{4-d}\left(u-9u^2\frac{S_d\Lambda^{d-4}}{(2\pi)^d}\ln b\right). \tag{6.98}$$

我们发现对于r',其缺少r^2项,这实际上会导致相应不动点出现问题.因此,我们需要对积分$\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2+r}$ 更仔细地处理,一个直接的方式是保留到r的一阶项,这可以通过如下方式实现,即

$$\begin{aligned}\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2+r} &= \int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2+r}-\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2}+\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2}\\ &= \int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{1}{k^2+r}-\frac{1}{k^2}\right)+\int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{k^2}\\ &\approx \int_{\Lambda/b}^{\Lambda}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{-r}{k^4}+\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d}\ln b\\ &\simeq -r\frac{S_d\Lambda^{d-4}}{(2\pi)^d}\ln b+\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d}\ln b\end{aligned} \tag{6.99}$$

这样有

$$r'=b^2\left(r-3ru\frac{S_d\Lambda^{d-4}}{(2\pi)^d}\ln b+3u\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d}\ln b\right), \tag{6.100}$$

通常我们舍去仅包含u的部分,(物理上这相当于重新定义r的零点,即裸的临界点位置)这样关于r' 的方程成为

$$r'=b^2r\left(1-3u\frac{S_d\Lambda^{d-4}}{(2\pi)^d}\ln b\right), \tag{6.101}$$

定义$\hat{u}=u\frac{S_d\Lambda^{d-4}}{(2\pi)^d}$,这样有

$$r'=b^2r(1-3\hat{u}\ln b), \tag{6.102}$$

$$\hat{u}'=b^{4-d}(\hat{u}-9\hat{u}^2\ln b). \tag{6.103}$$

然后我们利用$b^x=e^{x\ln b}\simeq 1+x\ln b$,那么上述两式成为:

$$r(b)=r'=(1+2\ln b)r(1-3\hat{u}\ln b)=r+(2-3\hat{u})r\ln b+\mathcal{O}(\ln^2 b), \tag{6.104}$$

$$\hat{u}(b)=\hat{u}'=(1+(4-d)\ln b)(\hat{u}-9\hat{u}^2\ln b)=\hat{u}+((4-d)\hat{u}-9\hat{u}^2)\ln b+\mathcal{O}(\ln^2 b). \tag{6.105}$$

那么相应的重整化群方程为

$$\beta(r)=\frac{dr(b)}{d\ln b}=(2-3\hat{u})r \tag{6.106}$$

$$\beta(\hat{u})=\frac{d\hat{u}(b)}{d\ln b}=\epsilon\hat{u}-9\hat{u}^2 \tag{6.107}$$

注意到我们已经把所有的$4-d$写为ϵ.

令β函数为零,我们得到两个不动点$(r^*_G=0,\hat{u}^*_G=0)$ 和 $(r^*_{WF}=0,\hat{u}^*_{WF}=\epsilon/9)$,前者称为Gauss不动点,后者则叫做Wilson-Fisher不动点.

为了分析不动点的稳定性,我们在不动点附近展开β函数

$$\beta(r)\approx(r-r^*)(2-3\hat{u}^*)-3r^*(\hat{u}-\hat{u}^*) \tag{6.108}$$

$$\beta(\hat{u})\approx(\hat{u}-\hat{u}^*)(\epsilon-18\hat{u}^*) \tag{6.109}$$

在Gauss不动点附近,我们得到

$$\beta(r)=\frac{dr}{d\ln b}\approx 2r \tag{6.110}$$

$$\beta(\hat{u})=\frac{d\hat{u}}{d\ln b}\approx\epsilon\hat{u} \tag{6.111}$$

显然,在r方向,重整化群流远离Gauss不动点,在$\hat{u}$方向,当$d>4$也就是$\epsilon<0$时,体系流向该不动点.而当$d<4(\epsilon>0)$,体系远离该不动点.换句话说当空间维度大于4时,Gauss不动点是一个描述相变的不稳定不动点,而当维度小于四时,其完全不稳定,不描述物理上稳定的状态和相变.

在Wilson-Fisher不动点附近,可得

$$\beta(r)=\frac{d\hat{r}}{d\ln b}\approx(2-\epsilon/3)r \tag{6.112}$$

$$\beta(\hat{u})=\frac{d\hat{u}}{d\ln b}\approx(\hat{u}-\epsilon/9)(-\epsilon) \tag{6.113}$$

显然,在r方向,在物理上感兴趣的空间维度内,其重整化群流远离该不动点,在$\hat{u}$方向,重整化群流与Gauss不动点刚好相反,即小于四维时是流向该不动点而大于四

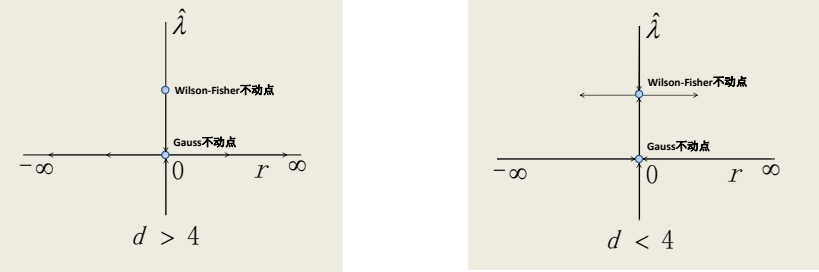


Figure 6.6: Ψ^4模型在$\epsilon = 4 - d$展开下Wilson-Fisher不动点和Gauss不动点附近的重整化群流情况.在$d > 4$时Wilson-Fisher不动点是非物理的,物理的不动点是Gauss不动点,而在$d < 4$时,系统流向Wilson-Fisher不动点,该不动点描述了相变的性质.

维时则远离不动点.这表明WF不动点在小于四维时是一个相变点而大于四维时则没有实际物理意义.

我们假定相变由Wilson-Fisher不动点描述,那么对第一个β函数积分可得

$$\frac{\tilde{r}}{r_0} \propto \xi^{2-\epsilon/3} \Rightarrow \xi \propto r_0^{-\frac{1}{2-\epsilon/3}} \tag{6.114}$$

此时对应的关联长度临界指数为$\nu = \frac{1}{2(1-\epsilon/6)}$.当$d = 3$即$\epsilon = 1$时,$\nu = 0.6$对比平均场指数$\nu = 0.5$更接近三维Ising模型的结果0.63. 此外,强行推至$d = 2$给出$\nu = 0.75$更接近Ising模型精确解的结果$\nu = 1$.

- 考虑最低阶相互作用并采用$\epsilon = 4 - d$展开,我们发现Ψ^4模型具有新的不稳定不动点,即Wilson-Fisher不动点,在该不动点附近的计算改进了平均场的临界指数的结果.

进一步,对于$O(N)$矢量的情况,$F_{GL} = \int d^d x[\frac{1}{2}(\nabla\vec{\Phi})^2 + \frac{r}{2}\vec{\Phi}^2 + u\vec{\Phi}^4]$, 微扰重整化给出 $\nu = \frac{1}{2(1-\epsilon(N+2)/2(N+8))}$.对$N = 2$的情况有$\nu = 0.625$,这与He-4实验的测量值$\nu = 0.670$ 较为接近.

实际上,微扰重整化方法能够算清楚的模型也就是这里提到的ϕ^4模型,下面讨论的非线性sigma模型以及下一章的XY模型.至于其他类似的模型,计算的方法也是类似的,当然对于相互作用费米子问题,其处理更为复杂,也是目前研究的热点问题.

$O(3)$非线性sigma模型与$d = 2 + \epsilon$展开*

在这一节,我们考虑经典$O(3)$非线性sigma模型:

$$F = \frac{1}{2\rho}\int d^d x(\nabla\vec{m})^2, \quad \vec{m}^2 = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1 \tag{6.115}$$

$$\mathcal{Z} = \int D\vec{m}\delta(\vec{m}^2 - 1)e^{-F} \tag{6.116}$$

这里ρ是常数,也是该模型的耦合系数.$\vec{m}$是有三个实分量的单位矢量,可以看作是经典意义下的单位磁化矢量.这里的非线性一词来源于积分测度中对于$\vec{m}$ 是单位矢量的要求.若不考虑该要求,那么这个模型就变成一个自由的理论,描述三个独立变量m_x, m_y, m_z.对于更广义的非线性sigma模型,其在理论物理的各个领域都有广泛的应用:

1. 粒子物理:量子色动力学;
2. 场论:弦理论;
3. 统计物理:经典Heisenberg模型;
4. 凝聚态物理:高温超导,量子自旋液体;

我们首先定义无量纲耦合常数$g = \rho a^{2-d}$,a是晶格常数,可看作实空间的最小尺度.这样相应的自由能化为

$$F = \frac{1}{2ga^{d-2}} \int d^d x (\nabla \vec{m})^2 \tag{6.117}$$

接下来,对于序参量场$\vec{m}$采用柱坐标表示,即

$$m_x = S\cos\theta, \quad m_y = S\sin\theta \tag{6.118}$$

由于序参量的归一化要求,那么有$m_z^2 + S^2 = 1$,这样我们得到

$$m_x = \sqrt{1-m_z^2}\cos\theta, \quad m_y = \sqrt{1-m_z^2}\sin\theta \tag{6.119}$$

$$(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 = \frac{(m_z \nabla m_z)^2}{1-m_z^2} + (1-m_z^2)(\nabla\theta)^2 \tag{6.120}$$

这样自由能完全可用纵向磁化m_z和面内自旋转角θ表示

$$F = \frac{1}{2ga^{d-2}} \int d^d x \left[(\nabla m_z)^2 + (1-m_z^2)(\nabla\theta)^2 + \frac{(m_z\nabla m_z)^2}{1-m_z^2} \right] \tag{6.121}$$

定义$m_z = \sqrt{ga^{d-2}}\phi$并代入自由能表达式可得

$$F = \int d^d x \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1-ga^{d-2}\phi^2}{2ga^{d-2}}(\nabla\theta)^2 + \frac{ga^{d-2}(\phi\nabla\phi)^2}{2(1-ga^{d-2}\phi^2)} \right] \tag{6.122}$$

假定无量纲耦合$g << 1$,则

$$F = \int d^d x \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2ga^{d-2}}(\nabla\theta)^2 - \frac{1}{2}\phi^2(\nabla\theta)^2 + \mathcal{O}(g) \right] \tag{6.123}$$

为了便于重整化处理,我们现在假定角度部分变化是缓慢的,也就是说在积掉ϕ场时θ可以当作常数处理,更明确的说是相应$k = 0$的部分.

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \int D\phi D\theta e^{-F} = \int D\theta e^{-\int d^dx \frac{1}{2ga^{d-2}}(\nabla\theta)^2} \int D\phi e^{-\int d^dx[\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2-\frac{1}{2}\phi^2(\nabla\theta)^2]} \\ &= \int D\theta e^{-\int d^dx \frac{1}{2ga^{d-2}}(\nabla\theta)^2} \int D\phi e^{-\sum_{k>0}\frac{1}{2}(k^2-(\nabla\theta)^2_{k=0})|\phi(k)|^2} \\ &= \int D\theta e^{-\int d^dx \frac{1}{2ga^{d-2}}(\nabla\theta)^2} \prod_{k>0}\sqrt{\frac{2\pi}{k^2-(\nabla\theta)^2_{k=0}}}\sqrt{\frac{2\pi}{k^2-(\nabla\theta)^2_{k=0}}} \\ &= \int D\theta e^{-\int d^dx \frac{1}{2ga^{d-2}}(\nabla\theta)^2} e^{\frac{1}{2}\sum_k\left(\ln\frac{2\pi}{k^2}-\ln\left(1-\frac{(\nabla\theta)^2_{k=0}}{k^2}\right)\right)} \end{aligned} \tag{6.124}$$

对包含$(\nabla\theta)^2_{k=0}$对数项展开计算可得

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\sum_k \ln\left(1-\frac{(\nabla\theta)^2_{k=0}}{k^2}\right) \approx -\frac{1}{2}(\nabla\theta)^2_{k=0}\frac{S_d}{(2\pi)^d}\int_{\Lambda/b}^{\Lambda} = -\frac{1}{2}(\nabla\theta)^2_{k=0}\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d(d-2)}(1-b^{2-d}) \\ &= -\frac{1}{2}\frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d(d-2)}(1-b^{2-d})\int d^dx(\nabla\theta)^2 \end{aligned} \tag{6.125}$$

这样,重整化之后的$\nabla\theta$部分系数是

$$\frac{1}{g'a'^{d-2}} = \frac{1}{ga^{d-2}} - \frac{S_d\Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d(d-2)}(1-b^{2-d}) \tag{6.126}$$

注意到$a'=ba$并且动量空间阶段尺度$\Lambda=1/a$,可得

$$\frac{1}{g'} = b^{d-2}\left[\frac{1}{g}-\frac{S_d}{(2\pi)^d(d-2)}(1-b^{2-d})\right] \Rightarrow g' \approx b^{2-d}g + \frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{b^{2-d}-b^{2(2-d)}}{(d-2)} \tag{6.127}$$

那么容易得到相应的β函数是

$$\beta(g) = \frac{dg}{d\ln b} = (2-d)g + \frac{S_d}{(2\pi)^d}g^2 \tag{6.128}$$

我们得到两个不动点分别是$g^*=0,\ g^*=\frac{(2\pi)^d}{S_d}(d-2)$.

在$g^*=0$附近我们得到

$$\beta(g)|_{g^*=0} = (2-d)g \tag{6.129}$$

这表明当$d>2$时,该不动点是稳定不动点,代表体系稳定的物理状态.当$g\to 0$时,注意到在配分函数中

$$e^{-\int d^dx\frac{1}{2}\frac{1}{2ga^{d-2}}(\nabla\theta)^2} \tag{6.130}$$

会被抑制,也就是说相位或者角度的涨落$(\nabla\theta)^2$在$g\to 0$被严重抑制,这显然对应于有序态,即自旋明确选取某个方向的自旋有序态.

在$g^*=\frac{(2\pi)^d}{S_d}(d-2)$附近则有

$$\beta(g)|_{g^*\neq 0} = (d-2)\left[g-\frac{(2\pi)^d}{S_d}(d-2)\right] \tag{6.131}$$

当$d>2$时,该不动点是不稳定不动点,代表相变点.对以上β函数积分可得

$$\xi \propto |g_0 - g^*|^{-1/(d-2)} \Rightarrow \nu = \frac{1}{d-2} \tag{6.132}$$

当$d=2$时,β函数中的线性项为零,只有关于g的二次方项

$$\beta(g) = \frac{dg}{d\ln b} = \frac{g^2}{2\pi} \tag{6.133}$$

显然,当体系不断标度至低能时(b增大),g流向强耦合即$g \to \infty$,这种流向强耦合的行为与量子色动力学中夸克禁闭的渐进自由(asymptotic freedom) 理论相似.对β函数积分可得

$$\frac{1}{g_0} - \frac{1}{g} = \frac{1}{2\pi}\ln b \tag{6.134}$$

令$b=\xi$可得指数依赖的关联长度$\xi \propto e^{2\pi(\frac{1}{g_0}-\frac{1}{g})}$.

最后,当$d<2$时,$g^* = \frac{(2\pi)^d}{S_d}(d-2) < 0$是非物理的,而$g^*=0$是不稳定不动点,在其附近得到的关联长度是$\xi \propto |g_0|^{-1/(2-d)}$,其临界指数是$\nu = 1/(2-d)$.

注意到$T \propto \rho \propto g$,则我们可以得到如下物理信息:

- $d>2$:有一个从高温无序态到低温有序态的相变,例如三维磁体的有限温相变.
- $d=2$:没有相变,体系流向强耦合,具有渐进自由行为,例如量子色动力学与Kondo问题.
- $d<2$:仅在$T=0$有相变,也即有序态只在零温存在,有限温度下只有无序态,例如一般的一维系统.

在结束本节讨论之前,我们比较$4-d$与$2+\epsilon$展开对三维$O(3)$模型系统的结果.$\nu_{4-d}=0.62, \nu_{d+\epsilon}=1$.而实验给出$\nu=0.69$,这说明$4-d$比$2+\epsilon$展开工作地更好,但是具体原因未知.

重整化在凝聚态物理中的其他应用:多才多艺的重整化*

局域化的标度理论*

在固体物理中,我们熟悉的是周期势场中运动的电子,此时电子的运动是Bloch波.另一方面,随着固体材料中杂质散射的不断增加,我们需要考虑电子在无序势场中的运动.Anderson指出强无序可以导致电子运动的局域化,这就是著名的Anderson局域化效应.[17] 进一步,Mott 和Abrikosov 证明一维系统中无论无序势强度有多弱,电子总是局域化的而不存在扩展态.对于高维的情

[17] Anderson,Phys.Rev.**109**,1492(1958).

况,Abrahams,Anderson,Licciardello和Ramakrishnan[18]所提出的局域化的标度理论是标志性的工作.[19]

这个局域化标度理论的出发点是系统的电导.由欧姆定律可知电流密度通过电导率与电场相联系,即$j=\sigma E$.j的意义是单位时间内通过单位横截面积的电子数目,E 是单位长度上的电压降.另一方面,电流I(单位时间内通过材料的电子数目)与电压V 和电阻R的关系是$I=\frac{V}{R}$.对一个线度为L的三维系统根据定义可知

$$I=jL^2=\sigma EL^2=\sigma\frac{V}{L}L^2=\sigma VL \tag{6.135}$$

这样系统的电导是$G(L)=\frac{1}{R}=\frac{I}{V}=\sigma L$.对于二维或者说准二维系统,我们考虑该体系的面积是L^2,厚度是$a<<L$,这样有

$$I=jaL=\sigma\frac{V}{L}aL=\sigma Va \tag{6.136}$$

这样有$G(L)=\sigma a$.对准一维的系统,系统的长度为L,横截面积为a^2,根据定义可知

$$I=ja^2=\sigma\frac{V}{L}a^2 \tag{6.137}$$

因此一维系统的电导是$G(L)=\sigma\frac{a^2}{L}$.由此可以看到,线度为L的d维系统的电导是$G(L)\sim L^{d-2}$.同时,绝缘体的电导可以估计为$G(L)\sim e^{-L/\xi}$,ξ代表材料的特征长度尺度,其由微观的物理细节决定.这实际上表明对无穷大系统$L\to\infty$电导指数型趋于零,这自然符合我们对绝缘体的预期.当然,为了理论研究的方便,我们引入无量纲化的电导,即

$$g(L)=\frac{G(L)}{e^2/h} \tag{6.138}$$

这样我们有

$$g(L)\sim\begin{cases}L^{d-2}, & \text{large } g;\\ e^{-L/\xi}, & \text{small } g.\end{cases} \tag{6.139}$$

于是,让我们定义β函数$\beta(g)=\frac{d\ln g(L)}{d\ln L}$,可得

$$\beta(g)=\frac{d\ln g(L)}{d\ln L}=\begin{cases}d-2-\frac{a}{g}, & \text{large } g;\\ \ln g, & \text{small } g.\end{cases} \tag{6.140}$$

注意到我们额外添加了$-a/g,a>0$这一项.

基于上述形式,图6.7给出了不同空间维度下Abrahams等人猜测的β函数.可以看到一维和二维体系的电导随尺寸$L\to\infty$而趋于零,因此低维系统的电子态总是局域化的.与之相反,对于三维系统,如果初始的电导g大于某个临界值g_c,那么$g(L)$会趋于无穷大,这样体系是金属,而当初始值小于g_c, 体系则会成为绝缘体.因此,系统存在金属态到绝缘态的相变,而相变点便是g_c.进一步,在g_c附近展

[18]简称四人帮(Gang of Four)

[19]Abrahams,Anderson,Licciardello,Ramakrishnan,Phys.Rev.Lett.**42**,673(1979).

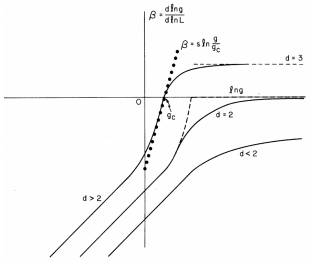


Figure 6.7: 文献Phys.Rev.Lett.**42**.673猜测的β函数.

开β函数可以得到$\beta(g) = s(g - g_c)$,这里$s = \frac{dg}{dL}|_{g=g_c}$是临界点处的导数.为了得到三维时$\beta(g) = d - 2 = 1$ 的行为,我们可以把β函数修改为

$$\frac{d\ln g(L)}{d\ln L} = \beta(g) = \frac{s(g - g_c)}{1 + s(g - g_c)} \tag{6.141}$$

整理并两边积分得

$$\int_{g_0}^{g} dg \left(\frac{1-\nu}{g} + \frac{\nu}{g - g_c}\right) = \int_{L_0}^{L} d\ln L \tag{6.142}$$

这里$g_0 = g(L_0)$且$\nu = \frac{1}{sg_c}$.完成积分有

$$\ln\left(\frac{g}{g_0}\right)^{1-\nu}\left(\frac{g - g_c}{g_0 - g_c}\right)^{\nu} = \ln\frac{L}{L_0} \Rightarrow \frac{g/L}{g_0/L_0} = \frac{g^{\nu}}{g_0^{\nu}}\frac{(g_0 - g_c)^{\nu}}{(g - g_c)^{\nu}} \tag{6.143}$$

在L很大时的金属态必有$g >> g_c$,则$g - g_c \simeq g$.注意到$\frac{g/L}{g_0/L_0}$就是三维情况下的电导率之比($\sigma = \frac{h}{e^2}G/L$),那么有

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = g_0^{-\nu}(g_0 - g_c)^{\nu} \Rightarrow \sigma \sim (g_0 - g_c)^{\nu}. \tag{6.144}$$

这说明处于金属和绝缘体相变附近的电导率满足热力学相变中类似的幂律形式,且电导率$\sigma(g = g_c) = \sigma_c$在相变点为零.[20]这说明Mott最早提出的金属最小电导率事实上在这里的金属绝缘体相变附近并不满足,也就是Anderson金属−绝缘体相变是连续相变而非Mott预言的一级相变. [21]

当然,对于实际系统而言,我们通常调节的是体系的电子密度或者无序强度,因此电导率自然也是这些量相对于临界值的幂律形式.一个有趣的实验结果是,与二维标度理论预期相反,人们在无序的二维电子气发现了金属态,以及Anderson相变的信号.[22] 这实际上表明电子相互作用在二维体系的局域化研究中发挥着重要作用.

[20]三维体系的数值模拟给出$\nu \simeq 1.5$.

[21]Mott的最小电导率也称为金属的Mott-Ioffe-Regal电阻极限.其值可以估计为电子的平均自由程l 等于晶格间距a时Drude模型给出的电阻率 $\rho = \frac{m_e v_F}{ne^2 a} \sim e^{-2}n^{-2/3}a^{-1}$.

[22]Kravchenko,Kravchenko,Furneaux,Pudalov,DIorio,Phys.Rev.B**50**,8039(1994).

近藤问题的穷人标度理论*

标度理论的一个重要应用是理解近藤杂质问题的低温特性.在这一方面,Anderson提出的穷人标度理论(poor man's scaling) 是最为典型的尝试.[23]当然,这里的穷人实际上是相对于Wilson采用计算机来完成数值重整化而言.[24]

Anderson的出发点是如下的各向异性$s-d$交换模型,或近藤模型:

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k,k'}(J_+\hat{S}^+\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+J_-\hat{S}^-\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}+J_z\hat{S}^z(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k'\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow})) \tag{6.145}$$

这里$\hat{c}$代表金属中的传导电子,$\hat{S}^\pm=\hat{S}^x\pm i\hat{S}^y,\hat{S}^z$ 表示嵌入金属后磁性杂质的$S=1/2$自旋.然后我们假定传导电子的能带宽度为$2D$,即$|\varepsilon_k|<D$且费米能对应$\varepsilon_k=0$.现在,把能带划分为高低能两个部分,低能部分为$|\varepsilon_k|<D-\delta D$,高能部分为$D-\delta D<|\varepsilon_k|<D$.这样微扰地积掉高能部分可以发现其效果是重整化参数$J_\pm,J_z$ (大带宽极限下$D>>|\varepsilon_k|$)

$$\begin{aligned}&J_\pm\to J_\pm+\delta J_\pm,\quad \delta J_\pm=-J_\pm J_z\rho_0\delta D\frac{2}{D}\\&J_z\to J_z+\delta J_z,\quad \delta J_z=-J_+J_-\rho_0\delta D\frac{2}{D}\end{aligned} \tag{6.146}$$

这里ρ_0是费米能处的态密度.上述结果可以利用计算电组率时的T矩阵稍加修改得到,例如各项同性Kondo模型的公式3.350修改为

$$T^{\uparrow\uparrow}_{kk'}(\omega)=J_z\hat{S}^z+J_+J_-\sum_{k_2}\left[\frac{(\hat{S}^z)^2+\hat{S}^-\hat{S}^+}{\omega-\varepsilon_{k_2}}-\frac{\overbrace{[\hat{S}^+,\hat{S}^-]}^{2\hat{S}^z}}{\omega-\varepsilon_{k_2}}f_F(\varepsilon_{k_2})\right] \tag{6.147}$$

这里我们加入了一阶修正项$J_z\hat{S}^z$.注意到中括号内第二项也包含$\hat{S}^z$,这样我们可以定义新的J_z:

$$J'_z=J_z-2J_+J_-\sum_{k_2}\frac{f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}=J_z+\delta J_z. \tag{6.148}$$

现在,我们考虑δJ_z中的动量求和仅对高能模式求,则有

$$\sum_{k_2}\frac{f_F(\varepsilon_{k_2})}{\omega-\varepsilon_{k_2}}\simeq\rho_0\int_{-D}^{-D+\delta D}d\varepsilon\frac{1}{\omega-\varepsilon}\simeq\rho_0\frac{\delta D}{\omega+D}. \tag{6.149}$$

由于我们最关心的物理是在费米能附近,则取$\omega=0$就得到$\delta J_z=-2J_+J_-\rho_0\frac{\delta D}{D}$,同理有$\delta J_\pm=-J_\pm J_z\rho_0\delta D\frac{2}{D}$.

[23]Anderson,J.Phys.C:Solid State Phys.**3**,2436(1970).Haldane把Anderson的方法推广到Anderson杂质模型,得到了更为复杂的不动点和渡越行为. Haldane,Phys.Rev.Lett.**40**,416(1978).

[24]Wilson,Rev.Mod.Phys.**47**,773(1975).

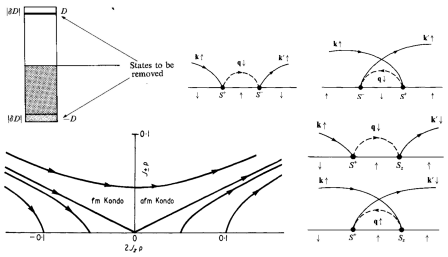


Figure 6.8: 各向异性$s-d$交换模型的Anderson标度处理.

注意到δD可以无穷小,那么我们可以把上述方程改写为微分方程,即($\delta J_z = -2J_+J_-\rho_0\frac{\delta D}{D} = -2J_+J_-\rho_0\delta\ln D \Rightarrow \frac{\delta J_z}{\delta\ln D} = -2J_+J_-\rho_0$.)

$$\begin{aligned}\frac{dJ_\pm}{d\ln D} &= -2\rho_0 J_z J_\pm \\ \frac{dJ_z}{d\ln D} &= -2\rho_0 J_+ J_-\end{aligned} \tag{6.150}$$

图6.8显示了相应的RG流图.可以看到,减少带宽D,J_z总是增加,因此对于铁磁的情况($J_z<0, |J_z|\geq J_\pm$),系统流向$J_\pm = 0$.而对于反铁磁模型$J_z>0$或$|J_z|<J_\pm$的铁磁模型,系统总是流向$J_z, J_\pm \to \infty$的强耦合.对于各向同性的反铁磁模型,$J_+ = J_- = J_z = J > 0$, 那么RG方程化为

$$\frac{dJ}{d\ln D} = -2\rho_0 J^2 \tag{6.151}$$

对上式两边积分可以看到

$$\int_J^{\tilde{J}} \frac{dJ}{J^2} = -2\rho_0\int_D^{\tilde{D}} d\ln D \Rightarrow De^{-\frac{1}{2J\rho_0}} = \tilde{D}e^{-\frac{1}{2\tilde{J}\rho_0}} \tag{6.152}$$

这说明系统存在一个RG不变的能量尺度,这通常定义为所谓的近藤温度,即

$$\boxed{T_K \sim De^{-\frac{1}{2\rho_0 J}}} \tag{6.153}$$

如果需要更精确的Kondo温度的估计,下一阶修正的β函数给出$\frac{dJ}{d\ln D} = -2\rho_0 J^2 + 2\rho_0^2 J^3$,类似处理得到

$$\boxed{T_K \sim D\sqrt{2\rho_0 J}e^{-\frac{1}{2\rho_0 J}}} \tag{6.154}$$

- 对于对称Anderson杂质模型,我们知道在U很大时有$J = 4V^2/U$,这样$T_K = D\sqrt{2\rho_0 J}e^{-\frac{1}{2\rho_0 J}}$可以用Anderson杂质模型的参数重新表示为$T_K = \sqrt{\frac{2U\Delta}{\pi}}e^{-\frac{\pi U}{8\Delta}}$.

事实上,早期微扰理论的困难就在于物理量在T_K附近出现发散行为,例如Abrikosovs对最主导的所有对数项求和得到杂质自旋磁化率为

$$\chi_{imp}(T) = \frac{(g\mu_B)^2 S(S+1)}{3k_B T}\left(1 - \frac{2J\rho_0}{1+2J\rho_0\ln(k_B T/D)} + c_2(2J\rho_0)^2\right) \tag{6.155}$$

注意到分母在$T = T_K$时为零,直接导致χ_{imp}非物理的发散.这说明非微扰理论在研究低温区,也就是$T < T_K$时的重要性.历史上,Wilson的数值重整化群理论在70年代成功地求解了近藤杂质问题,给出了全温区热容,磁化率等物理量的变化,其确认了系统低温下进入局域的费米液体状态, [25]而不是微扰计算所显示的发散或对数行为.80年代Andrei,Wiegmann,Kawakami等人利用Bethe拟设方法成功求解了Kondo杂质和Anderson杂质问题,[26]至此,从1930年代de Haas等发现电阻极小现象,到80年代的严格解,经过半个世纪的努力,金属中磁性杂质问题得到了圆满解决.更详细的讨论可以参考Hewson的专著[27].

本章小结和进一步阅读

本章小结 临界系统具有标度不变性;重整化是研究物理系统的重要手段.

本章关键词 标度;重整化;重整化群方程;Wilson动量空间重整化;Wilson-Fisher不动点;非线性sigma模型

进一步阅读 Lancaster和Blundell合著的《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》第三十五章;H.Nishimori 和G.Ortiz的《Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena》第三到第六章;M.Continentino的《Quantum Scaling in Mnay-Body Systems》第三和第四章

[25]Nozieres给出了强耦合时系统为局域费米液体的唯象理论.Nozieres,J.Phys.**37**,1(1976).简化的局域费米液体分析可以参P.Coleman 多体物理教科书634 – 638页.

[26]Andrei,Furuya,Lowenstein,Rev.Mod.Phys.**55**,331(1983).

[27]Hewson,《The Kondo Problem to Heavy Fermions》

附录

共形不变性与共形场论

在做学生的时候,我就听说量子场论中有一个叫做共形场论(CFT)的理论,这个理论以数学难度大和抽象著称.那我们为什么要学习或研究共形场论呢？这是因为CFT在理论物理的很多问题中都有重要应用,例如

- 弦论中的玻色/费米弦的动力学;
- 一维无能隙量子流体的低能描述(Luttinger液体);
- 分数量子霍尔效应中多体波函数的构造(Laughlin,Moore-Read);
- 近藤杂质问题的边界共形场计算;
- 经典统计模型的临界性质(二维Ising模型,Potts模型,三维$O(N)$模型);
- 超对称共形规范理论和规范/引力对偶(Ads/CFT).

下面我们将讨论CFT最基础的一些内容,这对于进一步学习高阶内容或阅读相关的文献可能有所帮助.当然,学习CFT的基本参考是:

- Belavin,Polyakov和Zamolodchikov(简称BPZ)关于二维共形场论的奠基性论文;[28]
- Ginsparg的讲义;[29]
- Di Francesco,Mathieu,Senechal关于共形场论的专著《Conformal Field Theory》(简称大黄书).

共形变换与共形场

在我们熟悉的复变函数论中,共形变换(conformal transformation)指的是把复平面区域变为更方便处理的区域并同时保持角度不变的变换.例如你可以把单位长的圆形碟子区域变为上半平面.[30]

数学上,如果我们考虑从x到x'的坐标变换,(可以看成我们用两个坐标系描述时空,一个坐标系中时空的位置用x标记而另一个坐标系中用x'标记)这可用如下公式表示:

$$x'^{\mu} = x'^{\mu}(x) \tag{6.156}$$

[28][Belavin,Polyakov,Zamolodchikov,infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory,Nuclear Physics B **241**,333(1984)]

[29]Applied Conformal Field Theory,arXiv:9108028

[30]共形变换和对称性的历史可以参考文献[Kastrup,On the advancements of conformal transformations and their associated symmetries in geometry and theoretical physics,Ann.Phys.(Berlin) **17**,631(2008)]

这里x'可以用x来表示,其具体形式依赖于坐标变换的形式.接下来,让我们对x'^{μ}取微分可得,

$$dx'^{\mu} = \sum_{\alpha} \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\alpha}} dx^{\alpha} = \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\alpha}} dx^{\alpha}. \tag{6.157}$$

(在相对论中)我们知道时空距离$ds^2 = g_{\mu\nu}(x)dx^{\mu}dx^{\nu}$ 是不变量,($g_{\mu\nu}$ 是度规)也就是在任意坐标系下都不改变.利用ds^2 的不变性,($ds'^2 = ds^2$)我们能够得到x'坐标系的度规:

$$ds^2 = g_{\mu\nu}(x)dx^{\mu}dx^{\nu} = g_{\mu\nu}(x)\frac{\partial x^{\mu}}{\partial x'^{\alpha}}dx'^{\alpha}\frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\beta}}dx'^{\beta} = g_{\mu\nu}(x)\frac{\partial x^{\mu}}{\partial x'^{\alpha}}\frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\beta}}dx'^{\alpha}dx'^{\beta} = g'_{\alpha\beta}(x')dx'^{\alpha}dx'^{\beta} \tag{6.158}$$

这样x'坐标系或者说坐标变换后时空度规$g_{\mu\nu}$变成:

$$g'_{\mu\nu}(x') = \frac{\partial x^{\alpha}}{\partial x'^{\mu}}\frac{\partial x^{\beta}}{\partial x'^{\nu}}g_{\alpha\beta}(x) \tag{6.159}$$

对于我们生活的$3+1$维闵可夫斯基时空有$g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} = (-1,1,1,1)$,即$ds^2 = \eta_{\mu\nu}dx^{\mu}dx^{\nu} = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$.上式说明$x$的坐标系与$x'$坐标系的度规满足上述关系.如果两个坐标系的度规满足如下形式,我们说度规之间通过共形变换函数$\Omega(x)$相联系:

$$g'_{\mu\nu}(x') = \Omega(x)g_{\mu\nu}(x). \tag{6.160}$$

- 若坐标变换$x \to x'$使得$g'_{\mu\nu}(x') = \Omega(x)g_{\mu\nu}(x)$恒成立,那么相应的坐标变换称为共形变换;
- 共形变换是一类特殊的坐标变换;
- 共形变换保证曲线的夹角不变.

对于给定的点x,$\Omega(x)$对于度规$g_{\mu\nu}(x)$相当于放大或者缩小的因子.如果度规通过$\Omega(x)$与闵可夫斯基度规$\eta_{\mu\nu}$相联系,即$g_{\mu\nu} = \Omega(x)\eta_{\mu\nu}$,那么我们说度规$g_{\mu\nu}$是共形平直的.

- 共形场论(conformal field theory,CFT):在共形变换下保持不变的量子场论称为共形场论.

设坐标变换$x \to x'$时场的变化是$\Phi(x) \to \Phi'(x')$,并且变换后的场可以用变换前场的某个函数表示,即$\Phi'(x') = \mathcal{F}(\Phi(x))$,也就是说坐标变换后的场可以用原先场的函数表示.如果坐标变换前的作用量S是

$$S = \int d^d x \mathcal{L}(\Phi(x), \partial_{\mu}\Phi(x)) \tag{6.161}$$

而变换后的作用量是

$$\begin{aligned} S' &= \int d^d x' \mathcal{L}(\Phi'(x'), \partial'_{\mu}\Phi'(x')), \\ &= \int d^d x' \mathcal{L}(\mathcal{F}(\Phi(x)), \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}}\partial_{\nu}\mathcal{F}(\Phi(x))) \\ &= \int d^d x \left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right| \mathcal{L}(\mathcal{F}(\Phi(x)), \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}}\partial_{\nu}\mathcal{F}(\Phi(x))) \end{aligned} \tag{6.162}$$

这里$\left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right|$是从$d$维体积元$d^dx'$到$d$维体积元$d^dx$的雅可比行列式,即$d^dx' = \left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right| d^dx$.

当$S = S'$时,我们说坐标变换$x \to x'$使得系统保持不变.

(1)作为一个例子,让我们考虑坐标平移变换,即$x \to x' = x + a$,a为常数.在这个变换下,我们假设场$\Phi(x)$满足$\Phi'(x') = \Phi(x)$,(对于任意的函数,平移变换一般而言无法写成这种简单的形式)这说明变换后的场在函数形式上与变换前相同.显然,平移变换下雅可比行列式为1,$\partial x^\nu/\partial x'^\mu = \delta^\nu_\mu$,$\mathcal{F}(\Phi(x)) = \Phi(x)$这样有

$$\begin{aligned} S' &= \int d^dx \left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right| \mathcal{L}(\mathcal{F}(\Phi(x)), \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\partial_\nu \mathcal{F}(\Phi(x))) \\ &= \int d^dx \mathcal{L}(\Phi(x), \partial_\mu \mathcal{F}(\Phi(x))) = S. \end{aligned} \tag{6.163}$$

因此,满足$x' = x + a$,$\Phi'(x') = \Phi(x)$的平移变换使得作用量不变.反过来说,作用量在平移$x \to x' = x + a$下的不变性要求场满足$\Phi'(x') = \mathcal{F}(\Phi(x)) = \Phi(x)$.

(2)让我们考虑时空坐标的Lorentz变换$x^\mu \to x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$,这里变换矩阵$\Lambda$满足$\eta_{\mu\nu}\Lambda^\mu_\rho\Lambda^\nu_\sigma = \eta_{\rho\sigma}$($\eta_{\mu\nu}$是平直时空的度规).现在假设在Lorentz变换下场的变换规则是

$$\Phi(x) \to \Phi'(x') = \Phi'(\Lambda x) = L_\Lambda \Phi(x), \tag{6.164}$$

这里L_Λ原则上是依赖于Λ的矩阵.所有满足$\eta_{\mu\nu}\Lambda^\mu_\rho\Lambda^\nu_\sigma = \eta_{\rho\sigma}$的$\Lambda$矩阵构成了Lorentz群而$L_\Lambda$则是Lorentz群的表示(矩阵).若时空是Minkowski时空,那么Lorentz群同构于$SO(d-1,1)$群而欧氏时空同构于纯粹的d维转动群$SO(d)$.$d = 2$对应的欧氏空间用$SO(2)$群描述,其同构于$U(1)$群.

由于$\det(\Lambda) = \left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right|$,而$\det(\eta_{\mu\nu}\Lambda^\mu_\rho\Lambda^\nu_\sigma) = \det(\eta_{\mu\nu})\det(\Lambda^\mu_\rho)\det(\Lambda^\nu_\sigma) = \det(\eta_{\rho\sigma}) = 1$ 那么Lorentz变换的雅可比行列式为1,这样有

$$S' = \int d^dx \mathcal{L}(L_\Lambda\Phi(x), \Lambda^{-1}\cdot\partial L_\Lambda\Phi(x)). \tag{6.165}$$

对于最简单的标量场φ,其表示是平凡的($L_\Lambda = 1$),那么作用量具有Lorentz不变性($S' = S$)的拉式量可以写成如下形式,

$$\mathcal{L} = f(\varphi) + g(\varphi)\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi. \tag{6.166}$$

这里f, g为φ的任意函数.

(3)我们再考虑标度变换$x' = \lambda x$,伸缩(dilation)因子λ相当于对坐标的放大或缩小.假设在标度变换下场满足$\Phi(x) \to \Phi'(x') = \Phi'(\lambda x) = \lambda^{-\Delta}\Phi(x)$,$\Delta$称作标度维数.在这个变换下,对$d$维系统,其雅可比行列式为$\left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right| = \lambda^d$,那么

$$S' = \lambda^d \int d^dx \mathcal{L}(\lambda^{-\Delta}\Phi(x), \lambda^{-1-\Delta}\partial_\mu\Phi(x)). \tag{6.167}$$

对于d维空间的无质量标量场$S = \int d^dx\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi$,若要求其具有标度不变性($S' = S$),那么根据$S'$的形式可知$\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi$前的因子$\lambda^{2(-1-\Delta)}$必须抵消积分号前的因

子λ^d,这样有$\Delta = d/2 - 1$.如果我们再加上φ的n次幂φ^n,那么标度不变性要求$\lambda^{-n\Delta}\lambda^d = 1$,即有$n = d/\Delta = 2d/(d-2)$.由于$n$为奇数时会使得场的经典基态能量为负无穷,因此我们只考虑偶数n,此时解为$d = 4, n = 4$和$d = 3, n = 6$.这说明经典意义上满足标度不变性的无质量标量场理论仅在三维和四维时空存在.

需要指出,对于规范变换,我们并不改变坐标x而是改变场函数的形式,例如在$U(1)$规范变换下有$\Phi(x) \to \Phi'(x) = e^{i\theta}\Phi(x)$,也就是场多了一个相位因子.当$\Phi(x)$具有多个分量时,规范变换则是$\Phi'(x) = R_\omega\Phi(x)$,这里$R_\omega$是规范变换对应的李群的表示.

现在,如果$x \to x'$是共形变换,并且$S' = S$,那么我们说在经典层次上,相应的系统满足共形不变性.

一般来说,这些具有共形不变性的场论都是欧几里得空间中的场论,简称欧氏场论.欧氏场论与闵氏场论通过对时间的解析延拓$t = -i\tau$相联系(这种特殊的解析延拓在场论中称为Wick转动).这样欧氏空间的度规是简单的,即$g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} = (1,1,1,1)$而不变距离是$ds^2 = g_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu = d\tau^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$.需要指出,二维共形场论是最特殊也最有用的共形场论.

- 实用的共形场论是平直的欧氏空间中的场论,而共形变换是欧氏空间中特殊的坐标变换.
- 四维时空中的Maxwell电磁理论是典型的共形场论.其在标度变换$x^\mu \to \lambda x^\mu$下不变(同时$A_\mu \to \lambda^{-1}A_\mu$).对于常见的理论,如果它在标度变换下不变,那么其在共形变换下也不变,[31]因此Maxwell理论实际上是一个共形场论,也是人们最早发现的共形场论.

生成元,Noether定理,Ward恒等式和能动张量

让我们考虑一个一维系统.在量子力学中我们知道空间位置x处的波函数$\psi(x)$与相邻位置$x + a(a \to 0)$处的波函数$\psi(x+a)$通过如下关系相联系:

$$\psi(x+a) = \psi(x) + a\partial_x\psi(x) + \mathcal{O}(a^2) = e^{a\partial_x}\psi(x) \tag{6.168}$$

注意到动量算符$P_x = -i\partial_x$,那么上式可以写成$\psi(x+a) = e^{iaP_x}\psi(x)$.物理上,我们称$e^{iaP_x}$为无穷小平移算符,这个算符把坐标$x$平移至$x+a$处.同时,我们称$P_x$是平移操作的生成元.[32]同理,角动量是旋转操作的生成元.

更一般的,场论中通过下面的方式寻找生成元.首先,我们如下坐标以及场的无穷小变换:

$$x'^\mu = x^\mu + \omega_a\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}, \qquad \Phi'(x') = \Phi(x) + \omega_a\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x) \tag{6.169}$$

[31]这种标度不变与共形不变性的联系最早由Polyakov建议[Conformal symmetry of critical fluctuations,JETP Lett. **12**,381(1970)]

[32]生成元可以理解为一些操作,当我们作用足够多这样的操作时就能得到任意需要的结果.例如我们想把x 点平移至有限远的$x+b$处,假设我们每次都平移很小的距离a,设$m = b/a$则有$\psi(x+b) = \lim_{m\to\infty}(e^{a\partial_x})^m\psi(x) = e^{ibP_x}\psi(x)$.

这里ω_a是一些列的无穷小的参数,在具体操作中一般只需要保留其一阶项.记号$\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x)$表示其是$x$的函数.习惯上,我们用下列式子定义生成元,

$$\delta_\omega\Phi(x)\equiv\Phi'(x)-\Phi(x)\equiv-i\omega_a G_a\Phi(x) \tag{6.170}$$

这个公式意味着我们用坐标变换前后函数在同一个时空点的取值来定义生成元G_a.这样,利用$\Phi'(x')$的表达式可得

$$\begin{aligned}\Phi'(x') &= \Phi(x)+\omega_a\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x)\\ &= \Phi(x'^\mu-\omega_a\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a})+\omega_a\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x)\\ &= \Phi(x'^\mu)-\omega_a\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\partial_\mu\Phi(x')+\mathcal{O}(\omega^2)+\omega_a\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x')+\mathcal{O}(\omega^2).\end{aligned}$$

在上面第三个等号中我们对$\Phi(x'^\mu-\omega_a\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a})$做了关于$\omega_a$的泰勒展开.忽略$\omega_a$的二阶项并对比$\Phi'(x)-\Phi(x)=-i\omega_aG_a\Phi(x)$立即得到生成元的形式:(顺便把$x'$改写为$x$)

$$\boxed{iG_a\Phi(x)=\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\partial_\mu\Phi(x)-\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x)} \tag{6.171}$$

这提供了寻找生成元的一般性方式.对于最熟悉的平移变换,我们有$x'^\mu=x^\mu+\omega^\mu$,(标记a现在作为Lorentz指标μ)$\Phi'(x')=\Phi(x)$,即$\mathcal{F}(\Phi)=\Phi$与ω^μ无关,因此有$iG_\mu\Phi(x)=\partial_\mu\Phi(x)$.这就是$P_\mu=G_\mu=-i\partial_\mu$,对于空间分量是动量算符而时间分量是哈密顿算符.

对于无穷小的Lorentz变换,我们有$x'^\mu=x^\mu+\omega^\nu_\mu x^\nu=x^\mu+\omega_{\rho\nu}\eta^{\rho\mu}x^\nu$.利用$\eta_{\mu\nu}\Lambda^\mu_\rho\Lambda^\nu_\sigma=\eta_{\rho\sigma}$可知$\omega_{\rho\nu}$是反对称的,即$\omega_{\rho\nu}=-\omega_{\nu\rho}$.在$d$维时空中,反对称$\omega_{\rho\nu}$矩阵的对角元为零,因此其独立的元素个数为$(d^2-d)/2$.这样形式上我们可以把无穷小Lorentz变换对坐标的变化$\delta x^\mu/\delta\omega_{\rho\nu}$写成

$$\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_{\rho\nu}}=\frac{1}{2}(\eta^{\rho\mu}x^\nu-\eta^{\nu\mu}x^\rho), \tag{6.172}$$

这样有$x'^\mu=x^\mu+\omega_{\rho\nu}\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_{\rho\nu}}=x^\mu+\omega_{\rho\nu}\frac{1}{2}(\eta^{\rho\mu}x^\nu-\eta^{\nu\mu}x^\rho)$.另一方面,场的无穷小Lorentz变换可以写成,

$$\mathcal{F}(\Phi)=L_\lambda\Phi,\quad L_\Lambda\approx 1-\frac{1}{2}i\omega_{\rho\nu}S^{\rho\nu}, \tag{6.173}$$

这里$S^{\rho\nu}$是满足Lorentz代数(一些对易关系)的厄密矩阵.对比$iG_a\Phi(x)=\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\partial_\mu\Phi(x)-\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}(x)$可得Lorentz变换的生成元$L^{\rho\nu}$满足(与定义公式相比实际上多了一个1/2因子,这是因为这里有两个指标ρ,ν)

$$i\frac{1}{2}L^{\rho\nu}\Phi(x)=\frac{1}{2}(\eta^{\rho\mu}x^\nu-\eta^{\nu\mu}x^\rho)\partial_\mu\Phi(x)+\frac{1}{2}iS^{\rho\nu}\Phi(x) \tag{6.174}$$

即有Lorentz变换的生成元为

$$\boxed{L^{\rho\nu}=-i(\eta^{\rho\mu}x^\nu-\eta^{\nu\mu}x^\rho)\partial_\mu+S^{\rho\nu}=i(x^\rho\partial^\nu-x^\nu\partial^\rho)+S^{\rho\nu}} \tag{6.175}$$

在前面的讨论中,无穷小参数ω_a是不依赖于时空位置的,这样的坐标表换称为刚性变换,而如果ω_a明显依赖于坐标x,那么相应的变换就是非刚性的.下面我们讨论这类非刚性变换的结果.首先,由$x'^\mu = x^\mu + \omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta \omega_a}$,我们有

$$\frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} = \delta^\nu_\mu + \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right), \tag{6.176}$$

然后相应的雅可比行列式就是$\left| \frac{\partial x'}{\partial x} \right|$.注意到如下行列式的性质,

$$\det(1+E) \approx 1 + \mathrm{Tr}E, \quad E << 1 \tag{6.177}$$

因此有,($\frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu}$看作是以$\nu, \mu$为指标的雅可比矩阵的矩阵元,这样$E$矩阵就是$\partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right)$)

$$\left| \frac{\partial x'}{\partial x} \right| = 1 + \mathrm{Tr}\partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right) + \mathcal{O}(\omega^2) = 1 + \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta \omega_a} \right) + \mathcal{O}(\omega^2). \tag{6.178}$$

这样雅可比矩阵的逆矩阵就是

$$\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} = \delta^\nu_\mu - \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right). \tag{6.179}$$

根据先前的讨论,我们知道坐标变换下作用量从S变为$S' = \int d^d x \left| \frac{\partial x'}{\partial x} \right| \mathcal{L}(\mathcal{F}(\Phi(x)), \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \partial_\nu \mathcal{F}(\Phi(x)))$. 用$\left| \frac{\partial x'}{\partial x} \right| = 1 + \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta \omega_a} \right)$,$\Phi'(x') = \mathcal{F}(\Phi(x)) = \Phi(x) + \omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a}$,$\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} = \delta^\nu_\mu - \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right)$.可得

$$S' = \int d^d x \left(1 + \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta \omega_a} \right) \right) \mathcal{L} \left(\Phi + \omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a}, \left(\delta^\nu_\mu - \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right) \right) \partial_\nu (\Phi + \omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a}) \right).$$

然后我们把拉式量$\mathcal{L}$展开到ω_a的一阶项可得

$$\begin{aligned} & \mathcal{L} \left(\Phi + \omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a}, \partial_\mu \Phi + \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a} \right) - \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right) \partial_\nu \Phi \right) \\ = \; & \mathcal{L}(\Phi, \partial_\mu \Phi) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Phi)} \left(-\partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right) \partial_\nu \Phi + \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a} \right) \right). \end{aligned}$$

因此,我们可以把S'写成$S' = S + \delta S$,

$$\delta S = \int d^d x \left[\partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\mu}{\delta \omega_a} \right) \mathcal{L} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Phi)} \left(-\partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \right) \partial_\nu \Phi + \partial_\mu \left(\omega_a \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a} \right) \right) \right].$$

这样上式可以写为ω_a的一次项和$\partial_\mu \omega_a$项,前者实际上根据之前关于平移,Lorentz变换等的讨论,其不改变S也就是说相应的$\delta S = 0$,这说明我们只需要考虑$\partial_\mu \omega_a$项的贡献,即有

$$\begin{aligned} \delta S &= \int d^d x \left[\frac{\delta x^\mu}{\delta \omega_a} \mathcal{L} \partial_\mu \omega_a - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Phi)} \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \partial_\nu \Phi \partial_\mu \omega_a + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Phi)} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a} \partial_\mu \omega_a \right] \\ &= \int d^d x \left[\frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \delta^\mu_\nu \mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Phi)} \frac{\delta x^\nu}{\delta \omega_a} \partial_\nu \Phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Phi)} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega_a} \right] \partial_\mu \omega_a \\ &= -\int d^d x j^\mu_a \partial_\mu \omega_a. \end{aligned} \tag{6.180}$$

这里我们定义了无穷小变换下的流j_a^μ,

$$j_a^\mu \equiv \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\partial_\nu\Phi - \delta_\nu^\mu\mathcal{L}\right)\frac{\delta x^\nu}{\delta\omega_a} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}. \tag{6.181}$$

$$\delta S = \int d^dx j_a^\mu\partial_\mu\omega_a = \int d^dx\partial_\mu j_a^\mu\omega_a + \int d^dx\partial_\mu(j_a^\mu\omega_a), \tag{6.182}$$

如果假设上式右边第二项在无穷远边界处为零而ω_a是任意的,那么作用量在坐标变换下的不变性意味着$\delta S = 0$,即如下流守恒,

$$\partial_\mu j_a^\mu = \partial_0 j_a^0 + \partial_i j_a^i = 0 \tag{6.183}$$

这称为Noether定理.j_a^μ对应的守恒荷为$Q_a = \int d^{d-1}x j_a^0$,这里$d^{d-1}x$代表对空间的积分,而$j_a^0$是流的时间分量.这样守恒荷的时间导数是

$$\partial_t Q_a = \int d^{d-1}x\partial_0 j_a^0 = -\int d^{d-1}x\partial_i j_a^i = -\int_\infty j^i d\sigma^i = 0 \tag{6.184}$$

这说明守恒荷不随时间变化,即是守恒量.当然,我们给守衡流添加上任意反对称张量$B_a^{\nu\mu} = -B_a^{\mu\nu}$也不改变流守恒,即$j_a^\mu + \partial_\nu B_a^{\nu\mu}$满足,

$$\partial_\mu(j_a^\mu + \partial_\nu B_a^{\nu\mu}) = 0 + \frac{1}{2}(\partial_\mu\partial_\nu B_a^{\nu\mu} + \partial_\nu\partial_\mu B_a^{\mu\nu}) = \frac{1}{2}(\partial_\mu\partial_\nu B_a^{\nu\mu} - \partial_\nu\partial_\mu B_a^{\nu\mu}) = 0, \tag{6.185}$$

因此新的流$j_a^\mu + \partial_\nu B_a^{\nu\mu}$也是守恒的.

接下来,让我们考虑一系列场的乘积,即$X = \Phi_1(x_1)\Phi_2(x_2)...\Phi_n(x_n)$,这样在路径积分下其关联函数可以写成

$$\begin{aligned}\langle X\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\int[d\Phi]\Phi_1(x_1)...\Phi_n(x_n)e^{-S[\Phi]} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\int[d\Phi']\Phi_1'(x_1)...\Phi_n'(x_n)e^{-S[\Phi']} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\int[d\Phi']X'e^{-S[\Phi']}.\end{aligned} \tag{6.186}$$

注意到Φ在积分中仅仅是哑指标,因此可以替换为Φ'.注意到无穷小变换下$\Phi'(x) = \Phi(x) - i\omega_a(x)G_a\Phi(x)$,这样有$X' = X + \delta X$,因此准确到$\omega_a$一阶的$\delta X$是

$$\begin{aligned}\delta X &= -i\sum_{j=1}^n\left(\Phi_1(x_1)...G_a\Phi_j(x_j)...\Phi_n(x_n)\right)\omega_a(x_j) \\ &= -i\int dx\omega_a(x)\sum_{j=1}^n\left(\Phi_1(x_1)...G_a\Phi_j(x)...\Phi_n(x_n)\right)\delta(x-x_j)\end{aligned} \tag{6.187}$$

同时,$S[\Phi'] = S' = S + \delta S = S + \int d^dx\partial_\mu j_a^\mu\omega_a(x)$.如果积分测度$[d\Phi'] = [d\Phi]$,那

么有

$$\begin{aligned}\langle X\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\int[d\Phi](X+\delta X)e^{-S-\int d^dx\partial_\mu j_a^\mu\omega_a(x)}\\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\int[d\Phi](X+\delta X)e^{-S}\left(1-\int d^dx\partial_\mu j_a^\mu\omega_a(x)+\mathcal{O}(\omega^2)\right)\\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\int[d\Phi]\left[(Xe^{-S}+\delta Xe^{-S})-X\int d^dx\partial_\mu j_a^\mu\omega_a(x)+\mathcal{O}(\omega^2)\right]\\ &= \langle X\rangle+\langle\delta X\rangle-\int d^dx\partial_\mu\langle j_a^\mu X\rangle\omega_a(x)+\mathcal{O}(\omega^2). \qquad (6.188)\end{aligned}$$

这样我们得到

$$\langle\delta X\rangle=\int d^dx\partial_\mu\langle j_a^\mu(x)X\rangle\omega_a(x). \qquad (6.189)$$

注意∂_μ仅作用在$j_a^\mu(x)$上而不作用于X.代入$\delta X, X$的具体形式并且比较上式两边可得所谓的Ward恒等式:

$$\boxed{-i\sum_{j=1}^n\langle\Phi_1(x_1)...G_a\Phi_j(x)...\Phi_n(x_n)\rangle\delta(x-x_j)=\partial_\mu\langle j_a^\mu(x)\Phi_1(x_1)...\Phi_n(x_n)\rangle}$$

Ward恒等式说明无穷小或者说连续的坐标变换$x\to x'$下(满足积分测度不变的情况下)场的关联函数所具有的限制条件.这个限制条件与坐标变换的生成元G_a和守衡流j_a^μ有关.

现在,让我们考虑无穷小时空平移变换,$x'^\nu=x^\nu+\epsilon^\nu$,这样$\frac{\delta x^\nu}{\delta\epsilon^a}=\delta_a^\nu$, $\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\epsilon^a}=0$,

$$\begin{aligned}j_a^\mu &= \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\partial_\nu\Phi-\delta_\nu^\mu\mathcal{L}\right)\delta_a^\nu\\ &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\partial_a\Phi-\delta_a^\mu\mathcal{L} \qquad (6.190)\end{aligned}$$

然后用$\eta^{a\nu}$作用j_a^μ可得,

$$\begin{aligned}T_c^{\mu\nu} &\equiv \eta^{a\nu}j_a^\mu=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\partial_a\Phi\eta^{a\nu}-\delta_a^\mu\mathcal{L}\eta^{a\nu}\\ &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\partial^\nu\Phi-\eta^{\mu\nu}\mathcal{L} \qquad (6.191)\end{aligned}$$

这里的$T_c^{\mu\nu}$称为正则形式下的能量-动量张量.由流守恒$\partial_\mu j_a^\mu=0$可得能-动张量的守恒律$\partial_\mu T^{\mu\nu}=0$.此外,能-动张量对应的守恒荷就是四维动量$P^\nu$:

$$P^\nu=\int d^{d-1}xT_c^{0\nu}, \qquad (6.192)$$

特别是$\nu=0$分量为

$$\begin{aligned}P^0 &= \int d^{d-1}xT_c^{00}=\int d^{d-1}x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_0\Phi)}\partial^0\Phi-\eta^{00}\mathcal{L}\\ &= \int d^{d-1}x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\Phi)}\partial_t\Phi-\mathcal{L}\\ &= \int d^{d-1}x\mathcal{H} \qquad (6.193)\end{aligned}$$

这说明P^0就是哈密顿量,也就是体系的能量.

当然,既然是守衡流,那么我们可以添加一些项使得$T_c^{\mu\nu}$称为对称张量,一般而言可以定义如下对称的能-动张量:

$$T_B^{\mu\nu} = T_c^{\mu\nu} + \partial_\rho B^{\rho\mu\nu} \tag{6.194}$$

这里$B^{\rho\mu\nu}$是关于前两个指标反对称的张量,即$B^{\rho\mu\nu} = -B^{\mu\rho\nu}$.因此,我们总能使得能动-张量称为对称张量,这对于计算是方便的.同时,坐标变换$x^\mu \to x^\mu = x^\mu + \epsilon^\mu(x)$的无穷小变换所导致的作用量变化是

$$\delta S = -\int dx \partial_\mu T_B^{\mu\nu} \epsilon_\nu. \tag{6.195}$$

利用无穷小Lorentz变换的结果$\frac{\delta x^\rho}{\delta \omega_{\mu\nu}} = \frac{1}{2}(\eta^{\rho\mu}x^\nu - \eta^{\rho\nu}x^\mu), \frac{\delta F}{\delta \omega_{\mu\nu}} = -i\frac{1}{2}S^{\mu\nu}\Phi$,可以构造出明确的$B^{\mu\rho\nu}$,(但不唯一)

$$B^{\mu\rho\nu} = \frac{i}{4}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi)} S^{\nu\rho}\Phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\rho \Phi)} S^{\mu\nu}\Phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu \Phi)} S^{\mu\rho}\Phi\right]. \tag{6.196}$$

最后,让我们考虑能-动张量的两一种定义方式.注意到在$x^\mu \to x^\mu = x^\mu + \epsilon^\mu(x)$下作用量的变化可以写成,

$$\delta S = \int dx T_B^{\mu\nu} \partial_\mu \epsilon_\nu = \frac{1}{2}\int dx T_B^{\mu\nu}(\partial_\mu \epsilon_\nu + \partial_\nu \epsilon_\mu)$$

这里我们利用了$T_B^{\mu\nu}$的对称特性.接下来,考虑坐标变换下时空度规的变化,即

$$\begin{aligned} g'_{\mu\nu} &= \frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu}\frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\nu} g_{\alpha\beta} \\ &= (\delta^\alpha_\mu - \partial_\mu \epsilon^\alpha)(\delta^\beta_\nu - \partial_\nu \epsilon^\beta) g_{\alpha\beta} \\ &= g_{\mu\nu} - (\partial_\mu \epsilon_\nu + \partial_\nu \epsilon_\mu) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \end{aligned} \tag{6.197}$$

因此无穷小坐标变换下度规的变化是$\delta g_{\mu\nu} = g'_{\mu\nu} - g_{\mu\nu} = -(\partial_\mu \epsilon_\nu + \partial_\nu \epsilon_\mu)$,对比$\delta S$的形式,我们有

$$\boxed{\delta S = -\frac{1}{2}\int dx T_B^{\mu\nu} \delta g_{\mu\nu}} \tag{6.198}$$

让我们考虑标量场的例子.其在弯曲空间的作用量是

$$S = \int d^d x \sqrt{g}\mathcal{L} = \frac{1}{2}\int d^d x \sqrt{g}(g^{\mu\nu}\partial_\mu \varphi \partial_\nu \varphi + m^2\varphi^2), \tag{6.199}$$

其中g表示度规的行列式$\det g_{\mu\nu}$.利用$\det A = e^{\mathrm{Tr}\ln A}$和$\delta g^{\mu\nu} = -g^{\alpha\mu}g^{\beta\nu}\delta g_{\alpha\beta}$可得

$$\delta\sqrt{g} = \frac{1}{2\sqrt{g}}\delta(\det g) = \frac{1}{2\sqrt{g}} g (g^{-1})_{\beta\alpha}\delta g_{\alpha\beta} = \frac{\sqrt{g}}{2} g^{\alpha\beta}\delta g_{\alpha\beta}. \tag{6.200}$$

这样对于标量场作用量有(只对度规取变化而不对场做)

$$\begin{aligned}\delta S &= \frac{1}{2}\int d^dx\delta\sqrt{g}(g^{\mu\nu}\partial_\mu\varphi\partial_\nu\varphi+m^2\varphi^2)+\frac{1}{2}\int d^dx\sqrt{g}\delta g^{\mu\nu}\partial_\mu\varphi\partial_\nu\varphi \\ &= \frac{1}{2}\int d^dx\frac{\sqrt{g}}{2}g^{\alpha\beta}(g^{\mu\nu}\partial_\mu\varphi\partial_\nu\varphi+m^2\varphi^2)\delta g_{\alpha\beta}-\frac{1}{2}\int d^dx\sqrt{g}g^{\alpha\mu}g^{\beta\nu}\partial_\mu\varphi\partial_\nu\varphi\delta g_{\alpha\beta} \\ &= \int d^dx\sqrt{g}\left[\frac{1}{2}g^{\alpha\beta}\mathcal{L}-\frac{1}{2}\partial^\alpha\varphi\partial^\beta\varphi\right]\delta g_{\alpha\beta} \qquad (6.201)\end{aligned}$$

这样对比$\delta S=-\frac{1}{2}\int dxT_B^{\alpha\beta}\delta g_{\alpha\beta}$并把$\sqrt{g}$归并到积分测度可得标量场的能-动张量为

$$T_B^{\alpha\beta}=-g^{\alpha\beta}\mathcal{L}+\partial^\alpha\varphi\partial^\beta\varphi. \qquad (6.202)$$

共形变换的生成元

现在,让我们考虑共形变换的生成元.我们设有如下无穷小坐标变换:[33]

$$x^\mu\to x'^\mu=x^\mu+\varepsilon^\mu \qquad (6.203)$$

这里ε^μ是无穷小量.假设上述变换是一个共形变换,那么必有$g'_{\mu\nu}(x')=\Omega(x)g_{\mu\nu}(x)$.设$\Omega(x)=1-f(x)$而$|f(x)|<<1$. 这样有

$$g'_{\mu\nu}(x')=(1-f(x))g_{\mu\nu}(x)=g_{\mu\nu}(x)-f(x)g_{\mu\nu}(x). \qquad (6.204)$$

另一方面,由$g'_{\mu\nu}(x')=\frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu}\frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\nu}g_{\alpha\beta}(x)$以及$x'=x+\varepsilon$可得

$$\frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu}\frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\nu}=\frac{\partial(x'^\alpha-\varepsilon^\alpha)}{\partial x'^\mu}\frac{\partial(x'^\beta-\varepsilon^\beta)}{\partial x'^\nu}=\left(\delta_\mu^\alpha-\frac{\partial\varepsilon^\alpha}{\partial x'^\mu}\right)\left(\delta_\nu^\beta-\frac{\partial\varepsilon^\beta}{\partial x'^\nu}\right). \qquad (6.205)$$

忽略ε^2以及更高阶项,($\frac{\partial\varepsilon^\alpha}{\partial x'^\mu}=\frac{\partial\varepsilon^\alpha}{\partial x^\mu}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)$)我们发现

$$\frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu}\frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\nu}=\delta_\mu^\alpha\delta_\nu^\beta-\delta_\mu^\alpha\frac{\partial\varepsilon^\beta}{\partial x^\nu}-\delta_\nu^\beta\frac{\partial\varepsilon^\alpha}{\partial x^\mu}=\delta_\mu^\alpha\delta_\nu^\beta-\delta_\mu^\alpha\partial_\nu\varepsilon^\beta-\delta_\nu^\beta\partial_\mu\varepsilon^\alpha \qquad (6.206)$$

这样有

$$\begin{aligned}g'_{\mu\nu}(x') &= \delta_\mu^\alpha\delta_\nu^\beta g_{\alpha\beta}(x)-\left(\delta_\mu^\alpha\partial_\nu\varepsilon^\beta+\delta_\nu^\beta\partial_\mu\varepsilon^\alpha\right)g_{\alpha\beta}(x) \\ &= g_{\mu\nu}(x)-\left(\partial_\nu\varepsilon^\beta g_{\mu\beta}(x)+\partial_\mu\varepsilon^\alpha g_{\alpha\nu}(x)\right) \\ &= g_{\mu\nu}(x)-(\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu) \qquad (6.207)\end{aligned}$$

这里我们已经用了$g_{\mu\nu}$是时空坐标无关的欧氏度规.(共形场论讨论是默认如此)把上述结果与$g'_{\mu\nu}(x')=(1-f(x))g_{\mu\nu}(x)$对比有

$$\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu=f(x)g_{\mu\nu}. \qquad (6.208)$$

[33]我们喜欢无穷小变换是因为这样能够用泰勒展开.

两边乘以$g^{\mu\nu}$并对重复指标求和有$g^{\mu\nu}g_{\mu\nu}=d$,d是时空维度.$g^{\mu\nu}(\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu)=\partial^\mu\varepsilon_\mu+\partial^\nu\varepsilon_\nu=2\partial_\mu\varepsilon^\mu\equiv 2\partial\cdot\varepsilon$. 为了简化记号我们采用了$\partial_\mu a^\mu=\partial^\mu a_\mu=\partial\cdot a$.我们发现

$$\frac{d}{2}f(x)=\partial\cdot\varepsilon\Rightarrow\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu=\frac{2}{d}\partial\cdot\varepsilon g_{\mu\nu}=\frac{2}{d}\delta_{\mu\nu}\partial\cdot\varepsilon. \tag{6.209}$$

定义$\Box=\partial_\mu\partial^\mu$,那么$\partial^\mu(\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu)=\Box\varepsilon_\nu+\partial_\nu\partial\cdot\varepsilon$ 则有

$$\partial^\mu(\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu)=\frac{2}{d}\partial^\mu\delta_{\mu\nu}\partial\cdot\varepsilon\Rightarrow\Box\varepsilon_\nu+\partial_\nu\partial\cdot\varepsilon=\frac{2}{d}\partial_\nu\partial\cdot\varepsilon. \tag{6.210}$$

即有

$$\boxed{\Box\varepsilon_\nu+\left(1-\frac{2}{d}\right)\partial_\nu\partial\cdot\varepsilon=0} \tag{6.211}$$

或者再对x^μ求导有

$$(\delta_{\mu\nu}\Box+(d-2)\partial_\mu\partial_\nu)\partial\cdot\varepsilon=0. \tag{6.212}$$

既然ε是任意的,那么上述恒成立要求$\partial\cdot\varepsilon$是关于x的不超过一阶的多项式.这说明ε本身是关于x的不超过二阶的多项式.因此有

$$\varepsilon^\mu=a_0^\mu+a_1x^\mu+a_{2\nu}^\mu x^\nu+a_3^\mu x^2+a_4^\nu x_\nu x^\mu. \tag{6.213}$$

ε的上述表达式对应四种具体的无穷小坐标变换,即

- $\varepsilon^\mu=a^\mu$,a^μ为常数.这是空间平移变换$x^\mu\to x'^\mu=x^\mu+a^\mu$.
- $\varepsilon^\mu=\lambda x^\mu$,$\lambda$为常数.这是标度变换$x^\mu\to x'^\mu=(1+\lambda)x^\mu$.
- $\varepsilon^\mu=\omega_\nu^\mu x^\nu$,$\omega_\nu^\mu$是反对称矩阵.这是空间旋转变换$x^\mu\to x'^\mu=(\delta_\nu^\mu+\omega_\nu^\mu)x^\nu$.
- $\varepsilon^\mu=b^\mu x^2-2x^\mu(b_\nu x^\nu)$,$b^\mu$为常数.这是特殊共形变换$x^\mu\to x'^\mu=(1-2b_\nu x^\nu)x^\mu+b^\mu x^2$.

对于这四类变换,我们可以定义相应的生成元:[34](可以利用 $iG_a\Phi(x)=\frac{\delta x^\mu}{\delta\omega_a}\partial_\mu\Phi(x)-\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega_a}$)

- $P_\mu=-i\partial_\mu$是平移的生成元(四维动量算符);
- $D=-ix^\mu\partial_\mu$是标度变换的生成元;
- $L_{\mu\nu}=i(x_\mu\partial_\nu-x_\nu\partial_\mu)$是旋转的生成元(角动量算符);
- $K_\mu=-i(x^2\partial_\mu-2x_\mu(x^\nu\partial_\mu))$是特殊共形变换的生成元.

[34]这些生成元构成了所谓的共形群

这些生成元之间的对易关系就是所谓的共形代数:

$$[D,P_\mu]=iP_\mu,\quad [D,K_\mu]=-iK_\mu$$
$$[K_\mu,P_\nu]=2i(\eta_{\mu\nu}D-L_{\mu\nu}),\quad [K_\rho,L_{\mu\nu}]=i(\eta_{\rho\mu}K_\nu-\eta_{\rho\nu}K_\mu)$$
$$[P_\rho,L_{\mu\nu}]=i(\eta_{\rho\mu}P_\nu-\eta_{\rho\nu}P_\mu),\quad [L_{\mu\nu},L_{\rho\sigma}]=i(\eta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma}+\eta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}-\eta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma}-\eta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho}).$$

把这些生成元作用到函数(所要处理的场)上就能得到坐标变换后的函数.例如

$$e^{i\lambda D}\psi(x)=(1+i\lambda D)\psi(x)=\psi(x)+\lambda x^\mu\partial_\mu\psi(x) \tag{6.214}$$

而

$$\psi(x+\lambda x)=\psi(x)+\lambda x^\nu\partial_\nu\psi(x) \tag{6.215}$$

这说明$e^{i\lambda D}\psi(x)=\psi(x+\lambda x)$也就是$e^{i\lambda D}$使得$\psi(x)$经过标度变换成为$\psi((1+\lambda)x)$.

把四种无穷小坐标变换积分后就得到四个有限变换.即有

$$x\to x'=x+a\quad x\to x'=\Lambda x\quad x\to x'=\lambda x\quad x\to x'=\frac{x+bx^2}{1+2b\cdot x+b^2x^2}. \tag{6.216}$$

前两个对应的度规的共形变换是$\Omega(x)=1$,标度变换有$\Omega(x)=\lambda^{-2}$而特殊共形状变换给出$\Omega(x)=(1+2b\cdot x+b^2x^2)^2$.

共形场

我们已经讨论了一般时空中的共形变换,这些共形变换的具体形式可由它们的生成元得到.[35]

记共形变换$x\to x'$的雅可比行列式为$J(x)=|\frac{\partial x'}{\partial x}|=1/\sqrt{g'(x')}=\Omega^{-d/2}$.($g$是度规(矩阵)对应的行列式:$g=\det g_{\mu\nu}$)[36]

现在,如果在共形变换$x\to x'$下,场$\phi_j(x)$按照如下规则变换,那么我们称ϕ_j为准初级场(quasi-primary field):

$$\phi_j(x)\to\phi'_j(x')=J^{-\Delta_j/d}(x)\phi_j(x). \tag{6.217}$$

这里Δ_j是ϕ_j的共形维度.我们知道准初级场的关联函数定义为

$$\langle\phi_1(x'_1)...\phi_n(x'_n)\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int\mathcal{D}\phi\phi_1(x'_1)...\phi_n(x'_n)e^{-S[\phi]} \tag{6.218}$$

然后我们把积分变量也就是ϕ重标为ϕ',则有

$$\langle\phi_1(x'_1)...\phi_n(x'_n)\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int\mathcal{D}\phi'\phi'_1(x'_1)...\phi'_n(x'_n)e^{-S[\phi']} \tag{6.219}$$

[35]空间维度$d>1$的共形场论可以参考综述[Rychkov,EPFL Lectures on Conformal Field Theory in $D\geqslant 3$ Dimensions,arXiv:1601.05000]

[36]$\int d^dx'=\int d^dx|\frac{\partial x'}{\partial x}|$

如果作用量在坐标变换$x \to x'$下保持不变,那么$S[\phi'] = S[\phi]$.同时根据定义有$\phi'(x') = \mathcal{F}(\phi(x))$,那么

$$\langle \phi_1(x_1')...\phi_n(x_n')\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}\int \mathcal{D}\phi \mathcal{F}(\phi_1(x_1))...\mathcal{F}(\phi_n(x_n))e^{-S[\phi]} = \langle \mathcal{F}(\phi_1(x_1))...\mathcal{F}(\phi_n(x_n))\rangle \tag{6.220}$$

这里我们假设积分测度$D\phi = D\phi'$.这样我们发现

$$\langle \phi_1(x_1')...\phi_n(x_n')\rangle = \langle \mathcal{F}(\phi_1(x_1))...\mathcal{F}(\phi_n(x_n))\rangle. \tag{6.221}$$

既然准初级场满足$\phi_j'(x') = J^{-\Delta_j/d}(x)\phi_j(x)$,这说明场本身形式的改变是$J^{-\Delta_j/d}(x)$,把这个结果代入上式的每一个 $\mathcal{F}(\phi(x))$有

$$\langle \phi_1(x_1')...\phi_n(x_n')\rangle = \langle J^{-\Delta_1/d}(x_1)\phi_1(x_1)...J^{-\Delta_n/d}(x_n)\phi_n(x_n)\rangle \tag{6.222}$$

这样准初级场的关联函数满足如下关系:

$$\boxed{\langle \phi_1(x_1)...\phi_n(x_n)\rangle = J^{\Delta_1/d}(x_1)...J^{\Delta_n/d}(x_n)\langle \phi_1(x_1')...\phi_n(x_n')\rangle} \tag{6.223}$$

如果我们选择时空平移变换,即$x' = x + a$,那么$J = 1$而

$$\langle \phi_1(x_1)...\phi_n(x_n)\rangle = \langle \phi_1(x_1 + a)...\phi_n(x_n + a)\rangle \tag{6.224}$$

如果选择标度变换$x' = \lambda x$,则有

$$J = \left|\frac{\partial x'}{\partial x}\right| = \mathrm{Det}\begin{pmatrix} \lambda & 0 & ... & 0 \\ 0 & \lambda & ... & 0 \\ ... & ... & ... & 0 \\ 0 & ... & ... & \lambda \end{pmatrix} = \lambda^d \tag{6.225}$$

而

$$\langle \phi_1(x_1)...\phi_n(x_n)\rangle = \lambda^{\Delta_1+...+\Delta_n}\langle \phi_1(\lambda x_1)...\phi_n(\lambda x_n)\rangle \tag{6.226}$$

当我们具体考虑具体的共形变换时,公式6.223能够很大程度上限制关联函数的形式.例如,让我们考虑两点关联函数$\langle \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle$.标度不变性要求

$$\langle \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle = \lambda^{\Delta_1+\Delta_2}\langle \phi_1(\lambda x_1)\phi_2(\lambda x_{2er})\rangle \tag{6.227}$$

而平移不变性要求$\langle \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle$仅依赖于相对位移$x_1 - x_2$.进一步考虑旋转不变性则说明关联函数不依赖于相对位移的方向也就是$\langle \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle = f(|x_1 - x_2|)$.因此同时满足标度,平移和旋转的关联函数是

$$\langle \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle = \lambda^{\Delta_1+\Delta_2}f(|\lambda||x_1 - x_2|) \tag{6.228}$$

让我们设$\lambda = |x_1 - x_2|^{-1}$并假设$f(1)$是非零的有限常数,那么有

$$\langle \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle = \frac{1}{|x_1 - x_2|^{\Delta_1+\Delta_2}}f(1) \tag{6.229}$$

也就是

$$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle = \frac{\lambda_{12}}{|x_1-x_2|^{\Delta_1+\Delta_2}} \tag{6.230}$$

如果再利用特殊共形变换则有[37]

$$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\rangle = \frac{\lambda_{12}}{|x_1-x_2|^{2\Delta_1}}\delta_{\Delta_1,\Delta_2}. \tag{6.231}$$

类似的,对于三点关联函数有

$$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\rangle = \frac{\lambda_{123}}{|x_1-x_2|^{\Delta_1+\Delta_2-\Delta_3}|x_2-x_3|^{\Delta_2+\Delta_3-\Delta_1}|x_1-x_3|^{\Delta_1+\Delta_3-\Delta_2}}. \tag{6.232}$$

通常Δ_j, λ_{123}这些参数称为CFT数据.事实上,这些CFT数据不仅决定两点和三点关联函数,它们还可以用来计算所有局域算符的关联函数,包括四点和更高阶的关联函数.为了看清这一点,我们需要由Wilson和Kadanoff所发明的算符乘积展开(operator product expansion,OPE).OPE指的是在关联函数中,我们把两个临近的局域算符用单个局域算符的级数来表示,即

$$\phi_i(x_1)\phi_j(x_2) = \sum_k f_{ijk}\phi_k(y) \tag{6.233}$$

系数f_{ijk}仅依赖于x_1, x_2, y的相对位置(关于y的导数)和其他参数.当然,在CFT中,我们可以把f_{ijk}与三点关联函数的系数λ_{ijk}联系在一起,即

$$f_{ijk}(x_1, x_2, y, \partial y) = \lambda_{ijk}\hat{f}_{ijk}(x_1, x_2, y, \partial y) \tag{6.234}$$

$\hat{f}_{ijk}$依赖于$\Delta_i, \Delta_j, \Delta_k, \phi$的(共形)自旋以及空间维度$d$.这样,利用OPE,我们可以把$n$点关联函数约化为$n-1$点关联函数,

$$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)...\phi_n(x_n)\rangle = \sum_k f_{12k}\langle\phi_k(y)\phi_3(x_3)...\phi_n(x_n)\rangle \tag{6.235}$$

不断使用OPE最终可以把n点关联函数用两点关联函数,CFT参数,共形维度和自旋等直接表示.

现在,让我们考虑四点关联函数$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\phi_4(x_4)\rangle$,显然我们可以先用OPE把$\phi_1\phi_2$变成$\phi_k$,同时把$\phi_3\phi_4$变成$\phi_m$,即

(6.236)

$$\begin{aligned}\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\phi_4(x_4)\rangle &= \sum_{k,m} f_{12k}f_{34m}\langle\phi_k(y)\phi_m(y')\rangle = \sum_{k,m} f_{12k}f_{34m}\delta_{km}\langle\phi_k(y)\phi_k(y')\rangle \\ &= \sum_k f_{12k}f_{34k}\langle\phi_k(y)\phi_k(y')\rangle \end{aligned} \tag{6.237}$$

[37]在文献中通常设$\lambda_{12}=1$

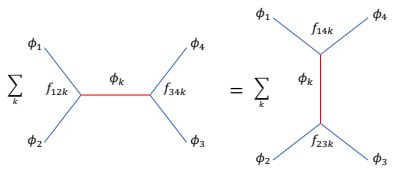


Figure 6.9: 四点关联函数$\langle\phi_1\phi_2\phi_3\phi_4\rangle$的交叉关系.

当然,我们也可以用OPE把$\phi_1\phi_3$变成ϕ_k,再把$\phi_1\phi_2$变成ϕ_k变成ϕ_m,这样有

$$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\phi_4(x_4)\rangle = \sum_{k,m} f_{12k}f_{34m}\langle\phi_k(y)\phi_m(y')\rangle = \sum_k f_{23k}f_{14k}\langle\phi_k(\tilde{y})\phi_k(\tilde{y}')\rangle$$

显然,在OPE收敛的区域,上述两式应该相等,这就是所谓的交叉关系(方程)(crossing relation equation),通常用图形表示为图6.9. 利用$f_{ijk}(x_1,x_2,y,\partial y) = \lambda_{ijk}\hat{f}_{ijk}(x_1,x_2,y,\partial y)$,我们可以把四点关联函数写成

$$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\phi_4(x_4)\rangle = \sum_{k,m} f_{12k}f_{34m}\langle\phi_k(y)\phi_m(y')\rangle = \sum_k \lambda_{12k}\lambda_{34k}W_k$$

这里$W_k = \hat{f}_{12k}(x_1,x_2,y,\partial y)\hat{f}_{34k}(x_3,x_4,y',\partial y')\langle\phi_k(y)\phi_k(y')\rangle$称为共形分波(conformal partial wave).这样我们用共形分波和λ_{ijk}表示了四点关联函数,文献中称为共形分波分解.

利用交叉关系,虽然四点关联函数$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\phi_4(x_4)\rangle$的具体形式无法通过共形不变性直接确定,但我们能得到如下的表达式:

$$\langle\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\phi_4(x_4)\rangle = g(\mu,\nu)K_4(x_1,x_2,x_3,x_4) \tag{6.238}$$

$$K_4(x_1,x_2,x_3,x_4) = \frac{1}{x_{12}^{(\Delta_1+\Delta_2)/2}x_{34}^{\frac{\Delta_3+\Delta_4}{2}}}\left(\frac{x_{24}^2}{x_{14}^2}\right)^{\Delta_{12}/2}\left(\frac{x_{14}^2}{x_{13}^2}\right)^{\Delta_{34}/2} \tag{6.239}$$

$x_{ij} = x_i - x_j, \Delta_{ij} = \Delta_i - \Delta_j$.$g(\mu,\nu)$是关于$\mu = \frac{x_{12}^2x_{34}^2}{x_{13}^2x_{24}^2}, \nu = \frac{x_{14}^2x_{23}^2}{x_{13}^2x_{24}^2}$ 的函数.进一步,利用共形分波W_k,我们发现

$$W_k = g_{\Delta_k,l_k}^{\Delta_{12},\Delta_{34}}(\mu,\nu)K_4 \tag{6.240}$$

这里$g_{\Delta_k,l_k}^{\Delta_{12},\Delta_{34}}(\mu,\nu)$称为共形块(conformal block),($l_k$是$\phi_k$的共形自旋)因此四点关联函数的$g(\mu,\nu)$用共形块表示为

$$g(\mu,\nu) = \sum_k \lambda_{12k}\lambda_{34k}g_{\Delta_k,l_k}^{\Delta_{12},\Delta_{34}}(\mu,\nu). \tag{6.241}$$

这样我们发现交叉关系也可以用共形块表示为

$$\boxed{\sum_k \lambda_{12k}\lambda_{34k}\frac{g^{\Delta_{12},\Delta_{34}}_{\Delta_k,l_k}(z,\bar{z})}{(z\bar{z})^{(\Delta_1+\Delta_2)/2}} = \sum_k \lambda_{32k}\lambda_{14k}\frac{g^{\Delta_{32},\Delta_{14}}_{\Delta_k,l_k}(1-z,1-\bar{z})}{((1-z)(1-\bar{z}))^{(\Delta_3+\Delta_2)/2}}} \tag{6.242}$$

这里$z,\bar{z}$是x_1,x_2,x_3,x_4在所谓共形坐标系下的表示.

换句话说,如果我们能够求出所有的共形块,那么就得到了所有的四点关联函数.

- 实际上,利用交叉关系,整体对称性和幺正性,我们可以对所有共形数据或者说共形块给出很强的限制,这些限制等价于部分求解了CFT,这也称为共形自举(conformal bootstrap).[38]例如幺正性要求标量场$\Delta \geq 1/2(d=3)$,$\Delta \geq 1(d=4)$而三点关联函数的系数λ_{123}必须是实数.
- 通过数值求解共形自举的一系列方程,人们已经得到三维和四维空间模型的临界性质,例如三维Ising模型,$O(N)$矢量模型,QED.

因此,我们发现对于一个共形不变的理论也就是共形场论,只要我们知道所有准初级场的标度维数Δ_j,参数λ_{ijk}以及共形块,那么我们就能够得到两点,三点,四点以及更高阶关联函数的精确形式.根据不同的准初级场和不同的标度维数,原则上我们能够分类所有的共形场论.

二维共形变换的生成元与Virasoro代数

先前的讨论对任意空间维度都成立.对于二维,由$\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu=\frac{2}{d}g_{\mu\nu}\partial\cdot\varepsilon$, 我们有

$$\partial_\nu\varepsilon_\mu+\partial_\mu\varepsilon_\nu=\delta_{\mu\nu}\partial_\rho\varepsilon^\rho \tag{6.243}$$

设二维时空的坐标是$x^\mu=(x^1,x^2)$那么有$(\mu=\nu=1)$

$$\partial_1\varepsilon_1+\partial_1\varepsilon_1=\partial_1\varepsilon_1+\partial_2\varepsilon_2\Rightarrow\partial_1\varepsilon_1=\partial_2\varepsilon_2 \tag{6.244}$$

而$(\mu=1,\nu=2)$

$$\partial_2\varepsilon_1+\partial_2\varepsilon_1=0\Rightarrow\partial_2\varepsilon_1=-\partial_2\varepsilon_1. \tag{6.245}$$

注意到如果设复数坐标$z=x_1+ix_2$,复变函数$\varepsilon=\varepsilon_1+i\varepsilon_2$,那么上述两个方程就是复变函数论中著名的柯西−黎曼条件.既然物理上$\varepsilon_1,\varepsilon_2$性质良好,那么结合柯西−黎曼条件可知$\varepsilon$是关于复变量$z$的解析函数,即

$$\varepsilon=\varepsilon(x_1,x_2)=\varepsilon(z)\qquad\oint dz\varepsilon(z)=0 \tag{6.246}$$

而$\bar{\varepsilon}(\bar{z})$是$\bar{z}=x_1-ix_2$的解析函数.因此,我们发现二维空间的共形变换可以写成

$$z\to z'=z+\varepsilon(z)\equiv f(z) \tag{6.247}$$

[38]关于共形自举可以参考综述文章[Poland,Rychkov,Vichi,The conformal bootstrap: Theory, numerical techniques, and applications,Rev.Mod.Phys. **91**,015002(2019)]

这说明每一个解析函数$f(z)$定义了一个从z到$f(z)$的共形变换.同理有$\bar{z}\to\bar{f}(\bar{z})$也定义了共形变换.这样我们发现

$$ds^2=dzd\bar{z}\to ds'^2=dz'd\bar{z}'=\frac{\partial f(z)}{\partial z}\frac{\partial\bar{f}(\bar{z})}{\partial\bar{z}}dzd\bar{z} \tag{6.248}$$

这样有$\Omega(x)=\partial_z f(z)\partial_{\bar{z}}\bar{f}(\bar{z})\equiv|\partial_z f(z)|^2$.

下面我们寻找二维空间共形变换的生成元.设标量场$\phi=\phi(z)$,那么在坐标/共形变换$z\to z'=z+\varepsilon$的情况下有

$$\phi(z')=\phi(z)+\varepsilon(z)\partial_z\phi(z)=e^{\varepsilon(z)\partial_z}\phi(z). \tag{6.249}$$

既然$\varepsilon(z)$是解析函数,那么其有如下泰勒展开:

$$\varepsilon(z)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nz^n\equiv-\sum_{n=-1}^{\infty}\varepsilon_nz^{n+1}. \tag{6.250}$$

则有

$$\varepsilon(z)\partial_z=-\sum_{n=-1}^{\infty}\varepsilon_nz^{n+1}\partial_z=\sum_{n=-1}^{\infty}\varepsilon_nL_z \tag{6.251}$$

这里算符L_n是二维共形变换的生成元,其定义如下:

$$\boxed{L_n=-z^{n+1}\partial_z} \tag{6.252}$$

既然n有无穷多取值,那么我们就有无穷多生成元.下面,我们验证L_n确实是生成元.考虑共形变换$z\to z'=z+\varepsilon=z-\varepsilon_nz^{n+1}$,这样有

$$\phi(z')=\phi(z)+\varepsilon\partial_z\phi(z)=\phi(z)-\varepsilon_nz^{n+1}\partial_z\phi(z) \tag{6.253}$$

而另一方面

$$e^{\varepsilon_nL_n}\phi(z)=\phi(z)+\varepsilon_nL_n\phi(z)=\phi(z)-\varepsilon_nz^{n+1}\partial_z\phi(z) \tag{6.254}$$

因此L_n是产生共形变换$z\to z'=z-\varepsilon_nz^{n+1}$的生成元.

对于生成元L_n有如下的对易关系:

$$\boxed{[L_m,L_n]=(m-n)L_{m+n}} \tag{6.255}$$

这个关系称为Virasoro代数.让我们验证这个重要的关系.设$\phi(z)$是任意的标量场,那么有

$$\begin{aligned}
[L_m,L_n]\phi(z) &= (L_mL_n-L_nL_m)\phi(z)=z^{m+1}\partial_z(z^{n+1}\partial_z\phi(z))-z^{n+1}\partial_z(z^{m+1}\partial_z\phi(z))\\
&= z^{m+1}(\partial_zz^{n+1}\partial_z\phi(z)+z^{n+1}\partial_z\partial_z\phi(z))-z^{n+1}(\partial_zz^{m+1}\partial_z\phi(z)+z^{m+1}\partial_z\partial_z\phi(z))\\
&= z^{m+1}((n+1)z^n\partial_z\phi(z)+z^{n+1}\partial_z\partial_z\phi(z))-z^{n+1}((m+1)z^m\partial_z\phi(z)+z^{m+1}\partial_z\partial_z\phi(z))\\
&= (n+1)z^{m+n+1}\partial_z\phi(z)-(m+1)z^{m+n+1}\partial_z\phi(z)\\
&= (n-m)z^{m+n+1}\partial_z\phi(z)=-(m-n)z^{m+n+1}\partial_z\phi(z)=L_{m-n}\phi(z).
\end{aligned} \tag{6.256}$$

由于$\phi(z)$是任意的,因此Virasoro代数$[L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n}$恒成立.同理有生成元$\bar{L}_n = -\bar{z}^{n+1}\partial_{\bar{z}}$使$\bar{z} \to \bar{z}'$并满足$[\bar{L}_m, \bar{L}_n] = (m-n)\bar{L}_{m+n}$.而$[L_m, \bar{L}_n] = 0$.

在所有生成元中$n = -1, 0, 1$地位最为特殊,这是因为它们直接对应平移,标度和特殊共形变换:

- $n = -1$:$L_{-1} = -\partial_z$产生平移$z' = e^{-\varepsilon L_{-1}} z = z + \varepsilon$;
- $n = 0$:$L_0 = -z\partial_z$产生标度变换$z' = e^{-\varepsilon L_0} z = (1+\varepsilon)z$;
- $n = 1$:$L_1 = -z^2\partial_z$,$z' = e^{-\varepsilon L_1} z = z + \varepsilon z^2$.

$\bar{L}_{-1}, \bar{L}_0, \bar{L}_1$则产生对于$\bar{z}$的平移,标度与特殊共形变换.注意到平移,标度等变换可以用Mobius变换直接表示:

$$z' = f(z) = \frac{az+b}{cz+d} \tag{6.257}$$

例如平移变换对应$a = d, c = 0$.

此外,$\frac{1}{2}(\bar{L}_0 - L_0)$是旋转操作的生成元:

$$\frac{1}{2}(\bar{L}_0 - L_0) = \frac{1}{2}(z\partial_z - \bar{z}\partial_{\bar{z}}). \tag{6.258}$$

由$\partial_z = \frac{\partial}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial z} = \partial_1 - i\partial_2$,$\partial_{\bar{z}} = \frac{\partial}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial \bar{z}} + \frac{\partial}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial \bar{z}} = \partial_1 + i\partial_2$.

$$\frac{1}{2}(z\partial_z - \bar{z}\partial_{\bar{z}}) = \frac{1}{2}((z-\bar{z})\partial_1 - i(\bar{z}+z)\partial_2) = -i(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) \tag{6.259}$$

这说明$\frac{1}{2}(\bar{L}_0 - L_0)$就是垂直于平面的角动量算符(量子力学中熟悉的$L_z = -i(x\partial_y - y\partial_x)$).

我们指出,在量子理论中,Virasoro代数会有一个额外的修正项:

$$\boxed{[L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n} + \frac{c}{12}m(m^2-1)\delta_{m+n,0}} \tag{6.260}$$

这里修正项的系数c是中心荷(central charge).[39]中心荷是一个普适的量,它取决于所研究的共形场论的类型.例如自由玻色子有$c = 1$而Majorana费米子有$c = 1/2$.[40]

能动张量与算符乘积展开

与一般空间维度类似,二维空间的(准)初级场定义为

$$\boxed{\phi'(z', \bar{z}') = \left(\frac{dz'}{dz}\right)^{-h}\left(\frac{d\bar{z}'}{d\bar{z}}\right)^{-\bar{h}}\phi(z, \bar{z})} \tag{6.261}$$

[39]满足幺正性的共形场论具有$c \geq 0$的要求

[40]弦论中的玻色弦有$c = 26$而费米型的超弦则是$c = 10$.这里的26与10同时也决定了玻色弦的时空是26维而超弦是10维.

这里$h=\frac{\Delta+s}{2},\bar{h}=\frac{\Delta-s}{2}$是共形维度而$\Delta,s$分别是标度维度和平面自旋.与一般空间维度讨论类似,利用共形对称性,二维空间中初级场的关联函数具有如下形式:

$$\langle\phi_1(z_1,\bar{z}_1)\phi_2(z_2,\bar{z}_2)\rangle=\frac{C_{12}}{(z_1-z_2)^{2h}(\bar{z}_1-\bar{z}_2)^{2\bar{h}}},\quad h_1=h_2=h,\bar{h}_1=\bar{h}_2=\bar{h} \tag{6.262}$$

$$\begin{aligned}\langle\phi_1(z_1,\bar{z}_1)\phi_2(z_2,\bar{z}_2)\phi_3(z_3,\bar{z}_3)\rangle &= C_{123}\frac{1}{(z_1-z_2)^{h_1+h_2-h_3}(z_2-z_3)^{h_2+h_3-h_1}(z_1-z_3)^{h_3+h_1-h_2}}\\ &\times\frac{1}{(\bar{z}_1-\bar{z}_2)^{\bar{h}_1+\bar{h}_2-\bar{h}_3}(\bar{z}_2-\bar{z}_3)^{\bar{h}_2+\bar{h}_3-\bar{h}_1}(\bar{z}_1-\bar{z}_3)^{\bar{h}_3+\bar{h}_1-\bar{h}_2}}\end{aligned}$$

让我们考虑二维自由玻色子的例子,其作用量是[41]

$$S=\frac{g}{2}\int d^2x\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi=\int dxdy\frac{g}{2}\left((\partial_x\phi)^2+(\partial_y\phi)^2\right) \tag{6.263}$$

那么其对应的能量–动量张量是

$$T_{\mu\nu}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\phi}\partial_\nu\phi-g_{\mu\nu}\mathcal{L}=g\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi-\delta_{\mu\nu}\frac{g}{2}\partial_\rho\phi\partial^\rho\phi \tag{6.264}$$

这样能量–动量张量$T_{\mu\nu}$的四个分量是

$$T_{xx}=\frac{g}{2}(\partial_x\phi\partial_x\phi-\partial_y\phi\partial_y\phi) \tag{6.265}$$

$$T_{yy}=\frac{g}{2}(\partial_y\phi\partial_y\phi-\partial_x\phi\partial_x\phi) \tag{6.266}$$

$$T_{xy}=T_{yx}=g\partial_x\phi\partial_y\phi \tag{6.267}$$

由于$T_{xx}+T_{yy}=0$,因此$T_{\mu\nu}$是无迹张量.现在,让我们引入复数坐标

$$z=x+iy\quad \bar{z}=x-iy\quad \partial_z=\frac{1}{2}(\partial_x-i\partial_y)\quad \partial_{\bar{z}}=\frac{1}{2}(\partial_x+i\partial_y) \tag{6.268}$$

这样

$$\partial_x\phi(x,y)=(\partial_z+\partial_{\bar{z}})\phi(z,\bar{z})\quad \partial_y\phi(x,y)=i(\partial_z-\partial_{\bar{z}})\phi(z,\bar{z}) \tag{6.269}$$

注意到$\int d^2x=\frac{1}{2}\int dzd\bar{z}$,那么作用量可以写成[42]

$$S=\int dxdy\frac{g}{2}\left((\partial_x\phi)^2+(\partial_y\phi)^2\right)=\int dzd\bar{z}\frac{1}{2}\frac{g}{2}4\partial_z\phi\partial_{\bar{z}}\phi=\int dzd\bar{z}g\partial_z\phi\partial_{\bar{z}}\phi \tag{6.270}$$

[41]一个非平凡的例子是弦理论中玻色弦的Polyakov作用量:$S=\frac{T}{2}\int d\tau d\sigma(\partial_\tau X^\mu\partial_\tau X_\mu-\partial_\sigma X^\mu\partial_\sigma X_\mu)$.这里$X^\mu(\tau,\sigma)$是$d+1$维平直时空中弦的世界面坐标,$\tau$是固有时,$\sigma$代表弦上某点的位置.$T=\frac{1}{2\pi\alpha'}$是弦的张力而$\alpha'$是Regge参数,其决定了弦的特征长度$l_s=\sqrt{2\alpha'}$.

[42]容易验证复数形式的自由玻色子作用量具有共形不变性.设共形变换$z\to z'$后的作用量是$S'=\int dz'd\bar{z}'g\partial_{z'}\phi'(z',\bar{z}')\partial_{\bar{z}'}\phi'(z',\bar{z}')$.那么有$S'=\int dzd\bar{z}\frac{dz'}{dz}\frac{d\bar{z}'}{d\bar{z}}g\frac{dz}{dz'}\partial_z\phi'(z',\bar{z}')\frac{d\bar{z}}{d\bar{z}'}\partial_{\bar{z}}\phi'(z',\bar{z}')$. 注意到标量场的定义是$\phi'(z',\bar{z}')=\phi(z,\bar{z})$,这样$S'=S=\int dzd\bar{z}g\partial_z\phi(z,\bar{z})\partial_{\bar{z}}\phi(z,\bar{z})$,这说明自由玻色子理论确实具有共形不变性.

如果引入度规

$$g_{\mu\nu}=\begin{pmatrix} g_{zz} & g_{z\bar{z}} \\ g_{\bar{z}z} & g_{\bar{z}\bar{z}} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{6.271}$$

那么作用量是

$$S=g\int dzd\bar{z}g_{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi. \tag{6.272}$$

一般我们定义$T=-2\pi T_{zz}$和$\bar{T}=-2\pi T_{\bar{z}\bar{z}}$,那么有

$$T=-2\pi T_{zz}=-2\pi g\partial_z\phi\partial_z\phi-\overbrace{g_{zz}}^{=0}\mathcal{L}=-2\pi g\partial_z\phi\partial_z\phi \tag{6.273}$$

而$\bar{T}=-2\pi g\partial_{\bar{z}}\phi\partial_{\bar{z}}\phi$.当然,在(量子)关联函数中,为了避免发散,我们一般采用正规化的能动张量:

$$T(z)=-2\pi g:\partial_z\phi\partial_z\phi:=-2\pi g\lim_{w\to z}(\partial_z\phi(z)\partial_w\phi(w)-\langle\partial_z\phi(z)\partial_w\phi(w)\rangle) \tag{6.274}$$

这样我们有$\langle T(z)\rangle=0$.

在共形场论中,我们最关心的是场的关联函数,例如两点关联$\langle\phi(r)\phi(r')\rangle$,其可以通过引入流项$J\phi$(也就是Schwinger的源场方法)并对配分函数求导获得:

$$\langle\phi(r)\phi(r')\rangle=-\frac{1}{2\pi g}\ln\frac{\sqrt{r/g}|r-r'|}{2}=-\frac{1}{4\pi g}\ln(r-r')^2-\frac{1}{2\pi g}\ln\sqrt{r/g}/2=-\frac{1}{4\pi g}\ln(r-r')^2+const. \tag{6.275}$$

这里为了积分收敛而加入了小的质量项r.换成复数坐标有

$$\langle\phi(z,\bar{z})\phi(w,\bar{w})\rangle=-\frac{1}{4\pi g}\ln(z-w)(\bar{z}-\bar{w})+const=-\frac{1}{4\pi g}(\ln(z-w)+\ln(\bar{z}-\bar{w}))+const \tag{6.276}$$

这样有

$$\begin{aligned}\langle\partial_z\phi(z,\bar{z})\partial_w\phi(w,\bar{w})\rangle&=-\frac{1}{4\pi g}\frac{1}{(z-w)^2}\\ \langle\partial_{\bar{z}}\phi(z,\bar{z})\partial_{\bar{w}}\phi(w,\bar{w})\rangle&=-\frac{1}{4\pi g}\frac{1}{(\bar{z}-\bar{w})^2}\\ \langle\partial_z\phi(z,\bar{z})\partial_{\bar{w}}\phi(w,\bar{w})\rangle&=\langle\partial_{\bar{z}}\phi(z,\bar{z})\partial_w\phi(w,\bar{w})\rangle=0\end{aligned} \tag{6.277}$$

现在,让我们定义所谓的算符乘积展开(operator product expansion,OPE):

$$\boxed{A(z)B(w)=\sum_{n=-\infty}^{N}\frac{\{AB\}_n(w)}{(z-w)^n}} \tag{6.278}$$

这里A,B是两个算符而$\{AB\}_n$是A,B的某种复合算符,其在$w=z$时是非奇异的.换句话说,OPE说的是当我们把两个算符乘一起时,我们用一些良好定义的单个算符的组合来表示两个算符的乘积,所有的奇异性都通过$z-w$的负幂次体现.当然,OPE等式两边的结果实际上只有在我们取平均时才有意

义,也就是说$\langle A(z)B(w)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{N} \frac{\langle\{AB\}_n(w)\rangle}{(z-w)^n}$.对于当前自由玻色子的情况,由$\langle\partial_z\phi(z,\bar{z})\partial_w\phi(w,\bar{w})\rangle = -\frac{1}{4\pi g}\frac{1}{(z-w)^2}$ 可知,这相当于如下OPE:

$$\partial_z\phi(z,\bar{z})\partial_w\phi(w,\bar{w}) \equiv \partial\phi(z)\partial\phi(w) \sim -\frac{1}{4\pi g}\frac{1}{(z-w)^2}. \tag{6.279}$$

同时,我们能够计算$T(z)$与$\partial\phi(w)$的OPE:

$$T(z)\partial\phi(w) = -2\pi g : \partial\phi(z)\partial\phi(z) : \partial\phi(w) \sim -4\pi g\partial\phi(z)\overbrace{\langle\partial\phi(z)\partial\phi(w)\rangle}^{-\frac{1}{4\pi g}\frac{1}{(z-w)^2}} = \frac{\partial\phi(z)}{(z-w)^2}$$

然后让$\partial\phi(z)$在w展开有$\partial\phi(z) = \partial\phi(w) + (z-w)\partial_w^2\phi(w) + ...$这样OPE是

$$T(z)\partial\phi(w) \sim \frac{\partial\phi(w)}{(z-w)^2} + \frac{\partial_w^2\phi(w)}{z-w}$$

一般来说,如果Φ是共形维度为$h,\bar{h}$的初级场,那么必有如下OPE:[43]

$$T(z)\Phi(w,\bar{w}) \sim \frac{h}{(z-w)^2}\Phi(w,\bar{w}) + \frac{1}{z-w}\partial_w\Phi(w,\bar{w}) \tag{6.280}$$

$$\bar{T}(\bar{z})\Phi(w,\bar{w}) \sim \frac{\bar{h}}{(\bar{z}-\bar{w})^2}\Phi(w,\bar{w}) + \frac{1}{\bar{z}-\bar{w}}\partial_{\bar{w}}\Phi(w,\bar{w}) \tag{6.281}$$

对比自由玻色子的结果发现$\partial_z\phi$是共形维度为$h=1$的初级场.(同理有$\partial_{\bar{z}}\phi$是共形维度为$\bar{h}=1$的初级场)

- 自由玻色子理论中ϕ不是初级场,而其导数$\partial_z\phi, \partial_{\bar{z}}\phi$是初级场.

让我们再计算能动张量之间的OPE:

$$\begin{aligned} T(z)T(w) &= 4\pi^2g^2 : \partial\phi(z)\partial\phi(z) :: \partial\phi(w)\partial\phi(w) :\sim 4\pi^2g^2 2(\langle\partial\phi(z)\partial\phi(w)\rangle)^2 \\ &\quad +4\pi^2g^2 4\partial\phi(z)\partial\phi(w)\langle\partial\phi(z)\partial\phi(w)\rangle \\ &= \frac{1/2}{(z-w)^4} - \frac{4\pi g\partial\phi(z)\partial\phi(w)}{(z-w)^2} \sim \frac{1/2}{(z-w)^4} + \frac{2T(w)}{(z-w)^2} + \frac{\partial T(w)}{z-w} \end{aligned}$$

一般而言,能动张量之间的OPE直接显示了中心电荷c:

$$T(z)T(w) \sim \frac{c/2}{(z-w)^4} + \frac{2T(w)}{(z-w)^2} + \frac{\partial T(w)}{z-w} \tag{6.282}$$

同时,这说明T是共形维度为$h=2$的准初级场.($\langle T(z)T(0)\rangle = \frac{c/2}{z^4}$)这样自由玻色子理论的中心电荷是$c=1$. [44]

[43]这里的OPE实际上源自Ward恒等式$\langle T(z)X\rangle = \sum_{i=1}^{n}(\frac{1}{z-w_i}\partial_{w_i}\langle X\rangle + \frac{h_i}{(z-w_i)^2}\langle X\rangle) + ...$这里$X$代表共形维度是$h_i$的$n$个初级场的乘积$(\Phi_1(w_1,\bar{w}_1)\Phi_2(w_2,\bar{w}_2)...\Phi_n(w_n,\bar{w}_n))$,... 代表非奇异部分.

[44]如果有两个独立的系统,那么它们的中心电荷是两者之和.

- 对任意二维共形场论,其能动张量与初级场的关联函数满足所谓的共形Ward恒等式,即$\langle T(z)\phi_1(z_1)...\phi_N(z_N)\rangle = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{h_j}{z-z_j}+\frac{1}{z-z_j}\frac{\partial}{\partial z_j}\right)\langle\phi_1(z_1)...\phi_N(z_N)\rangle$($h_j$是$\phi_j$的共形维度),这一重要结果有很广泛的应用.

  最后再看自由Majorana费米子的例子.系统的作用量是[45]

$$S=\frac{1}{2}g\int d^2x\Psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\partial_\mu\Psi \tag{6.283}$$

这里$\Psi=(\psi,\bar{\psi})^T$是两分量的旋量.$\gamma^0=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$,$\gamma^1=i\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$,这样采用复数坐标后有

$$\gamma^0\gamma^\mu\partial_\mu=\gamma^0(\gamma^0\partial_0+\gamma^1\partial_1)=2\begin{pmatrix}\partial_{\bar{z}}&0\\0&\partial_z\end{pmatrix} \tag{6.284}$$

这样作用量可以写成

$$S=g\int d^2x(\bar{\psi}\partial_z\bar{\psi}+\psi\partial_{\bar{z}}\psi). \tag{6.285}$$

直接计算发现

$$\begin{aligned}\langle\psi(z,\bar{z})\psi(w,\bar{w})\rangle&=\frac{1}{2\pi g}\frac{1}{z-w}\\\langle\bar{\psi}(z,\bar{z})\bar{\psi}(w,\bar{w})\rangle&=\frac{1}{2\pi g}\frac{1}{\bar{z}-\bar{w}}\\\langle\psi(z,\bar{z})\bar{\psi}(w,\bar{w})\rangle&=0\end{aligned} \tag{6.286}$$

这样费米子之间的OPE是$\psi(z)\psi(w)\sim\frac{1}{2\pi g}\frac{1}{z-w}$.另一方面,与自由玻色子类似,能动张量有

$$T(z)=-2\pi T_{zz}=-\pi g:\psi\partial_z\psi: \tag{6.287}$$

这样$T(z)$与$\psi(w)$的OPE是

$$T(z)\psi(w)=-\pi g:\psi(z)\partial_z\psi(z):\psi(w)\sim\frac{1}{2}\frac{\partial\psi(z)}{z-w}+\frac{1}{2}\frac{\psi(z)}{(z-w)^2} \tag{6.288}$$

这样我们发现费米子ψ的共形维度是$h=1/2$.(对比$T(z)\psi(w)\sim\frac{h\psi(z)}{(z-w)^2}+...$)类似的,我们有能动张量的OPE:

$$T(z)T(w)\sim\frac{1/4}{(z-w)^4}+\frac{2T(z)}{(z-w)^2}+\frac{\partial T(w)}{z-w} \tag{6.289}$$

对比$T(z)T(w)\sim\frac{c/2}{(z-w)^4}+...$,我们发现自由Majorana费米子的中心电荷是$c=1/2$.[46]

[45] 二维Ising模型(一维量子Ising模型)的临界点可以用这里的自由Majorana费米子描述.

[46] 作为对比,自由Dirac费米子的中心电荷是$c=1$.

Schwarzian导数与中心电荷的物理意义

如果我们考虑$z \to w$的共形变换,那么能动张量的变换关系是[47]

$$T'(w) = \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-2}\left[T(z) - \frac{c}{12}\{w,z\}\right] \tag{6.290}$$

这里$\{w,z\}$称为Schwarzian导数:[48]

$$\{w,z\} = \frac{d^3w/dz^3}{dw/dz} - \frac{3}{2}\left(\frac{d^2w/dz^2}{dw/dz}\right)^2. \tag{6.291}$$

中心电荷c的出现说明系统具有共形反常,这与共形对称因为引入(有限)宏观尺度而破缺直接相关.换句话说,c描述了系统对于所引入的宏观尺度的响应.下面,我们考虑定义在复平面上的共形场论.然后利用坐标变换$z \to w = \frac{L}{2\pi}\ln z$把复平面变为周长为$L$的圆柱面.(反过来就是把圆柱面变到复平面$z = e^{\frac{2\pi}{L}w}$)这时$dw/dz = L/(2\pi z)$而Schwarzian导数$\{w,z\}$的取值是$1/(2z^2)$.这样圆柱面上的能动张量与复平面的能动张量的关系是

$$T_c(w) = \frac{4\pi^2 z^2}{L^2}\left[T(z) - \frac{c}{12}\frac{1}{2z^2}\right] = \frac{4\pi^2}{L^2}\left[T(z)z^2 - \frac{c}{24}\right] \tag{6.292}$$

这样当$\langle T(z)\rangle = 0$时,$\langle T_c(w)\rangle = -\frac{c\pi^2}{6L^2}$,这说明中心电荷所对应的部分实际上可以看成真空能也就是Casmir能量.如果$L \to \infty$时的自由能密度是f_0,那么系统在L有限时的总自由能是

$$\boxed{F_L = f_0 L - \frac{\pi c}{6L}} \tag{6.293}$$

这样我们就把有限系统与无穷大系统的自由能密度通过中心电荷联系在一起.

当然,我们也考虑关联函数在$z \to w$的变化:

$$\langle\phi(w_1,\bar w_1)\phi(w_2,\bar w_2)\rangle = \left(\frac{dw_1}{dz_1}\right)^{-h}\left(\frac{dw_2}{dz_2}\right)^{-h}\left(\frac{dw_1}{dz_1}\right)^{-\bar h}\left(\frac{dw_2}{dz_2}\right)^{-\bar h}\langle\phi(z_1,\bar z_1)\phi(z_2,\bar z_2)\rangle \tag{6.294}$$

代入$w = \frac{L}{2\pi}\ln z$和$\langle\phi(z_1,\bar z_1)\phi(z_2,\bar z_2)\rangle = \frac{1}{(z_1-z_2)^{2h}}\frac{1}{(\bar z_1-\bar z_2)^{2\bar h}}$ 有

$$\begin{aligned}
\langle\phi(w_1,\bar w_1)\phi(w_2,\bar w_2)\rangle &= \left(\frac{2\pi z_1}{L}\right)^h\left(\frac{2\pi z_2}{L}\right)^h\left(\frac{2\pi \bar z_1}{L}\right)^{\bar h}\left(\frac{2\pi \bar z_1}{L}\right)^{\bar h}\frac{1}{(z_1-z_2)^{2h}}\frac{1}{(\bar z_1-\bar z_2)^{2\bar h}} \\
&= \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2h+2\bar h}\frac{e^{\frac{2\pi h(w_1+w_2)}{L}}}{(e^{\frac{2\pi h w_1}{L}}-e^{\frac{2\pi h w_2}{L}})^{2h}}\frac{e^{\frac{2\pi \bar h(\bar w_1+\bar w_2)}{L}}}{(e^{\frac{2\pi \bar h \bar w_1}{L}}-e^{\frac{2\pi \bar h \bar w_2}{L}})^{2\bar h}} \\
&= \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2h+2\bar h}(2\sinh\pi(w_1-w_2)/L)^{-2h}(2\sinh\pi(\bar w_1-\bar w_2)/L)^{-2\bar h}
\end{aligned}$$

[47]这个关系也可写成$T'(w) = \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-2}T(z) + \frac{c}{12}\{z,w\}$

[48]有趣的是在$z \to w = \frac{az+b}{cz+d}(ad-bc=1)$下Schwarzian导数为零

如果我们设$h = \bar{h} = \Delta/2$也就是初级场没有共形自旋,那么上式简化为($w = w_1 - w_2, \bar{w} = \bar{w}_1 - \bar{w}_2$)

$$\langle\phi(w_1,\bar{w}_1)\phi(w_2,\bar{w}_2)\rangle = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2\Delta}\left(4\sinh\frac{\pi w}{L}\sinh\frac{\pi\bar{w}}{L}\right)^{-\Delta} \tag{6.295}$$

让我们定义新变量$w = u + iv, \bar{w} = u - iv$,这样有

$$\langle\phi(u_1,v_1)\phi(u_2,v_2)\rangle = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2\Delta}\left(2\cosh\frac{2\pi u}{L} - 2\cos\frac{2\pi v}{L}\right)^{-\Delta}. \tag{6.296}$$

当$w, \bar{w} << L$时,$\sinh\frac{\pi w}{L} \simeq \frac{\pi w}{L}$,我们有$\langle\phi(w_1,\bar{w}_1)\phi(w_2,\bar{w}_2)\rangle \sim \frac{1}{|w|^{2\Delta}}$.这说明小尺度的关联对于系统的尺寸不敏感.当$u >> L$则有$\cosh\frac{2\pi u}{L} \simeq e^{\frac{2\pi u}{L}}$,因此$\langle\phi(u_1,v_1)\phi(u_2,v_2)\rangle \sim e^{-\frac{2\pi u}{L}\Delta}$.这样,沿着圆柱的方向($u$方向)的关联具有指数衰减,关联长度是$\xi = \frac{L}{2\pi\Delta}$.对于一维量子系统,无穷大圆柱对应于零温的有限系统(有周期边界)或者有限温度($T = 1/L$)的无穷大体系.因此,时间方向($u \to \tau$,τ是虚时)上的关联长度ξ意味着基态和第一激发态之间具有有限能隙.[49]

对于有限温度的系统,回忆之前的结果$\frac{F_L}{L} = f_0 - \frac{\pi c}{6L^2}$,设$T = 1/L$, 那么CFT在有限温度时的自由能密度是

$$f_L = f_0 - \frac{\pi c}{6}T^2 \tag{6.297}$$

这样导致的热容是$C = -T\frac{\partial^2 f_L}{\partial T^2} = \frac{c\pi}{3}T$.(注意这个结果与一维自由费米子系统的相似性.)

算符形式

在前面的讨论中,我们还没有涉及CFT中的状态或者其Hilbert空间.为了讨论状态空间,我们需要采用算符形式也就是标准的正则量子化形式.在(1+1)维,我们知道时间t 的取值是$(-\infty,\infty)$而空间位置x的取值可以取在一个圆环上,也就是$x \in [0, L], x + L = x$.这样(1+1)维时空相当于一个无限高的圆柱面,x方向是圆柱面的角度方向而t方向是圆柱的高度方向.现在如果定义复数坐标$\xi = t + ix$,那么我们可以利用如下共形变换把系统变换到复平面上:

$$z = e^{\frac{2\pi}{L}\xi} = e^{\frac{2\pi}{L}t}e^{i\frac{2\pi}{L}x} \tag{6.298}$$

显然,$t \to -\infty$对应$z = 0$的原点而$t \to \infty$对应$z = \infty$的无穷远点.对于同一个时间t,不同的空间位置对应于以$z = 0$为圆心,$e^{\frac{2\pi}{L}t}$为半径的圆上的点.这样,上述变换就把圆柱面上平行于t的直线变换为$z = 0$出发的射线而圆柱面上的每个截面圆对应于一系列同心圆.

[49]利用虚时关啦函数的谱分解能够证明$\langle\phi(x,0)\phi(x,\tau)\rangle \sim e^{-\delta E\tau}$,$\delta E = E_1 - E_0 = \frac{2\pi\Delta}{L}$($E_0, E_1$是系统的基态和第一激发态能量).

下面我们定义CFT的真空态为$|0\rangle$,而$t\to\pm\infty$时相互作用消失,如果把共形维度为$(h,\bar{h})$的初级场$\phi(z,\bar{z})$作用于真空有:

$$|h,\bar{h}\rangle\equiv\lim_{z,\bar{z}\to 0}\phi(z,\bar{z})|0\rangle=\phi(0,0)|0\rangle. \tag{6.299}$$

那么$|h,\bar{h}\rangle$是否是系统的本征态呢？答案是肯定的.首先,对于初级场$\phi(z,\bar{z})$,我们把它在$z=0,\bar{z}=0$做洛朗展开:

$$\begin{aligned}\phi(z,\bar{z})&=\sum_{m\in Z}\sum_{n\in Z}z^{-m-h}\bar{z}^{-n-\bar{h}}\phi_{m,n}\\ \phi_{m,n}&=\oint\frac{dz}{2\pi i}z^{m+h-1}\oint\frac{d\bar{z}}{2\pi i}\bar{z}^{n+\bar{h}-1}\phi(z,\bar{z})\end{aligned} \tag{6.300}$$

由于$\phi(z,\bar{z})$的共轭场$(\phi(z,\bar{z}))^\dagger=\bar{z}^{-2h}z^{-2\bar{h}}\phi(1/\bar{z},1/z)$,那么我们利用上述展开发现展开系数满足$\phi^\dagger_{m,n}=\phi_{-m,-n}$.现在让我们把$\phi(z,\bar{z})$的洛朗展开代入$|h,\bar{h}\rangle$的定义有

$$|h,\bar{h}\rangle\equiv\lim_{z,\bar{z}\to 0}\sum_{m\in Z}\sum_{n\in Z}z^{-m-h}\bar{z}^{-n-\bar{h}}\phi_{m,n}|0\rangle \tag{6.301}$$

为了让上式在$z,\bar{z}\to 0$时不因为$z^{-m-h},\bar{z}^{-n-\bar{h}}$的发散而奇异,我们必然要求负幂次$\frac{1}{z^{m+h}},\bar{z}^{n+\bar{h}}$的系数$\phi_{m,n}|0\rangle=0$,即有

$$\phi_{m,n}|0\rangle=0,\qquad(m+h>0,n+\bar{h}>0) \tag{6.302}$$

这说明$m>-h,n>-\bar{h}$的系数$\phi_{m,n}$可以看作是标准场论中的湮灭算符.

进一步,仿照初级场,我们设能动张量也有类似的洛朗展开:

$$T(z)=\sum_{n\in Z}z^{-n-2}L_n\qquad L_n=\oint\frac{dz}{2\pi i}z^{n+1}T(z) \tag{6.303}$$

这里我们已经用了能动张量的共形维度$h=2$.对于$\bar{T}(\bar{z})$也有类似的表达.($\bar{T}(\bar{z})=\sum_{n\in Z}\bar{z}^{-n-2}\bar{L}_n,\bar{L}_n=\oint\frac{dz}{2\pi i}\bar{z}^{n+1}\bar{T}(\bar{z})$)直接计算展开系数$L_n,L_m$的对易关系,我们发现它们满足如下的Virasoro代数:[50]

$$[L_n,L_m]=(n-m)L_{n+m}+\frac{c}{12}n(n^2-1)\delta_{n+m,0} \tag{6.304}$$

而把$L\to\bar{L}$就有$\bar{L}$的结果.我们看到$n=\pm1,0$时中心电荷部分自动为零,这样L_{-1},L_0,L_1构成封闭的子代数.注意到$L_0+\bar{L}_0$构成的标度变换使得坐标$(z,\bar{z})$变成$\lambda(z,\bar{z})$.而我们知道由于$z=e^{\frac{2\pi}{L}t}e^{i\frac{2\pi}{L}x}$,那么$\lambda z=e^{\frac{2\pi}{L}(t+\frac{L}{2\pi}\ln\lambda)}e^{i\frac{2\pi}{L}x}$,这相当于时间平移$t\to t+\frac{L}{2\pi}\ln\lambda$.在量子力学中时间平移操作的生成元是哈密顿量,[51]那么$L_0+\bar{L}_0$正比于系统的哈密顿量.

---

[50]利用L_n,L_m的定义,能动张量之间的OPE:$T(z)T(w)\sim\frac{c/2}{(z-w)^4}+\frac{2T(w)}{(z-w)^2}+\frac{\partial T(w)}{z-w}$...以及公式$[A,B]=\oint_0 dw\oint_w dz a(a)b(w)$ 而$A=\oint za(z),B=\oint dzb(z).\oint_w dz$ 说明积分回路包含w点而$\oint_0$说明积分回路包含0点.

[51]$|\psi(t+\Delta t)\rangle=|\psi(t)\rangle+\Delta t\partial_t|\psi(t)\rangle$而由含时Schödinger方程有$i\partial_t|\psi(t)\rangle=H|\psi(t)\rangle$,那么有$|\psi(t+\Delta t)\rangle=|\psi(t)\rangle-iH\Delta t|\psi(t)\rangle=e^{-iH\Delta t}|\psi(t)\rangle$,这说明哈密顿量$H$就是时间平移的生成元.

因此,如果$|h,\bar{h}\rangle$是$L_0,\bar{L}_0$的本征态,那么它们就是系统的本征态.具体而言,我们需要计算$L_0|h,\bar{h}\rangle = L_0\phi(0,0)|0\rangle$.让我们先计算$[L_n,\phi(w,\bar{w})]$:

$$[L_n,\phi(w,\bar{w})] = \oint \frac{dz}{2\pi i} z^{n+1} T(z)\phi(w,\bar{w}) \tag{6.305}$$

利用$T(z)$与ϕ的OPE,$T(z)\phi(w,\bar{w}) \sim \frac{h}{(z-w)^2}\phi(w,\bar{w}) + \frac{\partial\phi(w,\bar{w})}{z-w}$并利用一阶和二阶极点的留数公式$\oint \frac{dz}{2\pi i}\frac{f(z)}{z-z_0} = \lim_{z\to z_0}(z-z_0)\frac{f(z)}{z-z_0}$, $\oint \frac{dz}{2\pi i}\frac{f(z)}{(z-z_0)^2} = \lim_{z\to z_0}\frac{d}{dz}[(z-z_0)^2\frac{f(z)}{(z-z_0)^2}]$,我们有

$$\begin{aligned}[L_n,\phi(w,\bar{w})] &= \oint \frac{dz}{2\pi i} z^{n+1}\frac{h}{(z-w)^2}\phi(w,\bar{w}) + \oint \frac{dz}{2\pi i} z^{n+1}\frac{\partial\phi(w,\bar{w})}{z-w} \\ &= h(n+1)w^n\phi(w,\bar{w}) + w^{n+1}\partial\phi(w,\bar{w}) \end{aligned}\tag{6.306}$$

注意到这个结果只有当z^{n+1}是正幂次也就是$n \geq -1$时成立.这样有$[L_0,\phi(w,\bar{w})] = h\phi(w,\bar{w}) + w\partial\phi(w,\bar{w})$而

$$\begin{aligned} L_0|h,\bar{h}\rangle &= \lim_{w,w\to 0} L_0\phi(w,\bar{w})|0\rangle = \lim_{w,w\to 0}(\phi(w,\bar{w})L_0 + h\phi(w,\bar{w}) + w\partial\phi(w,\bar{w}))|0\rangle \\ &= \phi(w,\bar{w})L_0|0\rangle + h\phi(0,0)|0\rangle = \phi(w,\bar{w})L_0|0\rangle + h|h,\bar{h}\rangle. \end{aligned}\tag{6.307}$$

现在的问题是$L_0|0\rangle$的取值.注意到如果我们要求$T(z)|0\rangle, \bar{T}(\bar{z})|0\rangle$在$z,\bar{z}\to 0$时非奇异,那么类似于$\phi$系数$\phi_{m,n}$,我们有

$$L_n|0\rangle = 0 \quad \bar{L}_n|0\rangle = 0, \quad (n \geq -1) \tag{6.308}$$

因此$L_0|0\rangle = 0$,物理上这说明真空态的能量动量密度为零.($\langle 0|T(z)|0\rangle = 0$)这样我们发现

$$L_0|h,\bar{h}\rangle = h|h,\bar{h}\rangle. \tag{6.309}$$

这说明由初级场作用于真空产生的态$|h,\bar{h}\rangle$是系统的本征态且本征值为对应的共形维度h.同理有$\bar{L}_0|h,\bar{h}\rangle = \bar{h}|h,\bar{h}\rangle$.类似可以证明$n>0$的模式$L_n,\bar{L}_n$湮灭$|h,\bar{h}\rangle$:

$$L_n|h,\bar{h}\rangle = 0 \quad \bar{L}_n|h,\bar{h}\rangle = 0, \quad (n>0) \tag{6.310}$$

而$n<0$的模式等效于场论中的产生算符,例如(下面取$n>0$并且利用Virasoro代数关系$[L_0,L_{-n}] = nL_{-n}$)

$$L_0L_{-n}|h,\bar{h}\rangle = (L_{-n}L_0 + nL_{-n})|h,\bar{h}\rangle = (h+n)L_{-n}|h,\bar{h}\rangle \tag{6.311}$$

这说明$L_{-n}|h,\bar{h}\rangle$是系统本征值为$h+n$的本征态而L_{-n}是这个状态的产生算符.[52]这样我们能够对$|h,\bar{h}\rangle$作用各种负能模式L_{-n}而得到相应的本征态:

$$L_{-n_1}L_{-n_2}...L_{-n_M}|h,\bar{h}\rangle \quad (1 \leq n_1 \leq n_2 ... \leq n_M) \tag{6.312}$$

[52]实际上初级场的展开系数$\phi_{m,q}$也是产生算符,这可以通过对易关系$[L_n,\phi_{m,q}] = (n(h+1)-m)\phi_{m,q}$直接证明.

这个态的本征值是$h+n_1+n_2+...+n_M \equiv h+N$,$N$称为状态的层级(level of state).当然对于$|h,\bar{h}\rangle$的最小激发态(本征值为$h+1$,$N=1$)是把一个L_{-1}作用于$|h,\bar{h}\rangle$的态:

$$L_{-1}|h,\bar{h}\rangle \tag{6.313}$$

而更高的激发态是($N=2$)

$$L_{-2}|h,\bar{h}\rangle, \quad L_{-1}L_{-1}|h,\bar{h}\rangle \tag{6.314}$$

这两个态具有相同的本征值$h+2$.$N=3$对应的态有三个,即

$$L_{-3}|h,\bar{h}\rangle, \quad L_{-1}L_{-2}|h,\bar{h}\rangle, \quad L_{-1}L_{-1}L_{-1}|h,\bar{h}\rangle \tag{6.315}$$

依此类推,我们能够得到本征值为$h+N$的所有本征态.

- 从$|h,\bar{h}\rangle$出发我们能够得到各种激发态,这些激发态与$|h,\bar{h}\rangle$组成了所谓Verma模,也就是系统Hilbert空间的一部分.
- 更完整的状态序列是$|0\rangle \to |h,\bar{h}\rangle \to L_{-1}|h,\bar{h}\rangle \to L_{-2}|h,\bar{h}\rangle, L_{-1}L_{-1}|h,\bar{h}\rangle...$

这样,如果我们找到系统的一个初级场,那么我们就等价于找到了系统的一部分本征态,如果能够得到所有的初级场,那么我们就相当于得到了系统所有的本征态,也就是完整求解了这个CFT.

自由玻色子

设$\varphi(x,t)$满足周期边界条件$\varphi(x,t)=\varphi(x+L,t)$,这可以看作是一个圆环上的场.[53]这样我们做如下傅里叶变换:

$$\varphi(x,t)=\sum_n e^{i\frac{2\pi}{L}nx}\varphi_n(t) \quad \varphi_n(t)=\frac{1}{L}\int dx e^{-i\frac{2\pi}{L}nx}\varphi(x,t) \tag{6.316}$$

如果自由玻色子的作用量是$S=\int dtdx\frac{g}{2}((\partial_t\varphi)^2-(\partial_x\varphi)^2)$,那么有

$$S=\int dt\frac{gL}{2}\sum_n(\partial_t\varphi_n\partial_t\varphi_{-n}-\frac{(2\pi n)^2}{L^2}\partial_n\varphi_{-n}) \tag{6.317}$$

由于共轭动量是$\pi_n=gL\partial_t\varphi_{-n}$,那么系统的哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2gL}\sum_n(\pi_n\pi_{-n}+(2\pi ng)^2\varphi_n\varphi_{-n}) \tag{6.318}$$

当我们赋予正则对易关系$[\varphi_n,\pi_m]=i\delta_{nm}$后就得到一个量子系统.与通常场论中不同,我们引入算符$a_n,\bar{a}_n$,它们满足如下对易关系:[54]

$$[a_n,a_m]=n\delta_{n+m,0} \quad [a_n,\bar{a}_m]=0 \quad [a_n,a_m]=n\delta_{n+m} \tag{6.319}$$

[53]如果取反周期边界条件$\varphi(x,t)=-\varphi(x+L,t)$或者把$\varphi(x,t)$紧致化在一个半径为$R$的圆上($\varphi(x+L,t)=\varphi(x,t)+2\pi Rn, n\in Z$),那么下面的讨论会有定性的改变.或者的应用出现在弦论中.

[54]我们马上会看到这种形式的算符能更好地体现动力学上的退耦和,也就是$x-t$模式a_n和$x+t$模式$\bar{a}_n$彼此独立传播.

当$n>0$时a_n的具体形式是$a_n=\frac{-i\sqrt{n}}{\sqrt{4\pi g|n|}}(2\pi g|n|\varphi_n+i\pi_{-n})$而$n<0$有$a_n=\frac{i\sqrt{-n}}{\sqrt{4\pi g|n|}}(2\pi g|n|\varphi_n+i\pi_{-n})$.这样系统的哈密顿量是

$$H=\frac{\pi_0^2}{2gL}+\frac{2\pi}{L}\sum_{n\neq 0}(a_{-n}a_n+\bar{a}_{-n}\bar{a}_n) \tag{6.320}$$

这里π_0是$n=0$的零模式对应的动量,其与所有$a,\bar{a}$对易.我们发现$[H,a_{-m}]=\frac{2\pi}{L}ma_{-m}$,这说明当把$a_{-m}(m>0)$作用于$H$的能量为$E$ 的本征态时会得到能量为$E+\frac{2\pi m}{L}$的本征态.另一方面,我们有$\varphi_n=\frac{i}{n\sqrt{4\pi g}}(a_n-\bar{a}_{-n})$,这样

$$\varphi(x)=\varphi_0+\frac{i}{\sqrt{4\pi g}}\sum_{n\neq 0}e^{i\frac{2\pi}{L}nx}\frac{1}{n}(a_n-\bar{a}_{-n}) \tag{6.321}$$

利用Heisenberg运动方程有

$$\varphi(x,t)=\varphi_0+\frac{1}{gL}\pi_0 t+\frac{i}{\sqrt{4\pi g}}\sum_{n\neq 0}\frac{1}{n}(a_n e^{i\frac{2\pi}{L}n(x-t)}-\bar{a}_{-n}e^{i\frac{2\pi}{L}n(x+t)}) \tag{6.322}$$

我们发现$x-t$模式a_n与$x+t$模式$\bar{a}_n$退耦.做Wick转动$t=-i\tau$把系统转换至欧氏时空并采用新坐标

$$z=e^{\frac{2\pi}{L}(\tau-ix)}\qquad \bar{z}=e^{\frac{2\pi}{L}(\tau+ix)} \tag{6.323}$$

这样有

$$\varphi(z,\bar{z})=\varphi_0-\frac{i}{4\pi g}\pi_0\ln(z\bar{z})+\frac{i}{\sqrt{4\pi g}}\sum_{n\neq 0}\frac{1}{n}(a_n z^{-n}+\bar{a}_{-n}\bar{z}^{-n}). \tag{6.324}$$

在先前的讨论中,我们知道φ不是初级场而$\partial_z\varphi,\partial_{\bar{z}}\varphi$是初级场,因此有

$$i\partial_z\varphi(z,\bar{z})=\frac{1}{4\pi g}\frac{\pi_0}{z}+\frac{1}{\sqrt{4\pi g}}\sum_{n\neq 0}a_n z^{-n-1}. \tag{6.325}$$

如果定义$a_0=\frac{\pi_0}{\sqrt{4\pi g}}$,那么

$$i\partial_z\varphi(z,\bar{z})=\frac{1}{\sqrt{4\pi g}}\sum_{n}a_n z^{-n-1}. \tag{6.326}$$

注意到上式正是初级场的洛朗展开$\phi(z)=\sum_n z^{-n-1}\phi_n$.在弦论中,$\varphi_0$代表弦的质心坐标,$\pi_0$是质心动量而$a_n(n\neq 0)$是弦振动模式.

除了$\partial_z\varphi,\partial_{\bar{z}}\varphi$,顶点算符(vertex operator)也是自由玻色子系统的初级场,其定义如下:

$$V_\alpha(z,\bar{z})=:e^{i\alpha\varphi(z,\bar{z})}: \tag{6.327}$$

其具体形式可以写成两个彼此对易的部分,即有

$$V_\alpha(z,\bar{z})=e^{i\alpha\varphi_0+\frac{\alpha}{\sqrt{4\pi g}}\sum_{n>0}\frac{1}{n}(a_{-n}z^n+\bar{a}_{-n}\bar{z}^n)}e^{\frac{\alpha}{4\pi g}\pi_0-\frac{\alpha}{\sqrt{4\pi g}}\sum_{n>0}\frac{1}{n}(a_n z^{-n}+\bar{a}_n\bar{z}^{-n})}. \tag{6.328}$$

直接计算发现$V_\alpha(z,\bar{z})$的共形维度是$h=\bar{h}=\frac{\alpha^2}{8\pi g}$,因此关联函数是[55]

$$\langle V_\alpha(z,\bar{z})V_\beta(w,\bar{w})\rangle=\frac{\delta_{\alpha,-\beta}}{(z-w)^{\frac{\alpha^2}{4\pi g}}(\bar{z}-\bar{w})^{\frac{\alpha^2}{4\pi g}}}. \tag{6.329}$$

如果把顶点算符作用于真空态$|0\rangle$就得到$V_\alpha(0,0)|0\rangle$,利用对易关系可以证明$V_\alpha(0,0)|0\rangle$是π_0的本征态:

$$\pi_0 V_\alpha(0,0)|0\rangle=\alpha V_\alpha(0,0)|0\rangle. \tag{6.330}$$

同时注意到π_0与哈密顿量对易,这样$|\alpha\rangle\equiv V_\alpha(0,0)|0\rangle$就是系统的本征态.$a_n,\bar{a}_n(n>0)$湮灭$|\alpha\rangle$而对$|\alpha\rangle$作用$a_{-n},\bar{a}_{-n}(n>0)$能够得到相应的激发态$a_{-1}a_{-2}...a_{-1}a_{-2}...|\alpha\rangle$.

- $|\alpha\rangle\equiv V_\alpha(0,0)|0\rangle$相当于一般CFT理论中的$|h,\bar{h}\rangle=\phi(0,0)|0\rangle$而$a_{-1}a_{-2}...a_{-1}a_{-2}...|\alpha\rangle$相当于一般理论中的$\phi_{-n_1}\phi_{-n_2}...\phi_{-n_M}|h,\bar{h}\rangle$.

我们知道自由玻色子系统的能动张量是$T(z)=-2\pi g:\partial\varphi\partial\varphi:$,那么代入$\partial\varphi$的复数形式有

$$T(z)=\frac{1}{2}\sum_{n,m}z^{-n-m-2}:a_n a_m: \tag{6.331}$$

对比$T(z)$的洛朗展开$\sum_{n\in Z}z^{-n-2}L_n$,我们发现

$$L_n=\frac{1}{2}\sum_m a_{n-m}a_m\quad(n\neq 0)\qquad L_0=\sum_{n>0}a_{-n}a_n+\frac{1}{2}a_0^2 \tag{6.332}$$

类似的有$\bar{L}_n$.这样系统的哈密顿量可以写成

$$H=\frac{2\pi}{L}(L_0+\bar{L}_0) \tag{6.333}$$

这与一般CFT的结果$L_0+\bar{L}_0\sim H$吻合.

幺正性与最小模型

在文献中,CFT可以分为幺正(unitary)CFT和非幺正CFT.在这里幺正性指的是相应的理论不包含负模态(negative-norm states).所谓的负模态指的是态的模方小于零,即对任意态$|\Phi\rangle$存在

$$\langle\Phi|\Phi\rangle<0. \tag{6.334}$$

[55]一般的,我们可以考虑多个顶点算符的关联函数.如果设$g=\frac{1}{4\pi}$并且重新定义顶点算符$V_\alpha(z,\bar{z})=:e^{i\sqrt{2}\alpha\varphi(z,\bar{z})}:$,那么有$\langle V_{\alpha_1}(z_1,\bar{z}_1)...V_{\alpha_n}(z_n,\bar{z}_n)\rangle=\prod_{i<j}|z_i-z_j|^{4\alpha_i\alpha_j}$,这里$\sum^i\alpha_i=0$.如果只取全纯部分也就是只包含$z_i-z_j$而没有$\bar{z}_i-\bar{z}_j$,并且直接设$\alpha_i=\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}}$,这样有$\langle V_{\alpha_1}(z_1)...V_{\alpha_n}(z_n)\rangle=\prod_{i<j}(z_i-z_j)^m$.当$m$为奇数时,这相当于分数量子霍尔效应中的$1/m$态的Laughlin波函数.(完整的波函数自然需要包含$e^{-\sum_i|z_i|^2}$类型的Gauss型因子,这源自于谐振子的基态.)

如果我们坚持CFT理论是幺正的,那么对CFT的中心电荷c和场的维度h便给出了限制.例如考虑态$L_{-n}|h\rangle (n \geq 1)$的模,(利用对易关系$L_n, L_{-n} = 2nL_0 + \frac{c}{12}n(n^2-1)$)

$$\begin{aligned} \langle h|L_n L_{-n}|h\rangle &= \langle h|L_{-n}L_n + 2nL_0 + \frac{c}{12}n(n^2-1)|h\rangle \\ &= \left(2nh + \frac{c}{12}n(n^2-1)\right)\langle h|h\rangle. \end{aligned} \tag{6.335}$$

注意到$\langle h|h\rangle > 0$,那么当$c < 0$时足够大的n会导致模$\langle h|L_n L_{-n}|h\rangle < 0$.此外,如果取$n = 1$,那么$h < 0$也会导致负模态.这说明幺正的CFT必然满足

$$\boxed{c \geq 0, \quad h \geq 0} \tag{6.336}$$

数学上,我们可以通过研究所谓的Gram矩阵来得到幺正CFT的充要条件.让我们选择一个Verma模,也就是从$|h\rangle$出发并作用一系列L_{-n}的L_0的本征态,我们把它们记为$\{|i\rangle\}$,然后构造如下内积,

$$M_{ij} = \langle i|j\rangle \tag{6.337}$$

这里M_{ij}就是Gram矩阵的矩阵元,M就是Gram矩阵.然后任意物理态可由$\{|i\rangle\}$的线性叠加构成,即$|a\rangle = \sum_i a_i|i\rangle$.因此,任意物理态的模是

$$\langle a|a\rangle = \sum_{i,j} a_i^* a_j \langle i|j\rangle = \sum_{i,j} a_i^* a_j M_{ij} = a^\dagger M a. \tag{6.338}$$

注意到$M_{ij}^* = \langle j|i\rangle = M_{ji}$,这说明$M$是厄密矩阵.这样我们可以用幺正矩阵$U$把$M$对角化为$\Lambda$,即$M = U^\dagger \Lambda U$.因此有

$$\langle a|a\rangle = a^\dagger M a = \overbrace{a^\dagger U^\dagger}^{=b^\dagger} \Lambda \overbrace{U a}^{=b} = b^\dagger \Lambda b = \sum_i \Lambda_i |b_i|^2. \tag{6.339}$$

这里Λ_i是M的本征值,且都为实数(厄密矩阵的特点).既然幺正性意味着所有的物理态都必须满足$\langle a|a\rangle \geq 0$,这意味着$M$的所有本征值都必须非负($\Lambda_i \geq 0$).换句话说,负模态的存在等价于$M$至少有一个负的本征值.因此CFT幺正性的讨论等价于Gram矩阵M本征值的讨论,只要本征值都非负即有幺正的CFT,反之则为非幺正CFT.

进一步,M可以分块对角化为一些列子矩阵$M^{(l)}$,指标l表示态的层级.例如,$l = 0$层级对应的态是$|h\rangle$,这样$M^{(0)}$矩阵就是

$$M^{(0)} = \langle h|h\rangle = 1.$$

这个并不能对CFT参数c, h有任何限制.接下来,我们考虑$l = 1$,此时的态是$L_{-1}|h\rangle$,这样有

$$M^{(1)} = \langle h|L_1 L_{-1}|h\rangle = \langle h|L_{-1}L_1 + 2L_0 + \frac{c}{12}1(1-1)|h\rangle = 2h,$$

我们施加幺正性就重新得到$h \geq 0$.让我们再考虑$l = 2$,对应的态有两个,即$L_{-2}|h\rangle, L_{-1}L_{-1}|h\rangle$,这样就可以构造一个$2 \times 2$矩阵,

$$\begin{aligned} M^{(2)} &= \begin{pmatrix} \langle h|L_2L_{-2}|h\rangle & \langle h|L_2L_{-1}L_{-1}|h\rangle \\ \langle h|L_1L_1L_{-2}|h\rangle & \langle h|L_1L_1L_{-1}L_{-1}|h\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 4h + \frac{c}{2} & 6h \\ 6h & 4h(2h+1) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

既然$M^{(2)}$有两个本征值,它们都非负(幺正性要求)意味着$M^{(2)}$的行列式$\det M^{(2)}$和迹$\mathrm{Tr}M^{(2)}$都非负.直接计算可以看到

$$\det M^{(2)} = 32h^3 - 20h^2 + 4h^2c + 2hc = 32(h - h_{1,1})(h - h_{1,2})(h - h_{2,1}),$$

$$\mathrm{Tr}M^{(2)} = 8h(h+1) + c/2,$$

$$h_{1,1} = 0, \quad h_{1,2} = \frac{1}{16}(5 - c - \sqrt{(1-c)(25-c)}), \quad h_{2,1} = \frac{1}{16}(5 - c + \sqrt{(1-c)(25-c)}).$$

令$\det M^{(2)}, \mathrm{Tr}M^{(2)} \geq 0$就可以解得幺正性对中心荷$c$和场维度$h$得限制.例如$\mathrm{Tr}M^{(2)} \geq 0$并结合$l = 1$给出的限制$h \geq 0$可知$c \geq 0$.此外,由$\det M^{(2)}$的零点(或者$\det M^{(2)} = 0$根)$h_{1,1}, h_{1,2}, h_{2,1}$可知,

(1)当$c = 1$或$c = 25$时,$h_{1,2} = h_{2,1}$.这样对$c = 1$而言$\det M^{(2)} = 32h(h - 1/4)^2$,(对$c = 25$有$\det M^{(2)} = 32h(h + 5/4)^2$)幺正性只是给出$h \geq 0$.

(2)当$c < 1$或$c > 25$时,$h_{1,2}, h_{2,1}$为不相等的实数,且$h_{1,2} < h_{2,1}$.这样$c < 1$且要求幺正性说明$h \geq h_{2,1}$.

(3)当$1 < c < 25$时,$h_{1,2}, h_{2,1}$为不相等的复数.

对于更一般层级l,其Gram矩阵的行列式具有如下形式,其又叫做Kac行列式:

$$\det M^{(l)} = \alpha_l \prod_{r,s \geq 1, rs \leq l} [h - h_{r,s}(c)]^{p(l-rs)}, \tag{6.340}$$

这里α_l是不依赖于h, c且大于零的系数,($\alpha_l = \prod_{r,s\geq 1, rs\leq l}[(2r)^s s!]^{m(r,s)}$)$r, s$是大于等于1的整数,并且它们的乘积小于等于层级$l$.$m(r,s) = p(l - rs) - p(l - r(s+1))$,而$p(l - rs)$指的是把整数$l - rs$分为不同正整数的方式的数目,例如$p(1) = 1, p(2) = 2 (2 = 2, 2 = 1 + 1), p(3) = 5 (3 = 3, 3 = 2 + 1, 3 = 1 + 1 + 1)$.$h_{r,s}(c)$是依赖于$r, s$和$c$的行列式的零点,其具体表达式是

$$\begin{aligned} h_{r,s}(c) &= h_0 + \frac{1}{4}(r\alpha_+ + s\alpha_-)^2 \\ h_0 &= \frac{1}{24}(c-1) \\ \alpha_\pm &= \frac{\sqrt{1-c} \pm \sqrt{25-c}}{\sqrt{24}}. \end{aligned} \tag{6.341}$$

如果引入复数参数t,那么我们可以把c和$h_{r,s}$重新参数化为

$$\begin{aligned} c &= 13 - 6\left(t + \frac{1}{t}\right), \\ h_{r,s}(t) &= \frac{1}{4}(r^2-1)t + \frac{1}{4}(s^2-1)\frac{1}{t} - \frac{1}{2}(rs-1). \end{aligned} \tag{6.342}$$

当然,我们也可以用c反解出t,即有$t=1+\frac{1}{12}(1-c\pm\sqrt{(1-c)(25-c)})$.虽然有$\pm$两支解,但不影响行列式的取值.当$c<1$或$c>25$时$t$为实数而$1<c<25$时$t$为单位圆上的点.($\alpha_+=\sqrt{t},\alpha_-=-1/\sqrt{t}$)

另一种参数化方式是引入参数m,这样有

$$\begin{aligned} c&=1-\frac{6}{m(m+1)},\\ h_{r,s}(m)&=\frac{[(m+1)r-ms]^2-1}{4m(m+1)}. \end{aligned} \tag{6.343}$$

反解出m有$m=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{25-c}{1-c}}$.CFT在研究二维(经典)临界系统中的成功很大程度上依赖于我们对于Kac 行列式的知识.

基于Kac行列式,可以证明$c\geq 1,h\geq 0$的CFT满足幺正性.而$0<c<1,h>0$一般而言对应非幺正CFT,只有满足如下条件的$c,h_{r,s}(m)$对应幺正CFT:

$$\begin{aligned} c&=1-\frac{6}{m(m+1)},\\ h_{r,s}(m)&=\frac{[(m+1)r-ms]^2-1}{4m(m+1)}. \quad 1\leq r<m, \quad 1\leq s<r \end{aligned} \tag{6.344}$$

注意这里m是大于等于2的正整数而r,s仍然是满足约束条件的正整数.

- 幺正性要求CFT的c,h满足$c\geq 1,h\geq 0$或者$c=1-\frac{6}{m(m+1)},h_{r,s}(m)=\frac{[(m+1)r-ms]^2-1}{4m(m+1)}$.

进一步,满足如下三个要求的CFT称为最小模型(minimal model):

$$\begin{aligned} c&=1-6\frac{(p-p')^2}{pp'},\\ h_{r,s}&=\frac{(pr-p's)^2-(p-p')^2}{4pp'},\\ &1\leq r<p', \quad 1\leq s<p \end{aligned} \tag{6.345}$$

这里c为中心电荷,$h_{r,s}$是依赖于r,s取值的场的共形维度,不同的r,s一般对应不同的场.我们把具有维度$h_{r,s}$的场记为$\phi_{(r,s)}$以强调其对于r,s的依赖性.p,p'是互质的正整数($p\geq 3,p'\geq 2$),一般设$p>p'$.r,s是大于等于1的正整数.当我们给定p,p'时就给定了确定的c和$h_{r,s}$,此时的CFT记作$\mathcal{M}(p,p')$.

(1)让我们考虑最简单的最小模型$\mathcal{M}(3,2)$,这里$p=3,p'=2$.因此$c=0$而$h_{r,s}=\frac{(3r-2s)^2-1}{24}$.注意到$r$的允许取值为1,$s$允许取值为1,2,那么有

$$h_{1,1}=0, \quad h_{1,2}=0,$$

这自然对应于完全平凡的理论,在物理上我们并不被关心这类理论.

(2)接下来的最小模型是$\mathcal{M}(5,2),\mathcal{M}(4,3),\mathcal{M}(5,4)$.这里$\mathcal{M}(5,2)$实际上对应Yang-Lee边界奇异性问题,其中心电荷为$c=-22/5$,是典型的非幺正CFT.具

有虚数磁场ih的Ising模型$H=-J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j-ih\sum_i\sigma_i$,其自由能可以写成配分函数零点的密度$\rho(h,T)$的函数,

$$F(h)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\rho(x,T)\ln(h-ix),$$

而其磁化是$M=\frac{\partial F}{\partial H}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{\rho(x,T)}{H-ix}$.在顺磁态($T>T_c$),$\rho(h,T)$在$h=h_c(T)$显示临界行为,即$\rho(h,T)\sim(h-h_c)^{\sigma}$,这就是Yang-Lee边界奇异性.而磁化$M$也有相同的临界行为.

描述Yang-Lee边界奇异性的有效Ginzburg-Landau理论是

$$\mathcal{L}_{YL}=\frac{1}{2}(\partial_\mu\Phi)^2+i(h-h_c)\Phi+i\gamma\Phi^3. \tag{6.346}$$

这里ih相当于一个虚的磁场,Φ^3的系数$i\gamma$也是虚的.这样这个有效理论是非厄密的$\mathcal{L}_{YL}\neq(\mathcal{L}_{YL})^{\dagger}$.因此相关的CFT理论必然是非幺正的.由于$\mathcal{M}(5,2)$理论中$p=5,p'=2$,因此$r=1,s=1,2,3,4$.这样有

$$h_{1,1}=0,\quad h_{1,2}=-\frac{1}{5}\quad h_{1,3}=-\frac{1}{5},\quad h_{1,4}=0. \tag{6.347}$$

这说明体系有两个初级场$\phi_{(1,1)}=\phi_{(1,4)}$和$\phi_{(1,2)}=\phi_{(1,3)}$,其共形维度分别是0和$-1/5$.$\Phi$场可以看作解析和反解析场$\phi_{(1,2)}$的组合,因此其共形维度是$(-1/5,-1/5)$,这样就有$\langle\Phi(z,\bar{z})\Phi(w,\bar{w})\rangle\sim\frac{1}{(z-w)^{-2/5}(\bar{z}-\bar{w})^{-2/5}}\sim|z-w|^{4/5}$. 我们看到关联函数随着空间距离变大逐渐增强,这种特性是非厄密体系的一大特点.

(3)$\mathcal{M}(4,3)$对应二维Ising模型的临界点,其中心电荷为$c=1/2$,其具体性质会在下一小节说明.$\mathcal{M}(5,4)$对应三临界(tricritical)的Ising模型,其中心电荷为$c=7/10$.考虑如下二维Ising模型:

$$H=-\sum_{\langle ij\rangle}t_it_j(K+\delta_{\sigma_i,\sigma_j})-\mu\sum_i t_i. \tag{6.348}$$

当格点i没有自旋时$t_i=0$否则就是1.通过调节β,K,μ,体系的三个相可以交汇于同一个点,即三相点,这就是叫三临界性这个名字的由来.$M(5,4)$有六个初级场(包括平凡的$h_{1,1}=0$,三个能量密度类型的场,两个自旋类型的场),并且与超对称理论相关.

(4)与一般的量子场论不同,绝大多数的CFT并没有明确的路径积分描述,也就是写不出一个以作用量为核心的等效配分函数.但是,对于一类具有幺正性的最小模型,人们可以写出它的路径积分形式.这一类有趣的CFT称为$(m+1,m)$对角幺正最小模型,记为$\mathcal{M}(m+1,m)(m=2,3,4...)$,它的中心电荷和场的共形维度满足

$$c=1-\frac{6}{m(m+1)},\quad h_{r,s}=\frac{((m+1)r-ms)^2-1}{4m(m+1)},\quad 1\leq r\leq m-1,1\leq s\leq m. \tag{6.349}$$

整个理论的初级场是解析与反解析部分的结合,即有$\Phi_{(r,s)}(z,\bar{z})=\phi_{(r,s)}(z)\otimes\phi_{(r,s)}(\bar{z})$,同时$\Phi_{(r,s)}$场的的共形维度满足$h=\bar{h}=h_{r,s}$.如果定义$\Phi\equiv\Phi_{(2,2)}$,那

么$\mathcal{M}(m+1,m)$CFT对应的路径积分形式实际上时一个Ginzburg-Landau理论,这个理论的拉式量是

$$\mathcal{L}=\int d^2z\left(\frac{1}{2}(\partial\Phi)^2+\Phi^{2(m-1)}\right). \tag{6.350}$$

Ising模型

最后,我们考虑处于临界点的二维Ising模型,这个模型有两个明显的初级场,即Ising自旋σ(晶格自旋σ_i的连续极限)和能量密度ε($\sigma_i\sigma_j$的连续极限).我们知道自旋和能量密度的关联函数是

$$\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle=\frac{1}{|n|^{d-2+\eta}}=\frac{1}{|n|^{\eta}}\quad \langle\varepsilon_i\varepsilon_{i+n}\rangle=\frac{1}{|n|^{2d-2/\nu}}=\frac{1}{|n|^{4-2/\nu}} \tag{6.351}$$

根据精确解,我们知道$\eta=1/4,\nu=1$,这样假设σ,ε都么有共形自旋,那么有$h=\bar{h}$,这样

$$\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle=\frac{1}{(|n|^2)^{2h}}=\frac{1}{|n|^{\eta}}\Rightarrow h_\sigma=\bar{h}_\sigma=\frac{\eta}{4}=\frac{1}{16} \tag{6.352}$$

这样我们就得到了自旋的共形维度.同理有能量密度的共形维度是$h_\varepsilon=\bar{h}_\varepsilon=\frac{4-2/\nu}{4}=\frac{1}{2}$.

对于Ising模型的情况,我们有$p=4,p'=3$这样系统的中心电荷$c=\frac{1}{2}$.注意到r的取值是1, 2,s的取值是1, 2, 3,那么所有的共形维度是

$$h_{1,1}=h_{2,3}=0\quad h_{1,2}=h_{2,2}=\frac{1}{16}\quad h_{1,3}=h_{2,1}=\frac{1}{2} \tag{6.353}$$

显然$h_{1,2}=h_{2,2}=\frac{1}{16}$对应自旋$\sigma$而$h_{1,3}=h_{2,1}=\frac{1}{2}$对应能量密度$\varepsilon$,$h_{1,1}=h_{2,3}=0$对应平凡的算符,我们称之为恒等算符(identity operator),记做I.我们可以把它们之间的OPE写作如下形式,这也叫做聚合规则(fusion rule):

$$\begin{aligned}\sigma\times\sigma&=I+\varepsilon\\ \sigma\times\varepsilon&=\sigma\\ \varepsilon\times\varepsilon&=I\end{aligned} \tag{6.354}$$

例如$\sigma\times\varepsilon=\sigma$表示$\sigma(z)\varepsilon(w)\sim\sigma(w)$.

当然,我们知道自由Majorana费米子的中心电荷$c=1/2$与二维Ising模型的CFT相同.这说明这两个理论有直接的联系.事实上,如果我们从一维量子Ising模型出发通过Jordan-Winger变换会发现系统在临界点确实是自由的无质量Majorana费米子.因此,二维Ising模型CFT可以用自由Majorana费米子描述:

$$S=\frac{1}{2\pi}\int d^2z(\psi\bar{\partial}\psi+\bar{\psi}\partial\bar{\psi}) \tag{6.355}$$

由先前的讨论我们知道$\langle\psi(z)\psi(w)\rangle=\frac{1}{z-w},\langle\bar{\psi}(\bar{z})\bar{\psi}(\bar{w})\rangle=\frac{1}{\bar{z}-\bar{w}}(g=\frac{1}{2\pi})$. 注意到$\psi$的共形维度是$h=1/2,\bar{h}=0$($\bar{\psi}$的共形维度是$h=0,\bar{h}=1/2$)而能量密度$\varepsilon$有$h=\bar{h}=1/2$,这说明

$$\varepsilon(z,\bar{z})=i:\psi\bar{\psi}: \tag{6.356}$$

现在让我们计算$2n$个能量密度的关联函数$E_{2n}=\langle\varepsilon(z_1,\bar{z}_1)...\varepsilon(z_{2n},\bar{z}_{2n})\rangle$:

$$\begin{aligned}E_{2n} &= \langle\varepsilon(z_1,\bar{z}_1)...\varepsilon(z_{2n},\bar{z}_{2n})\rangle \\ &= \langle\psi(z_1)...\psi(z_{2n})\rangle\langle\bar{\psi}(\bar{z}_1)...\bar{\psi}(\bar{z}_{2n})\rangle \end{aligned} \tag{6.357}$$

对于反对称矩阵$A_{ij}=-A_{ji}$定义记号$\mathrm{Pf}(A)=\sqrt{\det(A)}$,(Pf代表Pfaffian)那么上式表示为

$$E_{2n}=\mathrm{Pf}[\langle\psi(z_i)\psi(z_j)\rangle]_{1\le i,j\le 2n}\times\mathrm{Pf}[\langle\bar{\psi}(\bar{z}_i)\bar{\psi}(\bar{z}_j)\rangle]_{1\le i,j\le 2n}=\left|\mathrm{Pf}\left[\frac{1}{z_i-z_j}\right]_{1\le i,j\le 2n}\right|^2.$$

这样我们发现能量密度的关联函数可以用反对称矩阵的Pfaffian进行简单表示.[56]

Ψ^4理论的双圈图修正

当我们计算四维Ψ^4理论的r修正时会遇到如图6.1(c)类型的双圈图,当外动量为k 时,这个双圈图等效于一个关联函数$G^{(0)}(k+q)$ 与一个有效相互作用$\Pi(q)$的单圈图:

$$\Sigma^{(2)}(k)\sim u^2\int\frac{d^4q}{(2\pi)^4}G^{(0)}(k+q)\Pi(q) \tag{6.358}$$

这里$\Pi(q)$是粒子-空穴激发对应的极化图(单圈):

$$\Pi(q)=\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4}G^{(0)}(k')G^{(0)}(k'+q)=\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4}\frac{1}{k'^2+r}\frac{1}{(k'+q)^2+r} \tag{6.359}$$

这个积分的计算需要用到名为Feynman参数化的技巧,也就是我们可以把$\frac{1}{xy}$ 写为如下形式

$$\frac{1}{xy}=\int_0^1 d\alpha\frac{1}{(\alpha x+(1-\alpha)y)^2}. \tag{6.360}$$

利用这种关系,我们发现

$$\Pi(q)=\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4}\int_0^1 d\alpha\frac{1}{[\alpha((k'+q)^2+r)+(1-\alpha)(k'^2+r)]^2}=\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4}\int_0^1 d\alpha\frac{1}{[k'^2+2\alpha k'q+\alpha q^2+r]^2}. \tag{6.361}$$

显然,此时积分变量k'与q依然耦合在一起,为了进一步处理,可以配出平方项α^2q^2,这样有

$$\Pi(q)=\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4}\int_0^1 d\alpha\frac{1}{[(k'+\alpha q)^2+\alpha(1-\alpha)q^2+r]^2}. \tag{6.362}$$

[56]只取全纯部分,那么Pfaffian形式能够自然描述分数量子霍尔效应中著名的Moore-Read波函数的Majorana费米子部分.反过来说,既然Moore-Read波函数被认为能够描述5/2态并且Majorana费米子一般认为来自无自旋或自旋完全简化电子直接的Cooper配对,那么人们认为5/2态是一种类似于超导的量子霍尔态.(虽然没有特别直接的证据)

由于积分上下限都取到无穷,因此变量代换$k' \to k' - \alpha q$不改变积分值,我们得到

$$\Pi(q) = \int_0^1 d\alpha \int \frac{d^4k'}{(2\pi)^4} \frac{1}{[k'^2 + \alpha(1-\alpha)q^2 + r]^2}, \tag{6.363}$$

注意到关于k'的积分与先前计算关于r的一阶修正时遇到的I_2形式完全相同,因此有

$$\Pi(q) = -\frac{1}{16\pi^2} + \frac{1}{16\pi^2} \int_0^1 d\alpha \ln \frac{\Lambda^2}{\alpha(1-\alpha)q^2 + r} = -\frac{1}{16\pi^2} - \frac{1}{16\pi^2} \int_0^1 d\alpha \ln(\alpha(1-\alpha)q^2 + r) + \frac{\ln \Lambda^2}{16\pi^2}. \tag{6.364}$$

这样,利用Feynman参数化我们发现极化函数包含三部分,即动量无关部分,动量依赖部分以及对数发散部分.把$\Pi(q)$代入$\Sigma^{(2)}$可得

$$\Sigma^{(2)} \sim \frac{u^2}{256\pi^4}(-1 + \ln \Lambda^2)(\Lambda^2 - r \ln \Lambda^2) - \frac{u^2}{128\pi^4} \int_0^\Lambda dq \frac{q^3}{q^2 + r} \int_0^1 d\alpha \ln(\alpha(1-\alpha)(q-k)^2 + r). \tag{6.365}$$

第六章习题

习题1:标度函数

Q:判断下列函数是否是标度函数:

(1) $f(x)=x^{\beta}$; (2) $f(x)=\ln x$; (3) $f(x)=e^{-\gamma x}$; (4) $f(k)=\dfrac{1}{k^2+r}$ (5) $f(x,t)=\dfrac{1}{x^2-t^2}$

习题2:自由场的标度维度

Q1:如果一个模型的作用量是$S=\int d^dx\bar{\psi}(-i\nabla)\psi$,那么$\dim[\psi]=$?

Q2:考虑一个虚时作用量$S=\int d\tau d^dx\Psi^*(\partial_\tau+\frac{-\nabla^2}{2})\Psi$,这里我们引入了虚时$\tau$,为了使得这个作用量在是无量纲的,那么$\dim[\Psi],\dim[\tau]=$?

习题3:相关与无关扰动

Q1:对于$S=\int d\tau d^dx\bar{\psi}(\partial_\tau-iv_F\nabla)\psi$,分析相互作用$u(\bar{\psi}\nabla\psi)^2$是否为无关扰动?

Q2:对于$S=\int d\tau d^dx\Psi^*(\partial_\tau+\frac{-\nabla^2}{2})\Psi$,$u(\Psi^*\Psi)^2$ 在什么情况下是相关扰动?

Bibliography

[1] Igor Herbut, A Modern Approach to Critical Phenomena, 第三章

[2] Mehran Kardar, Statistical Physics of Fields, 第四−六章

[3] Mucio A Continentino, Quantum Scaling in Many-Body Systems, 第十一章

[4] 李正中, 固体理论, 第十二章.

Chapter 7

KT相变:拓扑的崛起



Figure 7.1: David J. Thouless(1934−2019),F. Duncan M. Haldane(1951−)和J. Michael Kosterlitz(1943−). 三人因拓扑相变和拓扑物态的理论发现而荣获2016 年诺贝尔物理学奖.

KT相变:师徒合力破难题

在KT相变被发现之前,人们普遍认为序参量具有连续对称的二维系统并不存在相变.(先前我们讨论的二维$O(3)$ 非线性sigma模型在$2+\epsilon$展开框架下显示流向强耦合的行为,即相变不会出现.)

但是在准二维He-4超流薄膜确实观察到明显的相变信号,这表明二维仍可能存在相变.

- Thouless和Kosterlitz的理论研究表明具有$O(2)$对称的系统(例如XY模型)在二维可以显示一类不具有对称性破缺的相变,这就是KT相变,有时也叫拓扑相变.[1]
- 由于KT相变以及拓扑物态的研究,Thouless和Kosterlitz这对师徒与Haldane一起荣获2016 年度诺贝尔物理学奖.[2](图7.1)

David James Thouless,1934年出生于英国贝尔斯登,1958年于康奈尔大学获得博士学位,(导师是著名的物理诺奖获得者Bethe)华盛顿大学物理系教授.他为人们理解原子和电子的多体系统,原子核多体系统作出了重要贡献.他的研究领域包括超导现象,核物质性质以及原子核内激发态关联运动.J. Michael Kosterlitz,1942年出生于英国阿伯丁,1969年于牛津大学获得博士学位,现为美国布朗大学教授.他的研究涵盖一维和二维物理的凝聚态理论,随机系统,电子局域化和自旋玻璃态等的相变,以及熔化和凝固的临界动力学等领域.

关于BKT相变的一些历史回顾和新的应用可以参考纪念文集[1].下面我们以经典XY模型为例来讨论KT相变的基本内容.

[1]俄国物理学家Berezinskii更早注意到这个问题,因此KT相变也叫做BKT相变.

[2]Thouless获得诺贝尔奖的工作主要是KT相变和量子霍尔效应中引入的TKNN 不变量形式.Haldane获得诺奖工作是Haldane猜想和二维六角晶格上的Haldane模型.

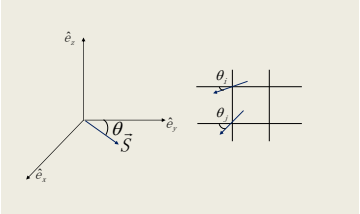


Figure 7.2: 平面内的经典自旋及其最近邻耦合.

XY模型:涡旋快来

我们所讨论的XY模型实际上是自旋只在XY平面内的经典Heisenberg模型(自旋分量可连续变化而不用取分立值):

$$H_{Heisenberg} = \sum_{j,k} J_{jk} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_k \tag{7.1}$$

这里自旋$\vec{S}_j$被看作是三维空间中大小为S的矢量,即$\vec{S}_j = S_j^x \vec{e}_x + S_j^y \vec{e}_y + S_j^z \vec{e}_z = S\vec{n}_j$.($\vec{n}_j$为单位矢量[3])$J_{jk}$是磁交换耦合常数,其在微观上依赖于$j,k$格点附近电子波函数在Coulomb势下的重叠积分.在实际使用中,J_{jk}一般作为体系的唯象参数出现,具体取值可通过拟合实验数据获得或人为直接给定. [4]另一方面,我们还需要确定系统所处的晶格,也就是自旋到底如何排列,常用的是d 维的超立方晶格.

现在,让我们考虑二维正方晶格的每个格点上都有一个自旋,现在设自旋仅有xy面内的分量,即位于格点j的自旋矢量是$\vec{S}_j = S_j^x \vec{e}_x + S_j^y \vec{e}_y = S(\cos\theta_j, \sin\theta_j)$,这里我们用自旋相对于$x$轴的夹角$\theta_j$来表示.

为了简化,我们设自旋大小$S = 1$,因此自旋之间的耦合项为$\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k = \cos\theta_j \cos\theta_k + \sin\theta_j \sin\theta_k = \cos(\theta_j - \theta_k)$. 进一步,我们考虑只有最近邻自旋之间有耦合,而耦合为铁磁型,即

$$\boxed{H_{XY} = -J \sum_{<j,k>} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_k = -J \sum_{<j,k>} \cos(\theta_j - \theta_k)} \tag{7.2}$$

这里$J > 0$以体现铁磁型耦合,$\langle j,k\rangle$表示对最近邻格点j,k求和.对当前的正方晶格,j,k求和可转化为对所有格点j以及它的最近邻$j+\delta$求和,(j的最近邻有四个,为

[3]在球坐标系中的形式是$\vec{n}_j = (\sin\theta_j \cos\varphi_j, \sin\theta_j \sin\varphi_j, \cos\theta_j)$

[4]当J_{jk}在空间中随机变化时,体系低温时可出现非平凡的顺磁态,即所谓自旋玻璃态(spin glass).在这个状态中任意格点的自旋期望值$\langle\vec{S}_j\rangle$为零,但同一格点自旋其自身具有长时关联,即$\lim_{t\to\infty}\langle\vec{S}_j(t)\vec{S}_j(0)\rangle \neq 0$.换句话说体系自旋对其自身具有记忆,这说明系统的遍历性发生破缺.实验上,我们可以通过测量静态磁化率在低温下的发散峰来确认自旋玻璃相变的发生.

避免重复计数则只需要考虑x,y方向而不用再考虑$-x,-y$方向)这里δ表示x,y方向矢量,即

$$\sum_{\langle j,k\rangle}=\sum_{j}\sum_{\delta=\hat{x},\hat{y}} \tag{7.3}$$

因此,我们的模型也可以写成

$$H_{XY}=-J\sum_{j}(\cos(\theta_j-\theta_{j+\hat{x}})+\cos(\theta_j-\theta_{j+\hat{y}})). \tag{7.4}$$

研究系统有限温度的性质需要我们计算系统的配分函数,即

$$\mathcal{Z}=\int_0^{2\pi}\prod_j d\theta_j e^{-\beta H_{XY}}=\int_0^{2\pi}\prod_j d\theta_j e^{-F_{XY}} \tag{7.5}$$

$$F_{XY}=-K\sum_{<j,k>}\cos(\theta_j-\theta_k) \tag{7.6}$$

这里定义了无量纲耦合参数$K=J/T$和有效自由能F_{XY}.

让我们先研究系统低温时的情况.在温度$T=0$时,系统的基态必定是所有自旋取向都一致的铁磁态.在低温时,我们假定自旋取向与零温时差别不是太大,换句话说我们认为相邻格点自旋取向基本一致,仅有小的偏差,这意味着$|\theta_i-\theta_j|<<1$,这样展开cos函数至夹角之差的平方项有$\cos(\theta_i-\theta_j)\simeq 1-\frac{1}{2}(\theta_i-\theta_j)^2$, 则有

$$F_{XY}\simeq -K\sum_{<j,k>}\left(1-\frac{1}{2}(\theta_j-\theta_k)^2\right)=-2KN_s+\frac{K}{2}\sum_{<j,k>}(\theta_j-\theta_k)^2 \tag{7.7}$$

这里N_s是系统总格点数.

忽略常数项(也就是自旋取向完全一致的铁磁态对应的基态能$E_g=-2KN_s$)可得如下有效自由能

$$F_{XY}=\frac{K}{2}\sum_{<j,k>}(\theta_j-\theta_k)^2=\frac{K}{2}\sum_j((\theta_j-\theta_{j+\hat{x}})^2+(\theta_j-\theta_{j+\hat{y}})^2) \tag{7.8}$$

可以看到,只要相邻自旋取向有差别,自由能就会升高.为了方便讨论,我们考虑系统在连续极限下的情况,这相当于是取晶格常数$a\to 0$的极限,物理上对应系统的自旋在晶格尺度之上光滑变化,这样,我们有

$$\sum_j=\frac{1}{a^2}\sum_{j_x}a\sum_{j_y}a \tag{7.9}$$

这里格点指标$j=(j_x,j_y)$表示自旋所在格点位置用两个整数指标j_x,j_y 表示.若设系统是$L\times L$ 大小的正方形,那么在$a\to 0$的极限下,上述对位置的求和成为对空间位置$\vec{r}=(x,y)$的积分,即

$$\frac{1}{a^2}\sum_{j_x}a\sum_{j_y}a\to\frac{1}{a^2}\int_0^L dx\int_0^L dy=\frac{1}{a^2}\int d^2r \tag{7.10}$$

同时,定义在格点上的自旋夹角θ_j成为空间位置$\vec{r}=(x,y)$的函数

$$\theta_j \to \theta(x,y), \quad \theta_{j+\hat{x}} \to \theta(x+a,y), \quad \theta_{j+\hat{y}} \to \theta(x,y+a) \tag{7.11}$$

这样

$$(\theta_j-\theta_{j+\hat{x}})^2+(\theta_j-\theta_{j+\hat{y}})^2=(\theta(x,y)-\theta(x+a,y))^2+(\theta(x,y)-\theta(x,y+a))^2 \tag{7.12}$$

在$a\to 0$时我们把$\theta(x+a,y),\theta(x,y+a)$做泰勒展开,则有

$$(\theta(x,y)-\theta(x+a,y))^2=(\theta(x,y)-\theta(x,y)-a\partial_x\theta(x,y))^2=a^2(\partial_x\theta)^2 \tag{7.13}$$

$$(\theta(x,y)-\theta(x,y+a))^2=(\theta(x,y)-\theta(x,y)-a\partial_y\theta(x,y))^2=a^2(\partial_y\theta)^2. \tag{7.14}$$

因此,

$$(\theta_j-\theta_{j+\hat{x}})^2+(\theta_j-\theta_{j+\hat{y}})^2=a^2(\partial_x\theta)^2+a^2(\partial_y\theta)^2 \tag{7.15}$$

综合以上这些结果,我们发现连续极限下系统的有效自由能函数近似于下式

$$F_{XY}=E_{XY}/T=\frac{K}{2}\frac{1}{a^2}\int\int dxdy\left[a^2\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^2+a^2\left(\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)^2\right]=\frac{K}{2}\int d^2r(\nabla\theta)^2 \tag{7.16}$$

这里,$\nabla\theta(\vec{r})=\partial_x\theta\vec{e}_x+\partial_y\theta\vec{e}_y$.对$\theta(r)$做傅里叶变换$\theta(r)=\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}e^{ikr}\theta(k)$,则有

$$F_{XY}=\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{K}{2}k^2|\theta(k)|^2=A\sum_k\frac{K}{2}k^2|\theta(k)|^2=A\sum_{k>0}Kk^2|\theta(k)|^2 \tag{7.17}$$

$A=L^2$是系统的面积,为简化记号可以令$A=1$.同时,配分函数可写为

$$\mathcal{Z}_{XY}\simeq\prod_r\int_{-\infty}^{\infty}d\theta(r)e^{-F_{XY}[\theta]}=\prod_{k>0}\int_{-\infty}^{\infty}d\theta^*(k)d\theta(k)e^{-Kk^2|\theta(k)|^2} \tag{7.18}$$

在连续模型近似中,我们只考虑系统位于二维正方晶格的情况并且相位的积分上下限已扩展至$(-\infty,\infty)$.显然,由于配分函数已经完全是Gauss积分形式,故而模型是完全可解的.回忆Gauss型作用量的关联函数是$\langle\theta(k)\theta(-k)\rangle=\frac{1}{Kk^2+r}$(我们加入了小的质量项$r$以避免发散),其空间关联函数是

$$\begin{aligned}\langle\theta(\vec{r})\theta(\vec{r}')\rangle &= G(\vec{r}-\vec{r}')=\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}\frac{1}{Kk^2+r}\\ &= \frac{1}{2\pi K}K_0(\sqrt{r/K}|\vec{r}-\vec{r}'|)\simeq-\frac{1}{2\pi K}\ln\frac{\sqrt{r/K}}{2}|\vec{r}-\vec{r}'|,\ |\vec{r}-\vec{r}'|<<1/\sqrt{r/K}\sim\xi.\end{aligned}$$

当$r\to 0$时,关联函数$\xi\to\infty$,此时角度之间的关联满足对数型的空间依赖关系$\ln|\vec{r}-\vec{r}'|^{-\frac{1}{2\pi K}}$. 可以得到低温下的自旋关联函数是

$$\begin{aligned}&\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle=\mathrm{Re}\langle e^{i(\theta(\vec{r}_i)-\theta(\vec{r}_j))}\rangle=e^{-\frac{1}{2}\langle(\theta(\vec{r}_i)-\theta(\vec{r}_j))^2\rangle}\propto e^{\langle\theta(\vec{r}_i)\theta(\vec{r}_j)\rangle}\\ &\simeq e^{\ln|\vec{r}_i-\vec{r}_j|^{-\frac{1}{2\pi K}}}=\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|^{\frac{1}{2\pi K}}}=\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|^{\frac{T}{2\pi J}}}\end{aligned} \tag{7.19}$$

类型	自旋关联	适用范围	原激发	紧致性
低温连续模型	$\frac{1}{\lvert\vec{r}_i-\vec{r}_j\rvert^{\frac{T}{2\pi J}}}$	低温区	自旋波	无
高温展开	$e^{-\lvert\vec{r}_i-\vec{r}_j\rvert\ln(T/J)}$	高温区	???	有

Table 7.1: XY模型高低温时两类方法的对比.

注意到此时低温态的自旋关联并不是通常有序态中的长程关联,[5]而是类似于相变点时的幂律衰减,这表明体系实际上处于有序与无序的边界上,文献中也称此种情形为准长程序或代数长程序.[6]

- 然而,当系统温度足够高时,自旋取向杂乱无章,其自旋关联必定是指数衰减的短程关联,即 $\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle\propto e^{-|\vec{r}_i-\vec{r}_j|/\xi}$ 那么如何得到这个物理上十分合理的结果呢?

- 注意到我们在处理低温态时假定相邻夹角θ变化很小而忽略了夹角本身是取值范围在$[0,2\pi]$并以2π为周期的周期函数的事实.一般这也叫做相位的紧致性(compact).(例如$\vec{S}(\theta+2\pi)=\vec{S}(\theta)$)

- 在高温态,自旋取向比较无规,相邻自旋之间夹角变化很大,因而其周期性是重要的,这与低温下的小涨落展开完全不同.

下面我们通过高温展开的方法定性估计高温时自旋关联的形式.这里提到的高温展开,其本质就是e指数展开,即Boltzman因子$e^{-\beta H}$ 在温度足够高时可以对小量$-\beta H$做展开.[7]

高温展开

当系统温度足够高时,我们可以按小参数$\beta=1/T$进行幂级数展开

$$e^{-\beta H_{XY}}=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^m(H_{XY})^m}{m!}=1-\beta H_{XY}+\frac{1}{2}\beta^2(H_{XY})^2+... \tag{7.20}$$

自旋关联函数也具有类似的展开形式

$$\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle\propto\frac{\prod_k\int_0^{2\pi}d\theta_k e^{i(\theta_i-\theta_j)}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^m(H_{XY})^m}{m!}}{\prod_k\int_0^{2\pi}d\theta_k\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^m(H_{XY})^m}{m!}}. \tag{7.21}$$

[5]有序态中的长程关联对自旋系统而言是指相距无穷远的自旋之间的关联函数仍然非零,例如$\lim_{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|\to\infty}\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle\neq 0$.

[6]文小刚的称法

[7]高温展开是一类特殊的级数展开(series expansion)方法,关于级数展开在晶格模型中的应用可以参考Oitmaa,Hamer,Zheng的《Series Expansion Methods for Strongly interacting Lattice Models》一书.

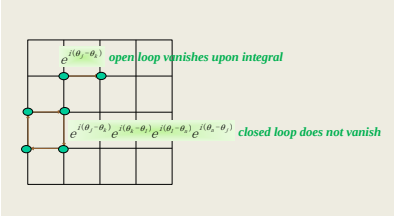


Figure 7.3: 计算配分函数时所遇到的封闭路径与开放路径,开放路径积分后贡献为零.

这里的分母来自于配分函数$\mathcal{Z}$的展开:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \prod_k \int_0^{2\pi} d\theta_k \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^m (H_{XY})^m}{m!} = \prod_k \int_0^{2\pi} d\theta_k \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\frac{K}{2})^m \left(\sum_{\langle i,j\rangle} e^{i(\theta_i-\theta_j)} + \sum_{\langle i,j\rangle} e^{-i(\theta_i-\theta_j)}\right)^m}{m!} \\ &= 1 + \prod_k \int_0^{2\pi} d\theta_k \sum_{m=1}^{\infty} \frac{K^m}{2^m m!} \sum_{\langle i,j\rangle} \sum_{\langle k,l\rangle} \sum_{\langle m,n\rangle} \cdots \left[e^{i(\theta_i-\theta_j)} e^{i(\theta_k-\theta_l)} e^{i(\theta_m-\theta_n)} \cdots\right] = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \mathcal{Z}_m. \end{aligned} \tag{7.22}$$

中括号内的e指数乘积共有m个乘积项构成.为了近似计算上述对所有角度θ 的积分,注意到夹角θ的积分具有以下性质

$$\int_0^{2\pi} d\theta_j e^{i\theta_j} = 0 \Rightarrow \int_0^{2\pi} d\theta_j e^{i\theta_j} \prod_{k\neq j} e^{i\theta_k} = 0 \tag{7.23}$$

换句话说,当我们考虑对某个夹角的积分时,如果其他格点的夹角并没有与所考虑格点形成闭合的回路,那么关于所求夹角的积分必定为零.而当体系具有如下所示的闭合回路时,对所求相位积分是非零的(如图7.3)

$$\int_0^{2\pi} d\theta_j e^{i(\theta_j-\theta_k)} e^{i(\theta_k-\theta_j)} = \int_0^{2\pi} d\theta_j = 2\pi \tag{7.24}$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta_j e^{i(\theta_j-\theta_k)} e^{i(\theta_k-\theta_l)} e^{i(\theta_l-\theta_m)} e^{i(\theta_m-\theta_j)} = \int_0^{2\pi} d\theta_j = 2\pi \tag{7.25}$$

因此,配分函数的计算实际上仅需要考虑闭合路径的贡献,开放路径贡献都是零.显然,$\mathcal{Z}$中$m = 1$的项不构成闭合回路,因此贡献为零,这样最低阶的贡献来自$m = 2$,

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_2 &= \prod_n \int_0^{2\pi} d\theta_n \frac{K^2}{2^2 2!} \sum_{\langle i,j\rangle} \sum_{\langle k,l\rangle} [e^{i(\theta_i-\theta_j)} e^{i(\theta_k-\theta_l)} + e^{i(\theta_i-\theta_j)} e^{-i(\theta_k-\theta_l)} + e^{-i(\theta_i-\theta_j)} e^{i(\theta_k-\theta_l)} \\ &\quad + e^{-i(\theta_i-\theta_j)} e^{-i(\theta_k-\theta_l)}] \\ &= \prod_n \int_0^{2\pi} d\theta_n \frac{K^2}{2^2 2!} \sum_{\langle i,j\rangle} 4 = (2\pi)^{N_s} \frac{K^2}{2^2 2!} 2N_s 4 \sim K^2. \end{aligned} \tag{7.26}$$

进一步,$m=3$时无法得到闭合路径,这样$\mathcal{Z}_3=0$而$m=4$时有$\mathcal{Z}_4\sim K^4$.[8]因此,我们发现XY模型在高温下的配分函数可以写成

$$\mathcal{Z}\sim 1+K^2+K^4+... \tag{7.27}$$

现在,我们考虑关联函数分子的计算.对配分函数计算相比,此时需要额外对两个自旋θ_i,θ_j 取积分.仿照配分函数的分析,仅有的积分非零项是链接这两个待求自旋的开放路径,例如

$$\int_0^{2\pi}d\theta_i d\theta_j e^{i(\theta_j-\theta_i)}e^{i(\theta_i-\theta_k)}e^{i(\theta_k-\theta_l)}e^{i(\theta_l-\theta_m)}e^{i(\theta_m-\theta_j)}=\int_0^{2\pi}d\theta_i d\theta_j=(2\pi)^2 \tag{7.28}$$

这样,我们知道对两个夹角θ_i,θ_j有贡献的第一个非零项就是链接这两个格点的最短的线段,也即

$$\prod_k\int_0^{2\pi}d\theta_k e^{i(\theta_i-\theta_j)}\prod_{l,n}K^m e^{i\theta_l}e^{i\theta_n}...\propto K^{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}+... \tag{7.29}$$

结合分子和分母的结果,我们发现自旋关联函数有如下形式

$$\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle\propto\frac{K^{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}}{1+K^2+O(K^4)}\propto e^{-|\vec{r}_i-\vec{r}_j|/\xi}. \tag{7.30}$$

在这里,我们也定义了高温时的关联长度$\xi=\frac{1}{\ln 1/K}=\frac{1}{\ln(T/J)}$.我们看到,通过高温展开并对所有夹角在紧致区间内的积分可以得到在空间指数衰减的自旋关联,这表明高温时体系处于无序态.而在低温时,体系的自旋关联是幂律衰减的,这表明系统可能存在从指数衰减的高温态到幂律衰减的低温态的相变.这个相变就是著名的Kosterlitz-Thouless相变或简称KT相变.

那么物理上是什么因素导致这种相变呢?Kosterlitz和Thouless给出的答案是涡旋.为了简化分析,下面考虑单个涡旋的性质以及对体系的影响.

涡旋

考虑位于二维平面坐标原点处的带有单位涡度的单个涡旋,这类涡旋可由如下自旋夹角描述

$$\boxed{\theta(\vec{r})=\arctan\frac{y}{x}} \tag{7.31}$$

这里自旋的位置矢量$\vec{r}=(x,y)$.注意到此时$\vec{r}$处的自旋的取向$\vec{S}$ 由夹角θ 确定,而θ又通过函数$\theta(\vec{r})=\arctan\frac{y}{x}$ 与实空间位置联系在一起.实际上$\arctan\frac{y}{x}$就是位置矢量$\vec{r}$与x 轴的夹角,因此在当前涡旋构型中,自旋与x轴的夹角与该自旋位置矢量$\vec{r}$ 与x轴的夹角相同,这说明$\vec{r}$处的自旋$\vec{S}(\vec{r})$的取向与其位矢完全相同,即有$\vec{S}(\vec{r})=\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$.(如图7.4) 因此,该类涡旋中如果我们知道了空间的位置就相当于知

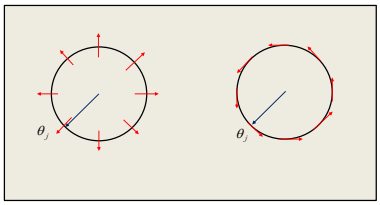


Figure 7.4: XY模型中两类典型的涡旋.

道了每个自旋的取向. [9]

- 认真的读者可能会好奇,我们为什么会选择$\theta(\vec{r}) = \arctan\frac{y}{x}$这种形式的涡旋解呢？这个问题的答案在于连续近似下的体系配分函数$Z_{XY} \simeq \prod_r \int d\theta(r) e^{-F_{XY}[\theta]} (F_{XY}[\theta] = \frac{K}{2}\int d^2r(\nabla\theta)^2)$在$K$比较大时由$F_{XY}$的极值决定,这等价于$\frac{\delta F_{XY}}{\delta\theta} = 0$的解决定体系的整体行为.显然,$\frac{\delta F_{XY}}{\delta\theta} = 0$给出二维拉普拉斯方程$\nabla^2\theta = 0$.

- 可以验证$\theta(r) = \sum_j \theta_j = \sum_j q_j \arctan\frac{y-y_j}{x-x_j}$是拉普拉斯方程$\nabla^2\theta = 0$的解.这里的$q_j$为整数,表示涡旋所携带的整数'电荷',比如我们上面考虑的最简单例子对应的是$q_j = +1$.x_j, y_j是第j个涡旋的涡旋中心.如果考虑两个涡旋的情况,每个涡旋的电荷分别是q_1, q_2,那么就有$\theta(r) = q_1 \arctan\frac{y-y_1}{x-x_1} + q_2 \arctan\frac{y-y_2}{x-x_2}$.

  进一步,我们研究夹角θ的梯度

$$\nabla\theta(\vec{r}) = \frac{\partial}{\partial x}\arctan\frac{y}{x}\hat{e}_x + \frac{\partial}{\partial y}\arctan\frac{y}{x}\hat{e}_y = \frac{x\hat{e}_y - y\hat{e}_x}{x^2+y^2} = \frac{1}{r}\hat{e}_\varphi \tag{7.32}$$

在上式的最后我们采用了平面极坐标系$x = r\cos\varphi, y = r\sin\varphi$.$\hat{e}_\varphi$是极坐标系中角度方向的单位矢量,它垂直于位置矢量$\vec{r}$.

然后,我们考虑包围涡旋中心$\vec{r} = 0$的任意闭合回路,并计算$\nabla\theta$在该回路上的环路积分,

$$I = \oint d\vec{l}\cdot\nabla\theta(\vec{r}) = \int d^2r\nabla\times\nabla\theta(\vec{r}) = \int d^2r 2\pi\delta(\vec{r}) = 2\pi \tag{7.33}$$

[8] 当然$m = 4$时候的闭合路径有两类,一类与$m = 2$相同,即公式7.24,而另一类则是公式7.25对应的路径

[9] 换句话说,涡旋位形的出现把自旋空间与实空间联系在了一起,数学上相当于$\theta(\vec{r})$定义了从二维空间与x轴夹角到自旋空间角度θ的映射,这种映射数学上用同伦群的记号可以标记为$\pi_1(S_1) = Z$.这个记号表示x轴夹角所在的实空间覆盖自旋角度所在空间的次数为整数次,整数Z也称为转动数.(winding number)

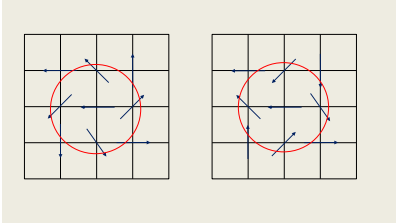


Figure 7.5: 晶格尺度下的涡旋与反涡旋.

这里用到了Stokes公式把环路积分化为面积分.因此我们发现涡旋对应的角度梯度的环路积分量子化为2π的整数倍.当然,直接考虑以涡旋中心$\vec{r}=0$为中心的环形回路也能得到同样的结果,

$$\oint d\vec{l}\cdot\nabla\theta(\vec{r})=\int_0^{2\pi} rd\varphi\frac{1}{r}=2\pi. \tag{7.34}$$

注意到我们这里考虑的是单位涡旋,故环路积分恰好是2π.这里的量子化,体现了一种整体的性质,也就是拓扑的性质.实际上如果我们光滑的改变$\theta(\vec{r})$的形式,其环路量子化取值依然是一个不变量,我们把这种在连续变换下的系统不变量称为系统的拓扑不变量.其体现的是只要系统整体的结构没有大的变化,那么相应的取值是不会改变的,这也是所谓的拓扑稳定性的涵义.

对于这个单位涡旋,让我们来分析它的热力学稳定性,也就是通过计算其自由能判断它什么时候适合形成,什么时候不适合形成.首先,根据连续极限时的有效自由能(其实是扣除基态能后的能量除去温度),即公式7.16,单个单位涡旋存在时的能量($E=TF$) 估计为

$$E_V=\frac{J}{2}\int d^2r(\nabla\theta(\vec{r}))^2=J\pi\int_R^L\frac{dr}{r}=J\pi\ln\frac{L}{R} \tag{7.35}$$

为了保证积分的有限性,我们取上限为系统的尺度L,下限则是涡旋核心尺度R.在R 以下,简单的连续描述失效.

同时,根据Boltzman的熵公式$S=k\ln\Omega=\ln\Omega$,我们需要考虑一个宏观态所对应微观状态的数目.对于当前的单涡旋系统,单涡旋存在的状态是宏观态,而微观态状态数可认为是在系统中涡旋可以存在位置的数目.因为在二维平面L^2的区域中可以出现涡旋的位置总数为$\Omega=L^2/R^2$,其中R^2代表单个涡旋的有效面积,因此,单个涡旋的热力学熵估计为

$$S_V=2\ln\frac{L}{R}. \tag{7.36}$$

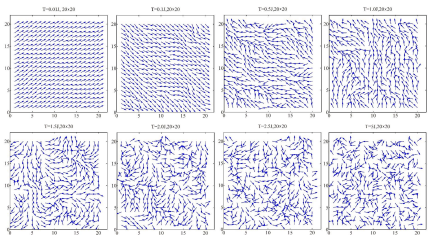


Figure 7.6: XY模型的经典蒙特卡洛模拟结果,可以看到涡旋随着温度升高的逐渐产生.

结合能量与热力学熵的结果,我们看到单涡旋的自由能F_V是(这个自由能是相对于背景而言的,也就是F_V表示单涡旋存在时自由能的变化量)

$$\boxed{F_V = E_V - TS_V = (\pi J - 2T)\ln\frac{L}{R}} \tag{7.37}$$

可以看到当$T = T_{KT} = \frac{\pi J}{2}$时,自由能恰好为零.当$T > T_{KT}$时自由能小于零,表明体系倾向于出现单个涡旋的状态.而当温度低于T_{KT}时,自由能为正,表面体系不倾向于形成单涡旋.[10]

通过前面的讨论,我们知道低温时系统的自旋关联是准长程的,当没有涡旋时,此种关联得到保持,而当高温时体系出现涡旋,涡旋出现使得体系自旋变得无序化,因而相应的自旋关联是短程的.换句话说,涡旋的出现驱动体系从低温态转变至高温态,这就是KT相变的本质,即拓扑缺陷(这里是涡旋)诱导的相变.所以有时也把KT相变称为拓扑相变.而刻画这种相变的不是通常的Landau序参量,而是拓扑不变量,这里就是前面提到的夹角梯度的环量,也就是转动数.图7.6显示了蒙特卡洛模拟二维XY模型的结果,其显示的是系统平衡时自旋取向的典型构型.可以看到低温下($T = 0.01J$)自旋取向趋于一致,类似于有序的铁磁态,而温度升高后自旋取向逐渐开始无序化,在T_{KT}附近已经出现明显的涡旋型结构($T = 1.5J$),进一步升温则系统完全无序化,进入顺磁态.显而易见,数值模拟的结果与我们的定性分析一致.

Sine-Gordon模型

为了在数学上更严格得讨论涡旋对体系的影响,人们采用Villian近似,Hubbard-Stratonovich变换以及Poission求和公式,得到XY模型的一个近似等效模型或者

[10]这里的结果与早期Anderson建议Thouless研究的$1/r^2$相互作用的一维Ising模型结果是类似的.当然模型本身来自Kondo杂质问题的量子哈密顿量可以对应为这个一维Ising模型.

说对偶模型,即Sine-Gordon模型:[11]

$$Z_{XY} \simeq Z_{SG} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_j d\phi_j e^{-F_{SG}[\phi]} \tag{7.38}$$

$$F_{SG} = \frac{1}{2K} \sum_{<ij>} (\phi_i - \phi_j)^2 - 2y \sum_j \cos(2\pi\phi_j) \tag{7.39}$$

第一项是对偶变换之后的部分,与未变换时的模型形式上很相似,只不过耦合参数K从分子变至分母,换句话说原来体系的高温(低温)态对应当前系统的低温(高温)态,这在物理上是一种强弱对偶[12]的明确体现.第二项实际上是为了便于讨论而手动加上的,其物理意义实际上是使得体系的激发变得有能隙.

在连续极限下,模型具有下列形式

$$Z_{SG} = \int D\phi(\vec{x}) e^{-F_{SG}} \tag{7.40}$$

$$\boxed{F_{SG} = \int d\vec{x} \left[\frac{1}{2K} (\nabla\phi(\vec{x}))^2 - 2ya^{-2} \cos(2\pi\phi(\vec{x})) \right]} \tag{7.41}$$

显然当$y = 0$时,ϕ激发是无能隙的,对应于XY模型中的低温态.现在,考虑强耦合极限,即$y >> 0$的情况,此时注意到 cosin势能的极小值是$\phi = n$,n为整数.那么在某一个最小值附近展开有$\phi = n + \delta\theta$

$$F_{SG} \simeq \int d\vec{x} \left[\frac{1}{2K} (\nabla\delta\phi)^2 + 4\pi^2 y a^{-2} (\delta\phi)^2 \right] = \int d\vec{k} \left[\frac{1}{2K} \vec{k}^2 + 4\pi^2 y a^{-2} \right] |\delta\phi(\vec{k})|^2 \tag{7.42}$$

换句话说,体系的低能激发$\delta\phi$获得了能隙$\Delta \propto \sqrt{y}$.也就是说在参数y很大的情况下,体系是处于有能隙态,此时关联函数是短程的,这应该对应于原始模型中的高温态.

Sine-Gordon模型的重整化群结果

Sine-Gordon模型的微扰重整化群处理是标准的,但涉及比较多的技术细节,(具体细节参考附录中的推导)在此我们直接给出最后得到的重整化群方程.注意到Sine-Gordon模型的参数有K和y,因此RG方程会有两个,即

$$\frac{dK}{d\ln b} = -\frac{\tilde{y}^2}{2} K^3 \tag{7.43}$$

[11] 具体的推导可参考本章附录

[12] 历史上最早的对偶是二维Ising模型的自对偶,也就是模型的配分函数在对偶变换前后具有相同的形式,此时相变点若存在即可明确得到.也就是说在Onsager的精确解之前,人们利用对偶性已经得到模型的相变温度.这里的对偶实际上再明确引入规范场就是所谓的粒子-涡旋对偶,其本质是XY模型中的涡旋对偶于有效超导模型当中的带电粒子,而XY模型中的无能隙自旋波型激发对应超导体的$U(1)$电磁场.在弦理论中,对偶发挥了更为重要的作用,例如S对偶,镜像对称以及最实用的的AdS/CFT对应.特别是最后一个,一般也叫作规范-引力对偶,目前已经广泛的应用于从流体力学到超导,费米液体,拓扑绝缘体的很多物理领域.

$$\frac{d\hat{y}}{d\ln b}=(2-\pi K)\hat{y},\quad \hat{y}=y\frac{(4\pi)^2}{\Lambda^4}. \tag{7.44}$$

这里我们先不用标准的方法处理上述方程,而是通过分析看看能得到什么样的结果.我们先看第一个方程.注意到K和$\hat{y}^2$都是大于等于零的,因此当b逐渐增大时,也就是随着我们不断地做重整化操作,系统的有效耦合K会不断减小,减小的快慢依赖于$\hat{y}^2$与K^3的乘积.也就是说,无论如何系统的参数K总是减小的.

对于第二个方程,可以看到$\hat{y}$随重整化的变化没有第一个方程简单,其取决于$\hat{y}$和$2-\pi K$的乘积.当$\hat{y}$取正值时,如果开始的时候$K<2/\pi$,那么$\hat{y}$随着重整化会增大,同时结合第一个方程可以发现K 会进一步减小,因此这种情况下系统最终会进入$K\to 0,\hat{y}\to\infty$的极限.这个极限下对应的系统就是T足够大的系统($K=J/T$),也就是高温的无序态.

另一方面,初始的K如果大于$2/\pi$,那么$\hat{y}$会逐渐减小.同时随着K的减小,K会接近$2/\pi$.接下来的情况根据初始$\hat{y}$取值的大小可以分为三种.(1) 如果初始的$\hat{y}$很大,那么当$K=2/\pi$时$\hat{y}$还是大于零,进一步重整化会使得$K,\hat{y}$的变化与$K<2\pi$一致,即流向高温无序态.(2)初始的$\hat{y}$很小,因此当K还没有接近$2/\pi$时,$\hat{y}$就已经降至零,此后根据第一个方程,K也不会再变化,这样我们发现系统会进入到$\hat{y}=0,K$为大于$2/\pi$的有限值的情况.这种情况自然对应无能隙的低温态.(3)最后一类情况就是$\hat{y}$的取值恰好在$K=2/\pi$时称为零.注意到$K=2/\pi$所对应的温度恰好就是之前通过计算单个涡旋自由能所得到的KT相变温度T_{KT}, 因此这类情况代表系统会处于相变点.

这样,根据初始$K,\hat{y}$的取值,我们发现系统会有三类可能的状态,即$K<2/\pi$流向的高温无序态,$K>2/\pi$流向的低温准长程序态以及恰好有$K=2/\pi$的相变点.如果用重整化的语言来说,$K^*=\frac{2}{\pi},\hat{y}=0$是一个非零的不动点,其对应于临界点;而当$K>K^*$时,体系流向$\hat{y}=0,K$为有限值的低温态,对应XY模型中具有幂律关联的准长程序;当$K<K^*$时,体系流向强耦合($\hat{y}\to\infty$),对应于高温无序态.

为了更加详细地分析相变点$K=K^*$附近的情况,我们需要对RG方程进行处理.定义新的变量$z=\hat{y}^2$,$x=2-\pi K<<1$,那么重整化群方程可写为

$$\frac{dz}{d\ln b}=2xz,\quad \frac{dx}{d\ln b}\simeq cz,\quad c=\left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \tag{7.45}$$

把两个方程相除可得

$$\frac{dz}{dx}=\frac{2x}{c} \tag{7.46}$$

把这个方程两边积分有

$$x^2=cz+A\Rightarrow(2-\pi K)^2=c\hat{y}^2+A \tag{7.47}$$

根据初值A的正负取值,我们发现系统有以下三类解:

- $A=0$的解$\hat{y}=\pm(2-\pi K)\frac{\pi}{2}$代表交点为$(2/\pi,0)$ 的两条直线.在重整化操作下随着K的不断减小, $K>K^*$的点都流向K^*,而$K<K^*$的点都远离K^*.

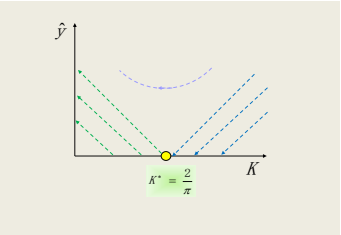


Figure 7.7: Sine-Gordon模型的重整化群流图,这里仅显示$y > 0$的部分.

- $A > 0$的解$\hat{y} = \pm\sqrt{(2-\pi K)^2 - A}\frac{\pi}{2}$代表两条双曲线.为了让根号有意义,$2 - \pi K$ 必须大于等于$\sqrt{A}$或者小于等于 $-\sqrt{A}$,这意味着$K > (2+\sqrt{A})/\pi > K^*$或$K < (2-\sqrt{A})/\pi < K^*$.因此这时候的解是关于$(K = K^*, y = 0$左右对称的双曲线.在重整化操作下$K > K^*$ 的点都流向$K > K^*$ 并且$y = 0$ 的无耦合区,而$K < K^*$ 的点都从$y = 0$流向大y的强耦合区.

- $A < 0$的解$\hat{y} = \pm\sqrt{(2-\pi K)^2 - A}\frac{\pi}{2}$代表两条双曲线,且是关于$(K = K^*, y = 0)$上下对称的双曲线.在重整化变换下体系总是流向强耦合的有能隙区域.

毫无疑问,三类解的性质与我们之前的定性分析是一致的,其定性结果总结在图7.7中.

现在让我们看看KT相变的物理性质.首先,当$K = K^* = 2/\pi, y = 0$时,体系处于临界点,但由于相互作用$y = 0$,因而对应的理论依然是自由理论,所以我们还是可以用低温下计算得到的自旋关联函数,只不过是把结果中的K换成K^*,因此相变点处的自旋关联函数为

$$\boxed{\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle_{T_{KT}} \propto \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{\frac{1}{2\pi K^*}}} = \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{\frac{1}{4}}}} \tag{7.48}$$

回忆标准的关联函数定义$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle_{T=T_c} \propto |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{-(d-2+\eta)}$, 通过对比我们得到KT 相变点的反常维度$\eta = 1/4$.这表明二维经典XY模型在相变点具有大的反常维度.物理上一个大的反常维度表明系统临界性质明显偏离Landau平均场以及Gauss涨落修正的理论预言.

利用标度关系$\delta = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta}$可得$\delta = 15$,即我们得到与二维Ising模型一样大的临界指数.

此外,我们考虑在KT相变点附近的无序区,此时$x^2 - cz = A < 0$.把$cz = x^2 - A$代入$\frac{dx}{d\ln b} = cz$可得

$$\frac{dx}{x^2 - A} = d\ln b \tag{7.49}$$

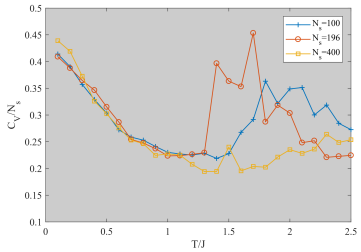


Figure 7.8: 蒙特卡洛模拟计算得到的XY模型热容,注意低温下的$1/T$行为和$T_{KT}/J = \frac{\pi}{2}$附近随系统尺寸增大逐渐消失的奇异性.

然后两边积分可得

$$\frac{1}{\sqrt{-A}}\arctan\frac{x}{\sqrt{-A}}|_{x(b=1)}^{\infty} = \ln b|_1^{\xi} \Rightarrow \ln\xi = \frac{1}{\sqrt{-A}}\left(\frac{\pi}{2} - \arctan\frac{x(b=1)}{\sqrt{-A}}\right) \simeq \frac{\pi}{2\sqrt{-A}} \tag{7.50}$$

注意到常数A有方程的初始条件,也就是$b = 1$所对应的裸的系统参数$x(b = 1), y(b = 1)$ 决定.由方程$x^2 - cz = A$可知 $A = (2 - \pi K(b = 1))^2 - y^2(b = 1) = \pi^2(K^* - K(b = 1))^2 - y^2(b = 1)$.

这样,我们得到关联长度为

$$\xi \propto e^{\frac{1}{\sqrt{-A}}} \propto e^{\frac{1}{\sqrt{K^*-K}}} \propto e^{\frac{1}{\sqrt{T-T_{KT}}}} \tag{7.51}$$

可以看到,在KT相变点,关联长度的发散不是幂律的而是指数型的,这与一般的连续相变明显不同.同时,系统的自由能密度可以估计为是$f \propto \xi^{-2} \propto e^{-\frac{1}{\sqrt{T-T_{KT}}}}$,换句话说,体系的热力学并没有强烈的奇异性.事实上,既然$K > K^*$都流向$y = 0$,那么说明在低温相(包括相变点)我们可以用自由理论(公式7.16)来计算系统的热力学性质,此时自由能密度$f \sim \int_0^{\Lambda} d^2k \ln(Kk^2) \sim \Lambda^2(\ln(K\Lambda^2) - 1) \sim \ln T$. 因此系统的热容是$C_V \sim 1/T$,即反比于温度.当$T \to T_{KT}$时则有$C_V \sim \frac{1}{T_{KT}}(1 - \frac{T-T_{KT}}{T_{KT}})$,这说明XY模型所对应的KT相变的热容不会显示热力学奇异性.

图7.8显示了蒙特卡洛模拟的系统热容,可以看到小系统的热容在T_{KT}附近有类似相变的尖峰行为,系统增大后奇异性消失.在低温下系统热容具有近似的$1/T$ 行为,这与理论分析一致.

- KT相变不显示热力学奇异性,这与通常的一级和二级(连续)相变明显不同.
- XY模型的低温相可以看作是一类临界态,具有幂律衰减的关联函数且每一个参数($K > 2/\pi, y = 0$)都是RG方程的不动点.
- 一维玻色化也涉及Sine-Gordon模型,其Luttinger液体态实则对应对XY模型的低温态,因而也具有幂律型关联函数.

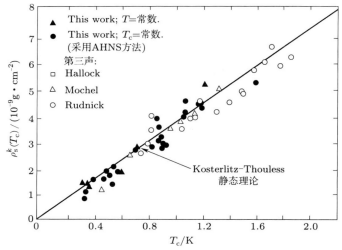


Figure 7.9: KT理论与实验的比较,可以看到两者相符合.(选自《凝聚态物理学》下卷p532.)

KT理论的预言与实验证实:理论的力量

在实验上,与KT相变理论最接近的物理系统是二维的He-4薄膜,相应的有效自由能是Ginzburg-Landau 型具有单个复数分量的理论,即

$$F_{GL} = \int d^2x \left[\frac{\hbar^2}{2mT} |\nabla\psi|^2 + \frac{r}{T}|\psi|^2 + \frac{u}{2T}|\psi|^4 \right] \tag{7.52}$$

在低温时,序参量近似为$\psi = \psi_0 e^{i\theta(x)}$($\psi_0$为常数),那么有

$$F_{GL} \simeq \int d^2x \left[\frac{\hbar^2\psi_0^2}{2mT} (\nabla\theta)^2 + ... \right] \tag{7.53}$$

对比XY模型(公式7.16),可知系数$K = \frac{\hbar^2\psi_0^2}{mT}$.换句话说,超流的相位部分与XY 模型是一致的.

由XY模型,我们知道当$T = T_{KT}$时,$K = K^* = 2/\pi$,因此$\frac{\hbar^2\psi_0^2}{mT_{KT}} = \frac{2}{\pi}$,这表明存在以下重要的比例关系

$$\boxed{\hbar^2\psi_0^2(T_{KT}) \propto T_{KT}} \tag{7.54}$$

注意到ψ_0^2实际上就是所谓的超流密度,这样上式表明体系不同临界温度下的超流密度正比于对应的KT相变温度.这个线性关系的预言已被70年代末的实验所证实.(图7.9)并且该关系的实验证实也是KT获得诺贝尔奖的重要因素.

- 二维超冷原子气体和Josephson结阵列也是实验研究KT相变的重要体系.

本章小结和进一步阅读

本章小结 KT相变是研究凝聚态物质中拓扑物态的开端;Sine-Gordon模型是重要的理论模型.

本章关键词 KT相变;XY模型;高温展开;Sine-Gordon模型

进一步阅读 敖平撰写的《纯粹的探索:索利斯是践行科学精神的榜样》;H.Nishimori和G.Ortiz的《Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena》第七章

附录

超导体中的涡旋

我们已经看到XY模型中的单个涡旋其能量随系统尺度对数增加,当系统趋于热力学极限时,单涡旋能量发散,这显然是非物理的.物理上这说明单涡旋的不稳定性.但是在超导体当中,单涡旋是可以稳定存在的,下面我们简要介绍相关的内容.首先超导的唯像热力学可以由Ginzburg-Landau自由能描述

$$F_{GL}=\int d^2x\left[|(\nabla-iq\vec{A})\Phi|^2+r|\Phi|^2+\frac{u}{2}(|\Phi|^2)^2+\frac{(\nabla\times\vec{A})^2}{2}\right] \tag{7.55}$$

在均匀超导态,序参量取非零的常数值Φ_0,但在有涡旋存在时,我们有

$$\lim_{|\vec{r}|\to\infty}\Phi(\vec{r})=\Phi_0 e^{in\theta(\vec{r})} \tag{7.56}$$

这里$\theta(\vec{r})=\arctan\frac{y}{x}$表示中心在坐标原点的涡旋位形.显然,但我们计算涡旋能量时自然会发现能量的对数发散,因此为了让涡旋能量不发散,我们要求矢量势抵消涡旋场的发散行为,即

$$\boxed{\lim_{|\vec{r}|\to\infty}(\nabla-iq\vec{A})\Phi=0\Rightarrow\lim_{|\vec{r}|\to\infty}\vec{A}(\vec{r})=\frac{n}{q}\nabla\theta(\vec{r})} \tag{7.57}$$

这样,如果我们在远离涡旋的区域沿着一条闭合回路做矢量势的环路积分,可以发现

$$\oint d\vec{l}\cdot\vec{A}=\frac{n}{q}\oint d\vec{l}\cdot\nabla\theta=\frac{n}{q}\int_0^{2\pi}rd\varphi\frac{1}{r}=\frac{2\pi n}{q}=\frac{2\pi\hbar n}{2e}=n\frac{h}{2e} \tag{7.58}$$

这说明在超导体的一个涡旋附近的磁通是量子化的,并且量子化为$h/(2e)$的整数倍,$h/(2e)$称为一个超导量子磁通.简言之,一个超导涡旋束缚半个基本量子磁通.同时我们可以计算系统此时的能量(序参量相关的能量设为零)

$$E=\int d^2x\left(\frac{n}{q}\right)^2\frac{(\nabla\times\nabla\theta)^2}{2}=\int d^2x\left(\frac{n}{q}\right)^2\frac{(2\pi\delta(\vec{r}))^2}{2} \tag{7.59}$$

为了进一步处理我们考虑$\delta(\vec{r})=\frac{\pi/a}{r^2+a^2}$,这里$a$相当于是涡旋中心的特征尺度,在这个尺度以上,我们可以用渐进的涡旋解,而在这个尺度以下我们不知道具体信息,但可以假定为无害的零贡献.那么有

$$E=\left(\frac{n}{q}\right)^2 2\pi^2\int d^2x\frac{(\pi/a)^2}{(r^2+a^2)^2}=\left(\frac{n}{q}\right)^2\frac{2\pi^5}{a^4} \tag{7.60}$$

注意到此时涡旋能量不再依赖于系统的尺寸,因此对数发散被消除,低温下涡旋在电磁矢量场的帮助下可以稳定存在,这就是理解第二类超导体涡旋态的基础.

XY模型与Sine-Gordon模型的对偶

在这一小节,我们将详细推导XY模型与Sine-Gordon模型的对偶变换.首先我们注意到XY 模型中真正难以处理的是相位变量θ_i取值在$[0,2\pi]$而非Gauss 变量的$(-\infty,\infty)$,但是注意到cos函数实际上可以在每一个极值位置展开,那么有:

$$\boxed{e^{\cos x} \simeq \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\left[1-\frac{1}{2}(x-2\pi n)^2\right]}} \tag{7.61}$$

这里n取值为所有整数,这就是著名的Villain近似.对于XY模型,我们重新如下

$$\mathcal{Z}_{XY} = \int_0^{2\pi} \prod_j d\theta_j e^{K\sum_{j,\hat{\mu}} \cos(\theta_j - \theta_{j+\hat{\mu}})} \tag{7.62}$$

利用Villain近似,相当于我们对每一对角度变量之差$\theta_j - \theta_{j+\hat{\mu}}$的cos函数在极值点$2\pi m_{j,\hat{\mu}}$ 附近展开至一阶项:

$$e^{K\cos(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}})} \simeq \sum_{m_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} e^{K-\frac{K}{2}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}}-2\pi m_{j,\hat{\mu}})^2} = e^K \sum_{m_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{K}{2}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}}-2\pi m_{j,\hat{\mu}})^2} \tag{7.63}$$

这样我们得到XY模型在Villain近似下的配分函数是(已忽略常数项)

$$\mathcal{Z}_{XY} \simeq \mathcal{Z}_V = \int_0^{2\pi} \prod_j d\theta_j \prod_{j,\hat{\mu}} \sum_{m_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{K}{2}\sum_{j,\hat{\mu}}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}}-2\pi m_{j,\hat{\mu}})^2} \tag{7.64}$$

为了进一步处理,引入Hubbard-Stratonovich变换把关于相位差的二次方化成一次方

$$\mathcal{Z}_V = \int_0^{2\pi} \prod_j d\theta_j \int_{-\infty}^{\infty} \prod_j dx_{j,\hat{\mu}} \prod_{j,\hat{\mu}} \sum_{m_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}} x_{j,\hat{\mu}}^2 - i\sum_{j,\hat{\mu}} x_{j,\hat{\mu}}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}}-2\pi m_{j,\hat{\mu}})} \tag{7.65}$$

如果我们积掉$x_{j,\hat{\mu}}$(即令$x_{j,\hat{\mu}} \to x_{j,\hat{\mu}} + iK(\theta_j - \theta_{j+\hat{\mu}} - 2\pi m_{j,\hat{\mu}})$可以消掉一次项,只剩$x^2$项,然后Gauss积分)就可以证明变换前后完全相等.

接下来我们需要利用Poisson求和公式:

$$\boxed{\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi m x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n)} \tag{7.66}$$

则有

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_V &= \int_0^{2\pi} \prod_j d\theta_j \int_{-\infty}^{\infty} \prod_j dx_{j,\hat{\mu}} e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}} x_{j,\hat{\mu}}^2 - i\sum_{j,\hat{\mu}} x_{j,\hat{\mu}}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}})} \prod_{j,\hat{\mu}} \sum_{m_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} e^{+i2\pi x_{j,\hat{\mu}} m_{j,\hat{\mu}}} \\
&= \int_0^{2\pi} \prod_j d\theta_j \int_{-\infty}^{\infty} \prod_j dx_{j,\hat{\mu}} e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}} x_{j,\hat{\mu}}^2 - i\sum_{j,\hat{\mu}} x_{j,\hat{\mu}}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}})} \prod_{j,\hat{\mu}} \sum_{n_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} \delta(x_{j,\hat{\mu}} - n_{j,\hat{\mu}}) \\
&= \int_0^{2\pi} \prod_j d\theta_j \prod_{j,\hat{\mu}} \sum_{n_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}} n_{j,\hat{\mu}}^2 - i\sum_{j,\hat{\mu}} n_{j,\hat{\mu}}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}})}
\end{aligned} \tag{7.67}$$

注意这里$n_{j,\hat{\mu}}$取整数值.移动求和中的变量,我们发现

$$\sum_{j,\hat{\mu}} n_{j,\hat{\mu}}(\theta_j-\theta_{j+\hat{\mu}})=\sum_{j,\hat{\mu}}(n_{j,\hat{\mu}}\theta_j-n_{j-\hat{\mu},\hat{\mu}}\theta_{j+\hat{\mu}-\hat{\mu}})=\sum_{j,\hat{\mu}}(n_{j,\hat{\mu}}-n_{j-\hat{\mu},\hat{\mu}})\theta_j \quad (7.68)$$

这样配分函数是

$$\mathcal{Z}_V=\int_0^{2\pi}\prod_j d\theta_j\prod_{j,\hat{\mu}}\sum_{n_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}} n_{j,\hat{\mu}}^2-i\sum_{j,\hat{\mu}}\theta_j(n_{j,\hat{\mu}}-n_{j-\hat{\mu},\hat{\mu}})} \quad (7.69)$$

这样我们可以积掉相位θ_j,得到关于$n_{j,\hat{\mu}}$的一个限制条件

$$\int_0^{2\pi} d\theta_j e^{-i\theta_j\sum_{\hat{\mu}}(n_{j,\hat{\mu}}-n_{j-\hat{\mu},\hat{\mu}})}=\delta_{0,\sum_{\hat{\mu}}(n_{j,\hat{\mu}}-n_{j-\hat{\mu},\hat{\mu}})} \quad (7.70)$$

也就是

$$\sum_{\hat{\mu}}(n_{j,\hat{\mu}}-n_{j-\hat{\mu},\hat{\mu}})=0 \quad (7.71)$$

对于正方晶格有

$$n_{j,\hat{x}}-n_{j-\hat{x},\hat{x}}+n_{j,\hat{y}}-n_{j-\hat{y},\hat{y}}=n_{j,\hat{x}}-n_{j,-\hat{x}}+n_{j,\hat{y}}-n_{j,-\hat{y}}=0 \quad (7.72)$$

如果我们把n看成某种通量,那么上述约束条件相当于是流守恒条件,即流入j格点和流出j格点的流量是相同的.我们把$\sum_{\hat{\mu}}(n_{j,\hat{\mu}}-n_{j-\hat{\mu},\hat{\mu}})$简记为$\nabla\cdot\vec{n}$,其中$\vec{n}(j)=(n_x(j),n_y(j))=(n_{j,\hat{x}},n_{j,\hat{y}})$. 这样配分函数是

$$\mathcal{Z}_V=\prod_{j,\hat{\mu}}\sum_{n_{j,\hat{\mu}}=-\infty}^{\infty}\delta_{\nabla\cdot\vec{n}=0}e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}} n_{j,\hat{\mu}}^2} \quad (7.73)$$

这个配分函数也称为XY模型的流表示.

我们注意到流表示中的约束条件相当于矢量场的梯度为零,回忆矢量分析,我们知道一个非奇异的矢量场的旋度是无散的,即有$\nabla\cdot(\nabla\times\vec{A})=\nabla\cdot\vec{B}=0$.那么通过如下定义的整数取值的$m_j$可以满足约束条件

$$n_{i,\hat{x}}=m_{i+\hat{x}+\hat{y}}-m_{i+\hat{x}};\ \ n_{i,\hat{y}}=m_{i+\hat{y}}-m_{i+\hat{x}+\hat{y}};\ \ n_{i-\hat{x},\hat{x}}=m_{i+\hat{y}}-m_i;\ \ n_{i-\hat{y},\hat{y}}=m_i-m_{i+\hat{x}} \quad (7.74)$$

这样我们发现配分函数具有如下的简单形式

$$\mathcal{Z}_V=\prod_j\sum_{m_j=-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}}(m_{j+\hat{\mu}}-m_j)^2} \quad (7.75)$$

再利用一次Poisson求和公式,我们可以把整数值的m变为连续取值的ϕ

$$\mathcal{Z}_V=\int_{-\infty}^{\infty}d\phi_j\prod_j\sum_{n_j=-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}}(\phi_{j+\hat{\mu}}-\phi_j)^2}e^{-i\sum_j 2\pi\phi_j n_j} \quad (7.76)$$

为了进一步的解析处理,我们引入化学势项

$$\ln(y)\sum_j n_j^2 \tag{7.77}$$

那么有

$$\begin{aligned}\sum_{n_j=-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi\phi_j n_j} e^{\ln(y)n_j^2} &= \sum_{n_j=-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi\phi_j n_j} y^{n_j^2} = 1 + y(e^{-i2\pi\phi_j} + e^{+i2\pi\phi_j}) + y^4(e^{-i4\pi\phi_j} + e^{+i4\pi\phi_j n_j}) + ... \\ &= 1 + 2y\cos(2\pi\phi_j) + 2y^4\cos(4\pi\phi_j) + ... \\ &\simeq e^{2y\cos(2\pi\phi_j)} + \mathcal{O}(y^2)\end{aligned}$$

这样我们得到最终的对偶模型是

$$\mathcal{Z}_V = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_j \prod_j \sum_{n_j=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2K}\sum_{j,\hat{\mu}}(\phi_{j+\hat{\mu}}-\phi_j)^2 + 2y\cos(2\pi\phi_j)} \tag{7.78}$$

Sine-Gordon模型重整化方程推导

为了计算正文中给出的RG方程,我们需要从Sine-Gordon模型的配分函数出发,通过Wilson的微扰重整化来得到想要的结果.首先,我们把场ϕ写成低能与高能模式,即$\phi = \phi_< + \phi_>$,(高能模式的动量绝对值范围与ϕ^4模型一致,即$[\Lambda/b, \Lambda]$)这样有效自由能可以写成

$$F_{SG} = \int d\vec{x}\left[\frac{1}{2K}(\nabla\phi_<)^2 + \frac{1}{2K}(\nabla\phi_>)^2 - 2y(\cos 2\pi\phi_< \cos 2\pi\phi_> - \sin 2\pi\phi_< \sin 2\pi\phi_>)\right] \tag{7.79}$$

仿照ϕ^4模型的处理,我们需要积分掉高能模式而得到仅包含低能模式的有效自由能.这样,我们可以把配分函数写成

$$\mathcal{Z} = \int D\phi_< e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_<)^2} \int D\phi_> e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_>)^2} e^{\int d\vec{x} 2y(\cos 2\pi\phi_< \cos 2\pi\phi_> - \sin 2\pi\phi_< \sin 2\pi\phi_>)}$$

对y项展开到一阶可得

$$e^{\int d\vec{x} 2y(\cos 2\pi\phi_< \cos 2\pi\phi_> - \sin 2\pi\phi_< \sin 2\pi\phi_>)} \simeq 1 + \int d\vec{x} 2y(\cos 2\pi\phi_< \cos 2\pi\phi_> - \sin 2\pi\phi_< \sin 2\pi\phi_>).$$

定义高能模式的平均$\langle ... \rangle = \frac{\int D\phi_> ... e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_>)^2}}{\int D\phi_> e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_>)^2}}$,则有

$$\mathcal{Z} \simeq \int D\phi_< e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_<)^2} \int D\phi_> e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_>)^2} \left(1 + \int d\vec{x} 2y(\cos 2\pi\phi_< \langle\cos 2\pi\phi_>\rangle - \sin 2\pi\phi_< \langle\sin 2\pi\phi_>\rangle)\right).$$

可以看到只要计算$\langle\cos 2\pi\phi_>\rangle$就能得到对$y$的一阶修正.由$\langle\phi(k)\phi(-k)\rangle = \frac{K}{k^2}$可知

$$\langle\phi(x)\phi(x)\rangle = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{K}{k^2} = \int_{\Lambda}^{\Lambda/b} \frac{dk}{2\pi}\frac{K}{k} = \frac{K}{2\pi}\ln b. \tag{7.80}$$

则

$$\langle \cos 2\pi\phi_> \rangle = \frac{1}{2}(\langle e^{i2\pi\phi_>}\rangle + \langle e^{-i2\pi\phi_>}\rangle) = e^{-\frac{1}{2}(2\pi)^2\langle\phi_>^2\rangle} = b^{-\pi K} \tag{7.81}$$

而sin项$\langle \sin 2\pi\phi_> \rangle$包含$\phi$的奇数次项,平均值为零.这样我们重新指数化可得

$$\mathcal{Z} \simeq \int D\phi_< e^{-\int d\vec{x}(\frac{1}{2K}(\nabla\phi_<)^2 - 2yb^{-\pi K}\cos 2\pi\phi_<)} \int D\phi_> e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_>)^2}$$

最后,我们需要对低能模式进行重标,也就是把动量从k换为$k' = bk$或者把坐标x换为$x' = x/b$,这样我们发现场ϕ无需重标,而y由于有对空间的二重积分而获得因子b^2,即有

$$\mathcal{Z} \simeq \int D\phi_< e^{-\int d\vec{x}'(\frac{1}{2K}(\nabla'\phi'_<)^2 - 2yb^{2-\pi K}\cos 2\pi\phi'_<)} \int D\phi_> e^{-\int d\vec{x}\frac{1}{2K}(\nabla\phi_>)^2}$$

显然,我们可以定义新的耦合系数$y(b) = y' = yb^{2-\pi K}$.由$b^{2-\pi K} = e^{(2-\pi K)\ln b} \simeq 1 + (2-\pi K)\ln b$,那么关于$y$的RG方程是

$$\frac{dy(b)}{d\ln b} = (2-\pi K)y. \tag{7.82}$$

当然我们发现上述的一阶展开计算并没有修正K,对K的修正会来自于展开的二阶项.可以看到展开的二阶项为

$$\begin{aligned} & 2y^2 \int d\vec{x}d\vec{z}(\cos 2\pi\phi_< \cos 2\pi\tilde{\phi}_<\langle\cos 2\pi\phi_> \cos 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle - \sin 2\pi\phi_< \cos 2\pi\tilde{\phi}_<\langle\sin 2\pi\phi_> \cos 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle \\ - \quad & \cos 2\pi\phi_< \sin 2\pi\tilde{\phi}_<\langle\cos 2\pi\phi_> \sin 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle + \sin 2\pi\phi_< \sin 2\pi\tilde{\phi}_<\langle\sin 2\pi\phi_> \sin 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle) \end{aligned} \tag{7.83}$$

注意带弯的表示位置是$\vec{z}$.注意到第二与第三项实际上相同,且其包含场的奇数次项,则其平均为零.同时,包含$\phi_<$的sin仅有奇数次项,其必然不会对$(\nabla\phi)^2$有修正,则这一项可以忽略,那么有

$$\begin{aligned} & 2y^2 \int d\vec{x}d\vec{z}(\cos 2\pi\phi_< \cos 2\pi\tilde{\phi}_<\langle\cos 2\pi\phi_> \cos 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle \\ = \quad & y^2 \int d\vec{x}d\vec{z}(\cos 2\pi(\phi_< + \tilde{\phi}_<) + \cos 2\pi(\phi_< - \tilde{\phi}_<))\langle\cos 2\pi\phi_> \cos 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle \\ \simeq \quad & y^2 \int d\vec{x}d\vec{z}(\cos 4\pi\phi_< + 1 - \frac{1}{2}(2\pi)^2(\nabla\phi_<)^2)\langle\cos 2\pi\phi_> \cos 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle \\ = \quad & -2\pi^2y^2 \int d\vec{x}d\vec{z}(\nabla\phi_<)^2\langle\cos 2\pi\phi_> \cos 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle + ... \end{aligned} \tag{7.84}$$

若令$g_>(x) = (2\pi)^2\langle\phi(x)\phi(0)\rangle$,则有

$$\langle \cos 2\pi\phi_> \cos 2\pi\tilde{\phi}_>\rangle = e^{-g_>(0)}\cosh(g_>(x-z)) \tag{7.85}$$

这样我们重新指数化后可以定义新的K,即

$$\frac{1}{K'} = \frac{1}{K} + 4\pi^2y^2 \int d\vec{z}e^{-g_>(0)}\cosh(g_>(x-z)) \tag{7.86}$$

经过稍显繁杂的计算[13]可知

$$\frac{1}{K(b)}=\frac{1}{K'}=\frac{1}{K}+\frac{K}{2}\frac{(4\pi)^4}{\Lambda^4}y^2\ln b. \tag{7.87}$$

由此得

$$\frac{dK^{-1}(b)}{d\ln b}=-\frac{1}{K^2}\frac{dK(b)}{d\ln b}=\frac{K}{2}\frac{(4\pi)^4}{\Lambda^4}y^2 \tag{7.88}$$

定义$\hat{y}=y\frac{(4\pi)^2}{\Lambda^2}$则有

$$\frac{dK(b)}{d\ln b}=-\frac{K^3}{2}\hat{y}^2. \tag{7.89}$$

这样我们就得到了正文中用到的两个RG方程.

XY模型对偶的场论形式

我们知道连续形式的XY模型是

$$\mathcal{Z}=\int D\theta e^{-\frac{K}{2}\int d^dr(\nabla\theta)^2} \tag{7.90}$$

为了明确体现涡旋自由度,我们令$\theta=\theta_c+\theta_v$,前者表示光滑的自由度,也就是XY模型低温下的自旋波激发,而后者θ_v体现涡旋自由度(或者其高维推广),是奇异的位形.

$$\mathcal{Z}=\int D\theta_cD\theta_ve^{-\frac{K}{2}\int d^dx(\partial_\mu\theta_c+\partial_\mu\theta_v)^2} \tag{7.91}$$

引入Hubbard-Stratonovich变换可得

$$\mathcal{Z}=\int D\theta_cD\theta_vDJ_\mu e^{\int d^dx[-\frac{J_\mu^2}{2K}-iJ_\mu(\partial_\mu\theta_c+\partial_\mu\theta_v)]} \tag{7.92}$$

对包含θ_c部分进行分部积分可得

$$\mathcal{Z}=\int D\theta_cD\theta_vDJ_\mu e^{\int d^dx[-\frac{J_\mu^2}{2K}+i\theta_c\partial_\mu J_\mu-iJ_\mu\partial_\mu\theta_v]} \tag{7.93}$$

积掉光滑自由度θ_c可得约束项$\partial_\mu J_\mu=0$,这在物理上表明某种粒子流守恒.在二维空间,我们可以令 $J_\mu=\epsilon_{\mu\nu}\partial_\nu\phi$,而对于三维系统则有$J_\mu=\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda$. 这样我们发现

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{d=2} &= \int D\theta_vD\phi e^{\int d^2x[-\frac{(\epsilon_{\mu\nu}\partial_\nu\phi)^2}{2K}-i\epsilon_{\mu\nu}\partial_\nu\phi\partial_\mu\theta_v]}=\int D\theta_vD\phi e^{\int d^2x[-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}-i(\partial_y\phi\partial_x\theta_v-\partial_x\phi\partial_y\theta_v)]}\\ &= \int Da_\mu D\phi e^{\int d^2x[-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}-i(a_x\partial_y\phi-a_y\partial_x\phi)]}=\int Da_\mu D\phi e^{\int d^2x[-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}-i(\partial_xa_y-\partial_ya_x)\phi]}\\ &= \int Da_\mu D\phi e^{\int d^2x[-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}-ib_z\phi]}\end{aligned} \tag{7.94}$$

这里我们令$\partial_\mu\theta_v\equiv a_\mu$并且对于涡旋位形而言其环路积分不为零,而是量子化为一些列2π的整数倍:

$$\int d\vec{S}\cdot\vec{b}=\oint d\vec{l}\cdot\vec{a}=\oint d\vec{l}\cdot\nabla\theta_v=2\pi n,\quad n=0,\pm1,\pm2... \tag{7.95}$$

[13]可参考文献[2]133 − 134页

现在,我们假定ϕ是缓变量,那么对磁矢量场b_z的空间积分可以看成是在一个磁场不为零的小区域内的积分,积分值显然量子化为$2\pi n$而同时该区域内的ϕ 基本不变,我们发现配分函数近似为

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{d=2} &\simeq \int D\phi \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\int d^2x[-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}-i2\pi n\phi]} = \int D\phi \prod_x e^{-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}}(1+e^{-i2\pi\phi}+e^{+i2\pi\phi}+...) \\ &\simeq \int D\phi \prod_x e^{-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}} e^{2\cos(2\pi\phi)} = \int D\phi e^{\int d^2x[-\frac{(\nabla\phi)^2}{2K}+2\cos(2\pi\phi)]} \end{aligned} \tag{7.96}$$

我们发现这个连续形式与Sine-Gordon模型的连续形式基本相同.

对于三维系统,我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{d=3} &= \int D\theta_v D\tilde{a}_\mu e^{\int d^3x[-\frac{(\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda)^2}{2K}-i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda\partial_\mu\theta_v]} = \int Da_\mu D\tilde{a}_\mu e^{\int d^3x[-\frac{(\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda)^2}{2K}-i\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu\tilde{a}_\lambda]} \\ &= \int Da_\mu D\tilde{a}_\mu e^{\int d^3x[-\frac{(\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda)^2}{2K}+i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\tilde{a}_\mu\partial_\nu a_\lambda]} = \int Da_\mu D\tilde{a}_\mu e^{\int d^3x[-\frac{(\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda)^2}{2K}+i\tilde{a}_\mu J^v_\mu]} \\ &= \int Da_\mu D\tilde{a}_\mu e^{\int d^3x[-\frac{\tilde{f}^2_{\mu\nu}}{4K}+i\tilde{a}_\mu J^v_\mu]} \end{aligned} \tag{7.97}$$

这里我们定义了涡旋流$J^v_\mu = \epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu a_\lambda \equiv \nabla\times\vec{a}$. 可以看到如果涡旋不存在,那么我们仅有Maxwell项,此时大K对应于强涨落的场,而小K对应弱涨落的场,此时矢量场总是无能隙的.当有少量涡旋存在时,如果我们积掉矢量场会发现涡旋之间存在长程力,这种长程力使得涡旋之间配对而降低能量,这就是原始XY模型低温态的图像.(这也对应于绝缘相)而当涡旋足够多时,发生玻色凝聚时,矢量场会由Anderson-Higgs机制获得非零的质量,因而涡旋之间传递的等效相互作用就是短程的,这使得涡旋凝聚图像是自洽的描述.(库伦屏蔽相)既然涡旋可以发生凝聚,那么它们就类似于通常的玻色子,这提示我们考虑如下的配分函数

$$\boxed{\mathcal{Z}_{SC} = \int D\Phi^*_v D\Phi_v D\tilde{a}_\mu e^{\int d^3x[|(\partial_\mu+i\tilde{a}_\mu)\Phi_v|^2+m^2_v|\Phi_v|^2+g_v|\Phi_v|^4-\frac{\tilde{f}^2_{\mu\nu}}{4K}]}} \tag{7.98}$$

这里复场Φ_v代表涡旋,$\tilde{f}_{\mu\nu}$代表自旋波的贡献,整个配分函数实际上描述一个与$U(1)$矢量场耦合的带电超导体.也就是说我们发现$\mathcal{Z}^{d=3}_{XY} \simeq \mathcal{Z}^{d=3}_{SC}$,即三维XY模型对偶于三维标量场量子电动力学模型.

第七章习题

习题1:一维XY模型

Q1:对于一维XY模型$H_{XY}=-J\sum_{j=1}^{N_s}\vec{S}_j\cdot\vec{S}_{j+1}=-J\sum_{j=1}^{N_s}\cos(\theta_j-\theta_{j+1})$,利用高温展开方法估计自旋关联函数$\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle$在$R_i-R_j>>1$时的行为.

Q2:设一维XY模型的有效自由能是$F_{XY}=E_{XY}/T=\frac{K}{2}\int dx(\partial_x\theta)^2$,试估计自旋关联函数$\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle$在$R_i-R_j>>1$时的行为并且与二维$XY$模型的结果进行比较.

习题2:多个涡旋的能量

Q1:证明涡旋解$\theta(\vec{r})=\arctan\frac{y}{x}$满足二维拉普拉斯方程$\nabla^2\theta=0$.

Q2:对于双涡旋解$\theta(r)=q_1\arctan\frac{y-y_1}{x-x_1}+q_2\arctan\frac{y-y_2}{x-x_2}$,利用哈密顿量表达式$H=\frac{J}{2}\int d^2r(\nabla\theta)^2$证明双涡旋情况下的能量是

$$E_V=\pi q_1^2J\ln\frac{R}{a}+\pi q_2^2J\ln\frac{R}{a}+2\pi Jq_1q_2\ln\frac{R}{r}\tag{7.99}$$

这里$r=\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_2-y_1)^2}$涡旋中心间的距离,$R,a$分别是体系的尺度和涡旋中心的尺度.注意到$q_1+q_2=0$时有$E_V=2\pi q_1^2J\ln\frac{r}{a}$,此时能量与体系大小无关,这说明单个涡旋时的$\ln R$发散被消除.类比于静电学,我们称$q_1+q_2=0$为电中性条件,对于更一般的多涡旋情况,电中性条件是$\sum_j q_j=0$,此时体系能量没有$\ln R$发散.

习题3:Bogoliubov不等式与最佳二次型

Q1:证明Bogoliubov不等式$F\leqslant F_0+\langle S-S_0\rangle_0$,这里$F=-T\ln\mathcal{Z}$是系统的自由能,$\mathcal{Z}=\int D\phi e^{-S[\phi]}$是体系配分函数的路径积分表示.$S_0$是任意选定的作用量,$F_0=-T\ln\mathcal{Z}_0$,$\mathcal{Z}_0=\int D\phi e^{-S_0[\phi]}$,$\langle...\rangle_0=\frac{1}{\mathcal{Z}_0}\int D\phi e^{-S_0[\phi]}(...)$.

Q2:考虑d维空间的Sine-Gordon模型,其有作用量$S=\int d^dx\left[\frac{1}{2K}(\nabla\phi(\vec{x}))^2-2ya^{-2}\cos(2\pi\phi(\vec{x}))\right]$.假设我们选择如下的二次型作用量,

$$S_0=\frac{1}{2}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}G_0^{-1}(k)\phi(\vec{k})\phi(-\vec{k}),\quad G_0^{-1}(k)=\frac{1}{K}k^2+\Sigma(k)$$

那么试计算变分自由能$F_{var}=F_0+\langle S-S_0\rangle_0$.

Q3:利用Q2所得的变分自由能对G_0取极值计算$\Sigma(k)$的具体形式.

Bibliography

[1] Jorge V Jose editor, 40 years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless theory.

[2] Igor Herbut, A Modern Approach to Critical Phenomena, 第六章

[3] Alexander Altland and Ben Simons, Condensed Matter Field Theory Modern, 第八章

Chapter 8

量子相变:聆听量子海洋的涨落

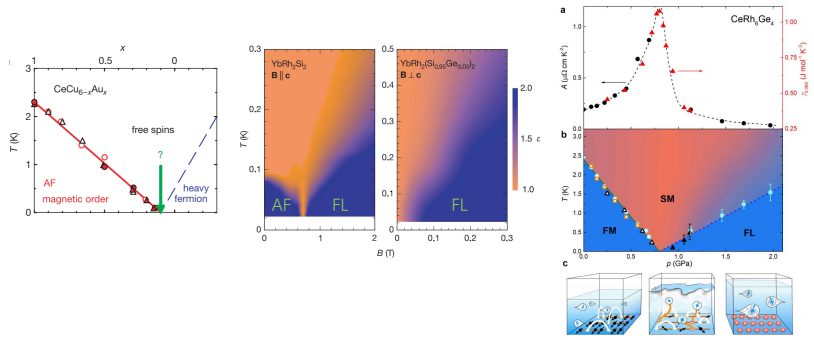


Figure 8.1: 重费米材料$CeCu_{6-x}Au_x$,$YbRh_2Si_2$和$CeRh_6Ge_4$的相图,系统显示量子临界行为. [1, 2, 3]

量子相变:量子力学压倒热运动

在这一讲,我们将主要以一维量子横场Ising模型为例,讨论量子相变的一般性内容.一般认为,以下几类系统的物理性质与量子相变有密切的联系:

- 实验上人们发现准一维材料$LiHoF_4$,$CoNb_2O_6$的极低温性质可以用这里讨论的一维量子横场Ising模型描述.此外目前冷原子以及受限的离子系统已经可以用来模拟十几个或者几十个等效自旋的量子Ising模型.

- 重费米子系统,如$CeCu_{6-x}Au_x$,$CeCoIn_5$,$YbRh_2Si_2$,$\beta-YbAlB_4$ 和$CeRh_6Ge_4$.(如图8.1)

- 铜氧化物,铁基和部分有机超导体.[1]

注意$YbRh_2Si_2$,$CeRh_6Ge_4$在量子临界区域都显示线性电阻行为,即$\rho(T)=\rho_0+AT$.(ρ_0是零温的剩余电阻,通常由杂质贡献)这类线性电阻行为是我们研究量子相变的一个重要原因.若采用Drude模型,即$\sigma(T)=1/(\rho(T)-\rho_0)=\frac{ne^2\tau}{m}$,这里$n$是载流子密度,$m$是电子有效质量,$1/\tau$是散射率,那么可得系数$A$为

$$A=\frac{\rho(T)-\rho_0}{T}=\frac{m}{ne^2}\frac{1}{\tau}\frac{1}{T} \tag{8.1}$$

[1]尽管这些超导体中量子临界点的实验证据并不明显.

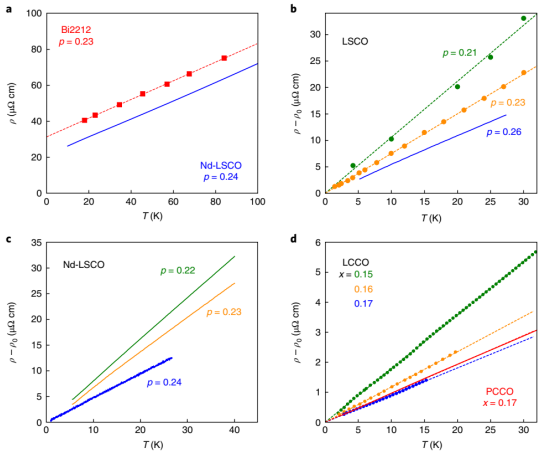


Figure 8.2: 铜氧化物系统的线性电阻行为.[4]

假设散射率满足所谓的Planckian极限:[2]

$$\frac{1}{\tau} \preceq \frac{k_B T}{\hbar} \tag{8.2}$$

那么有

$$A = \frac{m}{n}\frac{k_B}{e^2\hbar} \sim \frac{1}{T_F}. \tag{8.3}$$

实验发现,除上面提到的重费米子材料,多数的铜氧化物体系 [3]不论电子还是空穴掺杂其电阻系数A都满足上述关系.[4](如图 8.2)当然微观上到底是什么样的机制导致普遍观察到的线性电阻行为一直也没有共识,其研究自从80年代中期以来始终是凝聚态物理的重要话题.一类观点认为上述行为来自量子临界性,即重费米子系统中看到的线性电阻出现伴随着系统进入量子临界态.而像铜氧化物体系没有明显的量子临界特征却有线性电阻行为则说明了其他的可能性,例如规范场的涨落,无序等.

现在,让我们回到量子相变的讨论,这里讨论的出发点是什么是量子相变,一个简单的定义如下:

量子相变 非温度因素导致的零温相变称为量子相变.

我们把零温时非温度因素导致的相变称为量子相变,严格来说,量子相变仅存在于零温.但对于接近零温的系统,其仍然能感受到量子临界涨落的影响,因此有限

[2]没有严格的理论证明这个极限的存在.传统的电声相互作用满足$\tau^{-1} = 2\pi\lambda\frac{k_B T}{\hbar}$,对Cu,Ag和Au,电声耦合系数$\lambda \sim 0.1$,Nb和Pb则有$\lambda \succeq 1$.前者虽然满足Planckian极限,但与量子相变和强关联无关,后者说明这类极限并不是普适的.[Poniatowski et al.,Phys.Rev.B **104**,235138 (2021);Hartnoll,Mackenzie,Colloquium: Planckian dissipation in metals,Rev.Mod.Phys.,**94**,041002(2022)]

[3]例如空穴掺杂的$La_{2-x}Sr_xCuO_4$(LSCO),$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$(Bi2212) 和电子掺杂的$Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$(NCCO)以及$Pr_{2-x}Ce_xCuO_{4\pm\delta}$(PCCO).

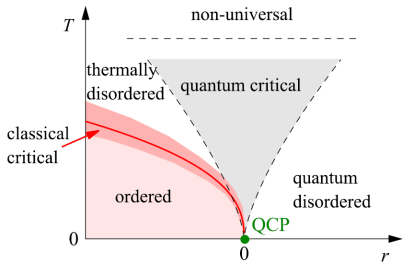


Figure 8.3: 量子临界点(QCP)附近的一般性相图($T-r$相图).$T=0$时通过调节非热参量r实现从有序态($r<0$) 到无序态($r>0$)的量子相变.在有序态,升高温度导致经典临界行为和热无序相的产生.在量子临界点($r=0$)以上存在量子涨落依然强烈的量子临界区.当温度足够高时,系统进入非普适区,其具体物理依赖材料或模型的参数细节,在临界行为的研究中通常忽略这一区域.

温度物理也会受到量子相变点的影响.通常可通过外加磁场,压力,化学掺杂,元素替代等方式把一些材料驱动至量子相变点附近,观察其热力学量或者输运量的临界行为,进而推定量子临界点的位置并构造出温度-调节参数的相图.(图8.3)

从理论模型的角度来看,一般可以构造如下模型来实现量子相变:

$$\hat{H}=\hat{H}_1+g\hat{H}_2 \tag{8.4}$$

这里要求哈密顿量的两个部分$\hat{H}_1,\hat{H}_2$不对易,即

$$[\hat{H}_1,\hat{H}_2]\neq 0 \tag{8.5}$$

这样$\hat{H}_1,\hat{H}_2$不会有共同的本征态.在此情况下$g=0$极限时系统的基态是$\hat{H}_1$的基态,而$g>>1$时的基态是$\hat{H}_2$的基态,显然由于哈密顿量的两个部分不对易,因此$g=0$与$g>>1$的基态并不相同,这说明通过调节参数g从0变化到$>>1$,系统(可能)会发生零温下的量子相变.与之相反,若哈密顿量中的每一部分都互相对易,那么相应的模型不会有量子相变,这样的模型称为阻挫自由的模型(frustration-free model), 即[4]

$$\hat{H}=\sum_j \hat{H}_j,\qquad [\hat{H}_j,\hat{H}_k]=0. \tag{8.6}$$

尽管系统的每一部分互相对易,但这并不说明系统是平凡的,例如Kitaev的toric-code模型就是典型的阻挫自由模型,其具有非平凡的量子基态结构(拓扑序).

余下的内容仅讨论最简单的几个模型系统,即[5]

[4]可参考《Quantum Information Meets Quantum Matter》4.5节

[5]量子场论并不是处理凝聚态问题的万能方法,或者说我们需要跳出场论的框架去思考问题.这是

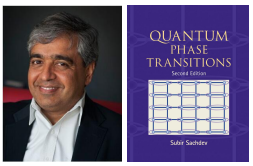


Figure 8.4: Subir Sachdev和他的著名的《量子相变》教科书.Sachdev因为对于理解强关联多体系统中的新物相以及引入原创的跨学科方法(把Ads/CFT用于凝聚态物质研究)的独立贡献而获得2018年的Dirac 奖,另外两位同时的获奖者是华人学者文小刚和越南学者Dam Thanh Son(谭青山).

- 一维量子Ising模型;
- 自由费米子模型;
- Su-Schrieffer-Heeger模型.

复杂系统中的量子相变,例如巡游费米子系统涉及的磁性相变以及无序自旋体系的相变,可以参阅专门的综述文章或Subir Sachdev的《量子相变》教科书.(如图8.4)

经典Ising模型

在讨论量子Ising模型之前,我们先介绍用来研究热力学相变的经典Ising模型,其哈密顿量如下:

$$H = \sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - h\sum_j \sigma_j, \qquad \sigma_j = \pm 1 \tag{8.7}$$

这里σ_j是定义在晶格格点j上的经典变量,取值为± 1.当然,最常用的是定义在d维超立方体格点(格点数$N_s = L^d$)上的仅有最近邻自旋耦合的模型,

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j - h\sum_j \sigma_j \tag{8.8}$$

当$J > 0$时称为铁磁Ising模型.对于铁磁Ising模型,其有相应的精确解,也就是能直接求出系统的配分函数$\mathcal{Z}$或自由能F

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H}, \qquad F = -T\ln\mathcal{Z} \tag{8.9}$$

因为凝聚态中使用场论时必须要在合适的真空态附近构造相应的场论形式,但凝聚态物质的真空远比场论的真空态$|0\rangle$复杂,这样就会出现场论形式构造不合适而使得后面所有精巧的计算都完全偏离实际体系的基本性质.

以及磁化强度M和磁化率χ:

$$M=-\frac{1}{N_s}\frac{\partial F}{\partial h},\quad \chi=\frac{\partial M}{\partial h}=-\frac{1}{N_s}\frac{\partial^2 F}{\partial h^2}. \tag{8.10}$$

1. $d=1$时Ising写出了精确的配分函数,系统在非零温时没有相变.[6]

2. $d=2$时Onsager用复杂的数学技巧求解了该模型,系统显示相变.[7]

3. $d=\infty$时平均场理论给出正确的描述,系统显示相变.

因此,对于$d>1$的铁磁Ising模型,系统显示相变,该相变是从顺磁态到铁磁态的相变.根据先前章节的讨论,我们可用Landau相变理论中的序参量来表示铁磁态是否出现,这里的序参量可以选为磁化强度M,微观上它是每个格点自旋取值的统计平均,即有$M=\frac{1}{N}\sum_j\langle\sigma_j\rangle$.

我们把Ising模型的铁磁–顺磁态相变的临界指数称为Ising模型普适类的临界指数,这是我们理解其他系统相变的重要参照.理论上,我们可以从Ginzburg-Landau自由能出发然后利用Wilson重整化群计算临界指数的近似值,这就是著名的Ginzburg-Landau-Wilson范式(paradigm).

这里我们利用平均场近似处理上述的Ising模型.既然序参量是M,那么我们便把求和中的$\sigma_i\sigma_j$用平均场近似:

$$\sigma_i\sigma_j\simeq\langle\sigma_i\rangle\sigma_j+\sigma_i\langle\sigma_j\rangle-\langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle \tag{8.11}$$

如果假设$\langle\sigma_j\rangle$在空间具有平移不变性,也就是各个格点磁化平均值相同,那么有$M=\frac{1}{N}N\langle\sigma_j\rangle=\langle\sigma\rangle$, 这样有

$$H\simeq -J\sum_{\langle i,j\rangle}(M\sigma_i+M\sigma_j-M^2)-h\sum_j\sigma_j=-J\sum_{\langle i,j\rangle}(2M\sigma_j-M^2)-h\sum_j\sigma_j \tag{8.12}$$

注意到$\sum_{\langle i,j\rangle}=d\sum_j$,($d$是超立方晶格的空间维度)那么哈密顿量为

$$H=-Jd\sum_j(2M\sigma_j-M^2)-h\sum_j\sigma_j=\sum_j(-2JdM-h)\sigma_j+JdN_sM^2 \tag{8.13}$$

这样通过平均场近似把哈密顿量分解为每个格点自旋的独立贡献,因此配分函数容易求得为

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}}e^{-\beta H}=\sum_{\{\sigma\}}e^{-\beta\sum_j(-2JdM-h)\sigma_j}e^{-\beta JdN_sM^2}\\ &= e^{-\beta JdN_sM^2}\prod_{j=1}^{N_s}\sum_{\sigma=\pm1}e^{\beta(2JdM+h)\sigma_j}\\ &= e^{-\beta JdN_sM^2}[2\cosh\beta(2JdM+h)]^{N_s}\end{aligned} \tag{8.14}$$

[6]这一章将利用转移矩阵进行求解.

[7]杨振宁给出了Onsager并未明确计算的磁化强度的临界指数.

这样系统的自由能密度为

$$\frac{F}{N_s} = JdM^2 - T\ln[2\cosh\beta(2JdM+h)] \tag{8.15}$$

而序参量M由自由能密度对M的一阶导数为零得到:

$$\frac{\partial F}{N_s\partial M} = 2JdM - T2\beta Jd\tanh\beta(2JdM+h) = 0 \tag{8.16}$$

即有

$$M = \tanh\beta(2JdM+h). \tag{8.17}$$

当外磁场$h=0$时,令$M\to 0$可展开tanh函数($\tanh x\simeq x$)得到

$$M = \beta 2JdM \Rightarrow 1 = 2Jd/T. \tag{8.18}$$

这样系统的平均场相变温度为$T_c = 2Jd$.在T_c附近,把tanh函数展开至下一阶($\tanh x\simeq x - x^3/3$)可得

$$M = \beta 2JdM - \frac{1}{3}(\beta 2Jd)^3M^3 \Rightarrow 1 = \beta 2Jd - \frac{1}{3}(\beta 2Jd)^3M^2 \Rightarrow 1 = \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 M^2 \tag{8.19}$$

即有

$$M^2 = \left(\frac{T_c}{T}-1\right)3\left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \Rightarrow M\sim\pm\sqrt{\frac{T_c}{T}-1}\sim\sqrt{T_c-T}. \tag{8.20}$$

这满足Landau平均场的一般结果.一般地,通过求解序参量M的完整温度依赖,我们发现因此,我们发现$T>T_c$时方程唯一解为$M=0$,此时系统为顺磁态.当$T<T_c$时存在非零解,这对应铁磁态.

最后,利用自由能密度的表达式,我们可以对M展开来得到Landau自由能的形式.首先把cosh函数展开

$$2\cosh\beta(2JdM+h) = 2\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2M^2 + \frac{1}{4!}\left(\frac{T_c}{T}\right)^4M^4 + \mathcal{O}(M^6)\right] \tag{8.21}$$

然后对对数部分展开($\ln(1+x)\simeq x - x^2/2$)

$$\ln[2\cosh\beta(2JdM+h)] = \ln 2 + \frac{1}{2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2M^2 + \frac{1}{4!}\left(\frac{T_c}{T}\right)^4M^4 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2M^2\right)^4 + \mathcal{O}(M^6) \tag{8.22}$$

这样自由能密度的展开式为

$$\frac{F}{N_s} = \frac{1}{2}T_cM^2 - T\ln 2 - T\frac{1}{2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2M^2 + T\frac{1}{12}\left(\frac{T_c}{T}\right)^4M^4 \tag{8.23}$$

即有标准的Landau自由能形式:

$$\frac{F}{N_s} = f_0 + \frac{r}{2}M^2 + \frac{u}{4}M^4,\quad f_0 = -T\ln 2\simeq -T_c\ln 2,\quad r = T_c - T\left(\frac{T_c}{T}\right)^2\simeq T_c - T,\quad u = \frac{T}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^4\simeq\frac{T_c}{3}. \tag{8.24}$$

一维量子横场Ising模型:看我们的十八般兵器

下面,让我们进入量子Ising模型的讨论.所谓量子Ising模型,就是在经典Ising模型的基础上把经典模型中的变量σ_j换成量子算符,例如自旋1/2对应的Pauli矩阵σ_j^z:

$$\sigma_j \to \hat{\sigma}_j^z \tag{8.25}$$

这样系统的经典哈密顿量也变为量子哈密顿量:

$$H = \sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - h\sum_j \sigma_j \to \hat{H} = \sum_{ij} J_{ij}\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_j^z - h\sum_j \hat{\sigma}_j^z \tag{8.26}$$

显然,由于每个$\hat{\sigma}_j^z$都彼此对易,因而自旋算符$\hat{\sigma}_j^z$并没有动力学,即$\frac{d\hat{\sigma}_j^z(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\sigma}_j^z, \hat{H}] = 0$. 为了使得系统具有非平凡的动力学,我们可以给系统加上额外的项,例如考虑x方向的外磁场,这相当于给系统加上如下的Zeeman耦合部分:

$$-h_x\sum_j \hat{\sigma}_j^x, \tag{8.27}$$

所以系统的完整哈密顿量为

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{ij} J_{ij}\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_j^z - h\sum_j \hat{\sigma}_j^z - h_x\sum_j \hat{\sigma}_j^x.} \tag{8.28}$$

这就是量子Ising模型的常用形式.一个有趣的事实是这类模型已被用来做量子annealing(退火)算法的实现工具.例如加拿大$d\ wave$公司所研制出售的商用量子计算机利用Josephson节阵列把上千个超导量子比特集成在一起进而模拟上述的量子Ising模型.通过把所求的问题转化为上述量子Ising模型在量子annealing下的基态求解(演化)问题,人们就可以得到复杂函数最优化或者求极小值问题的解答.[8]

下面,让我们关注更为简单的问题,即一维量子Ising模型的讨论.之所以讨论一维模型,其原因在于数学上便于处理且量子相变的基本内容通过该模型都可以体现.

一维量子Ising模型

首先,一维量子横场Ising模型(1D quantum Ising model in transverse field)定义如下:(图8.5)

$$\boxed{\hat{H} = -J\sum_j \hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_{j+1}^z - h\sum_j \sigma_j^x} \tag{8.29}$$

[8]目前,$d\ wave$的量子计算机价格极其昂贵(千万美元).此外,这里的量子计算机不是通用的(可以解决很多问题)计算机,仅能够做最优化问题,这是量子计算领域的普遍情况,一个能够拥有数以千计量子比特的通用量子计算机仍未出现.

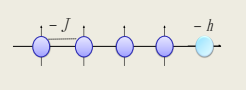


Figure 8.5: 一维量子横场Ising模型,横场h与最近邻交换耦合J之间的竞争决定系统的状态.

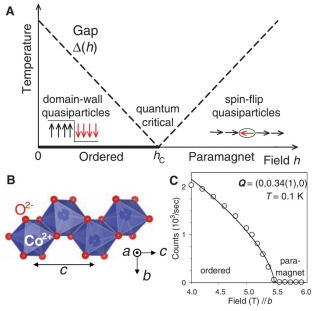


Figure 8.6: (A)一维量子Ising模型的基本相图;(B)准一维锯齿型Ising铁磁链材料$CoNb_2O_6$的结构;(C) 中子散射测得的三维磁性布拉格峰强度随横向磁场的变化.[5]

为简单起见,我们假设参数$J, h > 0$.[9]模型的第一项是仅有z方向的Ising耦合项,相比于具有完全自旋$SU(2)$旋转对称的Heisenberg模型$H = J\sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1}$,这里的Ising 耦合把对称性破缺至$Z_2$.在这里,$Z_2$对称性指的是当我们把$\hat{\sigma}_j^z$替换为$-\hat{\sigma}_j^z$时,哈密顿量中的$J$项依然不变.(可用$\hat{\mathcal{U}} = \prod_{j=1}^{N_s} \hat{\sigma}_j^x$实现该自旋翻转操作)回忆先前的讨论,我们知道一维和二维体系在有限温度不会自发地破坏连续对称性.但是这里实际上是分离的对称性,因而有可能存在热力学意义上的真实相变.

通过下面几节的理论分析可得模型的基本相图,其结果总结在图8.6(A)中.图(B)显示实验上实现一维量子Ising模型的一类实际材料,即准一维锯齿型Ising 铁磁链材料$CoNb_2O_6$的结构.图(C)显示了这类材料在低温下由中子散射测得的磁性布拉格峰强度随磁场的变化情况,这反映了系统从有序态转变为顺磁态.

$h = 0$极限

当横向场$h = 0$时,体系只剩Ising耦合部分,此时体系是严格可解的.每一个本

[9]如果$J < 0$,那么我们可以令$\sigma_j^z \to (-)^j \sigma_j^z$,这样哈密顿量是不变的,这说明$J$的符号并不重要.

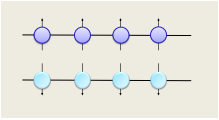


Figure 8.7: $h = 0$极限下的两个简并基态.

征态都可以通过$\hat{\sigma}^z$的本征态得以构造,即

$$|\psi\rangle = |\sigma_1, \sigma_2 ... \sigma_{N_s}\rangle = |\sigma_1\rangle|\sigma_2\rangle ... |\sigma_{N_s}\rangle = \prod_j |\sigma_j\rangle \tag{8.30}$$

而任意一个量子态则是上述态的叠加

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2 ... \sigma_{N_s}} C_{\sigma_1, \sigma_2 ... \sigma_{N_s}} |\sigma_1, \sigma_2 ... \sigma_{N_s}\rangle. \tag{8.31}$$

直观上,我们可以看到系统的基态是两个能量简并的铁磁态:(图8.7)

$$|\Psi_\uparrow\rangle = \prod_j |\uparrow\rangle_j \tag{8.32}$$

$$|\Psi_\downarrow\rangle = \prod_j |\downarrow\rangle_j \tag{8.33}$$

$|\Psi_\uparrow\rangle$代表所有自旋都朝上的态,而$|\Psi_\downarrow\rangle$对应所有自旋都向下的态.对应的基态能由下列本征方程给出

$$\hat{H}_{h=0}|\Psi_{\uparrow/\downarrow}\rangle = -J(N_s - 1)|\Psi_{\uparrow/\downarrow}\rangle = E_{FM}|\Psi_{\uparrow/\downarrow}\rangle. \tag{8.34}$$

上述能量为开边界的结果,对于周期边界系统,上述能量需要加上首尾自旋之间的耦合,这样能量为$E_{FM} = -JN_s$.

得到了基态之后,我们进一步需要寻找系统在基态之上的低能激发,因为这些激发决定了系统在低温或低频下的物理行为.我们发现:

- 在基态以上,体系的低能激发是自旋翻转(spin-flip)(类似于铁磁体中的自旋波)和畴壁(domain-wall).(图8.8)

所谓自旋翻转激发就是我们把某一个自旋反向并同时保持其他自旋取向不变.例如,在自旋全向上的基态上在i 格点的自旋翻转激发可以用波函数表示为

$$|\Psi_\uparrow\rangle_{spin-flip} = |\downarrow\rangle_i \prod_{j \neq i} |\uparrow\rangle_j \tag{8.35}$$

这代表体系其他格点的自旋都向上,只有i格点的自旋向下.这样单个自旋翻转的能量是

$$E_{spin-flip} = -J(N_s - 3) + 2J = E_{FM} + 4J, \tag{8.36}$$

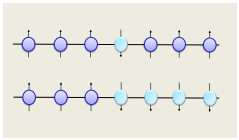


Figure 8.8: $h=0$极限下的低能激发:自旋翻转与畴壁.

这说明在最近邻的耦合下,体系能量升高了$4J$.

对于只有单个畴壁的情况,波函数可以写为

$$|\Psi\rangle_{domain-wall}=\prod_{j<i}|\uparrow\rangle_j\prod_{k\geq i}|\downarrow\rangle_k \tag{8.37}$$

代表在i格点附近处存在一个畴壁.在这里畴壁指的是自旋向上和自旋向下的自旋集体的分界区,其能量是(开边界):

$$E_{spin-flip}=-J(N_s-2)+J=E_{FM}+2J \tag{8.38}$$

- 这样,我们发现畴壁激发的能量其实小于自旋翻转的能量,也就是说体系在J项主导的铁磁态的低能激发主要是畴壁.

我们也可以定义所谓的反畴壁,例如

$$|\Psi\rangle_{anti-domain-wall}=\prod_{j<i}|\downarrow\rangle_j\prod_{k\geq i}|\uparrow\rangle_k \tag{8.39}$$

这对应于自旋在i格点左边全部向下而在i格点右边自旋全部向上.

当一对正反畴壁足够靠近时,系统的状态接近于单个自旋翻转的情况,也就是说,一对正反畴壁可以合成为一个自旋翻转事件,或者也叫做正反畴壁湮灭产生一个自旋翻转.例如第四与第九个格点存在的正反畴壁对可以通过让正畴壁逐渐靠近反畴壁而成为第四个格点的单自旋激发:

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle_{pair} &= |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\\ &\Rightarrow |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\\ &\Rightarrow |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\\ &\Rightarrow |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\\ &\Rightarrow |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle.\end{aligned} \tag{8.40}$$

这同样表明畴壁是系统中能量比自旋翻转更低的基本激发.当我们考虑有限小的h时,我们可以近似得到单个畴壁激发的色散关系.记i格点的畴壁所对应的状态为$|\Psi_i\rangle=|\uparrow\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\downarrow_i\downarrow\ldots\rangle$, 而把每个畴壁相干叠加就得到动量为$k$的畴壁态:

$$|\Psi_k\rangle=\sum_i e^{ikR_i}|\Psi_i\rangle \tag{8.41}$$

现在让我们通过本征方程近似计算这个态的能量,即

$$\hat{H}|\Psi_k\rangle = (\hat{H}_J + \hat{H}_h)|\Psi_k\rangle = E|\Psi_k\rangle \tag{8.42}$$

这里

$$\hat{H}_J|\Psi_k\rangle = \sum_i e^{ikR_i}\hat{H}_J|\Psi_i\rangle = \sum_i e^{ikR_i}(E_{FM}+2J)|\Psi_i\rangle \tag{8.43}$$

而

$$\hat{H}_h|\Psi_k\rangle = \sum_i e^{ikR_i}\hat{H}_h|\Psi_i\rangle \simeq \sum_i e^{ikR_i}(-h)(|\Psi_{i-1}\rangle + |\Psi_{i+1}\rangle) \tag{8.44}$$

这里忽略了更多畴壁的产生事件.这样我们发现,

$$\sum_i e^{ikR_i}(E_{FM}+2J)|\Psi_i\rangle + \sum_i e^{ikR_i}(-h)(|\Psi_{i-1}\rangle + |\Psi_{i+1}\rangle) = E\sum_i e^{ikR_i}|\Psi_i\rangle \tag{8.45}$$

对于第二和第三项移动i可得

$$\sum_i e^{ikR_i}(E_{FM}+2J)|\Psi_i\rangle - h\sum_i (e^{ik(R_i+a)}|\Psi_i\rangle + e^{ik(R_i-a)}|\Psi_i\rangle) = E\sum_i e^{ikR_i}|\Psi_i\rangle \tag{8.46}$$

比较左右两边可得

$$E = E_{FM} + 2J - h(e^{ika}+e^{-ika}) = E_{FM} + 2J - 2h\cos(ka). \tag{8.47}$$

这样小h极限下的畴壁色散为$\varepsilon(k) = E - E_{FM} = 2J(1-h/J\cos(ka))$.如果我们关心低能的畴壁激发,那么可以把色散关系在$k=0$展开,即有

$$\varepsilon(k) = 2J(1-h/J\cos(ka)) \simeq 2J(1-h/J) + h(ka)^2 \equiv \Delta + \frac{k^2}{2m} \tag{8.48}$$

这样畴壁就可以看成一个激发能隙为Δ,有效质量为$m\sim 1/h$的粒子.

实验上,我们一般用非弹性中子散射来探测系统的磁性激发.中子自旋$S=1/2$,因此它使得体系自旋改变为$\Delta S = 1$,即使得某个自旋翻转.对于这里的量子Ising 模型,$\Delta S = 1$的激发原则上既可以是单个自旋翻转激发,也可以是两个畴壁激发的复合体.对于给定动量k,单个自旋激发有明确的色散关系$\omega(k)$,而对于两个畴壁激发,给定总动量k,那么两者的动量分别是$k', k-k'$,即有

$$\omega(k) = \varepsilon(k') + \varepsilon(k-k') \tag{8.49}$$

注意到k'可以自由变化,因此我们会看到此时一个k并不对应一个确定的$\omega(k)$而是对应着许多$\omega(k)$,这就形成了连续谱,在中子散射实验中就会看到一团浆糊型的信号.(单自旋激发则是一条显著的色散曲线)典型的例子如图8.9所示,Ising铁磁体材料$CoNb_2O_6$在有序态其中子散射测得的自旋激发谱显示两个畴壁所导致的连续谱结构,(图B和C)而其顺磁态仅有自旋反向导致的单独的色散关系.(图E)

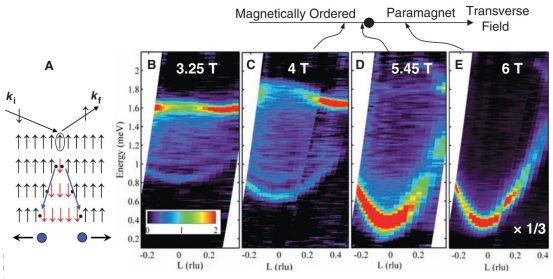


Figure 8.9: (A)中子散射在Ising链上产生一个自旋翻转,然后自旋翻转分裂为两个自由传播的畴壁;(B-E)$CoNb_2O_6$中由中子散射测得的自旋激发谱.注意有序态显示连续谱而顺磁态则是单独的色散.[5]

进一步,如果我们给系统外加一个z方向的纵向磁场项$\hat{H}_z = -h_z \sum_j \sigma_j^z, h_z > 0$,那么系统的总哈密顿量是

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - h\sum_j \sigma_j^x - h_z \sum_j \sigma_j^z. \tag{8.50}$$

在实际系统,例如$CoNb_2O_6$中,不同一维链之间有较弱的铁磁耦合,这类耦合导致低温下出现有效的纵向磁场项.当有纵向磁场项存在时,畴壁之间会产生等效的线性势.(如图8.10(G)所示) 这里的线性势可以理解如下.首先,在有z方向磁场时,假设双畴壁态是$|\Psi\rangle_{pair} = |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$, 那么这个双畴壁态相对于铁磁基态$|\Psi_\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow ...\rangle$的能量差是

$$\Delta E = \langle\Psi|_{pair}\hat{H}|\Psi\rangle_{pair} - \langle\Psi_\uparrow|\hat{H}|\Psi_\uparrow\rangle. \tag{8.51}$$

当$h = 0$时有$\Delta E = 4J + 2Lh_z$,这里L是$|\Psi\rangle_{pair}$中向下自旋的个数,也可以看成畴壁之间的距离.这说明畴壁之间距离越远,那么它们的能量就越高,能量增高正比于距离,这就是一个线性势.当$h \neq 0$时,我们知道每个畴壁的色散近似为$\varepsilon(k) = \Delta + \frac{k^2}{2m}$,这对应如下Schödnger方程:

$$\left(-\frac{1}{2m}\partial_x^2 + \Delta\right)\psi(x) = E\psi(x), \qquad E = \varepsilon(k) \tag{8.52}$$

当有两个畴壁时则有如下两体Schödnger方程

$$\left(-\frac{1}{2m}\partial_{x_1}^2 - \frac{1}{2m}\partial_{x_2}^2 + 2\Delta + V(x_1 - x_2)\right)\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2) \tag{8.53}$$

这里$V(x_1 - x_2) = \lambda|x_1 - x_2|$是线性势,$\lambda = h_z\langle\sigma^z\rangle/(a/2)$($\langle\sigma^z\rangle$ 代表铁磁态时的平均值).这样,描述两个畴壁相对运动的方程是($\psi(x_1, x_2) = e^{iqR}\varphi(x), R = (x_1 + x_2)/2, x = x_1 - x_2$)

$$\left(-\frac{1}{m}\partial_x^2 + \lambda|x|\right)\varphi(x) = (E - 2\Delta - \frac{q^2}{4m})\varphi(x). \tag{8.54}$$

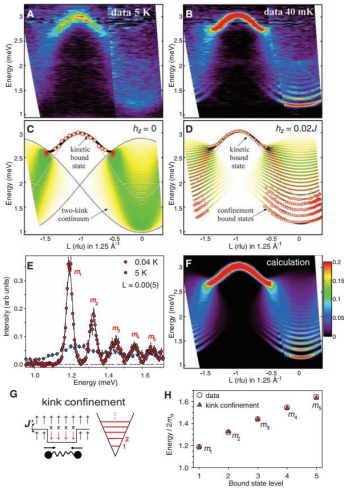


Figure 8.10: $CoNb_2O_6$在外场$h = 0$时的自旋激发.(A)布里渊区中心附近由自由畴壁导致的连续谱($L = 0$也就是$q = 0$).(B)低温下等效磁场h_z出现,这样 连续谱劈裂为双畴壁的束缚态.(C)(D)$h_z = 0$和$h_z = 0.02J$的模型计算.(E)布里渊区中心附近的五个锐利模式.(F)模型计算所得到的动力学关联函数$S_{xx}(k, \omega)$. (G)在有序的铁磁态,畴壁之间分开会产生等效的线性势,这种线性势使得两个畴壁形成束缚态.(H)理论计算与实验测得的束缚态能级的比较.[5]

在量子力学中,这类线性势所对应的一些列束缚态解由Airy函数给出,特别是本征能量为

$$E_j = 2\Delta + \frac{q^2}{4m} + z_j \frac{\lambda^{2/3}}{m^{1/3}} \qquad j = 1, 2, 3, 4... \tag{8.55}$$

这里z_j是Airy函数的负零点($\mathrm{Ai}(-z_j) = 0$),前几个取值为$z_1 = 2.33, z_2 = 4.08, z_3 = 5.52, z_4 = 6.78, z_5 = 7.94$.注意到这些束缚态能级的相对位置(取$q = 0$)与实验测量符合(图8.10(H)).[10]当$q \neq 0$时,束缚态能级会扩展为一些列能带,图8.10(B) 是实验结果而图8.10(F)是基于线性势模型的理论计算结果,两者符合很好.[11]

事实上,如果我们增大横向磁场h使得系统位于铁磁–顺磁相变点附近,那么当$h_z << J$时,Alexander Zamolodchikov基于E_8群的理论分析表明,[12][6]系统存在8个束缚能级.(也称为8个粒子)这些能级之间的相对位置由E_8群的表示给出,例如第一和第二个束缚态能量比值是所谓的黄金比例,$m_2/m_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1.618$.可以看到图8.11(D)说明当磁场$h$接近$5T$时束缚态能级的比值接近$E_8$群理论的预言.[13]

[10] Δ对应图中的m_0,E_j对应图中的m_j

[11] 当动量q 远离$q = 0$时,我们需要考虑完整的晶格模型,相关的细节可以参考文献[5]的补充资料.

[12] E_8群是最大的异常对称的李群,其在构造一类超弦理论即所谓杂化弦(heterotic string)理论中发挥基础性作用.($E_8 \otimes E_8$)

[13] 文献[5]尽管是一篇实验论文,但理论解释简单清楚,建议多加阅读以学习其写作和语言的表达方式. 文献[5]中结果的定性讨论和背景见文献[7].

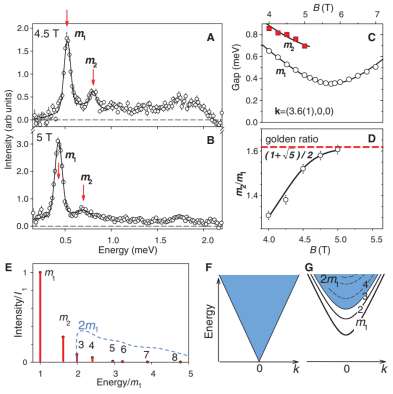


Figure 8.11: (A)(B)外场h为4.5T和5T时观测到的峰强度,这对应两个束缚态能级.(C)表明束缚态能级在5 − 6T的外场下有最小值.(D)说明最低两个束缚态能级比值接近黄金比例.(E)给出了理论上计算得到的8个束缚态能级的相对强度.(F)(G)分别说明$h_z = 0$时的连续激发谱和有限h_z时的束缚态能级. [5]

- 当我们考虑反周期边界条件,也就是链上的最后一个自旋与链头上的自旋之间耦合为+J时,此时基态具有单个畴壁结构,换句话说,单畴壁构型是反周期边界时的基态.

$J = 0$极限

此时,体系只存在横场部分,在$h > 0$的情况下,系统的基态是唯一的,即自旋全部朝向x 方向的态,

$$|\Psi_x\rangle = \prod_j |\rightarrow\rangle_j = \prod_j \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_j) \tag{8.56}$$

体系的基态能由本征方程给出

$$\hat{H}_{J=0}|\Psi_x\rangle = -hN_s|\Psi_x\rangle \tag{8.57}$$

系统的激发由每个格点上的$-x$方向的翻转构成,即$|\leftarrow\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j - |\downarrow\rangle_j)$. 因此,$i$ 格点处的自旋反向激发为

$$|\Psi_i\rangle = |\leftarrow\rangle_i \prod_{j\neq i} |\rightarrow\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_i - |\downarrow\rangle_i) \prod_{j\neq i} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_j) \tag{8.58}$$

- 显然我们可以期待,在$J/h >> 1$的区域,系统处于(z方向)铁磁态,而在相反的区域,即$J/h << 1$ 时体系处于无序态,也就是z方向磁化为零的态$\langle\sigma_j^z\rangle = 0$.这样,当我们调节$J/h$,体系可能存在从铁磁态到顺磁态的相变.

- 显然,在零温时体系不存在热涨落,这里的相变完全是由量子力学效应驱动的.我们把这种量子力学效应导致的相变称为量子相变(quantum phase

transition). 在当前的模型中,量子力学效应指的是σ^x 与σ^z之间的不对易,而在经典磁性问题中,显然自旋的各个方向是彼此对易的.

- 相反,我们熟悉的热力学相变由热涨落驱动,属于经典相变.

反铁磁Ising模型的畴壁激发与分数化

虽然在数学结构上铁磁耦合$J>0$与反铁磁$J<0$是一样的,但是其详细物理有所区别.首先,反铁磁情况下系统在$h=0$ 的基态是二重简并的标准Néel反铁磁态:

$$|\Psi_{AB}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow ...\rangle \tag{8.59}$$

$$|\Psi_{BA}\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow ...\rangle. \tag{8.60}$$

其能量与铁磁时时一致的.进一步,基态上的低能激发包括畴壁激发与单自旋翻转激发.单自旋激发与铁磁情况类似，就是直接在反铁磁基态背景上在某一个格点改变自旋取向,例如$|\Psi_{AB}\rangle$态在第四个格点有一个单自旋翻转激发的状态可写为

$$|\Psi_{AB}\rangle_{spin-flip} = |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow ...\rangle. \tag{8.61}$$

该激发相对于基态的能量变化是$4|J|$,与铁磁情况也是一致.至于基态上的畴壁激发则可由$|\Psi_{AB}\rangle, |\Psi_{BA}\rangle$互相错开一个格点来得到,例如在第四个格点附近的畴壁激发是

$$|\Psi\rangle_{domain-wall} = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow ...\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow ...\rangle, \tag{8.62}$$

换句话说,这个畴壁激发相当于前四个格点处于$|\Psi_{AB}\rangle$型的反铁磁态,而从第五个格点开始处于$|\Psi_{BA}\rangle$型的反铁磁态,两者之间错开了一个自旋或者是一个π相位.这个畴壁相对于基态的激发能是$2|J|$.

另一方面,一个单自旋激发可看成两个畴壁激发的复合体.例如考虑如下在第六个格点的单自旋翻转态:

$$|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \tag{8.63}$$

这一个单自旋翻转态可看成具有两个畴壁激发的态:

$$|\overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{S=1}\rangle \to |\overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{S=1/2}\overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{S=1/2}\rangle \to |\overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow}^{S=1/2}\overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{S=1/2}\rangle \tag{8.64}$$

这个过程可以看成单自旋激发分裂为两个畴壁,然后两个畴壁互相远离.注意到单自旋翻转激发相对基态而言的自旋变化为$\Delta S = \pm 1$,那么单个畴壁激发的自旋改变为$\Delta S = \pm\frac{1}{2}$因此,相对自旋改变为整数的单自旋翻转,畴壁激发可以看作是分数化(fractionalized)的激发,也就是具有系统简单激发量子数的分数量子数的激发.

- 这种分数化激发在一维反铁磁系统中是普遍存在的,物理上是自旋取向分界面处的畴壁,当然,我们也可以把它们看作是一种粒子,通常称为孤子(soliton).当其代表自旋$\Delta S = 1/2$的激发时也称为自旋子(spinon).这类孤子态在一维反铁磁Heisenberg模型的Bethe ansatz解中也得到明确的体现.

- $\Delta S = 1$的激发是熟悉的磁振子(magnon),当我们激发一个能量为$\varepsilon(q)$,动量为q 的magnon时,若magnon分数化为两个spinon,那么就有$\varepsilon(q) = \varepsilon_1(q_q) + \varepsilon_2(q_2), q = q_1 + q_2$. 在实验上,中子散射可以激发$\Delta S = 1$的东西,因此其散射谱中会出现由两个spinon叠加而成的连续谱.当然,如果没有分数化,那么散射谱就是一条明锐的谱线,代表magnon的色散关系.

- 高维系统例如二维体系,畴壁激发涉及大量自旋,其能量正比于畴壁区域的面积,能量变化一般大于单自旋翻转且自旋变化也远大于$\Delta S = 1$,这说明高维系统的畴壁既不是系统的低能激发也并非分数化激发.因此,二维反铁磁系统的分数化激发若存在,其机制与一维时并不相同.

微扰理论计算

这一小节的微扰计算参考PI的网络课程视频.[3]

当$J/h >> 1$时,我们考虑横场部分对体系基态波函数的修正,以自旋都向上排列的基态$|\Psi_\uparrow\rangle$ 为例,准确至波函数的一级修正项,我们发现

$$|\Psi'_\uparrow\rangle = |\Psi_\uparrow\rangle + \sum_j \frac{\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}(-h\sigma^x_j)|\Psi_\uparrow\rangle}{E_{FM} - E_{spin-flip}}|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} = |\Psi_\uparrow\rangle + \sum_j \frac{h}{4J}|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} \tag{8.65}$$

其中$|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip}$代表在自旋全向上的背景中在$j$格点有一个自旋向下的态,其能量比基态高$4J$,因此上式中分母$E_{Fm} - E_{spin-flip} = -4J$.至于分子则有

$$\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}(-h\sigma^x_j)|\Psi_\uparrow\rangle = -h\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}\overbrace{\sigma^x_j|\Psi_\uparrow\rangle}^{|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip}} = -h. \tag{8.66}$$

然后,在修正后基态下的m格点自旋z方向的基态平均值是

$$\langle\hat{\sigma}^z_m\rangle = \frac{\langle\Psi'_\uparrow|\hat{\sigma}^z_m|\Psi'_\uparrow\rangle}{\langle\Psi'_\uparrow|\Psi'_\uparrow\rangle} \tag{8.67}$$

其中分母计算为

$$\begin{aligned}\langle\Psi'_\uparrow|\Psi'_\uparrow\rangle &= \langle\Psi_\uparrow|\Psi_\uparrow\rangle + \left(\frac{h}{4J}\right)^2 \sum_{j,l}\langle\Psi_\uparrow|^l_{spin-flip}|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} \\ &= 1 + \left(\frac{h}{4J}\right)^2 \sum_{j,l}\delta_{j,l} = 1 + N_s\left(\frac{h}{4J}\right)^2\end{aligned} \tag{8.68}$$

而分子的计算是

$$\begin{aligned}\langle\Psi'_\uparrow|\hat{\sigma}^z_m|\Psi'_\uparrow\rangle &= \langle\Psi_\uparrow|\hat{\sigma}^z_m|\Psi_\uparrow\rangle + 2\frac{h}{4J}\sum_j\langle\Psi_\uparrow|\hat{\sigma}^z_m|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} \\ &+ \left(\frac{h}{4J}\right)^2\sum_{j,l}\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}\hat{\sigma}^z_m|\Psi_\uparrow\rangle^l_{spin-flip} \\ &= 1+0+\left(\frac{h}{4J}\right)^2\sum_{j,l}\delta_{j,l}\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}\hat{\sigma}^z_m|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} \\ &= 1+\left(\frac{h}{4J}\right)^2(N_s-1-1) \qquad (8.69)\end{aligned}$$

显然,当$m \neq j$时,$\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}\hat{\sigma}^z_m|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} = 1$,这总共有$N_s-1$种可能,而当$m=j$时则有$\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}\hat{\sigma}^z_m|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} = -1$,因此分子是

$$\sum_{j,l}\delta_{j,l}\langle\Psi_\uparrow|^j_{spin-flip}\hat{\sigma}^z_m|\Psi_\uparrow\rangle^j_{spin-flip} = 1\times(N_s-1)+(-1)\times 1 = N_s-1-1. \quad (8.70)$$

所以

$$\langle\Psi'_\uparrow|\hat{\sigma}^z_m|\Psi'_\uparrow\rangle = 1+\left(\frac{h}{4J}\right)^2(N_s-1-1). \qquad (8.71)$$

这样我们得到微扰论估计下的自旋平均值

$$\langle\hat{\sigma}^z_m\rangle = \frac{1+(\frac{h}{4J})^2(N_s-2)}{1+N_s(\frac{h}{4J})^2} = \left(1+(\frac{h}{4J})^2(N_s-2)\right)\left(1-N_s(\frac{h}{4J})^2+...\right) = 1-2\left(\frac{h}{4J}\right)^2+... \qquad (8.72)$$

显然当$h << J$时表示相对于完全极化的铁磁态的一个小的偏离.而如果我们强行令自旋平均值为零则可以得到一个从铁磁态到顺磁态的临界值的估计值$\langle\hat{\sigma}^z_m\rangle = 0 \Rightarrow (h/J)_c = 2\sqrt{2}$.(注意到平均场处理给出$(h/J)_c = 2$)

平均场理论

对于一般的量子多体模型,我们通常无法精确求解相应的多体Schödinger方程或者Green函数.对于量子临界问题也同样如此,作为最简单的近似,我们通常先尝试用平均场理论探索体系可能存在的不同基态,然后再分析平均场近似的可靠性,即考虑涨落效应的影响.

对于当前讨论的一维量子Ising模型,我们对Ising耦合部分做平均场处理,即

$$\boxed{\hat{\sigma}^z_j\hat{\sigma}^z_{j+1} \simeq \langle\hat{\sigma}^z_j\rangle\hat{\sigma}^z_{j+1} + \hat{\sigma}^z_j\langle\hat{\sigma}^z_{j+1}\rangle - \langle\hat{\sigma}^z_j\rangle\langle\hat{\sigma}^z_{j+1}\rangle} \qquad (8.73)$$

这里$\langle...\rangle$代表对相应的量取基态平均或系综平均.既然体系本身具有平移不变性,那么最简单的选取是每一个格点的磁化都相同,也就说体系具有均匀的磁化:

$$\langle\hat{\sigma}^z_j\rangle = \langle\hat{\sigma}^z_{j+1}\rangle = m \qquad (8.74)$$

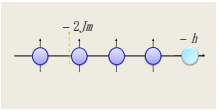


Figure 8.12: 单格点平均场近似,把相邻格点涨落的量子Ising 自旋近似用固定的自旋取值代替.

这样,体系的哈密顿量近似为每个独立格点的求和,即(图8.12)

$$\hat{H} \approx \sum_j [-2Jm\hat{\sigma}_j^z - h\hat{\sigma}_j^x] + \sum_j Jm^2 \tag{8.75}$$

既然哈密顿量已经化为每个格点的求和,那么对其中某一个格点而言,其哈密顿量是

$$\hat{H}_j = -2Jm\hat{\sigma}_j^z - h\hat{\sigma}_j^x = \begin{pmatrix} -2Jm & -h \\ -h & 2Jm \end{pmatrix} \tag{8.76}$$

对这个2×2矩阵对角化可得能量本征值以及本征波函数为

$$E_\pm = \pm\sqrt{(2Jm)^2 + h^2} \tag{8.77}$$

$$|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \frac{h}{\sqrt{h^2+(2Jm+E_+)^2}} \\ \frac{-(2Jm+E_+)}{\sqrt{h^2+(2Jm+E_+)^2}} \end{pmatrix}, \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \frac{h}{\sqrt{h^2+(2Jm-E_+)^2}} \\ \frac{-(2Jm-E_+)}{\sqrt{h^2+(2Jm-E_+)^2}} \end{pmatrix} \tag{8.78}$$

这样,在零温时,体系的单格点基态能是

$$\boxed{E_j = -\sqrt{(2Jm)^2 + h^2} + Jm^2} \tag{8.79}$$

$$\frac{\partial E_j}{\partial m^2} = -\frac{(2J)^2}{2\sqrt{(2Jm)^2 + h^2}} + J = 0 \Rightarrow \frac{2J}{\sqrt{(2Jm)^2 + h^2}} = 1 \tag{8.80}$$

这样我们得到在$T = 0$时的序参量

$$m^2 = 1 - \frac{h^2}{4J^2} \tag{8.81}$$

可以看到,体系存在一个临界的$(h/J)_c = 2$,在该临界值以上,磁化序参量为零,体系是无序态;而小于此临界值时体系序参量$m \neq 0$,表明体系处于Ising铁磁态.也就是说平均场理论预言体系存在从Ising 铁磁态至顺磁态的相变.

进一步,

$$m=\sqrt{1-\frac{h^2}{4J^2}}\propto\sqrt{\left(\frac{h}{J}\right)_c-\frac{h}{J}} \tag{8.82}$$

这表明体系的序参量在相变点连续变化,说明该相变是连续相变.既然这里的量子相变是连续相变,那么仿照经典连续(二级)相变的处理,我们可以引入相应的临界指数:

$$f\propto(T-T_c)^{2-\alpha}\Rightarrow e_g\propto(g-g_c)^{2-\alpha} \tag{8.83}$$

$$m\propto(T-T_c)^{\beta}\Rightarrow m\propto(g-g_c)^{\beta} \tag{8.84}$$

$$\xi\propto(T-T_c)^{-\nu}\Rightarrow\xi\propto(g-g_c)^{-\nu} \tag{8.85}$$

这里e_g是$T=0$时的基态能量密度.在量子相变中,g代表除了温度以外的相变调控因子,可以是压力,掺杂或者磁场等.在当前处理的量子Ising模型中,$g=h/J$ 并且可以发现$\beta=1/2$,显然这个临界指数与Landau平均场的结果完全相同.

同时,在接近临界点时能量具有如下的形式

$$\begin{aligned}E_j &= -\sqrt{(2Jm)^2+h^2}+Jm^2\approx -h-\frac{2J^2m^2}{h}+Jm^2\\ &= -h+\left(J-\frac{2J^2}{h}\right)\left(1-\frac{h^2}{4J^2}\right)\propto J\left(1-\frac{(h/J)_c}{h/J}\right)\left(1-\frac{(h/J)^2}{(h/J)_c^2}\right)\\ &\propto \left[\left(\frac{h}{J}\right)_c-\frac{h}{J}\right]^2,\end{aligned} \tag{8.86}$$

此时我们发现临界指数$\alpha=0$.

- 平均场理论给出的临界点是$h/J=2$
- 利用标度关系,可以看到所有的临界指数都是熟悉的Landau平均场指数,例如$\alpha=0,\beta=1/2$
- 但是,注意到我们处理的实际上是一个一维模型,根据经典相变的经验,平均场在低维系统中的结果通常不太靠谱.这意味着平均场可能会高估临界值$(h/J)_c$ 或者完全预言错误的有序态,并且相变的临界指数也可能不对.

一维量子Ising模型的对偶变换与自对偶*

在物理学中,某些模型之间存在着对应关系.通过这类对应关系,可以把完全不同的模型及其状态联系在一起,这就是所谓的对偶(duality).熟知的例子包括二维Ising 模型的自对偶,XY模型与Sine−Gordan模型的对偶,粒子−涡旋对偶,[14] 以及全息对偶(Ads/CFT).通常,这些对偶是所谓的强弱对偶,也就是说一个模型里面的弱耦合的态会对应于另一个模型的强耦合态,这对于我们非微扰地研究强耦合下的物理是很有帮助的.

[14] [Beekman,Zaanen,Type-II Bose-Mott insulators,Phys.Rev.B **86**,125129(2012)]

在这一节,我们简要介绍一维量子Ising模型的对偶.首先,我们定义新自旋变量$\hat{\mu}^x, \hat{\mu}^z$

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_j^x &= \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z \\ \hat{\mu}_j^z &= \prod_{k\leq j} \hat{\sigma}_k^x\end{aligned} \tag{8.87}$$

- 原则上,$\hat{\mu}_j^x, \hat{\mu}_j^z$应是$j, j+1$的函数,即这些新定义的自旋实际上定义在link上,$\hat{\mu}_{j,j+1}^x = \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z, \hat{\mu}_{j,j+1}^z = \prod_{k\leq j} \hat{\sigma}_k^x$.在一维空间,由于方向性并不重要,因此可以暂时先忽略定义在link 上与在格点上的区别.

注意到对于Ising自旋$\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^z$,其满足以下关系

$$\begin{aligned}&[\hat{\sigma}_j^\alpha, \hat{\sigma}_k^\beta] = 0, \quad j \neq k \\ &\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_j^z = -\hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_j^x \\ &(\hat{\sigma}_j^x)^2 = (\hat{\sigma}_j^z)^2 = 1\end{aligned} \tag{8.88}$$

可以证明,新自旋$\hat{\mu}^x, \hat{\mu}^z$也满足完全一样的关系.物理上,$\hat{\mu}_j^z$ 实际上描述在格点j处的畴壁,因为假设系统原先处于自旋全部向下的状态$|\Psi_\downarrow\rangle$,那么在作用$\hat{\mu}_j^z$后,j格点以及标号更小的格点自旋都反号,相当于是在j处产生了一个畴壁$|\Psi\rangle_{domain-wall}$.

- 因此,我们可以说μ_j^z是畴壁的产生算符,显然,畴壁的产生会使得系统无序化,因而畴壁算符也称作无序算符.

另一方面,$\hat{\mu}_j^x$可以看成畴壁的势能,因为对于一个确定的畴壁,例如在j处有一个畴壁,那么在这个状态作用上作$-2J\hat{\mu}_j^x$算符的平均后,我们发现相应的取值是$2J$,注意到$\hat{\mu}_j^x$并不改变畴壁态,因此$2J$就是畴壁能量相对于完全有序的铁磁基态的能量.

- $\hat{\mu}_j^x$是畴壁的势能算符或者是粒子数算符.

  注意到

$$\hat{\mu}_j^z \hat{\mu}_{j+1}^z = \prod_{k\leq j} \hat{\sigma}_k^x \prod_{m\leq j+1} \hat{\sigma}_m^x = \hat{\sigma}_{j+1}^x \prod_{k\leq j} (\hat{\sigma}_k^x)^2 = \hat{\sigma}_{j+1}^x \tag{8.89}$$

那么我们可以把原先的量子Ising模型改写为

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{\mu}_j^x - h\sum_j \hat{\mu}_{j-1}^z \hat{\mu}_j^z = -J\sum_j \hat{\mu}_j^x - h\sum_j \hat{\mu}_j^z \hat{\mu}_{j+1}^z \tag{8.90}$$

这个模型称为量子Ising模型的对偶模型,从$\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^z$到$\hat{\mu}^x, \hat{\mu}^z$的变换称为对偶变换.

我们可以发现,该哈密顿的形式与先前用$\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^z$表示的量子Ising 模型完全一样,只不过$J, h$互相交换了位置.在物理上,这表明如果是系统处于$\langle\hat{\sigma}^z\rangle \neq 0$的铁磁态,那么在对偶的新模型看来,此时应处于$\langle\hat{\mu}^z\rangle = 0$的顺磁态.而如果原始模型处

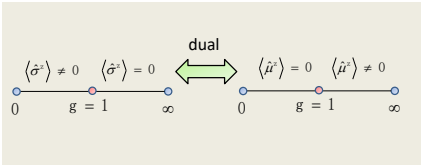


Figure 8.13: 在对偶变换下,量子Ising模型显示自对偶特性.

于顺磁态,那么新模型必定是处于$\langle\hat{\mu}^z\rangle \neq 0$的铁磁态.也就是说,两个模型的强弱耦合态在上述的对偶变换下互相交换,这称为自对偶,也就是自己的态在对偶变换下互换.(图8.13)

- 对偶联系不同的模型或者同一个模型的不同相,一个模型强耦合的物理可以通过对偶模型的弱耦合物理来理解.

  进一步,对于原始模型,我们知道其本征能量是

$$E(J,h) = \langle\hat{H}(J,h)\rangle = -J\left[\sum_j \langle\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_{j+1}^z\rangle + g\sum_j\langle\hat{\sigma}_j^x\rangle\right] = -J\tilde{E}(g) \tag{8.91}$$

而对于对偶后的新模型则有

$$E(h,J) = \langle\hat{H}(h,J)\rangle = -h\left[\sum_j \langle\hat{\mu}_j^z\hat{\mu}_{j+1}^z\rangle + \frac{1}{g}\sum_j\langle\hat{\mu}_j^x\rangle\right] = -h\tilde{E}\left(\frac{1}{g}\right) \tag{8.92}$$

由于这两个哈密顿量描述的是同一个系统,因此相同参数时的能量必定相等,因此有

$$-J\tilde{E}(g) = -h\tilde{E}\left(\frac{1}{g}\right) \Rightarrow \tilde{E}(g) = g\tilde{E}\left(\frac{1}{g}\right) \tag{8.93}$$

显然,我们发现$g = 1$是一个特殊点,在该点,上述等式自动成立.从物理上来说,对于一般的参数g,若是g时有一个能隙,那么$1/g$也会有一个能隙,当且仅当$g = 1$时,系统可能出现能隙为零的情况,也就是说$g = 1$可能就是系统的相变点.因此,根据自对偶的特性,我们预言一维量子Ising模型的相变点是$h/J = 1$. 事实上,这个结果与精确解一致.

在量子Ising模型中,顺磁态可以用大量自旋的无规翻转来理解,也可以通过畴壁的大量产生(凝聚)来解释.特别是在铁磁态中的畴壁是系统无序化的来源,其本身的稳定性来自于系统整体的特性,和局部的细节无关,因此畴壁是一种拓扑型激发,或者拓扑缺陷.这样,系统从铁磁态到顺磁态的相变可以看作是拓扑缺陷

驱动的相变.在低维系统中,拓扑缺陷诱导相变是一种常见的现象.(KT相变就是涡旋驱动的一类有限温度相变.)

最后,如果我们重新考虑新自旋是定义在link上的,那么对偶模型可以写为

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{\mu}^x_{j,j+1} - h\sum_j \hat{\mu}^z_{j-1,j}\hat{\mu}^z_{j,j+1} \tag{8.94}$$

在原始模型中,系统具有整体的Z_2不变性,也就是每个$\hat{\sigma}^z_j \to -\hat{\sigma}^z_j$, 系统的哈密顿量不变.而对于对偶后的模型,可以看到系统的对称性实际上提升为局域的Z_2规范对称性.如果定义Z_2规范变换算符$\hat{G}(j)$

$$\hat{G}(j) = \hat{\mu}^x_{j-1,j}\hat{\mu}^x_{j,j+1} \tag{8.95}$$

那么

$$\begin{aligned}\hat{G}(j)\hat{\mu}^z_{j,j+1}\hat{G}^{-1}(j) &= -\hat{\mu}^z_{j,j+1}\\ \hat{G}(j)\hat{\mu}^z_{j-1,j}\hat{G}^{-1}(j) &= -\hat{\mu}^z_{j-1,j}\end{aligned} \tag{8.96}$$

而在$\hat{G}(j)$的变换下,所有$\hat{\mu}^x$都不改变.同时$(\hat{G}(j))^2 = 1$,这表明$\hat{G}(j)$的本征值是± 1.可以发现,$\hat{G}(j)$与哈密顿量$\hat{H}$对易,这表明$\hat{G}(j)$是系统的守恒量,且对于每一个link上都有一个.对系统的每一个本征态,我们有

$$\hat{G}(j)|\Psi\rangle = q_j|\Psi\rangle, \quad q_j = \pm 1 \tag{8.97}$$

因此反复利用$\hat{G}(j)$可以发现(对于开边界的情况)

$$\hat{\mu}^x_{j,j+1} = q_j\hat{\mu}^x_{j-1,j} = q_jq_{j-1}\hat{\mu}^x_{j-2,j-1} = ... = q_jq_{j-1}...q_2\hat{\mu}^x_{1,2} \tag{8.98}$$

这样对于固定的q_j有

$$\hat{H} = -J\left[\sum_{j>1}(q_jq_{j-1}...q_2) + 1\right]\hat{\mu}^x_{1,2} - h\sum_j \hat{\mu}^z_{j-1,j}\hat{\mu}^z_{j,j+1} \tag{8.99}$$

- 对偶变换常常会把整体对称性提升为局域对称性.

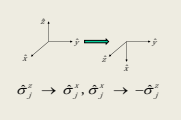


Figure 8.14: 坐标轴绕y轴逆时针做90度旋转,自旋算符经历相应的变换.

量子Ising模型的精确解:旅行中最美的珍珠

我们注意到一维的量子自旋模型总可以通过Jordan-Wigner变换而改写为费米子模型.[15]对于特殊例子,比如先前研究过的XY模型以及这里的横场Ising模型,体系最后对应于自由费米子问题,在这个意义上体系是精确可解的.

为了便于求解,我们把系统所在的坐标轴绕y轴逆时针做90度旋转,(当然也可以用$\hat{R}_j = e^{i\theta\vec{n}\cdot\hat{\vec{S}}_j}$ 转动自旋算符)即$x \to -z, z \to x, y \to y$, 这样自旋算符也有相应的变化 (图8.14)

$$\hat{\sigma}^z \to \hat{\sigma}^x, \quad \hat{\sigma}^x \to -\hat{\sigma}^z, \quad \hat{\sigma}^y \to \hat{\sigma}^y \tag{8.100}$$

这样哈密顿量则变为

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + h\sum_j \hat{\sigma}_j^z \tag{8.101}$$

Jordan-Wigner变换

我们知道,一维量子自旋系统的Jordan-Wigner变换定义如下

$$\hat{S}_j^+ = \hat{f}_j^+ e^{i\hat{\phi}_j}, \quad \hat{\phi}_j = \pi\sum_{m<j} \hat{f}_m^+ \hat{f}_m \tag{8.102}$$

$$\hat{S}_j^z = \hat{f}_j^+ \hat{f}_j - \frac{1}{2} \tag{8.103}$$

这样我们有如下关系:

$$\boxed{\hat{\sigma}_j^x = \hat{S}_j^+ + \hat{S}_j^- = (\hat{f}_j^+ + \hat{f}_j)e^{i\hat{\phi}_j}} \tag{8.104}$$

注意我们已经利用了恒等关系:$e^{i\phi_j} = \prod_{m<j}(1-2\hat{f}_m^\dagger \hat{f}_m) = e^{-i\phi_j}$, 这样$x$方向的自旋算符用费米子表示为$\hat{\sigma}_j^x = \hat{f}_j^\dagger e^{i\hat{\phi}_j} + e^{-i\hat{\phi}_j}\hat{f}_j = (\hat{f}_j^+ + \hat{f}_j)e^{i\hat{\phi}_j}$. 那么$x$方向耦

[15] 当然这个只对$S = 1/2$成立

合为

$$\begin{aligned}\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x &= (\hat{f}_j^+ + \hat{f}_j)e^{i\hat{\phi}_j}e^{-i\hat{\phi}_{j+1}}(\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_{j+1}) &(8.105)\\ &= (\hat{f}_j^+ + \hat{f}_j)(1-2\hat{f}_j^+\hat{f}_j)(\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_{j+1}) &(8.106)\\ &= (\hat{f}_j^+ - \hat{f}_j)(\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_{j+1}) &(8.107)\end{aligned}$$

这样,哈密顿量的费米子表示形式是

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -J\sum_j(\hat{f}_j^+ - \hat{f}_j)(\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_{j+1}) + 2h\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_j - 1/2) &(8.108)\\ &= -J\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1} - \hat{f}_j\hat{f}_{j+1}^+ - \hat{f}_j\hat{f}_{j+1}) + 2h\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_j - 1/2)\\ &= -J\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+\hat{f}_j + \hat{f}_{j+1}\hat{f}_j) + 2h\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_j - 1/2)\\ &= -J\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1} + \text{H.c.}) + 2h\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_j - 1/2) &(8.109)\end{aligned}$$

这里$H.c.$是指取厄密共轭.这样相互作用的自旋问题通过Jordan-Wigner变换转化为了无相互作用的晶格费米子问题.

与Kitaev超导链模型的等价*

对于超导BCS理论熟悉的读者会发现一维横场Ising模型的费米子表示就是一维p波BCS 超导模型.在文献中,通常令$J = t, 2h = -\mu$,那么就得到著名的Kitaev链模型或Kitaev超导模型:

$$\boxed{\hat{H}_{Kitaev} = -t\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+\hat{f}_j + \hat{f}_{j+1}\hat{f}_j) - \mu\sum_j\hat{f}_j^+\hat{f}_j} \quad (8.110)$$

在更一般的Kitaev链模型中,配对强度Δ与跃迁强度t是不同的

$$\hat{H}_{Kitaev} = \sum_j[-t(\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+\hat{f}_j) + \Delta\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1}^+ + \Delta^*\hat{f}_{j+1}\hat{f}_j] - \mu\sum_j\hat{f}_j^+\hat{f}_j$$

如果我们考虑最近邻费米子之间的相互作用,那么相应的模型哈密顿量是

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_j[-t(\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+\hat{f}_j) + \Delta\hat{f}_j^+\hat{f}_{j+1}^+ + \Delta^*\hat{f}_{j+1}\hat{f}_j]\\ &+U\sum_j(2\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j - 1)(2\hat{f}_{j+1}^\dagger\hat{f}_{j+1} - 1) - \mu\sum_j(\hat{f}_j^+\hat{f}_j - \frac{1}{2}) &(8.111)\end{aligned}$$

在一般情况下,这个模型是没有严格解析解的,但是如果我们注意到该模型与量子Ising 模型的相似性,就会发现如果我们令$t = \Delta$并且逆向使用Jordan-Wigner变换就有

$$\hat{H} = -t\sum_j\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_{j+1}^x + U\sum_j\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_{j+1}^z - \frac{\mu}{2}\sum_j\hat{\sigma}_j^z \quad (8.112)$$

此时我们得到一个具有z方向外磁场的XZ模型,进一步保持x轴不变,把z轴在yz平面内顺时针转动90 度可得$\hat{\sigma}^y \to -\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^z \to \hat{\sigma}^y$. 我们发现XZ 模型在自旋转动下自然成为了有$y$方向外磁场XY模型

$$\hat{H} = -t\sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + U\sum_j \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y - \frac{\mu}{2}\sum_j \hat{\sigma}_j^y \tag{8.113}$$

当外磁场项存在时,外磁场部分在Jordan-Wigner变换下导致包含相位因子的相互作用,而当$\mu = 0$时外磁场贡献消失,我们有

$$\hat{H} = -t\sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + U\sum_j \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y \tag{8.114}$$

此时再做Jordan-Wigner变换可得

$$\hat{H} = -t\sum_j [\hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+ \hat{f}_j + \hat{f}_{j+1}\hat{f}_j] + U\sum_j [-\hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+ \hat{f}_j - \hat{f}_{j+1}\hat{f}_j]$$

显然这已经是一个自由费米子问题,可以直接求解.这就是相互作用Kitaev超导链模型的一类精确解.[14, 15]注意到当$U = -t$时第一项与第二项中的配对部分互相抵消,此时我们重新得到标准一维量子XY 模型的自由费米子表示$\hat{H}_{XY} = -2t\sum_j [\hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+ \hat{f}_j]$.

模型的对角化

注意到对于超导类型的模型,由于配对项$\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_{j+1}^\dagger, \hat{f}_j \hat{f}_{j+1}$ 的出现,费米子总数$\hat{N} = \sum_j \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j$是不守恒的$[\hat{H}, \hat{N}] \neq 0$.但是,配对项同时产生或者消灭一对费米子,那么费米子总数的奇偶性是守恒的$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$,一般文献中也称为费米子数宇称守恒,这里费米子宇称算符记为

$$\hat{P} = (-1)^{\hat{N}} = e^{i\pi\hat{N}} = e^{i\pi\sum_j \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j} = \prod_j (1 - 2\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j) \tag{8.115}$$

利用费米子数算符$\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j$本征值为0和1的特性,我们立即发现$\hat{P}$ 的本征值是± 1,其中-1对应有奇数个粒子的情况而$+1$对应有偶数个粒子的情况.

当考虑周期边界条件是,系统满足平移不变性,也就是把j换成$j+1$时哈密顿量形式不变,这提示我们可以用傅里叶变换来对角化哈密顿量.令费米子算符的傅里叶变换为:

$$\hat{f}_j = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikR_j}\hat{f}_k \tag{8.116}$$

这里N_s是系统的总格点/自旋数目,$R_j = ja$是第j个格点的位置,a是晶格间距/常

数,动量k 取值在第一布里渊区$k \in [-\pi/a, \pi/a]$.这样可得

$$\begin{aligned}\sum_j \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j &= \sum_j \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{-ikR_j}\hat{f}_k^\dagger\right)\left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_{k'} e^{ik'R_j}\hat{f}_{k'}\right) \\ &= \sum_{k,k'}\sum_j \frac{1}{N_s} e^{-i(k-k')R_j}\hat{f}_k^\dagger \hat{f}_{k'} = \sum_{k,k'}\delta_{k,k'}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{k'} \\ &= \sum_k \hat{f}_k^\dagger \hat{f}_k \end{aligned} \tag{8.117}$$

这样横场项就对角化为

$$\hat{H}_h = \sum_k 2h\hat{f}_k^+\hat{f}_k - hN_s. \tag{8.118}$$

同理,我们也可以把Ising项做傅里叶变换,这里需要处理的是$\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_{j+1}^\dagger, \hat{f}_j^\dagger\hat{f}_{j+1}$:

$$\begin{aligned}\sum_j \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_{j+1}^\dagger &= \sum_j \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{-ikR_j}\hat{f}_k^\dagger\right)\left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_{k'} e^{-ik'(R_j+a)}\hat{f}_{k'}^\dagger\right) \\ &= \sum_{k,k'}\sum_j \frac{1}{N_s} e^{-i(k+k')R_j}e^{-ik'a}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{k'}^\dagger = \sum_{k,k'}\delta_{k+k'=0}e^{-ik'a}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{k'}^\dagger \\ &= \sum_k e^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger \end{aligned} \tag{8.119}$$

$$\begin{aligned}\sum_j \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_{j+1} &= \sum_j \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{-ikR_j}\hat{f}_k^\dagger\right)\left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_{k'} e^{ik'(R_j+a)}\hat{f}_{k'}\right) \\ &= \sum_{k,k'}\sum_j \frac{1}{N_s} e^{-i(k-k')R_j}e^{ik'a}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{k'} = \sum_{k,k'}\delta_{k,k'}e^{ik'a}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{k'} \\ &= \sum_k e^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k \end{aligned} \tag{8.120}$$

因此Ising项可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H}_J &= -J\sum_k (e^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k + e^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger + \text{H.c.}) \\ &= -J\sum_k (e^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k + e^{-ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k + e^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger + e^{-ika}\hat{f}_{-k}\hat{f}_k) \\ &= \sum_k (-2J\cos(ka)\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k - Je^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger - Je^{-ika}\hat{f}_{-k}\hat{f}_k) \end{aligned} \tag{8.121}$$

这样,我们可以把模型写成如下形式:

$$\hat{H} = \hat{H}_J + \hat{H}_h = \sum_k [(-2J\cos(ka) + 2h)\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k - Je^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger - Je^{-ika}\hat{f}_{-k}\hat{f}_k] - hN_s$$

现在,让我们把对k的求和划分为$k>0$与$k<0$,然后把$k<0$部分的k替换为$-k$,则上式成为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{k>0}[(-2J\cos(ka)+2h)(\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k+\hat{f}_{-k}^\dagger\hat{f}_{-k})-Je^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger-Je^{-ika}\hat{f}_{-k}^\dagger\hat{f}_k^\dagger \\ &\quad -Je^{-ika}\hat{f}_{-k}\hat{f}_k-Je^{ika}\hat{f}_k\hat{f}_{-k}] \\ &= \sum_{k>0}[(-2J\cos(ka)+2h)(\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k+\hat{f}_{-k}^\dagger\hat{f}_{-k})-Je^{ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger+Je^{-ika}\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger \\ &\quad -Je^{-ika}\hat{f}_{-k}\hat{f}_k+Je^{ika}\hat{f}_{-k}\hat{f}_k] \\ &= \sum_{k>0}[(-2J\cos(ka)+2h)(\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k+\hat{f}_{-k}^\dagger\hat{f}_{-k})-J(e^{ika}-e^{-ika})\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger-J(e^{-ika}-e^{ika})\hat{f}_{-k}\hat{f}_k]\end{aligned}$$

这里我们已经省略了常数项$-hN_s$.为了简化符号,我们定义$\varepsilon_k=-2J\cos k+2h,\Delta_k=2J\sin k$.(令$a=1$)那么哈密顿量为

$$\hat{H}=\sum_{k>0}[\varepsilon_k(\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k+\hat{f}_{-k}^\dagger\hat{f}_{-k})-i\Delta_k\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_{-k}^\dagger+i\Delta_k\hat{f}_{-k}\hat{f}_k]$$

注意到此时的哈密顿量实际上对应无自旋费米子的p波超导态.这里的p波指的是在小动量k时,超导配对能隙函数$\Delta_k\propto k$, 类似于原子物理里面所提及的角动量$l=1$的p波态.

为了进一步处理,我们可以把哈密顿量写成矩阵形式,即

$$\hat{H}=\sum_{k>0}\begin{pmatrix}\hat{f}_k^+ & \hat{f}_{-k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_k & -i\Delta_k\\ i\Delta_k & -\varepsilon_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{f}_k\\ \hat{f}_{-k}^+\end{pmatrix}+\sum_{k>0}\varepsilon_k \tag{8.122}$$

为了对角化上述具有配对项的哈密顿量,仿照之前反铁磁自旋波理论的处理,我们引入费米子的Bogoliubov变换:

$$\boxed{\begin{pmatrix}\alpha_k\\ \beta_k^+\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta_k & -i\sin\theta_k\\ -i\sin\theta_k & \cos\theta_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{f}_k\\ \hat{f}_{-k}^+\end{pmatrix}=\hat{U}\begin{pmatrix}\hat{f}_k\\ \hat{f}_{-k}^+\end{pmatrix}} \tag{8.123}$$

注意到此时的Bogoliubov变换含有虚数因子i.变换矩阵$\hat{U}$是标准的2×2幺正矩阵,即$\hat{U}^{-1}=\hat{U}^\dagger$.

$$\hat{H}=\sum_{k>0}\begin{pmatrix}\hat{\alpha}_k^+ & \hat{\beta}_k\end{pmatrix}\hat{U}\hat{h}_k\hat{U}^{-1}\begin{pmatrix}\hat{\alpha}_k\\ \hat{\beta}_k^+\end{pmatrix}+\sum_{k>0}\varepsilon_k,\quad \hat{h}_k=\begin{pmatrix}\varepsilon_k & -i\Delta_k\\ i\Delta_k & -\varepsilon_k\end{pmatrix}. \tag{8.124}$$

如果要求$\hat{U}\hat{h}_k\hat{U}^{-1}$是对角矩阵,那么我们就自然对角化了哈密顿量.直接计算发现

$$\hat{U}\hat{h}_k\hat{U}^{-1}=\begin{pmatrix}\varepsilon_k\cos2\theta_k+\Delta_k\sin2\theta_k & \varepsilon_k\sin2\theta_k-\Delta_k\cos2\theta_k\\ -\varepsilon_k\sin2\theta_k+\Delta_k\cos2\theta_k & -\varepsilon_k\cos2\theta_k-\Delta_k\sin2\theta_k\end{pmatrix} \tag{8.125}$$

对角矩阵的要求实际上导致如下的等式

$$\varepsilon_k\sin2\theta_k-\Delta_k\cos2\theta_k=0\Rightarrow\frac{\Delta_k}{\varepsilon_k}=\frac{\sin2\theta_k}{\cos2\theta_k} \tag{8.126}$$

对上式两边平方可解得$\sin 2\theta_k = \pm\frac{\Delta_k}{E_k}$,这里$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}$, 我们下面取$\sin 2\theta_k = \frac{\Delta_k}{E_k}$的解.那么,$\cos 2\theta_k = \sin 2\theta_k/(\Delta_k/\varepsilon_k) = \frac{\varepsilon_k}{E_k}$, 结合$\cos 2\theta_k = \cos^2\theta_k - \sin^2\theta_k$和$\sin^2\theta_k + \cos^2\theta_k = 1$可得$\cos^2\theta_k = 1 - \sin^2\theta_k = \frac{1}{2}(1 + \frac{\varepsilon_k}{E_k})$. 现在,我们取$\cos\theta_k = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \frac{\varepsilon_k}{E_k})}$ 的解,此时$\sin\theta_k = \sqrt{\frac{1}{2}(1 - \frac{\varepsilon_k}{E_k})}$. 注意到这里存在相因子的问题,即把$\sin\theta_k, \cos\theta_k$代入$\sin 2\theta_k$有

$$\sin 2\theta_k = 2\sin\theta_k\cos\theta_k = \sqrt{1 - \frac{\varepsilon_k^2}{E_k^2}} = \frac{|\Delta_k|}{E_k} \neq \frac{\Delta_k}{E_k} \tag{8.127}$$

因此,我们可以给$\sin\theta_k$或$\cos\theta_k$添加一个相因子,即符号函数$sign(\Delta_k)$,这样,Bogoliubov变换系数的明确形式是

$$\cos\theta_k = sign(\Delta_k)\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon_k}{E_k}\right)}, \quad \sin\theta_k = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon_k}{E_k}\right)}. \tag{8.128}$$

此时,哈密顿矩阵的上对角元化为

$$\varepsilon_k\cos 2\theta_k + \Delta_k\sin 2\theta_k = \varepsilon_k\frac{\varepsilon_k}{E_k} + \Delta_k\frac{\Delta_k}{E_k} = E_k, \tag{8.129}$$

这样,体系的哈密顿量对角化为如下形式

$$H = \sum_{k>0}[E_k(\alpha_k^+\alpha_k - \beta_k\beta_k^+) + \varepsilon_k] = \sum_{k>0}E_k(\alpha_k^+\alpha_k + \beta_k^\dagger\beta_k) + \sum_{k>0}(\varepsilon_k - E_k) \tag{8.130}$$

而$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} = 2J\sqrt{1 + g^2 - 2g\cos k}$解释为准粒子$\hat{\alpha}, \hat{\beta}$的色散关系.($g = h/J$)注意到当$g \ll 1$时$E_k \simeq 2J(1 - g\cos k)$,这与$h/J \ll 1$极限下得到的畴壁色散完全相同,因此准粒子在物理上对应系统中的畴壁激发且满足费米子特性.

精确解的物理性质

对于色散关系,

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} = 2J\sqrt{(g - \cos k)^2 + \sin^2 k} = 2J\sqrt{1 + g^2 - 2g\cos k} \tag{8.131}$$

显然,体系的准粒子激发能的零点当且仅当$\varepsilon_k = \Delta_k = 0$ 时存在,此时有$g = h/J = 1, k = 0$.换句话说,体系仅在$g = 1$ 时存在无能隙激发,而在其他情况下激发能都是有限值,这种无能隙激发将会导致自由能以及其他物理量的热力学奇异性.这说明$g = h/J = 1$就是体系的临界点. 相比较于平均场的结果$g_c = 2$,精确解的临界值更小,表明量子涨落使得体系的有序性降低,需要更大的J才能使铁磁态得以稳定存在.

$T = 0$时体系的基态能密度是

$$e_g = \frac{E_g}{N_s} = \frac{1}{N_s}\sum_{k>0}(\varepsilon_k - E_k) = \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi}(\varepsilon_k - E_k) \tag{8.132}$$

而在相变点附近,$\varepsilon_k \approx -2J + 2h + Jk^2, E_k \approx 2J\sqrt{(g-1)^2 + gk^2}$ 并且通过分析色散关系可以发现体系的关联长度具有简单的标度形式,即$\xi \propto 1/(J|g-1|)$, 这样体系的临界指数$\nu = 1$.

而体系的基态能密度在相变点附近则计算如下

$$\begin{aligned} e_g &\approx \int_0^\Lambda \frac{dk}{2\pi}[-2J(1-g) + Jk^2 - 2J\sqrt{(g-1)^2 + gk^2}] && (8.133)\\ &= -2J(1-g)\frac{\Lambda}{2\pi} + \frac{J\Lambda^3}{6\pi} - \int_0^\Lambda \frac{dk}{2\pi} 2J\sqrt{(g-1)^2 + gk^2} && (8.134)\\ &= -2J(1-g)\frac{\Lambda}{2\pi} + \frac{J\Lambda^3}{6\pi} - 2J\frac{(g-1)^2}{2\pi\sqrt{g}}\ln|g-1|\sqrt{g} && (8.135)\\ &\propto (g-1)^2 \ln|g-1| && (8.136) \end{aligned}$$

这表明体系的临界指数$\alpha = 0$并且显示额外的对数依赖.注意到这里的行为与二维经典Ising模型完全相同.

当$g = 1$即体系处于量子临界点时,我们注意到其色散具有简单的形式

$$E_k = 2J\sqrt{2 - 2\cos k} = 4J|\sin\frac{k}{2}| \approx c|k|, \quad c = 2J \tag{8.137}$$

这说明临界点时体系的低能激发是动量线性依赖的费米型准粒子.

自由能密度与临界指数

在有限温度下,处于临界点附近的费米型准粒子对能量密度$e(T)$的贡献是

$$e(T) = 2\int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} E_k f_F(E_k) \simeq \int_0^\infty \frac{dk}{\pi}\frac{ck}{e^{ck/T}+1} = \frac{T^2}{c\pi}\int_0^\infty \frac{xdx}{e^x+1} = \frac{\pi T^2}{12c} \propto T^2 \tag{8.138}$$

结合先前的零温能量密度的标度形式$e_g \propto (g-g_c)^{2-\alpha}$,我们可以推广出一个有限温度的自由能密度形式

$$f \propto (g-g_c)^{2-\alpha}\Theta\left(\frac{T}{g-g_c}\right) \tag{8.139}$$

如果超标度律$2-\alpha = \nu d$成立,那么我们得到

$$f \propto (g-g_c)^{\nu d}\Theta\left(\frac{T}{g-g_c}\right) \propto T^{\nu d}, \quad (g = g_c) \tag{8.140}$$

利用前面得到的临界指数$\nu = 1$和空间维度$d = 1$,我们发现

$$T^{\nu d} = T \neq T^2 \tag{8.141}$$

也就是说直接把经典相变中的超标度律套用过来是不正确的.经过大量的研究发现,对量子临界点附近的体系,其自由能的标度具有如下形式:

$$\boxed{f \propto (g-g_c)^{2-\alpha}\Theta\left(\frac{T}{(g-g_c)^{\nu z}}\right)} \tag{8.142}$$

而超标度律对量子临界系统则修正为所谓的量子超标度律

$$\boxed{2-\alpha=\nu(d+z)} \tag{8.143}$$

这里引入了动力学临界维度z(dynamical critical dimension).对于当前的一维量子Ising模型,我们发现如果令$z=1$,那么量子超标度律给出的自由能是正确的T^2形式.与热力学相变类似,对于处于零温的量子相变,其热力学量在量子临界点附近也具有标度行为:

$$C_v\propto(g-g_c)^{-\alpha},\quad \Psi\propto(g-g_c)^{\beta},\quad \chi\propto(g-g_c)^{-\gamma}, \tag{8.144}$$

而关联长度具有

$$\xi\propto(g-g_c)^{-\nu},\quad \xi_\tau\propto(g-g_c)^{-\nu z} \tag{8.145}$$

前者是常规的空间关联长度,表征涨落在空间的依赖关系,后者是(虚)时间关联长度,刻画涨落在时间上的关联程度.通常临界点附近的准粒子激发能量有$\omega\sim k^z$.

- 一般而言,$z\neq 1$并且可以是任意的正实数;
- 巡游铁磁性:$z=3$,巡游反铁磁性$z=2$;
- 动力学平均场给出的Mott相变$z=\infty$.

需要注意的是,通常一个高维系统既可以有量子相变也在有限温度存在热力学相变,这两者各自有一套临界指数且一般数值并不相同.(两者物理来源不同)

最后,对于量子临界点附近区域的物理量$\mathcal{O}$,若其受量子临界涨落支配,那么它也具有如下的标度形式

$$\boxed{\mathcal{O}(T,g)=(g-g_c)^x\Phi(T/(g-g_c)^{\nu z})} \tag{8.146}$$

这里系数x表示物理量$\mathcal{O}$随距离临界点远近的变化程度,对不同物理量一般不相同.例如Hubbard模型中由动力学平均场理论发现的掺杂驱动Mott临界点附近的电阻就有上述形式.

- 量子相变是发生在零温的相变,其由量子效应而非温度驱动,当量子临界涨落(无能隙模式)显著时可影响有限温度的物理.

根据已经得到的三个临界指数α,ν,z和四个标度关系,我们可以得到剩下的临界指数,显然,这些临界指数就是二维Ising模型的临界指数.因此,我们把一维量子横场Ising模型的临界指数总结如下:

$$\boxed{\alpha=0,\quad \beta=\frac{1}{8},\quad \gamma=\frac{7}{4},\quad \delta=15,\quad \nu=1,\quad \eta=\frac{1}{4},\quad z=1.} \tag{8.147}$$

这说明,如果我们直接计算临界点附近的x方向磁化基态期望值$m=\frac{1}{N_s}\sum_j\langle\hat{\sigma}_j^x\rangle$会发现$m\propto(g-g_c)^{1/8}$, 而临界点处的关联函数有$G_{jm}=\langle\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_m^x\rangle\propto\frac{1}{|R_j-R_m|^{1/4}}$.($m\propto(g-g_c)^{\beta}$,$G_{jm}\propto\frac{1}{|R_j-R_m|^{d+z-2+\eta}}$)

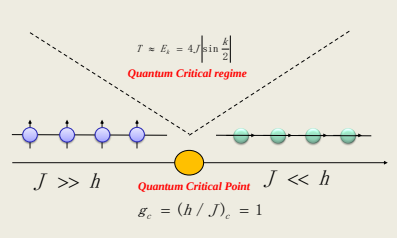


Figure 8.15: 一维量子横场Ising模型的定性相图.

与实验的比较*

对于通常的绝缘磁性系统,例如用横场Ising模型描述的体系,实验测量可以分为热力学测量和输运测量.热力学测量主要涉及热容和磁化(率)而动力学测量则包含中子散射(INS),[16]热导以及核磁共振(NMR).

通过先前的计算,我们知道$g = g_c$时的能量密度是$e(T) = \frac{\pi T^2}{12c} \propto T^2$, 这样热容应是温度的线性函数,($C_V = de(T)/dT$)这个结果与Ong 组的对$CoNb_2O_6$的实验测量一致.[8][17]

对于NMR,如果假设电子自旋和原子核之间的超精细相互作用能用$\hat{H}_{hf} = a_{hf}\vec{I}\cdot\vec{\sigma}$表示,($\vec{I}$是原子核的自旋)那么NMR所测得的弛豫率$1/T_1$(也称为自旋晶格弛豫率)与自旋关联函数$C(x_j,t) = \langle\hat{\sigma}_j^x(t)\hat{\sigma}_0^x\rangle$,或者说其傅里叶变换,也就是动力学磁化率$\chi(k,\omega)$直接相关:[18]

$$\frac{1}{T_1} = \lim_{\omega\to 0}\frac{2T}{\omega}\int\frac{dk}{2\pi}|a_{hf}|^2\mathrm{Im}\chi(k,\omega) = \lim_{\omega\to 0}\frac{2T}{\omega}|a_{hf}|^2\mathrm{Im}\chi(x=0,\omega). \quad (8.148)$$

对于平衡态的动力学磁化率$\chi(x=0,\omega)$,我们可先求其对应的虚频磁化率$\chi(x,\omega_n)$.然后利用解析延拓$i\omega_n \to \omega + i0^+$就能得到实频磁化率$\chi(x=0,\omega)$.对于处于量子临界点的一维横场Ising模型有

$$Im\chi(x=0,\omega) = \frac{ZG_I(0)}{T^{3/4}2^{1/4}\sqrt{\pi}\Gamma(1/8)\Gamma(5/8)}\sinh\frac{\omega}{2T}\left|\Gamma\left(\frac{1}{8}-\frac{i\omega}{2\pi T}\right)\right|^2 \quad (8.149)$$

这里$Z = J^{-1/4}$,$G_I(0) = 0.8587$.因此我们发现

$$\frac{1}{T_1} = |a_{hf}|^2\frac{ZG_I(0)\Gamma(1/8)}{T^{3/4}2^{1/4}\sqrt{\pi}\Gamma(5/8)} = 2.13|a_{hf}|^2\frac{J^{-1/4}}{T^{3/4}}. \quad (8.150)$$

[16]先前已基于文献[5]讨论了$CoNb_2O_6$的中子散射结果.

[17]Ong组的热容测量说明临界磁场和低于临界磁场时系统都有线性热容行为,这与一维量子Ising模型不符,此外在顺磁态发现的低温热容上升也与Ising模型所预期的指数抑制行为差异明显,这说明$CoNb_2O_6$体系的实际建模远比量子Ising模型复杂.

[18]这里的讨论主要基于文献[9].理论上更详细的处理可参考Sachdev书第七章和第十章.

这里的$T^{-3/4}$行为与$CoNb_2O_6$的低温实验测量一致.[9](适用范围大体是$T \leq 0.4J$)

量子模型与经典统计模型的对应:总归是经典的好

准备

我们首先考虑$e^{a\hat{\sigma}^x}$在$\hat{\sigma}^z$本征态$|\sigma\rangle$与$|\sigma'\rangle$下的期望值,这里$\sigma,\sigma'=\pm 1$代表自旋向上与向下.

$$e^{a\hat{\sigma}^x}=\sum_m \frac{a^m}{m!}(\hat{\sigma}^x)^m=\sum_{m=even}\frac{a^m}{m!}\hat{I}+\sum_{m=odd}\frac{a^m}{m!}\hat{\sigma}^x=\hat{I}\cosh(a)+\hat{\sigma}^x\sinh(a)$$

由于

$$\langle\sigma'|\hat{I}|\sigma\rangle=\frac{1+\sigma\sigma'}{2},\quad \langle\sigma'|\hat{\sigma}^x|\sigma\rangle=\frac{1-\sigma\sigma'}{2} \tag{8.151}$$

可以得到

$$\begin{aligned}\langle\sigma'|e^{a\hat{\sigma}^x}|\sigma\rangle &= \frac{1+\sigma\sigma'}{2}\cosh(a)+\frac{1-\sigma\sigma'}{2}\sinh(a)=\frac{1+\sigma\sigma'}{2}\frac{e^a+e^{-a}}{2}+\frac{1-\sigma\sigma'}{2}\frac{e^a-e^{-a}}{2}\\ &= \frac{1}{2}(e^a+\sigma\sigma' e^{-a})=e^{\ln\frac{1}{2}(e^a+\sigma\sigma' e^{-a})}=e^{\frac{1}{2}\ln(\cosh a\sinh a)+\frac{\sigma\sigma'}{2}\ln\coth a}\\ &= e^{\frac{1}{2}\ln\frac{\sinh 2a}{2}}e^{\frac{\sigma\sigma'}{2}\ln\coth a}\end{aligned} \tag{8.152}$$

即有如下重要关系

$$\boxed{\langle\sigma'|e^{a\hat{\sigma}^x}|\sigma\rangle=e^{\frac{1}{2}\ln\frac{\sinh 2a}{2}}e^{\frac{\sigma\sigma'}{2}\ln\coth a}} \tag{8.153}$$

$S=1/2$自旋系统的经典对应

考虑$S=1/2$的量子自旋的哈密顿量是$\hat{H}=-J\hat{\sigma}^z-h\hat{\sigma}^x$,其(正则系综的)配分函数是

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}} \tag{8.154}$$

我们把β划分为M等分,每一份长度为$\Delta\tau=\beta/M$,如果我们把β看做是虚时间[19],那么$\Delta\tau$则是虚时间隔.这种操作就是著名的Trotter-Suzuki分解.

那么配分函数的Trotter分解形式是

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}=\mathrm{Tr}[e^{-\Delta\tau\hat{H}}e^{-\Delta\tau\hat{H}}...e^{-\Delta\tau\hat{H}}e^{-\Delta\tau\hat{H}}] \tag{8.155}$$

对于其中某个$e^{-\Delta\tau\hat{H}}$,近似有

$$e^{-\Delta\tau\hat{H}}=e^{\Delta\tau J\hat{\sigma}^z}e^{\Delta\tau h\hat{\sigma}^x}+O((\Delta\tau)^2) \tag{8.156}$$

[19]回忆量子力学中的时间演化算符是$e^{-i\hat{H}t/\hbar}$,而统计力学的中的密度矩阵(Boltzman权重因子)是$e^{-\beta\hat{H}}/\mathcal{Z}$,则可有等效关系$\beta\sim it$, 也就是说温度的倒数就像是虚数轴上的时间,即虚时.

这样

$$e^{\Delta\tau J\hat{\sigma}^z}e^{\Delta\tau h\hat{\sigma}^x}=\sum_{\sigma,\sigma'}e^{\Delta\tau J\hat{\sigma}^z}|\sigma'\rangle\langle\sigma'|e^{\Delta\tau h\hat{\sigma}^x}|\sigma\rangle\langle\sigma|=e^{\frac{1}{2}\ln\frac{\sinh 2\Delta\tau h}{2}}\sum_{\sigma,\sigma'}e^{\Delta\tau J\sigma'}e^{\frac{\sigma\sigma'}{2}\ln\coth\Delta\tau h}|\sigma'\rangle\langle\sigma| \tag{8.157}$$

这里利用了准备部分得到的公式$\langle\sigma'|e^{a\hat{\sigma}^x}|\sigma\rangle=e^{\frac{1}{2}\ln\frac{\sinh 2a}{2}}e^{\frac{\sigma\sigma'}{2}\ln\coth a}$.令

$$\Delta\tau J_\tau\equiv\frac{1}{2}\ln\coth\Delta\tau h,\quad C_\tau\equiv e^{\frac{1}{2}\ln\frac{\sinh 2\Delta\tau h}{2}} \tag{8.158}$$

我们可以得到

$$e^{\Delta\tau J\hat{\sigma}^z}e^{\Delta\tau h\hat{\sigma}^x}=C_\tau\sum_{\sigma,\sigma'}e^{\Delta\tau(J\sigma'+J_\tau\sigma\sigma')}|\sigma'\rangle\langle\sigma| \tag{8.159}$$

同理对每一个$e^{-\Delta\tau\hat{H}}$都做同样的操作,我们可以得到如下的形式

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= (C_\tau)^M\sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M)}\sum_{\sigma'(1)\ldots\sigma'(M)}\mathrm{Tr}[e^{\Delta\tau(J\sigma'(M)+J_\tau\sigma(M)\sigma'(M))}|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(M)| \qquad (8.160)\\ &\times\ e^{\Delta\tau(J\sigma'(M-1)+J_\tau\sigma(M-1)\sigma'(M-1))}|\sigma'(M-1)\rangle\langle\sigma(M-1)|\ldots e^{\Delta\tau(J\sigma'(1)+J_\tau\sigma(1)\sigma'(1))}|\sigma'(1)\rangle\langle\sigma(1)|]\\ &= (C_\tau)^M\sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M)}\sum_{\sigma'(1)\ldots\sigma'(M)}e^{\sum_{m=1}^M\Delta\tau(J\sigma'(m)+J_\tau\sigma(m)\sigma'(m))}\\ &\times\ \mathrm{Tr}[|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(M)|\sigma'(M-1)\rangle\langle\sigma'(M-1)|\ldots\langle\sigma(m)|\sigma'(m-1)\rangle\ldots\langle\sigma(2)|\sigma'(1)\rangle\langle\sigma(1)|] \qquad (8.161)\end{aligned}$$

由于态的正交性,可以看到对每个$m(2\le m\le M)$存在$\sigma'(m-1)=\sigma(m)$.这样可消去$M-1$个σ'得

$$\mathcal{Z}=(C_\tau)^M\sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M)}\sum_{\sigma'(M)}e^{\sum_{m=1}^{M-1}\Delta\tau(J\sigma(m+1)+J_\tau\sigma(m)\sigma(m+1))}e^{\Delta\tau(J\sigma'(M)+J_\tau\sigma(M)\sigma'(M))}\mathrm{Tr}|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(1)|$$

又由于取迹操作,这要求$\sigma(1)=\sigma'(M)$,如果我们定义$\sigma'(M)=\sigma(M+1)$也就是$\sigma(M+1)=\sigma(1)$或者说$\sigma(m)$满足周期条件,这样所有的态矢量都被消去,体系的配分函数具有如下形式

$$\mathcal{Z}=(C_\tau)^M\sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M),\sigma(M+1)=\sigma(1)}e^{\sum_{m=1}^M\Delta\tau(J\sigma(m)+J_\tau\sigma(m)\sigma(m+1))}=(C_\tau)^M\sum_{\{\sigma\}}e^{-\beta H_{eff}} \tag{8.162}$$

这等价于一个有效经典哈密顿的配分函数,其对应的哈密顿量是(令$m=l$)

$$H_{eff}=\sum_{l=1}^M\left[-\frac{J}{M}\sigma(l)-\frac{J_\tau}{M}\sigma(l)\sigma(l+1)\right]=\sum_{l=1}^M[-h_{eff}\sigma(l)-J_{eff}\sigma(l)\sigma(l+1)] \tag{8.163}$$

这里定义了等效外场$h_{eff}=J/M$和等效耦合$J_{eff}=J_\tau/M$.可以看到,此时单个量子$S=1/2$ 自旋对应的恰好是一个经典的一维Ising模型,量子模型中的横场

部分对应于Ising模型的Ising耦合,而量子模型中的耦合部分对应于Ising模型的外场部分.此外,量子模型中的$\hat{\sigma}^z$直接变为了相应的经典量σ,而横场部分则变为了(虚时意义上的)动力学部分,并且时间方向上具有周期性($\sigma(1)=\sigma(M+1)$).总结起来,我们发现单个$S=1/2$量子自旋的配分函数与一个一维经典Ising 模型的配分函数相等:

$$\boxed{\mathcal{Z}_{S=1/2}=\mathcal{Z}_{d=1,Ising}} \tag{8.164}$$

简单来看,我们发现0维的量子问题对应于一维的经典统计问题.需要强调的是,这里的对应实际上是两个系统配分函数相等,这意味着两者的热力学性质一致.作为例子,既然经典一维Ising模型对应单个自旋,而单个自旋不会发生相变,由此我们可以判断一维经典Ising模型也没有相变.

物理量的统计平均计算

如果我们要求体系能量的统计平均值$\langle\hat{H}\rangle$,这相当于要计算$\hat{\sigma}^x$和$\hat{\sigma}^z$的统计平均:

$$\langle\hat{\sigma}^x\rangle=\frac{\mathrm{Tr}\hat{\sigma}^x e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}},\langle\hat{\sigma}^z\rangle=\frac{\mathrm{Tr}\hat{\sigma}^z e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}} \tag{8.165}$$

对于分母$\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}$,这就是配分函数自身,其结果已知.对于分子$\mathrm{Tr}\hat{\sigma}^z e^{-\beta\hat{H}}$,仿照配分函数的处理方式,我们发现

$$(C_\tau)^M\sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M)}\sum_{\sigma'(M)}e^{\sum_{m=1}^{M-1}\Delta\tau(J\sigma(m+1)+J_\tau\sigma(m)\sigma(m+1))}e^{\Delta\tau(J\sigma'(M)+J_\tau\sigma(M)\sigma'(M))}\mathrm{Tr}[\hat{\sigma}^z|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(1)|]$$

而求迹计算的结果是

$$\mathrm{Tr}[\hat{\sigma}^z|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(1)|]=\sum_{\tilde{\sigma}}\langle\tilde{\sigma}|\hat{\sigma}^z|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(1)|\tilde{\sigma}\rangle=\sigma'(M)\langle\sigma(1)|\sigma'(M)\rangle=\delta_{\sigma(1),\sigma'(M)}\sigma(1) \tag{8.166}$$

因此$\langle\hat{\sigma}^z\rangle$的分子是

$$(C_\tau)^M\sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M)}e^{\sum_{m=1}^{M}\Delta\tau(J\sigma(m+1)+J_\tau\sigma(m)\sigma(m+1))}\sigma(1)$$

即

$$\begin{aligned}\langle\hat{\sigma}^z\rangle &= \frac{\mathrm{Tr}\hat{\sigma}^z e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}}=\frac{(C_\tau)^M\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)}\sigma(1)e^{\beta\sum_{l=1}^{M}(\frac{J}{M}\sigma(l)+\frac{J_\tau}{M}\sigma(l)\sigma(l+1))}}{(C_\tau)^M\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)}e^{\beta\sum_{l=1}^{M}(\frac{J}{M}\sigma(l)+\frac{J_\tau}{M}\sigma(l)\sigma(l+1))}}\\ &= \frac{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)}\sigma(1)e^{-\beta H_{eff}}}{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)}e^{-\beta H_{eff}}}\end{aligned} \tag{8.167}$$

另一方面,对于$\langle\hat{\sigma}^x\rangle$的分子有

$$(C_\tau)^M\sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M)}\sum_{\sigma'(M)}e^{\sum_{m=1}^{M-1}\Delta\tau(J\sigma(m+1)+J_\tau\sigma(m)\sigma(m+1))}e^{\Delta\tau(J\sigma'(M)+J_\tau\sigma(M)\sigma'(M))}\mathrm{Tr}[\hat{\sigma}^x|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(1)|]$$

$$\mathrm{Tr}[\hat{\sigma}^x|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(1)|] = \sum_{\tilde{\sigma}}\langle\tilde{\sigma}|\hat{\sigma}^x|\sigma'(M)\rangle\langle\sigma(1)|\tilde{\sigma}\rangle = \langle\sigma(1)|-\sigma'(M)\rangle = \delta_{\sigma(1),-\sigma'(M)} \tag{8.168}$$

则

$$(C_\tau)^M \sum_{\sigma(1)\ldots\sigma(M)} e^{\sum_{m=1}^{M}\Delta\tau(J\sigma(m+1)+J_\tau\sigma(m)\sigma(m+1))} e^{-2\Delta\tau(J\sigma(1)+J_\tau\sigma(M)\sigma(1))}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}\langle\hat{\sigma}^x\rangle &= \frac{\mathrm{Tr}\hat{\sigma}^x e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}} = \frac{(C_\tau)^M\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{\beta\sum_{l=1}^{M}(\frac{J}{M}\sigma(l)+\frac{J_\tau}{M}\sigma(l)\sigma(l+1))} e^{-2\Delta\tau(J\sigma(1)+J_\tau\sigma(M)\sigma(1))}}{(C_\tau)^M\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{\beta\sum_{l=1}^{M}(\frac{J}{M}\sigma(l)+\frac{J_\tau}{M}\sigma(l)\sigma(l+1))}} \\ &= \frac{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=-\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}} e^{-2\Delta\tau(J\sigma(1)+J_\tau\sigma(M)\sigma(1))}}{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}}}\end{aligned} \tag{8.169}$$

在实际的蒙特卡洛数值模拟中,我们重写以上形式

$$\langle\hat{\sigma}^z\rangle = \frac{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}}\frac{\sigma(1)e^{-\beta H_{eff}}}{e^{-\beta H_{eff}}}}{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}}} = \frac{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}}\langle\sigma(1)\rangle_{cl}}{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}}} \tag{8.170}$$

$$\langle\sigma(1)\rangle_{cl} = \frac{\sigma(1)e^{-\beta H_{eff}}}{e^{-\beta H_{eff}}} = \sigma(1), \sigma(1) = \sigma(M+1) \tag{8.171}$$

$$\langle\hat{\sigma}^x\rangle = \frac{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}} e^{-2\Delta\tau(J\sigma(1)+J_\tau\sigma(M)\sigma(1))}}{\sum_{\{\sigma\},\sigma(1)=\sigma(M+1)} e^{-\beta H_{eff}}} \tag{8.172}$$

这样相应的物理量估计值是

$$\langle\hat{\sigma}^z\rangle \approx \frac{1}{\Omega}\sum_{\{\sigma\}}\sigma(1), \quad \langle\hat{\sigma}^x\rangle \approx \frac{1}{\Omega}\sum_{\{\sigma\}} e^{-2\Delta\tau(J\sigma(1)+J_\tau\sigma(M)\sigma(1))} \tag{8.173}$$

由此能够得到这些量的统计平均值.[20]

$$\langle\hat{H}\rangle = -J\langle\hat{\sigma}^z\rangle - h\langle\hat{\sigma}^x\rangle \tag{8.174}$$

一般情况的对应

采用同样的处理方式,我们立即得到d维量子Ising模型与$d+1$维经典Ising模型对应,即它们的配分函数相同:

$$\boxed{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_{d,QIM}} = \mathcal{Z}_{d,QIM} = \mathcal{Z}_{d+1,CIM} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{d+1,CIM}}} \tag{8.175}$$

这里

$$\hat{H}_{d,QIM} = -J\sum_{<j,k>}\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_k^z - h\sum_j\sigma_j^x \rightleftharpoons H_{d+1,CIM} = -\frac{J}{M}\sum_l\sum_{<j,k>}\sigma_j(l)\sigma_k(l) - \frac{J_\tau}{M}\sum_{l,j}\sigma_j(l)\sigma_j(l+1) \tag{8.176}$$

[20]数值验证似乎说明$e^{-2\Delta\tau(J\sigma(1)+J_\tau\sigma(M)\sigma(1))}$改成$e^{-2\Delta\tau J_\tau\sigma(M)\sigma(1)}$也不影响最后的计算结果.

方法	平均场	微扰论	对偶变换	精确解	量子蒙特卡洛
特性	近似	近似	精确	精确	精确
高维适用性	√	√	???	???	√

Table 8.1: 一维量子Ising模型处理方法一览.

可以看到经典模型的第一项反映的是空间上的耦合,即原始量子模型中的Ising耦合,而第二项则代表时间上的耦合,来自于量子模型的横场部分,即自旋翻转部分.也就是说如果用经典的语言来理解量子系统,那么自旋翻转等效于给体系添加了时间上的关联,使得体系的有效维度从d维增加到$d+1$维.

- 一般的说,d维量子系统对应于$d+1$维经典统计系统,对于全同玻色子或费米子系统的证明需要路径积分形式.

- 显然,一维横场量子Ising模型等价于二维经典Ising模型,由于后者在有限温度有相变发生,那么前者也会有相变,只不过此时相变只发生在零温.(注意相变只有无穷大体系才会真正出现,因此要求体系任意维度都应趋于无穷大,对于等效的Ising模型,这要求虚时划分$M\to\infty$同时参数J_{eff},h_{eff}应为有限值,这要求$\beta\to\infty$,也就是$T=0$.) 这样我们就可以理解先前计算中量子Ising模型的临界指数与经典模型相同的原因,即两者是完全对应的模型.

- 但是,注意量子系统并不完全等价于相应的经典模型.在一般的统计经典模型中,空间维度上的边界条件具有任意性,可以周期或开边界,但是对应得到的经典模型在虚时间方向上具有周期性.此外对应还会导致一些经典统计中不存在的元素出现,例如Berry相位或者各种拓扑项(θ 相).

一维Ising模型的转移矩阵解与对应*

我们已经看到单个量子自旋可以对应一个等效的一维经典Ising模型,在这一小节,我们把思路反过来,即考虑如何从经典模型对应到量子模型.我们考虑由N_s个取值为±1的经典自旋变量构成的一维经典Ising模型(简单起见假定周期边界$\sigma_j=\sigma_{j+N_s}$):

$$H=-\tilde{J}\sum_j\sigma_j\sigma_{j+1}-\tilde{h}\sum_j\sigma_j=-\sum_j\left(\tilde{J}\sigma_j\sigma_{j+1}+\frac{\tilde{h}}{2}(\sigma_j+\sigma_{j+1})\right)\quad(8.177)$$

其配分函数是

$$\mathcal{Z}=\sum_{\{\sigma_j=\pm1\}}e^{-\beta H}=\sum_{\{\sigma_j=\pm1\}}\prod_j e^{\beta\tilde{J}\sigma_j\sigma_{j+1}}e^{\beta\tilde{h}/2(\sigma_j+\sigma_{j+1})}\equiv\sum_{\{\sigma_j=\pm1\}}\prod_j T(\sigma_j,\sigma_{j+1})\quad(8.178)$$

这里定义了因子

$$T(\sigma_j,\sigma_{j+1})=e^{\beta\tilde{J}\sigma_j\sigma_{j+1}}e^{\beta\tilde{h}/2(\sigma_j+\sigma_{j+1})} \tag{8.179}$$

如果我们把所有可能的T理解为在两个虚拟的(量子)两态系统间的矩阵,那么有

$$T(\sigma_j,\sigma_{j+1})=\left(\begin{array}{cc} e^{\beta\tilde{J}}e^{\beta\tilde{h}} & e^{-\beta\tilde{J}} \\ e^{-\beta\tilde{J}} & e^{\beta\tilde{J}}e^{-\beta\tilde{h}} \end{array}\right)_{\sigma_j,\sigma_{j+1}}\equiv\langle\sigma_j|\hat{T}|\sigma_{j+1}\rangle \tag{8.180}$$

这样我们发现配分函数可以写成一系列矩阵相乘的迹:

$$\mathcal{Z}=\sum_{\{\sigma\}}\langle\sigma_1|\hat{T}|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|\hat{T}...|\sigma_{N_s}\rangle\langle\sigma_{N_s}|\hat{T}|\sigma_1\rangle=\mathrm{Tr}[\overbrace{\hat{T}_1...\hat{T}_1\hat{T}_1}^{N_s}]=\mathrm{Tr}[\hat{T}^{N_s}] \tag{8.181}$$

$\hat{T}$矩阵就是所谓的转移矩阵.注意到矩阵求迹是独立于基矢选取的,因此我们可以直接选择使得转移矩阵对角化的基矢来计算配分函数,即可以用其本征值来进行计算.在原先的自旋基矢下有

$$\hat{T}=\left(\begin{array}{cc} e^{\beta\tilde{J}}e^{\beta\tilde{h}} & e^{-\beta\tilde{J}} \\ e^{-\beta\tilde{J}} & e^{\beta\tilde{J}}e^{-\tilde{h}} \end{array}\right) \tag{8.182}$$

那么这个2×2矩阵的本征值是$\lambda_\pm=e^{\beta\tilde{J}}\cosh(\beta\tilde{h})\pm\sqrt{e^{2\beta\tilde{J}}\sinh^2(\beta\tilde{h})+e^{-2\beta\tilde{J}}}$,相应的配分函数则是

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}\left(\begin{array}{cc} \lambda_+^{N_s} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N_s} \end{array}\right)=\lambda_+^{N_s}+\lambda_-^{N_s}=\lambda_+^{N_s}\left(1+\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N_s}\right) \tag{8.183}$$

当我们考虑热力学极限,即格点数目趋于无穷大时,配分函数由大的本征值决定

$$\mathcal{Z}\simeq\lambda_+^{N_s} \tag{8.184}$$

相应的自由能密度是

$$\frac{\mathcal{F}}{N_s}=-T\ln\lambda_+=-T\ln(e^{\beta\tilde{J}}\cosh(\beta\tilde{h})+\sqrt{e^{2\beta\tilde{J}}\sinh^2(\beta\tilde{h})+e^{-2\beta\tilde{J}}}) \tag{8.185}$$

如果考虑外场为零的情况($\tilde{h}=0$),那么自由能密度是

$$\frac{\mathcal{F}}{N_s}=-T\ln(e^{\beta\tilde{J}}+e^{-\beta\tilde{J}})=-T\ln[2\cosh(\beta\tilde{J})] \tag{8.186}$$

注意到cosh函数并没有有限β下的奇异性,这说明自由能密度没有奇异性,也就是一维经典Ising 链没有热力学相变发生.类似地,我们也可以用转移矩阵的形式计算自旋平均值$\langle\sigma_j\rangle$和自旋关联函数$\langle\sigma_j\sigma_{j+r}\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle\sigma_j\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{\{\sigma\}}\langle\sigma_1|\hat{T}|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|\hat{T}...\langle\sigma_j|\hat{\sigma}^z\hat{T}|\sigma_{j+1}\rangle...|\sigma_{N_s}\rangle\langle\sigma_{N_s}|\hat{T}|\sigma_1\rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}[\hat{T}^{j-1}\hat{\sigma}^z\hat{T}^{N_s-(j-1)}]=\frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}[\hat{T}^{N_s}\sigma^z]\end{aligned} \tag{8.187}$$

$$\begin{aligned}\langle\sigma_j\sigma_{j+r}\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{\{\sigma\}}\langle\sigma_1|\hat{T}|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|\hat{T}...\langle\sigma_j|\hat{\sigma}^z\hat{T}|\sigma_{j+1}\rangle...\langle\sigma_{j+r}|\hat{\sigma}^z\hat{T}|\sigma_{j+r+1}\rangle...|\sigma_{N_s}\rangle\langle\sigma_{N_s}|\hat{T}|\sigma_1\rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}[\hat{T}^{j-1}\hat{\sigma}^z\hat{T}^r\hat{\sigma}^z\hat{T}^{N_s-(j+r-1)}] = \frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}[\hat{\sigma}^z\hat{T}^r\hat{\sigma}^z\hat{T}^{N_s-r}]. \end{aligned} \tag{8.188}$$

当$\tilde{h}=0$时,我们可以用幺正矩阵$\hat{U}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$对角化$\hat{T}$,这样就可以用其本征值进行计算.由此可以算得

$$\langle\sigma_j\rangle=0,\quad \langle\sigma_j\sigma_{j+r}\rangle=\frac{\lambda_+^{N_s-r}\lambda_-^r+\lambda_-^{N_s-r}\lambda_+^r}{\lambda_+^{N_s}+\lambda_-^{N_s}}. \tag{8.189}$$

当$N_s >> r$时,我们发现关联函数具有指数衰减形式,$\langle\sigma_j\sigma_{j+r}\rangle \sim (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^r = e^{-r/\xi}$.这里自旋间的关联长度是$\xi=\frac{1}{\ln(\lambda_+/\lambda_-)}$.

- 实际上,上述转移矩阵形式对于任意具有最近邻相互作用的一维晶格体系都适用.
- 注意到若磁场可以取虚数值,那么当$e^{2\beta\tilde{J}}\sinh^2(\beta\tilde{h})+e^{-2\beta\tilde{J}}=0$时$\lambda_+=\lambda_-$,这样关联长度发散,这说明体系出现了相变,在文献中称为杨-李边界奇异性(Yang-Lee edge singularity).[21]

让我们回到配分函数的讨论.注意到配分函数的转移矩阵表示,对比于先前单个量子自旋配分函数的Troter展开,我们可以认为

$$\hat{T}\equiv e^{-\Delta\tau\hat{H}} \tag{8.190}$$

也就是转移矩阵可以对应于量子哈密顿量.特别是因为$\hat{T}=\hat{T}_1\hat{T}_2$(这里我们采用更为方便的非对称形式),并且转移矩阵是2×2矩阵,则可以对应于一个量子自旋的$\hat{\sigma}$矩阵:

$$\hat{T}_1\equiv e^{-\Delta\tau a\hat{\sigma}_x};\quad \hat{T}_2\equiv e^{-\Delta\tau b\hat{\sigma}_z} \tag{8.191}$$

这里的系数可以通过比较两边矩阵元定出,即有

$$\begin{pmatrix}e^{\beta\tilde{h}} & 0\\ 0 & e^{-\beta\tilde{h}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e^{-\Delta\tau b} & 0\\ 0 & e^{+\Delta\tau b}\end{pmatrix}\Rightarrow b=-\frac{\beta}{\Delta\tau}\tilde{h} \tag{8.192}$$

$$\hat{T}_1=e^{\beta\tilde{J}}\hat{I}+e^{-\beta\tilde{J}}\hat{\sigma}_x=e^{\ln[2\cosh(\beta\tilde{J})]\hat{\sigma}_x}=e^{-\Delta\tau a\hat{\sigma}_x}\Rightarrow a=-\frac{1}{\Delta\tau}\ln[2\cosh(\beta\tilde{J})] \tag{8.193}$$

这样我们发现对应的量子模型就是一个$S=1/2$量子自旋:

$$\hat{H}=a\hat{\sigma}_x+b\hat{\sigma}_z=-\frac{1}{\Delta\tau}\ln[2\cosh(\beta\tilde{J})]\hat{\sigma}_x-\frac{\beta}{\Delta\tau}\tilde{h}\hat{\sigma}_z \tag{8.194}$$

[21] [Fisher,Yang-Lee Edge Singularity and ϕ^3 Field Theory,Phys.Rev.Lett. **40**,1610(1978)]

拓扑量子相变:当拓扑遇见量子涨落*

先前的讨论中我们发现一般的相变不论是经典还是量子相变,基本都涉及对称性的破缺并且都有明确的序参量. 唯一的例外是KT相变,在这里我们将讨论更多拓扑相变的例子,它们的相变与KT相变的差异在于相变发生在零温,因此属于量子相变研究的范畴.

通常的拓扑量子相变或者说拓扑相实际上有以下三种涵义:

- 费米面拓扑的变化,即Lifshitz相变,强调的是费米面整体结构的变化.
- 拓扑绝缘体,超导体,Wely半金属,此时拓扑的含义是体系的单粒子波函数(Bloch态,能带结构)在参数空间,这里一般是第一布里渊区具有特殊的结构,根据此结构可以定义相应的拓扑不变量.
- 分数量子霍尔效应,手性自旋液体,有能隙的Z_2自旋液体,对于这些系统,拓扑指的是多体基态波函数具有非平凡的简并.

当然,实际系统中的区分并没有那么严格,一个系统有可能即有基态波函数的简并,又在动量空间具有特殊结构,在相变前后费米面有明显的结构变化.

自由费米子的Lifshitz相变*

我们考虑一个d维空间中的无自旋自由费米气体系统,体系的哈密顿量是熟悉的形式

$$\hat{H}=\sum_k\left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k \tag{8.195}$$

在$T=0$时费米子占据数是

$$\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\rangle_{T=0}=\theta\left(\mu-\frac{k^2}{2m}\right) \tag{8.196}$$

我们发现当$\mu>0$时,费米面以下总有有限的费米子占据,但是当$\mu<0$时体系就没有任何费米子占据了.显然,$\mu=0$是一个临界值,区分了两种完全不同的状态,前者是自由费米气体而后者类似于能带绝缘体.体系存在通过调节化学势μ而导致的量子相变,这通常称作密度驱动的量子相变,当涉及费米面的变化时也叫做Lifshitz相变.

可以算得系统在$\mu>0$时的总能量密度是

$$e_{tot}=\frac{E}{V}=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)\theta\left(\mu-\frac{k^2}{2m}\right)=\frac{S_d}{(2\pi)^d}(2m)^{\frac{d}{2}}\mu^{\frac{d+2}{2}}\left(\frac{1}{d+2}-\frac{1}{d}\right)\propto\mu^{\frac{d+2}{2}} \tag{8.197}$$

而总粒子数密度为

$$n_{tot}=\frac{N}{V}=\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\theta\left(\mu-\frac{k^2}{2m}\right)=\frac{S_d}{(2\pi)^d}\int_0^{\sqrt{2m\mu}}k^{d-1}dk=\frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{(2m\mu)^{\frac{d}{2}}}{d}\propto\mu^{\frac{d}{2}} \tag{8.198}$$

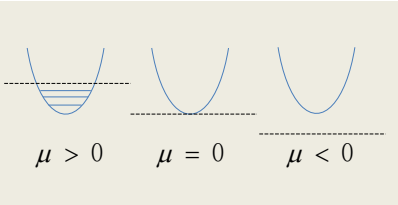


Figure 8.16: 自由费米子的Lifshitz相变示意图,虚线代表等效化学势μ的位置.$\mu > 0$和$\mu < 0$分别是费米气体和真空态,具有不同的费米面拓扑,$\mu = 0$是Lifshitz相变点,费米面收缩为一个点,物理量(电荷压缩率)在该点显示奇异性.

当然,基态时的n_{tot}也可通过总能量密度关于化学势的一阶导数$n_{tot} = -\frac{\partial e_{tot}}{\partial \mu}$ 直接获得.为了判断相变的阶数,我们需要计算总能量密度关于化学势的二阶导数,也就是系统的电荷极化率$\chi_c = \frac{\partial n_{tot}}{\partial \mu} = -\frac{\partial^2 e_{tot}}{\partial^2 \mu}$,当$\mu > 0$ 时为

$$\chi_c = \frac{\partial n_{tot}}{\partial \mu} = \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{(2m)^{\frac{d}{2}}}{2} \mu^{\frac{d}{2}-1} \propto \mu^{\frac{d}{2}-1} \tag{8.199}$$

而$\mu < 0$时是绝缘体而有$\chi_c = 0$.可以看到,当$d = 1$时,即一维自由费米子系统,电荷极化率在$\mu = 0$发散,而在$d = 2, 3$时都没有发散行为,这说明电荷极化率并不是判断是否是二级相变的良好依据.

物理上更有效或者与实验直接相关的量是电荷压缩率$\kappa_c = \frac{\chi_c}{n_{tot}^2}$,

$$\kappa_c = -\frac{1}{n_{tot}^2} \frac{\partial^2 e_{tot}}{\partial^2 \mu} = \frac{(2\pi)^d}{S_d} \frac{d^2}{2(2m)^{d/2}} \frac{1}{\mu^{\frac{d}{2}+1}} \propto \frac{1}{\mu^{\frac{d}{2}+1}}. \tag{8.200}$$

可以看到,在所有空间维度,作为总能量密度二阶导数的电荷压缩率在相变点发散,因此这里的量子相变是二级相变.

根据三个物理量e_{tot}, n_{tot}, χ_c,我们可以得到三个临界指数$\alpha = \gamma = 1 - \frac{d}{2}, \beta = \frac{d}{2}$,(在这里我们选择总粒子数密度$n_{tot}$ 作为序参量,尽管其并未破缺任何对称性)注意到这三个临界指数满足标度律$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$.当体系处于相变点时$\mu = 0$并且能量密度与温度满足

$$e_{tot}(T) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{k^2/(2m)}{e^{k^2/(2mT)} + 1} = \frac{2^{d/2-1} m^{d/2} S_d}{(2\pi)^d} T^{d/2+1} \int_0^\infty \frac{x^{d/2} dx}{e^x + 1} \propto T^{\frac{d}{2}+1} \tag{8.201}$$

换句话说Lifshitz临界点在有限温度时会有幂律型的温度依赖的热力学信号($C_v \sim T^{d/2}$), 这可能对应于实验系统中的某些反常热力学行为.另外注意到能量的表达式中$k^2 \sim \mu$,这样我们发现关联长度是$\xi \propto \mu^{-1/2}$而相应的临界指数是$\nu = 1/2$.

注意到$\mu = 0$时费米子的色散关系是$k^2/(2m)$,因此其动力学临界指数为$z = 2$.可以看到,α, ν, z 满足量子超标度关系$2 - \alpha = \nu(d + z)$,这说明任意空间维度的自由费米子Lifshitz 相变都满足量子超标度律.

- 任何相互作用费米子系统由化学势(密度)调控的Lifshitz相变至少是二级相变.

这是因为,随着化学势的变化,能量密度不会有奇异性(发散),能量密度关于化学势的一阶导数,即粒子密度也不会有发散.这样,奇异性最早能出现在能量密度对化学势的二阶导数,也就是电荷压缩率或者电荷极化率中.这个结论对任意相互作用费米子系统都成立,与维度等也无关.当然,由其他物理量调节的Lifshitz相变是否是二级相变就不一定,依赖于具体系统和参数.

最后,我们把自由费米子Lifshitz相变的临界指数总结如下:

$$\boxed{\alpha = 1 - \frac{d}{2}, \quad \beta = \frac{d}{2}, \quad \gamma = 1 - \frac{d}{2}, \quad \nu = \frac{1}{2}, \quad z = 2} \tag{8.202}$$

采用标度/量纲分析,我们可以进一步理解Lifshitz相变.出发点是电子系统的作用量:

$$S = \int dtd^dx\psi^\dagger(i\partial_t + \frac{\nabla^2}{2m})\psi \tag{8.203}$$

由量纲分析(以长度量纲为准,即$\dim[x] = 1$)可知,为了使S无量纲那么有$\dim[t] = 2, \dim[\psi] = -\frac{d}{2}$.由此我们发现时间与空间的标度是不同的,即$\dim[t] = 2\dim[x]$,这里的因子2就是动力学临界指数$z$.下面我们计入相互作用,根据对称性和局域性的要求,最简单的非零相互作用是

$$g_1 \int dtd^dx\psi^\dagger(x)\nabla\psi(x)\psi^\dagger(x)\nabla\psi(x) \tag{8.204}$$

我们发现$\dim[g_1] = d$.这说明在标度变换$x' = \lambda x$下有$g_1' = \lambda^d g_1$.当$\lambda \to 0$时耦合系数$g_1' \to 0$.因此只要g_1本身是小量,那么这个相互作用在Lifshitz相变点就可以忽略.当然,如果考虑由集体模式或规范场诱导的非局域相互作用,例如

$$g_2 \int dtd^dxd^dy\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(y)\psi(y)\psi(x) \tag{8.205}$$

那么有$\dim[g_2] = -2$,因此相互作用会影响相变点的行为.

- 局域的四费米子相互作用并不影响Lifshitz相变点.

Lifshitz相变的一个例子:磁场下的一维量子XY模型*

作为Lifshitz相变的例子,我们考虑外加z方向磁场h下的一维量子XY模型:

$$\hat{H} = -J\sum_j(\hat{S}_j^x\hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y\hat{S}_{j+1}^y) - h\sum_j\hat{S}_j^z = -\frac{J}{2}\sum_j(\hat{S}_j^+\hat{S}_{j+1}^- + \hat{S}_j^-\hat{S}_{j+1}^+) - h\sum_j\hat{S}_j^z \tag{8.206}$$

利用标准的Jordan-Wigner变换可得

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{J}{2}\sum_j(\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_{j+1}+\hat{f}_{j+1}^\dagger\hat{f}_j)-h\sum_j(\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j-\frac{1}{2}) \\ &= \sum_k(-J\cos k_x-h)\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k+\frac{h}{2}N_s \\ &= \sum_k\varepsilon_k\hat{f}_k^\dagger\hat{f}_k+\frac{h}{2}N_s \end{aligned} \tag{8.207}$$

这里费米子的色散关系修正为$\varepsilon_k=-J\cos k_x-h$.可以看到如果磁场大于一维自由费米子的能带半宽$W=|J|$,那么基态时系统是没有任何费米子填充的绝缘体或者是费米子完全填满能带的绝缘体.另一方面,当$|h|<W$时,费米子部分填满能带,此时显示金属性的基态,因此$|h|=W$恰好是系统的金属–绝缘体相变点,也就是Lifshitz相变点,因为费米面的拓扑从金属时的费米点随外磁场的增大而逐渐消失.

我们可以考虑系统的基态能密度,即

$$e_g=\frac{E_g}{N_s}=\frac{1}{N_s}\sum_k\varepsilon_k\theta(-\varepsilon_k)+\frac{h}{2}=\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk_x}{2\pi}(-J\cos k_x-h)\theta(J\cos k_x+h)+\frac{h}{2} \tag{8.208}$$

令$h=gJ$,并设$J>0$,那么有

$$e_g=\frac{-J}{\pi}\int_0^{\pi}dk_x(\cos k_x+g)\theta(\cos k_x+g)+\frac{h}{2} \tag{8.209}$$

当$g>1$,即系统处于绝缘体时,阶跃函数$\theta(x)$恒为一,积分部分的能量贡献为$-h$,因此相应的基态能量密度为$e_g=-\frac{h}{2}=-\frac{Jg}{2}$,在物理上这对应着强磁场时所有自旋都沿着$z$方向排列,因此能量密度是$-h\times\frac{1}{2}=-\frac{h}{2}$.当$g<-1$时,阶跃函数$\theta(x)$恒为零,相应的基态能量密度为$e_g=\frac{h}{2}=\frac{Jg}{2}$,物理上对应强磁场时所有自旋都沿负$z$ 轴排列.

当$|g|<1$时,$k<k_F$区间对积分贡献非零,这里的费米动量k_F由阶跃函数的零点确定,即$\cos k_F+g=0$, 这样我们发现

$$e_g=\frac{-J}{\pi}\int_0^{k_F}dk_x(\cos k_x+g)+\frac{h}{2}=-\frac{J}{\pi}(\sin k_F+k_Fg)+\frac{h}{2}=-\frac{J}{\pi}\left[\sin\cos^{-1}(-g)+\cos^{-1}(-g)g\right]+\frac{Jg}{2}. \tag{8.210}$$

注意到这里出现了$\cos^{-1}x$,其关于x的一阶导数为$\frac{d\cos^{-1}x}{dx}=-\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$.

零温下系统的磁化强度$m=\frac{1}{N_s}\sum_j(\langle\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j\rangle-\frac{1}{2})=-\frac{\partial e_g}{\partial h}$的结果是

$$m=\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk_x}{2\pi}\theta(\cos k_x+g)-\frac{1}{2}=\left\{\begin{array}{r}-\frac{1}{2},\quad g<-1\\ \frac{1}{\pi}\cos^{-1}(-g)-\frac{1}{2},\quad |g|\leqslant 1\\ +\frac{1}{2},\quad g>1\end{array}\right\} \tag{8.211}$$

因此,$|g|\leqslant 1$的态用自旋语言描述就是部分极化的铁磁态,而$|g|\leqslant 1$ 对应完全极

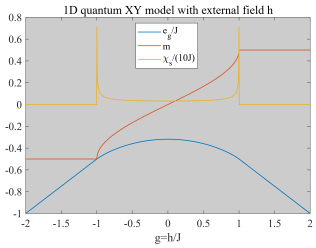


Figure 8.17: 一维量子XY模型在横场h下的物理量随$g=h/J$ 的变化,注意磁化率χ_s在量子相变点$g=g_c=\pm1$处的发散.

化的铁磁态.与之对应的自旋磁化率为

$$\chi_s=\frac{\partial m}{\partial h}=\frac{\partial m}{\partial g}\frac{\partial g}{\partial h}=\left\{\begin{array}{ll}0, & |g|>1\\ \frac{1}{J\pi}\frac{1}{\sqrt{1-g^2}}, & |g|\leqslant 1\end{array}\right\}, \tag{8.212}$$

注意到$g=\pm1$处χ_s发散,这说明这两个点都是量子相变点.为了得到系统的临界指数,可以在$g=g_c$处展开e_g,m,χ_s.例如,在$g\to g_c=1$ 时,

$$\chi_s\to\frac{1}{J\pi}\frac{1}{2g_c}\frac{1}{\sqrt{g_c-g}}\propto(g-g_c)^{-1/2}, \tag{8.213}$$

这样临界指数$\gamma=1/2$,同理可得$\alpha=\beta=1/2$.[22]对比上一节讨论的自由费米子Lifshitz相变的临界指数$\alpha=\gamma=1-\frac{d}{2},\beta=\frac{d}{2}$, 可以看到磁场下的一维量子XY模型确实显示自由费米子Lifshitz相变的临界行为,特别是磁化率在临界点的发散行为在实验探测中是重要的信号.[23]

图8.17显示了能量密度e_g,磁化m以及自旋磁化率χ_s随参数$g=h/J$的变化情况.e_g和m在$g_c=\pm1$都是连续的,而χ_s 显示明显的发散行为,这与我们在相变点附近的近似讨论是一致的.

- 磁场下的一维量子XY模型是相互作用量子多体系统显示Lifshitz相变的典型例子.(尽管从自旋的角度来说并没有费米面一说.)其相变普适类是自由费米子Lifshitz相变类.

最后,我们考虑系统在有限温度时的热力学量.我们首先来看热容,

$$C_v=\frac{\partial e(T)}{\partial T}=\frac{1}{\pi}\int_0^\pi dk_x\varepsilon_k\frac{\partial f_F(\varepsilon_k)}{\partial T}=\frac{1}{\pi}\int_0^\pi dk_x f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_k))\frac{\varepsilon_k^2}{T^2} \tag{8.214}$$

[22]磁化强度m在相变前后总是非零,因此实际的序参量是部分极化态与完全极化态的磁化强度之差,即$\Delta m=1-|m|$,在临界点附近其通过$\Delta m\propto(g-g_c)^\beta$对应临界指数$\beta$.

[23]能量密度e_g 和磁化m在相变点都是连续的,只有χ_s不连续.

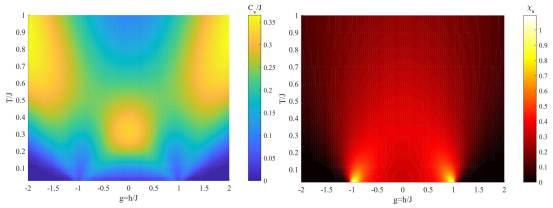


Figure 8.18: 一维量子XY模型在横场h下的热容C_v和磁化率χ_s随$g=h/J$和温度T的变化.

热容的典型结果显示在图8.18中.注意系统的一维特性,因此并没有热容的奇异性.在临界点附近的低温区域,($T/J<0.2$)热容的温度依赖与相邻的绝缘相(自旋完全极化态)和金属相(自旋部分极化态)略有不同,这对应自由费米子Lifshitz相变的热容$C_v\sim T^{1/2}$.这样的温度依赖用标度理论可理解为$f\sim(g-g_c)^{2-\alpha}\Theta(T/(g-g_c)^{\nu z})$,然后代入一维自由费米子Lifshitz相变的临界指数$\alpha=1/2,\nu=1/2,z=2$可知$g=g_c$时$f\sim T^{3/2}$, 因此$C_v\sim T\partial^2 f/\partial^2 T\sim T^{1/2}$.对于$J=h=1$的情况,直接拟合$T\in[0,0.1]$范围的结果可得$C_v(g=1,T)\simeq 0.25\sqrt{T}$.当然,超出$T/J>0.1$ 则很难用$\sqrt{T}$拟合.

接下来,有限温度的磁化强度为

$$m=\frac{1}{N_s}\sum_j\left(\langle\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j\rangle-\frac{1}{2}\right)=\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk_x}{2\pi}f_F(\varepsilon_k)-\frac{1}{2} \tag{8.215}$$

由于磁化强度不显示奇异性,因此我们考虑其磁化率

$$\chi_s=\frac{\partial m}{\partial h}=\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk_x}{2\pi}\frac{\partial f_F(\varepsilon_k)}{\partial h}=\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk_x}{2\pi}\frac{\partial f_F(\varepsilon_k)}{\partial\varepsilon_k}\frac{\partial\varepsilon_k}{\partial h}=\int_0^{\pi}\frac{dk_x}{\pi}f_F^2(\varepsilon_k)\frac{e^{\varepsilon_k/T}}{T}=\int_0^{\pi}\frac{dk}{\pi}f_F(\varepsilon_k)(1-f_F(\varepsilon_k))\frac{1}{T}. \tag{8.216}$$

图8.18也给出了磁化率的典型结果,其在最低温下$g=\pm1$显示发散行为,这与零温计算相符合.在$T/J<0.1, g\sim\pm1$的范围内可以看到较为明显量子临界区域,其基本特征是具有相当大的自旋磁化率.在该临界区域内,磁化率随温度依赖可以通过$\chi_s\sim(g-g_c)^{-\gamma}\Theta(T/(g-g_c)^{\nu z})$并代入$\gamma=1/2,\nu=1/2,z=2$得到$\chi_s(g\to g_c,T)\sim T^{-\gamma}=T^{-1/2}$.对于$J=h=1$的情况,直接拟合数值积分的结果可得$\chi_s(g=1,T)\simeq\frac{0.15}{\sqrt{T}}$.与热容不同,拟合发现磁化率$\frac{1}{\sqrt{T}}$行为实际上在很大的温度区间内($T\in[0,0.5]$)都近似满足.

- 结合热容与磁化率的有限温度行为,我们看到在零温量子临界点以上的有限温度区域确实存在所谓的量子临界区域,该区域的热力学量满足相应的标度形式,具有幂律的温度依赖.这也是实验可以间接探测量子临界性的主要原因.

在结束这一部分的讨论前,我们简单分析系统的关联函数.利用标度关系$(2-\eta)\nu=\gamma$以及$\nu=1/2,\gamma=1/2$可得$\eta=1$,因此零温基态时的序参量所对应的关联函数在临界点附近满足以下形式

$$\langle(\hat{\sigma}_i^z-\langle\hat{\sigma}_i^z\rangle)(\hat{\sigma}_j^z-\langle\hat{\sigma}_j^z\rangle)\rangle\sim\frac{1}{|R_i-R_j|^{d+z-2+\eta}}=\frac{1}{|R_i-R_j|^2}. \tag{8.217}$$

可以看到,z方向自旋关联是距离平方反比依赖.同时,系统的横向关联$\langle\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-\rangle$可以通过下式计算,(设$i<j$)

$$\langle\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-\rangle=\langle\hat{f}_i^\dagger\hat{f}_j e^{i\pi\sum_{m=i+1}^{j-1}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m}\rangle. \tag{8.218}$$

在零温基态且$g=g_c$时,例如$g=1$,系统的基态波函数仅有$k=0$态占据,即$|g\rangle=\hat{f}_{k=0}^\dagger|0\rangle|0\rangle...=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_n\hat{f}_n^\dagger|0\rangle|0\rangle...$, 这样

$$\langle\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-\rangle=\langle g|\hat{f}_i^\dagger\hat{f}_j e^{i\pi\sum_{m=i+1}^{j-1}\hat{f}_m^\dagger\hat{f}_m}|g\rangle=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\langle g|\hat{f}_i^\dagger\hat{f}_j|0\rangle...|1\rangle_j...=\frac{1}{N_s} \tag{8.219}$$

在热力学极限下,$N_s\to\infty$,系统横向涨落消失.作为对比,我们知道$g=0$,也就是不加外场时的XY 模型的横向自旋关联是$\langle\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-\rangle\sim\frac{1}{|R_i-R_j|^{1/2}}$.

拓扑量子相变:一维费米子的拓扑态及其量子相变*

SSH模型的提出

在讨论拓扑物态和拓扑量子相变问题中常用的一个一维电子模型是简化版的Su-Schrieffer-Heeger(SSH)模型,其是一个双子格的一维自由费米子模型,其形式如下 (如图8.19)

$$\boxed{\hat{H}_{SSH}=-(t-\delta t)\sum_{j=1}^{N_s}(\hat{c}_{Aj}^\dagger\hat{c}_{Bj}+\hat{c}_{Bj}^\dagger\hat{c}_{Aj})-(t+\delta t)\sum_{j=1}^{N_s-1}(\hat{c}_{Bj}^\dagger\hat{c}_{Aj+1}+\hat{c}_{Aj+1}^\dagger\hat{c}_{Bj})} \tag{8.220}$$

这里我们写出的形式是开边界的,当考虑周期边界条件时还需要添加第N_s个格点的B电子$\hat{c}_{BN_s}$与第一个格点A电子$\hat{c}_{A1}$的跃迁

$$-(t+\delta t)(\hat{c}_{BN_s}^\dagger\hat{c}_{A1}+\hat{c}_{A1}^\dagger\hat{c}_{BN_s}). \tag{8.221}$$

物理上,SSH模型最早提出被用于理解聚合物材料的电子结构,例如聚乙炔(polyacetylene,化学式为$(CH)_x$).这类聚合物经溴或碘掺杂之后导电性会提高到金属水平,因此也叫做导电聚合物,其发现者因此荣获2000年诺贝尔化学奖.对于CH_x,(每个C原子有一个未配对的电子,其结构如图8.19所示)Su,Schrieffer和Heeger指出我们可以把参与成键的π 电子建模为一维紧束缚模型而σ电子则与原子核(离子实)一起运动,这样相关的哈密顿量是 [24]

$$\hat{H}=-\sum_{j\sigma}t_{j,j+1}(\hat{c}_{j\sigma}^\dagger\hat{c}_{j+1\sigma}+h.c.)+\sum_j\frac{K}{2}(\mu_{j+1}-\mu_j)^2+\sum_j\frac{M}{2}(\partial_t\mu_j)^2 \tag{8.222}$$

[24] [Su,Schrieffer,Heeger,Solitons in Polyaeetylene, Phys.Rev.Lett. **42**,1698(1979)]

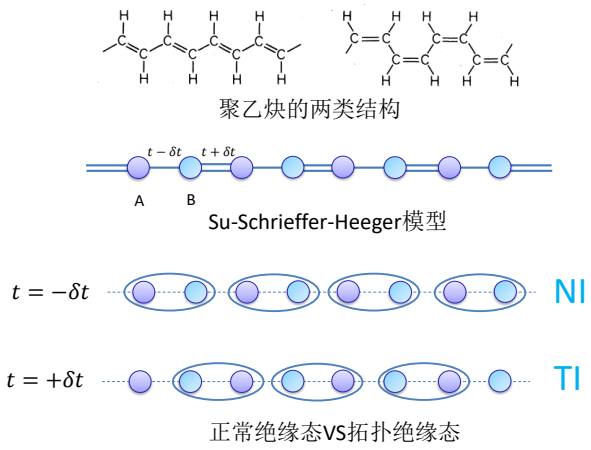


Figure 8.19: 聚乙炔的结构,Su-Schrieffer-Heeger模型以及在$t=\pm\delta t$极限下的两个拓扑不等价的态.$t=-\delta t$ 时无边界态(拓扑平凡的绝缘体),$t=\delta t$ 时有零能边界态(拓扑非平凡的绝缘体).

这里μ_j是第j个离子实(CH原子团)的位移,我们对其采用经典描述,M是其质量,K是离子实之间简谐势的强度,$\hat{c}_{j\sigma}$是位于第j个CH原子团自旋为σ的π电子的湮灭算符.与通常的紧束缚电子模型不同,上述模型的跃迁系数$t_{j,j+1}=t-\alpha(\mu_{j+1}-\mu_j)$明确依赖于离子实的相对位置,当两个离子实靠近时我们认为形成了双键而远离时对应单键.另一方面,考虑能量稳定性则说明单键和双键彼此交替出现(源于Peierls不稳定性), [25]即$\mu_{j+1}-\mu_j=(-1)^{j+1}\mu_0$,这样我们就可以定义$A,B$两个子格.(例如$j$为奇数是$A$子格而$j$ 为偶数对应B子格)定义$\alpha\mu_0=\delta t$,那么单键时的跃迁系数是$t-\delta t$而双键对应$t+\delta t$.最后,忽略离子实的所有动力学和电子自旋自由度就得到简化版的SSH模型.

SSH模型的相变

为了讨论这个模型的相,我们先考虑极限情况,并且采用开边界.当$\delta t=t$时,同一个子格内的跃迁为零,模型变为

$$\hat{H}_{SSH}^{\delta t=t}=-2t\sum_{j=1}^{N_s-1}(\hat{c}_{Bj}^{\dagger}\hat{c}_{Aj+1}+\hat{c}_{Aj+1}^{\dagger}\hat{c}_{Bj}) \tag{8.223}$$

这代表不同子格间电子的两两耦合,形成两个完全局域的键$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}_{Bj}^{\dagger}\pm\hat{c}_{Aj+1}^{\dagger})|0\rangle$,其能量是$\pm 2t$. 注意到在开边界情况下,$\hat{c}_{BN_s}$与$\hat{c}_{A1}$并未出现在哈密顿量中,这说明它们就是所谓的零能量态$\hat{c}_{A1}^{\dagger}|0\rangle,\hat{c}_{BN_s}^{\dagger}|0\rangle$,简称零模.($[\hat{c}_{A1}^{\dagger},\hat{H}_{SSH}]=0\Rightarrow$

[25] [Su,Schrieffer,Heeger,Soliton excitations in Polyaeetylene, Phys.Rev.B **22**,2099(1980)]

$\hat{H}_{SSH}\hat{c}^{\dagger}_{A1}|0\rangle = 0$)在这个单电子态中电子完全局域化在第一个格点的$A$ 子格或第N_s个格点的B子格.

- 这些零模对应于导电聚合物中的孤子态,关于其物理的详细介绍可以参考相关的综述文章.[26]

如果我们观察体系的单电子能谱,我们会发现有N_s-1个简并的能级$-2t$,两个简并的零能态以及N_s-1个简并的$+2t$能级.当考虑半填满的情况时,也就是体系总共填充N_s个电子时,低能的N_s-1个$-2t$能级都被填满,剩下的一个电子可以占据两个局域化的零能态$\hat{c}^{\dagger}_{A1}|0\rangle$或$\hat{c}^{\dagger}_{BN_s}|0\rangle$中的任意一个,这表明多体(多电子系统)基态具有二重简并,简并来源于两个单电子零能能级的两种占据可能.($|\psi_A\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{A1}\prod_{j=1}^{N_s-1}\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}^{\dagger}_{Bj}+\hat{c}^{\dagger}_{Aj+1})|0\rangle$, $|\psi_B\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{BN_s}\prod_{j=1}^{N_s-1}\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}^{\dagger}_{Bj}+\hat{c}^{\dagger}_{Aj+1})|0\rangle$)

然后,我们考虑相反的极限,即$\delta t=-t$,此时格点间的跃迁为零,只存在同一格点内电子的耦合,

$$\hat{H}^{\delta t=-t}_{SSH} = -2t\sum_{j=1}^{N_s}(\hat{c}^{\dagger}_{Aj}\hat{c}_{Bj}+\hat{c}^{\dagger}_{Bj}\hat{c}_{Aj}) \tag{8.224}$$

与$\delta t=t$情况不同,现在$\hat{c}_{BN_s}$与$\hat{c}_{A1}$都出现在哈密顿量中,且与相应格点的另一个子格的电子耦合.这样系统就不会有局域化的零能态,而只有N_s重简并的能量为$\pm 2t$ 的单电子能级.此时,若有N_s个电子填充,那么多体基态是完全占据N_s个$-2t$能级的非简并态$|\psi\rangle = \prod_{j=1}^{N_s}\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}^{\dagger}_{Aj}+\hat{c}^{\dagger}_{Bj})|0\rangle$.

如果我们把有没有局域化的零能态看成区分体系不同状态的标志,那么在$\delta t=-t$与$\delta t=t$的态显然是不同的,尽管在半满时两者都是绝缘体,但是零能态以及多体基态简并度上的差别足以区分两者.前者可以认为是平凡的绝缘体而后者则是一类拓扑非平凡的绝缘体.

当δt取值偏离t时,只要零能态存在,那么拓扑非平凡的绝缘体仍然是稳定的.换句话说,只要体系的基态可以连续形变至$\delta t=t$的极限,[27]那么我们就认为它描述同一个态.反之,能够连续形变至$\delta t=-t$极限的都是平凡的绝缘体.

很显然,我们并不能通过对称性来区分这两个绝缘态,Landau对称破缺理论在这里并不能分辨体系的两个不同的绝缘体.如果我们认为调节δt可以导致两者之间的相变,(相变点是$\delta t=0$)那么这个量子相变应该是拓扑相变,即整体结构的变化导致的相变,而非对称性导致相变.

在非两个极限的情况下,可以直接以格点为基矢对角化体系的单粒子哈密顿量$\hat{H}_{SSH}$以得到单粒子能谱,如图8.20所示,我们发现当$\delta t>0$时,体系形成上下两个能带,在能带之间的能隙区存在两个孤立的零能模式,这两个模式是局域化在边界c_{1A}和c_{BN_s}附近的.而当$\delta t<0$时,体系只存在上下连个能带,能隙中没有任何能态.此时,可以认为$\delta t=0$是相变点.

[26] [Heeger,Kivelson,Schrieffer,Su, Solitons in conducting polymers, Rev.Mod.Phys. **60**,781(1988)]

[27] 回忆Landau费米液体中关于绝热连续性的解释

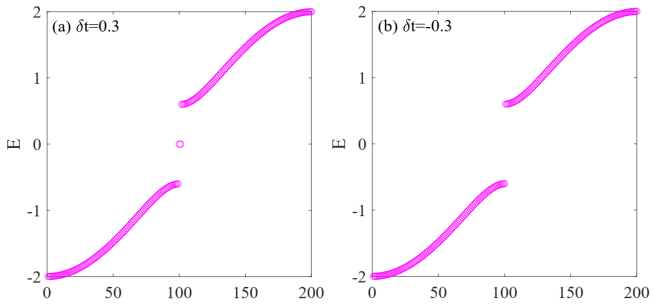


Figure 8.20: (a)$\delta t = 0.3$显示两个简并的零能模式;(b)$\delta t = -0.3$不显示零能模式.($t = 1$)

Berry相位

实际上,我们可以定义一个拓扑不变量,也就是Berry相位γ_c,来更好地刻画SSH模型中的两类态.为此,我们首先回顾量子力学中的Berry相位的基本内容.[28]

让我们考虑一个含时的量子系统,其演化满足含时Schödinger方程$i\partial_t|\psi,t\rangle = H(t)|\psi,t\rangle$.这里$|\psi,t\rangle$是任意量子态而$H(t)$是时间依赖的哈密顿量.对于任意时刻$t$,原则上总是可以通过求解(瞬时)本征方程得到瞬时本征态$|n,t\rangle$:

$$H(t)|n,t\rangle = E_n(t)|n,t\rangle \tag{8.225}$$

这里$E_n(t)$是t时刻的第n个能量本征值并且同一时刻t本征态$|n,t\rangle$满足正交归一性.(不同时刻的状态一般不满足正交归一)然后我们把一般的量子态$|\psi,t\rangle$用瞬时本征态$|n,t\rangle$展开:

$$|\psi,t\rangle = \sum_n c_n(t)e^{i\theta_n(t)}|n,t\rangle \tag{8.226}$$

$\theta_n(t) = -\int_0^t dt' E_n(t')$代表时间演化的动力学相位,对于不含时的哈密顿量$H$就会得到熟知的结果$\theta_n(t) = -E_n t$.把上式代入含时Schödinger方程可得:[29]

$$\sum_n \left(\dot{c}_n(t)e^{i\theta_n(t)}|n,t\rangle + c_n(t)e^{i\theta_n(t)}\partial_t|n,t\rangle\right) = 0 \tag{8.227}$$

对上式左乘$\langle m,t|$并利用正交归一性$\langle m,t|n,t\rangle = \delta_{mn}$有

$$\sum_n \left(\dot{c}_n(t)e^{i\theta_n(t)}\delta_{m,n} + c_n(t)e^{i\theta_n(t)}\langle m,t|\partial_t|n,t\rangle\right) = 0 \tag{8.228}$$

[28]Sakurai书《Modern Quantum Mechanics》第二版7.6节.
[29]注意$\dot{\theta}_n(t) = \partial_t\theta_n(t) = E_n(t)$

整理可得

$$\begin{aligned}\dot{c}_m(t) &= -\sum_n c_n(t)e^{i(\theta_n(t)-\theta_m(t))}\langle m,t|\partial_t|n,t\rangle \\ &= -c_m(t)\langle m,t|\partial_t|m,t\rangle - \sum_{n\neq m} c_n(t)e^{i(\theta_n(t)-\theta_m(t))}\langle m,t|\partial_t|n,t\rangle\end{aligned}$$

这样我们发现叠加系数$c_m(t)$的时间依赖不仅取决于$|m,t\rangle$的变化率$\langle m,t|\partial_t|m,t\rangle$还依赖于其他态$|n,t\rangle$的贡献$e^{i(\theta_n(t)-\theta_m(t))}\langle m,t|\partial_t|n,t\rangle$.为了得到$\langle m,t|\partial_t|n,t\rangle$的显式表达式,我们让$H(t)|n,t\rangle = E_n(t)|n,t\rangle$两边求时间导数可得:

$$(\dot{H}(t)-\dot{E}_n(t))|n,t\rangle = (H(t)-E_n(t))\partial_t|n,t\rangle \tag{8.229}$$

再左乘$\langle m,t|$可得(设$m\neq n$)

$$\langle m,t|\partial_t|n,t\rangle = \frac{\langle m,t|\dot{H}(t)|n,t\rangle}{E_n(t)-E_m(t)}. \tag{8.230}$$

因此,我们有

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t)\langle m,t|\partial_t|m,t\rangle - \sum_{n\neq m} c_n(t)e^{i(\theta_n(t)-\theta_m(t))}\frac{\langle m,t|\dot{H}(t)|n,t\rangle}{E_n(t)-E_m(t)}. \tag{8.231}$$

现在,假设哈密顿量$H(t)$随时间演化足够缓慢以至于使得下式成立,那么我们说系统是绝热演化的:

$$\langle m,t|\partial_t|m,t\rangle >> \frac{\langle m,t|\dot{H}(t)|n,t\rangle}{E_n(t)-E_m(t)} \tag{8.232}$$

这样就能够忽略$\langle m,t|\partial_t|n,t\rangle$项而得到(当然能级$m\neq n$是非简并的)

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t)\langle m,t|\partial_t|m,t\rangle \Rightarrow c_m(t) = c_m(0)e^{i\gamma_c(t)} \tag{8.233}$$

这里$\gamma_c(t) = i\int_0^t dt'\langle m,t'|\partial_{t'}|m,t'\rangle$就是几何相位或者Berry相位,其依赖于波函数在演化时间内的变化.

若$t=0$时刻系统处于第n个本征态$|n\rangle$,那么在绝热近似下t时刻的波函数是不包含其他本征态的影响而只依赖于t时刻的本征态$|n,t\rangle$:

$$|\psi,t\rangle = c_n(0)e^{i\gamma_c(t)}e^{i\theta_n(t)}|n,t\rangle \tag{8.234}$$

换句话说,初始是处于第n个本征态的系统在t时刻仍然处于第n个本征态,此时时间演化积累的相位是动力学相位$\theta(t)$和几何相位$\gamma_c(t)$.

进一步,我们考虑哈密顿量通过参数$\vec{R}=\vec{R}(t)$依赖于时间,即$H(t)=H(\vec{R}(t))$,这里$\vec{R}$可以是电场,磁场也可以是动量$\vec{k}$或者其他参数.既然哈密顿量依赖于$\vec{R}$,那么状态也依赖于$\vec{R}$:$|n,t\rangle = |n,\vec{R}(t)\rangle$.因此Berry相位也可以写成

$$\gamma_c = i\int_0^t dt'\langle n,\vec{R}(t')|\partial_{\vec{R}}|n,\vec{R}(t')\rangle\cdot\frac{d\vec{R}}{dt'} = i\int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} d\vec{R}\cdot\langle n,\vec{R}(t')|\partial_{\vec{R}}|n,\vec{R}(t')\rangle \tag{8.235}$$

当参数$\vec{R}$做一个周期演化,即$\vec{R}(t=T)=\vec{R}(0)$时,我们发现

$$\boxed{\gamma_c = i\oint d\vec{R}\cdot\langle n,\vec{R}|\partial_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle} \tag{8.236}$$

代表一个闭合的回路积分.这说明周期演化系统的Berry相位取决于波函数相对于演化参数的变化情况.如果定义等效的矢量势(Berry联络):

$$\vec{a}(\vec{R}) = i\langle n,\vec{R}|\partial_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle \tag{8.237}$$

和磁场(Berry曲率):

$$\vec{b}(\vec{R}) = \nabla_{\vec{R}}\times\vec{a}(\vec{R}) \tag{8.238}$$

对于二维或三维参数空间的矢量$\vec{R}$,利用Stokes公式有

$$\gamma_c = \oint d\vec{R}\cdot\vec{a}(\vec{R}) = \int d\vec{S}\cdot\vec{b}(\vec{R}) \tag{8.239}$$

这样Berry相位代表一类等效的磁通量.在实际计算中,我们也可以把$\vec{b}(\vec{R})$表示为更方便的形式,即

$$\vec{b}(\vec{R}) = \nabla_{\vec{R}}\times\vec{a}(\vec{R}) = i\nabla_{\vec{R}}\times(\langle n,\vec{R}|\partial_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle) = i(\nabla_{\vec{R}}\langle n,\vec{R}|)\times\nabla_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle \tag{8.240}$$

对上式插入完备系$\sum_m|m,\vec{R}\rangle\langle m,\vec{R}|=1$有

$$\vec{b}(\vec{R}) = i\sum_m \nabla_{\vec{R}}\langle n,\vec{R}|m,\vec{R}\rangle\times\langle m,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle. \tag{8.241}$$

对$H(\vec{R})|n,\vec{R}\rangle = E_n(\vec{R})|n,\vec{R}\rangle$两边求$\vec{R}$的倒数并且左乘$|m,\vec{R}\rangle$有

$$\langle m,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle = \frac{\langle m,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}H(\vec{R})|n,\vec{R}\rangle - \nabla_{\vec{R}}E_n(\vec{R})\delta_{mn}}{E_n(\vec{R})-E_m(\vec{R})}. \tag{8.242}$$

由于$\nabla_{\vec{R}}(\langle n,\vec{R}|m,\vec{R}\rangle) = \nabla_{\vec{R}}\delta_{mn} = 0 = \nabla_{\vec{R}}\langle n,\vec{R}|m,\vec{R}\rangle + \langle n,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|m,\vec{R}\rangle$,那么有$\nabla_{\vec{R}}\langle n,\vec{R}|m,\vec{R}\rangle = -\langle n,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|m,\vec{R}\rangle$,这样

$$\vec{b}(\vec{R}) = -i\sum_m\langle n,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|m,\vec{R}\rangle\times\langle m,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle = -i\sum_{m\neq n}\langle n,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|m,\vec{R}\rangle\times\langle m,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle. \tag{8.243}$$

这里$m=n$项由于矢量与自身相乘为零.代入$\langle m,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}|n,\vec{R}\rangle$的具体形式有

$$\vec{b}(\vec{R}) = i\sum_{m\neq n}\frac{\langle n,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}H(\vec{R})|m,\vec{R}\rangle\times\langle m,\vec{R}|\nabla_{\vec{R}}H(\vec{R})|n,\vec{R}\rangle}{(E_n(\vec{R})-E_m(\vec{R}))^2}. \tag{8.244}$$

考虑一个自旋1/2电子与随着时间缓慢变化的磁场$\vec{B}$耦合的系统,$H=\vec{\sigma}\cdot\vec{B}(t)$.我们知道这个系统的其本征值为$E_\pm=\pm|\vec{B}|$分别对应两个不同的能

级,即自旋与$\vec{B}$平行和反平行的状态,记为$|\pm,t\rangle$.在绝热近似下,Berry相位γ_c中的参数$\vec{R}$可以用$\vec{B}$表示,这样有

$$\vec{b}_\pm = i\frac{\langle \pm,t|\nabla_{\vec{B}}H|\mp,t\rangle \times \langle \mp,t|\nabla_{\vec{B}}H|\pm,t\rangle}{4\vec{B}^2}. \tag{8.245}$$

而$\nabla_{\vec{b}}H = \frac{\partial H}{\partial B_x}\vec{e}_x + \frac{\partial H}{\partial B_y}\vec{e}_y + \frac{\partial H}{\partial B_z}\vec{e}_z = \sigma^x\vec{e}_x + \sigma^y\vec{e}_y + \sigma^z\vec{e}_z = \vec{\sigma}$. 因此$\vec{B}_\pm = i\frac{\langle \pm,t|\vec{\sigma}|\mp,t\rangle \times \langle \mp,t|\vec{\sigma}|\pm,t\rangle}{4\vec{B}^2}$. 利用$|\pm,t\rangle$的具体形式我们可以通过比较单调的过程直接计算$\vec{b}_\pm$.当然注意到系统的旋转不变性,我们可以设自旋处于$+z$或者$-z$方向,在计算完之后恢复自旋对称性即可.这样我们设$|\pm,t\rangle$分别是$\sigma^z = \pm 1$的本征态,这样有

$$\langle \mp,t|\vec{\sigma}|\pm,t\rangle = \langle \mp,t|\sigma^x\vec{e}_x + \sigma^y\vec{e}_y|\pm,t\rangle = \vec{e}_x \pm i\vec{e}_y \tag{8.246}$$

容易算的

$$\vec{b}_\pm = i\frac{\pm 2i\vec{e}_z}{4\vec{B}^2} = \mp\frac{\vec{e}_z}{2\vec{B}^2} \tag{8.247}$$

根据自旋旋转对称性,我们知道方向矢量$\vec{e}_z$应指向$\vec{B}$的方向,即$\vec{B}/|\vec{B}|$,因此具有完全旋转对称的情况下有

$$\vec{b}_\pm = \mp\frac{\vec{B}/|\vec{B}|}{2\vec{B}^2} = \mp\frac{\vec{B}}{2|\vec{B}|^3} \tag{8.248}$$

这样Berry相位是

$$\gamma_c = \int d\vec{S}\cdot\vec{b}_\pm = \mp\frac{1}{2}\int d\vec{S}\cdot\frac{\vec{B}}{|\vec{B}|^3} = \mp\frac{\Omega}{2} \tag{8.249}$$

Ω表示矢量$\vec{B}$所包围的立体角.(如果$\vec{S}$是包围$\vec{B}=0$的球面,那么有$\gamma_c = \mp\frac{1}{2}4\pi|\vec{B}|^2\frac{\vec{B}}{|\vec{B}|}\cdot\frac{\vec{B}}{|\vec{B}|^3} = \mp 2\pi$.) 由此,我们看到在时间缓慢变化磁场下演化一周的1/2自旋所获得的Berry相位是矢量$\vec{B}$所包围立体角的一半.

SSH模型的Berry相位

现在让我们考虑SSH模型.为此,我们考虑周期边界并把哈密顿量变换至动量空间有

$$\hat{H}_{SSH} = -(t-\delta t)\sum_k(\hat{c}^\dagger_{Ak}\hat{c}_{Bk} + \hat{c}^\dagger_{Bk}\hat{c}_{Ak}) - (t+\delta t)\sum_k(e^{ika}\hat{c}^\dagger_{Bk}\hat{c}_{Ak} + e^{-ika}\hat{c}^\dagger_{Ak}\hat{c}_{Bk}) \tag{8.250}$$

把哈密顿量写为矩阵形式有

$$\hat{H}_{SSH} = \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{Ak} & \hat{c}^\dagger_{Bk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -t_1 - t_2e^{-ika} \\ -t_1 - t_2e^{ika} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{Ak} \\ \hat{c}_{Bk} \end{pmatrix} = \sum_k \hat{\psi}^\dagger_k[\vec{d}(k)\cdot\vec{\hat{\sigma}}]\hat{\psi}_k \tag{8.251}$$

为了简化符号,采用了$t_1 = t - \delta t,\ t_2 = t + \delta t$.这里我们使用了标准的Pauli矩阵$\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)$, 并且引入了$\vec{d}$矢量:

$$\vec{d}(k) = (d_x, d_y, d_z) = (-t_1 - t_2 \cos ka, -t_2 \sin ka, 0) \tag{8.252}$$

体系的能谱可以通过以下方式求得:

$$(\vec{d} \cdot \hat{\vec{\sigma}})^2 = d_j d_k \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = d_j d_k (i\epsilon^{jkl}\hat{\sigma}_l + \delta_{jk}\hat{I}) = \delta_{jk} d_j d_k = \vec{d}^2 \hat{I} \tag{8.253}$$

这样体系的能谱是

$$E_k = \pm|\vec{d}| = \pm\sqrt{d_x^2 + d_y^2} = \pm\sqrt{(t_1 - t_2)^2 + 4t_1 t_2 \sin^2 ka} = \pm\sqrt{4\delta t^2 + 4(t^2 - \delta t^2)\sin^2 ka} \tag{8.254}$$

可以看到当且仅当$\delta t = 0$时,上下两个能带之间能隙为零,且为零点出现在$k = 0$.当$\delta t \neq 0$时, 体系出现$2|\delta t|$大小的能隙,对于半满的体系,下能带恰好填满,体系处于绝缘态.

定义单位$\vec{d}$矢量

$$\hat{\vec{d}} = \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|} = \frac{(-(t - \delta t) - (t + \delta t)\cos ka, -(t + \delta t)\sin ka)}{\sqrt{4\delta t^2 + 4(t^2 - \delta t^2)\sin^2 ka}} \tag{8.255}$$

我们可以看到,分子可以看成是以$(t - \delta t, 0)$为圆心,$t + \delta t$为半径的圆上点的坐标.显然,当$\delta t = 0$时,圆恰好通过xy平面的坐标原点$(0, 0)$. 当$\delta t > 0$时,矢量$\vec{d}$形成的圆包围原点,而$\delta t < 0$时,矢量$\vec{d}$形成的圆完全不包含原点.

矢量$\hat{\vec{d}}$具有明显的几何意义,其相当于从原点出发,与单位圆上点的一系列连线对应的矢量,$\delta t > 0$时连续地改变参数k导致的$\hat{\vec{d}}$扫过的角度是2π或其整数倍,而$\delta t < 0$时并不能扫过完整的2π,根据对称性可以知是零,这显然对应于两种不同的状态.当然,$\vec{d}$矢量扫过的角度可以看作是二维空间的立体角Ω.

同时,注意到动量空间哈密顿$H(k) = \vec{d}(k) \cdot \hat{\vec{\sigma}}$在形式上与时间缓慢变化磁场下演化一周的1/2自旋问题完全相同,那么我们定义体系的拓扑不变量是Berry相位γ_c,[30]其等于矢量$\vec{d}$扫过的立体角Ω的一半(模2π).我们知道$\delta t > 0$时$\vec{d}(k)$对应的圆包含坐标原点,这样其对应的立体角就是2π,而当$\delta t < 0$时,$\vec{d}(k)$对应的圆不包含坐标原点,其所得的立体角为零,这样我们就有:

$$\boxed{\gamma_c = \frac{\Omega}{2} = \left\{ \begin{array}{ll} \pi, & \delta t > 0 \\ 0, & \delta t < 0 \end{array} \right\}} \tag{8.256}$$

更数学的说,当我们连续改变动量k(从$-\pi$到π)时,$\hat{\vec{d}}$相当于是把一个圆$(-\pi, \pi)$(记为S^1)映射到单位圆(也记为S^1).相应的拓扑不变量就是一个圆覆盖单位圆的次数,这个不变量通常也叫做转动数(winding number).[31]当覆盖次数为零时对应的是Berry相位为零,而覆盖次数为非零整数时对应Berry 相位为π的拓扑态.

[30]一般形式中的参数$\vec{R}$,在这类就是矢量$\vec{d}(k)$

[31]这类S^1到S^1的映射对应着一个整数,数学上记为$\pi_1(S^1) = Z$,其构成的群结构也叫做基本群.当然如果考虑圆到二维球面的映射,那么有$\pi_1(S^2) = 0$,也就是说一个圆并不能覆盖二维球面.

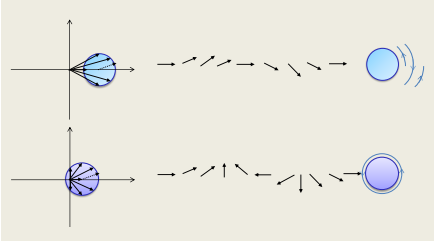


Figure 8.21: $\hat{\vec{d}}$在$\delta t<0$(上图)和$\delta t>0$(下图)时的几何意义.$\delta t<0$ 时$\hat{\vec{d}}$随着动量k的演化扫出的轨迹是平凡的,可收缩为一点,当$\delta t>0$ 时$\hat{\vec{d}}$ 扫出的轨迹是一个圆,拓扑非平凡.

当然,我们也可以直接计算Berry相位.我们定义Berry联络(等效的电磁规范势)为

$$a(k)=i\langle u_-|\partial_k|u_-\rangle \tag{8.257}$$

表示对二能级系统的低能能级$u_-(k)$的一个重叠度.对于当前的模型,我们知道对于确定的动量k,哈密顿量是

$$H(k)=\vec{d}(k)\cdot\hat{\vec{\sigma}} \tag{8.258}$$

而本征能量是$\pm|\vec{d}|$.可以发现对应$-\vec{d}$的本征态是

$$|u_-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\frac{-d_x+id_y}{|\vec{d}|}\\1\end{pmatrix} \tag{8.259}$$

那么

$$\partial_k|u_-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\frac{(-d_x'+id_y')|\vec{d}|-(-d_x+id_y)|\vec{d}|'}{|\vec{d}|^2}\\0\end{pmatrix} \tag{8.260}$$

$$\langle u_-|\partial_k|u_-\rangle=\frac{(d_x+id_y)(d_x'-id_y')-|\vec{d}||\vec{d}|'}{2|\vec{d}|^2}=i\frac{d_yd_x'-d_xd_y'}{2|\vec{d}|^2} \tag{8.261}$$

这样我们得到一维动量空间中的Berry联络的具体表达式

$$a(k)=\frac{d_xd_y'-d_yd_x'}{2|\vec{d}|^2} \tag{8.262}$$

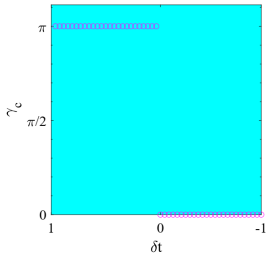


Figure 8.22: SSH模型的(多体)Berry相位随着δt的变化.($t=1$)

那么对整个第一布里渊区积分可得Berry相位(等效的电磁场通量)[32]

$$\begin{aligned}\gamma_c &= \int_0^{2\pi} a(k)dk = \int_0^{2\pi} dk \frac{d_x d'_y - d_y d'_x}{2|\vec{d}|^2} = \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} dk \frac{t_2^2 + t_1 t_2 \cos k}{t_2^2 + t_1^2 + 2t_1 t_2 \cos k} \\ &= \frac{\pi}{2}\left(1 - \frac{t_1^2 - t_2^2}{|t_1 + t_2||t_1 - t_2|}\right) = \frac{\pi}{2}\left[1 - \mathrm{sign}(t_1 + t_2)\mathrm{sign}(t_1 - t_2)\right] \quad (8.263) \\ &= \frac{\pi}{2}\left[1 + \mathrm{sign}(t)\mathrm{sign}(\delta t)\right] = \pi\theta(t\delta t) = \left\{ \begin{array}{ll} \pi, & t\delta t > 0 \\ 0, & t\delta t < 0 \end{array} \right\} \quad (8.264)\end{aligned}$$

显然,这里直接计算的结果与我们先前的分析完全一致.

当然,我们这里讨论的SSH模型只是无相互作用电子模型,当体系存在相互作用时,Berry相位可以通过体系的多体基态波函数在不同扭转边界条件下的平均给出,即 [33]

$$\boxed{\gamma_c = \int_0^{2\pi} d\theta i \langle \Psi_g(\theta)|\partial_\theta|\Psi_g(\theta)\rangle} \quad (8.265)$$

这里θ是在边界处的扭转角度,即$\hat{c}_{N_s+1} = e^{i\theta}\hat{c}_1$(周期边界对应于$\theta = 0, 2\pi$,我们也可以把它吸收到边界处跃迁强度的定义中).$\Psi_g(\theta)$是扭转角为$\theta$时的归一化基态波函数.这样SSH模型的哈密顿量可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -(t-\delta t)\sum_{j=1}^{N_s}(\hat{c}^\dagger_{Aj}\hat{c}_{Bj} + \hat{c}^\dagger_{Bj}\hat{c}_{Aj}) - (t+\delta t)\sum_{j=1}^{N_s-1}(\hat{c}^\dagger_{Bj}\hat{c}_{Aj+1} + \hat{c}^\dagger_{Aj+1}\hat{c}_{Bj}) \\ &- (t+\delta t)(e^{i\theta}\hat{c}^\dagger_{BN_s}\hat{c}_{A1} + e^{-i\theta}\hat{c}^\dagger_{A1}\hat{c}_{BN_s}) + \hat{H}_{int}. \quad (8.266)\end{aligned}$$

$\hat{H}_{int}$是相互作用,例如最近邻格点间的相互作用

$$\hat{H}_{int} = V_1\sum_{j=1}^{N_s}\hat{c}^\dagger_{Aj}\hat{c}_{Aj}\hat{c}^\dagger_{Bj}\hat{c}_{Bj} + V_2\sum_{j=1}^{N_s}\hat{c}^\dagger_{Bj}\hat{c}_{Bj}\hat{c}^\dagger_{Aj+1}\hat{c}_{Aj+1}. \quad (8.267)$$

[32]对比一般形式$\gamma_c = \oint d\vec{R}\cdot\vec{a}(\vec{R})$

[33][Hirano,Katsura,Hatsugai,Topological classification of gapped spin chains: Quantized Berry phase as a local order parameter, Phys.Rev.B **77**,094431(2008)]

在实际计算中,我们可以取θ为分立值$\theta_n = 2\pi\frac{n-1}{M-1}$,$(n = 1, 2...M)$ 这样离散形式的(多体)Berry相位是[34]

$$\gamma_c = \mathrm{Im}\left[\ln\prod_{n=1}^{M}\frac{\langle\Psi_g(\theta_n)|\Psi_g(\theta_{n+1})\rangle}{\sqrt{|\langle\Psi_g(\theta_n)|\Psi_g(\theta_{n+1})\rangle|^2}}\right], \quad \theta_{M+1} = \theta_1. \tag{8.268}$$

图8.22给出了无相互作用SSH模型($V_1 = V_2 = 0$)的计算结果,可以看到与其他方法所得结果一致.

此外,采用电子的Green函数$G(k,\omega)$也可以表示Berry相位γ_c:

$$\boxed{\gamma_c = \frac{1}{4i}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\int_{-\pi}^{\pi}dk\mathrm{Tr}\left[\hat{\sigma}^z G\partial_\omega G^{-1}G\partial_k G^{-1}\right]} \tag{8.269}$$

对于无相互作用的SSH模型,我们有$G(k,\omega) = (\omega - \vec{d}\cdot\hat{\vec{\sigma}})^{-1} = \frac{\omega+\vec{d}\cdot\hat{\vec{\sigma}}}{\omega^2-\vec{d}^2}$, 而$\partial_\omega G^{-1} = 1, \partial_k G^{-1} = -\vec{d}'\cdot\hat{\vec{\sigma}}$.把这些结果代入$\gamma_c$可得[35]

$$\begin{aligned}
\gamma_c &= -\frac{1}{4i}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\int_{-\pi}^{\pi}dk\mathrm{Tr}\left[\hat{\sigma}^z\frac{\omega^2\vec{d}'\cdot\hat{\vec{\sigma}} + \vec{d}^2\vec{d}'\cdot\hat{\vec{\sigma}} + 2\omega\vec{d}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\vec{d}'\cdot\hat{\vec{\sigma}}}{(\omega^2-\vec{d}^2)^2}\right] \\
&= -\frac{1}{4i}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\int_{-\pi}^{\pi}dk\left[\frac{2\omega^2 d'_z + 2\vec{d}^2 d'_z + 4i\omega(\vec{d}\times\vec{d}')_z}{(\omega^2-\vec{d}^2)^2}\right] \\
&= -\int_0^{\infty}d\omega^2\int_{-\pi}^{\pi}dk\frac{d_x d'_y - d_y d'_x}{2(\omega^2-\vec{d}^2)^2} = \int_{-\pi}^{\pi}dk\frac{d_x d'_y - d_y d'_x}{2\vec{d}^2} = \int_0^{2\pi}dka(k).
\end{aligned}$$

这说明Green函数形式的表示与(单粒子)波函数表示结果相同.

细心的读者会发现上述公式在对Green函数求痕中出现了矩阵$\hat{\sigma}^z$,这里的原因涉及到SSH类型模型的对称性,也就是所谓的子格或者手征对称性.注意到$\hat{\sigma}^{x,y,z}$作用在以$\hat{\psi}_k = (\hat{c}_{Ak}, \hat{c}_{Bk})^T$为基的$A,B$子格空间,这个空间的哈密顿量是$H(k) = \vec{d}\cdot\hat{\vec{\sigma}}$.定义手征操作$\hat{C}$满足$\hat{C}^2 = 1$,如果$\hat{C}H(k)\hat{C}^{-1} = -H(k)$,那么我们说体系存在手征对称性,代入SSH模型的$H(k)$可以发现SSH确实具有手征对称性,[36]这类对称性导致了γ_c可以具有非平凡的取值(可以把γ_c/π定义为这类体系的拓扑不变量用以表征体系存在的拓扑非平凡绝缘态).

结合前面的开边界的讨论,我们发现体系存在边界态(零能模式)对应Berry相为π的拓扑态,而没有零能边界态时则对应Berry相为零的平凡态.这体现了拓扑物态研究中一条重要的结论,即块体-边界对应(bulk-edge/boundary correspondence), 非平凡的块体态必然对应非平凡的边界态,反之亦然.

- 拓扑态:当系统的某些物理性质依赖于整体的拓扑而不是局域的细节时,例如无序,那么这个系统被认为实现了一个拓扑态.

[34] [Bhakuni,Ghosh and Grosfeld,Interaction-driven phase transition in one dimensional mirror-symmetry protected topological insulator,SciPost Phys. Core **5**,048(2022)]

[35] 利用(注意$d_z = 0$,$\vec{A}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\vec{B}\cdot\hat{\vec{\sigma}} = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$

[36] 从$H(k)$的结构来看,手征对称性实际上说的是哈密顿量中只存在不同子格间的耦合而没有相同子格的耦合.如果我们强行加入一个同子格的耦合,例如$\mu\hat{\sigma}^z$,那么$\hat{C}H(k)\hat{C}^{-1} \neq -H(k)$,体系将不具有手征对称性,而$\gamma_c$也无法量子化为$\pi$.

- 拓扑态的例子:量子霍尔效应,拓扑绝缘体,超导体...
- 一般而言拓扑态可以用相应的拓扑不变量描述,例如这里的Berry相,拓扑绝缘体中的Z_2 指标, 量子霍尔效应中的Chern数.
- 除了拓扑不变量,量子纠缠也可用来刻画拓扑物态,例如纠缠熵和纠缠谱.

为了研究两个态之间的量子相变,我们考虑基态能关于调节参数δt的一阶导数,即

$$\frac{\partial E_g}{N_s \partial \delta t} = \frac{1}{N_s}\sum_k \frac{4\delta t(1-\sin^2 ka)}{E_k} \tag{8.270}$$

对其进行数值求和可知,基态能的一阶导数是连续的但是二阶导数在$\delta t = 0$处发散,表明体系是关于调节参数δt的二级相变.考虑$\delta t \to 0$ 并在$k = 0$展开可知基态能有如下形式

$$\frac{\partial E_g}{N_s \partial \delta t} \propto -\int_0^\Lambda dk\sqrt{\delta t^2 + t^2k^2} = \frac{1}{2}\Lambda\sqrt{\Lambda^2+\delta t^2} + \frac{\delta t^2}{2}\ln\frac{\Lambda+\sqrt{\Lambda^2+\delta t^2}}{\delta t} \propto \delta t^2 \ln\frac{\delta t}{\Lambda} \tag{8.271}$$

可以发现在相变点附近,基态能与调节参数之间的关系与一维量子横场Ising模型完全相同,即都具有 $\alpha = 0$以及额外的对数依赖.通过分析能谱可知$\xi \sim \delta t^{-1}$,这样关联长度的临界指数是 $\nu = 1$也与量子Ising模型一致.当然,这里并没有定义良好的Landau序参量,所以其他临界指数就不好定义了.[37]

最后,我们注意到在当前的模型在$\delta t = 0$有相变,此时在$k = 0$与$k = \pi$处的费米子激发无能隙.当δt 有限时,这两处自然显示有限的能隙,但系统的低能物理由这两处的费米子激发决定.因此,我们在这两个动量展开哈密顿量可得

$$k \to 0:\ \vec{d} = (-t_1 - t_2 + \frac{t_2a^2}{2}k^2, -t_2ak, 0) = (-2t + \frac{t_2a^2}{2}k^2, -t_2ak, 0) \approx (-2t, -t_2ak, 0)$$
$$k \to \pi:\ \vec{d} = (-t_1 + t_2 + \frac{t_2a^2}{2}\tilde{k}^2, +t_2a\tilde{k}, 0) = (2\delta t - \frac{t_2a^2}{2}\tilde{k}^2, +t_2a\tilde{k}, 0) \approx (2\delta t, +t_2a\tilde{k}, 0),\quad \tilde{k} = k - \pi$$

$$\hat{H} = \sum_k \hat{\psi}_k^\dagger \left(-m_0\sigma^x - ck\sigma^y\right)\hat{\psi}_k + \sum_{\tilde{k}} \hat{\psi}_{\tilde{k}}^\dagger \left(m_\pi\sigma^x + ck\sigma^y\right)\hat{\psi}_{\tilde{k}} \tag{8.272}$$

这里我们定义了质量$m_0 = 2t, m_\pi = 2\delta t$以及速度$c = 2t_2a$.可以看到,体系的低能哈密顿量由两类Dirac费米子组成,特别是在相变点附近,$m_\pi << m_0$ 导致主要物理来自于接近无质量的在$k = \pi$点展开得到的Dirac费米子.

利用傅里叶变换把$k = \pi$附近的Dirac费米子变换至实空间可得

$$\hat{H}_\pi = \int dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left(m_\pi\sigma^x - ic\partial_x\sigma^y\right)\hat{\psi}(x) \tag{8.273}$$

[37]Berry相在相变的两边是良好的广义序参量,但是在相变点无法定义,换句话说Berry相在相变点是跳变的,类似于一个一级相变的行为,但这里明显是个二级相变,所以其不适合作为刻画相变的序参量.

在一维空间考虑Dirac费米子与电磁场的最小耦合,我们得到1+1维的量子电动力学哈密顿量,即QED_2

$$\hat{H}_{QED}=\int dx\hat{\psi}^{\dagger}(x)\left[m_{\pi}\sigma^{x}-i(\partial_{x}-ieA_{x})\sigma^{y}\right]\hat{\psi}(x) \tag{8.274}$$

现在,我们可以利用Dirac费米子来讨论SSH模型的零模态.对于$\hat{H}_{\pi}$,利用Heisenberg运动方程可知场$\hat{\psi}$满足$i\partial_{t}\hat{\psi}=\left(m_{\pi}\sigma^{x}-ic\partial_{x}\sigma^{y}\right)\hat{\psi}$,然后两边都乘以左乘$\sigma^{x}$可得($c=1$)

$$i\gamma^{0}\partial_{t}\hat{\psi}+i\gamma^{1}\partial_{x}\hat{\psi}-m(x)\hat{\psi}=0. \tag{8.275}$$

这里$\gamma^{0}=\sigma_{x},\gamma^{1}=i\sigma_{z}$,质量$m_{\pi}$用一个位置依赖的量$m(x)$代替.让我们考虑这个方程对应的零模态,此时可以设$\partial_{t}\hat{\psi}$,然后把量子场$\hat{\psi}$用经典场$\psi=(\psi_{1},\psi_{2})^{T}$替换,这样有

$$\begin{aligned}-\partial_{x}\psi_{1}&=m(x)\psi_{1},\\ \partial_{x}\psi_{2}&=m(x)\psi_{2}.\end{aligned} \tag{8.276}$$

直接积分有$\psi_{1}\sim e^{-\int_{a}^{x}dx'm(x')},\psi_{2}\sim e^{\int_{a}^{x}dx'm(x')}(a<0,|a|\gg 1)$. 若取$m(x)=m\mathrm{sign}(x),(m>0)$这样$\psi(x)=(e^{mx}e^{|a|m},0)^{T}(x<0),\psi(x)=(e^{-mx}e^{|a|m},0)^{T}(x>0)$.这样我们发现体系存在局域化(在$x=0$附近指数decay)的零能模式,在空间中局域化的尺度由局域化长度$\xi=1/m$决定.这类局域化的零模解在高能物理中称为Jackiw-Rebbi解,其高维推广可以用来理解二维和三维拓扑绝缘体/Chern绝缘体的边界或表面态.

一维量子横场Ising模型中的拓扑物态与Majorana费米子*

在先前一维量子Ising模型的讨论中,我们知道体系在Jordan-Wigner变换后的哈密顿量是一个等效的BCS 型p 波超导体模型

$$\hat{H}=\sum_{k>0}\begin{pmatrix}\hat{f}_{k}^{+} & \hat{f}_{-k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{k} & i\Delta_{k}\\ -i\Delta_{k} & -\varepsilon_{k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{f}_{k}\\ \hat{f}_{-k}^{+}\end{pmatrix}+\sum_{k>0}\varepsilon_{k} \tag{8.277}$$

那么对应的$\vec{d}$矢量是$\vec{d}=(0,d_{y},d_{z})=(0,-\Delta_{k},\varepsilon_{k})$, 而单位矢量具有如下形式

$$\hat{\vec{d}}=\frac{(0,-2J\sin k,-2J\cos k+2h)}{\sqrt{4J^{2}\sin^{2}k+4J^{2}(\cos k-hg)^{2}}} \tag{8.278}$$

与SSH模型的分析一样,分子是以$(0,2h)$为圆心,$2J$为半径的圆上点的坐标.显然,当$h=J$时,圆恰好通过坐标原点$(0,0)$.当$h<J$时,矢量$\vec{d}$形成的圆包围原点,而$h>J$时,矢量$\vec{d}$形成的圆完全不包含原点.显然,拓扑不变量Berry相位γ_{c}等于单位矢量$\hat{\vec{d}}$扫过的立体角Ω的一半:

$$\gamma_{c}=\frac{\Omega}{2}=\begin{Bmatrix}\pi, & J>h\\ 0, & J<h\end{Bmatrix} \tag{8.279}$$

在物理上,我们注意到Berry相位为π的拓扑态对应原始理论中的具有两重简并基态的Ising铁磁态,而$\gamma_c = 0$的拓扑平凡态对应于基态非简并的顺磁态.

显然根据块体-边界对应原理,当体系处于拓扑态时,其开边界下的边界必定有非平凡的零能边界模式.在这里我们重新考虑模型的实空间哈密顿量

$$\hat{H} = -J \sum_{j=1}^{N_s-1} (\hat{f}_j^+ - \hat{f}_j)(\hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_{j+1}) + 2h \sum_j (\hat{f}_j^+ \hat{f}_j - 1/2) \tag{8.280}$$

引入两类Majoranna(实)费米子$\hat{\psi}_j^1, \hat{\psi}_j^2$,$((\hat{\psi}_j^a)^\dagger = \hat{\psi}_j^a)$[38]

$$\hat{f}_j = \hat{\psi}_j^1 + i\hat{\psi}_j^2 \tag{8.281}$$

可以发现其满足反对易关系$[\hat{\psi}_j^a, \hat{\psi}_m^b]_+ = 2\delta_{j,m}\delta_{a,b}$,这样哈密顿量完全改写为Majorana费米子的形式

$$\hat{H} = 4iJ \sum_{j=1}^{N_s-1} \hat{\psi}_j^2 \hat{\psi}_{j+1}^1 + 2h \sum_j (2i\hat{\psi}_j^1 \hat{\psi}_j^2 + 2 - 1/2) \tag{8.282}$$

注意到$\hat{\psi}_{j=1}^1, \hat{\psi}_{j=N_s}^2$两个Majorana费米子并未出现在$J$项中,这说明它们就是我们想要找的零能边界模式的代表.当$h = 0$ 时,这两个模式就是精确的边界态,而当$h \neq 0$时,只要$h < J$,那么局域在边界的零能模式便总是存在.

如果我们定义一个新的复费米子算符 $\hat{c} = \hat{\psi}_{j=1}^1 + i\hat{\psi}_{j=N_s^2}$,其Hilbert空间由未据态$|0\rangle$和已占据态 $|1\rangle = \hat{c}^\dagger|0\rangle$构成,且是能量为零的两个简并态.那么由此形成的多体基态自然是两重简并的.(与SSH模型不同,这里系统本身的粒子数不守恒,所以$|0\rangle$和$|1\rangle$都是相应的多体基态.)我们通常把这两个零能模式称为Majarona费米子零模(Majorana zero mode,MZM).虽然自旋系统的电学测量无法直接探测这里的MZM,但是在真实的一维p波超导体中却已观测到相关的迹象.实验上Delft组的研究团队将InSb 半导体纳米线靠在超导电极旁产生等效的一维p波超导体并测量其隧穿电导的零偏压峰以确认MZM的出现.(如图8.23)[39]

- 超导体(Pb)表面与铁磁链(Fe)接触形成的准一维结构在边界处观测到MZM的信号;[40]
- 拓扑绝缘体与超导体所形成的异质结构存在涡旋态,在涡旋核心附近存在MZM;[41]

[38]Ettore Majorana (1906 – 1938)在其1937年的论文指出Dirac方程可改写为两类实费米子的方程,这些实费米子就是Majorano 费米子.粒子物理理论认为中微子可能是一类有质量的Majorana费米子,但实验上仍然没有定论.

[39]V. Mourik et al., Science **336**,1003(2012).需要指出,零偏压峰的出现实际上有多种不同的解释,例如Andreev束缚态.(M. Valentini et al., Science **373**, 82 (2021))因此需要结合其他特征来判定MZM,例如通过量子化的电导平台,不过遗憾的是相关实验已被证实是错误的并被撤稿.(H. Zhang(张浩) et al., Nature **556**,74 (2018))

[40][Nadj-Perge et al.,Observation of Majorana fermions in ferromagnetic atomic chains on a superconductor,Science **346**,602(2014)]

[41][Sun et al.,Majorana Zero Mode Detected with Spin Selective Andreev Reflection in the Vortex of a Topological Superconductor,Phys.Rev.Lett. **116**,257003(2016)]

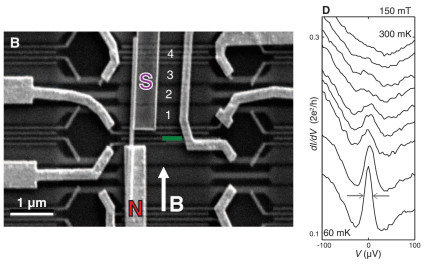


Figure 8.23: Delft组的实验设备和观察到的零偏压峰(可能的MZM).

- 铁基超导体$FeTe_{0.55}Se_{0.45}$的涡旋核心也观测到MZM.[42]

也就是说,简并的边界态解释了体系多体基态波函数在Ising铁磁态的双重简并.此外,我们也看到原始的一维量子Ising模型等价于一维p波超导链模型,后者等价于一维Majarona费米子链,即

$$\hat{H}_{Ising} \rightleftharpoons \hat{H}_{p-SC} \rightleftharpoons \hat{H}_{Majarona}. \tag{8.283}$$

最后,我们也可以从能带填充的角度来理解两个态的拓扑差异(这里的拓扑含义更接近于先前讨论的自由费米子的Lifshitz相变,即费米面结构),对于$J > h$的情况,自由费米子色散$\varepsilon_k = -2J\cos k + 2h$表明费米子的基态占据形成一维费米面,粒子数是非零值,当考虑配对项时则说明每一对动量为$k, -k$的费米子形成对,这类似于一般的弱耦合BCS超导态,一般也叫作弱配对态;然而,如果$J < h$,那么自由费米子基态其实是等效的能带绝缘体,此时粒子数为零,配对的加入诱导粒子数的涨落,产生所谓的强配对超导态.显然,在物理上,两类配对态是不同的,一种是费米气体配对,另一种是能带绝缘体配对.考虑到这两个超导态拓扑性质上的差异,我们称弱配对态为拓扑超导态,而强配对态则是正常或者非拓扑超导态,在拓扑态的分类上文献中一般用Z_2指标来区分这两个态.

- SSH模型的边界态是局域在边界的零能费米子模式.
- 量子Ising模型的等效Majornna费米子模型告诉我们其边界态是两个零能的Majorana费米子.
- 如果考虑纵向自旋分量间的耦合.那么相应的模型是

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x - J_z \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z + h\sum_j \sigma_j^z \tag{8.284}$$

此时模型无法精确求解,但可以通过应用这里已经详细说明的微扰理论,平均场近似以及简单的精确对角化计算得到满意的物理图像和对实验的合理解释.具体讨论可参考文献[[16]].

[42] [Wang et al.,Evidence for Majorana bound states in an iron-based superconductor,Science **362**,333(2018)]

一维量子横场Ising模型的共形场论描述*

我们知道一维量子横场Ising模型可用Majorana费米子描述,

$$\hat{H} = 4iJ\sum_j \hat{\psi}_j^2\hat{\psi}_{j+1}^1 + 4ih\sum_j \hat{\psi}_j^1\hat{\psi}_j^2 \tag{8.285}$$

引入傅里叶变换

$$\hat{\psi}_j^{1,2} = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikR_j}\hat{\psi}_k^{1,2} = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_{k>0}(e^{ikR_j}\hat{\psi}_k^{1,2} + e^{-ikR_j}(\hat{\psi}_k^{1,2})^\dagger) \tag{8.286}$$

这里$\hat{\psi}_k^{1,2} = (\hat{\psi}_{-k}^{1,2})^\dagger$且满足$\{\hat{\psi}_k^a, \hat{\psi}_{-k'}^b\} = \{\hat{\psi}_k^a, (\hat{\psi}_{k'}^b)^\dagger\} = 2\delta_{ab}\delta_{kk'}$. 利用傅里叶变换改写哈密顿量可得,

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= 4iJ\sum_k e^{-ika}\hat{\psi}_k^2\hat{\psi}_{-k}^1 + 4ih\sum_k \hat{\psi}_k^1\hat{\psi}_{-k}^2 \\
&= 4iJ\sum_{k>0}(e^{-ika}\hat{\psi}_k^2\hat{\psi}_{-k}^1 + e^{ika}\hat{\psi}_{-k}^2\hat{\psi}_k^1) + 4ih\sum_{k>0}(\hat{\psi}_k^1\hat{\psi}_{-k}^2 + \hat{\psi}_{-k}^1\hat{\psi}_k^2) \\
&= 4iJ\sum_{k>0}(-e^{-ika}(\hat{\psi}_k^1)^\dagger\hat{\psi}_k^2 + e^{ika}(\hat{\psi}_k^2)^\dagger\hat{\psi}_k^1) + 4ih\sum_{k>0}(-(\hat{\psi}_k^2)^\dagger\hat{\psi}_k^1 + (\hat{\psi}_k^1)^\dagger\hat{\psi}_k^2)
\end{aligned}$$

写成矩阵形式则有

$$\hat{H} = \sum_{k>0}\begin{pmatrix} (\hat{\psi}_k^1)^\dagger & (\hat{\psi}_k^2)^\dagger \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -4iJe^{-ika} + 4ih \\ 4iJe^{ika} - 4ih & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\psi}_k^1 \\ \hat{\psi}_k^2 \end{pmatrix}$$

对角化我们发现其本征值是$\pm 4J\sqrt{1+g^2-2g\cos(ka)}$,注意到$\{\hat{\psi}_k^a, (\hat{\psi}_{k'}^b)^\dagger\} = 2\delta_{ab}\delta_{kk'}$,因而把反对易关系归一化到$\delta_{ab}\delta_{kk'}$相当于把每个费米子算符除以$\sqrt{2}$,这样本征值中的因子2就吸收到费米子的定义中,剩下的部分成为$\pm 2J\sqrt{1+g^2-2g\cos(ka)}$,这恰好就是Ising模型精确解的本征能量.

为了便于场论处理,我们采用连续极限,也就是定义

$$\frac{\hat{\psi}_j^{1,2}}{\sqrt{a}} \to \hat{\psi}^{1,2}(x = x_j) \tag{8.287}$$

这里a为晶格间距,同时

$$\sum_j \to \int \frac{dx}{a}, \quad [\hat{\psi}_j^a, \hat{\psi}_m^b]_+ = 2\delta_{j,m}\delta_{a,b} \to [\hat{\psi}^a(x), \hat{\psi}^b(y)]_+ = \delta_{a,b}\delta(x-y) \tag{8.288}$$

这样有

$$\begin{aligned}
\hat{H} \to \hat{H} &= 4i\int dx(J\hat{\psi}^2(x)\hat{\psi}^1(x+a) + h\hat{\psi}^1(x)\hat{\psi}^2(x)) \\
&= 4i\int dx\left(J\hat{\psi}^2(x)(\hat{\psi}^1(x) + a\partial_x\hat{\psi}^1(x) + \mathcal{O}(a^2)) + h\hat{\psi}^1(x)\hat{\psi}^2(x)\right).
\end{aligned}$$

在相变点时,我们知道$J = h$,这样哈密顿量简化为

$$\hat{H} = 4Ja\int dx\hat{\psi}^2 i\partial_x\hat{\psi}^1 = 4Ja\int dx\hat{\psi}^1 i\partial_x\hat{\psi}^2 = 2Ja\int dx\left(\hat{\psi}^2 i\partial_x\hat{\psi}^1 + \hat{\psi}^1 i\partial_x\hat{\psi}^2\right)$$

上述哈密顿量对应的作用量是(令$2Ja=1$)

$$S=\int dtdx\left(\psi^1 i\partial_t\psi^1+\psi^2 i\partial_t\psi^2-\psi^2 i\partial_x\psi^1-\psi^1 i\partial_x\psi^2\right) \tag{8.289}$$

对应的虚时作用量则是

$$S=\int d\tau dx\left(\psi^1\partial_\tau\psi^1+\psi^2\partial_\tau\psi^2+\psi^2 i\partial_x\psi^1+\psi^1 i\partial_x\psi^2\right). \tag{8.290}$$

为了简化这个作用量,让我们引入两个新的Majorana费米场,

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1+\psi^2),\quad \bar{\psi}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1-\psi^2) \tag{8.291}$$

这样我们发现

$$S=\int d\tau dx\left(\psi\partial_\tau\psi+\bar{\psi}\partial_\tau\bar{\psi}+\psi i\partial_x\psi-\bar{\psi}i\partial_x\bar{\psi}\right). \tag{8.292}$$

若引入两分量的旋量$\Psi=(\psi,\bar{\psi})^T$,那么

$$S=\int d\tau dx\Psi^\dagger(\partial_\tau+i\sigma^z\partial_x)\Psi. \tag{8.293}$$

让我们定义Dirac的γ矩阵$\gamma^0=\sigma^x,\gamma^1=\sigma^y$,这样有($\partial_0=\partial_\tau,\partial_1=\partial_x$)

$$S=\int d\tau dx\Psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\partial_\mu\Psi \tag{8.294}$$

这说明量子临界点的Ising模型可用自由Majorana费米子场论描述.注意到1+1维自由Majorana费米子场论实际上是一种共形场论,[43]因此其具有如下性质:

- $\psi(\bar{\psi})$的共形维度是$h=1/2(\bar{h}=1/2)$,中心电荷是$c=1/2$;
- 能量密度ε和Ising自旋σ的共形维度分别是$h_\varepsilon=\bar{h}_\varepsilon=1/2,h_\sigma=\bar{h}_\sigma=1/16$;
- 能量密度,Ising自旋之间具有聚合规则(fusion rule)$\sigma\times\sigma=I+\varepsilon,\sigma\times\varepsilon=\sigma,\varepsilon\times\varepsilon=I$;(这反映的是它们足够接近时的行为,也就是算符乘积展开(operator-product-expansion,OPE))
- 任何关于临界点的微扰都可以用共形微扰论进行计算($\mathcal{Z}=\int D\Psi^\dagger D\Psi e^{-S-S_p}$,这里$S_p$是微扰部分的作用量,对其做指数展开$e^{-S_p}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}S_p^n$即可计算以共形场作用量$S$为权重的配分函数或者关联函数)

本章小结与进一步阅读

本章小结 量子相变是发生在零温的相变;一维横场Ising模型是量子相变的范例;拓扑量子相变广泛存在于各类系统中.

[43]对比第六章附录关于自由Majorana费米子共形场论性质的介绍

本章关键词 量子相变;量子Ising模型;自对偶;动力学临界指数;量子-经典对应;Lifshitz相变;SSH模型;Berry相位

进一步阅读 冯端和金国钧合著《凝聚态物理学》(下卷)第二十四章;S.Sachdev的《Quantum phase transitions》第五和第十章;Dutta等人的《Quantum Phase Transitions in Transverse Field Spin Models》第四到第六章;M.Continentino的《Key Methods and Concepts in Condensed Matter Physics》第八章

附录

量子Ising模型的Z_2对称性

实际上,我们可以定义Z_2变换的操作,即幺正矩阵$\hat{\mathcal{U}}=\prod_{j=1}^{N_s}\hat{\sigma}_j^x$($Z_z$ 群中另一个元素是恒等操作,这里就是什么都不做的操作),那么有

$$\hat{\mathcal{U}}^+\hat{\sigma}_m^x\hat{\mathcal{U}}=\hat{\sigma}_m^x,\ \ \hat{\mathcal{U}}^+\hat{\sigma}_m^y\hat{\mathcal{U}}=-\hat{\sigma}_m^y,\ \ \hat{\mathcal{U}}^+\hat{\sigma}_m^z\hat{\mathcal{U}}=-\hat{\sigma}_m^z \tag{8.295}$$

也就是说不仅Ising项在Z_2变换下不变,横场项也是不变的,则整个哈密顿量在Z_2操作下不变

$$\hat{\mathcal{U}}^+\hat{H}\hat{\mathcal{U}}=\hat{H}\Rightarrow[\hat{\mathcal{U}},\hat{H}]=0 \tag{8.296}$$

这样,如果$|\psi\rangle$是体系的本征态满足

$$\hat{H}|\psi\rangle=E|\psi\rangle \tag{8.297}$$

那么

$$\hat{H}(\hat{\mathcal{U}}|\psi\rangle)=\hat{\mathcal{U}}(\hat{H}|\psi\rangle)=\hat{\mathcal{U}}E|\psi\rangle=E(\hat{\mathcal{U}}|\psi\rangle) \tag{8.298}$$

这表明$\hat{\mathcal{U}}|\psi\rangle$也是体系能量为$E$的本征态.如果$|\psi\rangle$与$\hat{\mathcal{U}}|\psi\rangle$不同,则表明体系能量具有简并. 对于这里的情况,我们发现完全的铁磁态$|\Psi_\uparrow\rangle$和$|\Psi_\downarrow\rangle$由Z_2操作$\hat{\mathcal{U}}$相联系,即$\hat{\mathcal{U}}|\Psi_{\uparrow/\downarrow}\rangle=|\Psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle$, 这表明这两个态能量是简并的.而无序态$\hat{\mathcal{U}}|\Psi_x\rangle=|\Psi_x\rangle$, 这说明变换前后是同一个态,说明此时能量没有简并.详细的数值计算表明体系从$g=h/J=0$一直到$g=1$基态都是二重简并的,而大于此值体系基态是唯一的.

量子Ising模型的数值对角化

我们已经知道,一维量子Ising模型可借助Jordan-Wigner变换得到精确的解析解.然而,如果我们给模型加上额外的扰动项,例如x方向的磁场项,那么模型的可解性将会破坏.所以,我们有必要从数值模拟的角度来研究量子Ising模型,这里将采取最简单的方法,也就是数值精确对角化(exact diagonalization,ED).

对一个量子多体模型,数值对角化就是通过选取多体基矢,构造出多体哈密顿量在基矢下的矩阵,然后对角化矩阵得到系统的本征能量和本征态.然后用所得的本征态进一步计算物理量的期望值,这是标准的矩阵量子力学的处理方式.对于$S=1/2$的自旋系统,完全对角化,也就是求出所有本征能量与本征态的计算,最大可计算的系统大小为$N_s=20$. 如果考虑系统的各种对称性,并计算基态,那么相应的系统最大为$N_s=40$.因此,数值对角化所计算的系统都是小尺寸的系统,其优点是所得的结果在数值上是精确的,而缺点则是小尺寸系统的性质不好外推到大系统的情况,这点对于二维量子系统特别明显.

现在,让我们以一维量子Ising模型为例,阐述数值对角化的基本想法.一维量子Ising模型的哈密顿量为如下形式,

$$\hat{H}=-J\sum_n\hat{\sigma}_n^z\hat{\sigma}_{n+1}^z-h\sum_n\sigma_n^x=-J\hat{H}_J-h\hat{H}_h,\quad \hat{H}_J=\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_{j+1}^z,\ \ \hat{H}_h=\sum_j\sigma_j^x \tag{8.299}$$

注意到$\hat{H}_J$中出现z方向自旋的耦合,因此我们选取$\hat{\sigma}^z$的本征态作为基矢,即为

$$|\sigma_1,\sigma_2,...\rangle,\quad \sigma_n=\uparrow,\downarrow \tag{8.300}$$

在实际计算中,我们用1代表↑,0代表↓,这样就用正负一的一串数字代表一个基矢态,例如

$$|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle\to|11100010\rangle. \tag{8.301}$$

对一个4格点组成的$S=1/2$自旋链,其基矢维数为$2^4=16$,也就是共有16个基矢,相应的哈密顿量矩阵也是16×16的正方矩阵.我们可以写出这16个基矢,

$$\begin{aligned}&|0000\rangle,\ \ |0001\rangle,\ \ |0010\rangle,\ \ |0011\rangle\\&|0100\rangle,\ \ |0101\rangle,\ \ |0110\rangle,\ \ |0111\rangle\\&|1000\rangle,\ \ |1001\rangle,\ \ |1010\rangle,\ \ |1011\rangle\\&|1100\rangle,\ \ |1101\rangle,\ \ |1110\rangle,\ \ |1111\rangle\end{aligned} \tag{8.302}$$

可以看到,这16个基矢可以看作是16个二进制数,并且恰好是0到15这16个十进制数分别对应的二进制数,因此我们可以用十进制数作为相应基矢的标号.对于当前的例子,标号$j=0,...,15$.例如$j=0$ 对应$|j=0\rangle=|0000\rangle$,也就是自旋全朝下的状态,而$j=15$对应$|j=15\rangle=|1111\rangle$,即自旋全朝上的状态.当体系有$N_s$个格点时,基矢的标号从$j=0$一直取到$j=2^{N_s}-1$,共有$2^{N_s}$ 个.

现在,让我们构造哈密顿量的矩阵元,即$H(k,j)=\langle k|\hat{H}|j\rangle$.注意到$\hat{H}$的算符部分可分为$\hat{H}_J$和$\hat{H}_h$,我们先看$\hat{H}_J$ 部分.对于某个基矢$|j\rangle$, 我们有

$$\hat{H}_J|j\rangle=E_J|j\rangle,\quad E_J=\sum_n\sigma_n\sigma_{n+1} \tag{8.303}$$

换句话说,$\hat{H}_J$不改变基矢$|j\rangle$,因此非零的矩阵元为$\langle j|H_J|j\rangle$,$j=0,...,2^{N_s}-1$.

另一方面,

$$\hat{H}_h|j\rangle=\sum_n\sigma_n^x|...,\sigma_n,...\rangle=\sum_n|...,\overline{\sigma_n},...\rangle=\sum_n|j_n\rangle,\quad n=1,2...N_s \tag{8.304}$$

这里$\overline{\sigma_n}=-\sigma_n$,也就是使得自旋翻转.既然$\hat{H}_h$ 会分别使每个格点上的自旋翻转,那么翻转后的状态也是基矢态,记为$|j_n\rangle$, 共有N_s个.这样,对于一个确定的基矢$|j\rangle$,$\hat{H}_h$的非零跃迁矩阵元为$\langle j|\hat{H}_h|j_n\rangle$, 共有$N_s$个.($j=0,...,2^{N_s}-1,n=1,2...N_s$)因此,哈密顿量$\hat{H}$的非零矩阵元为

$$H(k,j)=\langle k|\hat{H}|j\rangle=\delta_{k,j}(-J)\langle j|H_J|j\rangle-h\delta_{k,j_n}\langle j|\hat{H}_h|j_n\rangle \tag{8.305}$$

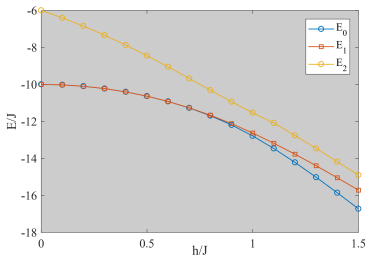


Figure 8.24: 10格点一维量子横场Ising模型的数值对角化所得的基态,第一与第二激发态能量.

也就是说,哈密顿量的对角元由$\langle j|H_J|j\rangle$决定,有2^{N_s}个,非零的非对角元由$\langle j|\hat{H}_h|j_n\rangle$确定,有$2^{N_s}\times N_s$个.

下面我们以4格点的量子Ising链为例,系统为周期边界.这样仅需计算每个基矢下的能量E_J即可得到哈密顿量对角元.注意到Ising对称性以及平移不变性,则有

$$\begin{aligned}
&E_J(0)=E_J(15)=4\\
&E_J(1)=E_J(2)=E_J(4)=E_J(7)=E_J(8)=E_J(11)=E_J(13)=E_J(14)=0\\
&E_J(3)=E_J(6)=E_J(9)=E_J(12)=0\\
&E_J(5)=E_J(10)=-4
\end{aligned}\tag{8.306}$$

这样有$\langle 0|H_J|0\rangle=\langle 15|H_J|15\rangle=4,\langle 5|H_J|5\rangle=\langle 10|H_J|10\rangle=-4$.对于非对角元,我们有

$$\begin{aligned}
&\langle 0|\hat{H}_h|1\rangle=\langle 0|\hat{H}_h|2\rangle=\langle 0|\hat{H}_h|4\rangle=\langle 0|\hat{H}_h|8\rangle=1\\
&\langle 1|\hat{H}_h|9\rangle=\langle 1|\hat{H}_h|5\rangle=\langle 1|\hat{H}_h|3\rangle=\langle 1|\hat{H}_h|0\rangle=1\\
&\langle 2|\hat{H}_h|10\rangle=\langle 2|\hat{H}_h|6\rangle=\langle 2|\hat{H}_h|0\rangle=\langle 2|\hat{H}_h|3\rangle=1...
\end{aligned}\tag{8.307}$$

作为一个实际例子,图8.24显示了10格点一维量子横场Ising模型的数值对角化所得的基态,第一与第二激发态能量.可以看到当h/J较小时系统基态是双重简并的,这是体系基态为双重简并的铁磁态的基本特征,而在h/J较大时仅有唯一基态,这与顺磁性的非简并基态吻合,因此这里的数值计算与先前的解析研究结果一致. 注意到,由于有限尺寸效应,系统的量子临界点位置($(h/J)_c\sim 0.8-0.9$)小于$h/J=1$,更大的系统会接近理论上的比值.

类似地,我们也可以用数值对角化研究量子XY模型,XXZ模型等自旋模型.当考虑到费米子交换导致的负号后,我们也可以计算费米子系统的基本性质,当然对于费米子而言,例如Hubbard模型,可以计算的系统尺寸一般不会超过$N_s=20$,因此更大系统的计算只能采用其他数值模拟方法,例如密度矩阵重整化群或者行列式量子蒙特卡洛.

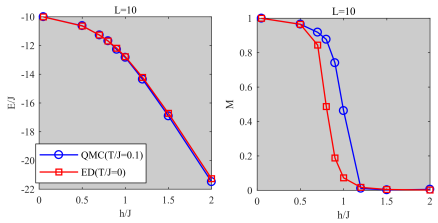


Figure 8.25: 10格点一维量子横场Ising模型的量子蒙特卡洛模拟结果与数值对角化的比较.

量子-经典对应的应用:量子Ising模型的量子蒙特卡洛模拟

在先前的讨论中,我们看到量子模型的配分函数等价为对应经典模型的配分函数.因此,当我们需要研究量子模型的热力学性质时,可以通过计算对应的经典模型来得到.对于经典统计模型,最常用的数值计算方法是蒙特卡洛模拟.这类方法通过随机抽样的方式等效计算配分函数和物理量的统计平均,在足够多的抽样次数后可得精确的物理量平均值.把量子问题转化为可用蒙特卡洛模拟计算的数值方法称为量子蒙特卡洛.这里提到的量子经典对应涉及的是自旋系统,对于费米子系统,通常需要采用行列式的形式得到等效的经典问题,这类方法称为行列式量子蒙特卡洛,其零温形式也叫做投影量子蒙特卡洛.

作为量子-经典对应的应用,或者说量子蒙特卡洛的简单例子,我们研究一维量子横场Ising模型.一维量子横场Ising模型可以等效为二维经典Ising模型,对等效经典模型运用蒙特卡洛方法并结合之前物理量的计算公式可得平均能量E 和磁化M的数值计算结果.图8.25显示了10格点一维量子横场Ising模型由量子蒙特卡洛模拟计算得到的平均能量和磁化与数值对角化的比较.可以看到低温的蒙特卡洛结果与零温的数值对角化计算基本符合.

需要注意的是,对于无限大的一维量子横场Ising模型,其仅在零温时有长程有序,也就是$T = 0$时才存在铁磁有序态.在我们的蒙特卡洛模拟中,T是有限值,系统大小为10 个格点,系统显示铁磁有序,这是典型的有限尺寸效应.这里的原因是温度很低时,系统的铁磁关联长度超过系统的尺寸,因而在有限温度下显示长程的铁磁序.对于固定的温度,我们进一步增大系统尺寸会发现铁磁磁矩会逐渐减小.任意有限温度系统在大尺寸极限下都不会显示真正的铁磁有序.

第八章习题

习题1:量子Ising模型的横向磁化

Q1:写出一维量子横场Ising模型的临界指数α, ν, z.并说明这些临界指数是否满足超标度关系.

Q2:对于一维量子Ising模型计算零温时z方向(坐标旋转之后的z方向,相当于旋转之前的x方向)的平均磁化$\frac{1}{N_s}\sum_j \langle \hat{\sigma}_j^z \rangle_{T=0}$,并解释为何这个量在有限横场$h$下总是非零的.

习题2:二维量子Ising模型

Q:利用平均场理论计算二维正方晶格量子Ising模型的基态能密度并定出量子临界点的位置.二维正方晶格量子Ising模型定义如下:

$$\hat{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - h\sum_j \hat{\sigma}_j^x = -J\sum_{j,\delta=x,y} \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+\delta}^z - h\sum_j \hat{\sigma}_j^x.$$

习题3:量子标度

Q:设处于量子临界点附近系统其(玻色型)准粒子具有$\omega_k \sim |k|^{3/2}$的色散关系.试估计临界点附近该准粒子对热容的贡献.(假设满足超标度关系且系统是三维的.)

习题4:杨-李边界奇异性的临界指数

Q1:证明一维Ising模型的磁场$h = \pm i\beta^{-1}\sin^{-1}(e^{-2\beta J})$时转移矩阵的本征值$\lambda_+ = \lambda_-$.

Q2:记$h_c = \pm i\beta^{-1}\sin^{-1}(e^{-2\beta J})$,证明磁化密度$m = \frac{1}{N_s}\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial h}$在临界点$h = h_c$附近有$m \sim (h-h_c)^{-1/2}$,磁化率$\chi = \frac{dm}{dh} \sim (h-h_c)^{-3/2}$,关联长度$\xi \sim (h-h_c)^{-1/2}$.

Bibliography

[1] A. Schroder et al., Onset of antiferromagnetism in heavy-fermion metals, Nature **407**, 351 (2000).

[2] J. Custers et al., The break-up of heavy electrons at a quantum critical point, Nature **424**, 524 (2003).

[3] B. Shen et al., Strange-metal behaviour in a pure ferromagnetic Kondo lattice, Nature **579**, 51 (2020).

[4] A. Legros et al., Universal T-linear resistivity and Planckian dissipation in overdoped cuprates, Nature Physics **15**, 142 (2019).

[5] R. Coldea et al., Quantum Criticality in an Ising Chain:Experimental Evidence for Emergent E_8 Symmetry, Science **327**, 177 (2010).

[6] A. B. Zamolodchikov, Integrals of motion and S matrix of the (scaled) $T = T_c$ Ising model with magnetic field, Int. J. Mod. Phys. A **4**, 4235 (1989).

[7] B. G. Levi, A complex symmetry arises at a spin chain' s quantum critical point, Physics Today **63**, 3, 13 (2010).

[8] T. Liang, S. M. Koohpayeh, J.W. Krizan, T. M. McQueen, R. J. Cava and N. P. Ong, Heat capacity peak at the quantum critical point of the transverse Ising magnet $CoNb_2O_6$, Nat. Commun. **6**, 7611 (2015).

[9] A. W. Kinross, M. Fu, T. J. Munsie, H. A. Dabkowska, G. M. Luke, S. Sachdev, and T. Imai, Evolution of Quantum Fluctuations Near the Quantum Critical Point of the Transverse Field Ising Chain System $CoNb_2O_6$, Phys. Rev. X **4**, 031008 (2014).

[10] Mucio A Continentino, Quantum Scaling in Many-Body Systems, 第五章

[11] Roger Melko, Quantum Many-Body Physics, http://pirsa.org/C15078

[12] Subir Sachdev, Quantum Phase Transitions, 第五章，第十章

[13] Marcel Franz, Condensed Matter, http://pirsa.org/C14035

[14] J.-J. Miao, H.-K. Jin, F.-C. Zhang and Y. Zhou, Exact Solution for the Interacting Kitaev Chain at the Symmetric Point, Phys. Rev. Lett. **118**, 267701 (2017).

[15] M. Ezawa, Exact solutions and topological phase diagram in interacting dimerized Kitaev topological superconductors, Physical Review B **96**, 121105(R) (2017).

[16] Grégoire Vionnet, Brijesh Kumar and Frédéric Mila, Level crossings induced by a longitudinal coupling in the transverse field Ising chain, Physical Review B **95**, 174404 (2017).

Chapter 9

路径积分:多体物理的新宠

路径积分:对历史求和

在统计物理中,我们的核心目的是计算系统的配分函数

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \tag{9.1}$$

对于经典系统,对所有量子态的求迹化简为对所有独立变量的积分,只要我们可以计算所得到的高维积分,那么 体系的性质便是清楚的.但是,对量子系统,求迹的运算显然是极其困难的,(这要求完全对角化多体哈密顿量)那么可以采用什么方式把困难的对角化问题转化为类似经典统计的积分问题呢?

答案是采用路径积分(path integral)形式.[1]简单来说,对于单个粒子组成的量子力学系统$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$,我们关心的是粒子在任意时间和任意位置的波函数,即$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$. 在Schödinger的波动力学中,不显含时系统的状态$|\psi(t)\rangle$可由某个参考时刻,例如$t = 0$ 时刻通过(幺正)时间演化得到,即$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$.($e^{-i\hat{H}t/\hbar}$是时间演化因子)那么

$$\psi(x,t) = \langle x|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{9.2}$$

现在,让我们插入坐标空间的完备系$1 = \int dx'|x'\rangle\langle x'|$,则

$$\psi(t,x) = \int dx' \overbrace{\langle x|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|x'\rangle}^{G(x,t;x',0)} \overbrace{\langle x'|\psi(0)\rangle}^{\psi(x',0)} = \int dx' G(x,t;x',0)\psi(x',0) \tag{9.3}$$

这里我们定义了Feynman传播子

$$G(x,t;x',0) = \langle x|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|x'\rangle \tag{9.4}$$

其物理意义是粒子从$t = 0$时刻的x'位置运动至t时刻x处的概率振幅.利用传播子,我们看到求解时间依赖波函数$\psi(x,t)$的任务就转化为传播子的计算,而传播子可以写成

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a) = \int \mathcal{D}x e^{i\frac{S}{\hbar}} = \int_{x(t_a)=x_a,x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt(\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x))}. \tag{9.5}$$

这里$\int_{x(t_a)=x_a,x(t_b=x_b)} \mathcal{D}x$表明我们需要对所有链接时空位置$x_a,t_a$ 和x_b,t_b的粒子可能运动的轨迹(路径)进行求和,这也就是路径积分名字的来源.当然不同路径的贡献并不相同,其贡献的权重由粒子运动的经典作用量S的指数因子$e^{i\frac{S}{\hbar}}$所决定.这样,

$$\psi(t,x) = \int dx' \int_{x(t)=x,x(0)=x'} \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'(\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x))}\psi(x',0) \tag{9.6}$$

- 路径积分是量子力学的第三种表述形式(前两种为Schödinger的波动力学和Heisenberg的矩阵力学),最早由Dirac提出基本构想,后由Feynman建立其

[1]简单的应用可以参考《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》23和50章.

形式体系.相比于一般的量子力学形式,路径积分更接近经典力学,(有经典作用量)因此可容易得到一些半经典解($\hbar \to 0$时运动方程的解)且便于用经典图像理解.[2]

- 当把路径积分用于研究多体系统时,除了可得传统Feynman图微扰理论外,还能直接联系拓扑相关的事物,因此当我们讨论拓扑项时就免不了路径积分.

- 利用路径积分我们能够在形式上写出宇宙的波函数[3]:$\Psi(g_{\mu\nu}, A_\mu, \phi, \psi...) = \int \mathcal{D}g\mathcal{D}A\mathcal{D}\phi\mathcal{D}\psi e^{i\frac{S(g_{\mu\nu}, A_\mu, \phi, \psi...)}{\hbar}}\Psi(0)$.这里$g_{\mu\nu}, A_\mu, \phi, \psi$ 分别表示目前已知宇宙中的引力场,规范场,以及物质场.$\Psi(0)$表示没有任何时空和物质,因此宇宙波函数$\Psi(g_{\mu\nu}, A_\mu, \phi, \psi...)$表示没有时空与物质的虚空经过量子力学的演化成为现在的宇宙.

对于我们关心的量子多体系统的平衡态行为而言,配分函数的计算实际上类似于量子力学中传播子的计算,特别是Boltzman因子发挥着时间演化因子$e^{-i\hat{H}t/\hbar}$的作用,这说明,通过类比量子力学中路径积分理论的处理,我们就可以得到多体系统配分函数的路径积分形式.下面,我们以单粒子配分函数的计算作为例子.

单粒子的路径积分

考虑一个哈密顿量为$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$的一维粒子,其有限温度物理完全由配分函数决定

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}} \tag{9.7}$$

我们把虚时间β切分为M等份,即$\beta = \Delta\tau M$,则配分函数成为M项乘积的函数

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}(e^{-\Delta\tau\hat{H}})^M = \mathrm{Tr}[e^{-\Delta\tau\hat{H}}...e^{-\Delta\tau\hat{H}}] = \mathrm{Tr}\prod_{l=1}^{M} e^{-\Delta\tau\hat{H}} \tag{9.8}$$

对于其中某一个$e^{-\Delta\tau\hat{H}}$,如果时间间隔$\Delta\tau$足够小,那么我们可以把指数展开

$$e^{-\Delta\tau\hat{H}} = 1 - \Delta\tau\hat{H} + O((\Delta\tau)^2) \approx 1 - \Delta\tau\hat{H} \tag{9.9}$$

在单粒子量子力学中,我们常采用位置空间和动量空间作为基矢,它们分别具有完备性关系 $\int dx|x\rangle\langle x| = 1,\ \int dp|p\rangle\langle p| = 1$, 那么利用这两个完备性关系,我们得到

$$\hat{H} = \int dx(l)dp(l)|x(l)\rangle\langle x(l)|\hat{H}|p(l)\rangle\langle p(l)| = \int dx(l)dp(l)\left(\frac{p^2(l)}{2m} + V(x(l))\right)|x(l)\rangle\langle x(l)|p(l)\rangle\langle p(l)| \tag{9.10}$$

[2]除了路径积分形式,量子力学还有David Bohm的pilot波形式,Wigner-Moyal的相空间形式.

[3]Hartle and Hawking,Phy.Rev.D.**28**,2960(1983).

这样指数因子成为

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau\hat{H}} &\approx 1-\Delta\tau\hat{H} = \overbrace{\int dx(l)dp(l)|x(l)\rangle\langle x(l)|p(l)\rangle\langle p(l)|}^{=1} - \Delta\tau\int dx(l)dp(l)\left(\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))\right)|x(l)\rangle\langle \\ &= \int dx(l)dp(l)\left(1-\Delta\tau\left(\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))\right)\right)|x(l)\rangle\langle x(l)|p(l)\rangle\langle p(l)| \end{aligned}$$

因此,我们重新指数化有

$$e^{-\Delta\tau\hat{H}} \approx \int dx(l)dp(l)e^{-\Delta\tau[\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))]}|x(l)\rangle\langle x(l)|p(l)\rangle\langle p(l)| \tag{9.12}$$

在量子力学中,我们知道$\langle x(l)|p(l)\rangle = \frac{e^{i\frac{p(l)}{\hbar}x(l)}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, 那么有

$$e^{-\Delta\tau\hat{H}} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx(l)dp(l)e^{i\frac{p(l)}{\hbar}x(l)-\Delta\tau[\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))]}|x(l)\rangle\langle p(l)| \tag{9.13}$$

这样对每一个$e^{-\Delta\tau\hat{H}}$都采用同样的处理,我们发现配分函数可以写成如下形式

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{M/2}}\int dx(1)...dx(M)\int dp(1)...dp(M)e^{i\sum_{l=1}^{M}\frac{p(l)}{\hbar}x(l)-\Delta\tau\sum_{j=1}^{M}[\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))]}\prod_{l=1}^{M}|x(l)\rangle\langle p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{M/2}}\int\prod_{l=1}^{M}dx(l)dp(l)e^{i\sum_{l=1}^{M}\frac{p(l)}{\hbar}x(l)-\Delta\tau\sum_{j=1}^{M}[\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))]}\mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M}|x(l)\rangle\langle p(l)|\right] \end{aligned} \tag{9}$$

对于因子的求迹$\mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M}|x(l)\rangle\langle p(l)|\right]$可有以下结果

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M}|x(l)\rangle\langle p(l)|\right] &= \int dx\langle x(0)|x(M)\rangle\langle p(M)|x(M-1)\rangle\langle p(M-1)|...|x(2)\rangle\langle p(2)|x(1)\rangle\langle p(1)|x(0)\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{M/2-1/2}}e^{-i\sum_{l=1}^{M-1}\frac{p(l+1)}{\hbar}x(l)}\int dx\langle x(0)|x(M)\rangle\langle p(1)|x(0)\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{M/2}}e^{-i\sum_{l=1}^{M-1}\frac{p(l+1)}{\hbar}x(l)}e^{-i\frac{p(1)}{\hbar}x(M)} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{M/2}}e^{-i\sum_{l=1}^{M}\frac{p(l)}{\hbar}x(l-1)},\quad x(0)=x(M) \end{aligned} \tag{9.15}$$

这样体系的配分函数是

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{M}}\int_{x(0)=x(M)}\prod_{l=1}^{M}dx(l)dp(l)e^{i\sum_{l=1}^{M}\frac{p(l)}{\hbar}(x(l)-x(l-1))-\Delta\tau\sum_{j=1}^{M}[\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))]}$$

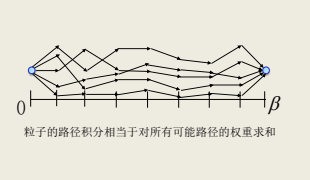


Figure 9.1: 粒子的路径积分相当于对所有可能路径的权重求和,当求和数足够巨大时则转化为对路径的积分.

当我们取连续极限,即$M \to \infty,\ \Delta\tau \to 0$但保持$\beta = M\Delta\tau$不变,则有

$$l\Delta\tau \to \tau \tag{9.16}$$

$$p(l) \to p(\tau) \tag{9.17}$$

$$x(l) - x(l-1) \to \Delta\tau \frac{dx}{d\tau}|_{x(l)=x(\tau)} = d\tau \dot{x}(\tau) \tag{9.18}$$

$$\sum_{l=1}^{M} \Delta\tau \to \int_0^\beta d\tau \tag{9.19}$$

$$\int \prod_{l=1}^{M} dx(l) \to \int Dx(\tau) \tag{9.20}$$

$$\int \prod_{l=1}^{M} \frac{dp(l)}{2\pi\hbar} \to \int Dp(\tau) \tag{9.21}$$

那么连续极限下的配分函数写为

$$\mathcal{Z} = \int Dx(\tau)Dp(\tau)e^{i\int_0^\beta p(\tau)\dot{x}(\tau) - \int_0^\beta d\tau[\frac{p^2(\tau)}{2m} + V(x(\tau))]} = \int Dx(\tau)Dp(\tau)e^{-S}, \quad \hbar = 1$$

我们这里定义了虚时间下的作用量

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[-ip\dot{x} + H(p,x)\right] = \int_0^\beta d\tau \left[-ip\dot{x} + \frac{p^2}{2m} + V(x)\right] \tag{9.22}$$

- 作用量中的第一项实际上对应几何相位,即Berry相位.为了看出这种解释,我们做Wick转动$\tau = it$ 把虚时间换为实时间,这样有 $e^{-S} \to e^{i\gamma_c}e^{-i\int dtH(t)}, \gamma_c = \int dtp\partial_t x$. 对比量子力学中的时间演化因子$e^{-i\hat{H}t}$, 我们知道动力学部分由$e^{-i\int dtH(t)}$确定,而剩下的$\gamma_c$就是Berry相位.

- 注意到无论是在实时还是虚时形式中,Berry相位的贡献是复数,这导致量子粒子的等效Boltzman因子并不是正定的,当我们用经典统计解释时,这种非正定的贡献将会引起困难,并最终使得量子Monte Carlo模拟失效.

实际上,如果势能与动量无关,那么我们可以积掉动量.为明确起见,我们先考虑离散情况,此时

$$\mathcal{Z}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^M}\int_{x(0)=x(M)}\prod_{l=1}^{M}dx(l)dp(l)e^{i\sum_{l=1}^{M}\frac{p(l)}{\hbar}(x(l)-x(l-1))-\Delta\tau\sum_{j=1}^{M}[\frac{p^2(l)}{2m}+V(x(l))]}$$

这里涉及动量p的二次与线性项,而注意到如下高斯积分的结果:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dye^{-ay^2+by}=e^{\frac{b^2}{4a}}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{9.23}$$

因此对每个动量$p(l)$的积分可以直接进行,这样

$$\int dp(l)e^{\frac{i}{\hbar}(x(l)-x(l-1))p(l)-\frac{\Delta\tau}{2m}p^2(l)}=\sqrt{\frac{\pi}{\Delta\tau/(2m)}}e^{\frac{-\left(\frac{x(l)-x(l-1)}{\hbar}\right)^2}{4\Delta\tau/(2m)}} \tag{9.24}$$

由此对动量积分后的配分函数为

$$\mathcal{Z}=\frac{(\sqrt{2m\pi/\Delta\tau})^M}{(2\pi\hbar)^M}\int_{x(0)=x(M)}\prod_{l=1}^{M}dx(l)e^{-\sum_{l=1}^{M}\Delta\tau\frac{m}{2}(\frac{x(l)-x(l-1)}{\hbar\Delta\tau})^2}e^{-\sum_{l=1}^{M}\Delta\tau\sum_{j=1}^{M}V(x(l))}.$$

与先前讨论一致,我们取连续极限,这样就有(令$\hbar=1$)

$$\mathcal{Z}=\mathcal{Z}_0\int Dxe^{-\int_0^\beta d\tau(\frac{m}{2}\dot{x}^2+V(x))}.$$

当然,我们也可以把上述积掉动量的过程理解为先进行配平方,

$$-ip\dot{x}+\frac{p^2}{2m}=\frac{(p-im\dot{x})^2}{2m}+\frac{1}{2}m\dot{x}^2 \tag{9.25}$$

然后移动积分变量$p\to p+im\dot{x}$,这样我们得到

$$S=\int_0^\beta d\tau\left[\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\dot{x}^2+V(x)\right] \tag{9.26}$$

此时,动量部分可以通过Gauss积分积掉

$$\mathcal{Z}=\int Dp(\tau)e^{-\int_0^\beta d\tau\frac{p^2}{2m}}\int Dx(\tau)e^{-\int_0^\beta d\tau(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+V(x))}=\mathcal{Z}_0\int Dx(\tau)e^{-\int_0^\beta d\tau\mathcal{L}(x,\dot{x})}$$

这样,我们引入了拉格朗日量

$$\mathcal{L}(x,\dot{x})=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+V(x) \tag{9.27}$$

与实时路径积分的关系

注意这个拉氏量与通常的相比($\mathcal{L}=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x)$),其势能的符号是相反的.[4]事实上,如果我们在实时路径积分形式中做Wick转动$t=-i\tau$,那么传播

[4]这个负号说明粒子感受到的势垒在Wick转动下成为势阱,这样我们可以把势阱之间的跃迁解释成势垒间的隧穿,这就是所谓的instanton技术.每一个instanton事件解释为一次隧穿.这类技术可以得到比WKB近似更多的信息,还可解释真空之间的隧穿效应.(《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》459 – 466 页.)

子$G(x,t;x',0)\to G_E(x,\tau;x',0)$,

$$\begin{aligned} G_E(x,\tau;x',0) &= \int_{\tilde{x}(\tau)=x,\tilde{x}(0)=x'} \mathcal{D}\tilde{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^\tau(-i)d\tau'(-\frac{m(\partial_{\tau'}\tilde{x})^2}{2}-V(\tilde{x}))} \\ &= \int_{\tilde{x}(\tau)=x,\tilde{x}(0)=x'} \mathcal{D}\tilde{x}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau d\tau'(\frac{m\dot{\tilde{x}}^2}{2}+V(\tilde{x}))} \end{aligned} \tag{9.28}$$

显然,在$G_E(x,\tau;x',0)$中设$x'=x$,$\tau=\beta$,$\hbar=1$并对x积分就得到虚时形式下的配分函数,

$$\mathcal{Z}=\int dxG_E(x,\beta;x,0)=\int\mathcal{D}xe^{-S} \tag{9.29}$$

换句话说,$\frac{1}{\mathcal{Z}}G_E(x,\beta;x',0)$相当于平衡态密度矩阵$\hat{\rho}=\frac{1}{\mathcal{Z}}e^{-\beta\hat{H}}$在坐标表象下的矩阵元,即有$G_E(x,\beta;x',0)=\langle x|e^{-\beta\hat{H}}|x'\rangle$,

$$G_E(x,\beta;x',0)=\int_{\tilde{x}(\beta)=x,\tilde{x}(0)=x'}\mathcal{D}\tilde{x}e^{-\int_0^\beta d\tau(\frac{m\dot{\tilde{x}}^2}{2}+V(\tilde{x}))} \tag{9.30}$$

因此我们也就获得了密度矩阵的路径积分表示.平衡态密度矩阵(矩阵元)的路径积分与配分函数的路径积分表示相比,相当于固定了初始时刻$\tau=0$以及终了时刻$\tau=\beta$体系处于的量子态(这里是$|x'\rangle$和$|x\rangle$)

对于由$|\psi\rangle=e^{-i\hat{H}(0-t_{-\infty})}|\psi(-\infty)\rangle(t_{-\infty}=-\infty)$构成的纯态密度矩阵$\hat{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi|$,其坐标空间的矩阵元$\rho(x,x')=\langle x|\psi\rangle\langle\psi|x'\rangle$表示为

$$\begin{aligned} \rho(x,x') &= \psi(x,0)\psi^*(x',0)=\int dx''G(x,0;x'',-\infty)\psi(x'',-\infty)\int dx'''G(x''',\infty;x',0)\psi^*(x''',-\infty) \\ &= \int dx''\int_{\tilde{x}(0)=x,\tilde{x}(-\infty)=x''}\mathcal{D}\tilde{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^0 dt'(\frac{m\dot{\tilde{x}}^2}{2}-V(x))}\psi(x'',-\infty) \\ &\times \int dx'''\int_{\tilde{x}(\infty)=x''',\tilde{x}(0)=x'}\mathcal{D}\tilde{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt'(\frac{m\dot{\tilde{x}}^2}{2}-V(\tilde{x}))}\psi^*(x''',-\infty) \\ &= \int dx''dx'''\int_{\tilde{x}(0^-)=x,\tilde{x}(0^+)=x',\tilde{x}(-\infty)=x'',\tilde{x}(\infty)=x'''}\mathcal{D}\tilde{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^\infty dt'(\frac{m\dot{\tilde{x}}^2}{2}-V(\tilde{x}))}\psi(x'',-\infty)\psi^*(x''',-\infty) \\ &= \int_{\tilde{x}(0^-)=x,\tilde{x}(0^+)=x'}\mathcal{D}\tilde{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^\infty dt'(\frac{m\dot{\tilde{x}}^2}{2}-V(\tilde{x}))}\psi^*(\tilde{x}(\infty),-\infty)\psi(\tilde{x}(-\infty),-\infty) \end{aligned} \tag{9.31}$$

可以看到,$\rho(x,x')$在路径积分下的物理意义是从负无穷时间传播到正无穷时间粒子对所有可能路径的求和,当然,我们需要保证正负无穷是同一个量子态而零时刻附近粒子必须出现在x和x'处.如果再做Wick转动,那么我们就得到虚时形式下的密度矩阵,(假设无穷时间时的状态$\psi(x,-\infty)$是均匀分布,那么它仅是常数因子而可忽略)

$$\boxed{\rho(x,x')=\int\mathcal{D}\tilde{x}e^{-\int_{-\infty}^\infty d\tau'(\frac{m\dot{\tilde{x}}^2}{2}+V(\tilde{x}))}\delta(\tilde{x}(0^-)=x)\delta(\tilde{x}(0^+)=x')} \tag{9.32}$$

总之,无论采用哪种方式,我们发现量子粒子的配分函数的求迹运算通过路径积分方法转化为一个等效的经典统计模型.在该统计模型中,变量是每一时刻

的坐标$x(\tau)$,Boltzman权重是作用量的指数e^{-S},而作用量本身由粒子的经典拉格朗日量的虚时间积分定出$S = \int_0^\beta \mathcal{L}(x, \dot{x})$.

注意,在经典力学中,粒子的运动轨迹由作用量的极值确定$\delta S = 0$, 但在这里所有的路径都有贡献,这些路径的求和给出量子力学效应.

量子场的路径积分:我们都用相干态

在单粒子的路径积分构造中,我们利用位置与动量的本征态把算符化为一般的数,进而得到纯数形式的配分函数.对于量子场,我们先前已经得到了相应的二次量子化形式,以及产生湮灭算符作用的Fock空间.那么相应的问题是此时我们该选择什么样的态,以使得算符形式的场变为数,构造有用的场的路径积分形式.我们会发现,玻色子与费米子的形式并不相同,玻色场可化为通常的数,但是费米场则需要反对易的数,即Grassman数.

玻色场

回忆先前二次量子化时的讨论,我们知道量子场的任意态可以展开为占据数态的叠加

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1,n_2,\ldots} C_{n_1,n_2,\ldots}|n_1,n_2,\ldots\rangle \tag{9.33}$$

这里占据数态可由粒子数产生算符作用于真空态构造而成

$$|n_1,n_2,\ldots\rangle = \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}\ldots}{\sqrt{n_1!}\sqrt{n_2!}\ldots}|0\rangle \tag{9.34}$$

如果我们构造这样一个态$|\phi\rangle$

$$|\phi\rangle = e^{\sum_j \phi_j \hat{a}_j^\dagger}|0\rangle \tag{9.35}$$

其中ϕ_i代表一些列复的常系数.[5]那么对这个态作用上任意湮灭算符$\hat{a}_i$

$$\hat{a}_i|\phi\rangle = \hat{a}_i e^{\sum_j \phi_j \hat{a}_j^\dagger}|0\rangle = e^{\sum_{j\neq i} \phi_j \hat{a}_j^\dagger}\hat{a}_i e^{\phi_i \hat{a}_i^\dagger}|0\rangle \tag{9.36}$$

为了计算$\hat{a}_i e^{\phi_i \hat{a}_i^\dagger}$,我们把指数展开,并利用 $[\hat{a},(\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$可得

$$\begin{aligned}\hat{a}_i e^{\phi_i \hat{a}_i^\dagger}|0\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\phi_i^n}{n!}\hat{a}_i(\hat{a}_i^\dagger)^n|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\phi_i^n}{n!}\left[(\hat{a}_i^\dagger)^n\hat{a}_i + n(\hat{a}_i^\dagger)^{n-1}\right]|0\rangle \\ &= \phi_i\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\phi_i^{n-1}}{(n-1)!}(\hat{a}_i^\dagger)^{n-1}|0\rangle = \phi_i e^{\phi_i\hat{a}_i^\dagger}|0\rangle\end{aligned} \tag{9.37}$$

这样,我们发现

$$\boxed{\hat{a}_i|\phi\rangle = \phi_i e^{\sum_j \phi_j \hat{a}_j^\dagger}|0\rangle = \phi_i|\phi\rangle} \tag{9.38}$$

这表明$|\phi\rangle$就是湮灭算符$\hat{a}_i$的本征态,也叫做玻色场的相干态(coherent state),[6]其对应的本征值是ϕ_i. 这样,我们可以利用其作为基矢构造相应的路径积分形式.

[5]ϕ_i的总数取决于系统不同玻色子模式的个数.系统有N个模式那么ϕ_i就有N个.例如$\hat{H} = \omega\hat{a}^\dagger\hat{a}$那么$|\phi\rangle = e^{\phi\hat{a}^\dagger}|0\rangle$也就是只有一个系数而如果哈密顿量有两个模式$\hat{H} = \omega_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 + \omega_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2$那么$|\phi\rangle = e^{\phi_1\hat{a}_1^\dagger + \phi_2\hat{a}_2^\dagger}|0\rangle$.因此,相干态实际上包含了所有模式的信息.

[6]相干态在量子光学和量子信息研究中是非常重要的.

显然,对$\hat{a}_i|\phi\rangle = \phi_i|\phi\rangle$求共轭可得

$$\boxed{\langle\phi|\hat{a}_i^\dagger = \langle\phi|\phi_i^*} \tag{9.39}$$

此外,

$$\hat{a}_i^\dagger|\phi\rangle = \partial_{\phi_i}|\phi\rangle \tag{9.40}$$

对于两个不同的相干态$|\phi\rangle,\ |\theta\rangle$有

$$\langle\theta|\phi\rangle = \langle 0|e^{\sum_j \theta_j^*\hat{a}_j}|\phi\rangle = \langle 0|e^{\sum_j \theta_j^*\phi_j}|\phi\rangle = e^{\sum_j \theta_j^*\phi_j}\langle 0|\phi\rangle \tag{9.41}$$

而

$$\langle 0|\phi\rangle = \langle 0|e^{\sum_j \phi_j\hat{a}_j^\dagger}|0\rangle = \prod_j\langle 0|e^{\phi_j\hat{a}_j^\dagger}|0\rangle = \prod_j\langle 0|\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\phi_j^n}{n!}(\hat{a}_j^\dagger)^n|0\rangle = \prod_j\langle 0|\frac{\phi_j^0}{0!}(\hat{a}_j^\dagger)^0|0\rangle = \prod_j\langle 0|0\rangle = 1 \tag{9.42}$$

这样我们得到两个相干态的重叠度是

$$\boxed{\langle\theta|\phi\rangle = e^{\sum_j \theta_j^*\phi_j}} \tag{9.43}$$

那么对于同一个相干态有

$$\langle\phi|\phi\rangle = e^{\sum_j \phi_j^*\phi_j} = e^{\sum_j |\phi_j|^2} \tag{9.44}$$

这两个结果表明相干态之间既不是正交的,也不是归一的.关于相干态最重要的结果是它们的完备性关系,即

$$\boxed{\int\prod_j \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-\sum_j \phi_j^*\phi_j}|\phi\rangle\langle\phi| = 1} \tag{9.45}$$

注意到通常量子力学中的完备关系是$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$,这样作用到任意量子态$|\psi\rangle$有

$$\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_{nm}|n\rangle\overbrace{\langle n|m\rangle}^{\delta_{nm}}c_m = \sum_m c_m|m\rangle = |\psi\rangle \tag{9.46}$$

这说明$\sum_n |n\rangle\langle n|$确实是单位算符,满足完备性关系.现在我们把$\int\prod_j \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-\sum_j \phi_j^*\phi_j}|\phi\rangle\langle\phi|$作用到任意相干态$|\theta\rangle$上(量子场的任意量子态是相干态的叠加),如果$\int\prod_j \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-\sum_j \phi_j^*\phi_j}|\phi\rangle\langle\phi|\theta\rangle = |\theta\rangle$ 成立说明该形式是正确的完备性关系.直接计算有

$$\begin{aligned}
&\int\prod_j \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-\sum_j \phi_j^*\phi_j}|\phi\rangle\langle\phi|\theta\rangle = \int\prod_j \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-\sum_j \phi_j^*\phi_j}|\phi\rangle e^{\sum_j \phi_j^*\theta_j}\\
=\ &\int\prod_j \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-\sum_j \phi_j^*\phi_j}e^{\sum_j \phi_j^*\theta_j}e^{\sum_j \phi_j a_j^\dagger}|0\rangle\\
=\ &\prod_j\int\frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-\phi_j^*\phi_j+\phi_j^*\theta_j+\phi_j a_j^\dagger}|0\rangle = \prod_j\overbrace{\int\frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi}e^{-(\phi_j^*-a_j^\dagger)(\phi_j-\theta_j)}}^{=1}e^{\theta_j a_j^\dagger}|0\rangle\\
=\ &\prod_j e^{\theta_j a_j^\dagger}|0\rangle = |\theta\rangle
\end{aligned} \tag{9.47}$$

这里$d\phi_j^* d\phi_j = d\mathrm{Re}\phi_j d\mathrm{Im}\phi_j$.这说明$\int \prod_j \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi} e^{-\sum_j \phi_j^* \phi_j} |\phi\rangle\langle\phi| = 1$ 是正确的完备性关系.

让我们考虑一个单频率玻色子的简单例子,其哈密顿量是$\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}$,与先前的单粒子情况类似,我们把配分函数的指数划分为M 份

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \mathrm{Tr}(e^{-\Delta\tau \hat{H}})^M \tag{9.48}$$

对其中的每一份插入$|\phi'\rangle = e^{\phi' \hat{a}^\dagger}|0\rangle$和$|\phi\rangle = e^{\phi \hat{a}^\dagger}|0\rangle$的完备性关系有

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\tau\hat{H}} &= \int \frac{d\phi'^* d\phi'}{\pi} e^{-\phi'^*\phi'} |\phi'\rangle\langle\phi'| e^{-\Delta\tau\hat{H}} \int \frac{d\phi^* d\phi}{\pi} e^{-\phi^*\phi} |\phi\rangle\langle\phi| \\
&= \int \frac{d\phi'^* d\phi'}{\pi} e^{-\phi'^*\phi'} \int \frac{d\phi^* d\phi}{\pi} e^{-\phi^*\phi} |\phi'\rangle\langle\phi'| e^{-\Delta\tau\hat{H}} |\phi\rangle\langle\phi| \\
&= \int \frac{d\phi'^* d\phi'}{\pi} \int \frac{d\phi^* d\phi}{\pi} e^{-\Delta\tau H(\phi'^*,\phi)} e^{-\phi'^*\phi'} e^{-\phi^*\phi} |\phi'\rangle\langle\phi'|\phi\rangle\langle\phi|, \quad H(\phi'^*,\phi) = \omega\phi'^*\phi \\
&= \int \frac{d\phi'^* d\phi'}{\pi} \int \frac{d\phi^* d\phi}{\pi} e^{-\Delta\tau H(\phi'^*,\phi)} e^{-\phi'^*\phi'} e^{-\phi^*\phi} e^{\phi'^*\phi} |\phi'\rangle\langle\phi|
\end{aligned} \tag{9.49}$$

这里ϕ和ϕ'分别为$2l-1$与$2l$时刻的复场.那么体系的配分函数是

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \int \prod_{l=1}^{M} \frac{d\phi^*(2l) d\phi(2l) d\phi^*(2l-1) d\phi(2l-1)}{\pi^2} \prod_{l=1}^{M} e^{-\phi^*(2l)\phi(2l) - \phi^*(2l-1)\phi(2l-1) + \phi^*(2l)\phi(2l-1) - \Delta\tau H(\phi^*(2l),\phi(2l-1))} \\
&\quad \times \mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M} |\phi(2l)\rangle\langle\phi(2l-1)|\right]
\end{aligned} \tag{9.50}$$

这里的求迹可选为对所有占据数态$\{|n\rangle\}$求和,[7]那么有

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M} |\phi(2l)\rangle\langle\phi(2l-1)|\right] &= \sum_n \langle n| \prod_{l=1}^{M} |\phi(2l)\rangle\langle\phi(2l-1)|n\rangle \\
&= \prod_{l=1}^{M-1} e^{\phi^*(2l+1)\phi(2l)} \sum_n \langle n|\phi(2M)\rangle\langle\phi(1)|n\rangle \\
&= \prod_{l=1}^{M-1} e^{\phi^*(2l+1)\phi(2l)} \langle\phi(1)| \overbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}^{=1} |\phi(2M)\rangle \\
&= \prod_{l=1}^{M-1} e^{\phi^*(2l+1)\phi(2l)} \overbrace{\langle\phi(1)|\phi(2M)\rangle}^{=e^{\phi^*(1)\phi(2M)}} \\
&= \prod_{l=1}^{M} e^{\phi^*(2l-1)\phi(2l-2)}, \quad \phi(0) = \phi(2M)
\end{aligned} \tag{9.51}$$

可以看到配分函数中求迹操作的主要效果是产生时间方向上的边界跃迁($e^{\phi^*(1)\phi(2M)}$),这等价于存在边界条件$\phi(0) = \phi(2M)$.[8] 这样我们发现分离

[7]对于多个模式构成的相干态$|\phi\rangle = e^{\sum_j \phi_j \hat{a}_j^\dagger}|0\rangle$,我们需要对所有模式的所有占据数态$\{|n_1, n_2 ...\rangle\}$求和.

[8]如果不做求迹操作,那么上面的结果是$\prod_{l=1}^{M-1} e^{\phi^*(2l+1)\phi(2l)} |\phi(2M)\rangle\langle\phi(1)|$.

形式的作用量是

$$S=\sum_{l=1}^{M}[\phi^*(2l)\phi(2l)+\phi^*(2l-1)\phi(2l-1)-\phi^*(2l)\phi(2l-1)-\phi^*(2l-1)\phi(2l-2)$$
$$+\Delta\tau H(\phi^*(2l),\phi(2l-1))]$$
$$=\sum_{l=1}^{M}[\phi^*(2l)(\phi(2l)-\phi(2l-1))+\phi^*(2l-1)(\phi(2l-1)-\phi(2l-2))+\Delta\tau H(\phi^*(2l),\phi(2l-1))]$$

在连续极限,我们有

$$\phi(2l)-\phi(2l-1),\phi(2l-1)-\phi(2l-2)\to\frac{\Delta\tau}{2}\partial_\tau\phi(\tau)|_{\tau=l\Delta\tau}=\frac{d\tau}{2}\partial_\tau\phi$$
$$\phi^*(2l),\phi^*(2l-1)\to\phi^*(\tau) \tag{9.52}$$

这样我们得到连续极限下的作用量

$$S=\int_0^\beta d\tau\left[\phi^*\partial_\tau\phi+H(\phi^*,\phi)\right]=\int_0^\beta d\tau\left[\phi^*\partial_\tau\phi+\omega\phi^*\phi\right] \tag{9.53}$$

此时边界条件是$\phi(0)=\phi(\beta)$,配分函数的形式是

$$\mathcal{Z}=\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S},\quad D\phi(\tau)\equiv\prod_\tau d\phi(\tau) \tag{9.54}$$

- 值得注意的是,不做求迹操作会得到$e^{-\beta\hat{H}}=\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S}|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)|$,(没有边界条件$\phi(\beta)=\phi(0)$,注意到$|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)|$实际上还有因子$e^{-\phi^*(0)\phi(\beta)}$与它相乘,不过文献中通常不明确写出).因此平衡态密度矩阵可以表示为$\hat{\rho}=\frac{1}{\mathcal{Z}}e^{-\beta\hat{H}}=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S}|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)|$而基态密度矩阵是$\beta\to\infty$的极限,即$\hat{\rho}=|\Psi_g\rangle\langle\Psi_g|=\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S}|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)|$.这些形式对研究系统的量子纠缠很有用.

  如果考虑正规序形式的相互作用$g\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}$,那么在做相干态平均时有

$$\langle\phi'|g\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}|\phi\rangle=g\phi^2\langle\phi'|\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|\phi\rangle=g(\phi'^*)^2\phi^2\langle\phi'|\phi\rangle \tag{9.55}$$

这等价于在作用量中直接加入这一项

$$S=\int_0^\beta d\tau\left[\phi^*\partial_\tau\phi+\omega\phi^*\phi+g(\phi^*)^2\phi^2\right] \tag{9.56}$$

对于一般形式的玻色子的哈密顿量$\hat{H}=\sum_{jk}t_{jk}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_k+\sum_{jklm}V_{jklm}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l\hat{b}_m$其相干态平均有如下形式

$$\langle\phi'|\hat{H}|\phi\rangle = \sum_{jk}t_{jk}\langle\phi'|\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_k|\phi\rangle+\sum_{jklm}V_{jklm}\langle\phi'|\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l\hat{b}_m|\phi\rangle \tag{9.57}$$
$$= \sum_{jk}t_{jk}\langle\phi'|\phi_j'^*\phi_k|\phi\rangle+\sum_{jklm}V_{jklm}\langle\phi'|\phi_j'^*\phi_k'^*\phi_l\phi_m|\phi\rangle \tag{9.58}$$
$$= \left[\sum_{jk}t_{jk}\phi_j'^*\phi_k+\sum_{jklm}V_{jklm}\phi_j'^*\phi_k'^*\phi_l\phi_m\right]\langle\phi'|\phi\rangle \tag{9.59}$$
$$= H(\phi'^*,\phi)e^{\sum_j\phi_j'^*\phi_j} \tag{9.60}$$

这样我们发现相应的连续极限作用量是

$$\boxed{S=\int_0^\beta d\tau\left[\sum_j\phi_j^*\partial_\tau\phi_j+\sum_{jk}t_{jk}\phi_j^*\phi_k+\sum_{jklm}V_{jklm}\phi_j^*\phi_k^*\phi_l\phi_m\right]=\int_0^\beta d\tau\left[\sum_j\phi_j^*\partial_\tau\phi_j+H(\phi^*,\phi)\right]}$$

当然周期边界条件也推广为$\phi_j(0)=\phi_j(\tau)$.

换句话说,我们发现如下重要对应:

- 二次量子化玻色子的多体哈密顿量$\hat{H}=\sum_{jk}t_{jk}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_k+\sum_{jklm}V_{jklm}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_l\hat{b}_m$对应的作用量相当于把哈密顿量中的产生(湮灭)算符$\hat{b}_j^\dagger,\hat{b}_k$换为对应的复数场 ϕ_j^*,ϕ_k并添加对虚时间的导数部分$\sum_j\phi_j^*\partial_\tau\phi_j$.
- d维的玻色系统对应于$d+1$维的等效经典统计(场)模型.
- 如果我们把场的下标解释为空间坐标,就有玻色场算符形式哈密顿量与经典场作用量的对应:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)+\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\\ \Rightarrow S &= \int d\tau\int d^dx\psi^*(x)\left[\partial_\tau-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\psi(x)+\int d\tau\int d^dx\int d^dy\psi^*(x)\psi^*(y)V(x-y)\psi(y)\psi(x)\end{aligned}$$

一个例子:双模玻色场

让我们考虑两个耦合的玻色子模式$\hat{a}_1,\hat{a}_2$,体系的哈密顿量是$\hat{H}=\omega(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)+V(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)$. 这样体系的相干态可以设为$|\phi\rangle=e^{\phi_1\hat{a}_1^\dagger+\phi_2\hat{a}_2^\dagger}|0,0\rangle$.根据先前的讨论,体系的基态密度矩阵可用路径积分在写成:

$$\hat{\rho}=|\Psi_g\rangle\langle\Psi_g|=\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S[\phi]}|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)|. \tag{9.61}$$

现在,让我们积掉$\hat{a}_2$模式的自由度以得到$\hat{a}_1$模式的约化密度矩阵$\hat{\rho}_{reduce}=\mathrm{Tr}_{\hat{a}_2}\hat{\rho}$,这里的关键是计算$\mathrm{Tr}_{\hat{a}_2}|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)|$:

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{\hat{a}_2}|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)| &= \sum_{n_2=0}^\infty\langle n_2|\overbrace{e^{\phi_1(\beta)\hat{a}_1^\dagger}e^{\phi_2(\beta)\hat{a}_2^\dagger}|0,0\rangle}^{|\phi(\beta)\rangle}\overbrace{\langle 0,0|e^{\phi_1^*(0)\hat{a}_1}e^{\phi_2^*(0)\hat{a}_2}}^{\langle\phi(0)|}|n_2\rangle\\ &= e^{\phi_1(\beta)\hat{a}_1^\dagger}|0\rangle\langle 0|e^{\phi_1^*(0)\hat{a}_1}\sum_{n_2=0}^\infty\langle n_2|e^{\phi_2(\beta)\hat{a}_2^\dagger}|0\rangle\langle 0|e^{\phi_2^*(0)\hat{a}_2}|n_2\rangle\\ &= e^{\phi_1(\beta)\hat{a}_1^\dagger}|0\rangle\langle 0|e^{\phi_1^*(0)\hat{a}_1}\langle 0|e^{\phi_2^*(0)\hat{a}_2}\overbrace{\sum_{n_2=0}^\infty|n_2\rangle\langle n_2|}^{=1}e^{\phi_2(\beta)\hat{a}_2^\dagger}|0\rangle\\ &= e^{\phi_1(\beta)\hat{a}_1^\dagger}|0\rangle\langle 0|e^{\phi_1^*(0)\hat{a}_1}W(\phi_2(\beta),\phi_2^*(0))\end{aligned} \tag{9.62}$$

这里

$$\begin{aligned} W(\phi_2(\beta),\phi_2^*(0)) &= \langle 0|e^{\phi_2^*(0)\hat{a}_2}e^{\phi_2(\beta)\hat{a}_2^\dagger}|0\rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty}\frac{(\phi^*(0))^m\phi^n(\beta)}{m!n!}\langle 0|\hat{a}_2^m(\hat{a}_2^\dagger)^n|0\rangle \\ &= \sum_{m,n=0}^{\infty}\frac{(\phi_2^*(0))^m\phi_2^n(\beta)}{m!n!}\langle m|\sqrt{m!}\sqrt{n!}|n\rangle \\ &= \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(\phi_2^*(0))^m\phi_2^m(\beta)}{m!} = e^{\phi_2^*(0)\phi_2(\beta)} \end{aligned} \tag{9.63}$$

因此有

$$\hat{\rho}_{reduce} = \lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S[\phi]}e^{\phi_1(\beta)\hat{a}_1^\dagger}|0\rangle\langle 0|e^{\phi_1^*(0)\hat{a}_1}e^{\phi_2^*(0)\phi_2(\beta)}. \tag{9.64}$$

注意到定义$|\phi(\beta)\rangle\langle\phi(0)|$时没有明确写出的因子$e^{-\sum_{i=1}^{2}\phi^*(0)\phi(\beta)}$,这个因子的存在使得密度矩阵的路径积分没有周期边界条件$\phi(0)=\phi(\beta)$.现在,积掉$\hat{a}_2$自由度所得的因子$e^{\phi_2^*(0)\phi_2(\beta)}$恰好抵消$e^{-\phi_2^*(0)\phi_2(\beta)}$,这样$\phi_2$又有周期边界条件同时约化密度矩阵可以写成

$$\hat{\rho}_{reduce} = \lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S[\phi]}e^{-\phi_1^*(0)\phi_1(\beta)}e^{\phi_1(\beta)\hat{a}_1^\dagger}|0\rangle\langle 0|e^{\phi_1^*(0)\hat{a}_1}. \tag{9.65}$$

可以看到如果再对$\hat{a}_1$自由度求迹就有标准结果$\mathrm{Tr}\hat{\rho}_{reduced}=1$,而约化密度矩阵在不同占据数态下的矩阵元是

$$\langle n_1|\hat{\rho}_{reduce}|n_1'\rangle = \lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S[\phi]}e^{-\phi_1^*(0)\phi_1(\beta)}\frac{\phi_1^{n_1}(\beta)(\phi_1^*(0))^{n_1'}}{\sqrt{n_1!n_1'!}}. \tag{9.66}$$

费米场

Grassman数

在定义费米子的相干态之前,我们先介绍Grassman数的简单性质.

如有两个Grassman数η_i,η_j,那么它们满足反对易关系

$$\boxed{\eta_i\eta_j+\eta_j\eta_i=[\eta_i,\eta_j]_+=0} \tag{9.67}$$

这说明我们交换两个Grassman数时会多出一个负号. 显然,当$\eta_i=\eta_j$时可得$2\eta_i^2=0$,即有

$$\boxed{\eta_i^2=0} \tag{9.68}$$

也就是说两个相同Grassman数的乘积为零.这个性质导致Grassman数构成的函数具有很好的性质,例如函数的泰勒展开只有有限项

$$f(\eta)=f(0)+\eta f'(0)+\sum_{n=2}^{\infty}\eta^n\frac{f^n(0)}{n!}=f(0)+\eta f'(0)+0=f(0)+\eta f'(0) \tag{9.69}$$

在泰勒展开中,展开系数$f(0), f'(0)$本身是通常的数,与费米子算符和Grassman都是对易的.

Grassman数的导数定义为

$$\partial_{\eta_i}\eta_j = \delta_{ij} \tag{9.70}$$

注意,由于求导本身包含η_i,这说明求导符号∂_{η_i}也是反对易的Grassman数,即有

$$\partial_{\eta_i}(\eta_j\eta_i) = (\partial_{\eta_i}\eta_j)\eta_i - \eta_j\partial_{\eta_i}\eta_i = 0 - \eta_j = -\eta_j, \quad i \neq j \tag{9.71}$$

Grassman数的积分是

$$\int d\eta_i = 0, \qquad \int d\eta_i\eta_i = 1 \tag{9.72}$$

注意积分符号$d\eta_i$也是反对易的数.此外,我们发现Grassman数的积分与求导实际上是一样的.这可以理解为

$$\int d\eta f(\eta) = \int d\eta[f(0) + \eta f'(0)] = \int d\eta\eta f'(0) = f'(0) = \partial_\eta f(\eta) \tag{9.73}$$

这样,Grassman数的Gauss积分具有很简单的形式(a是普通的数)

$$\boxed{\int d\bar{\eta}d\eta e^{-a\bar{\eta}\eta} = \int d\bar{\eta}d\eta(1 - a\bar{\eta}\eta) = -a\int d\bar{\eta}d\eta\bar{\eta}\eta = +a\partial_{\bar{\eta}}\bar{\eta}\partial_\eta\eta = a} \tag{9.74}$$

在计算上述积分时,我们需要先对$e^{-a\bar{\eta}\eta}$展开$e^{-a\bar{\eta}\eta} = 1 - a\bar{\eta}\eta$. 当有很多个Grassman数时,相应的Gauss积分是

$$\int\prod_i d\bar{\eta}_i d\eta_i e^{-\bar{\eta}_i A_{ij}\eta_j} = \int\prod_i d\tilde{\bar{\eta}}_i d\tilde{\eta}_i e^{-\tilde{\bar{\eta}}_i\tilde{A}_{ii}\tilde{\eta}_i} = \prod_i \tilde{A}_{ii} = \mathrm{Det}A \tag{9.75}$$

这里我们通过引入幺正矩阵总是可以把非对角形式$\bar{\eta}_i A_{ij}\eta_j$化为对角形式$\tilde{\bar{\eta}}_i\tilde{A}_{ii}\tilde{\eta}_i$而$\tilde{A}_{ii}$是矩阵$A$的本征值.

最后,我们规定Grassman数与费米子算符之间满足反对易关系$[\eta_i, \hat{c}_j]_+ = 0$而它们与玻色子算符以及通常的数之间是对易的.

相干态路径积分

仿照玻色子的情形,我们定义费米子的相干态

$$\boxed{|\eta\rangle = e^{-\sum_j \eta_j\hat{c}_j^\dagger}|0\rangle} \tag{9.76}$$

它是费米子湮灭算符$\hat{c}_i$的本征态

$$\hat{c}_i|\eta\rangle = \eta_i|\eta\rangle \tag{9.77}$$

注意费米子相干态中指数$e^{-\sum_j \eta_j\hat{c}_j^\dagger}$的负号而玻色子相干态没有负号.

我们可以看一下单个模式下的情况,即

$$|\eta\rangle = e^{-\eta\hat{c}^\dagger}|0\rangle = (1-\eta\hat{c}^\dagger)|0\rangle = |0\rangle - \eta|1\rangle \tag{9.78}$$

$$\hat{c}|\eta\rangle = \hat{c}|0\rangle - \hat{c}\eta|1\rangle = \eta\hat{c}|1\rangle = \eta|0\rangle \tag{9.79}$$

注意到

$$\eta|\eta\rangle = \eta|0\rangle - \eta^2|1\rangle = \eta|0\rangle \tag{9.80}$$

那么我们得到

$$\hat{c}|\eta\rangle = \eta|0\rangle = \eta|\eta\rangle \tag{9.81}$$

也就是$|\eta\rangle$是$\hat{c}$的本征态,其本征值η.同理可知对一般的费米子湮灭算符 $\hat{c}_i|\eta\rangle = \eta_i|\eta\rangle$成立.

费米子相干态的共轭态是

$$\langle\eta| = \langle 0|e^{-\sum_j \hat{c}_j\bar{\eta}_j} = \langle 0|e^{\sum_j \bar{\eta}_j\hat{c}_j} \tag{9.82}$$

注意对于Grassman数而言,$\bar{\eta} \neq \eta^*$,也就是$\bar{\eta},\eta$是两个无关的独立变量.

这样产生算符$\hat{c}_i^\dagger$作用于相干态的共轭可得

$$\langle\eta|\hat{c}_i^\dagger = \langle\eta|\bar{\eta}_i \tag{9.83}$$

与玻色子的情况类似,两个费米子相干态的重叠度是

$$\boxed{\langle\eta'|\eta\rangle = e^{\sum_j \bar{\eta}'_j\eta_j}} \tag{9.84}$$

完备性关系是

$$\boxed{\int\prod_j d\bar{\eta}_j d\eta_j e^{-\sum_j \bar{\eta}_j\eta_j}|\eta\rangle\langle\eta| = 1} \tag{9.85}$$

考虑一个单模费米子$\hat{H} = \varepsilon\hat{c}^\dagger\hat{c}$的路径积分,仿照玻色子的处理,我们得到

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\tau\hat{H}} &= \int d\bar{\eta}'d\eta' e^{-\bar{\eta}'\eta'}\int d\bar{\eta}d\eta e^{-\bar{\eta}\eta}|\eta'\rangle\langle\eta'|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\eta\rangle\langle\eta| &(9.86)\\
&= \int d\bar{\eta}'d\eta'\int d\bar{\eta}d\eta e^{-\Delta\tau H(\bar{\eta}',\eta)}e^{-\bar{\eta}'\eta'}e^{-\bar{\eta}\eta}|\eta'\rangle\langle\eta'|\eta\rangle\langle\eta| &(9.87)\\
&= \int d\bar{\eta}'d\eta'\int d\bar{\eta}d\eta e^{-\Delta\tau H(\bar{\eta}',\eta)}e^{-\bar{\eta}'\eta'}e^{-\bar{\eta}\eta}e^{\bar{\eta}'\eta}|\eta'\rangle\langle\eta| &(9.88)
\end{aligned}$$

对所有时刻求和可得系统的配分函数

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \int\prod_{l=1}^{M} d\bar{\eta}(2l)d\eta(2l)d\bar{\eta}(2l-1)d\eta(2l-1)\prod_{l=1}^{M} e^{-\bar{\eta}(2l)\eta(2l)-\bar{\eta}(2l-1)\eta(2l-1)+\bar{\eta}(2l)\eta(2l-1)-\Delta\tau H(\bar{\eta}(2l),\eta(2l-1}\\
&\times \mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M}|\eta(2l)\rangle\langle\eta(2l-1)|\right]
\end{aligned}$$

注意求迹运算对所有费米子占据数态求和

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M}|\eta(2l)\rangle\langle\eta(2l-1)|\right] &= \sum_n\langle n|\prod_{l=1}^{M}|\eta(2l)\rangle\langle\eta(2l-1)|n\rangle\\ &= \prod_{l=1}^{M-1}e^{\bar\eta(2l+1)\eta(2l)}\sum_n\langle n|\eta(2M)\rangle\langle\eta(1)|n\rangle\\ &= \prod_{l=1}^{M-1}e^{\bar\eta(2l+1)\eta(2l)}\langle-\eta(1)|\sum_n|n\rangle\langle n|\eta(2M)\rangle\\ &= \prod_{l=1}^{M-1}e^{\bar\eta(2l+1)\eta(2l)}\langle-\eta(1)|\eta(2M)\rangle\\ &= \prod_{l=1}^{M}e^{\bar\eta(2l-1)\eta(2l-2)},\ \ \eta(0)=-\eta(2M)\end{aligned}\tag{9.89}$$

在以上的推导中,我们利用了关系$\langle n|\eta'\rangle\langle\eta|n\rangle=\langle-\eta|n\rangle\langle n|\eta'\rangle$, $\langle-\eta|=\langle0|e^{-\bar\eta\hat c}$.对于前者,我们可以简单证明其成立,也就是有

$$\langle n|\eta'\rangle\langle\eta|n\rangle=\langle0|(\hat c)^n|\eta'\rangle\langle\eta|(\hat c^\dagger)^n|0\rangle.$$

由于对费米子而言$n=0$或1,因此当$n=0$时就有

$$\langle0|\eta'\rangle\langle\eta|0\rangle=\langle0|(|0\rangle-\eta'|1\rangle)(\langle0|(|0\rangle-\eta|1\rangle))^*=\langle0|0\rangle\langle0|0\rangle,$$

这里利用了$|\eta\rangle=|0\rangle-\eta|1\rangle$.当$n=1$时就有

$$\langle1|\eta'\rangle\langle\eta|1\rangle=\langle0|\hat c|\eta'\rangle\langle\eta|\hat c^\dagger|0\rangle=\langle0|\eta'|\eta'\rangle\langle\eta|\bar\eta|0\rangle=\eta'\bar\eta\langle0|\eta'\rangle\langle\eta|0\rangle=\eta'\bar\eta\langle0|0\rangle\langle0|0\rangle.$$

另一方面

$$\begin{aligned}\langle-\eta|n\rangle\langle n|\eta'\rangle &= \langle0|e^{-\bar\eta\hat c}(\hat c^\dagger)^n|0\rangle\langle0|(\hat c)^n e^{\eta'\hat c^\dagger}|0\rangle\\ &= \langle0|(1-\bar\eta\hat c)(\hat c^\dagger)^n|0\rangle\langle0|(\hat c)^n(1+\eta'\hat c^\dagger)|0\rangle\end{aligned}$$

当$n=0$时有

$$\langle-\eta|0\rangle\langle0|\eta'\rangle=\langle0|(1-\bar\eta\hat c)|0\rangle\langle0|(1+\eta'\hat c^\dagger)|0\rangle=\langle0|0\rangle\langle0|0\rangle.$$

当$n=1$有

$$\langle-\eta|1\rangle\langle1|\eta'\rangle=\langle0|(1-\bar\eta\hat c)\hat c^\dagger|0\rangle\langle0|\hat c(1+\eta'\hat c^\dagger)|0\rangle=-\bar\eta\eta'\langle0|0\rangle\langle0|0\rangle=\eta'\bar\eta\langle0|0\rangle\langle0|0\rangle.$$

因此我们发现$\langle0|\eta'\rangle\langle\eta|0\rangle=\langle-\eta|0\rangle\langle0|\eta'\rangle$,$\langle1|\eta'\rangle\langle\eta|1\rangle=\langle-\eta|1\rangle\langle1|\eta'\rangle$, 这说明$\langle n|\eta'\rangle\langle\eta|n\rangle=\langle-\eta|n\rangle\langle n|\eta'\rangle$恒成立.

在这里我们发现边界条件是$\eta(0)=-\eta(2M)$,即有反周期边界条件. 最后,我们得到连续极限下的费米子系统作用量

$$S=\int_0^\beta d\tau\,[\bar\eta\partial_\tau\eta+H(\bar\eta,\eta)]=\int_0^\beta d\tau\,[\bar\eta\partial_\tau\eta+\varepsilon\bar\eta\eta]\tag{9.90}$$

此时边界条件是$\eta(0)=-\eta(\beta)$,配分函数的形式是

$$\mathcal{Z}=\int D\bar{\eta}(\tau)D\eta(\tau)e^{-S} \tag{9.91}$$

当我们处理费米子多体哈密顿量时,我们会发现有如下对应关系.

- 产生湮灭算符构成的哈密顿量的对应:

$$\begin{aligned}&\hat{H}=\sum_{jk}t_{jk}\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_k+\sum_{jklm}V_{jklm}\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_l\hat{c}_m\\&\Rightarrow S=\int_0^\beta d\tau\left[\sum_j\bar{\eta}_j\partial_\tau\eta_j+\sum_{jk}t_{jk}\bar{\eta}_j\eta_k+\sum_{jklm}V_{jklm}\bar{\eta}_j\bar{\eta}_k\eta_l\eta_m\right]\end{aligned}$$

- 场算符形式的哈密顿量:

$$\begin{aligned}&\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)+\int d^dx\int d^dy\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)\\&\Rightarrow S=\int d\tau\int d^dx\bar{\psi}(x)\left[\partial_\tau-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\psi(x)+\int d\tau\int d^dx\int d^dy\bar{\psi}(x)\bar{\psi}(y)V(x-y)\psi(y)\psi(x)\end{aligned}$$

- 注意费米子系统的反周期边界条件$\eta_j(0)=-\eta_j(\beta),\ \psi(0)=-\psi(\beta)$.

松原频率

通过以上两小节的讨论,我们知道二次量子化的多体哈密顿量可以利用相干态路径积分改写为对作用量的统计求和,即

$$S=\int_0^\beta d\tau\left[\sum_j\bar{\psi}_j\partial_\tau\psi_j+\sum_{jk}t_{jk}\bar{\psi}_j\psi_k+\sum_{jklm}V_{jklm}\bar{\psi}_j\bar{\psi}_k\psi_l\psi_m\right],\ \mathcal{Z}=\int D\bar{\psi}D\psi e^{-S} \tag{9.92}$$

注意到场函数ψ满足周期或反周期边界条件$\phi(0)=\pm\psi(\beta)$,那么我们可以对场函数做分离的傅里叶展开:

$$\begin{aligned}&\psi(\tau)=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_n e^{-i\Omega_n\tau}\psi(\Omega_n),\ \Omega_n=\frac{\pi}{\beta}2n,\ n=0,\pm1,...,boson\\&\psi(\tau)=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_n e^{-i\omega_n\tau}\psi(\omega_n),\ \omega_n=\frac{\pi}{\beta}(2n+1),\ n=0,\pm1,...,fermion\end{aligned}$$

也就是说玻色场的频率Ω_n是π的偶数倍,而费米子场的频率ω_n 是π的奇数倍,这里的频率Ω_n,ω_n叫做松原频率(Matsubara frequency).逆傅里叶变换是

$$\psi(\Omega_n)=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_n\tau}\psi(\tau),\quad boson \tag{9.93}$$

$$\psi(\omega_n)=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}\psi(\tau),\quad fermion \tag{9.94}$$

类型	相干态	性质	边界条件	虚频率
玻色场	$\|\phi\rangle = e^{\sum_j \phi_j \hat{a}_j^\dagger}\|0\rangle$	$\hat{a}_i\|\phi\rangle = \phi_i\|\phi\rangle$	$\phi(\tau+\beta) = \phi(\tau)$	$\Omega_n = 2n\pi T$
费米场	$\|\eta\rangle = e^{-\sum_j \eta_j \hat{c}_j^\dagger}\|0\rangle$	$\hat{c}_i\|\eta\rangle = \eta_i\|\eta\rangle$	$\eta(\tau+\beta) = -\eta(\tau)$	$\omega_n = (2n+1)\pi T$

Table 9.1: 玻色与费米子体系相干态的性质.

以费米子系统为例,那么代入傅里叶变换后可得频率空间的作用量

$$S = \sum_{\omega_n}\sum_{j,k}\bar{\psi}_j(\omega_n)(-i\omega_n\delta_{jk} + t_{jk})\psi_k(\omega_n)$$
$$+\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_{n_1},\omega_{n_2},\omega_{n_3},\omega_{n_4}}\sum_{jklm} V_{jklm}\bar{\psi}_j(\omega_{n_1})\bar{\psi}_k(\omega_{n_2})\psi_l(\omega_{n_3})\psi_m(\omega_{n_4})\delta_{\omega_{n_1}+\omega_{n_2},\omega_{n_3}+\omega_{n_4}} \tag{9.95}$$

在推导以上形式时我们用到了$\frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\tau e^{-i(\omega_n-\omega_{n'})\tau} = \delta_{\omega_n,\omega_{n'}}$.

路径积分的简单例子:三人行比四人强

自由费米子

对于自由费米子,我们选择用动量本征态展开费米场,那么其作用量是

$$S_0 = \sum_{\omega_n}\sum_k \bar{\psi}_k(\omega_n)(-i\omega_n + \varepsilon_k - \mu)\psi_k(\omega_n) \tag{9.96}$$

那么对应的配分函数是

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_0 &= \int D\bar{\psi}D\psi e^{-\sum_{\omega_n}\sum_k \bar{\psi}_k(\omega_n)(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu)\psi_k(\omega_n)} &(9.97)\\
&= \prod_{k,\omega_n}\int d\bar{\psi}_k(\omega_n)d\psi_k(\omega_n)e^{-(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu)\bar{\psi}_k(\omega_n)\psi_k(\omega_n)} &(9.98)\\
&= \prod_{k,\omega_n}(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu) &(9.99)
\end{aligned}$$

这里我们利用了Grassman数的Gauss积分$\int d\bar{\eta}d\eta e^{-a\bar{\eta}\eta} = a$.既然有了配分函数,那么自由能是

$$\mathcal{F}_0 = -T\ln\mathcal{Z}_0 = -T\sum_{k,\omega_n}\ln(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu) \tag{9.100}$$

对比我们早已知晓的自由费米子自由能$\mathcal{F}_0 = -T\sum_k \ln(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)})$, 两者的差别在于对松原频率的求和.

我们把自由能对化学势求导可得

$$\frac{\partial\mathcal{F}_0}{\partial\mu} = -T\sum_{k,\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-(\varepsilon_k-\mu)} \tag{9.101}$$

利用围道积分可以证明以下重要的频率求和公式(对费米子)

$$T\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-(\varepsilon_k-\mu)} = f_F(\varepsilon_k-\mu) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1} \tag{9.102}$$

对玻色子的频率求和有

$$T\sum_{\Omega_n}\frac{1}{i\Omega_n-(\varepsilon_k-\mu)} = -f_B(\varepsilon_k-\mu) = -\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1} \tag{9.103}$$

这样我们有

$$\frac{\partial\mathcal{F}_0}{\partial\mu} = -T\sum_{k,\omega_n}\frac{1}{i\omega_n-(\varepsilon_k-\mu)} = -\sum_k f_F(\varepsilon_k-\mu) \tag{9.104}$$

两边对化学势求积分可得

$$\int_{-\infty}^{\mu}d\mu\frac{\partial\mathcal{F}_0}{\partial\mu} = -\sum_k\int_{-\infty}^{\mu}d\mu f_F(\varepsilon_k-\mu) \Rightarrow \mathcal{F}_0 = -T\ln(1+e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}) \tag{9.105}$$

这就是自由费米子自由能的标准结果.

在量子多体理论中,一个重要的物理量是所谓Green函数或多粒子关联函数. 其中最简单的是自由费米子在能量-动量空间的单粒子Green函数,在路径积分形式中有

$$G^0(k,\omega_n) = -\langle \psi_k(\omega_n)\bar{\psi}_k(\omega_n)\rangle_0 \tag{9.106}$$

这里$\langle ...\rangle_0$代表对自由费米子系统的统计平均,即

$$\langle ...\rangle_0 \equiv \frac{\int D\bar{\psi}D\psi(...)e^{-S_0}}{\int D\bar{\psi}D\psi e^{-S_0}} \tag{9.107}$$

让我们计算自由费米子的Green函数

$$G^0(k,\omega_n) = -\langle \psi_k(\omega_n)\bar{\psi}_k(\omega_n)\rangle_0 = -\frac{\int D\bar{\psi}D\psi(\psi_k(\omega_n)\bar{\psi}_k(\omega_n))e^{-S_0}}{\int D\bar{\psi}D\psi e^{-S_0}} \tag{9.108}$$

注意到分母就是配分函数$\mathcal{Z}_0$,而分子可计算为

$$\begin{aligned}
&-\int D\bar{\psi}D\psi[\psi_k(\omega_n)\bar{\psi}_k(\omega_n)]e^{-(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu)\bar{\psi}_k(\omega_n)\psi_k(\omega_n)}e^{-\sum_{\omega_{n'},k'\neq\omega_n,k}\bar{\psi}_k(\omega_n)(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu)\psi_k(\omega_n)}\\
&= -\int d\bar{\psi}_k(\omega_n)d\psi_k(\omega_n)[\psi_k(\omega_n)\bar{\psi}_k(\omega_n)][1-(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu)\bar{\psi}_k(\omega_n)\psi_k(\omega_n)]\\
&\times \prod_{k',\omega_{n'}\neq\omega_n,k}(-i\omega_{n'}+\varepsilon_{k'}-\mu)\\
&= (-1)\prod_{k',\omega_{n'}\neq\omega_n,k}(-i\omega_{n'}+\varepsilon_{k'}-\mu)
\end{aligned}$$

这样有

$$G^0(k,\omega_n) = -\frac{\int D\bar{\psi}D\psi(\psi_k(\omega_n)\bar{\psi}_k(\omega_n))e^{-S_0}}{\int D\bar{\psi}D\psi e^{-S_0}} = \frac{-\prod_{k',\omega_{n'}\neq\omega_n,k}(-i\omega_{n'}+\varepsilon_{k'}-\mu)}{\prod_{k,\omega_n}(-i\omega_n+\varepsilon_k-\mu)} = \frac{1}{i\omega_n-(\varepsilon_k-\mu)} \tag{9.109}$$

也就是说自由费米子的单粒子Green函数是

$$G^0(k,\omega_n) = -\langle \psi_k(\omega_n)\bar{\psi}_k(\omega_n)\rangle_0 = \frac{1}{i\omega_n-(\varepsilon_k-\mu)} \tag{9.110}$$

另一个重要的量是先前讨论Coulomb电子气体和线性响应理论都出现过的自由电子极化函数

$$\begin{aligned}
\chi_0(q,\Omega_n) &= -\frac{T}{V}\sum_{\omega_n,k}G^0(k,\omega_n)G^0(k+q,\omega_n+\Omega_n) && (9.111)\\
&= -\frac{T}{V}\sum_{\omega_n,k}\frac{1}{i\omega_n-\xi_k}\frac{1}{i\omega_n+i\Omega_n-\xi_{k+q}},\quad \xi_k=\varepsilon_k-\mu && (9.112)\\
&= -\frac{T}{V}\sum_{\omega_n,k}\left[\frac{1}{i\omega_n-\xi_k}-\frac{1}{i\omega_n+i\Omega_n-\xi_{k+q}}\right]\frac{1}{i\Omega_n-\xi_{k+q}+\xi_k} && (9.113)\\
&= -\frac{1}{V}\sum_{k}\frac{f_F(\xi_k)-f_F(\xi_{k+q})}{i\Omega_n-\xi_{k+q}+\xi_k},\quad f_F(\xi_{k+q}\pm i\Omega_n)=f_F(\xi_{k+q}),\quad \Omega_n=\frac{2\pi n}{\beta} &&\\
&= \frac{1}{V}\sum_{k}\frac{f_F(\xi_{k+q})-f_F(\xi_k)}{i\Omega_n-\xi_{k+q}+\xi_k}. && (9.114)
\end{aligned}$$

Coulomb电子气

我们现在采用路径积分形式重新讨论在《二次量子化》那讲已经仔细研究的Coulomb电子气模型.根据费米子相干态路径积分的一般规则,我们知道Coulomb电子气的作用量是

$$S=\int d\tau\left[\int d^dx\bar{\psi}_\sigma(x,\tau)(\partial_\tau-\frac{\nabla^2}{2m})\psi_\sigma(x,\tau)+\frac{1}{2}\int d^dx\int d^dy\frac{e^2}{|\vec{x}-\vec{y}|}\bar{\psi}_\sigma(x,\tau)\bar{\psi}_{\sigma'}(y,\tau)\psi_{\sigma'}(y,\tau)\psi_\sigma(x,\tau)\right. \tag{9.115}$$

这里$\psi_\sigma(x,\tau)$是Grassman场代表自旋为σ的电子,并具有反周期边界条件$\psi_\sigma(x,\tau)=-\psi_\sigma(x,\tau+\beta)$.

实际上,尽管我们花了很多时间引进路径积分形式,但是实际上能够严格计算的还是Gauss积分或者说场的二次型.当哈密顿量或作用量出现场的三次或者四次项时,一般无法做严格的处理,只能用某些近似计算方法. [9]

我们当然可以直接把相互作用当做小量进行微扰计算,但这样并不会体现路径积分形式的优点,因为传统的算符(正则)形式也可以在引入Green函数与Feynman图之后进行微扰计算并对某些子图进行求和.

- 路径积分形式的优点在于可以通过适当的变换,例如Hubbard-Stratonovich变换,引入辅助场以明确考虑某些关心的物理自由度.在此基础上做平均场(鞍点)近似并发展相关的微扰论计算.

- 从实用角度来看,路径积分形式 1)可以更严格地考虑平均场近似; 2)便于处理规范场自由度 3)时间关联效应.

既然我们只会Gauss积分,那么我们希望把作用量化为费米场的二次型,这样我们可以积掉费米子自由度得到一个有效的新模型.

我们考虑如下的变换

$$e^{g(\bar{\psi}\psi)^2}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\phi}{\sqrt{\pi g}}e^{-\frac{\phi^2}{g}+\phi\bar{\psi}\psi+\bar{\psi}\psi\phi} \tag{9.116}$$

我们来简单证明一下这个变换,考虑右边的对实数场ϕ的积分

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\phi e^{-\frac{\phi^2}{g}+2\phi\bar{\psi}\psi}=\int_{-\infty}^{\infty}d\phi e^{-\frac{(\phi-g\bar{\psi}\psi)^2}{g}+g(\bar{\psi}\psi)^2}=\int_{-\infty}^{\infty}d\tilde{\phi}e^{-\frac{\tilde{\phi}^2}{g}+g(\bar{\psi}\psi)^2}=\sqrt{\pi g}e^{g(\bar{\psi}\psi)^2},\ \ \tilde{\phi}=\phi-g\bar{\psi}\psi \tag{9.117}$$

也就是我们通过配平方并移动积分变量ϕ可以把右边积掉得到要证明的形式.

- 通过引入辅助场ϕ可以把四费米子相互作用$(\bar{\psi}\psi)^2$改写为费米子-辅助场的三次项型耦合$\phi\bar{\psi}\psi$,这就是著名的Hubbard-Stratonovich变换,简称HS变换.

[9]比较严格的方法其实存在,就是量子Monte Carlo模拟,但是对于费米子系统,负符号问题导致模拟只能处理非常特殊的模型或者温度很高,相互作用很弱的情况.

Coulomb电子气的辅助场

为了把作用量写成可以用HS变换处理的形式,我们对作用量做动量空间的傅里叶变换

$$\psi(x,\tau)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}\psi_k(\tau) \tag{9.118}$$

$$S=\int d\tau\left[\sum_k\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau+\frac{k^2}{2m}\right)\psi_{k\sigma}(\tau)+\frac{1}{2V}{\sum_{k,k',q}}'\frac{4\pi e^2}{q^2}\bar{\psi}_{k+q\sigma}(\tau)\bar{\psi}_{k'-q\sigma'}(\tau)\psi_{k'\sigma'}(\tau)\psi_{k\sigma}(\tau)\right] \tag{9.119}$$

这里对动量q的求和不包括$q=0$部分,因为这一部分已经与正点背景相抵消.

为了便于处理,我们考虑电子密度

$$\begin{aligned}\rho(x,\tau)&=\bar{\psi}_\sigma(x,\tau)\psi_\sigma(x,\tau)=\frac{1}{V}\sum_{k,k'}e^{-i(k-k')x}\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k\sigma}(\tau)\\&=\frac{1}{V}\sum_{k,q}e^{iqx}\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k+q\sigma}(\tau)=\frac{1}{V}\sum_{k,q}e^{iqx}\rho_q(\tau)\end{aligned} \tag{9.120}$$

这里电子密度的傅里叶分量是$\rho_q(\tau)\equiv\sum_k\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k+q\sigma}(\tau)$ 且满足$\rho_{-q}(\tau)=\rho_q^*(\tau)$.这样,我们可以把作用量改写为

$$\begin{aligned}S&=\int d\tau\left[\sum_k\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau+\frac{k^2}{2m}\right)\psi_{k\sigma}(\tau)+\frac{1}{2V}{\sum_{k,k',q}}'\frac{4\pi e^2}{q^2}\bar{\psi}_{k+q\sigma}(\tau)\psi_{k\sigma}(\tau)\bar{\psi}_{k'-q\sigma'}(\tau)\psi_{k'\sigma'}(\tau)\right]\\&=\int d\tau\left[\sum_k\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau+\frac{k^2}{2m}\right)\psi_{k\sigma}(\tau)+\frac{1}{2V}{\sum_q}'\frac{4\pi e^2}{q^2}\rho_{-q}(\tau)\rho_q(\tau)\right]\end{aligned} \tag{9.121}$$

注意,对于作用量中的电荷密度部分,我们有

$$e^{-\int d\tau\sum_q'\frac{2\pi e^2}{q^2V}\rho_{-q}(\tau)\rho_q(\tau)}={\prod_{q,\tau}}'e^{-\frac{2\pi e^2}{q^2V}|\rho_q(\tau)|^2}={\prod_{q,\tau}}'e^{-\frac{2\pi e^2}{q^2V}[(\mathrm{Re}\rho_q(\tau))^2+(\mathrm{Im}\rho_q(\tau))^2]}$$

对比HS变换的公式,$g=-\frac{2\pi e^2}{q^2V}$,即对每一个动量有一个g_q. 对每一动量q 每一个时刻τ的$(\mathrm{Re}\rho_q(\tau))^2$ 和$(\mathrm{Im}\rho_q(\tau))^2$分别引入独立的辅助场$\mathrm{Re}\phi_q(\tau)$与$\mathrm{Im}\phi_q(\tau)$,我们发现

$$\begin{aligned}&{\prod_{q,\tau}}'e^{-\frac{2\pi e^2}{q^2V}[(\mathrm{Re}\rho_q(\tau))^2+(\mathrm{Im}\rho_q(\tau))^2]}\\&={\prod_{q,\tau}}'\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\mathrm{Re}\phi_q(\tau)d\mathrm{Im}\phi_q(\tau)}{\pi g_q}e^{-\frac{(\mathrm{Re}\phi_q(\tau))^2+(\mathrm{Im}\phi_q(\tau))^2}{g_q}+2\mathrm{Re}\phi_q(\tau)\mathrm{Re}\rho_q(\tau)+2\mathrm{Im}\phi_q(\tau)\mathrm{Im}\rho_q(\tau)}\\&={\prod_{q,\tau}}'\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\phi_q^*(\tau)d\phi_q(\tau)}{\pi g_q}e^{-\frac{\phi_q^*(\tau)\phi_q(\tau)}{g_q}+2(\phi_q(\tau)\rho_{-q}(\tau)+\phi_q^*(\tau)\rho_q(\tau))}\\&=\int D\phi_q^*(\tau)D\phi_q(\tau)e^{-\int d\tau\sum_q'[\frac{\phi_q^*(\tau)\phi_q(\tau)}{g_q}-2(\phi_q(\tau)\sum_k\bar{\psi}_{k+q\sigma}(\tau)\psi_{k\sigma}(\tau)+\phi_q^*(\tau)\sum_k\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k+q\sigma}(\tau))]}\end{aligned}$$

注意到对于Gauss积分,其e^{-ax^2}中的系数a必须满足Re$a>0$,这样,我们做如下重标

$$\phi_q(\tau)\to i\frac{e}{2\sqrt{V}}\phi_q(\tau),\quad \phi_q^*(\tau)\to i\frac{e}{2\sqrt{V}}\phi_q^*(\tau) \tag{9.122}$$

则有

$$\int D\phi_q^*(\tau)D\phi_q(\tau)e^{-\int d\tau\sum_q'[\frac{q^2}{8\pi}\phi_q^*(\tau)\phi_q(\tau)-i\frac{e}{\sqrt{V}}(\phi_q(\tau)\sum_k\bar{\psi}_{k+q\sigma}(\tau)\psi_{k\sigma}(\tau)+\phi_q^*(\tau)\sum_k\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k+q\sigma}(\tau))]}$$

可以证明有以下关系

$$\begin{aligned}
&-ie\int d^3x\phi(x,\tau)\bar{\psi}_\sigma(x,\tau)\psi_\sigma(x,\tau)=-ie\frac{1}{V^{3/2}}\sum_{k,k',q}\phi_q(\tau)\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k'\sigma}(\tau)\int d^3xe^{i(q+k'-k)x}\\
&=-ie\frac{1}{V^{1/2}}\sum_{k,k',q}\phi_q(\tau)\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k'\sigma}(\tau)\delta_{q+k',k}\\
&=-ie\frac{1}{V^{1/2}}\sum_{k,q}\phi_q(\tau)\bar{\psi}_{k+q\sigma}(\tau)\psi_{k\sigma}(\tau)
\end{aligned}$$

同理可得

$$-ie\int d^3x\phi^*(x,\tau)\bar{\psi}_\sigma(x,\tau)\psi_\sigma(x,\tau)=-ie\frac{1}{V^{1/2}}\sum_{k,q}\phi_q^*(\tau)\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k+q\sigma}(\tau)$$

$$\frac{1}{8\pi}\int d^3x\phi^*(x,\tau)(-\nabla^2)\phi(x,\tau)=\frac{1}{8\pi}\sum_q q^2\phi_q^*(\tau)\phi_q(\tau) \tag{9.123}$$

$$\frac{1}{8\pi}\int d^3x\phi(x,\tau)(-\nabla^2)\phi^*(x,\tau)=\frac{1}{8\pi}\sum_q q^2\phi_q(\tau)\phi_q^*(\tau) \tag{9.124}$$

$$\frac{1}{8\pi}\int d^3x\phi^*(x,\tau)(-\nabla^2)\phi^*(x,\tau)=\frac{1}{8\pi}\sum_q q^2\phi_q^*(\tau)\phi_{-q}^*(\tau) \tag{9.125}$$

$$\frac{1}{8\pi}\int d^3x\phi(x,\tau)(-\nabla^2)\phi(x,\tau)=\frac{1}{8\pi}\sum_q q^2\phi_q(\tau)\phi_{-q}(\tau) \tag{9.126}$$

这提示我们如果定义新的实场$\tilde{\phi}(x,\tau)=\frac{1}{2}(\phi(x,\tau)+\phi^*(x,\tau))$, 那么我们可以把动量空间的形式重新转换至实空间,得到

$$\begin{aligned}
&\int D\phi_q^*(\tau)D\phi_q(\tau)e^{-\int d\tau\sum_q'[\frac{q^2}{8\pi}\phi_q^*(\tau)\phi_q(\tau)-i\frac{e}{\sqrt{V}}(\phi_q(\tau)\sum_k\bar{\psi}_{k+q\sigma}(\tau)\psi_{k\sigma}(\tau)+\phi_q^*(\tau)\sum_k\bar{\psi}_{k\sigma}(\tau)\psi_{k+q\sigma}(\tau))]}\\
&=\int D\tilde{\phi}(x,\tau)e^{-\int d\tau d^3x[\frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi}-ie\phi(x,\tau)\tilde{\psi}_\sigma(x,\tau)\psi_\sigma(x,\tau)]}
\end{aligned} \tag{9.127}$$

这样完整的作用量是

$$\boxed{S=\int d\tau d^3x\left[\frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi}+\bar{\psi}_\sigma(x,\tau)\left(\partial_\tau-\frac{\nabla^2}{2m}-ie\tilde{\phi}(x,\tau)\right)\psi_\sigma(x,\tau)\right]} \tag{9.128}$$

这样,我们通过引入辅助场$\tilde{\phi}$把四费米子形式的Coulomb相互作用项化为两个费米场与辅助场的线性耦合.回忆在考虑电磁场效应时,我们通常采用最小耦合$\partial_\mu \to \partial_\mu - ieA_\mu$, 那么注意到这里的辅助场与电子耦合的形式，那么我们可以说辅助场$\tilde{\phi}$在物理上就代表电磁势的标量部分,或者说标量电磁场.

- 显然,这里的HS变换表明标量电磁势传递的是时间上静态的Coulomb相互作用.

有效作用量

既然作用量中已经是费米场的二次型,那么我们可以利用费米子的Gauss积分积掉费米子场得到等效的只包含辅助场的作用量.

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \int D\tilde{\phi} e^{-\int d\tau d^3x \frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi}} \int D\bar{\psi}D\psi e^{-\int d\tau d^3x \bar{\psi}_\sigma \left(\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2m} - ie\tilde{\phi}\right)\psi_\sigma} \\ &= \int D\tilde{\phi} e^{-\int d\tau d^3x \frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi}} \prod_\sigma \mathrm{Det}\left[\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2m} - ie\tilde{\phi}\right] \end{aligned} \tag{9.129}$$

注意到费米子行列式中$\hat{M} \equiv \partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2m} - ie\tilde{\phi}$可以看作是以时空坐标$(x,\tau)$为指标的矩阵.$\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2m} = -(\hat{G}^0(x,\tau))^{-1}$,这说明其可表示为自由费米子的单粒子Green函数.一般而言,

$$\int D\bar{\psi}D\psi e^{-\int d\tau d\tau' d^3x d^3y \bar{\psi}_\sigma(x,\tau)M(x,y;\tau,\tau')\psi_\sigma(y,\tau')} = \prod_\sigma \mathrm{Det}\hat{M} = \prod_\sigma \int d\tau \int d^3x \langle x,\tau|\hat{M}|x,\tau\rangle$$

这里$|x,\tau\rangle$是时空坐标的基矢.对当前的模型则有$M(x,y;\tau,\tau') = (\partial_\tau - \frac{\nabla_x^2}{2m} - ie\tilde{\phi}(x,\tau))\delta(x-y)\delta(\tau-\tau)$. 这样我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \int D\tilde{\phi} e^{-\int d\tau d^3x \frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi}} \prod_\sigma \mathrm{Det}\left[\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2m} - ie\tilde{\phi}\right] = \int D\tilde{\phi} e^{-\int d\tau d^3x \frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi}} e^{2\ln \mathrm{Det}\left[-(\hat{G}^0)^{-1} - ie\tilde{\phi}\right]} \\ &= \int D\tilde{\phi} e^{-\int d\tau d^3x \frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi}} e^{2\mathrm{Tr}\ln\left[-(\hat{G}^0)^{-1} - ie\tilde{\phi}\right]} \\ &= \int D\tilde{\phi} e^{-S_{eff}} \end{aligned} \tag{9.130}$$

$$S_{eff} = \int d\tau d^3x \frac{(\nabla\tilde{\phi})^2}{8\pi} - 2\mathrm{Tr}\ln\left[-(\hat{G}^0)^{-1} - ie\tilde{\phi}\right] = \sum_{\vec{q},\Omega_n} \frac{\vec{q}^2}{8\pi}\tilde{\phi}_{-q}\tilde{\phi}_q - 2\mathrm{Tr}\ln\left[-(\hat{G}^0)^{-1} - ie\tilde{\phi}\right] \tag{9.131}$$

这里的S_{eff}就是只包含辅助场$\tilde{\phi}$的有效作用量.

毫无疑问,有效作用量中的对数部分表示费米子对辅助场的影响,一般而言也是无法严格求解的.这里我们假定耦合常数e(电子电荷)是小量,对对数部分进行展开

$$\begin{aligned}\ln\left[-(\hat{G}^0)^{-1} - ie\tilde{\phi}\right] &= \ln[-(\hat{G}^0)^{-1}] + \ln\left[1 + ie\hat{G}^0\tilde{\phi}\right] = \ln[-(\hat{G}^0)^{-1}] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n}(ie\hat{G}^0\tilde{\phi})^n \\ &= \ln[-(\hat{G}^0)^{-1}] + (ie\hat{G}^0\tilde{\phi}) - \frac{1}{2}(ie\hat{G}^0\tilde{\phi})^2 + \mathcal{O}(n=3)\end{aligned}$$

那么近似到二阶项有

$$\mathrm{Tr}\ln\left[-(\hat{G}^0)^{-1}-ie\tilde{\phi}\right]\approx \mathrm{Tr}\ln[-(\hat{G}^0)^{-1}]+\mathrm{Tr}(ie\hat{G}^0\tilde{\phi})-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(ie\hat{G}^0\tilde{\phi})^2$$

注意到第一项对应于自由费米子的贡献,其值是常数,没有动力学效应,因此下面的讨论中我们忽略这一项. 对于第二项,我们有

$$\mathrm{Tr}(ie\hat{G}^0\tilde{\phi})=ie\mathrm{Tr}\hat{G}^0\tilde{\phi}=\sum_{k,k'}\langle k|\hat{G}^0|k'\rangle\langle k'|\tilde{\phi}|k\rangle=\sum_{k,k'}G^0_{k,k'}\delta_{k,k'}\tilde{\phi}_{k',k}=\sum_k G^0_k\tilde{\phi}_0=0$$

在这里,我们采用频率-动量的本征态来对角化相关的矩阵$\langle x|k\rangle\equiv\langle x,\tau|k,\omega_n\rangle=\frac{1}{\sqrt{V\beta}}e^{ikx-i\omega_n\tau}$

$$\begin{aligned}
&\langle k|\hat{G}^0|k'\rangle=\int dxdx'\langle k|x\rangle\langle x|\hat{G}^0|x'\rangle\langle x'|k'\rangle\\
&=\int dxdx'\frac{1}{\sqrt{V\beta}}e^{-ikx+i\omega_n\tau}\frac{-1}{\partial_\tau-\frac{\nabla_x^2}{2m}}\delta(x-x')\delta(\tau-\tau')\frac{1}{\sqrt{V\beta}}e^{ik'x'-i\omega_{n'}\tau'}\\
&=\int dx\frac{1}{V\beta}e^{-ikx+i\omega_n\tau}\frac{-1}{\partial_\tau-\frac{\nabla_x^2}{2m}}e^{ik'x-i\omega_{n'}\tau}=\int dx\frac{1}{V\beta}e^{-ikx+i\omega_n\tau}\frac{1}{i\omega_{n'}-\frac{k'^2}{2m}}e^{ik'x-i\omega_{n'}\tau}\\
&=\frac{1}{i\omega_n-\frac{k^2}{2m}}\delta_{k,k}\delta_{\omega_n,\omega_{n'}}\equiv G^0_k\delta_{k,k'}
\end{aligned}$$

$$\langle k|\tilde{\phi}|k'\rangle=\int dxdx'\langle k|x\rangle\langle x|\tilde{\phi}|x'\rangle\langle x'|k'\rangle=\int d\tau d^3x\tilde{\phi}(x,\tau)\frac{1}{V\beta}e^{i(k'-k)x-i(\omega_{n'}-\omega_n)\tau}=\frac{1}{\sqrt{V\beta}}\tilde{\phi}_{k-k'}$$

显然我们对动量的求和并不包括$q=0$的部分,那么$\tilde{\phi}_0=0$,也就是展开的第二项也是零.利用计算一级以及二级项的结果,我们可以容易地计算第三项的贡献

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(ie\hat{G}^0\tilde{\phi})^2 &= \frac{e^2}{2}\sum_{k,k'}\langle k|\hat{G}^0\tilde{\phi}|k'\rangle\langle k'|\hat{G}^0\tilde{\phi}|k\rangle=\frac{e^2}{2}\sum_{k,k'}G^0_kG^0_{k'}\langle k|\tilde{\phi}|k'\rangle\langle k'|\tilde{\phi}|k\rangle\\
&= \frac{e^2}{2}\sum_{k,k'}G^0_kG^0_{k'}\frac{1}{V\beta}\tilde{\phi}_{k-k'}\tilde{\phi}_{k'-k}\\
&= \frac{e^2}{2}\sum_{k,q}G^0_kG^0_{k+q}\frac{1}{V\beta}\tilde{\phi}_{-q}\tilde{\phi}_q\\
&= -\frac{e^2}{2}\sum_q\chi^0(q)\tilde{\phi}_{-q}\tilde{\phi}_q
\end{aligned}\tag{9.132}$$

注意我们已经利用了自由费米子极化函数$\chi^0(q)=-\frac{T}{V}\sum_{\omega_n,k}G^0(k,\omega_n)G^0(k+q,\omega_n+\Omega_n)$. 这样我们得到准确至$e^2$阶的有效作用量

$$S_{eff}=\sum_{\vec{q},\Omega_n}\left[\frac{\vec{q}^2}{8\pi}+e^2\chi^0(\vec{q},\Omega_n)\right]\tilde{\phi}_{-q}\tilde{\phi}_q,\quad \tilde{\phi}_q=\tilde{\phi}_{\vec{q},\Omega_n}\tag{9.133}$$

注意到,$\chi^0(\vec{q},\Omega_n)$在高频时主导的项是态密度所对应的常数项以及Ω_n^2, 当做解析延拓$i\Omega_n\to\omega+i0^+$后,$\tilde{\phi}$场的色散与先前讨论的等离激元模式相同,换句话说,$\tilde{\phi}$所对应的激发就是熟悉的等离激元.

巡游电子的量子相变:Hertz理论*

让我们考虑标准的单带Hubbard模型的作用量

$$\boxed{S=\int d\tau\left[\sum_{i\sigma}\bar{\psi}_{i\sigma}(\partial_\tau-\mu)\psi_{i\sigma}-\sum_{ij\sigma}t_{ij}\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{j\sigma}+U\sum_i\bar{\psi}_{i\uparrow}\psi_{i\uparrow}\bar{\psi}_{i\downarrow}\psi_{i\downarrow}\right]} \tag{9.134}$$

注意到Hubbard相互作用项可以改写为

$$U\bar{\psi}_{i\uparrow}\psi_{i\uparrow}\bar{\psi}_{i\downarrow}\psi_{i\downarrow}=-\frac{U}{2}(\bar{\psi}_{i\uparrow}\psi_{i\uparrow}-\bar{\psi}_{i\uparrow}\psi_{i\uparrow})^2+\frac{U}{2}(\bar{\psi}_{i\uparrow}\psi_{i\uparrow}+\bar{\psi}_{i\uparrow}\psi_{i\uparrow}) \tag{9.135}$$

这样作用量可以写为

$$S=\int d\tau\left[\sum_{i\sigma}\bar{\psi}_{i\sigma}\left(\partial_\tau-\mu+\frac{U}{2}\right)\psi_{i\sigma}-\sum_{ij\sigma}t_{ij}\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{j\sigma}-\frac{U}{2}\sum_i(\sum_\sigma\sigma\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{i\sigma})^2\right] \tag{9.136}$$

这样对于每一时刻的每一格点,我们有HS变换(忽略变换导致的常数)

$$e^{\frac{U}{2}(\sum_\sigma\sigma\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{i\sigma})^2}=\int d\phi_i e^{-\frac{U}{2}\phi_i^2+U\phi_i\sum_\sigma\sigma\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{i\sigma}} \tag{9.137}$$

则包含辅助场ϕ的系统作用量是

$$S=\int d\tau\left[\sum_i\frac{U}{2}\phi_i^2+\sum_{i\sigma}\bar{\psi}_{i\sigma}\left(\partial_\tau-\mu+\frac{U}{2}\right)\psi_{i\sigma}-\sum_{ij\sigma}t_{ij}\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{j\sigma}-U\sum_{i\sigma}\phi_i\sigma\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{i\sigma}\right] \tag{9.138}$$

注意到,如果我们令$\phi_i(\tau)=m(-1)^{R_i}$,(m为参数)那么就等价于反铁磁平均场理论,而如果令 $\phi_i(\tau)=m$可以得到铁磁的平均场理论.换句话说,平均场等价于令作用量中的辅助场取固定的位形.[10]

如果我们想得到只包含辅助场的作用量,那么可以积掉费米子自由度,仿照上一节Coulomb电子气的讨论,我们发现

$$\begin{aligned}S &= \int d\tau\sum_i\frac{U}{2}\phi_i^2-\sum_\sigma\mathrm{Tr}\ln\left[\left(\partial_\tau-\mu+\frac{U}{2}\right)\delta_{ij}-t_{ij}-U\phi_i\sigma\delta_{ij}\right]\\ &= \int d\tau\sum_i\frac{U}{2}\phi_i^2-\sum_\sigma\mathrm{Tr}\ln\left[-(G^0)^{-1}-U\phi\sigma\right]\end{aligned} \tag{9.139}$$

首先,关于辅助场的一阶展开项为零

$$\sum_\sigma\sigma\mathrm{Tr}[UG^0\phi]=0 \tag{9.140}$$

[10]如果假设辅助场只有空间上的变化而没有时间变化,那么系统的配分函数可以看成不同辅助场构型下单粒子哈密顿量的叠加,这样我们可以通过经典蒙特卡洛模拟研究系统的热力学性质,这称为平均场蒙特卡洛,典型的应用是计算高温下Hubbard 模型的相图.[Mukherjee et al., Phys.Rev.B **90**,205133(2014)]

事实上,关于辅助场的所有奇数次项都为零

$$\sum_{\sigma}\sigma^{n}\mathrm{Tr}[UG^{0}\phi]^{n}=0,\quad n=odd \tag{9.141}$$

因此最低阶的贡献应该是ϕ^2和ϕ^4项,对于平方项,我们有(与Coulomb电子气的讨论完全一样)

$$\frac{1}{2}\sum_{\sigma}\mathrm{Tr}[UG^{0}\phi]^{2}=U^{2}\mathrm{Tr}[G^{0}\phi G^{0}\phi]=\frac{U^{2}}{V\beta}\sum_{k,k'}G^{0}_{k}G^{0}_{k'}\phi_{k-k'}\phi_{k'-k}=-U^{2}\sum_{q}\chi^{0}(q)\phi_{-q}\phi_{q} \tag{9.142}$$

而对四次方项计算可得

$$\frac{1}{4}\sum_{\sigma}\mathrm{Tr}[UG^{0}\phi]^{4}=\frac{U^{4}}{2(V\beta)^{2}}\sum_{k,k_1,k_2,k_3}G^{0}_{k}G^{0}_{k_1}G^{0}_{k_2}G^{0}_{k_3}\phi_{k-k_1}\phi_{k_1-k_2}\phi_{k_2-k_3}\phi_{k_3-k} \tag{9.143}$$

这样我们发现展开到ϕ^4的有效作用量是

$$S=\sum_{q}\left[\frac{U}{2}-U^{2}\chi_{0}(q)\right]\phi_{-q}\phi_{q}+\frac{U^{4}}{2(V\beta)^{2}}\sum_{k,k_1,k_2,k_3}G^{0}_{k}G^{0}_{k_1}G^{0}_{k_2}G^{0}_{k_3}\phi_{k-k_1}\phi_{k_1-k_2}\phi_{k_2-k_3}\phi_{k_3-k} \tag{9.144}$$

对于四次项可以移动变量可得

$$\begin{aligned}&\frac{U^{4}}{2(V\beta)^{2}}\sum_{k,k_1,k_2,k_3}G^{0}_{k}G^{0}_{k_1}G^{0}_{k_2}G^{0}_{k_3}\phi_{k-k_1}\phi_{k_1-k_2}\phi_{k_2-k_3}\phi_{k_3-k}\\&=\frac{U^{4}}{2(V\beta)^{2}}\sum_{k,q_1,q_2,q_3}G^{0}_{k}G^{0}_{k+q_1}G^{0}_{k+q_1+q_2}G^{0}_{k-q_1-q_2-q_3}\phi_{q_1}\phi_{q_2}\phi_{q_3}\phi_{-q_1-q_2-q_3}\end{aligned}$$

假定我们只对低频的辅助场模式感兴趣那么可以令所有费米子Green函数中的动量$q_1,q_2,q_3=0$,这样有

$$\begin{aligned}&\frac{U^{4}}{2(V\beta)^{2}}\sum_{k}(G^{0}_{k})^{4}\sum_{q_1,q_2,q_3}\phi_{q_1}\phi_{q_2}\phi_{q_3}\phi_{-q_1-q_2-q_3}\approx\frac{U^{4}\mathcal{C}_{4}}{2(V\beta)^{2}}\sum_{q_1,q_2,q_3}\phi_{q_1}\phi_{q_2}\phi_{q_3}\phi_{-q_1-q_2-q_3},\\&\mathcal{C}_{4}=\sum_{k}(G^{0}_{k})^{4}\approx const.\end{aligned}$$

令$\lambda=\frac{U^4\mathcal{C}_4}{2V\beta}$,那么四次项可以写为实空间的形式

$$\lambda\int d\tau d^{d}x\phi^{4}(x,\tau) \tag{9.145}$$

这样我们得到Hertz于70年代引入的用来描述巡游费米子量子相变的作用量,即Hertz作用量:[11]

$$S=\sum_{q}\left[\frac{U}{2}-U^{2}\chi_{0}(q)\right]\phi_{-q}\phi_{q}+\lambda\int d\tau d^{d}x\phi^{4}(x,\tau). \tag{9.146}$$

[11]Hertz,Quantum critical phenomena,Phys.Rev.B **14**,1165(1976)

假如只看二次项部分,那么根据Landau理论,序参量场的二次系数的零点决定相变的位置,在这里我们把ϕ解释为铁磁序参量场,那么相变的位置由如下方程决定

$$\frac{U}{2}-U^2\chi_0(q)=0\Rightarrow 1=2U\chi_0(\vec{q},\Omega_n) \tag{9.147}$$

注意到如果我们令$\Omega_n=0$,那么极化函数自动化为Lindhard函数的形式,即

$$\chi_0(\vec{q},0)=N(0)\left[\frac{1}{2}+\frac{1-x^2}{4x}\ln\frac{1+x}{1-x}\right],\quad x=\frac{|\vec{q}|}{2k_F} \tag{9.148}$$

在小动量时

$$\chi^0(\vec{q},0)\approx N(0)\left[1-\frac{\vec{q}^2}{4k_F^2}\right] \tag{9.149}$$

此时相变条件是

$$1=2UN(0)\left[1-\frac{\vec{q}^2}{4k_F^2}\right] \tag{9.150}$$

显然$\vec{q}=0$的激发对应的条件恰好是体系真实相变的条件,也就是我们重新发现了巡游铁磁相变的Stoner 判据 $1=2UN(0)$.当这个相变发生在零温时,我们讨论的便是量子相变.

为了进一步讨论,我们有

$$\chi^0(q)=\chi_0(\vec{q},\Omega_n)-\chi_0(\vec{q},0)+\chi_0(\vec{q},0) \tag{9.151}$$

当$\Omega_n<<v_Fq$时,我们有

$$\chi^0(q,\Omega_n)-\chi^0(q,0)\approx cN(0)\left[-\frac{|\Omega_n|}{v_Fq}\right],\quad d=2:c=1;d=3:c=\pi/2$$

$$\chi_0(q)\approx -cN(0)\frac{|\Omega_n|}{v_Fq}+N(0)\left[1-\frac{\vec{q}^2}{4k_F^2}\right]=N(0)\left[1-\frac{\vec{q}^2}{4k_F^2}-c\frac{|\Omega_n|}{v_Fq}\right] \tag{9.152}$$

这样体系的有效作用量在小动量和低频时的近似是

$$S=\sum_q\frac{U}{2}\left[1-2UN(0)\left(1-\frac{\vec{q}^2}{4k_F^2}-c\frac{|\Omega_n|}{v_Fq}\right)\right]\phi_{-q}\phi_q+\lambda\int d\tau d^dx\phi^4(x,\tau) \tag{9.153}$$

重标体系参数$\delta=\frac{U}{2}(1-2UN(0)),a=\frac{U^2N(0)}{4k_F^2},\gamma=\frac{U^2N(0)c}{v_F}$, 我们得到Hertz模型的最终形式是

$$\boxed{S=\sum_q\left[\delta+a\vec{q}^2+\gamma\frac{|\Omega_n|}{|\vec{q}|}\right]\phi_{-q}\phi_q+\lambda\int d\tau d^dx\phi^4(x,\tau)} \tag{9.154}$$

- 在临界点时,频率Ω_n与动量$\vec{q}$的依赖关系是$\Omega_n\sim\vec{q}^3$,也就是一个时间维度对应三个空间维度,即动力学临界指数$z=3$.
- 对这个作用量采用Wilson动量空间RG分析可知体系的有效维度是 $D=d+z=d+3$,对于二维和三维系统,D大于上临界维度,则体系的相变性质由Gauss不动点描述,或者说可以用平均场理论来理解.这就是Hertz-Miliis理论的最核心内容.

- 然而实验上发现不管是铜氧化物还是重费米子系统,真正能用Hertz-Millis-Moriya理论理解的并不多.很多材料显示出明显的反常,比如横跨几个温度量级的线性电阻行为,对数依赖的比热,幂律依赖的磁化率等,这些都无法用这里的理论得到合理的解释.

我们看到,实际上得到Hertz最终的作用量已经做了很多近似,最主要的就是假定我们可以忽略所有高阶费米子Green函数,或者圈图的贡献,只保留序参量场的二次和四次项.很显然,这个假定未必是物理上正确的出发点,因为高阶项中可能的对数发散会完全破坏简单的泰勒展开的结果.由于这个原因,所以现在人们研究巡游电子相变时已经不用Hertz-Millis理论了.当前的研究通常是明确保留费米子自由度,然后考虑序参量与费米子耦合的高级微扰论计算,事实表明这个微扰计算也未必可靠,高阶项可能导致微扰完全失效,这表明巡游电子系统的量子相变问题仍未得到解决....

量子自旋的路径积分形式:逃脱算符的枷锁

单个$S=1/2$自旋

对于一个$S=1/2$的自旋,其波函数可写为$|\uparrow\rangle$与$|\downarrow\rangle$ 的叠加

$$|\psi\rangle=\alpha|\uparrow\rangle+\beta|\downarrow\rangle=\left(\begin{array}{c}\alpha\\ \beta\end{array}\right) \tag{9.155}$$

叠加系数满足归一化条件$|\alpha|^2+|\beta|^2=1$.为了明确讨论,我们对系数做如下参数化,即

$$|\psi\rangle=|\vec{n}\rangle\equiv|\theta,\varphi\rangle=\left(\begin{array}{c}\cos\frac{\theta}{2}\\ e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\end{array}\right)=\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle+e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle \tag{9.156}$$

当我们把自旋算符作用与这个态时,我们发现

$$\hat{\vec{S}}|\vec{n}\rangle=\frac{1}{2}(\hat{\sigma}^x\hat{e}_x+\hat{\sigma}^y\hat{e}_y+\hat{\sigma}^z\hat{e}_z)|\vec{n}\rangle=\frac{1}{2}\left[\left(\begin{array}{c}e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\\ \cos\frac{\theta}{2}\end{array}\right)\hat{e}_x+\left(\begin{array}{c}-ie^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\\ i\cos\frac{\theta}{2}\end{array}\right)\hat{e}_y+\left(\begin{array}{c}\cos\frac{\theta}{2}\\ -e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\end{array}\right)\hat{e}_z\right] \tag{9.157}$$

这样,自旋算符在这个态下的平均值为

$$\begin{aligned}\langle\vec{n}|\hat{\vec{S}}|\vec{n}\rangle &= \frac{1}{2}\left[2\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\varphi\hat{e}_x+2\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\sin\varphi\hat{e}_y+(\cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2})\hat{e}_z\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[\sin\theta\cos\varphi\hat{e}_x+\sin\theta\sin\varphi\hat{e}_y+\cos\theta\hat{e}_z\right]\\ &= \frac{1}{2}\vec{n},\quad \vec{n}=\cos\varphi\cos\theta\hat{e}_x+\sin\varphi\sin\theta\hat{e}_y+\cos\theta\hat{e}_z\end{aligned} \tag{9.158}$$

注意到$\vec{n}$就是落在单位球面上并以球心为其起点的单位方向矢量.(如果对这个不熟悉可以回忆一下球坐标与直角坐标系的变换关系)这其实相当于一个经典的自旋矢量,因此在这个意义上,$|\vec{n}\rangle$是所谓的自旋相干态.量子自旋在这个态的平均值相当于一个经典单位矢量.

一般而言,对于自旋为S的量子自旋,我们有

$$\boxed{\langle\vec{n}|\hat{\vec{S}}|\vec{n}\rangle=S\vec{n}} \tag{9.159}$$

注意到自旋相干态满足完备性关系:

$$\boxed{\int_0^{2\pi}\frac{d\varphi}{2\pi}\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta|\vec{n}\rangle\langle\vec{n}|=1} \tag{9.160}$$

以及归一化条件$\langle\vec{n}|\vec{n}\rangle=1$.

现在,我们考虑$S=1/2$自旋模型的哈密顿量是$\hat{H}=-\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B}$,而系统的配分函数是

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}} \tag{9.161}$$

仿照路径积分的一般性处理,我们发现

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\sigma}\langle\sigma|e^{-\Delta\tau\hat{H}}e^{-\Delta\tau\hat{H}}...e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\sigma\rangle \qquad (9.162)\\
&= \prod_{l=1}^{M}\int \sin\theta(l)d\theta(l)d\varphi(l)\sum_{\sigma}\langle\sigma|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\vec{n}(M)\rangle\langle\vec{n}(M)|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\vec{n}(M-1)\rangle\langle\vec{n}(M-1)|\\
&\times...e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\vec{n}(1)\rangle\langle\vec{n}(1)||\sigma\rangle\\
&= \int D\theta D\varphi e^{-\Delta\tau\sum_{l=1}^{M}H(\vec{n}(l))}\sum_{\sigma}\langle\sigma|\vec{n}(M)\rangle\left[\prod_{l=1}^{M-1}\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle\right]\langle\vec{n}(1)|\sigma\rangle\\
&= \int D\theta D\varphi e^{-\Delta\tau\sum_{l=1}^{M}H(\vec{n}(l))}\left[\prod_{l=1}^{M-1}\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle\right]\sum_{\sigma}\langle\vec{n}(1)|\sigma\rangle\langle\sigma|\vec{n}(M)\rangle\\
&= \int D\theta D\varphi e^{-\Delta\tau\sum_{l=1}^{M}H(\vec{n}(l))}\left[\prod_{l=1}^{M-1}\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle\right]\langle\vec{n}(1)|\vec{n}(M)\rangle\\
&= \int D\theta D\varphi e^{-\Delta\tau\sum_{l=1}^{M}H(\vec{n}(l))}\left[\prod_{l=1}^{M}\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle\right]\delta_{\vec{n}(1)=\vec{n}(M+1)} \qquad (9.163)
\end{aligned}
$$

在上面的推导中,我们做了如下近似

$$
\begin{aligned}
\langle\vec{n}(l+1)|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\vec{n}(l)\rangle &\simeq \langle\vec{n}(l+1)|(1-\Delta\tau\hat{H})|\vec{n}(l)\rangle = \langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle - \langle\vec{n}(l+1)|\Delta\tau\hat{H}|\vec{n}(l)\rangle\\
&\simeq \langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle - \langle\vec{n}(l)|\Delta\tau\hat{H}|\vec{n}(l)\rangle = \langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle - \Delta\tau H(\vec{n}(l))\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}\\
&\simeq e^{-\Delta\tau H(\vec{n}(l))}\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle. \qquad (9.1
\end{aligned}
$$

在连续时间极限下$\Delta\tau\sum_l \to \int_0^\beta d\tau$

$$e^{-\Delta\tau\sum_{l=1}^{M}H(\vec{n}(l))} \to e^{-\int_0^\beta d\tau H(\vec{n}(\tau))} \qquad (9.165)$$

$$\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle \to \langle\vec{n}(\tau+\Delta\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle \qquad (9.166)$$

$$\langle\vec{n}(\tau+\Delta\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle = \langle\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle + \Delta\tau\langle\frac{d}{\tau}\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle = 1 + \Delta\tau\langle\frac{d}{\tau}\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle$$

由于$\langle\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle = 1$,那么有

$$0 = \frac{d}{d\tau}(\langle\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle) = \langle\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle + \langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)\rangle \Rightarrow \langle\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle = -\langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)\rangle \qquad (9.167)$$

这样我们计算$|\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)\rangle$

$$|\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)\rangle = \frac{d}{d\tau}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\frac{\dot{\theta}}{2}\sin\frac{\theta}{2}\\ \frac{\dot{\theta}}{2}e^{i\varphi}\cos\frac{\theta}{2} + i\dot{\varphi}e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \qquad (9.168)$$

$$\langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)\rangle = i\dot{\varphi}\sin^2\frac{\theta}{2} = i\dot{\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2} \qquad (9.169)$$

这样,我们得到

$$\langle\vec{n}(\tau+\Delta\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle=1-\Delta\tau i\dot{\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2}\approx e^{-\Delta\tau i\dot{\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2}} \tag{9.170}$$

$$\left[\prod_{l=1}^{M}\langle\vec{n}(l+1)|\vec{n}(l)\rangle\right]\to e^{-\int_0^\beta d\tau i\dot{\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2}}\quad\theta(\beta)=\theta(0),\varphi(\beta)=\varphi(0) \tag{9.171}$$

综合上述结果,我们发现单自旋模型的路径积分形式是

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}&=\int D\theta D\varphi e^{-\int_0^\beta d\tau[i\dot{\varphi}\frac{1-\cos\theta}{2}+H(\vec{n}(\tau))]} &(9.172)\\ &=\int D\vec{n}e^{-iS\omega(\vec{n})-\int_0^\beta d\tau H(\vec{n})} &(9.173)\\ &=\int D\vec{n}e^{-A_{eff}},\quad A_{eff}=iS\omega_B(\vec{n})+\int_0^\beta d\tau H(\vec{n}) &(9.174)\end{aligned}$$

这里A_{eff}是整个系统的经典作用量,其中相位部分$iS\omega_B(\vec{n})$就是自旋的Berry相位

$$e^{-iS\omega_B(\vec{n})}=e^{-iS\int_0^\beta d\tau(1-\cos\theta)\dot{\varphi}},\quad S=1/2 \tag{9.175}$$

注意到路径积分的周期边界条件$\vec{n}(0)=\vec{n}(\beta)$,那么Berry相位部分表示取值在单位球上的单位矢量从$\tau=0$到$\tau=\beta$的周期演化.单位矢量的周期演化在单位球面上扫出了一条封闭曲线,该曲线所对应的立体角就是$\omega_B=\int_0^\beta(1-\cos\theta)\dot{\varphi}$.

进一步,Berry相位部分的变分是

$$\begin{aligned}\delta\omega_B&=\int_0^\beta d\tau\left[(1-\cos\theta)\delta\dot{\varphi}+\sin\theta\dot{\varphi}\delta\theta\right]=\int_0^\beta d\tau\left[-\delta\varphi\sin\theta\dot{\theta}+\delta\theta\sin\theta\dot{\varphi}\right]\\ &=\int_0^\beta d\tau\left[\delta\vec{n}(\tau)\cdot\left(\frac{d\vec{n}(\tau)}{d\tau}\times\vec{n}(\tau)\right)\right] &(9.176)\end{aligned}$$

这个结果在接下来的讨论中十分重要.

一维量子Heisenberg反铁磁链模型

我们考虑如下的一维最近邻反铁磁Heisenberg模型:

$$\hat{H}=J\sum_j\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_{j+1} \tag{9.177}$$

把单个自旋的相干态路径积分扩展至这里的多自旋情况,(相当于把单自旋相干态$|\vec{n}\rangle$扩展为多自旋相干态$\prod_j|\vec{n}_j\rangle$)我们立即得到相应的作用量

$$\boxed{A_s=iS\sum_j\omega_B(\vec{n}_j)+JS^2\int_0^\beta d\tau\sum_j\vec{n}_j\cdot\vec{n}_{j+1}} \tag{9.178}$$

$$\boxed{\omega_B(\vec{n}_j)=\int_0^\beta d\tau(1-\cos\theta_j)\dot{\varphi}_j} \tag{9.179}$$

对于反铁磁体,我们期待其经典自旋矢量$\vec{n}_j$近似显示空间的反铁磁行为,即

$$\vec{n}_j \approx (-1)^j \vec{m}_j + \vec{L}_j \tag{9.180}$$

其中$\vec{m}_j, \vec{L}_j$分别代表自旋磁化的交错部分和均匀部分.也就是说$\vec{m}_j$表示反铁磁序参量的强度,而$\vec{L}_j$是铁磁序参量的强度.在反铁磁体当中,我们一般假定$|\vec{L}_j| << |\vec{m}_j|$. 考虑到单位矢量的归一性$\vec{n}_j^2 = 1$,那么我们要求

$$\vec{m}_j \cdot \vec{L}_j = 0 \tag{9.181}$$

即有

$$1 = \vec{n}_j^2 \approx m_j^2 + 2(-1)^j \vec{m}_j \cdot \vec{L}_j + \vec{L}_j^2 = m_j^2 + \mathcal{O}(\vec{L}_j^2) \tag{9.182}$$

这要求$\vec{m}_j$也是单位矢量.代入$\vec{m}_j, \vec{L}_j$于作用量A_s 可得

$$A_s = iS\sum_j \omega_B[(-1)^j\vec{m}_j+\vec{L}_j]+JS^2\int_0^\beta d\tau\sum_j[-\vec{m}_j\cdot\vec{m}_{j+1}+(-1)^j\vec{m}_j\cdot\vec{L}_{j+1}+(-1)^{j+1}\vec{m}_{j+1}\cdot\vec{L}_j+\vec{L}_j\cdot\vec{L}_{j+1}] \tag{9.183}$$

现在,让我们在连续空间极限下化简上述作用量. 首先由于$\vec{L}_j$是小量,我们可以展开每一个Berry相位项

$$\omega_B[(-1)^j\vec{m}_j + \vec{L}_j] = \omega_B((-1)^j\vec{m}_j) + \int d\tau \frac{\partial\omega_B(\vec{m}_j)}{\partial\vec{m}_j}|_{\vec{m}_j=(-1)^j\vec{m}_j} \cdot \vec{L}_j + O(\vec{L}_j^2) \tag{9.184}$$

利用上一小节最后的Berry相位变分的公式,我们得到

$$\frac{\partial\omega_B(\vec{m}_j)}{\partial\vec{m}_j}|_{\vec{m}_j=(-1)^j\vec{m}_j} = \frac{d\vec{m}_j}{d\tau} \times \vec{m}_j \tag{9.185}$$

而对于$\omega_B((-1)^j\vec{m}_j)$,回忆单位矢量的定义$\vec{m} = (\cos\varphi\sin\theta, \sin\varphi\sin\theta, \cos\theta)$, 这样有

$$-\vec{m} = (\cos(\pi+\varphi)\sin(\pi-\theta), \sin(\pi+\varphi)\sin(\pi-\theta), \cos(\pi-\theta)) \tag{9.186}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}\omega_B(-\vec{m}_j) &= \int_0^\beta d\tau(1-cos(\pi-\theta_j))\frac{d}{d\tau}(\pi+\varphi_j) = \int_0^\beta d\tau(1+\cos(\theta_j))\dot{\varphi}_j \\ &= \varphi_j(\beta) - \varphi_j(0) + \int_0^\beta d\tau\cos(\theta_j)\dot{\varphi}_j \end{aligned} \tag{9.187}$$

注意到

$$\omega_B(\vec{m}_j) = \int_0^\beta d\tau(1-\cos(\theta_j))\dot{\varphi}_j = \varphi_j(\beta) - \varphi_j(0) - \int_0^\beta d\tau\cos(\theta_j)\dot{\varphi}_j \tag{9.188}$$

这样有关系式

$$\omega_B(-\vec{m}_j) = -\omega_B(\vec{m}_j) + 2(\varphi_j(\beta) - \varphi_j(0)) \tag{9.189}$$

利用路径积分的边界条件$\vec{n}_j(\beta) = \vec{n}_j(0)$,这相当于$\varphi_j(\beta) - \varphi_j(0)$ 是2π的整数倍,这样$2(\varphi_j(\beta) - \varphi_j(0))$只是贡献$4\pi$的整数倍,这对配分函数而言只是一个常数因子,在下面的讨论中可以略去. 这样我们得到

$$A_s = A_B + A_H, \quad A_B = iS\sum_j (-1)^j \omega_B(\vec{m}_j)$$

$$A_H = \int_0^\beta d\tau \sum_j \left[-JS^2 \vec{m}_j \cdot \vec{m}_{j+1} + (-1)^j JS^2 \vec{m}_j \cdot (\vec{L}_{j+1} + \vec{L}_{j-1}) + JS^2 \vec{L}_j \cdot \vec{L}_{j+1} + iS\vec{L}_j \cdot \frac{d\vec{m}_j}{d\tau} \times \vec{m}_j \right]$$

在连续近似下,我们有

$$\begin{aligned}
&\vec{m}_j \cdot \vec{m}_{j+1} \to \vec{m}(x,\tau) \cdot (\vec{m}(x,\tau) + \partial_x \vec{m}(x,\tau) + \frac{1}{2}\partial_x^2 \vec{m}(x,\tau)) = 1 - \frac{1}{2}(\partial_x \vec{m})^2 \\
&(-1)^j JS^2 \vec{m}_j \cdot (\vec{L}_{j+1} + \vec{L}_{j-1}) \to (-1)^j JS^2 \vec{m} \cdot (\vec{L} + \partial_x \vec{L} + \vec{L} - \partial_x \vec{L}) = 0 \\
&JS^2 \vec{L}_j \cdot \vec{L}_{j+1} \to JS^2 \vec{L}^2 \qquad (9.190) \\
&iS\vec{L}_j \cdot \frac{d\vec{m}_j}{d\tau} \times \vec{m}_j \to iS\vec{L} \cdot \frac{d\vec{m}}{d\tau} \times \vec{m} \qquad (9.191)
\end{aligned}$$

此时作用量的动力学部分是

$$A_H = \int_0^\beta d\tau \int dx \left[\frac{JS^2}{2}(\partial_x \vec{m})^2 + JS^2 \vec{L}^2 + iS\vec{L} \cdot \frac{d\vec{m}}{d\tau} \times \vec{m} \right] \qquad (9.192)$$

(配完全平方$\vec{L} \to \vec{L} + \frac{i}{2JS}\frac{d\vec{m}}{d\tau} \times \vec{m}$) 积掉均匀部分$\vec{L}$可得(原则上需要考虑约束条件$\vec{m} \cdot \vec{L} = 0$,但这里自动满足此条件)

$$A_H = \int_0^\beta d\tau \int dx \left[\frac{JS^2}{2}(\partial_x \vec{m})^2 + \frac{1}{4J}\left(\frac{d\vec{m}}{d\tau} \times \vec{m} \right)^2 \right] \qquad (9.193)$$

注意到第二项还可进一步化简

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d\vec{m}}{d\tau} \times \vec{m} \right)^2 &= \epsilon^{ijk}\epsilon^{ilq}(\partial_\tau m_j \partial_\tau m_l) m_k m_q = (\delta_{j,l}\delta_{k,q} - \delta_{j,q}\delta_{k,l})(\partial_\tau m_j \partial_\tau m_l) m_k m_q \\
&= (\partial_\tau m_j)(\partial_\tau m_j) m_k m_k - (\partial_\tau m_j)(\partial_\tau m_k) m_k m_j \\
&= (\partial_\tau \vec{m})^2 \vec{m}^2 - \left(\frac{1}{2}\partial_\tau \vec{m}^2 \right)^2 \qquad (9.194) \\
&= (\partial_\tau \vec{m})^2 \qquad (9.195)
\end{aligned}$$

这样动力学部分化简为

$$A_H = \int_0^\beta d\tau \int dx \left[\frac{JS^2}{2}(\partial_x \vec{m})^2 + \frac{1}{4J}(\partial_\tau \vec{m})^2 \right] \qquad (9.196)$$

也就是一个$1+1$维的$O(3)$非线性Sigma模型.这里的$O(3)$指的是三维矢量$\vec{m}$在3×3正交变换下保持矢量平方$\vec{m}^2$不变的操作所构成的$O(3)$群.非线性指的是这个模型有约束条件$\vec{m}^2 = 1$,若没有这个条件则叫做线性模型.至于sigma这个叫法是

源于最早人们写出该模型时用符号$\vec{\sigma}$代表$\vec{m}$.对于Berry 相位部分我们假定体系由$2N_s$ 个格点构成且具有周期边界,那么有

$$\begin{aligned} A_B &= iS\sum_{j=1}^{2N_s}(-1)^j\omega_B(\vec{m}_j) = iS\sum_{k=1}^{N_s}[\omega_B(\vec{m}_{2k}) - \omega_B(\vec{m}_{2k-1})] \quad (9.197)\\ &= iS\frac{1}{2}\int dx\frac{\partial\omega_B(\vec{m})}{\partial\vec{m}}\cdot\partial_x\vec{m} \quad (9.198)\\ &= iS\frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau\int dx(\partial_\tau\vec{m}\times\vec{m})\cdot\partial_x\vec{m} \quad (9.199)\\ &= iS\frac{4\pi\mathcal{Q}}{2} = iS2\pi\mathcal{Q} \quad (9.200)\end{aligned}$$

这里定义了$\mathcal{Q}$:

$$\boxed{\mathcal{Q} = \frac{1}{4\pi}\int_0^\beta d\tau\int dx(\partial_\tau\vec{m}\times\vec{m})\cdot\partial_x\vec{m} = \frac{1}{4\pi}\int_0^\beta d\tau\int dx\vec{m}\cdot(\partial_\tau\vec{m}\times\partial_x\vec{m})}$$

对于在时间与空间方向上都具有周期边界的系统,Q量子化为一些列整数,通常称为Skyrmion数.其物理意义是从二维环面$([0,L]\otimes[0,\beta])$到单位球面$\vec{m}^2 = m_x^2+m_y^2+m_z^2 = 1$的形变次数,或者说是二维环面覆盖单位球面的次数.

当然,如果我们考虑开边界系统,那么这相当于体系两段的自旋没有配对而体系中间的所有自旋还是成对贡献拓扑项,即有

$$A_B' = iS2\pi\mathcal{Q} + i\frac{S}{2}[\omega_B(\vec{m}(x=L)) - \omega_B(\vec{m}(x=0))] \quad (9.201)$$

这里的第二项相当于是把周期边界时的$\omega_B(\vec{m}(x=0)) - \omega_B(\vec{n}(x=L))$项剔除掉.这个结果并不由Haldane发现,而是在由TK Ng(吴大琪)在1994年得到.

结合Berry相位部分和动力学($O(3)$非线性Sigma模型)部分,我们发现体系在有周期边界条件时的有效作用量具有如下形式

$$\boxed{A_{eff} = iS2\pi\mathcal{Q} + \int_0^\beta d\tau\int dx\left[\frac{JS^2}{2}(\partial_x\vec{m})^2 + \frac{1}{4J}(\partial_\tau\vec{m})^2\right]} \quad (9.202)$$

第一项反映的是自旋Berry相位的贡献,对一维反铁磁体而言,场论中称其为拓扑θ项.注意到动力学部分其实相当于一个经典的$1+1$维$O(3)$非线性sigma模型.(在先前经典相变的重整化讨论中,我们已经研究了$O(3)$情况的重整化群流图和相应的不动点.)

Haldane猜想

如果Berry相位部分不影响动力学,那么一维量子Heisenberg反铁磁体的低能物理可以由相应的经典非线性sigma 模型描述.而对于Berry相位,其对配分函数的贡献是

$$e^{-i2S\pi\mathcal{Q}} \quad (9.203)$$

注意到$\mathcal{Q}$为整数,那么我们发现半整数自旋系统($S=\frac{1}{2},\frac{3}{2}...$)的贡献是

$$(-1)^{\mathcal{Q}} \tag{9.204}$$

也就是说不同Skyrmion数的自旋位形相互抵消.从经典统计的角度来说,$(-1)^{\mathcal{Q}}e^{-A_H}$表示相应的统计权重既有正的,也有负的,而我们知道负的概率是没有意义的,因此半整数自旋的路径积分虽然看上去是经典统计问题,但是Blotzman权重的负概率导致其量子特性的呈现.这种负概率会导致传统(量子)蒙特卡洛方法的失效,也就是有符号问题.

但是,对于整数自旋($S=1,2...$),我们发现Berry相位项的贡献是

$$(-1)^{\mathcal{Q}}=1 \tag{9.205}$$

也就是说所有Skyrimion数的贡献是叠加在一起的并且Boltzman权重是正定的,经典蒙特卡洛可以用来研究相关的模型.从物理上来说,如果想要知道体系的动力学性质,我们可以只研究动力学部分A_H的效应.

基于整数与半整数自旋Berry相位项对配分函数贡献的不同行为,Haldane猜测(conjecture)半整数自旋的物理应该和整数自旋的物理不同,特别是整数自旋系统应该有一个有限的激发能隙(基于没有Skyrmion的$1+1$维非线性sigma模型,即A_H部分的场论分析),即现在的Haldane能隙.而对于半整数自旋,基于Bethe ansatz,玻色化以及大量的数值计算分析,一般认为体系是低能自旋激发无能隙的.(Haldane自己认为这些结果是理论的自然预言,并不是猜想.)[12]

作为一个简单的例子,让我们考虑一维$S=1/2$的反铁磁双链(阶梯ladder)模型,其在链间耦合为反铁磁时Berry 相位互相抵消$e^{-i0\mathcal{Q}}$,体系是平凡的有能隙顺磁态.但是当链间耦合为铁磁时,两个链的Berry相位相互叠加得到$e^{-i2\pi\mathcal{Q}}$,特别是开边界条件下在边界处的Berry相位是 $i\frac{1}{2}[\omega_B(\vec{m}(x=L))-\omega_B(\vec{m}(x=0))]$, 这其实就是两个自由的$S=1/2$自旋的Berry相位,也就是说铁磁耦合时系统在边界处有两个(分数化了的)$S=1/2$自旋,这与完全没有边界自旋的平凡态时完全不同的.我们通常把边界有自由$S=1/2$自旋的顺磁态(基态)称为Haldane 态.

- 实验上人们最早在有机链分子NENP中观察到Haldane态的信号.
- 最近,人们在冷原子光晶格中利用^{6}Li原子气体的最低能超精细态观测到了Haldane态的基本特征,即弦序和空间分辨的磁化.[13]

在这里弦序通常的定义为

$$\hat{\mathcal{O}}_{ij}^{string}=\hat{\mathcal{O}}_i\prod_{l=i+1}^{i+j-1}\hat{U}_l\hat{\mathcal{O}}_{i+j} \tag{9.206}$$

[12]Haldane猜想只是说明整数自旋系统有能隙,但能隙的自旋链依然可以有完全不同的物理性质,特别其拓扑性质可以全然不同.

[13][Sompet et al.,Realizing the symmetry-protected Haldane phase in Fermi‐Hubbard ladders,Nature published online (2022)]

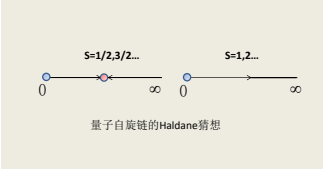


Figure 9.2: 一维量子自旋链的Haldane猜想,即整数自旋链基态是强耦合的无序有能隙自旋液体,而半整数自旋链则流向无能隙的自旋液体态.

$\hat{U}_l$可以选为z轴转动π角度的操作,即$\hat{U}_l = e^{i\pi\hat{S}_l^z}$.$\hat{\mathcal{O}}_i, \hat{\mathcal{O}}_{i+j}$选为$\hat{S}_i^z, \hat{S}_{i+j}^z$.注意到当$\hat{S}_l^z = 0$时$\hat{U}_l = 1$而$\hat{S}_l^z = \pm 1$(我们考虑$S = 1$体系)时$\hat{U}_l = -1$,这说明对弦序参量$\langle\hat{\mathcal{O}}_{ij}^{string}\rangle$有非平凡贡献的是排除所有$S^z = 0$后自旋上与下的构型.当$\langle\hat{\mathcal{O}}_{ij}^{string}\rangle \neq 0$时我们说体系具有非平凡的弦序,这又是也叫做Haldane态中的隐藏序(hidden order).

最后,注意到Haldane态的边界模式与先前研究的一维费米子SSH模型的费米子零模以及一维p波超导模型的Majorana零模的相似性,这实际上是一维拓扑态或者更确切的说是对称性保护拓扑态(symmetry-protected topological (SPT)state)的一般特征.

AKLT,MPS和张量网络态

在Haldane提出猜想以后,Affleck,Lieb,Kennedy和Tasaki指出如下一维$S = 1$量子反铁磁链的基态是Haldane态:

$$\hat{H}_{AKLT} = J\left[\hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+1} + \frac{1}{3}\left(\hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+1}\right)^2\right] \tag{9.207}$$

这里$\hat{S}_j$是$S = 1$的自旋算符.这个哈密顿量的基态可以直接写出,即著名的AKLT态:

$$|\psi\rangle_{AKLT} = \hat{P}|VB\rangle \tag{9.208}$$

$|VB\rangle = \prod_{i=1}^{N_s-1} |\uparrow\rangle_{iR}|\downarrow\rangle_{i+1L} - |\downarrow\rangle_{iR}|\uparrow\rangle_{i+1L}$ 是一个$S = 1/2$自旋组成的价键(固体)态,这里的$S = 1/2$自旋可以看成是把原始的$S = 1$ 自旋人为地拆分为两个自旋而形成,R, L表示同一个原始自旋拆分出的新自旋.$\hat{P}$是把$S = 1/2$系统的状态投影回$S = 1$自旋体系,具体形式是

$$\hat{P} = \sum_{j=1}^{N_s}\left[|S^z = 1\rangle_j\langle\uparrow|_{jL}\langle\uparrow|_{jR} + |S^z = 0\rangle_j\frac{\langle\uparrow|_{jL}\langle\downarrow|_{jR} + \langle\downarrow|_{jL}\langle\uparrow|_{jR}}{\sqrt{2}} + |S^z = -1\rangle_j\langle\downarrow|_{jL}\langle\downarrow|_{jR}\right] \tag{9.209}$$

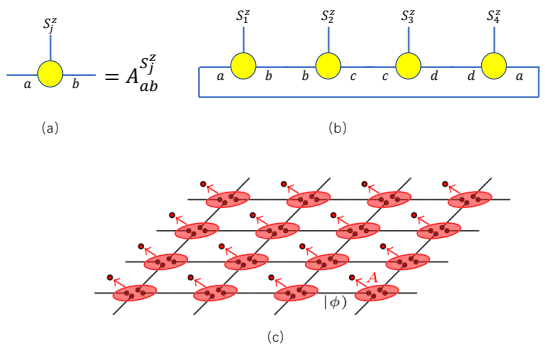


Figure 9.3: (a)矩阵$A_{ab}^{S_j^z}$的图形表示;(b)四自旋AKLT态的MPS图形表示;(c)PEPS的图形表示.

上式中的三项分别是把自旋$S=1/2$态往$S=1$的三个态做投影.注意到破坏任意一个自旋单态会消耗能量J,因此AKLT态描述有能隙的自旋液体,这与Haldane的场论预言一致.同时我们注意到链两端存在自由自旋,($j=1$的左自旋以及$j=N_s$的右自旋没有在波函数中)这也是预期的结果.

当然,AKLT态也可以写成所谓矩阵乘积态形式(matrix-product-state(MPS)):[14][6]

$$|\psi\rangle_{AKLT}=\sum_{S_1^z,S_2^z\ldots}\mathrm{Tr}[A^{S_1^z}A^{S_2^z}\ldots A^{S_{N_s}^z}]|S_1^z,S_2^z\ldots S_{N_s}^z\rangle \tag{9.210}$$

这里矩阵$A^{S_j^z}$是$S=1$的自旋取值为$S^z=1,0,-1$时对应的矩阵.求迹操作对应系统的周期边界条件.具体而言,我们有

$$A^{S_j^z=1}=-\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\sigma}^x-i\hat{\sigma}^y),\quad A^{S_j^z=0}=-\hat{\sigma}^z,\quad A^{S_j^z=-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\sigma}^x+i\hat{\sigma}^y) \tag{9.211}$$

注意到每一个自旋所对应的矩阵都相等,这体现了体系具有平移不变性.MPS态可以用图形进行方便地表示,图9.3(a)给出了矩阵$A_{ab}^{S_j^z}$的图形表示,而(b)是四个自旋的AKLT态的MPS图形表示.

- 结合MPS态表示,对称性分析以及纠缠谱的计算,人们发现自旋为奇数的Haldane态是一类由对称性[15]保护的拓扑态,(根据定义,对称保护拓扑相是指当存在某类对称性时体系是稳定的而一旦消除这种对称性那么体系就可以绝热演化为平凡的绝缘体)而偶数自旋Haldane 态则不是.[16]

[14]MPS态的高维推广就是张量网络态

[15]这类拓扑非平凡态由一下三类对称性中的任意一个保护:1)关于x,y,z 轴转动π 角度;2)时间反演对称($-\hat{S}_j^{x,y,z}\to\hat{S}_j^{x,y,z}$);3)关于键中心的空间反演.存在1)时体系具有弦序,边界态和二重简并的纠缠谱.存在2)时弦序就无法用来表征Haldane态,而有3)时只有二重简并的纠缠谱才能表

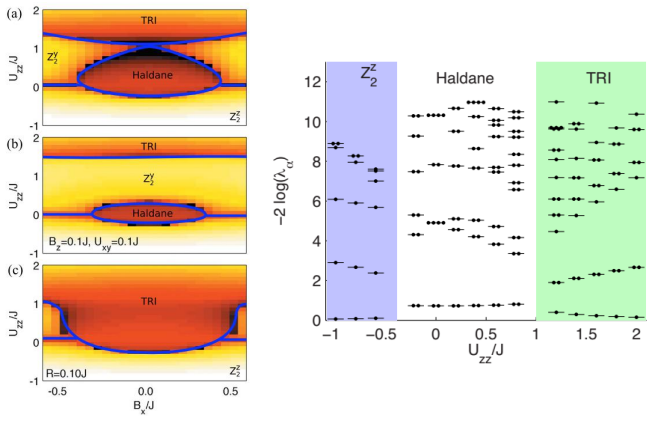


Figure 9.4: $S=1$的自旋模型的基态相图(a)(b)(c)和纠缠谱.

Pollmann等人利用MPS系统化得研究了Haldane态的稳定性.[17]首先,他们考虑如下$S=1$的自旋模型,

$$\hat{H}_0 = J\sum_j \hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+1} + B_x \sum_j \hat{S}_j^x + U_{zz}\sum_j (\hat{S}_j^z)^2 \tag{9.212}$$

这个模型的对称性包括空间平移不变性,

$$\hat{\vec{S}}_j \to \hat{\vec{S}}_{j+1}, \quad \hat{H}_0 \to \hat{H}_0 \tag{9.213}$$

(以键中心为参考的)空间反演不变性

$$\hat{\vec{S}}_j \to \hat{\vec{S}}_{1-j}, \quad \hat{H}_0 \to \hat{H}_0 \tag{9.214}$$

绕x轴转动π角度($e^{i\pi\sum_j \hat{S}_j^x}$)

$$\hat{S}_j^{y,z} \to -\hat{S}_j^{y,z}, \quad \hat{S}_j^x \to \hat{S}_j^x, \quad \hat{H}_0 \to \hat{H}_0 \tag{9.215}$$

以及绕y轴转动π角度与时间反演的复合($e^{i\pi\sum_j \hat{S}_j^y} \times TR$)

$$\hat{S}_j^y \to -\hat{S}_j^y, \quad \hat{S}_j^{x,z} \to \hat{S}_j^{x,z}, \quad \hat{H}_0 \to \hat{H}_0. \tag{9.216}$$

图9.4(a)给出了$\hat{H}_0$的基态相图.当U_{zz}很大时,体系基态就是平凡的顺磁态(TRI),可以理解为简单的乘积态$\prod_j |S_j^z=0\rangle$.进一步,体系也存在两个反铁磁态(Z_2^y, Z_2^z),其

征Haldane态.

[16][Pollmann,Berg,Turner,Oshikawa, Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems, Phys.Rev.B **85**,075125(2012);Pollmann,Turner, Detection of symmetry-protected topological phases in one dimension, Phy.Rev.B **86**,125441(2012)]

[17][Pollmann,Turner,Berg,Oshikawa,Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension,Phys.Rev.B **81**,064439(2010)]

具有非零的磁性序参量$\sum_j\langle\hat{S}_j^y\rangle\neq 0$或$\sum_j\langle\hat{S}_j^z\rangle\neq 0$.$Uzz=Bx=0$是Heisenberg点,其附近是Haldane态.

图9.4右边表明Haldane态的'低能'纠缠谱显示二重简并,而其他拓扑平凡态,例如TRI和Z_2^z则没有这类简并.通常认为我们可以用二重简并的纠缠谱来定义$S=1$体系中的Haldane态.需要指出,虽然平凡态(TRI)的纠缠谱也可以出现简并,但是这些简并可以通过对称性破缺的扰动(保持空间反演不变性)来消除,与之相比,Haldane态纠缠谱的双重简并在这些扰动下是稳定的.为了证明这一点,Pollmann等人考虑了破坏$e^{i\pi\sum_j\hat{S}_j^x}$和$e^{i\pi\sum_j\hat{S}_j^y}\times TR$对称性的扰动$\hat{H}_1$

$$\hat{H}_1=B_z\sum_j\hat{S}_j^z+U_{xy}\sum_j(\hat{S}_j^x\hat{S}_j^y+\hat{S}_j^y\hat{S}_j^x) \tag{9.217}$$

此时,哈密顿量$\hat{H}_0+\hat{H}_1$的基态相图就由图9.4(b)给出.由于空间反演不变性仍然存在,因此相图中的Haldane态还可以稳定,其纠缠谱 具有双重简并.最后,如果考虑破坏空间反演不变性的扰动$\hat{H}_1=R\sum_j[\hat{S}_j^z(\hat{S}_j^x\hat{S}_{j+1}^x+\hat{S}_j^y\hat{S}_{j+1}^y)-\hat{S}_{j+1}^z(\hat{S}_j^x\hat{S}_{j+1}^x+\hat{S}_j^y\hat{S}_{j+1}^y)+H.c.]$,如图9.4(c)所示,Haldane态此时已经消失,我们可以认为这种情况下没有空间反演对称性保护的Haldane态会连续变化为平凡的TRI态.

更一般地,我们可以用MPS近似一维自旋和玻色子系统的基态波函数,此时矩阵A推广为$d\times d$的矩阵,d称为所谓的键维度(bond dimension).如果把矩阵中的元素当作变分参数,那么MPS就成为一类变分波函数,这样通过对能量变分取极小就可得系统近似的基态波函数.[18]其计算结果与密度矩阵重整化群类似,因此目前成为了模拟一维量子系统性质的标准数值算法.

进一步,人们也利用MPS对一维的自旋和玻色子系统进行了分类,[19]这实际上是无相互作用拓朴绝缘体和超导体分类在相互作用情况下的重要推广.例如在陈谐等人的工作中,他们假设所有可能的一维有能隙态都可以用MPS来表示,然后利用局域幺正变换和MPS的对称性,就可以得到(具有某种简单对称性情况下)一维量子自旋体系中所有有能隙态的分类.其主要结果是:

(a)如果没有任何对称性(包括平移对称),所有有能隙的一维自旋体系都属于一个态.

(b)对于仅具有在格点对称性(on-site symmetry,用G表示)的一维非平移不变自旋体系,所有不破坏对称性的有能隙态可以用群G的第二上同调群$H^2(G,C)$(second cohomology group)的等价类来分类.(假定每一个格点上的物理态形成群G的线性表示)

结果(a)意味着一维体系没有拓扑序.结果(b)说明,具有在格点$SO(3)$自旋对称性的非平移不变的整数自旋链若不破坏$SO(3)$对称则有且仅有两类不等价的态.(这实际上说明$S=1$反铁磁自旋链具有非平凡的Haldane态和平凡的顺磁性

[18]当然也可以采用虚时演化的方式计算基态波函数

[19][Chen,Gu,Wen,Classification of gapped symmetric phases in one-dimensional spin systems,Phys.Rev.B **83**,035107(2011)]

乘积态)对于具有在格点Z_n对称的自旋链有且仅有一个不破坏Z_n对称的有能隙态.(回忆一维量子Ising模型具有唯一的顺磁态)仅有在格点$U(1)$对称的自旋链有且仅有三个不破坏$U(1)$对称的有能隙态.

最后,可以把MPS的想法推广至二维或三维空间,此时相应的状态一般称为张量网络(tensor network)态,例如投影纠缠对态(projected entangled pair state,PEPS),(图9.3(c))树张量网络态,多尺度纠缠重整化拟设(multiscale entanglement renormalization ansatz,MERA)等.[20]为了便于入门这些数值技术,下面给出了一些网站资源:

- Nishino,The DMRG Homepage. http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/dmrg.html
- Stoudenmirev,The Tensor Network. https://tensornetwork.org/
- FishmanvM,Stoudenmire,White,An open source TNS library. https://itensor.org/
- Hauschild,Pollmann,A tensor library for Python (TeNPy). https://github.com/tenpy/tenpy
- Evenbly,Tensors.net. https://www.tensors.net/

高维Heisenberg反铁磁体:非线性sigma模型场论*

在一维Heisenberg反铁磁体的讨论中,我们发现单个自旋链的Berry相位是 $i2\pi S\mathcal{Q}$.对于高维反铁磁系统,例如二维正方晶格上最近邻耦合的反铁磁Heisenberg模型$\hat{H} = J\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{\vec{S}}_i\cdot\hat{\vec{S}}_j$,我们可以看成一个个自旋链的叠加,并且由于反铁磁经典位形的假定 $\vec{n}_j \sim (-1)^{R_j}\vec{m}_j$,每个相邻的自旋链的Berry相位差一个负号,这样所有链的叠加(假定超立方体且体系的链数目为偶数)导致的Berry相位互相抵消,最后得到零的结果.也就是说如果考虑连续的非奇异自旋位形,那么高维反铁磁体的Berry相位为零.此时体系的有效作用量是$d+1$维$O(3)$非线性Sigma模型:

$$A_{eff} = \int_0^\beta d\tau\int d^dx\left[\frac{1}{gc}(\partial_\tau\vec{m})^2 + \frac{c}{g}(\nabla\vec{m})^2\right] = \frac{1}{g}\int_0^{c\beta} dx_0\int d^dx(\partial_\mu\vec{m})^2, \tag{9.218}$$

这里$x_0 = c\tau, \partial_\mu = (\partial_0,\nabla) = (\frac{1}{c}\partial_\tau,\nabla)$.

$$c = \sqrt{2d}JS \tag{9.219}$$

$$g = \frac{2\sqrt{2d}}{S} \tag{9.220}$$

不包含Berry相位的配分函数是

$$\mathcal{Z} = \int\mathcal{D}\vec{m}\delta(\vec{m}^2-1)e^{-A_{eff}} \tag{9.221}$$

[20]更进一步的讨论可以参考综述文献[Cirac,Perez-Garcia,Schuch,Verstraete,Matrix product states and projected entangled pair states:Concepts,symmetries,theorems Rev.Mod.Phys. **93**,045003(2021)]或者关于概念的简单评述[Bañuls,Tensor Network Algorithms: A Route Map,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **14**,173(2023)]

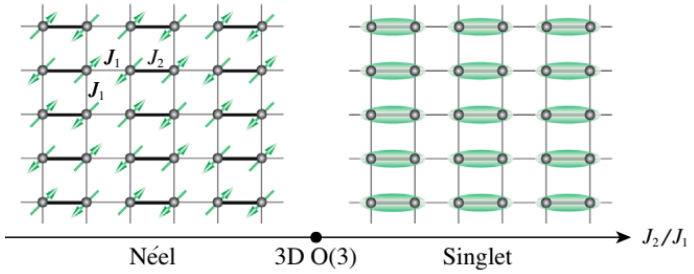


Figure 9.5: 正方晶格J_1-J_2栏状二聚体反铁磁模型的基态相图.随着J_2/J_1的增加,体系从Néel反铁磁态转变为横向排列的自旋单重态(价键固体),两者之间的量子相变点由3维$O(3)$非线性Sigma模型描述.

需要指出,这里得到的$d+1$维$O(3)$非线性Sigma模型可以描述一些有趣的二维量子反铁磁系统:

- 正方晶格J_1-J_2栏状二聚体反铁磁模型;(图9.5)
- 正方晶格双层反铁磁Heisenberg模型.

在先前的非线性sigma模型的重整化讨论中,我们已经知道该类模型在高维时存在有序-无序相变,而低维时没有相变,体系流向强耦合.在这里我们采用平均场的处理方法来检视相关的物理内容.

我们知道

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-ia\lambda} = \delta(a) \tag{9.222}$$

那么配分函数测度部分的约束可以化为动力学的拉格朗日乘子λ的作用量

$$\delta\left(\vec{m}^2(x,\tau)-1\right) = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda(x,\tau) e^{-i\lambda(x,\tau)\left(\vec{m}^2(x,\tau)-1\right)} \tag{9.223}$$

这样我们得到新的有效作用量与配分函数(令速度$c=1$)

$$A_{eff} = \int_0^\beta d\tau \int d^dx \frac{1}{g}\left[(\partial_\tau \vec{m})^2 + (\nabla\vec{m})^2 + ig\lambda(\vec{m}^2-1)\right] = \frac{1}{g}\int_0^\beta dx_0 \int d^dx[(\partial_\mu\vec{m})^2 + ig\lambda(\vec{m}^2-1)] \tag{9.224}$$

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\vec{m}\mathcal{D}\lambda e^{-A_{eff}} \tag{9.225}$$

在平均场处理中,我们假定λ与时间τ无关,此外体系的解如果是均匀的,那么λ也与位置无关,也就是我们假定$\lambda(x,\tau)=\lambda_0=const.$. 为了进一步处理的方

便,通常令$ig\lambda_0 = m_0^2$, 这样我们得到平均场近似下的作用量是

$$A_{MF} = \frac{1}{g}\int_0^\beta dx_0 \int d^d x[(\partial_\mu \vec{m})^2 + m_0^2(\vec{m}^2 - 1)] \tag{9.226}$$

这样,作用量已经是$\vec{m}$的Gauss形式,可以完全积掉$\vec{m}$. 做傅里叶变换

$$\vec{m}(x,\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta V}}\sum_{\Omega_n}\sum_k e^{ikx - i\Omega_n \tau}\vec{m}(k, i\Omega_n) \tag{9.227}$$

$$A_{MF} = \frac{1}{g}\left[\sum_{\Omega_n}\sum_k (\Omega_n^2 + k^2 + m_0^2)|\vec{m}|^2 - m_0^2\beta V\right] \tag{9.228}$$

我们得到平均场的配分函数是

$$\mathcal{Z}_{MF} = e^{\frac{m_0^2\beta V}{g}}\prod_{k,\Omega_n}\left[\sqrt{\frac{\pi g}{\Omega_n^2 + k^2 + m_0^2}}\right]^3 \tag{9.229}$$

相应的自由能是

$$F_{MF} = -\frac{m_0^2 V}{g} + \frac{3}{2}T\sum_{k,\Omega_n}\ln(\Omega_n^2 + k^2 + m_0^2) - \frac{3}{2}T\sum_{k,\Omega_n}\ln(\pi g) \tag{9.230}$$

使得自由能最小化的m_0^2由下式决定

$$\frac{\partial F_{MF}}{\partial m_0^2} = 0 \Rightarrow \frac{3T}{2V}\sum_{k,\Omega_n}\frac{1}{\Omega_n^2 + k^2 + m_0^2} = \frac{1}{g} \Rightarrow \frac{3T}{2V}\sum_{k,\Omega_n}\frac{1}{\Omega_n^2 + \omega_k^2} = \frac{1}{g},\ \omega_k = \sqrt{k^2 + m_0^2} \tag{9.231}$$

对松原频率求和可得

$$T\sum_{\Omega_n}\frac{1}{\Omega_n^2 + \omega_k^2} = \frac{1}{2\omega_k}(f_B(\omega_k) - f_B(-\omega_k)) = \frac{\coth\frac{\beta\omega_k}{2}}{2\omega_k} \tag{9.232}$$

$$\frac{3}{2V}\sum_k \frac{\coth\frac{\beta\omega_k}{2}}{2\omega_k} = \frac{1}{g} \tag{9.233}$$

当体系温度为零时,我们有$\coth\frac{\beta\omega_k}{2} = 1$,

$$\frac{3}{4}\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{1}{\sqrt{k^2 + m_0^2}} = \frac{1}{g} \tag{9.234}$$

一般而言,这个方程总有$m_0^2 > 0$的有能隙解,此时系统的自旋激发总是需要消耗有限能量$|m_0|$.为了讨论非平凡的解,我们设$m_0 = 0$,此时有

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{1}{|k|} = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\int_0^\Lambda dk\frac{k^{d-1}}{k} = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\int_0^\Lambda dk k^{d-2} \tag{9.235}$$

显然,这个积分在一维是发散的,也就是说我们假定的$m_0 = 0$的无能隙解在一维时不稳定的.但是在$d > 1$时,无能隙解对应的积分是有限的,这说明体系可以支持相关的无能隙激发.

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\frac{1}{|k|} = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{\Lambda^{d-1}}{d-1},\quad d > 1 \tag{9.236}$$

这样无能隙解恰好出现的临界值g_c为

$$\frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{\Lambda^{d-1}}{d-1}=\frac{4}{3g_c}\Rightarrow g_c=\frac{4(2\pi)^d}{3S_d}\frac{d-1}{\Lambda^{d-1}} \tag{9.237}$$

当$g>g_c$时,体系只有有能隙激发,当$g<g_c$时体系可以出现无能隙激发,这样$g=g_c$就是系统的量子临界点.从物理上来看,如果$m_0=0$,那么平均场作用量是

$$A_{MF}=\frac{1}{g}\sum_{\Omega_n}\sum_{k}(\Omega_n^2+k^2)|\vec{m}|^2 \tag{9.238}$$

此时对应的激发能谱是$\omega_k\sim k(d>1)$,显然这就是我们先前讨论Heisenberg反铁磁模型中用HP玻色子方法得到的反铁磁自旋波激发.当然,除了无能隙的自旋波(Goldstone模式),体系还存在有能隙的振幅(Higgs)模式,我们可以令$\vec{m}=(m_x,m_y,m_z+n_{or})$,其中$n_{or}$是相应的序参量场,在平均场近似下是常数.把这个形式代入平均场作用量

$$A_{MF}=\frac{1}{g}\left[\sum_{a=x,y,z}\sum_{\Omega_n}\sum_{k}(\Omega_n^2+k^2+m_0^2)|m_a|^2+m_0^2(n_{or}^2-1)\beta V\right] \tag{9.239}$$

积掉横向涨落部分m_x,m_y以及纵向涨落m_z可得

$$F_{MF}=\frac{m_0^2V}{g}(n_{or}^2-1)+\frac{3}{2}T\sum_{k,\Omega_n}\ln(\Omega_n^2+k^2+m_0^2)-\frac{3}{2}T\sum_{k,\Omega_n}\ln(\pi g) \tag{9.240}$$

对m_0^2和n_{or}取极值可得

$$\frac{3g}{2}\frac{T}{V}\sum_{k,\Omega_n}\frac{1}{\Omega_n^2+k^2+m_0^2}=1-n_{or}^2 \tag{9.241}$$

$$m_0^2n_{or}=0 \tag{9.242}$$

显然,当$n_{or}=0$时,此时回到先前讨论的情况.当$m_0=0$,$n_{or}\neq 0$时,我们有

$$n_{or}^2=1-\frac{3g}{2}\frac{T}{V}\sum_{k,\Omega_n}\frac{1}{\Omega_n^2+k^2}=1-\frac{3g}{4V}\sum_{k}\frac{\coth\frac{\beta|k|}{2}}{|k|} \tag{9.243}$$

在$T=0$时,我们得到

$$n_{or}^2=1-\frac{3g}{4}\frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{\Lambda^{d-1}}{(d-1)}=1-\frac{g}{g_c} \tag{9.244}$$

当$g<g_c$时,序参量n_{or}为有限值,代表反铁磁有序态的出现,而当$g>g_c$时,$n_{or}=0$,体系进入无序态且能隙$m_0^2>0$.

最后,我们讨论临界点的行为,在平均近似下关联函数是

$$G^0(k,i\Omega_n)=\langle m_a(k,\Omega_n)m_a(-k,-\Omega_n)\rangle=\frac{g}{\Omega_n^2+k^2} \tag{9.245}$$

实频的关联函数可以通过解析延拓获得$i\Omega_n \to \omega + i0^+$

$$G^0(k,\omega) = \frac{g}{k^2 - \omega^2} \tag{9.246}$$

显然其满足标度形式$G(k) \sim \frac{1}{k^{2-\eta}}$,$\eta = 0$.如果我们超越平均场,即考虑高阶的涨落修正,可以发现在单圈图(RPA)近似下有

$$\eta = \frac{8}{3\pi^2 N} \simeq 0.09, \quad N = 3, d = 2 \tag{9.247}$$

也就是

$$G(k,\omega) \sim \frac{g}{(k^2 - \omega^2)^{\frac{2-0.09}{2}}} \tag{9.248}$$

这说明二维反铁磁体在相变点有一个小的反常维度.同时,注意到原始的作用量(没做平均场的作用量)中时间与空间是等价出现的,这说明动力学临界指数是$z = 1$.在铜氧化物高温超导体发现后,人们利用这里的二维量子非线性sigma模型研究其反铁磁母体的磁性行为,基本结论是母体化合物处于反铁磁有序的一边,低能激发是自旋波,距离量子相变点还有距离.换句话说,铜氧化物母体从磁性角度来说看起来是比较经典的.

高维Heisenberg反铁磁体:可能的拓扑项

尽管连续位形导致的Berry相位完全抵消,但是我们可以考虑奇异位形的效应,比如所谓的刺猬位形,其有非零的空间Skyrmion数

$$\mathcal{Q}(\tau) = \frac{1}{4\pi}\int dxdy\vec{m}(x,y,\tau)\cdot\left[\frac{\partial\vec{m}(x,y,\tau)}{\partial_x}\times\frac{\partial\vec{m}(x,y,\tau)}{\partial_x}\right] \tag{9.249}$$

而对配分函数的总贡献是

$$e^{-i2\pi S\int d\tau\mathcal{Q}(\tau)} \tag{9.250}$$

此时,系统的性质依赖于这些拓扑激发位形的具体特性.一般而言,当体系处于磁有序态时,这些拓扑激发的贡献可以忽略,基本物理可以通过相应的$d+1$维非线性sigma模型来理解.而当体系从磁有序态接近量子相变点或者处于无序的顺磁态时,这些位形的贡献必须严格考虑,然而我们并不能严格计算其真实效果,只能定性地估计其效果.目前的理论研究表明在考虑这些拓扑位形后,体系的顺磁态对于奇数自旋一般会显示空间平移对称的破缺,此时系统处于所谓的价键固体态即VBS,(对于偶整数自旋没有平移对称破缺,例如二维自旋为$S = 2$的AKLT态?)而当处于量子临界点时,系统可能出现退禁闭现象,低能激发是分数化的自旋子(spinon)及其携带的规范场.[7]

本章小结与进一步阅读

本章小结 路径积分是出场量子化的另一种形式;自旋路径积分给出拓扑相位的有效描述.

本章关键词 路径积分;相干态;Grassman数;Hubbard-Stratonovich变换;Hertz理论;Haldane猜想;AKLT态;MPS

进一步阅读 Lancaster和Blundell合著的《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》第二十三到二十八章;Altland和Simons的《Condensed matter field theory》第三和第四章;P.Coleman的《Introduction to Many-Body Physics》第十二到十三章

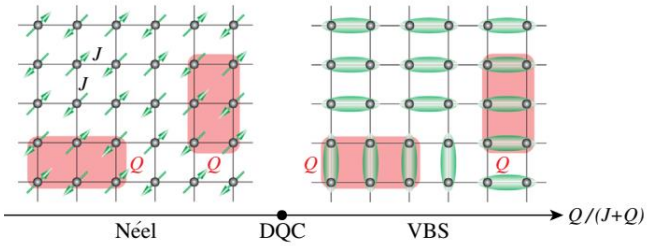


Figure 9.6: 正方晶格$J-Q$模型的基态相图.随着Q/J的增加,体系从Néel反铁磁态转变为价键固体,两者之间的量子相变点是退禁闭的量子临界点.

附录

J-Q模型与退禁闭临界现象

如果量子反铁磁体完全由等效的量子非线性sigma模型描述,那么我们期待其量子临界点附近的关联函数并没有太反常的特性,然而在反铁磁与VBS态的相变点,体系的低能物理由退禁闭的自旋子描述,此时关联函数具有很大的反常维度.为了在数值上直接模拟这个奇特的退禁闭效应,Sandvik用量子蒙特卡洛方法研究了$J-Q$模型:[8]

$$\hat{H}_{J-Q}=J\sum_{ij}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j-Q\sum_{ijkl}\left(\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j-\frac{1}{4}\right)\left(\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j-\frac{1}{4}\right) \tag{9.251}$$

这个模型一般定义在正方或六角晶格,(图9.6)第一项是标准的最近邻Heisenberg耦合,其导致反铁磁Neel序,第二项是不同价键的耦合,其倾向于使体系形成VBS.当$J/Q\simeq 0.04$时,体系处于量子临界态,数值模拟表明$z=1,\eta=0.26\pm0.03$.这里出现的反常维度远大于非线性sigma模型的结果$\eta=0.29>>0.09$.

在这里我们不打算完整讨论退禁闭临界理论的具体内容仅阐述所谓CP_1理论的基本形式. 其出发点是把自旋矢量$\vec{m}$写为两个复玻色场$z_\uparrow,z_\downarrow$的乘积,即

$$\vec{m}=z_\alpha^*\vec{\sigma}_{\alpha\beta}z_\beta=(z_\uparrow^*z_\downarrow+z_\downarrow^*z_\uparrow,i(-z_\uparrow^*z_\downarrow+z_\downarrow^*z_\uparrow),z_\uparrow^*z_\uparrow-z_\downarrow^*z_\downarrow) \tag{9.252}$$

同时$\vec{m}$的单位性要求

$$|z_\uparrow|^2+|z_\downarrow|^2=|z_\alpha|^2=1 \tag{9.253}$$

那么有

$$\begin{aligned}(\partial_\mu \vec{m})^2 &= (\partial_\mu z_\alpha^* z_\beta)\vec{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\vec{\sigma}_{\eta\gamma}\partial_\mu(z_\eta^* z_\gamma) = (2\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\eta}-\delta_{\alpha\beta}\delta_{\eta\gamma})\partial_\mu(z_\alpha^* z_\beta)\partial_\mu(z_\eta^* z_\gamma)\\ &= 2\partial_\mu(z_\alpha^* z_\beta)\partial_\mu(z_\beta^* z_\alpha) - \partial_\mu|z_\alpha|^2\partial_\mu|z_\eta|^2 = 2\partial_\mu(z_\alpha^* z_\beta)\partial_\mu(z_\beta^* z_\alpha)\\ &= 4[|z_\beta|^2\partial_\mu z_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha + (z_\alpha\partial_\mu z_\alpha^*)(z_\beta\partial_\mu z_\beta^*)]\\ &= 4[|\partial_\mu z_\alpha|^2 + (z_\alpha\partial_\mu z_\alpha^*)(z_\beta\partial_\mu z_\beta^*)] \qquad (9.254)\end{aligned}$$

这样我们得到

$$\frac{1}{g}(\partial_\mu\vec{m})^2 = \frac{4}{g}[|\partial_\mu z_\alpha|^2 + (z_\alpha\partial_\mu z_\alpha^*)(z_\beta\partial_\mu z_\beta^*)] = \frac{4}{g}[|\partial_\mu z_\alpha|^2 + (z_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha)(z_\beta^*\partial_\mu z_\beta)] \qquad (9.255)$$

进一步,如果利用HS变换消掉关于z的四次项,那么我们得到

$$\begin{aligned}e^{-\frac{4}{g}\int d\tau d^dx(z_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha)^2} &= e^{\frac{4}{g}\int d\tau d^dx(iz_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha)^2} = e^{\frac{1}{g}\int d\tau d^dx(iz_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha)^2} = \int\mathcal{D}\phi_\mu e^{-\int d\tau d^dx[\tilde{g}\phi_\mu^2 - 2i\phi_\mu z_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha]}\\ &= \int\mathcal{D}\phi_\mu e^{-\frac{1}{g}\int d\tau d^dx[\tilde{g}^2\phi_\mu^2 - 2i\tilde{g}\phi_\mu z_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha]} \qquad (9.256)\\ &= \int\mathcal{D}\phi_\mu e^{-\frac{1}{g}\int d\tau d^dx[z_\alpha^* z_\alpha\tilde{g}^2\phi_\mu^2 - 2i\tilde{g}\phi_\mu z_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha]} \qquad (9.257)\end{aligned}$$

如果令$\tilde{g}\phi_\mu = a_\mu$,我们发现

$$A_{eff} = \int_0^\beta d\tau\int d^dx\frac{1}{\tilde{g}}|(\partial_\mu + ia_\mu)z_\alpha|^2 \qquad (9.258)$$

$$Z = \int\mathcal{D}z^*\mathcal{D}z\delta(|z|^2-1)\mathcal{D}a_\mu e^{-A_{eff}} \qquad (9.259)$$

注意到上述作用量在如下$U(1)$规范变换下不变

$$z_\alpha(x,\tau)\to e^{i\theta(x,\tau)}z_\alpha(x,\tau) \qquad (9.260)$$

$$a_\mu(x,\tau)\to a_\mu(x,\tau) - \partial_\mu\theta(x,\tau) \qquad (9.261)$$

最后,对于一维反铁磁体的Berry相位,我们发现

$$\begin{aligned}&i\frac{2\pi S}{4\pi}\int d\tau dx\vec{m}\cdot\partial_\tau\vec{m}\times\partial_x\vec{m} = i\frac{2\pi S}{4\pi}\int d\tau dx 2[\partial_\tau(z_\alpha^*\partial_x z_\alpha) - \partial_x(z_\alpha^*\partial_\tau z_\alpha)]\\ &= iS\int d\tau dx[\partial_\tau(z_\alpha^*\partial_x z_\alpha) - \partial_x(z_\alpha^*\partial_\tau z_\alpha)] \qquad (9.262)\end{aligned}$$

如果令$iz_\alpha^*\partial_\mu z_\alpha = a_\mu$,并且注意到

$$x_\mu = (\tau, x),\quad \partial_\mu = (\partial_\tau,\nabla),\quad j_\mu = (i\rho,\vec{j}),\quad a_\mu = (i\phi,\vec{a}) = (a_0,\vec{a}) \qquad (9.263)$$

$$\vec{b} = \nabla\times\vec{a},\quad \vec{e} = i(\nabla a_0 - \partial_\tau\vec{a}) \qquad (9.264)$$

这样我们得到Berry相位相当于电场在时空中的总通量

$$iS\int d\tau dx[\partial_\tau a_x - \partial_x a_\tau] = -S\int d\tau dx e_x. \qquad (9.265)$$

第九章习题

习题1:作用量与配分函数

Q1:试由作用量$S=\int_0^\beta d\tau\mathcal{L}(x,\dot{x})$推导相应的拉格朗日运动方程.

Q2:设$S=1/2$费米子在磁场B作用下的作用量是$S=\int_0^\beta d\tau\sum_\sigma \bar{c}_\sigma(\partial_\tau-\mu_B\sigma B)c_\sigma$,试计算相应的配分函数$Z=\int\mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}ce^{-S}$.(提示:利用傅里叶变换$c(\tau)=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_{\omega_n}e^{-i\omega_n\tau}c(\omega_n)$)

Q3:假设$M=e^{\frac{1}{2}\sum_{i,j}A_{ij}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j^\dagger}$,这里$A_{ij}$是$2N\times 2N$的反对称矩阵,$\hat{c}_j^\dagger$是$2N$个标准费米子的产生算符.试利用费米子路径积分计算$\mathrm{Tr}[MM^\dagger]$,这里求迹是对$2^{2N}$维费米子Hilbert空间求.(提示:$\int\prod_{j=1}^{2N}d\bar{c}_jdc_je^{-\frac{1}{2}\bar{\Psi}\Lambda\Psi}=\sqrt{\mathrm{Det}\Lambda}$,$\Psi=(c_1,...c_{2N},\bar{c}_1,...\bar{c}_{2N})^T$)

习题2:一些概念

Q1:解释什么是Hubbard-Stratonovich变换.

Q2:解释一维自旋链系统的Haldane猜想.

习题3:Kondo晶格

Q1:利用路径积分形式写出Kondo晶格模型的作用量,其中Kondo晶格模型定义如下:

$$\hat{H}_{KL}=\sum_{ij\sigma}t_{ij}\hat{c}_{i\sigma}^\dagger\hat{c}_{j\sigma}+J\sum_j\hat{c}_{j\alpha}^\dagger\hat{c}_{j\beta}\vec{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\vec{S}_j^f \tag{9.266}$$

这里$c_{j\sigma}$代表巡游电子,$\vec{S}_j^f$代表局域的f电子自旋自由度.J描述巡游电子与局域自旋的Kondo相互作用.

Q2:当仅有纵向Kondo耦合时(即只有z方向的Kondo耦合),Kondo晶格模型简化为Ising-Kondo晶格模型:

$$\hat{H}_{IKL}=\sum_{ij\sigma}t_{ij}\hat{c}_{i\sigma}^\dagger\hat{c}_{j\sigma}+J\sum_{j\sigma}\sigma\hat{c}_{j\sigma}^\dagger\hat{c}_{j\sigma}S_j^z \tag{9.267}$$

试证明此时Berry相位$\omega_B(\vec{n})=0$.

Bibliography

[1] Roger Melko, Quantum Many-Body Physics, http://pirsa.org/C15078

[2] Alexander Altland and Ben Simons, Condensed Matter Field Theory Modern, 第四章

[3] Nato Nagaosa, Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics, 第四章

[4] Nato Nagaosa, Quantum Field Theory in Strongly Correlated Electronic Systems, 第二章，第三章

[5] Tai-Kai Ng, Edge states in antiferromagnetic quantum spin chains, Phys. Rev. B **50**, 555 (1994).

[6] B. Zeng, X. Chen, D.-L. Duan and X.-G. Wen, Quantum Information Meets Quantum Matter, 第八章

[7] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M. P. A. Fisher, Science **303**, 1490 (2004); T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **70**, 144407 (2004).

[8] Anders W. Sandvik, Evidence for Deconfined Quantum Criticality in a Two-Dimensional Heisenberg Model with Four-Spin Interactions, Phys. Rev. Lett. **98**, 227202 (2007).

GBKsong

Chapter 10

拓扑物态:万物皆拓扑

体系	整数量子霍尔效应	拓扑绝缘体	SSH模型	分数量子霍尔效应
拓扑不变量	陈数	Z_2指标	缠绕数	基态简并度
对称性	???	时间反演	手征	???
边界态	chiral费米子	helical费米子	费米子零模	chiral Luttinger液体

Table 10.1: 一些凝聚态体系的拓扑不变量.

拓扑物态:看看谁没有拓扑

广义而言,拓扑物态指的是系统的基本性质与其拓扑结构密切相关.在数学上,拓扑研究的是物体在连续形变下是否能够彼此变换.在物理上,我们关心的是系统哈密顿量在连续改变系统参数下的不变性.简单来说,如果系统参数连续改变而某些性质不变,那么这些性质就被称为是系统的拓扑性质,也就是整体的性质,对于这些整体性质的研究构成了拓扑物态研究的核心,也就是说我们研究的是变换了的系统中的不变性.[1]在凝聚态物理中,我们一般用更狭义的拓扑物态的定义,(量子拓扑材料)也就是系统的基态波函数具有拓扑结构,可用拓扑不变量描述.根据这个定义,先前讨论的XY模型所显示的KT相变就被排除在外,而SSH模型可具有拓扑物态并用取值为π的Berry相位描述.对于一个一般的量子多体系统,其基态波函数通常是非常复杂的.用当前流行的量子信息语言来说就是系统具有复杂的纠缠结构.一些较为简单的系统具有短程的纠缠而复杂的系统具有长程纠缠.

当然,人们研究最多也最充分的是有能隙的量子系统,这类系统所具有的拓扑物态是1980年代以来凝聚态物理发展的重要方向.例如整数量子霍尔效应,[2]分数量子霍尔效应,[1]量子自旋霍尔效应,三维拓扑绝缘体以及量子反常霍尔效应.[9, 10][3]对于这些系统,除分数量子霍尔效应以外,我们都可用单粒子图像理解和讨论其基本性质.在单粒子图像下,这些系统的拓扑结构可通过相应的单粒子波函数在参数空间,例如动量空间,绝热演化所得的非平凡相位来理解.一般而言,这个非平凡相位就是著名的Berry相位.更重要的是,所得的相位最终可解释为一些取值为整数的分立的量,即拓扑不变量,例如整数量子霍尔效应与量子反常霍尔效应中的Chern数,量子自旋霍尔效应和拓扑绝缘体中的Z_2不变量.

一般来说,找到拓扑不变量就等于定性描述了系统整体的拓扑结构.但是,对于有限的系统,其必然存在边界,在边界上可形成边界态.对于拓扑平凡也就是没有特定拓扑结构的系统,例如平凡的绝缘体,其也存在边界态,只不过这些边界态的存在或者说稳定性容易被杂质,相互作用所影响.与之相反,拓扑物态通常具有边界态,这称为块体–边界对应,这些边界态反应从拓扑非平庸到拓扑平庸变

[1]系统的对称性所对应的守恒量自然是不变的,不过一旦加入破坏对称性的扰动就会消除这些不变量

[2][Von Klitzing,Dorda,Pepper,New method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance,Phys.Rev.Lett. **45**,494(1980)]

[3]关于拓扑物态一个很好的网络课程是https://topocondmat.org/

化的边界,对相互作用和杂质都有较好的稳定性,比较著名的有量子霍尔效应中的chiral边界态和量子自旋霍尔效应中的helical 边界态.从实用的角度来说,找到非平凡边界态等价于找到系统非平庸的整体拓扑结构.

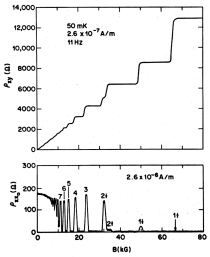


Figure 10.1: GaAs/GaAlAs异质结构中电阻率ρ_{xx}, ρ_{xy}随磁场的变化.此时载流子密度和温度固定.[1]图中整数表示Landau能级指标,箭头上下表示占据该能级的自旋取向.

量子Hall效应:强磁场的礼物

Klaus von Klitzing(1943−)发现低温强磁场下的二维电子气的横向电导/Hall电导(率)显示量子化的行为,这就是量子Hall效应. 如图10.1所示,弱磁场时Hall电阻率显示$\rho_{xy} \sim B$的经典Hall 效应行为,只有强磁场才观测到一些列平台,这些平台对应的Hall电导率量子化为如下形式:

$$\sigma_H = 1/\rho_{xy} = \sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h} \tag{10.1}$$

如果$\nu = 1, 2, 3...$等一些列整数,这就是整数量子Hall效应,如果ν是有理分数,那么对应的是分数量子Hall效应,我们这里只讨论整数量子Hall效应.von Klitzing因整数量子Hall效应的发现而荣获1985年物理学诺贝尔奖.

Laughlin的规范讨论

既然电导量子化为e^2/h的整数倍,那么其物理来源应该与拓扑有关.下面我们介绍Laughlin的简单讨论.[2]我们考虑一个中间挖空的圆形碟子(圆盘),即所谓的Corbino几何.(图10.2)在Hall效应的实验研究中需要外加电场,在这个几何中电场E方向是圆盘的周长方向,而横向/Hall电流I则是沿着半径的方向.那么横向方向的电荷改变是$\Delta Q = I\Delta t$,这在物理上表明电荷从圆盘中心边界到圆盘边界的转移.

一般而言这种环形电场可以通过Faraday效应产生$\oint d\vec{r} \cdot \vec{E} = \partial_t \Phi$, 这里$\Phi$是通过圆盘中心空洞区的总磁通量.如果假定电场大小仅依赖与相对于圆盘中心的距离R,那么有$2\pi R E(R,t) = \partial_t \Phi$,即

$$E(R,t) = \frac{1}{2\pi R}\partial_t \Phi \tag{10.2}$$

同时,径向电流密度是$j = \frac{I}{2\pi R}$,这样体系的Hall电导是

$$\sigma_H = \frac{j}{E(R,t)} = \frac{\frac{I}{2\pi R}}{\frac{1}{2\pi R}\partial_t \Phi} = \frac{I}{\partial_t \Phi} \tag{10.3}$$

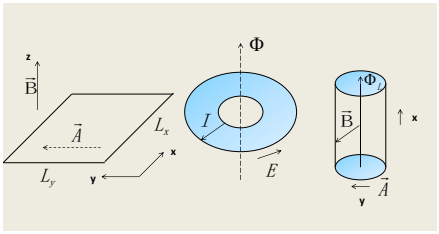


Figure 10.2: 讨论量子霍尔效应时常用的几种几何,从走往右依次是平面,圆盘面以及圆柱面,注意磁场$\vec{B}$对应的矢量势是$\vec{A}$.圆盘面中心插入磁通以产生电场$\vec{E}$, 圆柱面中心的额外磁通Φ_L使得谐振子中心数变化导致电子的转移.

当然在这里我们认为纵向电导为零,这样就不用考虑相关的效应.(即假设系统整体是绝缘体)接下来,考虑Δt 时间内磁通量的改变是一个基本量子磁通$\Delta\Phi = \Phi_0 = h/e \sim 10^{-15}T \cdot m^2$.[4]这样有

$$\sigma_H = \frac{I}{\partial_t \Phi} = \frac{\Delta Q/\Delta t}{\Phi_0/\Delta t} = \frac{\Delta Q}{\Phi_0} = \frac{e\Delta Q}{h} \tag{10.4}$$

由于体系只改变了一个量子磁通,波函数仅仅改变了一个相位$e^{i2\pi\frac{e}{h}\Phi_0} = 1$,也就是说体系波函数保持不变,对一个多电子系统,这可能导致电子数的改变$\Delta Q = ne$,其中n为整数,这样我们就解释了整数量子Hall效应的电导行为

$$\sigma_H = n\frac{e^2}{h}, \quad n = 1, 2, 3... \tag{10.5}$$

总的来说,我们通过给系统施加一个单位磁通使得系统从无磁通的状态演化至有一个磁通的状态,系统前后在物理上是相同的,唯一的变化是有电荷从一边输运至另一边.当输运的电荷是整数时系统便显示量子化的霍尔电导.

Laudau量子化

以上给出的Laughlin规范讨论适合于一般性的情况,为了更为细致地了解量子Hall效应的基本物理,我们将从Landau量子化出发详细讨论相关的数学形式和物理内容.

[4]原则上磁通量改变是任意的,但是这会导致系统的波函数明显依赖于磁通,即有额外的相位因子$e^{i2\pi\frac{e}{h}\Delta\Phi}$, 注意到这样施加的磁通相当于给系统的矢量势$\vec{A}$ 取不同的规范.(相对于$\vec{A} = 0$而言)为了让体系体现规范不变性,也就是物理可观测量都不依赖于$\vec{A}$的具体选取,(根据经典电磁学只要$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$不变,那么$\vec{A}$的不同选取就是不同的规范.未加磁通时电子所在区域$\vec{B} = 0, \vec{A} = 0$,加磁通后$\vec{A} \neq 0$)那么自然的结果是要求$\Delta\Phi = \Phi_0$.因此这里的讨论也称为Laughlin的规范讨论.更简单的说,为了保证波函数的单值性,即独立于非物理(不可观测)的$\vec{A}$的不同选取,我们自然也要求$\Delta\Phi = \Phi_0$或者Φ_0的整数倍.

首先在外磁场存在时的单电子本征方程是

$$\left[\frac{(-i\hbar\vec{\nabla}+e\vec{A})^2}{2m}+V(r)\right]\psi(r)=E\psi(r) \tag{10.6}$$

这里我们假定Zeeman效应足够强以至于所有电子都是极化的,这样Zeeman项可以不用明确考虑.对于一个晶体而言,如果我们关心的电子不在布里渊区边界附近,那么其运动可以近似为自由电子,只不过此时电子的质量m应理解为晶格周期势修正之后的有效质量.这样我们有

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla}+e\vec{A})^2\psi(r)=E\psi(r) \tag{10.7}$$

我们考虑电子在xy平面内运动并且均匀的外磁场沿着z方向,$\vec{B}=B\hat{e}_z$.在Landau规范下,[5]我们有

$$\vec{A}=Bx\hat{e}_y,\quad \vec{B}=\nabla\times\vec{A}=B\hat{e}_z \tag{10.8}$$

注意到我们可以有分离变量形式的解

$$\psi(r)=e^{ik_y y}\varphi(x) \tag{10.9}$$

那么代入这个解并采用Landau规范下的矢量势可得本征方程为

$$\boxed{\frac{1}{2m}\left[(-i\hbar\partial_x)^2+(\hbar k_y+eBx)^2\right]\varphi(x)=E\varphi(x)} \tag{10.10}$$

为了接下来处理的方便,我们定义$\hbar k_y=-eBx_0$,即有

$$x_0=-\frac{\hbar k_y}{eB} \tag{10.11}$$

然后移动变量x至$x'=x-x_0$,那么我们得到

$$\left[\frac{-\hbar^2\partial_{x'}^2}{2m}+\frac{e^2B^2}{2m}x'^2\right]\varphi(x')=E\varphi(x') \tag{10.12}$$

令$\omega_c=\frac{eB}{m}$为回旋共振频率,[6] $l_c=\sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ 为磁长度,那么我们得到一个标准的一维谐振子

$$\left[\frac{-\hbar^2\partial_{x'}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_c^2x'^2\right]\varphi(x')=E\varphi(x') \tag{10.13}$$

其本征能量是一系列分离的值

$$E=E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c,\quad n=0,1,2,3.... \tag{10.14}$$

[5]也可以取对称规范,即$\vec{A}=\frac{1}{2}(-By\hat{e}_x+Bx\hat{e}_y)=\frac{1}{2}(-By,Bx)$.

[6]Kohn证明对于只依赖于电子位置的电子−电子相互作用,回旋共振频率不会因为相互作用而改变.[Kohn,Cyclotron Resonance and de Haas-van Alphen Oscillations of an Interacting Electron Gas,Phys.Rev. **123**,1242 (1961)]

本征态是

$$\varphi(x') \propto H_n(x')e^{-\frac{x'^2}{2l_c^2}} \tag{10.15}$$

这里$H_n(x')$是第n阶厄米多项式.[7]这个波函数描述的是以x_0为中心的谐振子,既然$x_0 = -\frac{\hbar k_y}{eB}$,那么也就是说对于每一个固定的$y$ 方向动量k_y 都有一个谐振子与其对应.这样,二维电子气在均匀磁场下的波函数是

$$\psi_{n,k_y}(x,y) \propto e^{ik_y y}H_n(x-x_0)e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2l_c^2}}, \quad x_0 = -\frac{\hbar k_y}{eB} \tag{10.16}$$

能量是

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c, \quad n = 0,1,2,3.... \tag{10.17}$$

这样我们发现每一个Landau能级E_n都高度简并,对于同一个n,所有允许的y方向动量取值k_y都有相同的能量.那么每个Landau能级的简并度可以由以下方式定出.我们考虑体系是一个$L_x \times L_y$的长方形,那么每一个电子做谐振运动的中心位置x_0都必须在长方形内部,这要求

$$0 \leq x_0 = \frac{\hbar k_y}{eB} \leq L_x \tag{10.18}$$

这样体系的动量$k_y \geqslant 0$,同时最大允许的y方向动量是

$$k_y^{max} = \frac{eBL_x}{\hbar} \tag{10.19}$$

另一方面,我们考虑y方向具有周期边界条件,即$\psi_{n,k_y}(x,y) = \psi_{n,k_y}(x,y+L_y)$ 那么有

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y}m, m = 0,1,2... \tag{10.20}$$

也就是说y方向动量的间隔是$\Delta k_y = 2\pi/L_y$,而总的y方向动量的个数即简并度是

$$D = \frac{k_y^{max}}{\Delta k_y} = \frac{eBL_xL_y}{2\pi\hbar} = \frac{eB}{h}S = \frac{e}{h}\Phi = \frac{\Phi}{\Phi_0} = N_\Phi, \quad S = L_xL_y \tag{10.21}$$

这里我们引入了系统的总面积是$S = L_xL_y$,系统的总磁通量是$\Phi = BS$,$\Phi_0 = h/e = 2\times10^{-15}T\cdot m^2$是单位磁通量子而 N_Φ是总磁通量子数.可以看到一个Landau能级的简并度实际上等于总磁通量子的个数.对于给定的系统大小,简并度正比于磁场感应强度B.也就是说强磁场下,Landau能级的简并度十分巨大.例如取量子霍尔效应中典型的磁场尺度$B = 1T$,系统大小我们选为cm量级的样品,这样它的面积就是为$S = 10^{-4}m^2$,那么$D = BS/\Phi_0 \simeq 10^{11}$, 也就是说此时一个Landau 能级内填充的电子数为1000 亿的量级.

在零温时,如果我们有N个电子,那么这些电子将会从第零Landau能级$n = 0$开始逐步占据所有可能的动量态,当第一Landau能级的N_Φ个动量态被完全占据后,进一步的电子占据必须从第一Landau能级($n = 1$)开始.此时每个电子需要消耗额外的$\hbar\omega_c$能量才能占据第一Landau能级,以此类推我们便得到了N个电子占据的情况,即体系的基态是电子占据Landau能级构成的Slater行列式波函数.

[7]事实上归一化的波函数可以写成$\varphi(x') = N_nH_n(x')e^{-\frac{x'^2}{2l_c^2}}, N_n = (\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2}$.

量子振荡

现在,我们假设费米能E_F恰好在第n个Landau能级,那么当我们不断减小磁场时费米能刚好能落在新磁场下的$n+1$个Landau能级,这样我们有

$$E_F = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{eB_n^{old}}{m} = \left(n+1+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{eB_{n+1}^{new}}{m} \tag{10.22}$$

我们发现($E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, A_F = \pi k_F^2$)

$$\Delta(1/B) \equiv \frac{1}{B_{n+1}^{new}} - \frac{1}{B_n^{old}} = \frac{\hbar e}{mE_F} = \frac{2\pi e}{\hbar}\frac{1}{A_F}. \tag{10.23}$$

这说明相邻磁场倒数的差与系统费米能或者费米面直接联系.(对于三维系统,类似的计算表明A_F代表垂直磁场平面内的费米面的极值面积[8])同时,注意到费米能在Landau能级时意味着系统态密度的极大值,这自然会反映到各个物理量的磁场变化上,例如磁化和电阻率的磁场变化会出现振荡行为,分别对应de-Haas van-Alphen效应和Shubnikov de-Haas效应.[9]文献中这些振荡就称为量子振荡(quantum oscillation), 其是金属或者说费米液体的典型特征.[10]反过来通过这些效应的$1/B$周期能够测量费米面的形状.

例如我们可以计算当前二维系统的de-Haas van-Alphen效应.首先,电子的态密度是

$$N(\omega) = \sum_n \sum_{k_y} \delta(\omega - E_n) = \frac{BS}{h/e}\sum_n \delta(\omega - E_n) \tag{10.24}$$

显然态密度是一些列的δ函数.总能量是

$$E = \int d\omega \omega N(\omega) f_F(\omega) = \frac{BS}{h/e}\sum_n E_n f_F(E_n). \tag{10.25}$$

在零温时$f_F(E_n) = \theta(E_F - E_n)$,那么零温下的磁化为

$$M = -\frac{\partial E}{\partial B} = -\frac{2}{B}\frac{BS}{h/e}\sum_n E_n\theta(E_F - E_n) + \frac{1}{B}\frac{BS}{h/e}\sum_n E_n^2\delta(E_F - E_n). \tag{10.26}$$

注意到上是右边的δ函数表明当费米能在Landau能级内时,系统磁化出现发散行为.当我们调节磁场大小时,每当Landau能级能量等于费米能时都对应一个磁化极大值,这样系统磁化就显示振荡行为,即著名的de-Haas van-Alphen效应.而相邻极大值倒数的差就是前面提到的$\Delta(1/B)$,也就是所谓的振荡周期.实验上也喜欢用振荡频率$f = 1/\Delta(1/B)$来直接联系系统的极值面积A_F,即$f = \frac{\hbar}{2\pi e}A_F$,其单位是磁场,即特斯拉.[11]

[8]更一般性的证明可以采用Onsager和Lifshitz的半经典讨论.

[9]在de Hass和van Alphen发现铋磁化率振荡行为之前,Landau的理论计算已经指出可能存在振荡行为,只不过他在咨询过Kapitza后认为这些振荡实验上观测不到.

[10]关于量子振荡的详细讨论可以参考相关的专著,例如[Shoenberg,Magnetic oscillations in metals]

[11]$f = \frac{\hbar}{2\pi e}A_F$也称为Onsager关系.代入数值可得$f = \frac{1}{4\pi^2}\Phi_0 A_F = 5\times 10^{-17}T\cdot m^2 A_F = 5\times 10^{-13}T\cdot cm^2 A_F$.这样有$A_F = \frac{f}{5\times 10^{-13}T}cm^{-2} = \frac{f}{50T}nm^{-2}$.若频率$f = 500T$,那么相应的极值面积是$A_F = 10nm^{-2}$,这对应一个很小的费米面.

现在,让我们估计f的量级.对于简单金属,电子密度$n\sim 10^{23-24}cm^{-3}$,费米波矢$k_F=(3\pi^2 n)^{1/3}\sim 10^8 cm^{-1}$.这样当我们把极值面积用圆代替有$A_F=\pi k_F^2\sim 10^{16}cm^{-2}$.这样可得$f\sim 10^4-10^5\frac{J}{sm^2C}=10^4-10^5T$,也就是说简单金属的量子振荡频率为几千到几万的特斯拉.

量子振荡的振幅与Lifshitz-Kosevich公式

我们看到,通过分析磁化随磁场的变化可以得到量子振荡的周期,进一步的解析处理则能够得到量子振荡的振幅.让我们仍然考虑均匀磁场下的二维电子系统,其热力学性质由其热力学势(自由能)Ω给出

$$\Omega=-T\sum_i \ln(1+e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}) \tag{10.27}$$

这里的求和i对所有单粒子能级求,μ是化学势.对当前考虑的磁场下的二维电子气,对单粒子能级的求和就是对Landau能级指标n以及动量k_y求,即有,

$$\Omega=-T\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k_y}\ln(1+e^{-\beta(E_n-\mu)})=-TD\sum_{n=0}^{\infty}\ln(1+e^{-\beta(E_n-\mu)}) \tag{10.28}$$

这里$D=BS/(h/e)$是每个Landau能级的简并度.上式用电子的态密度$N(\omega)$可以改写为

$$\Omega=-T\int_{-\infty}^{\infty}d\omega N(\omega)\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)})=-T\int_0^{\infty}d\omega N(\omega)\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)}) \tag{10.29}$$

由于$N(\omega)$中最小的$E_n>0$,因此这里的积分下限可直接取为零.接下来,注意到所谓的Poisson求和公式:[12]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-n)=\sum_{p=-\infty}^{\infty}e^{2\pi ipx} \tag{10.30}$$

那么我们可以把态密度改写为

$$N(\omega)=D\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(\omega-\hbar\omega_c(n+1/2)\right)=\frac{D}{\hbar\omega_c}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(\frac{\omega}{\hbar\omega_c}-1/2-n\right)=\frac{D}{\hbar\omega_c}\sum_{p=-\infty}^{\infty}e^{2\pi ip(\frac{\omega}{\hbar\omega_c}-1/2)} \tag{10.31}$$

注意到态密度的定义中仅对$n\geq 0$求和而这里为了使用Poisson求和公式把求和扩展至$n<0$,由于热力学势中只有$\omega\geq 0$对积分有贡献,这样我们这里的处理并不改变热力学势的取值.把上述结果代入热力学势可得

$$\begin{aligned}\Omega &= -T\frac{D}{\hbar\omega_c}\sum_{p=-\infty}^{\infty}(-1)^p\int_0^{\infty}d\omega e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)})\\ &= -T\frac{D}{\hbar\omega_c}\int_0^{\infty}d\omega\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)})-T\frac{D}{\hbar\omega_c}\sum_{p\neq 0}(-1)^p\int_0^{\infty}d\omega e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)})\end{aligned}$$

[12]或者用更直接的形式$\sum_{n=0}^{\infty}f(n+\gamma)=\int_0^{\infty}dxf(x)+2\int_0^{\infty}dxf(x)\mathrm{Re}\sum_{p=1}^{\infty}e^{i2\pi p(x-\gamma)}$

这里的第一项与磁场无关($D/(\hbar\omega_c) = \frac{BS}{h/e}\frac{m}{\hbar eB} = \frac{mS}{2\pi\hbar^2}$),因此对量子振荡没有贡献而在下面的讨论中忽略. 第二项中的积分可以做分部积分处理,即

$$\int_0^\infty d\omega \frac{d}{d\omega}\left[e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)})\right] = \frac{2\pi ip}{\hbar\omega_c}\int_0^\infty d\omega e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)}) - \beta\int_0^\infty d\omega\frac{e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}$$

上式左边的值是$-\ln(1+e^{\beta\mu})$,这样有

$$\int_0^\infty d\omega e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}\ln(1+e^{-\beta(\omega-\mu)}) = \frac{\hbar\omega_c}{2\pi ip}\beta\int_0^\infty d\omega\frac{e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1} - \frac{\hbar\omega_c}{2\pi ip}\ln(1+e^{\beta\mu})$$

我们看到上式右边第二项仅是磁场的线性函数,也不会产生振荡行为,(对p求和后这一项自动为零)因此与量子振荡相关的热力学势由第一项贡献,此时热力学势的振荡部分就是

$$\Omega_{osc} = -T\frac{D}{\hbar\omega_c}\sum_{p\neq 0}(-1)^p\frac{\hbar\omega_c}{2\pi ip}\beta\int_0^\infty d\omega\frac{e^{2\pi ip\frac{\omega}{\hbar\omega_c}}}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1} = -D\sum_{p=1}^\infty\frac{(-1)^p}{\pi p}\int_0^\infty d\omega\frac{\sin(2\pi p\frac{\omega}{\hbar\omega_c})}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}. \tag{10.32}$$

进一步,利用分部积分可得

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty d\omega\frac{\sin(2\pi p\frac{\omega}{\hbar\omega_c})}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1} &= -\frac{\hbar\omega_c}{2\pi p}\int_0^\infty d\omega\left[\frac{d}{d\omega}\frac{\cos(2\pi p\frac{\omega}{\hbar\omega_c})}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1} + \beta e^{\beta(\omega-\mu)}\frac{\cos(2\pi p\frac{\omega}{\hbar\omega_c})}{(e^{\beta(\omega-\mu)}+1)^2}\right] \\
&= -\frac{\hbar\omega_c}{2\pi p}\left[\frac{-1}{e^{-\beta\mu}+1} + \beta\int_0^\infty d\omega e^{\beta(\omega-\mu)}\frac{\cos(2\pi p\frac{\omega}{\hbar\omega_c})}{(e^{\beta(\omega-\mu)}+1)^2}\right] \\
&= -\frac{\hbar\omega_c}{2\pi p}\left[\frac{-1}{e^{-\beta\mu}+1} - \int_0^\infty d\omega\cos(2\pi p\omega/(\hbar\omega_c))\frac{\partial f_F(\omega)}{\partial\omega}\right] \\
&\simeq -\frac{\hbar\omega_c}{2\pi p}\left[\frac{-1}{e^{-\beta\mu}+1} + \cos(2\pi p\mu/(\hbar\omega_c))R_T(p)\right],\ (\mu\gg T)
\end{aligned} \tag{10.33}$$

这里引入了因子$R_T(p) = \frac{xp}{\sinh(xp)}, x = \frac{2\pi^2 T}{\hbar\omega_c}$.显然,$\frac{-1}{e^{-\beta\mu}+1}$部分不贡献关于磁场的振荡,这样

$$\Omega_{osc} = D\hbar\omega_c\sum_{p=1}^\infty\frac{(-1)^p}{2\pi^2p^2}R_T(p)\cos\frac{2\pi p\mu}{\hbar\omega_c}. \tag{10.34}$$

当$T=0$时,我们有

$$\Omega_{osc}(T=0) = D\hbar\omega_c\sum_{p=1}^\infty\frac{(-1)^p}{2\pi^2p^2}\cos\frac{2\pi p\mu}{\hbar\omega_c}. \tag{10.35}$$

而$T\gg\hbar\omega_c$时有$R_T(p)\simeq 2xpe^{-xp}$,则有

$$\boxed{\Omega_{osc}(T\gg\hbar\omega_c) = 2TD\sum_{p=1}^\infty\frac{(-1)^p}{p}e^{-\frac{2\pi^2pT}{\hbar\omega_c}}\cos\frac{2\pi p\mu}{\hbar\omega_c}.} \tag{10.36}$$

所有的p中最主导的或者说实验上最相关的是$p=1$项,此时振荡相关的热力学势近似为

$$\Omega_{osc}\simeq D\hbar\omega_c\frac{-1}{2\pi^2}\frac{\frac{2\pi^2T}{\hbar\omega_c}}{\sinh\frac{2\pi^2T}{\hbar\omega_c}}\cos\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c}. \tag{10.37}$$

注意到$\cos\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c} = \cos\frac{2\pi\hbar^2k_F^2/(2m)}{\hbar eB/m} = \cos\frac{\pi k_F^2\hbar}{eB} = \cos\frac{\hbar}{eB}A_F$.显然,其振荡的频率$f$由$\cos\frac{2\pi f}{B}$给出,这样我们就重新得到了Onsager关系$f = \frac{\hbar}{2\pi e}A_F$.

进一步,我们发现磁化的振荡由下式给出,(注意到cos 项中$\mu \gg \hbar\omega_c$, 因而对磁场求导可仅对这一项求)

$$M_{osc} = -\frac{\partial\Omega_{osc}}{\partial B} \simeq \frac{eS\mu}{2\pi^2\hbar}\frac{\frac{2\pi^2T}{\hbar\omega_c}}{\sinh\frac{2\pi^2T}{\hbar\omega_c}}\sin\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c} = \frac{eS\mu}{2\pi^2\hbar}R_T\sin\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c}. \tag{10.38}$$

- 如果考虑电子与固体中杂质的散射,那么Landau能级会获得有限的展宽,这样振荡会被进一步抑制,这相当于上述公式需要加上所谓的Dingle因子$R_D = e^{-\frac{2\pi^2T_D}{\hbar\omega_c}}$,$T_D = \frac{\hbar}{2\pi\tau}$是Dingle温度,$\tau$是电子寿命;[13]

- 考虑电子在磁场下有Zeeman能$\Delta E_{\sigma=\uparrow,\downarrow} = -\frac{1}{2}g\mu_BB\sigma$,而自旋向上与向下电子之间的Zeeman能级差$\Delta\varepsilon = g\mu_BB$会导致自旋因子$R_s = \cos\frac{\pi\Delta\varepsilon}{\hbar\omega_c}$.

自旋因子R_s可以简单理解为自旋向上与向下电子贡献的叠加,这相当于$\cos\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c}$中的化学势$\mu$分别用$\mu_\uparrow = \mu + \frac{1}{2}g\mu_BB$以及$\mu_\downarrow = \mu - \frac{1}{2}g\mu_BB$代替,这样有

$$\cos\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c} \to \cos\frac{2\pi\mu_\uparrow}{\hbar\omega_c} + \cos\frac{2\pi\mu_\downarrow}{\hbar\omega_c} = 2\cos\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c}\cos\frac{\pi g\mu_BB}{\hbar\omega_c} \tag{10.39}$$

因此自旋因子是$R_s = \cos\frac{\pi g\mu_BB}{\hbar\omega_c} = \cos\frac{\pi\Delta\varepsilon}{\hbar\omega_c}$.综合这些因子,一般物理量的振荡部分的振幅$A(T)$可以写成

$$\boxed{A(T) \propto R_TR_DR_s}. \tag{10.40}$$

一般而言,上面关于热力学势和磁化等物理量的公式称为Lifshitz-Kosevich公式,简称LK公式,这是我们理解实验上各类金属系统量子振荡行为的基本出发点.在实验中可以利用上述公式拟合数据来得到电子有效质量的估计.[14]

相互作用对量子振荡的影响

- 详细的理论研究表明,电子–电子相互作用(费米液体的框架下)与电声相互作用的主要效果是自能函数的实部修正公式中的质量而虚部导致等效的Dinge因子.

[13]实验样品的非均匀性也会导致等效的Dingle因子

[14]在固定的磁场下利用$\ln(M_{osc}/T) \sim \ln\sinh(amT)$ 以估计有效质量m.例如欠掺杂铜氧化物在强磁场下显示量子振荡行为,其电子有效质量通过这种方式直接获得.[Doiron-Leyraud et al.,Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high-Tc superconductor,Nature **447**,565(2007).]

当然,比较严格的理论处理实际上基于热力学势的Luttinger-Ward泛函表示,[15]

$$\Omega = -T\mathrm{Tr}\sum_m e^{i\omega_m 0^+}\ln(-G^{-1}(\omega_m)) + \Sigma(\omega_m)G(\omega_m) + \Phi[G] \tag{10.41}$$

如果我们希望得到磁化M,那么根据热力学关系则有

$$M = -\frac{\partial\Omega}{\partial B} = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial B}\right)_\Sigma - \overbrace{\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\Sigma}\right)_B}^{=0}\frac{\partial\Sigma}{\partial B} = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial B}\right)_\Sigma \tag{10.42}$$

这样我们只需要对有明确磁场B依赖的部分求导,也就是对于对数项中单粒子部分求导.换句话说,对于量子振荡有贡献的只有对数项,即

$$\Omega_{osc} = -T\mathrm{Tr}\sum_m e^{i\omega_m 0^+}\ln(-G^{-1}(\omega_m)) = -T\mathrm{Tr}\sum_m e^{i\omega_m 0^+}\ln(-i\omega_m+\varepsilon(B)+\Sigma(\omega_m,B)) \tag{10.43}$$

而

$$M_{osc} = T\mathrm{Tr}\sum_m e^{i\omega_m 0^+}\partial_B\ln(-i\omega_m+\varepsilon(B)+\Sigma(\omega_m,B)) = T\mathrm{Tr}\sum_m e^{i\omega_m 0^+}(-G(\omega_m,B))\partial_B\varepsilon(B) \tag{10.44}$$

在考虑低温,弱磁场极限下($T \ll \mu, \hbar\omega_c \ll \mu$),对于费米液体其自能的磁场依赖估计为$\Sigma(\omega_m,B) \simeq \Sigma(\omega_m) + \frac{B^2}{\mu^2}\tilde{\Sigma}(\omega_m,B)$,与$\varepsilon(B)$中的$\hbar\omega_c \sim B$ 相比可以忽略自能的磁场依赖,[16]这样对量子振荡有贡献的热力学势是

$$\boxed{\Omega_{osc} = -T\mathrm{Tr}\sum_m e^{i\omega_m 0^+}\ln(-G^{-1}(\omega_m)) = -T\mathrm{Tr}\sum_m e^{i\omega_m 0^+}\ln(-i\omega_m+\varepsilon(B)+\Sigma(\omega_m))} \tag{10.45}$$

这里$\varepsilon(B)$是磁场依赖的的单粒子能量,例如三维自由电子气体有$\varepsilon(B) = (n+1/2)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} - \mu$,自能$\Sigma$ 可用无外磁场时的值代替.对于如下三维电子气体的Green函数,

$$\begin{aligned} G_{\uparrow\uparrow}(\omega_m) &= \left(i\omega_m - (n+1/2)\hbar\omega_c - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} - \frac{g}{2}\mu_B B + \mu - \Sigma_\uparrow(\omega_m)\right)^{-1} \\ G_{\downarrow\downarrow}(\omega_m) &= \left(i\omega_m - (n+1/2)\hbar\omega_c - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} + \frac{g}{2}\mu_B B + \mu - \Sigma_\downarrow(\omega_m)\right)^{-1} \end{aligned} \tag{10.46}$$

[15]当然,对于具体模型,例如周期Anderson模型,我们可以从路径积分形式出发,然后引入隶玻色子表示并把与磁场直接耦合的(传导)电子的费米场算符用Landau能级的波函数来展开,接下来把所有费米子自由度都积分掉就得到用隶玻色子和拉格朗日乘子表示的严格配分函数.对这个配分函数的鞍点近似给出平均场结果,其形式与下面的扩展LK公式一致,而Gauss涨落修正形式复杂但没有额外结果.具体的计算可参考文献[Rasul,de Haas-van Alphen eKect in the Anderson lattice for large orbital degeneracy,Phys.Rev.B **39**,663 (1989)]

[16]对于一般的非费米液体,若自能$\Sigma(\omega_m) \sim \omega_m^\alpha$,那么其磁场依赖估计为$\Sigma(\omega_m,B) \simeq \Sigma(\omega_m) + \frac{B^\alpha}{\mu^\alpha}\tilde{\Sigma}(\omega_m,B)$. 此时自能的磁场依赖指数$\alpha$若小于等于1则说明该磁场依赖不能忽略.

有

$$\Omega_{osc}=-TDL_z\sum_n\int\frac{dk_z}{2\pi}\sum_\sigma\sum_m e^{i\omega_m 0^+}\ln\left(-i\omega_m+(n+1/2)\hbar\omega_c+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu-\sigma\frac{g}{2}\mu_BB+\Sigma_\sigma(\omega_m)\right) \tag{10.47}$$

注意到自能满足(由Green函数的谱定理可得)

$$\Sigma(\omega_m)=\int d\omega\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Sigma(\omega)}{i\omega_m-\omega}\Rightarrow\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)=-\omega_m\int d\omega\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Sigma(\omega)}{\omega_m^2+\omega^2} \tag{10.48}$$

这里$\mathrm{Im}\Sigma(\omega)$是推迟Green函数的自能虚部且满足$\mathrm{Im}\Sigma(\omega)\le 0$,那么有$\omega_m>0$时$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)<0$而$\omega_m<0$时$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)>0$.这样热力学势中的对数项可改写为积分:

$$\ln(z-i\omega_m+\Sigma(\omega_m))=\int_b^{b+i\infty}\frac{ds}{s}e^{-s(z-i\omega_m+\Sigma(\omega_m))},\quad \omega_m>0 \tag{10.49}$$

$$\ln(z-i\omega_m+\Sigma(\omega_m))=-\int_{b-i\infty}^{b}\frac{ds}{s}e^{-s(z-i\omega_m+\Sigma(\omega_m))},\quad \omega_m<0 \tag{10.50}$$

这里因子$b>0$.因此

$$\begin{aligned}
\Omega_{osc} &= -TDL_z\sum_n\int\frac{dk_z}{2\pi}\sum_\sigma\sum_{\omega_m>0}\int_b^{b+i\infty}\frac{ds}{s}e^{-s(-i\omega_m+(n+1/2)\hbar\omega_c+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu-\sigma\frac{g}{2}\mu_BB+\Sigma_\sigma(\omega_m))}\\
&+ TDL_z\sum_n\int\frac{dk_z}{2\pi}\sum_\sigma\sum_{\omega_m<0}\int_{b-i\infty}^{b}\frac{ds}{s}e^{-s(-i\omega_m+(n+1/2)\hbar\omega_c+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu-\sigma\frac{g}{2}\mu_BB+\Sigma_\sigma(\omega_m))}\\
&= -T\frac{m\omega_cV}{4\pi^2\hbar}\sum_n\int dk_z\sum_\sigma\sum_{\omega_m>0}\int_b^{b+i\infty}ds\frac{1}{2s\sinh\frac{s\hbar\omega_c}{2}}e^{-s(-i\omega_m+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu-\sigma\frac{g}{2}\mu_BB+\Sigma_\sigma(\omega_m))}\\
&+ T\frac{m\omega_cV}{4\pi^2\hbar}\sum_n\int dk_z\sum_\sigma\sum_{\omega_m<0}\int_{b-i\infty}^{b}ds\frac{1}{2s\sinh\frac{s\hbar\omega_c}{2}}e^{-s(-i\omega_m+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu-\sigma\frac{g}{2}\mu_BB+\Sigma_\sigma(\omega_m))}\\
&= -T\frac{m\omega_cV}{4\pi^2\hbar}\int dk_z\sum_{\omega_m>0}\int_b^{b+i\infty}ds\frac{e^{-s(-i\omega_m+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu)}}{2s\sinh\frac{s\hbar\omega_c}{2}}(e^{s(\frac{g}{2}\mu_BB-\Sigma_\uparrow(\omega_m))}+e^{-s(\frac{g}{2}\mu_BB+\Sigma_\downarrow(\omega_m))})\\
&+ T\frac{m\omega_cV}{4\pi^2\hbar}\int dk_z\sum_\sigma\sum_{\omega_m<0}\int_{b-i\infty}^{b}ds\frac{e^{-s(-i\omega_m+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu)}}{2s\sinh\frac{s\hbar\omega_c}{2}}(e^{s(\frac{g}{2}\mu_BB-\Sigma_\uparrow(\omega_m))}+e^{-s(\frac{g}{2}\mu_BB+\Sigma_\downarrow(\omega_m))}).
\end{aligned}$$

注意到$\sinh\frac{s\hbar\omega_c}{2}$的极点是$s_p=\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c},p=\pm1,\pm2,\pm3...$, 对$s$的积分转换为极点的留数求和,

$$\int_b^{b+i\infty}ds\frac{f(s)}{2s\sinh\frac{s\hbar\omega_c}{2}}=2\pi i\sum_{p=1}^{\infty}\lim_{s\to s_p}(s-s_p)\frac{f(s)}{s(e^{(s-s_p)\hbar\omega_c/2}e^{s_p\hbar\omega_c/2}-e^{-(s-s_p)\hbar\omega_c/2}e^{-s_p\hbar\omega_c/2})}=\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^pf(s_p)}{p} \tag{10.51}$$

因此

$$\Omega_{osc} = -T\frac{m\omega_c V}{4\pi^2\hbar}\int dk_z \sum_{\omega_m>0}\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p \frac{e^{-\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(-i\omega_m+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu)}}{p}(e^{\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B-\Sigma_\uparrow(\omega_m))}+e^{-\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B+\Sigma_\downarrow$$
$$- T\frac{m\omega_c V}{4\pi^2\hbar}\int dk_z \sum_{\sigma}\sum_{\omega_m<0}\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p \frac{e^{+\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(-i\omega_m+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\mu)}}{p}(e^{-\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B-\Sigma_\uparrow(\omega_m))}+e^{+\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B$$

现在,让我们利用鞍点近似来估计对k_z的积分,即有

$$\int dk_z f(k_z)e^{i\alpha h(k_z)} \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha|h''(k_0^*)|}}f(k_z^*)e^{i\alpha h(k_z^*)\pm\frac{i\pi}{4}}, \quad h'(k_z^*)=0 \tag{10.52}$$

在Ω_{osc}中$f(k_z)=1,\alpha=2\pi p/(\hbar\omega_c),h(k_z)=i\omega_m-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}+\mu$.那么$k_z^*=0$,$h''(k_z^*)=-\frac{\hbar^2}{m}<0$,这样我们取$-i\pi/4$这个因子.($h''(k_z^*)>0$取$+i\pi/4$)这样有

$$\int dk_z \frac{e^{\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(i\omega_m-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}+\mu)}}{p} \simeq \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{\frac{\hbar^2}{m}}}\frac{e^{\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(i\omega_m+\mu)-\frac{i\pi}{4}}}{p^{3/2}} = \sqrt{m\hbar\omega_c}\frac{e^{\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(i\omega_m+\mu)-\frac{i\pi}{4}}}{\hbar p^{3/2}} \tag{10.53}$$

$$\Omega_{osc} = -T\frac{(m\hbar\omega_c)^{3/2}V}{4\pi^2\hbar^3}\sum_{\omega_m>0}\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p\frac{e^{\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(i\omega_m+\mu)-\frac{i\pi}{4}}}{p^{3/2}}(e^{\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B-\Sigma_\uparrow(\omega_m))}+e^{-\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B+\Sigma_\downarrow(\omega_m))}$$
$$- T\frac{(m\hbar\omega_c)^{3/2}V}{4\pi^2\hbar^3}\sum_{\omega_m<0}\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p\frac{e^{+\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(-i\omega_m-\mu)+\frac{i\pi}{4}}}{p^{3/2}}(e^{-\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B-\Sigma_\uparrow(\omega_m))}+e^{+\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B+\Sigma_\downarrow(\omega_r$$

最后,利用自能的谱表示可得$\mathrm{Re}(-\omega_m)=\mathrm{Re}\Sigma(\omega_m),\mathrm{Im}\Sigma(-\omega_m)=-\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)$,
这样$\omega_m<0$的部分可改写为

$$\sum_{\omega_m>0}e^{+\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(i\omega_m-\mu)+\frac{i\pi}{4}}(e^{-\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B-\mathrm{Re}\Sigma_\uparrow(\omega_m)+i\mathrm{Im}\Sigma_\uparrow(\omega_m))}+e^{+\frac{i2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{g}{2}\mu_B B+\mathrm{Re}\Sigma_\downarrow(\omega_m)-i\mathrm{Im}\Sigma_\downarrow(\omega_m))}),$$

把$\omega_m>0,<0$部分加在一起,我们发现热力学势的表达式是(令体积$V=1$)

$$\Omega_{osc} = -\frac{2T(m\hbar\omega_c)^{3/2}}{\pi^2\hbar^2}\sum_{p=1}^{\infty}\sum_{\omega_n>0}\frac{(-1)^p}{p^{3/2}}e^{-\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\omega_n-\mathrm{Im}X(\omega_n))}$$
$$\times \quad(\cos(F_p(\omega_n))\cos(\phi_p(\omega_n))\cosh(u_p(\omega_n))+\sin(F_p(\omega_n))\sin(\phi_p(\omega_n))\sinh(u_p(\omega_n)))$$

$$F_p(\omega_n)=\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\mu-\mathrm{Re}X(\omega_n))-\frac{\pi}{4}$$
$$\phi_p(\omega_n)=\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\frac{1}{2}g\mu_B B-\mathrm{Re}Y(\omega_n))$$
$$u_p(\omega_n)=\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}\mathrm{Im}Y(\omega_n)$$
$$X(\omega_n)=\frac{1}{2}(\langle\Sigma_\uparrow(\omega_n)\rangle+\langle\Sigma_\downarrow(\omega_n)\rangle), Y(\omega_n)=\frac{1}{2}(\langle\Sigma_\uparrow(\omega_n)\rangle-\langle\Sigma_\downarrow(\omega_n)\rangle),$$

这里$\langle\Sigma_\uparrow(\omega_n)\rangle, \langle\Sigma_\downarrow(\omega_n)\rangle$代表自能在费米面上的平均.当$\mathrm{Im}Y(\omega_n)=0$时,则有

$$\boxed{\Omega_{osc}=-\frac{2T(m\hbar\omega_c)^{3/2}}{\pi^2\hbar^2}\sum_{p=1}^{\infty}\sum_{\omega_n>0}\frac{(-1)^p}{p^{3/2}}e^{-\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\omega_n-\mathrm{Im}X(\omega_n))}\times\cos(F_p(\omega_n))\cos(\phi_p(\omega_n))}$$

这个公式称为扩展的LK公式,这是我们研究相互作用电子系统量子振荡现象的基础.需要指出,推导上述结果需要用到一些计算回路积分和鞍点近似的技巧,[17]因此,我们介绍一个简化的理论处理,尽管这个处理并不严格,但其能够给出严格处理相同的结果.[18]

首先,我们知道二维电子气体在均匀磁场下的电子总数可写成:

$$N=\int_0^\infty d\omega\frac{N(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}=D\int_0^\infty d\omega\frac{\sum_n\delta(\omega-E_n)}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1} \tag{10.54}$$

注意到δ函数相当于自由电子Green函数$G^{(0)}(\omega)=\frac{1}{\omega-E_n}$的谱函数,即$-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^{(0)}(\omega+i0^+)$. [19] 因此,当存在相互作用时,我们可以用相互作用的Green函数$G(\omega)$代替$G^{(0)}(\omega)$,而$G(\omega)$可以写成

$$G(\omega)=\frac{1}{\omega-E_n-\Sigma(\omega)} \tag{10.55}$$

这里我们假设自能函数$\Sigma(\omega)$近似与磁场无关,这样的近似是Luttinger推导相互作用修正的LK公式的基础.[20]$G(\omega)$对应的谱函数具有如下类Lorentz型,

$$A(\omega)=\frac{-\mathrm{Im}\Sigma(\omega)/\pi}{(\omega-E_n-\mathrm{Re}\Sigma(\omega))^2+(\mathrm{Im}\Sigma(\omega))^2} \tag{10.56}$$

而电子总数是

$$N=D\int_0^\infty d\omega\frac{\sum_n A(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}=\frac{D}{\pi}\int_0^\infty d\omega\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}\sum_n\frac{-\mathrm{Im}\Sigma(\omega)}{(\omega-E_n-\mathrm{Re}\Sigma(\omega))^2+(\mathrm{Im}\Sigma(\omega))^2}. \tag{10.57}$$

[17]具体计算可以参考详细研究相互作用对量子振荡影响的综述论文[Wasserman,Springford,The influence of many-body interactions on the de Haas-van Alphen effect,Advances in Physics **45**,471(1996)]的公式39-58.此外,基于扩展的LK公式,该论文还讨论了非磁性杂质散射,铁磁关联,电−声相作用,重费米子和第二类超导体的量子振荡.

[18][McCollam et al.,de Haas van Alphen effect in heavy fermion compounds-effective mass and non-Fermi-liquid behaviour,Physica B **403**,717(2008)]

[19]事实上,电子数可以用Green函数直接表示: $N=\int d^dx\langle\psi^\dagger(x)\psi(x)\rangle=\int d^dx\lim_{\tau\to0^-}-\langle T_\tau\psi(x,\tau)\psi^\dagger(x,0)\rangle=T\sum_{\omega_m}\int d^dxe^{-i\omega_m0^-}G(x,x,i\omega_m)=T\sum_{\omega_m}\int d^dxe^{i\omega_m0^+}\int d\omega\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(x,x,i\omega_m\to\omega+i0^+)}{i\omega_m-\omega}$
$=\int d^dx\int d\omega\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(x,x,\omega)}{e^{\beta\omega}+1}=\int d\omega\int d^dx\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(x,x,\omega)}{e^{\beta\omega}+1}$.定义$N(\omega)=\int d^dx-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(x,x,\omega)$并移动$\omega\to\omega-\mu$就得到$N=\int d\omega\frac{N(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}$.

[20][Luttinger,Theory of the de Haas-van Alphen Effect for a System of Interacting Fermions,Phys.Rev. **121**,1251(1961)]注意到,这个自能与磁场无关的近似并不总是成立,目前研究的非费米液体或者掺杂Mott绝缘体的量子振荡行为的正确处理可能需要严格考虑自能的磁场依赖.

进一步,我们发现Lorentz型可以转化为如下的积分,(注意$\mathrm{Im}\Sigma(\omega)\leq 0$)

$$\mathrm{Re}\int_0^\infty d\tau e^{i(\omega-E_n-\mathrm{Re}\Sigma(\omega))\tau+\mathrm{Im}\Sigma(\omega)\tau}=\frac{-\mathrm{Im}\Sigma(\omega)}{(\omega-E_n-\mathrm{Re}\Sigma(\omega))^2+(\mathrm{Im}\Sigma(\omega))^2} \tag{10.58}$$

而

$$N=\frac{D}{\pi}\int_0^\infty d\omega\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}\mathrm{Re}\int_0^\infty d\tau\sum_n e^{i(\omega-E_n-\mathrm{Re}\Sigma(\omega))\tau+\mathrm{Im}\Sigma(\omega)\tau} \tag{10.59}$$

由先前使用过的Poisson求和公式可得$\sum_n e^{-in\hbar\omega_c\tau}=\frac{2\pi}{\hbar\omega_c}\sum_p\delta(\tau-2\pi p/(\hbar\omega_c))$,这样

$$\begin{aligned}N &= \frac{2\pi D}{\pi\hbar\omega_c}\int_0^\infty d\omega\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}\mathrm{Re}\int_0^\infty d\tau e^{i(\omega-\hbar\omega_c/2-\mathrm{Re}\Sigma(\omega))\tau+\mathrm{Im}\Sigma(\omega)\tau}\sum_p\delta(\tau-2\pi p/(\hbar\omega_c))\\ &= \frac{2D}{\hbar\omega_c}\int_0^\infty d\omega\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}\mathrm{Re}\sum_p e^{i\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\omega-\hbar\omega_c/2-\mathrm{Re}\Sigma(\omega)-i\mathrm{Im}\Sigma(\omega))}\end{aligned} \tag{10.60}$$

在低温下,我们可以把积分下限扩展至$-\infty$,这是由于指数因子在ω很大时为$e^{\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}\omega}$,这些高频振荡部分不会对积分有实质贡献.这样上式费米分布函数的极点位置是$\omega=\mu+i\omega_m,\omega_m=(2m+1)\pi T$,(假设自能函数是$\omega$的解析函数,这样它们就不会贡献额外的奇点)对$\omega$ 的积分转化为对正的虚频ω_m 求和,

$$\begin{aligned}N &\propto D\frac{2\pi T}{\hbar\omega_c}\mathrm{Re}\sum_{\omega_m>0}\sum_p e^{i\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\mu+i\omega_m-\hbar\omega_c/2-\mathrm{Re}\Sigma(\omega_m)-i\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m))}\\ &\propto \frac{2\pi T}{\hbar\omega_c}\mathrm{Re}\sum_{\omega_m>0}\sum_p(-1)^p e^{i\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\mu+i\omega_m-\mathrm{Re}\Sigma(\omega_m))}e^{\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)}\\ &= \frac{2\pi T}{\hbar\omega_c}\sum_p(-1)^p\sum_{\omega_m>0}e^{-\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\omega_m-\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m))}\cos\frac{2\pi p(\mu-\mathrm{Re}\Sigma(\omega_m))}{\hbar\omega_c}\end{aligned} \tag{10.61}$$

显然,这个结果与先前的扩展LK公式在形式上是一致的.可以看到,$\cos\frac{2\pi p(\mu-\mathrm{Re}\Sigma(\omega_m))}{\hbar\omega_c}$决定了量子振荡的周期,而自能的实部相当于移动化学势,特别是我们一般用费米能处或者说$\Sigma(\omega_m=\pi T)$来代替,这样等效的化学势$\mu'=\mu-\Sigma(\pi T)$就实际确定了频率$f=\mu'/(\hbar\omega_c)$.至于振幅部分则有

$$\frac{2\pi T}{\hbar\omega_c}\sum_p(-1)^p\sum_{\omega_m>0}e^{-\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\omega_m-\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m))}=\sum_p\frac{(-1)^p}{2\pi p}A_p(T), \tag{10.62}$$

这里我们定义了$A_p(T)=\frac{4\pi^2pT}{\hbar\omega_c}\sum_{\omega_m>0}e^{-\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\omega_m-\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m))}$. 现在,让我们考虑几个简单的例子:

1. 对于费米气体,我们有$\Sigma(\omega_m)=0$,那么$A_p(T)=\frac{4\pi^2pT}{\hbar\omega_c}\sum_{m=0}^\infty e^{-\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}\omega_m}=\frac{\frac{2\pi^2pT}{\hbar\omega_c}}{\sinh\frac{2\pi^2pT}{\hbar\omega_c}}$, 这就是LK公式中的温度因子$R_T$.
2. 对于杂质散射,自能虚部是常数$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)=-\Gamma$,那么除了$R_T$外我们还得到Dingle因子$e^{-\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}\Gamma}$.

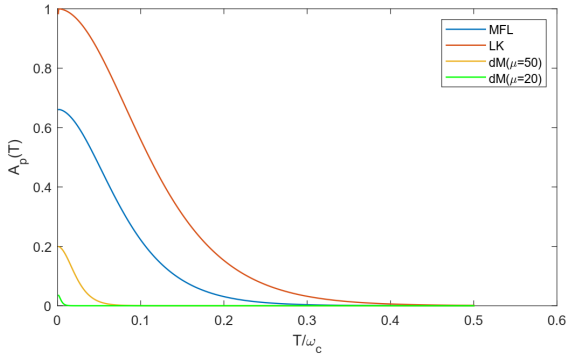


Figure 10.3: 边缘费米液体(蓝线)和掺杂Mott绝缘体(黄线,绿线)的振荡振幅与费米气体(LK公式,红线)的比较.(参数选取为$D=100, V\rho_F=0.2, \hbar\omega_c=1, J=400$)

3. 对于费米液体,实频自能是$\Sigma(\omega)=-\lambda\omega-i\Gamma\omega^2$,那么解析延拓后的虚频自能是$\Sigma(\omega_m)=-\lambda i\omega_m-i\Gamma(i\omega_m)^2$.因此,自能虚部是$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)=-\lambda\omega_m+\Gamma\omega_m^2$.考虑到指数因子,那么$\Gamma$项相对$\lambda$是小量,因而虚部的作用相当于修正$\omega_c$,即$\omega_c\to\omega_c/(1+\lambda)$或者说把回旋共振质量($\omega_c=\frac{eB}{m_c}$)修正为$m_c\to m_c(1+\lambda)$.

4. 对于边缘费米液体,其虚频自能与实频自能满足$\Sigma(\omega_m)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Sigma(\omega)}{i\omega_m-\omega}$而$\mathrm{Im}\Sigma(\omega)=-(V\rho_F)^2\pi|\omega|$.这样,$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)=-2\omega_m(V\rho_F)^2\ln\frac{\sqrt{D^2+\omega_m^2}}{|\omega_m|}$, 在低温下可近似为$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)\simeq-2\omega_m(V\rho_F)^2\ln\frac{D}{\pi T}$, 因此回旋共振质量$m_c$获得对数的温度依赖$m_c(1+2(V\rho_F)^2\ln\frac{D}{\pi T})$.[21]图10.3显示了边缘费米液体的振荡振幅($A_p(T)$,$p=1$)与费米气体(LK公式)的比较,可以看到两者的温度依赖行为基本相同,这说明实验上通过量子振荡振幅难以区分费米液体与边缘费米液体.

- 我们看到只要电子自能函数是ω的解析函数,那么上述讨论表明相互作用体系的量子振荡都类似于无相互作用情况下的LK公式.当然,如果出现非解析的自能,例如$\Sigma(\omega)\sim\frac{1}{\omega}$,(掺杂Mott绝缘体可能具有此类自能)那么上述结果会如何变化呢？ 例如我们考虑Ising-Kondo晶格模型在强耦合时的自能近似为$\Sigma(\omega_m)=\frac{J^2/16}{i\omega_m+\mu}$,$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)=-\omega_m\frac{J^2/16}{\omega_m^2+\mu^2}$.[22] 图10.3显示,当化学势$\mu$偏离半满时的取值$\mu=0$时,这类自能的结果(黄线)仍然与LK公式定性符合,只不过振幅减小很多,当μ接近零时(绿线)量子振荡的振幅几乎为零.(低温下$\mathrm{Im}\Sigma(\omega_m)$的主要作用是增强回旋共振质量,这样自然抑制了振幅)这表明简

[21] [Schlottmann,Phys.Rev.B **77**,195111(2008)]
[22] [Yang et al.,Phys.Rev.B **100**,045148 (2019).]

单的具有极点结构的自能并不能导致LK 公式的完全失效. [23]

最后,我们指出,很多强关联电子系统都观测到了量子振荡现象,而这些体系通常认为其性质难以用费米液体描述:

- 欠掺杂铜氧化物超导材料,例如$YBa_2Cu_4O_8$,$YBa_2Cu_3O_{6.5}$以及$Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$[24];
- $\nu = 1/2$量子霍尔态;[25]
- 重费米子材料,如$CeCoIn_5$;[26]
- 近藤绝缘体材料,如SmB_6和YbB_{12}.[27]

作为一个有趣的例子,图10.4显示了近藤绝缘体材料SmB_6的量子振荡测量结果.[3]实验上采用Magnetic torque进行测量.在消去磁场二次方依赖的背景后可以看到明显的振荡行为.通过对数据做快速傅里叶变换可以得到主导的频率,也就是那些极值面对应的频率,可以看到既包含低频$f \sim 350T$也存在高频信号$f > 10000T$.前者对应小的费米面,解释为三维体材料的二维表面态,而后者对应非常巨大的费米面,很难用表面态解释,其到底为何仍处于争议之中.理论解释既有比较传统的解释如磁击穿和激子,[28]也有诸如近藤崩塌和Majorana费米海等分数化解释.[29]从表明上来看,近藤绝缘体SmB_6的体态是电的绝缘体而对磁场有

[23]当然,有一种可能性是对于掺杂Mott绝缘体,Luttinger-Ward泛函形式本身可能已不适用,此时基于该形式的扩展LK公式自然也失效.基于全息对偶(规范/引力对偶或者AdS/CFT),人们计算了带电黑洞背景下Dirac费米子对量子振荡的贡献,结果发现仍有类似于LK公式的形式,只不过需要把公式中的质量解释为温度依赖的量.[Hartnoll and Hofman,Generalized Lifshitz-Kosevich scaling at quantum criticality from the holographic correspondence,Phys.Rev.B **81**,155125(2010)]

[24][Doiron-Leyraud et al.,Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high-Tc superconductor,Nature **447**,565(2007)]发现了$YBa_2Cu_3O_{6.5}$的量子振荡,[Helm et al.,Phys.Rev.Lett. **103**,157002(2009)]发现了电子掺杂材料$Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$的量子振荡.相关的进展可以参考综述文章[Sebastian,Proust,Quantum Oscillations in Hole-Doped Cuprates,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **6**,411(2015)]

[25][Leadley et al.,Measurements of the Effective Mass and Scattering Times of Composite Fermions from Magnetotransport Analysis,Phys.Rev.Lett. **72**,1906(1994)]这个实验表明$\nu = 1/2$态为代表的金属态,(通常解释为复合费米子的金属态)显示电阻的量子振荡,其满足费米液体的一般结果(即Ando公式,类似与LK公式).既然$\nu = 1/2$态为金属态,称其为量子霍尔态并不合适.

[26][McCollam et al., Anomalous de Haas-van Alphen Oscillations in $CeCoIn_5$,Phys.Rev.Lett. **94**,186401(2005)]这个工作中用反铁磁量子临界理论所得的低阶自能$\Sigma(\omega) \sim \sqrt{\omega}$成功解释了$CeCoIn_5$在极低温下对LK公式的偏离.

[27][Tan et al.,Unconventional Fermi surface in an insulating state,Science **349**,287(2015);Xiang et al.,Quantum oscillations of electrical resistivity in an insulator,Science **362**,65(2018)]

[28][Knolle,Cooper,Quantum Oscillations without a Fermi Surface and the Anomalous de Haas‐van Alphen Effect,Phys.Rev.Lett.**115**,146401(2015);Zhang,Song,Wang,Quantum Oscillation in Narrow-Gap Topological Insulators,Phys.Rev.Lett. **116**,046404(2016);Riseborough,Fisk,Critical examination of quantum oscillations in SmB_6,Phys.Rev.B **96**,195122(2017);Knolle,Cooper,Excitons in topological Kondo insulators: Theory of thermodynamic and transport anomalies in SmB_6,Phys.Rev.Lett. **118**,096604(2017)]

[29][Baskaran,Majorana Fermi Sea in Insulating SmB_6:A proposal and a Theory of Quantum Oscillations in Kondo Insulators,arXiv:1507.03477;Erten,Ghaemi,Coleman,Kondo

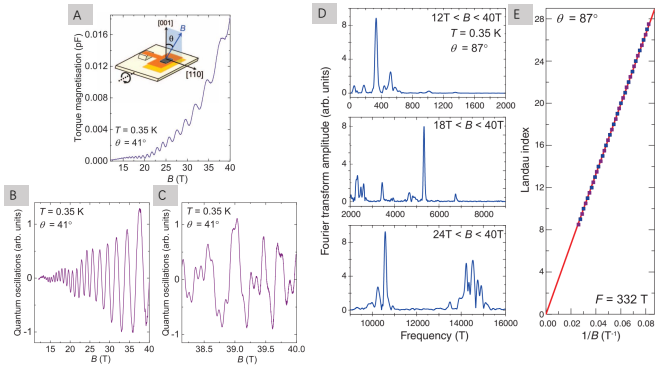


Figure 10.4: 近藤绝缘体材料SmB_6的量子振荡测量.(A)Magnetic torque测量数据显示磁场二次方依赖的背景;(B)消减背景后的振荡行为;(C)强磁场下的精细振荡;(D)傅里叶变换后的频谱;(E)低频振荡满足费米液体行为.[3]

响应,这暗示了体系可能存在中性的费米子激发,例如Majorana费米海或者自旋子.当然,对同为近藤绝缘体的YbB_{12}的测量显示更为奇怪的特性,即体系同时存在de-Haas van-Alphen效应和Shubnikov de-Haas效应,这就更难以理解了.[4]

量子霍尔电导的计算

直接计算

在实际的量子霍尔效应实验中,除了垂直平面的磁场,我们也需要考虑面内的电场.为简单起见,假设电场$\vec{E}$是沿着x方向的恒定电场,那么其对电子能量的贡献为$U(x) = e\mathcal{E}x$,由于这个电场项不含空间坐标y,因此系统的波函数仍然是$\psi(r) = e^{ik_y y}\varphi(x)$,只不过此时$\varphi(x)$的方程包含$U(x) = e\mathcal{E}x$,即有

$$\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\partial_x)^2 + \frac{1}{2m}(\hbar k_y + eBx)^2 + e\mathcal{E}x\right]\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{10.63}$$

或者

$$\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\partial_x)^2 + \frac{1}{2m}(eB(x - x_0))^2 + e\mathcal{E}(x - x_0) + e\mathcal{E}x_0\right]\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{10.64}$$

Breakdown and Quantum Oscillations in SmB_6,Phys.Rev.Lett. **116**,046403(2016);Erten,Chang,Coleman,Tsvelik,Skyrme Insulators: Insulators at the Brink of Superconductivity,Phys.Rev.Lett. **119**,057603(2017)]

注意到我们只要把$e\mathcal{E}(x-x_0)$吸收到二次项的定义中,就可以把方程化为先前仅有磁场的形式,

$$\frac{1}{2m}(eB(x-x_0))^2+e\mathcal{E}(x-x_0)=\frac{1}{2m}\left[\left(eB(x-x_0)+m\frac{\mathcal{E}}{B}\right)^2-\left(m\frac{\mathcal{E}}{B}\right)^2\right] \tag{10.65}$$

这等价于定义新的谐振子中心x_0':

$$x_0'=x_0+\frac{m\mathcal{E}/B}{-eB}=\frac{\hbar k_y+m\mathcal{E}/B}{-eB} \tag{10.66}$$

这样上述方程化为

$$\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\partial_x)^2+\frac{1}{2m}(eB(x-x_0'))^2-\frac{1}{2m}\left(m\frac{\mathcal{E}}{B}\right)^2+e\mathcal{E}x_0\right]\varphi(x)=E\varphi(x) \tag{10.67}$$

即是一个具有常数能量项的谐振子方程.显然是谐振子系统,那么上述方程给出的电子能级为

$$E_{n,k_y}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c-\frac{1}{2m}\left(m\frac{\mathcal{E}}{B}\right)^2+e\mathcal{E}\frac{\hbar k_y}{-eB} \tag{10.68}$$

系统的波函数为

$$\psi_{n,k_y}(x,y)\propto e^{ik_y y}H_n(x-x_0')e^{-\frac{(x-x_0')^2}{2l_c^2}}. \tag{10.69}$$

注意到,由于电场的加入,现在能级依赖于y方向的动量k_y,也就是说原先的能级简并被电场所消除.

最后,让我们计算系统在电场和磁场同时存在时的电导.在经典力学中,电子的速度与其机械动量相联系$\dot{\vec{x}}=\frac{1}{m}(\vec{p}+e\vec{A})$,电子运动所导致的电流密度为$\vec{J}=-ne\dot{\vec{x}}=\frac{-e}{m}n(\vec{p}+e\vec{A})$,那么在量子力学中,电流密度的表达式为(也可参考第二章《二次量子化》附录C中的公式)

$$\vec{J}=\frac{-e}{m}\sum_{occp}\langle\psi|(-i\hbar\nabla+e\vec{A})|\psi\rangle \tag{10.70}$$

这里仅考虑零温时的电流,因此求和仅对电子占据的状态求和.对于我们考虑的系统,可计算其横向电流J_y 和纵向电流J_x,也就是分别与电场$\vec{E}=\mathcal{E}\vec{e}_x$方向垂直和平行的分量.我们假定系统恰好占据完第$\nu$个Landau能级.对$J_x$有

$$\begin{aligned}J_x &= \frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}\int dxdy\psi_{n,k_y}^*(x,y)(-i\hbar\partial_x)\psi_{n,k_y}(x,y)\\ &= \frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}C_n^2\int dxH_n(x-x_0')e^{-\frac{(x-x_0')^2}{2l_c^2}}(-i\hbar\partial_x)H_n(x-x_0')e^{-\frac{(x-x_0')^2}{2l_c^2}}\end{aligned}$$

这里C_n为归一化常数.令$x'=x-x'_0$,这样上式中对x的积分可换为对x'的积分,则有

$$J_x=\frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}C_n^2\int dx' H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}(-i\hbar\partial_{x'})H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}=0. \quad (10.71)$$

注意到由于被积函数总是x'奇函数,(注意厄密多项式满足$H_n(-x)=(-1)^nH_n(x)$,这样被积函数$H_n(x)\partial_x H_n(x)$显然为x的奇函数)因此在对称区间下积分必为零.[30]因此,纵向电流J_x为零.对于J_y 则有

$$\begin{aligned}J_y &= \frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}\int dxdy\psi^*_{n,k_y}(x,y)(-i\hbar\partial_y+eBx)\psi_{n,k_y}(x,y)\\ &= \frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}C_n^2\int dx H_n(x-x'_0)e^{-\frac{(x-x'_0)^2}{2l_c^2}}(\hbar k_y+eBx)H_n(x-x'_0)e^{-\frac{(x-x'_0)^2}{2l_c^2}}\end{aligned}$$

令$x'=x-x'_0$,则有

$$J_y = \frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}C_n^2\int dx' H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}(\hbar k_y+eBx'+eBx'_0)H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}$$

注意到由于被积函数$H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}(eBx')H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}$ 总是x'奇函数,则这一项积分为零.那么剩下的部分为,

$$\begin{aligned}J_y &= \frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}(\hbar k_y+eBx'_0)\overbrace{C_n^2\int dx' H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}H_n(x')e^{-\frac{(x')^2}{2l_c^2}}}^{=1}\\ &= \frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}(\hbar k_y+eBx'_0)=\frac{-e}{m}\sum_{n=1}^{\nu}\sum_{k_y}(\hbar k_y+eB\frac{\hbar k_y+m\mathcal{E}/B}{-eB})\\ &= \frac{-e}{m}\nu\sum_{k_y}\frac{-m\mathcal{E}}{B}=\nu e\frac{\mathcal{E}}{B}\sum_{k_y}=\nu e\frac{\mathcal{E}}{B}D=\nu e\frac{\mathcal{E}}{B}\frac{eB}{h}S=\nu\frac{e^2}{h}\mathcal{E}S. \quad (10.72)\end{aligned}$$

注意我们已经用了$\sum_{k_y}=D$.因此,对于单位面积的系统,($S=1$)电流密度为$J_x=0,J_y=\nu\frac{e^2}{h}\mathcal{E}$. 为了考虑电场与电流方向不一致时的情况,我们可以定义电导率张量定义为$J_\alpha=\sigma_{\alpha\beta}E_\beta$,对当前情况则有

$$\begin{pmatrix}J_x\\J_y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sigma_{xx}&\sigma_{xy}\\\sigma_{yx}&\sigma_{yy}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}E_x\\E_y\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0\\\nu\frac{e^2}{h}\mathcal{E}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sigma_{xx}&\sigma_{xy}\\\sigma_{yx}&\sigma_{yy}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathcal{E}\\0\end{pmatrix} \quad (10.73)$$

可以解得$\sigma_{xx}=0,\sigma_{yx}=\nu\frac{e^2}{h}$,这说明当电子填满$\nu$ 个Landau能级时,系统的纵向电导σ_{xx}为零,而横向电导,也就是霍尔电导σ_{yx}量子化为e^2/h 的整数倍,这就解释了整数量子霍尔效应中量子化电导的起源.

[30]也可以用占据数态和升降算符证明

- 本章附录从线性响应理论和Green函数形式出发直接计算了霍尔电导率.

既然电阻率是电导率的倒数,对于张量形式的电导率,当$\sigma_{xx}=0,\sigma_{xy}=-\sigma_{yx}\neq 0$时,有趣的是我们发现纵向电阻率(也称为磁电阻)$\rho_{xx}=0$,[31]这说明系统似乎像超导体一样电子可以无阻地运动.但实际上,这仅仅说明体系是绝缘体而具有抵抗扰动的刚性.

TKNN

历史上,关于霍尔电导量子化最重要的工作是Thouless-Kohmoto-Nightingale-den Nijs 合作完成的TKNN 公式.[5]Thouless建议研究二维周期势场中的电导量子化问题,其哈密顿量是先前Landau量子化哈密顿量基础上附加周期势,他们发现此时的电导可以写成如下形式;

$$\sigma_{xy}=\frac{e^2}{h}\sum_n\frac{1}{2\pi}\int_{BZ}d^2kF_n^{xy}(k) \tag{10.74}$$

$$F_n^{xy}=\frac{1}{2i}\int d^2r\left(\frac{\partial u_n^*}{\partial k_x}\frac{\partial u_n}{\partial k_y}-\frac{\partial u_n^*}{\partial k_y}\frac{\partial u_n}{\partial k_x}\right)=\frac{1}{2i}\left(\partial_{k_x}\langle u_n|\partial_{k_y}|u_n\rangle-\partial_{k_y}\langle u_n|\partial_{k_x}|u_n\rangle\right). \tag{10.75}$$

这里单电子波函数是$\psi_{kn}(r)=u_n(r)e^{ikr}$,$u_n$是定义在磁单胞中关于$r$的周期函数而$k$是定义在磁布里渊区的波矢.对能级$n$的求和仅包含电子的占据态.更进一步,如果引入有效矢量势A:

$$A^i(k)=\frac{1}{2i}\int d^2r\left(u_n^*\frac{\partial u_n}{\partial k_i}-u_n\frac{\partial u_n^*}{\partial k_i}\right)=\frac{1}{2i}\left(\langle u_n|\partial_{k_i}|u_n\rangle-\partial_{k_i}\langle u_n|u_n\rangle\right) \tag{10.76}$$

那么$F_n^{xy}=\partial_{k_x}A^y-\partial_{k_y}A^x$就是等效的磁场,而此时电导就成为等效矢量势绕布里渊区边界的回路积分:

$$\sigma^{xy}=\frac{e^2}{h}\sum_n\frac{1}{2\pi}\oint dk_iA_n^i(k). \tag{10.77}$$

容易证明$\oint dk_iA_n^i(k)$必定是2π的整数倍,这样霍尔电导必然量子化为e^2/h的整数倍.数学上,$\frac{1}{2\pi}\oint dk_iA_n^i(k)\equiv C_1$就是著名的(第一)Chern数,其自动量子化为一系列整数,换句话说,体系的可以用拓扑不变量Chern数来表征.因此,整数量子霍尔效应电导量子化可以归结为拓扑不变量Chern数.

多体Chern数

当然,TKNN公式实际上仅对无相互作用且没有无序的理想晶格体系成立.为了克服TKNN公式的问题,牛谦等给出了一个基于扭转边界条件的形式,其可以适用于无序和相互作用的情形,这个理论形式通常称为多体Chern数形式.[32]

[31]实验当然也是这个结果,例如图10.1.

[32][Niu,Thouless,Wu,Quantized Hall conductance as a topological invariant,Phys.Rev.B **31**,3372(1985)]

牛谦等人的出发点是如下用一次量子化形式表述的Hall电导(Kubo公式):

$$\sigma^{yx}=\frac{ie^2\hbar}{S}\sum_{n>0}\frac{(v_1)_{0n}(v_2)_{n0}-(v_2)_{0n}(v_1)_{n0}}{(E_0-E_n)^2} \tag{10.78}$$

这里$S=L_xL_y$是体系的面积,$0,n$分别代表多电子体系的基态和激发态,E_0,E_n是对应的能量.为明确起见,Landau规范下N电子体系的哈密顿量是

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{(-i\hbar\partial_{x_i})^2}{2m}+\frac{(-i\hbar\partial_{y_i}-eBx_i)^2}{2m}\right]+\sum_i U(x_i,y_i)+\sum_{j=1}^{N}\sum_{i<j}^{N}V(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|) \tag{10.79}$$

这个哈密顿量第一部分就是熟悉的单电子在均匀磁场下的动能,而$U(x_i,y_i),V(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)$则表示外势能和电子-电子之间的相互作用.此外Hall电导公式中的v_1,v_2是速度算符:

$$v_1=\sum_{i=1}^{N}\frac{-i\hbar\partial_{x_i}}{m},\qquad v_2=\sum_{i=1}^{N}\frac{-i\hbar\partial_{y_i}-eBx_i}{m}. \tag{10.80}$$

其矩阵元$(v_1)_{0n}=\langle\psi_0|v_1|\psi_n\rangle$,$\psi_0,\psi_n$是体系的基态和激发态.如果设体系多体波函数为$\psi(x_1,y_1,x_2,y_2...x_i,y_i...x_N,y_N)$,那么体系的边界条件可以选为

$$\psi(...x_i=L_x,y_i...)=\psi(...x_i=0,y_i...)=0,\quad \psi(...x_i,y_i+L_y...)=e^{i\beta L_y}\psi(...x_i,y_i...). \tag{10.81}$$

β是相位因子用以保证体系波函数满足交换反对称,这样x方向具有固定边界条件而y方向是扭转边界条件,扭转的角度是βL_y.如果只关系块体对Hall电导的贡献,那么x 方向的边界条件可以替换为$\psi(...x_i+L_x,y_i...)=e^{i\alpha L_x}e^{i\frac{eB}{\hbar}y_iL_x}\psi(...x_i,y_i...)$,这样$x$ 方向也具有了扭转边界条件.接下来,我们对波函数做幺正变换,

$$\psi\to\phi=e^{-i\alpha(x_1+x_2+...+x_N)}e^{-i\beta(y_1+y_2+...+y_N)}\psi \tag{10.82}$$

这样本征方程$H\psi=E\psi$就改写为$\tilde{H}\phi=E\phi$.幺正变换后的哈密顿量$\tilde{H}$可以由H中$-i\partial_{x_i}\to-i\partial_{x_i}+\alpha,-i\partial_{y_i}\to-i\partial_{y_i}+\beta$ 来得到.此时,Hall电导可以改写为

$$\sigma^{yx}(\alpha,\beta)=\frac{ie^2}{S\hbar}\sum_{n>0}\frac{\langle\phi_0|\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\alpha}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\beta}|\phi_0\rangle-\langle\phi_0|\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\beta}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\alpha}|\phi_0\rangle}{(E_0-E_n)^2}. \tag{10.83}$$

现在定义扭转角度$\theta=\alpha L_x,\varphi=\beta L_y$,那么上述形式可以简化为

$$\sigma^{yx}(\theta,\varphi)=\frac{ie^2}{\hbar}\left[\left\langle\frac{\partial\phi_0}{\partial\theta}|\frac{\partial\phi_0}{\partial\varphi}\right\rangle-\left\langle\frac{\partial\phi_0}{\partial\varphi}|\frac{\partial\phi_0}{\partial\alpha\theta}\right\rangle\right]. \tag{10.84}$$

这样,Hall电导与扭转角度θ,φ直接相关.但是一般来说我们很难直观的说明上述形式可以得到量子化的Hall电导,因此,牛谦等建议我们可以对所有的扭转角度θ,φ做平均,也就是

$$\sigma^{yx}=\int_0^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\varphi}{2\pi}\sigma^{yx}(\theta,\varphi)=\frac{e^2}{h}\int_0^{2\pi}d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\frac{1}{2\pi i}\left[\left\langle\frac{\partial\phi_0}{\partial\varphi}|\frac{\partial\phi_0}{\partial\theta}\right\rangle-\left\langle\frac{\partial\phi_0}{\partial\theta}|\frac{\partial\phi_0}{\partial\varphi}\right\rangle\right]. \tag{10.85}$$

可以看到,这个形式与TKNN公式在形式上是一致的,只不过TKNN中的动量k_x, k_y作用由扭转角θ, φ来代替.当能隙存在时,非简并的基态ϕ_0从$\theta = 0$演化到2π时显然会返回到自身,这样Hall电导就会量子化为e^2/h的整数倍,即$\sigma^{yx} = C_1 \frac{e^2}{h}$,

$$C_1 = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left[\left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \varphi} | \frac{\partial \phi_0}{\partial \theta} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \theta} | \frac{\partial \phi_0}{\partial \varphi} \right\rangle \right]. \tag{10.86}$$

- 上述公式使用于整数量子Hall电导的计算.对于分数量子Hall体系,例如$\nu = \frac{1}{p}$态,上述公式可以写成$\sigma^{yx} = \frac{1}{p} \frac{e^2}{h} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{2\pi i} \left[\left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \varphi} | \frac{\partial \phi_0}{\partial \theta} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \theta} | \frac{\partial \phi_0}{\partial \varphi} \right\rangle \right]$.只不过此时$\phi_0$理解为分数量子Hall态的简并基态当中的某一个.

- 最近,Kudo等人的工作表明,对于尺寸比较大的体系,不做角度平均的形式$\sigma^{yx}(\theta, \varphi)$也可以得到正确的Hall电导量子化,(他们以晶格版的量子Hall问题,也就是Hofstadter模型为例进行了数值计算)这对于实际计算而言是相当好的简化. [33]

圆柱几何下的Laughlin规范讨论

我们现在考虑圆柱形的几何,也就是说x方向是圆柱的高度方向,y是圆柱每个截面的切向,而 z方向则是圆柱每个截面的径向,此时依然有y方向的周期边界,而x方向是开边界,$x = 0$和$x = L_x$是系统的两个边界.(图10.2)磁场方向是圆柱面的法向,而矢量势则是在切向$Bx\hat{e}_y$.然后Laughlin 讨论需要加入磁通量Φ_L,这个磁通量通过圆柱的中心,其产生的矢量势是Φ_L/L_y,这样系统的总矢量势是

$$\vec{A}(x, y) = \left(Bx + \frac{\Phi_L}{L_y} \right) \hat{e}_y \tag{10.87}$$

那么体系的单电子哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2m} \left[(-i\hbar\partial_x)^2 + \left(-\hbar k_y + \frac{e\Phi_L}{L_y} + eBx \right)^2 \right] \tag{10.88}$$

为了形式的简单,我们重新定义了动量的符号$k_y \to -k_y$.这样固定动量的谐振子的中心位置是

$$x_0' = \frac{\hbar k_y}{eB} - \frac{e\Phi_L}{eBL_y} = \frac{1}{eBL_y}(mh - e\Phi_L) = \left(m - \frac{\Phi_L}{\Phi_0} \right) \frac{\Phi_0}{BL_y}, \quad m = 0, 1, 2... \tag{10.89}$$

这相当于同一个Landau能级电子的不同动量轨道分别等间距地占据从$x = 0$到$x = L_x$ 的空间.对于完全填满的Landau能级,当我们改变的磁通量Φ_L恰好为一个磁通量子Φ_0时,这相当于每一个占据的电子的谐振子运动中心都做了一个单位移动,也就是说在一个单位磁通改变的影响下,每一个电子往最近的谐振子

[33] [Kudo,Watanabe,Kariyado,Hatsugai,Many-Body Chern Number without Integration,Phy.Rev.Lett. **122**,146601(2019)]

轨道上跳跃.对于边界处的电子,即$x=0$和$x=L_y$处,那么显然$x=0$附近电子跑掉了(因为其运动中心超过了$[0,L_x]$ 的范围),而相反的是,$x=L_x$附近多了一个电子(原来m的最大取值是简并度D而现在的取值是$D+1$当然加磁通后的取值下限从$m=0$变成了$m=1$,所以总的取值数或者简并度还是保持不变).等效的说,这可以看成是改变一个量子磁通量使得对于每一个填满的Landau能级,系统从一边输运了一个电子到另一边.如果系统总共有n个Landan能级被填满,那么在此过程当中总电子的运输量是$\Delta Q=ne$. 根据先前一般情况下的讨论,我们知道此时系统的Hall电导是

$$\sigma_H=\frac{e}{h}\Delta Q=n\frac{e^2}{h},n=1,2,3... \tag{10.90}$$

这样我们就从Landau量子化的角度解释了Hall电导的整数量子化.

- 注意,这里假定电子完全填满n个Landau能级,如果Landau能级没有被填满,此时理论上来说系统实际上是处于金属态的,Hall电导并不会有量子化.
- 这样看来,当且仅当电子恰好填满了整数个Landau能级后,体系才有Hall霍尔效应,但是如果真是这样那么只要我们给体系再加一个电子,那么这个电子就填充到更高的Landau能级,此时体系已经不是绝缘体,Hall电导不会量子化.但是实际上,真实系统存在杂质和无序,它们会导致一些局域化的态,多余的电子实际上是先填充这些局域化的态,然后才会填充更高的Landau能级,这样观察整数量子霍尔效应就不需要对电子数太精细的调节.(这些局域化的态并不参与导电因而不影响Hall 电导)

边缘态

我们已经看到Laughlin的规范讨论通过电子从圆柱的一边到另一边的输运解释了Hall电导的量子化. 如果我们回忆电子在垂直平面磁场作用下的经典运动轨迹,此时电子以回旋半径为运动半径做圆周运动, 对于远离边界的电子,它们各自独立地做圆周运动不互相干扰,显然这种不干扰性表明电子轨道是局域化的,并不能参与电流的输运,也就是不贡献电导.

但是注意到那些在圆柱边界附近运动的电子,它们不应该跑掉(实际材料中由于静电约束势电子跑不出去),我们看到它们实际上并不是做完整的圆周运动,而是做不断向前的回弹运动.这种不断向前的回弹运动就是Hall效应中的边缘态,如果考虑电子的速度是$\vec{v}=v\hat{e}_y$,即沿着y轴方向运动,磁场是$\vec{B}=B\hat{e}_z$, 那么电子感受到的Lorentz力是$\vec{F}=-e\vec{v}\times\vec{B}=-evB\hat{e}_x$就是受到$x$轴的反方向的力,这使得电子在上边界附近是做逆时针沿着y轴回弹运动($v_y>0$), 而在下边界就是逆时针沿着$-y$轴方向的运动($v_y<0$),即上下两个边界的运动方向恰好相反,注意到在每一边界的电子运动方向都相同,这就是所谓的chiral边界态(chiral edge state).当然,如果我们逆转磁场的方向,那么边界态电子的运动方向也就刚好交换一下.

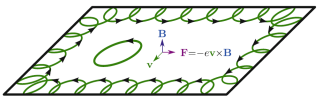


Figure 10.5: 量子Hall效应中的块体轨道和边界轨道,块体轨道是局域化的态而边界轨道贡献电导.

为了便于定量的讨论,我们在先前使用的哈密顿量的基础上计入x方向的约束静电势$V(x)$,

$$H=\frac{1}{2m}\left[(-i\hbar\partial_x)^2+\left(-\hbar k_y+\frac{e\Phi_L}{L_y}+eBx\right)^2+V(x)\right] \tag{10.91}$$

静电约束势的具体形状并不是很重要,一般而言在系统的中央也就是远离边界处是很平坦的,可以设为$V(x)=0$, 而在边界附近是很陡峭的,这使得电子不会跑出去.

如果静电势相比于电子微观运动变化要小很多,那么我们可以利用Tomas-Fermi近似,也就是说把体系的本征能量近似为没有静电势时的能量加上静电势的能量:

$$E_n(x)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c+V(x,n) \tag{10.92}$$

这里我们认为对于每一个Landau能级电子的静电势能一般是不同的.注意到每一个电子实际上都在各自的谐振子中心$x_0=-\frac{\hbar k_y}{eB}$附近运动,那么我们需要把电子微观运动的位置用电子平均意义上的谐振子中心位置来代替,即有

$$E_n(k_y)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c+V\left(-\frac{\hbar k_y}{eB},n\right) \tag{10.93}$$

对于远离边界的块体态,我们近似认为$V(-\frac{\hbar k_y}{eB},n)=0$,这样得到的是原先的能量简并的Landau能级.当在边界附近时,每个Landau能级与费米能的差可以写为

$$E_n(k_y)-E_F=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c-E_F+V\left(-\frac{\hbar k_y}{eB},n\right) \tag{10.94}$$

对静电势做展开可得

$$E_n(k_y)-E_F\simeq\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c-E_F+V\left(-\frac{\hbar k_F^n}{eB},n\right)+v_F^n(k_y-k_F^n) \tag{10.95}$$

这里k_F^n是第n个Landau能级与费米能相交的位置,也就是边界态的特征波矢,即等效的费米波矢.$v_F^n = \frac{\partial V(k_y,n)}{\partial k_y}$是相应的费米速度,可以看做是边界电子的所谓漂移速度$E/B,\ E \sim -\partial_x V(x)$. 当然,由于静电势产生的力总是指向系统内部,那么两个边界的速度是相反的.最后,我们指出边界态的出现并不依赖于系统的具体形状,比如说如果考虑一个中空的圆盘,磁场垂直于圆盘,这样边界态分别在圆盘的内环与外环上,并且边界电子运动方向恰好相反.

当我们给边界加上电压时,同一个边界电子数并不该变,因而纵向电导为零,但是注意到此时上下两个边界的电子数,或者说电流密度由于外加电压而有差异,这样霍尔电导是非零的.考虑到chiral边界态只朝一个方向运动,那么无序和相互作用效应都不会定性影响电输运.由经典输运理论可知电流是

$$I = (-e)\sum_k f_F(\varepsilon_k + eV)\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} \simeq \int \frac{dk}{2\pi\hbar}(-eV)\delta(\varepsilon_k)\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} \tag{10.96}$$

既然每个Landau能级贡献的chiral费米子色散可近似为$\varepsilon_k^n \simeq v_F^n(k - k_F^n)$,那么总电流是

$$I = (e^2V)\sum_n \int \frac{d(v_F^n k)}{2\pi\hbar v_F^n}\delta(v_F^n(k - k_F^n))v_F^n = \sum_n \frac{e^2}{2\pi\hbar}V = \sum_n \frac{e^2}{h}V \tag{10.97}$$

这说明每一个边界态可以贡献一个基本电导单元$\frac{e^2}{h}$,(这里谈电导率没有什么意义,只有整体的电导有实际价值)对于费米能以下有n个边界态的系统,我们得到的总Hall电导就是$\sigma_H = n\frac{e^2}{h}$,也就是用边界态可以解释观察到的整数量子Hall电导行为.

Hofstadter模型与Hofstadter butterfly:让人迷恋的蝴蝶

我们已经讨论了二维自由电子气在均匀磁场下的运动,我们看到电子形成一系列Landau 能级,每个Landau 能级有巨大的简并.现在我们在晶格系统中考虑相同的问题,即考虑均匀外磁场对晶格电子运动的影响.为明确起见,考虑二维正方晶格上仅有最近邻跃迁的电子(可忽略自旋自由度),其哈密顿量如下:

$$H=-t\sum_{\langle n,m\rangle}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_m=-t\sum_n(\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{x}}+\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.}) \tag{10.98}$$

这里我们用$j_x=1,...,N_x$,$j_y=1,...,N_y$,N_x,N_y 分别是x,y 方向的格点数,它们与系统在x,y方向的长度L_x,L_y关系为$L_x=N_xa,L_y=N_ya$,a 为晶格长度.我们给每一个格点n进行标号,即有$n=(j_x,j_y)$,这表明格点n的位置矢量为$r_n=j_xa\hat{e}_x+j_ya\hat{e}_y$.$n+\hat{x}$ 表示与格点n 间距为单位长度(晶格尺度)的相邻格点,其位置坐标为(j_x+1,j_y),也就是n格点右边的格点.同理$n+\hat{y}$是n格点上方的格点,位置坐标为(j_x,j_y+1).

现在,我们假设给系统添加上垂直于平面的z方向的均匀磁场$\vec{B}=B\hat{e}_z$.在Landau规范下,均匀磁场可用一个y方向的矢量势$\vec{A}=Bx\hat{e}_y$产生.在量子力学中,我们直接做替换$\vec{p}\to\vec{p}+e\vec{A}$就能得到正确的Schödinger方程,即 $\left[\frac{(-i\hbar\vec{\nabla}+e\vec{A})^2}{2m}+V(r)\right]\psi(r)=E\psi(r)$. 但是对于晶格问题,如何替换看起来明并明显.

Peierls代换

根据量子力学,如果在所求区域中$\vec{B}=0$,那么相应的波函数可以转化为无磁场时的波函数与一个相因子的乘积形式,即

$$\psi(r)=e^{i\theta(r)}\tilde{\psi}(r),\quad \theta(r)=\frac{e}{\hbar}\int_\Theta^r d\vec{r}'\cdot\vec{A}(r') \tag{10.99}$$

这里Θ为任意选择的参考点,而$\tilde{\psi}(r)$ 满足$\left[\frac{(-i\hbar\vec{\nabla})^2}{2m}+V(r)\right]\tilde{\psi}(r)=E\tilde{\psi}(r)$. 这说明,如果电子运动区域内不存在$\vec{B}$,那么矢量势对电子的影响通过相位因子体现.

圆环上运动的电子

作为一个例子,让我们考虑一个在半径为ρ的圆环上运动的电子,在圆环中心存在垂直电子运动平面的静态磁场$\vec{B}=B\vec{e}_z$,在圆环内任意包围磁场$\vec{B}$ 的环路给出磁通量为$\Phi=\oint d\vec{l}\cdot\vec{A}=\int d\vec{S}\cdot\vec{B}$,那么该磁场可通过如下矢量势实现:

$$\vec{A}=\frac{\Phi}{2\pi\rho}\vec{e}_\varphi=A_\varphi\vec{e}_\varphi \tag{10.100}$$

这里我们采用了以圆环中心为原点的平面极坐标系(加上z轴后则是柱坐标系).注意直角坐标系与柱坐标系的代换关系,$\nabla=(\partial_x,\partial_y,\partial_z)\to(\partial_\rho,\frac{1}{\rho}\partial_\varphi,\partial_z)$, 定

态Schödinger 方程可以写为

$$\frac{(p_\varphi + eA_\varphi)^2}{2m}\psi(\varphi) = \frac{(-i\hbar\partial_\varphi + e\frac{\Phi}{2\pi})^2}{2m\rho^2}\psi(\varphi) = E\psi(\varphi) \tag{10.101}$$

其本征函数和本征能量为

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}}e^{in\varphi}, \quad E = \frac{(n\hbar + \frac{e\Phi}{2\pi})^2}{2m\rho^2} \tag{10.102}$$

进一步,注意到问题本身的自然边界条件$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$, 那么$n$ 量子化为一系列整数($n = 0, \pm1, \pm2, ...$),也就是z方向的角动量量子数.对于一般的磁通量Φ,电子在圆环上运动并未感受到磁场$\vec{B}$,但其本征能量会受到磁通Φ 的影响而发生改变.当且仅当Φ为单位磁通量子$\Phi_0 = h/e$ 的整数倍时,电子能级才不受影响.

另一方面,在圆环上求解问题时磁场$\vec{B}$为零,那么可以做变换$\psi(\varphi) = e^{i\theta(\varphi)}\tilde{\psi}(\varphi)$使得$\tilde{\psi}(\varphi)$满足的Schödinger方程为为矢量势的形式,即$\frac{p_\varphi^2}{2m}\tilde{\psi}(\varphi) = E\tilde{\psi}(\varphi)$. 此时方程的解仍然是$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}}e^{in\varphi}$ 但本征能量则不包含磁通($E = \frac{(n\hbar)^2}{2m\rho^2}$).既然物理的波函数必须是单值的,这要求 $\theta(\varphi) = 2\pi m, m = 0, \pm1, \pm2...$,这等价于

$$\frac{e}{\hbar}\int_\Theta^r d\vec{r}' \cdot \vec{A}(r') = 2\pi m \tag{10.103}$$

为了避免位置依赖,这里的积分路径只能选取为闭合回路,因此$\int_\Theta^r d\vec{r}' \cdot \vec{A}(r') = \oint d\vec{l} \cdot \vec{A} = \Phi$, 这等价于要求$\frac{e}{\hbar}\Phi = 2\pi m$,也就是$\Phi$为单位磁通量子的整数倍.因此,波函数的单值性要求了穿过圆环磁通的量子化.

Peierls代换

在晶格问题中,如果考虑磁场$\vec{B}$并不作用在格点上,而是穿透无格点的plaquett中心,那么电子运动就只需计入相位因子即可.对一个一般性的哈密顿量,$H = -\sum_{m,n} t_{mn}\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_n = -\sum_{m,n} t_{mn}|m\rangle\langle n|$, 外磁场的作用可以通过对每一个格点态$|m\rangle$引入相位因子来实现,即

$$|m\rangle \to e^{i\theta_m}|m\rangle, \quad \theta_m = \frac{e}{\hbar}\int_\Theta^{r_m} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(r') \tag{10.104}$$

这样,加入磁场后的哈密顿量成为

$$H = -\sum_{m,n} t_{mn}e^{i(\theta_m - \theta_n)}|m\rangle\langle n| = -\sum_{m,n} t_{mn}e^{ia_{mn}}|m\rangle\langle n| = -\sum_{m,n} t_{mn}e^{ia_{mn}}\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_n, \tag{10.105}$$

即我们做了如下代换

$$\boxed{t_{mn} \to t_{mn}e^{ia_{mn}}, \quad a_{mn} = \frac{e}{\hbar}\int_{r_n}^{r_m} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(r')} \tag{10.106}$$

这个代换也称为Peierls代换.[12]这样外磁场下的晶格模型可写为

$$H = -\sum_{m,n} t_{mn}e^{ia_{mn}}\hat{c}_m^\dagger\hat{c}_n \tag{10.107}$$

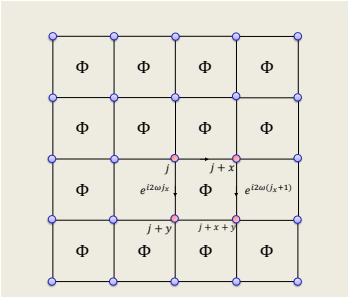


Figure 10.6: 取定规范势后Hofstadter模型的示意图

一般而言,矢量势本身满足规范变换,因此我们可以根据问题选择合适的矢量势形式以方便讨论和实际计算.

Hofstadter模型

回到之前讨论的而正方晶格最近邻跃迁模型,现在我们采用Peierls代换,这样有

$$H=-t\sum_n(e^{ia_{n,n+\hat{x}}}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{x}}+e^{ia_{n,n+\hat{y}}}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.}) \tag{10.108}$$

对于矢量势$\vec{A}=Bx\hat{e}_y$,我们有

$$a_{n,n+\hat{x}}=\frac{e}{\hbar}\int_{r_n}^{r_{n+\hat{x}}}d\vec{r}'\cdot\vec{A}(r')=\frac{e}{\hbar}\int_{j_xa}^{(j_x+1)a}dx'Bx'\hat{e}_x\cdot\hat{e}_y=0 \tag{10.109}$$

$$a_{n,n+\hat{y}}=\frac{e}{\hbar}\int_{r_n}^{r_{n+\hat{y}}}d\vec{r}'\cdot\vec{A}(r')=\frac{e}{\hbar}\int_{j_ya}^{(j_y+1)a}dy'B(j_xa)\hat{e}_y\cdot\hat{e}_y=\frac{e}{\hbar}Bj_xa^2 \tag{10.110}$$

这里$n=(j_x,j_y),r_n=j_xa\hat{e}_x+j_ya\hat{e}_y,r_{n+\hat{x}}=(j_x+1)a\hat{e}_x+j_ya\hat{e}_y,r_{n+\hat{y}}=j_xa\hat{e}_x+(j_y+1)a\hat{e}_y$.

代入$a_{n,n+\hat{x},\hat{y}}$的具体形式可得

$$H=-t\sum_n(\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{x}}+e^{i\frac{e}{\hbar}Ba^2j_x}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.}) \tag{10.111}$$

注意j_x是格点n的x方向坐标.$Ba^2=\Phi$恰好是在一个plaquett(最小的正方形)中的磁通量,(例如电子从$(j_x,j_y)\to(j_x,j_y+1)\to(j_x+1,j_y+1)\to(j_x+1,j_y)\to(j_x,j_y)$形成一个顺时针的闭合回路所获得的相位因子是$e^{i\frac{e}{\hbar}Ba^2j_x}e^{-i\frac{e}{\hbar}Ba^2(j_x+1)}=e^{-i\frac{e}{\hbar}Ba^2}$) 因此通过单位磁通量子$\Phi_0=h/e$, 我们可以把$\Phi$写成$\Phi=\frac{h}{e}w=2\pi\frac{\hbar}{e}w$,$w$为实数,电子在每个plaquett中逆/顺时针跃迁一周获得相位是$\pm\Phi$.这样哈密顿量简化为

$$\boxed{H_H=-t\sum_n(\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{x}}+e^{i2\pi wj_x}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.})} \tag{10.112}$$

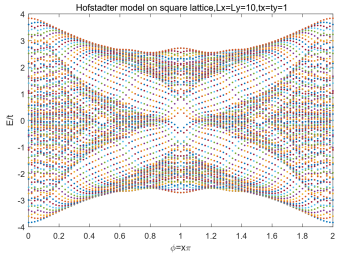


Figure 10.7: Hofstadter模型的能谱结构,即Hofstadter butterfly结构.($\phi = 2\pi w$,10×10的系统,取开边界条件.)

这就是一般形式的Hofstadter模型.(图10.6)对于凝聚态物理实验室中能够实现的较大静态均匀磁场,一般有$B \sim 1 - 50T$,T是磁场的单位特斯拉,其与另一个常用单位高斯的换算关系为$1T = 10^4 G$.考虑到典型的晶格长度$a \sim 10^{-10} - 5 \times 10^{-10} m$, 这样一个晶格plaquett上的磁通$\Phi$与单位磁通量子的比值可以估计为

$$\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{Ba^2}{h/e} = w \sim 10^{-6} - 10^{-3} \tag{10.113}$$

因此,在实际的固体材料中,每一个格点附近有一个单位磁通这样的情况并不会出现,反而是10^4的格点加在一起才会感受到量级为单位磁通的磁场.在这个意义上,固体系统所受到的磁场是比较小的.

关于Hofstadter模型的一个有趣性质是其随着外加磁场/磁通变化的能谱结构,文献中称为Hofstadter butterfly.图10.7显示了数值计算得到的能谱结构,注意到其图形与一只蝴蝶极为相似,故称为Hofstadter butterfly.[13][34]由于实际固体材料中的磁场对应$w << 1$ 的情况,因此我们并不期待其能观测到Hofstadter butterfly结构.另一方面,在冷原子系统中,等效磁场可以实现$w \sim 1$的情况,因此该类系统是实现Hofstadter模型并观察Hofstadter butterfly的更理想体系.[35]

Harper方程

通常,令$w = \frac{p}{q}$,p, q为互质的正整数.这样Hofstadter模型也可改写为

$$H_H = -t \sum_n (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+\hat{x}} + e^{i2\pi \frac{p}{q} j_x} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+\hat{y}} + \text{H.c.}) \tag{10.114}$$

既然q为正整数,那么n格点与$n+q$格点的跃迁强度一致,这说明系统在x方向的平移不变性是平移q个格点的大平移而非平移一个格点的小平移.用固体物理的话

[34]周期边界条件也可得到类似的蝴蝶谱,其与开边界的差别在于周期边界没有边界态,因而能带之间显示完整能隙.当然,周期边界的代价是需要计算较大的体系,例如对于$w = p/q, q = 60$需要60×60晶格.

[35]2013年,由Wolfgang Ketterle领导的MIT实验组利用光晶格首次实现了Hofstadter模型.[Miyake et al.,Phys.Rev.Lett.**111**,185302(2013)]

说,$w=p/q$时系统形成了周期为q的超晶格,这将会导致系统的单个能带会劈裂为q个子能带.(严格来说,对于周期边界的系统,这需要系统在x方向的尺度N_x是q的整数倍)

具体来说,我们可以对y方向做傅里叶变换,即$\hat{c}_n=\frac{1}{\sqrt{Ly}}\sum_{k_y}e^{ik_yj_y}\hat{c}_{j_x}(k_y)$,则有

$$H_H=\sum_{k_y}\left[-t\sum_{j_x}(\hat{c}^\dagger_{j_x}(k_y)\hat{c}_{j_x+1}(k_y)+\hat{c}^\dagger_{j_x+1}(k_y)\hat{c}_{j_x}(k_y))-2t\sum_{j_x}\cos(2\pi j_xp/q+k_y)\hat{c}^\dagger_{j_x}(k_y)\hat{c}_{j_x}(k_y)\right] \tag{10.115}$$

这样,我们仅需对固定动量k_y下的等效一维哈密顿量进行对角化即可得到系统的能谱.

当然,我们也可以写出固定k_y时对应的单粒子Schödinger方程.首先,用投影算符代替哈密顿量中的费米子算符,即

$$H_H(k_y)=\sum_{j_x}(-t|j_x\rangle\langle j_x+1|-t|j_x+1\rangle\langle j_x|-2t\cos(2\pi j_xp/q+k_y)|j_x\rangle\langle j_x|) \tag{10.116}$$

接下来让我们考虑本征方程$H_H(k_y)|\Psi\rangle=E|\Psi\rangle$,这里本征态可用$\{|j_x\rangle\}$展开,即有$|\Psi\rangle=\sum_{j_x}C_{j_x}|j_x\rangle$,那么本征方程可写成

$$\sum_{j_x}\left(-tC_{j_x-1}-tC_{j_x+1}-2t\cos(2\pi j_xp/q+k_y)C_{j_x}\right)|j_x\rangle=\sum_{j_x}EC_{j_x}|j_x\rangle. \tag{10.117}$$

因此我们得到展开系数满足的方程:

$$\boxed{-t(C_{j_x-1}+C_{j_x+1})-2t\cos(2\pi j_xp/q+k_y)C_{j_x}=EC_{j_x}} \tag{10.118}$$

这个方程就是著名的Harper方程.[36]

考虑x方向具有周期边界,注意到体系平移q个格点的不变性,那么$C_1,C_2...C_q$形成元胞中的q个子格,而$C_{1+q},C_{2+q}...C_{2q}$则是第二个元胞中的子格.一般而言,C_{j_x}可以表示为第$\tilde{m}$个元胞中的第m个子格, 根据Bloch定理,元胞间的相对动量是$k_x=\frac{2\pi n}{N_x/q},n=1,2...\frac{L_x}{q}$,即有

$$C_{j_x}=e^{ik_x(\tilde{m}-1)}C_m,\quad j_x=m+q(\tilde{m}-1);m=1,2...q;\tilde{m}=1,2...N_x/q \tag{10.119}$$

这样Harper方程简化为

$$-t\begin{pmatrix}2\cos(2\pi\frac{p}{q}+k_y) & 1 & 0 & e^{ik_x}\\ 1 & 2\cos(4\pi\frac{p}{q}+k_y) & 1 & 0\\ ... & ... & ... & ...\\ e^{-ik_x} & 0 & 1 & 2\cos(2\pi p+k_y)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\...\\C_q\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\...\\C_q\end{pmatrix}$$

[36]Harper方程与很多物理问题有关,例如量子霍尔效应,准晶,局域−退局域相变,非对易几何,重整化群,分形理论,数论以及泛函理论.具体可参考[Czajka et al.,Phys.Rev.B **74**,125116(2006)] 的参考文献7 − 13.

对于固定的k_y,对角化上述矩阵(记为$h^{mm'}_{k_x}(k_y)$)便得到q个子能带,每个子能带有N_x/q个能级$\varepsilon^m_{k_x}(k_y)$(不同的k_x的取值).换句话说,如果定义傅里叶变换

$$\hat{c}_{j_x}(k_y)=\frac{1}{\sqrt{L_x/q}}\sum_{k_x}e^{ik_x\tilde{m}}\hat{c}_{k_x,m}(k_y) \tag{10.120}$$

那么体系的哈密顿量改写为

$$H_H=\sum_{k_x,k_y}\sum_{m,m'}h^{mm'}_{k_x}(k_y)\hat{c}^\dagger_{k_x,m}(k_y)\hat{c}_{k_x,m'}(k_y)=\sum_{|k_x|\leq\pi/q}\sum_{|k_y|\leq\pi}\sum_{m=1}^{q}\varepsilon^m_{k_x}(k_y)\hat{\tilde{c}}^\dagger_{k_x,m}(k_y)\hat{\tilde{c}}_{k_x,m}(k_y) \tag{10.121}$$

这样我们就实现了周期边界下Hofstadter模型的对角化.

- 周期边界下的Hofstadter模型会出现q个子能带,每个子能带由N_xN_y/q个动量(k_x,k_y)表征,电子的色散关系是$\varepsilon^m_{k_x}(k_y)$.

$w=1/2$与Laughlin规范讨论

对于最简单的情况,$w=1/2$,此时有

$$H_H=-t\sum_n(\hat{c}^\dagger_n\hat{c}_{n+\hat{x}}+(-1)^{j_x}\hat{c}^\dagger_n\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.}) \tag{10.122}$$

显然,此时y方向跃迁强度交错变化,这使得系统出现两套子格,即j_x为奇数和偶数的格点,因此系统的能带自动从不加磁场的一条劈裂为两条.

我们注意到在当前的晶格模型中,如果也考虑Laughlin类似的规范讨论,那么我们可以把系统卷成一个圆柱,x方向是圆柱的高度方向,而y方向是圆柱的切向方向.这样,空心圆柱中心穿过的磁通Φ_L对圆柱上系统的影响可以用如下哈密顿量描述:

$$H_H=-t\sum_n(\hat{c}^\dagger_n\hat{c}_{n+\hat{x}}+e^{i2\pi wj_x}e^{i\frac{e}{\hbar}\Phi_L/Ly}\hat{c}^\dagger_n\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.}) \tag{10.123}$$

这里L_y是y方向的格点数目,同时x方向为开边界,y方向是周期边界.对于不加外磁场的自由粒子系统,当$\Phi_L=h/e$为单位磁通时,上述模型简化为

$$H=-t\sum_n(\hat{c}^\dagger_n\hat{c}_{n+\hat{x}}+e^{i2\pi/Ly}\hat{c}^\dagger_n\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.}). \tag{10.124}$$

Hofstadter模型和绝缘体的量子振荡

一个有趣的问题是当前模型的量子振荡行为,也就是磁化随磁场的变化情况.这里我们用能量对磁场的导数来得到磁化,即$M=-\partial E/\partial B$.[37]图10.8给出了半满填充时20×20体系在开边界条件下磁化强度随磁场的变化,可以看到弱磁场的线性行为(说明磁化率为常数,这体现了费米气体的Pauli顺磁性)在强磁场

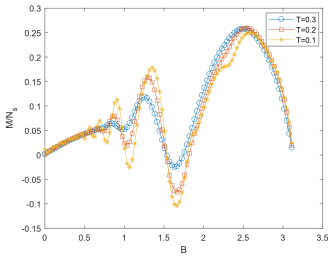


Figure 10.8: Hofstadter模型磁化的量子振荡行为,取开边界.

下转变为明确的振荡行为,且随着温度升高振荡行为减弱.其振荡周期满足公式10.23,即振荡周期由体系的费米面决定.

一个有趣的问题是对于绝缘体是否也存在明确的量子振荡.为了在Hofstadter模型基础上描述零磁场时的绝缘体,我们考虑电子感受到交错势$\Delta(-1)^{n_x+n_y}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_n$,($\Delta$为交错势强度)

$$H=-t\sum_n(\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{x}}+\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.})+\Delta\sum_n(-1)^{n_x+n_y}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_n \tag{10.125}$$

做傅里叶变换有

$$H=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k+\Delta\sum_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{k+Q}=\sum_k{}'(\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k+\varepsilon_{k+Q}\hat{c}_{k+Q}^\dagger\hat{c}_{k+Q})+\Delta\sum_k{}'(\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{k+Q}+\hat{c}_{k+Q}^\dagger\hat{c}_k) \tag{10.126}$$

这里$\varepsilon_k=-2t(\cos k_x+\cos k_y)$,$Q=(\pi,\pi)$,$\sum_k'$表示对$k$的求和只涉及约化布里渊区(也称为磁布里渊区),即$\cos k_x+\cos k_y>0$的区域.注意到$\varepsilon_{k+Q}=-\varepsilon_k$,因此对角化后电子色散为$E_{k\pm}=\pm\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2}$.物理上,这类色散关系可以解释为$\varepsilon_k=0$所定义的半满费米面由于$k$以及$k+Q$动量电子的互相散射(杂化)而在费米面上产生$2\Delta$大小的能隙,单一能带$\varepsilon_k$劈裂为两条,半满时$E_{k-}$完全占据,因此体系成为绝缘体.

- 类似的机制也广泛出现在自旋密度波,电荷密度波有序所诱导的绝缘体中.(Δ正比于序参量的强度,依赖于温度和相互作用)

现在,我们结合交错势和轨道磁场可得如下Hofstadter模型,

$$H_H=-t\sum_n(\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{x}}+e^{i2\pi\frac{p}{q}j_x}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+\hat{y}}+\text{H.c.})+\Delta\sum_n(-1)^{n_x+n_y}\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_n \tag{10.127}$$

图10.9显示了不同交错势强度Δ下磁化的量子振荡($T/t=0.1$).首先,可以看到随着Δ/t的增加,振荡逐渐被抑制,到$\Delta/t=2$时振荡完全消失,这说明只要

[37]这自然是近似,严格来说需要利用自由能求得磁化.

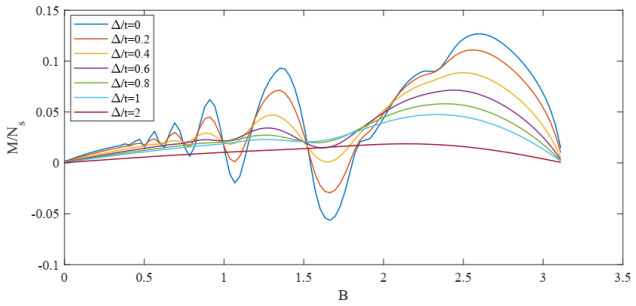


Figure 10.9: 交错势下Hofstadter模型磁化的量子振荡行为,取开边界.

能隙$\Delta \lesssim t$,那么绝缘体依然能够显示量子振荡.其次,注意到振荡的基本结构在$\Delta/t \leqslant 1$时都相同,这说明小能隙时的振荡周期与无能隙时基本一致,也就是说绝缘体量子振荡测量所得的(虚假)费米面是其未形成绝缘体时(金属态)的费米面.当前模型中化学势为零,因此金属态的费米面由$\varepsilon_k = 0$确定,这实际上就是磁布里渊区边界,因而绝缘体时费米面也是磁布里渊区边界.最后,振荡随Δ/t增加而抑制,这说明能隙的效果似乎类似Dingle因子,即$e^{-\frac{\Delta}{\hbar\omega_c}}$.

让我们首先解释绝缘体量子振荡与金属态一致这个问题.在金属态,磁场$B = 0$时的色散是$\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$,可在$k_x = k_y = 0$处展开为$\varepsilon_k \simeq -4t + tk^2 \equiv -\varepsilon_0 + \frac{k^2}{2m}$.在费米能处$\varepsilon_k = 0$,这定义了金属态的费米动量$k_F = \sqrt{2m\varepsilon_0}$.当$B \neq 0$时,仿照先前量子振荡的讨论,可令$\frac{k^2}{2m} \to (n + 1/2)\hbar\omega_c$,$(n = 0, 1, 2...$,同时$\varepsilon_k \to \varepsilon_n = -\varepsilon_0 + (n + 1/2)\hbar\omega_c)$这样费米能处最高占据的Landau能级由$\varepsilon_{n=n^*} = 0$给出,这里$n^*$为最高占据Landau能级指标,显然有$n^* = \frac{\varepsilon_0}{\hbar\omega_c} - 1/2$.

当我们把磁场从B改为$B_+(B_-)$时$(B_- < B < B_+)$,我们期待B_+时的第$n^* - 1$个Landau能级恰好落在费米能,也就是原先B时的第n^*个Landau能级所在位置,那么必有

$$-\varepsilon_0 + (n^* + 1/2)\hbar\frac{eB}{m} = 0 = -\varepsilon_0 + (n^* - 1 + 1/2)\hbar\frac{eB_+}{m} \tag{10.128}$$

这样有

$$\frac{1}{B} - \frac{1}{B_+} = \frac{\hbar e}{m\varepsilon_0} \tag{10.129}$$

同理有$\frac{1}{B_-} - \frac{1}{B} = \frac{\hbar e}{m\varepsilon_0}$,这说明无论增大还是减小磁场,振荡周期都是$\frac{\hbar e}{m\varepsilon_0} = \frac{2\pi e}{\hbar}\frac{1}{A_F}(A_F = \pi k_F^2$为二维费米面的面积).

另一方面,$\Delta \neq 0$所对应的绝缘态在$B \neq 0$的能级为$E_{n\pm} = \pm\sqrt{\varepsilon_n^2 + \Delta^2}$.显然,由于$E_{n\pm} \neq 0$,费米能处没有Landau 能级占据,但是距离费米能最近的上下能带边界$E_{n\pm} = \pm\Delta(\Delta, -\Delta$分别对应上能带底和下能带顶)的Landau能级已被占据,此时因$\varepsilon_n = 0$,那么被占据Landau能级指标依然是$n = n^*$.对于$E_{n-} = -\Delta$的

下能带顶,把B改为B_+时要求第n^*-1Landau能级仍位于能带顶处,那么有

$$E_{n^*-}(B)=-\Delta=E_{n^*-1,-}(B_+)\Rightarrow -\varepsilon_0+(n^*+1/2)\hbar\frac{eB}{m}=-\Delta=-\varepsilon_0+(n^*-1+1/2)\hbar\frac{eB_+}{m} \tag{10.130}$$

可以看到这个关系与金属态完全一致,那么必然有振荡周期$\frac{\hbar e}{m\varepsilon_0}=\frac{2\pi e}{\hbar}\frac{1}{A_F}$.(上能带底的结果也一样)因此,我们看到绝缘体的振荡周期确实与金属态相同,这就解释了数值计算的结果.

- 这可以通过简单的magnetic breakthrough(磁击穿)讨论来理解.注意到当磁场比较弱时,我们可以展开哈密顿量中的指数因子$e^{i2\pi wj_x}$,这样磁场对应的能量尺度为$E_B=2\pi wt$,同时能隙尺度为Δ.只要$E_B>\Delta$,此时电子可以沿着最高占据的等能面运动($\varepsilon_k=0$,即金属态能带的费米面),也可以在改变磁场下跃迁至最低未占据的等能面(也是$\varepsilon_k=0$),这会产生量子振荡,且振荡周期由$\varepsilon_k=0$,这就是磁击穿.

现在,让我们直接计算绝缘态时的量子振荡振幅.在$T=0,B=0$时,体系能量为$E=\sum_k' E_{k-}=-\sum_k'\sqrt{\Delta^2+\varepsilon_k^2}$.当$B\neq 0$时,$\sum_k'$转化为$D\sum_{n=0}^{\infty}$,这样有

$$E=-D\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\Delta^2+(-\varepsilon_0+(n+1/2)\hbar\omega_c)^2} \tag{10.131}$$

再利用求和公式$\sum_{n=0}^{\infty}f(n+\gamma)=\int_0^{\infty}dxf(x)+2\int_0^{\infty}dxf(x)\mathrm{Re}\sum_{p=1}^{\infty}e^{i2\pi p(x-\gamma)}$,则有

$$E=-D\int_0^{\infty}dx\sqrt{\Delta^2+(-\varepsilon_0+x\hbar\omega_c)^2}-2D\int_0^{\infty}dx\sqrt{\Delta^2+(-\varepsilon_0+x\hbar\omega_c)^2}\mathrm{Re}\sum_{p=1}^{\infty}e^{i2\pi p(x-1/2)} \tag{10.132}$$

上式第二部分贡献能量随磁场的振荡,这样能量的振荡部分为

$$E_{osc}=-2D\hbar\omega_c\int_0^{\infty}dx\sqrt{(\Delta/\hbar\omega_c)^2+(x-\varepsilon_0/\hbar\omega_c)^2}\mathrm{Re}\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p e^{i2\pi px} \tag{10.133}$$

做变量代换$x'=x-\varepsilon_0/\hbar\omega_c,\alpha=\Delta/\hbar\omega_c$那么

$$E_{osc}=-2D\hbar\omega_c\mathrm{Re}\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p e^{i2\pi p\varepsilon_0/\hbar\omega_c}\int_{-\varepsilon_0/\hbar\omega_c}^{\infty}dx'\sqrt{\alpha^2+x'^2}e^{i2\pi px'} \tag{10.134}$$

然后对积分部分分部积分可得($\sqrt{\alpha^2+x'^2}e^{i2\pi px'}=\frac{d}{dx'}\frac{\sqrt{\alpha^2+x'^2}e^{i2\pi px'}}{i2\pi p}-\frac{1}{i2\pi p}\frac{x'}{\sqrt{\alpha^2+x'^2}}e^{i2\pi px'}$)

$$\int_{-\varepsilon_0/\hbar\omega_c}^{\infty}dx'\sqrt{\alpha^2+x'^2}e^{i2\pi px'}=\frac{(\sqrt{\alpha^2+x'^2}e^{i2\pi px'})_{-\varepsilon_0/\hbar\omega_c}^{\infty}}{i2\pi p}-\frac{1}{i2\pi p}\int_{-\varepsilon_0/\hbar\omega_c}^{\infty}dx'\frac{x'}{\sqrt{\alpha^2+x'^2}}e^{i2\pi px'} \tag{10.135}$$

注意到上式右边第一项并不产生振荡因而可以舍去(无穷大上限可用能带尺度截断),而第二部分可以化为对p的导数,这样有

$$\int_{-\varepsilon_0/\hbar\omega_c}^{\infty} dx' \sqrt{\alpha^2+x'^2} e^{i2\pi p x'} = -\frac{1}{(i2\pi)^2 p}\frac{d}{dp}\int_{-\varepsilon_0/\hbar\omega_c}^{\infty} dx' \frac{e^{i2\pi p x'}}{\sqrt{\alpha^2+x'^2}} + ... \tag{10.136}$$

在弱磁场情况下,$\varepsilon_0 = 4t \gg \hbar\omega_c$,这样积分下限可扩展至$-\infty$,因此$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{i2\pi p x'}}{\sqrt{\alpha^2+x'^2}} = K_0(\alpha 2\pi p)$.[38]这里$K_0(x)$是第二类变形贝塞尔函数.[39]由此我们发现

$$E_{osc} = -2D\hbar\omega_c \mathrm{Re}\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p e^{i2\pi p\varepsilon_0/\hbar\omega_c}\frac{1}{(2\pi)^2 p}\frac{d}{dp}K_0(\alpha 2\pi p) \tag{10.137}$$

利用第二类变形贝塞尔函数的递推关系($\frac{d}{dx}K_0(x) = -K_1(x)$)可以把上式改写为

$$E_{osc} = \frac{D\Delta}{\pi}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^p}{p}\cos\left(\frac{2\pi p\varepsilon_0}{\hbar\omega_c}\right)K_1\left(\frac{2\pi p\Delta}{\hbar\omega_c}\right) \tag{10.138}$$

我们看到量子振荡周期与先前分析一致,即由ε_0决定,这实际上是费米能($\mu = 0$)相对于未形成绝缘体时能带ε_k底部的距离,换句话说量子振荡测量的绝缘体的虚假费米面实际上是$\varepsilon_k = 0$时的费米面.

最后,当能隙$\Delta \gg \hbar\omega_c$时利用$K_1(x)$的渐进形式$K_1(x) \sim \frac{\pi}{2\sqrt{x}}e^{-x}$可得

$$E_{osc} \simeq \frac{D\Delta}{\pi}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^p}{p}\cos\left(\frac{2\pi p\varepsilon_0}{\hbar\omega_c}\right)\frac{\pi}{2\sqrt{\frac{2\pi p\Delta}{\hbar\omega_c}}}e^{-\frac{2\pi p\Delta}{\hbar\omega_c}} \tag{10.139}$$

这说明绝缘体量子振荡振幅类似LK公式,能隙的存在相当于一个Dingle因子$e^{-\frac{2\pi p\Delta}{\hbar\omega_c}}$,这样只有小能隙的绝缘体才能观察到可观的量子振荡,能隙太大就看不到了。

- 绝缘体可存在量子振荡现象,其本质是磁击穿(能隙Δ小于磁场能量尺度,例如$\hbar\omega_c$);
- 绝缘体的振荡周期由未杂化(金属态)费米面$\varepsilon_k = 0$决定(若费米能为零),其振幅类似Lifshitz-Kosevich公式;
- 磁击穿机制可能与先前讨论的拓扑近藤绝缘体(SmB_6,YbB_{12})以及激子绝缘体的量子振荡起源相关.[40]

---

[38]对于一般的ν,有$K_\nu(\alpha x) = \frac{(2\alpha)^\nu\Gamma(\nu+1/2)}{2x^\nu\Gamma(1/2)}\int_{-\infty}^{\infty}dt\frac{e^{-ixt}}{(\alpha^2+t^2)^{\nu+1/2}}$,($\mathrm{Re}(\nu+1/2) > 0, x > 0, |arg(\alpha)| < \pi/2$), 这个结果可参考王竹溪和郭敦仁《特殊函数概论》315页习题36.

[39]梁昆淼编《数学物理方法》书称其为虚宗量汉克尔函数(第四版287页)

[40][Riseborough,Fisk,Critical examination of quantum oscillations in SmB_6,Phys.Rev.B **96**,195122(2017);Allocca,Cooper,Quantum oscillations in interaction-driven insulators,arXiv:2110.14643]由于近藤绝缘体和激子绝缘体的能隙Δ由相互作用驱动,其本身随磁场也会发生振荡,因此人们也推测它们量子振荡可能源于能隙本身的振荡(对近藤绝缘体具体而言是近藤杂化序参量的振荡).[Lu et al.,Enhanced quantum oscillations in Kondo insulators,Phys.Rev.B **101**,115102(2020)]

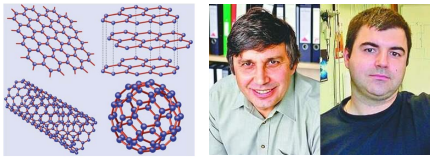


Figure 10.10: (左图)石墨烯,石墨,碳纳米管和富勒烯.(右图)Andre Geim(1958−)和Konstantin Novoselov(1974−). 二人因二维石墨烯材料的突破性实验(发现石墨烯)荣获2010年诺贝尔物理学奖.

六角晶格上的紧束缚模型系统:新世纪的交响乐

石墨烯的紧束缚模型

石墨烯(graphene)几乎是理想化的石墨单层,在2004年由Novoselov和Geim发现,由于该类材料的发现,这两位研究者被授予2010年诺贝尔物理学奖.石墨烯的基本晶格结构是二维六角晶格,即蜂窝状(honeycomb)的晶格.与正方晶格不同,六角晶格天然是双子格系统,可以认为是由物理上等价的具有三角晶格结构的A,B两套子格嵌套而成.任意选取某一个格点代表A子格的格点,那么与之最近邻是三个B子格的格点,其对应的三个最近邻矢量是

$$\vec{\delta}_1 = a(1,0),\quad \vec{\delta}_2 = a\left(-\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}\right),\quad \vec{\delta}_3 = a\left(-\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \tag{10.140}$$

这里a是晶格间距.进一步,A子格格点次近邻的是六个A子格格点,这六个矢量分别是

$$\delta'_1 = a\left(\frac{3}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}\right),\ \delta'_2 = a(0,\sqrt{3}),\ \delta'_3 = a\left(-\frac{3}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}\right),\ \delta'_4 = -\delta'_1,\ \delta'_5 = -\delta'_2, \delta'_6 = -\delta'_3 \tag{10.141}$$

注意到B子格格点的次近邻矢量与A相同.

描述石墨烯中电子的最简化模型是只考虑最紧邻跃迁的紧束缚单带模型,在该类模型中只包含垂直于六角晶格平面的p_z轨道电子彼此杂化形成的π能带电子,其定义如下:

$$\boxed{H = -t\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j = -t\sum_{i,\delta}(\hat{c}_{A,i}^\dagger \hat{c}_{B,i+\delta} + \hat{c}_{B,i+\delta}^\dagger \hat{c}_{A,i})} \tag{10.142}$$

这里我们不涉及磁性问题,因而忽略了电子的自旋自由度.(假设$t>0$)对i的求和计及所有的原胞,比如说如果我们共有$2N_2$个格点,那么共有N_s个原胞,每个原胞

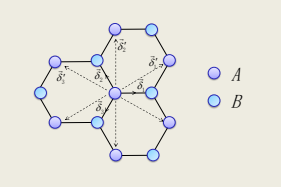


Figure 10.11: 六角晶格的双子格结构(A,B两个子格),最近邻的三个矢量$\vec{\delta}_1,\vec{\delta}_2,\vec{\delta}_3$ 和六个次近邻矢量$\pm\vec{\delta}'_1,\pm\vec{\delta}'_2,\pm\vec{\delta}'_3$.

有A和B两个子格格点,这样对i 的求和为N_2个,δ代表最近邻矢量,因此上述求和恰好不重复而无遗漏的考虑了所有的最近邻跃迁的贡献.

做傅里叶变换

$$\hat{c}_{A,j}=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikR_j}\hat{c}_{A,k},\quad \hat{c}_{B,j}=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikR_j}\hat{c}_{B,k} \tag{10.143}$$

那么哈密顿量变为

$$\begin{aligned}
H &= -t\frac{1}{N_s}\sum_{i,\delta}\left(\sum_k\sum_{k'} e^{-ikR_i}e^{ik'(R_i+\delta)}\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{B,k'}+h.c.\right)\\
&= -t\sum_k\left(\sum_\delta e^{ik\delta}\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{B,k}+h.c.\right)\\
&= -t\sum_k\left(f(k)\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{B,k}+f^*(k)\hat{c}^\dagger_{B,k}\hat{c}_{A,k}\right)\\
&= \sum_k\begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger_{A,k} & \hat{c}^\dagger_{B,k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -tf(k)\\ -tf^*(k) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{A,k}\\ \hat{c}_{B,k}\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{10.144}$$

这里定义了动量依赖的因子$f(k)=\sum_\delta e^{ik\delta}=e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1}+e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2}+e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3}=e^{ik_x}+2e^{-i\frac{k_x}{2}}\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_y$, 对角化这个$2\times 2$矩阵可得准粒子的色散关系是

$$\begin{aligned}
E_{k\pm} &= \pm t|f(k)|=\pm t\sqrt{1+4\cos\frac{3}{2}k_x\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_y+4\cos^2\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\\
&= \pm t\sqrt{3+4\cos\frac{3}{2}k_x\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_y+2\cos\sqrt{3}k_y}
\end{aligned} \tag{10.145}$$

为进一步讨论,我们选择的实空间晶格的基矢是$\vec{\delta}'_1$和$\vec{\delta}'_2$,这两个矢量都在六角晶格的平面内,由此可以得到相应的倒格矢是

$$\vec{G}_1=2\pi\frac{\vec{\delta}'_2\times a\vec{e}_z}{\vec{\delta}'_1\cdot(\vec{\delta}'_2\times a\vec{e}_z)}=2\pi\frac{a^2(\sqrt{3},0)}{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^3}=\frac{4\pi}{3a}(1,0) \tag{10.146}$$

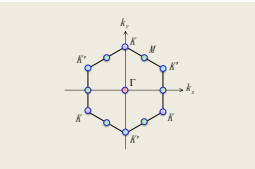


Figure 10.12: 六角晶格的第一布里渊区,有六个K点(只有两个不等价,记为K和K'),六个M点(不等价的M点也只有两个)和一个布里渊区中心点Γ点.

$$\vec{G}_2 = 2\pi \frac{a\vec{e}_z \times \vec{\delta}_1'}{\vec{\delta}_1' \cdot (\vec{\delta}_2' \times a\vec{e}_z)} = 2\pi \frac{a^2(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2})}{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^3} = \frac{4\pi}{3a}\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \tag{10.147}$$

利用这两个倒格矢,可以发现与布里渊区中心$\Gamma = (0,0)$最近邻的动量空间格点有六个,然后根据这六个点可以得到Wigner-Seitz原胞,即一个动量空间的六角形.这就是六角晶格的第一布里渊区,其六个顶点分别是

$$\frac{4\pi}{3a}\left(0, \pm\frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \frac{4\pi}{3a}\left(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2\sqrt{3}}\right) \tag{10.148}$$

通常把这些点记为K点,并且六个点只有两个彼此独立,[41]因而也记为K和K'点,例如选取$K = \frac{4\pi}{3a}(0, \frac{1}{\sqrt{3}}), K' = \frac{4\pi}{3a}(0, -\frac{1}{\sqrt{3}})$. 此外第一布里渊区的六条边的中点记为$M$点,例如$\pm\frac{1}{2}\vec{G}_1, \pm\frac{1}{2}\vec{G}_2$.这样我们发现当前选择下的六角晶格的第一布里渊区是一个有两个顶点在y 轴上的等边六角形,边长为$\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$,面积是$\frac{8\pi^2}{3\sqrt{3}a^2}$.

我们发现能谱$E_{k\pm}$在六个K点的能量恰好为零,如果费米能在能量为零处,那么说明系统在第一布里渊区除六个K点外都有激发能隙,而这些K点是无能隙点,也称为Dirac点,此时系统本身称为Dirac半金属(semimetal).之所以称为Dirac半金属是因为当我们在K点展开时会发现系统的哈密顿量十分类似于Dirac费米子的哈密顿量,例如在$K = \frac{4\pi}{3a}(0, \frac{1}{\sqrt{3}})$展开有

$$\begin{aligned} f(k) = f(K+q) &= e^{iq_x} + 2e^{-i\frac{q_x}{2}}\cos\left(\frac{2\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}q_y\right) \\ &\simeq 1 + iq_x + 2\left(1 - i\frac{1}{2}q_x\right)\left(-\frac{1}{2} - \frac{3}{4}q_y\right) + \mathcal{O}(q_x^2, q_y^2) \\ &\simeq +i\frac{3}{2}q_x - \frac{3}{2}q_y + \mathcal{O}(q_x^2, q_y^2, q_xq_y) \end{aligned} \tag{10.149}$$

这里的$\vec{q}$表示相对于K点的偏离,这样系统的单粒子哈密顿量是

$$H_q = \begin{pmatrix} 0 & -t(i\frac{3}{2}q_x - \frac{3}{2}q_y) \\ -t(-i\frac{3}{2}q_x - \frac{3}{2}q_y) & 0 \end{pmatrix} = \frac{3t}{2}q_x\tau^y + \frac{3t}{2}q_y\tau^x \tag{10.150}$$

[41] 可以通过倒格矢或者晶格平移矢量$\vec{T} = n\vec{G}_1 + m\vec{G}_2$,$n, m$为整数,联系在一起

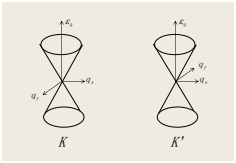


Figure 10.13: K和K'附近展开得到的Dirac cone结构,注意所得的线性的色散关系$\varepsilon_q = \pm v_F|\vec{q}|$.

如果定义费米速度$v_F = \frac{3t}{2}$,Dirac矩阵$\alpha^1 = \tau^y, \alpha^2 = \tau^x$,那么哈密顿量描述一个标准的无质量Dirac 费米子系统

$$H_q = v_F\vec{\alpha}\cdot\vec{q}, \quad \vec{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2) \quad \vec{q} = (q_x, q_y) \tag{10.151}$$

此时Dirac费米子的色散是$\varepsilon_q = \pm v_F|\vec{q}|$,是动量的线性函数.如果我们画出$\varepsilon_q$随动量$q_x, q_y$的依赖关系,那么会发现一个圆锥型的色散关系,也就是所谓的Dirac cone结构.这是Dirac费米子的典型特征,常常用于判别Dirac费米子的存在与否.(例如利用ARPES实验得到色散关系,看看是否有Dirac cone结构来判断是否是Dirac费米子激发)对于石墨烯可以发现有六个Dirac cone,这对应于六个Dirac点(K 点).同时我们可求得Dirac费米子的态密度是$N(\omega) = \sum_q \delta(\omega - v_F|q|) \simeq \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2}\delta(\omega - v_F|q|) = \frac{1}{2\pi v_F^2}\int x dx \delta(\omega - x) = \frac{|\omega|}{2\pi v_F} \propto |\omega|$. 可以看到相应的态密度也是能量的线性函数,这样对于热容和磁化率的贡献可以估计为$C_V \sim T\int d\omega N(\omega)\frac{\partial f_F(\omega)}{\partial T} \propto T^2, \chi \sim \frac{C_V}{T} \sim T$.

最后我们考虑次近邻跃迁与化学势的影响.在有这两者的情况下,系统的哈密顿量扩展为

$$\boxed{H = -t\sum_{i,\delta}(\hat{c}^\dagger_{A,i}\hat{c}_{B,i+\delta} + \hat{c}^\dagger_{B,i+\delta}\hat{c}_{A,i}) - t'\sum_{i,\delta'}(\hat{c}^\dagger_{A,i}\hat{c}_{A,i+\delta'} + \hat{c}^\dagger_{B,i}\hat{c}_{B,i+\delta}) - \mu\sum_i(\hat{c}^\dagger_{A,i}\hat{c}_{A,i} + \hat{c}^\dagger_{B,i}\hat{c}_{B,i})} \tag{10.152}$$

t'是次近邻跃迁的强度,μ是化学势,δ'表示次近邻的矢量,次近邻求和是对六个δ'求和.做傅里叶变换可得

$$\begin{aligned} H &= -t\sum_k(f(k)\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{B,k} + f^*(k)\hat{c}^\dagger_{B,k}\hat{c}_{A,k}) - t'\sum_k(\gamma(k)\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{A,k} + \gamma(k)\hat{c}^\dagger_{B,k}\hat{c}_{B,k}) \\ &-\mu\sum_k(\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{A,k} + \hat{c}^\dagger_{B,k}\hat{c}_{B,k}) \\ &= \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{A,k} & \hat{c}^\dagger_{B,k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t'\gamma(k) - \mu & -tf(k) \\ -tf^*(k) & -t'\gamma(k) - \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{A,k} \\ \hat{c}_{B,k} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{10.153}$$

$$\gamma(k)=\sum_{\delta'}e^{-ik\delta'}=2[\cos(\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_1)+\cos(\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_2)+\cos(\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_3)]$$
$$=2[\cos\left(\frac{3}{2}k_x+\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)+\cos\sqrt{3}k_y+\cos\left(-\frac{3}{2}k_x+\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)]$$
$$=4\cos\frac{3}{2}k_x\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_y+2\cos\sqrt{3}k_y \tag{10.154}$$

通过对角化2×2矩阵可以得到系统的色散为

$$E_{k\pm}=\pm t|f(k)|-t'\gamma(k)-\mu=\pm t\sqrt{3+\gamma(k)}-t'\gamma(k)-\mu \tag{10.155}$$

可以看到,当加入次近邻跃迁和化学势后,能带的粒子−空穴对称性被破坏($E_{k+}\neq -E_{k-}$),但是系统的无能隙特性依然保持.

- 关于石墨烯电子结构的详细讨论可参考综述文章[7].
- 石墨烯中电子相互作用的研究也是一个热门问题,可参考综述文章[8].

Haldane模型与Chern绝缘体

我们已经知道在低温与强磁场下,二维电子气会显示量子Hall效应,这似乎说明量子Hall 电导必须依赖于磁场,但是Haldane在1988年提出的一个玩具模型,即Haldane模型表明外磁场不是必须.[42]Haldane模型是一个定义在六角晶格的紧束缚费米子模型,其定义如下(图10.14)

$$\boxed{H_H=-t\sum_{\langle i,j\rangle}(\hat{c}^\dagger_{A,i}\hat{c}_{B,j}+\hat{c}^\dagger_{B,j}\hat{c}_{A,i})-t'\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle}e^{i\varphi_{ij}}(\hat{c}^\dagger_{A,i}\hat{c}_{A,j}+\hat{c}^\dagger_{B,i}\hat{c}_{B,j})} \tag{10.156}$$

这里的相位φ_{ij}选取的规则是对于从A到次近邻的六个A的跃迁,如果是顺时针方向的,那么$e^{i\varphi_{ij}}=i$,否则则为$-i$,而B子格间的跃迁与A 相同,只是刚好相差一个负号.具体而言,我们发现相应的跃迁因子是

$$-ie^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_1}+ie^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_1}+ie^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_2}-ie^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_1}-ie^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_3}+ie^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_1}=2(i)^2[-\sin\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_1+\sin\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_2-\sin\vec{k}\cdot\vec{\delta}'_3]$$
$$=-2\left[\sin\sqrt{3}k_y-2\cos\frac{3}{2}k_x\sin\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right]\equiv -2g(k) \tag{10.157}$$

$$g(k)=\sin\sqrt{3}k_y-2\cos\frac{3}{2}k_x\sin\frac{\sqrt{3}}{2}k_y \tag{10.158}$$

这样,从A出发顺时针通过三个次近邻的A子格格点费米子所获得的相位是$(i)^3=-i=e^{-i\frac{\pi}{2}}$,而在$B$那子格内的跃迁相位是$(-i)^3=i=e^{i\frac{\pi}{2}}$,因此费米子在一个六角形内跃迁的总相位是$e^{-i\frac{\pi}{2}}e^{i\frac{\pi}{2}}=1$,也就是说费米子总体而言没不会感受到

[42][Haldane,Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly", Phys.Rev.Lett. **61**,2015(1988)]

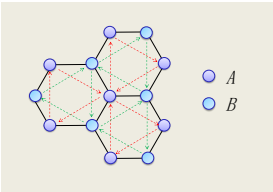


Figure 10.14: Haldane模型中的次近邻跃迁,$A(B)$子格顺时针跃迁的相位因子是$e^{i\frac{\pi}{2}}(e^{-i\frac{\pi}{2}})$.红色箭头代表$A$子格顺时针跃迁方向,绿色箭头代表$B$子格顺时针跃迁方向.

相位的变化,或者说费米子感受到的等效总磁场为零.但是,对于A或者B子格而言,则分别感受到相反的等效磁场的作用,其磁通量分别是$\Phi = \mp\frac{\pi}{2}\frac{\hbar}{q}$.($q$为费米子的电荷)

- Haldane模型尽管没有总外磁场,但是不同子格依然感受到等效磁场的效应,因此破坏时间反演对称性.

傅里叶变换后的哈密顿量是

$$\begin{aligned} H_H &= -t\sum_k (f(k)\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{B,k} + f^*(k)\hat{c}^\dagger_{B,k}\hat{c}_{A,k}) + 2t'\sum_k g(k)(\hat{c}^\dagger_{A,k}\hat{c}_{A,k} - \hat{c}^\dagger_{B,k}\hat{c}_{B,k}) \\ &= \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{A,k} & \hat{c}^\dagger_{B,k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2t'g(k) & -tf(k) \\ -tf^*(k) & -2t'g(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{A,k} \\ \hat{c}_{B,k} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{10.159}$$

对角化可得色散关系是

$$E_{k\pm} = \pm\sqrt{t^2|f(k)|^2 + 4(t')^2 g^2(k)} \tag{10.160}$$

注意到由于次近邻跃迁的影响,特别是因子$g(k) = \sin\sqrt{3}k_y + 2\cos\frac{3}{2}k_x \sin\frac{\sqrt{3}}{2}k_y$使得无能隙的Dirac 点($K$ 点)打开能隙,(半满的)系统完全成为绝缘体而非先前的Dirac 半金属.

我们也可以利用Pauli矩阵把单粒子哈密顿量写成更紧凑的形式,即

$$\begin{aligned} H_H &= \sum_k \hat{\psi}^\dagger_k \hat{H}(k)\hat{\psi}_k \\ \hat{H}(k) &= -t\mathrm{Re}f(k)\hat{\tau}^x + t\mathrm{Im}f(k)\hat{\tau}^y + 2t'g(k)\hat{\tau}^z = \vec{d}(k)\cdot\hat{\vec{\tau}} \end{aligned} \tag{10.161}$$

这里$\vec{d}(k) = (d_x, d_y, d_z) = (-t\mathrm{Re}f(k), t\mathrm{Im}f(k), 2t'g(k))$是一个等效的三维矢量,其变量是二维的动量,$\hat{\vec{\tau}} = (\hat{\tau}^x, \hat{\tau}^y, \hat{\tau}^z)$.如果我们定义单位矢量$\hat{\vec{d}} = \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|}$,那么这个单位矢量描述了从二维轮胎面$(k_x, k_y)$(取值在第一布里渊区具有周期性,记

为T^2)到三维单位球的二维表面($\hat{\vec{d}}^2=\hat{d}_x^2+\hat{d}_y^2+\hat{d}_z^2=1$,记为$S^2$)的一个映射/覆盖,(当然需要$\vec{d}$本身没有零点,也就是系统的能谱$E_{k+}-E_{k-}=2|\vec{d}(k)|$有能隙)

根据拓扑学的研究,这类映射就是T^2到S^2的同伦(homotopy)映射,对应着一个整数,数学上记为$\pi_2(S^2)=Z$,[43]在这里就是著名的(第一)Chern 数:

$$\mathcal{C}_1=\frac{1}{4\pi}\int d^2k\hat{\vec{d}}\cdot\left(\frac{\partial\hat{\vec{d}}}{\partial k_x}\times\frac{\partial\hat{\vec{d}}}{\partial k_y}\right) \tag{10.162}$$

- 对于二维绝缘体,其单粒子哈密顿量的动量空间结构可以定义拓扑不变量,例如Chern数.

- 单粒子哈密顿量的动量空间结构实际上反映了系统本征波函数族,也就是Bloch函数在动量空间的拓扑结构.

对于晶格模型而言,具体计算Chern数需要数值计算积分,但是我们知道动量空间结构的特点主要由奇异点来体现,例如石墨烯的特点就是其具有无能隙的Dirac点,对于这里的Haldane模型而言,相当于是次近邻跃迁在Dirac点打开能隙,只要能隙打开不要太大,那么Dirac点的特性依然会有体现,或者说Dirac费米子的性质任然有重要的贡献.因此,我们在$K=\frac{4\pi}{3a}(0,\frac{1}{\sqrt{3}})$点和$K'=\frac{4\pi}{3a}(0,-\frac{1}{\sqrt{3}})$展开,可得

$$\begin{aligned}K:&\quad f(k)=f(K+q)\simeq\frac{3}{2}(iq_x-q_y)\quad g(k)=g(K+q)\simeq-\frac{3\sqrt{3}}{2}\\K':&\quad f(k)=f(K+q)\simeq\frac{3}{2}(iq_x+q_y)\quad g(k)=g(K+q)\simeq+\frac{3\sqrt{3}}{2}\end{aligned}$$

这样我们发现在K点附近$\vec{d}=(v_Fq_y,v_Fq_x,-m)$,$m=3\sqrt{3}t'$是等效Dirac费米子的质量,其对应的有质量Dirac费米子哈密顿量是

$$H_q^K=v_F\vec{\alpha}\cdot\vec{q}-m\beta,\quad\vec{\alpha}=(\alpha^1,\alpha^2)\quad\beta=\hat{\tau}^z\quad\vec{q}=(q_x,q_y) \tag{10.163}$$

而在K'点附近有$\vec{d}=(-v_Fq_y,v_Fq_x,+m)$,$m=3\sqrt{3}t'$

$$H_q^{K'}=v_F\vec{\alpha}\cdot\tilde{\vec{q}}+m\beta,\quad\tilde{\vec{q}}=(q_x,-q_y) \tag{10.164}$$

这样我们看到在Dirac点附近展开导致了有质量Dirac费米子,并且不等价的Dirac点给出的质量恰好相反.对K点处的Dirac费米子,有

$$\begin{aligned}&\partial_{q_x}\vec{d}=(0,v_F,0)=v_F\vec{e}_y,\quad\partial_{q_y}\vec{d}=(v_F,0,0)=v_F\vec{e}_x\Rightarrow\partial_{q_x}\vec{d}\times\partial_{q_y}\vec{d}=-v_F^2\vec{e}_z\\&\vec{d}\cdot(\partial_{q_x}\vec{d}\times\partial_{q_y}\vec{d})=mv_F^2,\quad|\vec{d}|^3=(v_F^2(q_x^2+q_y^2)+m^2)^{\frac{3}{2}}\end{aligned} \tag{10.165}$$

[43]这些映射的集合构成所谓的同伦群,对于d维轮胎面T^d到$d+1$维单位球的d维球面S^d的同伦映射也对应于整数$\pi_d(S^d)=Z$.

其Chern数为

$$\begin{aligned}\mathcal{C}_1^K &= \frac{1}{4\pi}\int dq_x dq_y \frac{1}{|\vec{d}|^3}\vec{d}\cdot(\partial_{q_x}\vec{d}\times\partial_{q_y}\vec{d}) = \frac{1}{4\pi}\int dq_x dq_y \frac{mv_F^2}{(v_F^2(q_x^2+q_y^2)+m^2)^{\frac{3}{2}}} \\ &= \frac{m}{2}\int_0^\infty (v_F q)d(v_F q)\frac{1}{((v_F q)^2+m^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{m}{2}I(m) \qquad (10.166)\end{aligned}$$

$$I(m) = \int_0^\infty dx \frac{x}{(x^2+m^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dy \frac{1}{(y+m^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{2}(-2)(y+m^2)^{-\frac{1}{2}}|_0^\infty = \frac{1}{|m|} \qquad (10.167)$$

我们得到

$$\mathcal{C}_1^K = \frac{1}{2}\frac{m}{|m|} = \frac{1}{2}\mathrm{sgn}(m) \qquad (10.168)$$

同理可得

$$\mathcal{C}_1^{K'} = \mathcal{C}_1^K \qquad (10.169)$$

这样系统的总Chern数是两类Dirac费米子的总和$\mathcal{C}_1 = \mathrm{sgn}(m) = \mathrm{sgn}(t')$,如果$t' > 0$,则有$\mathcal{C}_1 = 1$.这说明系统是一个拓扑态,可以用非零的Chern数刻画.物理上非零的Chern 数对应于量子化Hall电导$\sigma_H = \mathcal{C}_1\frac{e^2}{h}$, 因此系统又是一类量子霍尔态,通常称为量子反常霍尔绝缘体或者Chern绝缘体.[44],

- 量子反常Hall绝缘体或者Chern绝缘体是一类无外加磁场而具有量子化Hall电导的绝缘体.
- 次近邻跃迁导致的等效质量m最后对应于非零的Chern数,通常称之为Haldane质量项.

与Haldane质量项相对应还有一个导致拓扑平凡绝缘体的质量项,称为Semenoff质量项,这相当于在K和K'展开的Dirac费米子质量相同.此时Chern数 $\mathcal{C}_1^{K'} = -\mathcal{C}_1^K$,这样总的Chern数为零,系统是拓扑平凡的绝缘态.微观上,我们可以通过在子格间的交错势来实现,即

$$H = -t\sum_{\langle i,j\rangle}(\hat{c}_{A,i}^\dagger \hat{c}_{B,j} + \hat{c}_{B,j}^\dagger \hat{c}_{A,i}) - t'\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle}(\hat{c}_{A,i}^\dagger \hat{c}_{A,j} - \hat{c}_{B,i}^\dagger \hat{c}_{B,j}). \qquad (10.170)$$

Haldane模型的有效理论

实际上,我们可以用一个有效理论来理解Haldane模型的低能物理,其出发点是我们写出K, K'点附近展开所得的Dirac费米子哈密顿量的作用量,例如K点附近有

$$S = \int d^3x\left[\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu + m)\psi\right] \qquad (10.171)$$

[44]量子反常Hall效应在2013年由清华薛琪坤组在铁磁元素掺杂的拓扑绝缘体$Cr_{0.15}(Bi_{0.1}Sb_{0.9})_{1.85}Te_3$薄膜当中首次观测到.低温下,实验测量的Hall电导显示量子化平台,而纵向电导则很小.后续的高精度实验独立验证了这个发现.而Haldane模型本身则在费米型冷原子系统中得以实现.[11]

这里我们令$v_F=1$,$\gamma^\mu=(\gamma^0,\gamma^1,\gamma^2)=(\beta,\beta\alpha^1,\beta\alpha^2)$,这三个$\gamma$矩阵满足反对易关系$\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}=2\eta^{\mu\nu}I_{2\times2}$.$\eta^{\mu\nu}$为$2+1$维闵氏时空的度规,这里取$(+1,-1,-1)$.$\partial_\mu=(\partial_t,\partial_x,\partial_y)$.两分量Dirac场$\psi=(c_A,c_B)^T$,$\bar\psi=(\bar c_A,\bar c_B)\beta$.

接下来,让我们通过最小耦合引入电磁场$A^\mu=(\phi,A_x,A_y)$,则作用量描述$2+1$维时空有质量Dirac费米子与电磁场耦合的量子电动力学,

$$S=\int d^3x\left[\bar\psi_\sigma(i\gamma^\mu(\partial_\mu-ieA_\mu)+m)\psi_\sigma-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right]. \tag{10.172}$$

现在,为了研究电磁响应,我们可以积掉Dirac费米子,这样Dirac费米子贡献的有效作用量是

$$\begin{aligned}S_{eff}&=\ln\mathrm{Det}\left[i\gamma^\mu(\partial_\mu-ieA_\mu)+m\right]\\&=\mathrm{Tr}\ln\left[i\gamma^\mu(\partial_\mu-ieA_\mu)+m\right]\\&=\mathrm{Tr}\ln\left[i\gamma^\mu\partial_\mu+m\right]+\mathrm{Tr}\ln\left[1+e(i\gamma^\mu\partial_\mu+m)^{-1}\gamma^\mu A_\mu\right].\end{aligned}$$

这里上面的第一项与电磁场A_μ无关,因此可以不用考虑.对第二项做泰勒展开可得

$$\begin{aligned}S_{eff}&=\mathrm{Tr}\left[e(i\gamma^\mu\partial_\mu+m)^{-1}\gamma^\mu A_\mu-\frac{e^2}{2}(i\gamma^\mu\partial_\mu+m)^{-1}\gamma^\mu A_\mu(i\gamma^\nu\partial_\nu+m)^{-1}\gamma^\nu A_\nu\right]+...\\&=\mathrm{Tr}\left[e\frac{i\gamma^\nu\partial_\nu-m}{-\partial^2-m^2}\gamma^\mu A_\mu-\frac{e^2}{2}A_\mu\frac{i\gamma^\alpha\partial_\alpha-m}{-\partial^2-m^2}\gamma^\mu\frac{i\gamma^\beta\partial_\beta-m}{-\partial^2-m^2}\gamma^\nu A_\nu\right]+...\end{aligned} \tag{10.173}$$

注意到$\mathrm{Tr}\gamma^\mu=0,\mathrm{Tr}\gamma^\mu\gamma^\nu=2\eta^{\mu\nu}$,这样上式中关于$A_\mu$的一次项为零(也利用了Lorentz规范条件$\partial^\mu A_\mu=0$).对于第二项,我们把它变换到动量空间可得($k^\mu=(\omega,k_x,k_y)$)

$$S_{eff}=\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}A_\mu(q)\Pi^{\mu\nu}(q)A_\nu(-q)+...$$

$$\begin{aligned}\Pi^{\mu\nu}(q)&=-\frac{e^2}{2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{(k^2-m^2)((k+q)^2-m^2)}\mathrm{Tr}(\gamma^\alpha k_\alpha-m)\gamma^\mu(\gamma^\beta(k+q)_\beta-m)\gamma^\nu\\&=-\frac{e^2}{2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{-mq_\beta}{(k^2-m^2)((k+q)^2-m^2)}\mathrm{Tr}[\gamma^\mu\gamma^\beta\gamma^\nu]\\&=-\frac{e^2}{2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{-2imq_\beta\epsilon^{\mu\beta\nu}}{(k^2-m^2)((k+q)^2-m^2)}\end{aligned} \tag{10.174}$$

然后,我们做Wick转动,也就是把$k_0=\omega$写成$\omega=ik_E$,(从闵氏空间变为容易处理的欧氏空间)这样关于k的积分转变为$\tilde k$的积分($\int d^3k=i\int d^3\tilde k$,$\tilde k^\mu=(k_E,k_x,k_y)$),即$i\int\frac{d^3\tilde k}{(2\pi)^3}\frac{1}{(\tilde k^2+m^2)((\tilde k+\tilde q)^2+m^2)}=i\arcsin\frac{\sqrt{\frac{|\tilde q|}{\tilde q^2+4m^2}}}{4\pi|\tilde q|}\simeq\frac{i}{8\pi|m|}$(设$|\tilde q|\ll$

$|m|$).我们发现$\Pi^{\mu\nu}(\tilde{q}) = -e^2\frac{m\tilde{q}_\beta\epsilon^{\mu\beta\nu}}{8\pi|m|}$.由此,

$$\begin{aligned} S_{eff} &= -e^2\frac{m}{8\pi|m|}\int\frac{d^3\tilde{q}}{(2\pi)^3}A_\mu(\tilde{q})i\tilde{q}_\beta\epsilon^{\mu\beta\nu}A_\nu(-\tilde{q})+... \\ &= e^2\frac{m}{8\pi|m|}\int d\tau d^2x\epsilon^{\mu\nu\lambda}A_\mu\partial_\nu A_\lambda+... \\ &= e^2\frac{m}{8\pi|m|}\int d\tau d^2x\epsilon^{\mu\nu\lambda}A_\mu\partial_\nu A_\lambda \end{aligned} \tag{10.175}$$

上述作用量称为Chern-Simons作用量,其代表一类典型的拓扑场论.由这个作用量,重新做Wick转动并对A_x求导可得x方向电流为[45]

$$J_x = \frac{\partial S_{eff}}{\partial A_x} = e^2\frac{m}{4\pi|m|}(-\partial_y\phi-\partial_t A_y) = \frac{\mathrm{sign}(m)}{2}\frac{e^2}{h}E_y, \tag{10.176}$$

因此我们发现K点对Hall电导的贡献是$\frac{\mathrm{sign}(m)}{2}\frac{e^2}{h}$.结合$K'$点就得到与先前讨论一致的结果.

- 虽然我们只计算了A^2阶的贡献,但是更仔细的高阶计算表明Chern-Simons项并不会有高阶微扰的修正,因此$\Pi^{\mu\nu}$在低能极限下是精确的.

Kane-Mele模型与量子自旋霍尔绝缘体

我们看到Haldane模型中费米子感受到等效磁场的作用使得时间反演对称性破缺进而具有非零的量子Hall 电导,但是在实际材料中等效磁场通常由自发产生的内磁场(磁性有序)或者自旋−轨道耦合诱导.对于强自旋轨道耦合系统,电子能量依赖于自旋与轨道角动量的乘积,即$\vec{L}\cdot\vec{S}$,可以看到自旋向上与向下的电子感受到大小相同但方向相反的由轨道角动量产生的等效磁场.基于这种考虑并且结合对石墨烯的估计,Kane和Mele提出一个定义在六角晶格上的紧束缚电子模型,即著名的Kane-Mele模型:[46]

$$\boxed{H_{KM} = -t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma}(\hat{c}^\dagger_{A,i,\sigma}\hat{c}_{B,j,\sigma}+\hat{c}^\dagger_{B,j,\sigma}\hat{c}_{A,i,\sigma}) - t'\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle,\sigma}\sigma e^{i\varphi_{ij}}(\hat{c}^\dagger_{A,i,\sigma}\hat{c}_{A,j,\sigma}+\hat{c}^\dagger_{B,i,\sigma}\hat{c}_{B,j,\sigma})} \tag{10.177}$$

与Haldane模型相比,这个模型考虑了电子的自旋自由度,并且电子的不同自旋取向感受相反的等效磁场,(次近邻求和依赖自旋的取向)可以看成是两个无自旋Haldane 模型的叠加.[47]傅里叶变换后可得

$$H_{KM} = \sum_{k,\sigma}\begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger_{A,k,\sigma} & \hat{c}^\dagger_{B,k,\sigma}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2t'g(k)\sigma & -tf(k)\\ -tf^*(k) & -2t'g(k)\sigma\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{A,k,\sigma}\\ \hat{c}_{B,k,\sigma}\end{pmatrix}.$$

[45]注意$A_\mu=(\phi,-A_x,-A_y)$,因此$S_{eff}\sim\int -A_x\partial_y\phi-(-A_x)\partial_t(-A_y)+...$

[46][Kane,Mele, Quantum Spin Hall Effect in Graphene, Phys.Rev.Lett. **95**,226801(2005); Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect, Phys.Rev.Lett. **95**,146802(2005)]

[47]由于石墨烯的自旋轨道耦合过弱,(强度正比于原子序数四次方,越重元素越强)实验上并未在此体系发现量子自旋霍尔效应.2007年德国Würzburg 大学Molenkamp组在HgCdTe量子阱中观察到量子自旋霍尔效应.[König et al., Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells, Science **318**,766(2007)]

如果我们引入四行一列的旋量$\hat{\psi}_k = (\hat{c}_{A,k,\uparrow}, \hat{c}_{B,k,\uparrow}, \hat{c}_{A,k,\downarrow}, \hat{c}_{B,k,\downarrow})^T$, 那么上述哈密顿量可以改写为紧凑的形式,即

$$
\begin{aligned}
&H_{KM} = \sum_k \hat{\psi}_k^\dagger \hat{H}(k) \hat{\psi}_k, \\
&\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} \hat{H}_\uparrow(k) & 0 \\ 0 & \hat{H}_\downarrow(k) \end{pmatrix}, \\
&\hat{H}_\uparrow(k) = \begin{pmatrix} 2t'g(k) & -tf(k) \\ -tf^*(k) & -2t'g(k) \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_\downarrow(k) = \begin{pmatrix} -2t'g(k) & -tf(k) \\ -tf^*(k) & 2t'g(k) \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

注意到自旋自由度彼此没有耦合,因此4×4哈密顿量分块对角为$\hat{H}_\uparrow(k), \hat{H}_\downarrow(k)$,两者的能谱与Haldane模型相同,即有$E_{k\pm,\sigma} = \pm\sqrt{t^2|f(k)|^2 + 4(t')^2 g^2(k)}$,这样总共有四个能带.

由于体系的z方向自旋守恒,因此对于自旋向上与向下的电子可以分别定义Chern数$\mathcal{C}_1^\uparrow$和$\mathcal{C}_1^\downarrow$,通过与前面Haldane模型完全相同的计算可以得到有质量Dirac费米子贡献的Chern数为

$$\mathcal{C}_1^\uparrow = \mathrm{sgn}(t'), \quad \mathcal{C}_1^\downarrow = -\mathrm{sgn}(t') \tag{10.178}$$

可以看到,自旋两个分量电子的总Chern数,或者电荷Chern数为零

$$\mathcal{C}_1^{charge} = \mathcal{C}_1^\uparrow + \mathcal{C}_1^\downarrow = 0 \tag{10.179}$$

这说明系统的霍尔电导为零,但是上下自旋Chern数之差,即所谓的自旋Chern数,[48]是非零的整数

$$\mathcal{C}_1^{spin} = \mathcal{C}_1^\uparrow - \mathcal{C}_1^\downarrow = 2\mathrm{sgn}(t') \neq 0 \tag{10.180}$$

这对应着量子化的自旋Hall电导$\sigma_{SH} = \mathcal{C}_1^{spin}\frac{\hbar}{2e}\frac{e^2}{h} = \pm\frac{e}{2\pi}$,[49]因此我们也把Kane-Mele模型的基态称为量子自旋Hall绝缘体.

Z_2拓扑不变量与拓扑绝缘体

在Kane-Mele模型中,如果z方向自旋S^z不守恒,那么采用自旋Chern数来表征就失效了.破坏自旋守恒的扰动可以来源于与其他能带的耦合,镜面对称的破缺(Rashba自旋-轨道耦合),相互作用或者无序.虽然它们的存在摧毁了自旋量子Hall电导的量子化但是却不会摧毁量子自旋Hall态的拓扑有序特性,这种有序性来源于时间反演($\mathcal{T}$)不变体系的Kramers定理会抑制满足时间反演要求的扰动在体系的边界打开能隙.因此量子自旋Hall态的基态与简单的绝缘体并不相同.这说明对于时间反演不变的体系,我们可以定义一类拓扑不变量,这就是Z_2拓扑指标.

[48] [Sheng,Weng,Sheng,Haldane,Quantum Spin-Hall Effect and Topologically Invariant Chern Numbers, Phys.Rev.Lett. **97**,036808(2006)]

[49] 注意到自旋流与电荷流的关系是$\vec{J}_s = \frac{\hbar}{2e}(\vec{J}_\uparrow - \vec{J}_\downarrow)$.

时间反演

让我们回忆时间反演操作$\mathcal{T}$对哈密顿量的作用.首先,在$\mathcal{T}$作用下,费米子算符$\hat{c}_{k\uparrow} \to \mathcal{T}\hat{c}_{k\uparrow}\mathcal{T}^{-1} = \hat{c}_{-k\downarrow}, \hat{c}_{k\downarrow} \to \mathcal{T}\hat{c}_{k\downarrow}\mathcal{T}^{-1} = -\hat{c}_{-k\uparrow}$, 而哈密顿量的其他部分则取复共轭.这样,对于

$$H_{KM} = \sum_{k,\sigma}\Big[2t'g(k)\sigma(\hat{c}^{\dagger}_{A,k,\sigma}\hat{c}_{A,k,\sigma} - \hat{c}^{\dagger}_{B,k,\sigma}\hat{c}_{B,k,\sigma}) - tf(k)\hat{c}^{\dagger}_{A,k,\sigma}\hat{c}_{B,k,\sigma} - tf^{*}(k)\hat{c}^{\dagger}_{B,k,\sigma}\hat{c}_{A,k,\sigma}\Big]$$

其时间反演后的哈密顿量是

$$\begin{aligned}\mathcal{T}H_{KM}\mathcal{T}^{-1} &= \sum_{k,\sigma}2t'g(k)\sigma(\hat{c}^{\dagger}_{A,-k,-\sigma}\hat{c}_{A,-k,-\sigma} - \hat{c}^{\dagger}_{B,-k,-\sigma}\hat{c}_{B,-k,-\sigma}) \\ &- t\sum_{k,\sigma}(f^{*}(k)\hat{c}^{\dagger}_{A,-k,-\sigma}\hat{c}_{B,-k,-\sigma} + f(k)\hat{c}^{\dagger}_{B,-k,-\sigma}\hat{c}_{A,-k,-\sigma}) \\ &= \sum_{k,\sigma}2t'g(-k)(-\sigma)(\hat{c}^{\dagger}_{A,k,\sigma}\hat{c}_{A,k,\sigma} - \hat{c}^{\dagger}_{B,k,\sigma}\hat{c}_{B,k,\sigma}) \\ &- t\sum_{k,\sigma}(f^{*}(-k)\hat{c}^{\dagger}_{A,k,\sigma}\hat{c}_{B,k,\sigma} + f(-k)\hat{c}^{\dagger}_{B,k,\sigma}\hat{c}_{A,k,\sigma}). \quad (10.181)\end{aligned}$$

注意到$g(-k) = -g(k), f(-k) = f^{*}(k)$,那么上述哈密顿量与$H_{KM}$完全相同,即

$$\mathcal{T}H_{KM}\mathcal{T}^{-1} = H_{KM} \Rightarrow [\mathcal{T}, H_{KM}] = 0, \quad (10.182)$$

这说明H_{KM}描述的Kane-Mele模型具有时间反演对称性.当然,我们也可以用更紧凑的形式进行表述.首先,在$\mathcal{T}$作用下

$$\mathcal{T}\hat{\psi}_k\mathcal{T}^{-1} = \begin{pmatrix}\hat{c}_{A,-k,\downarrow}\\ \hat{c}_{B,-k,\downarrow}\\ -\hat{c}_{A,-k,\uparrow}\\ -\hat{c}_{B,-k,\uparrow}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\-1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{A,-k,\uparrow}\\ \hat{c}_{B,-k,\uparrow}\\ \hat{c}_{A,-k,\downarrow}\\ \hat{c}_{B,-k,\downarrow}\end{pmatrix} = i(s^{y}\otimes I_{2\times 2})\hat{\psi}_{-k}. \quad (10.183)$$

这里我们引入了矩阵的直积(也叫做Kronecher积)$A \otimes B$,具体而言对于$m \times n$矩阵A以及$p \times q$矩阵B有,

$$A \otimes B = \begin{pmatrix}A_{11}B & ... & ... & A_{1n}B\\ ... & ... & ... & ...\\ A_{m1}B & ... & ... & A_{mn}B\end{pmatrix}. \quad (10.184)$$

矩阵直积有下面一些性质:

(1)设K为常数,那么$K(A \otimes B) = (KA) \otimes B = A \otimes (KB)$;

(2)$(A \otimes B)^{T} = A^{T} \otimes B^{T}$;

(3)$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$;

(4)若有$m\times n$矩阵A,$p\times q$矩阵B,$n\times s$矩阵C以及$q\times t$矩阵D,则有$(A\otimes B)(C\otimes D) = (AC) \otimes (BD)$;

(5)对于可逆的$n\times n$复数矩阵A,B有$(A\otimes B)^{-1}=A^{-1}\otimes B^{-1}$;

(6)若$n\times n$复数矩阵A,B是幺正矩阵,那么有$A\otimes B$也是幺正矩阵;

(7)对于$m\times m$复数矩阵A和$n\times n$复数矩阵B有$\det(A\otimes B)=(\det(A))^n(\det(B))^m$.

同时,$\tau^{\alpha=x,y,z}$, $s^{\alpha=x,y,z}$分别是作用在A,B子格空间和自旋空间的Pauli算符.另一方面,根据先前的计算有$\mathcal{T}\hat{H}(k)\mathcal{T}^{-1}=\hat{H}^*(k)$.这样我们有,

$$\begin{aligned}\mathcal{T}H_{KM}\mathcal{T}^{-1} &= \sum_k \mathcal{T}\hat{\psi}_k^\dagger\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}\hat{H}(k)\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}\hat{\psi}_k\mathcal{T}^{-1}\\ &= \sum_k \hat{\psi}_{-k}^\dagger(is^y\otimes I_{2\times 2})^\dagger\mathcal{T}\hat{H}(k)\mathcal{T}^{-1}(is^y\otimes I_{2\times 2})\hat{\psi}_{-k}\\ &= \sum_k \hat{\psi}_{-k}^\dagger(is^y\otimes I_{2\times 2})^\dagger\hat{H}^*(k)(is^y\otimes I_{2\times 2})\hat{\psi}_{-k}. \quad (10.185)\end{aligned}$$

而

$$H_{KM}=\sum_k\hat{\psi}_k^\dagger\hat{H}(k)\hat{\psi}_k=\sum_k\hat{\psi}_{-k}^\dagger\hat{H}(-k)\hat{\psi}_{-k}. \quad (10.186)$$

这样时间反演不变性意味着$(is^y\otimes I_{2\times 2})^\dagger\hat{H}^*(k)(is^y\otimes I_{2\times 2})=\hat{H}(-k)$.在讨论涉及拓扑的单粒子问题时,我们喜欢忽略哈密顿量中的费米子算符而把所有关于费米子算符的操作全部归并到对于动量空间哈密顿$\hat{H}(k)$(也叫做Bloch哈密顿量)的操作.这样结合上面的结果,我们可以定义仅作用于单粒子哈密顿量$\hat{H}(k)$和相应的本征态$|u_n(k)\rangle$的时间反演操作

$$\hat{\Theta}\equiv(is^y\otimes I_{2\times 2})K, \quad (10.187)$$

这里K是取复共轭.因此,$\mathcal{T}$变换下有$\hat{H}(k)\to\hat{\Theta}^{-1}\hat{H}(k)\hat{\Theta}$,而时间反演不变性意味着$\hat{\Theta}^{-1}\hat{H}(k)\hat{\Theta}=\hat{H}(-k)$.

对于Kane-Mele模型,我们发现,

$$\hat{\Theta}^{-1}\hat{H}(k)\hat{\Theta}=\begin{pmatrix}0 & -I_{2\times 2}\\ I_{2\times 2} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{H}_\uparrow^*(k) & 0\\ 0 & \hat{H}_\downarrow^*(k)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & I_{2\times 2}\\ -I_{2\times 2} & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{H}_\downarrow^*(-k) & 0\\ 0 & \hat{H}_\uparrow^*(-k)\end{pmatrix} \quad (10.188)$$

这样时间反演不变性$\hat{\Theta}^{-1}\hat{H}(k)\hat{\Theta}=\hat{H}(-k)$要求$\hat{H}_\downarrow^*(-k)=\hat{H}_\uparrow(k)$.

空间反演

类似的,根据定义,空间反演(中心反演)操作$\mathcal{P}$下费米子算符的变换规则是$\hat{c}_{A,k,\sigma}\to\hat{c}_{B,-k,\sigma},\hat{c}_{B,k,\sigma}\to\hat{c}_{A,-k,\sigma}$.(注意到空间反演交换了$A,B$子格)这样

$$\mathcal{P}\hat{\psi}_k\mathcal{P}^{-1}=\begin{pmatrix}\hat{c}_{B,-k,\uparrow}\\ \hat{c}_{A,-k,\uparrow}\\ \hat{c}_{B,-k,\downarrow}\\ \hat{c}_{A,-k,\downarrow}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{A,-k,\uparrow}\\ \hat{c}_{B,-k,\uparrow}\\ \hat{c}_{A,-k,\downarrow}\\ \hat{c}_{B,-k,\downarrow}\end{pmatrix}=(I_{2\times 2}\otimes\tau^x)\hat{\psi}_{-k}. \quad (10.189)$$

对于哈密顿量H_{KM}则有$\mathcal{P}H_{KM}\mathcal{P}^{-1}=\sum_k \hat{\psi}^\dagger_{-k}(I_{2\times2}\otimes\tau^x)^\dagger\hat{H}(k)(I_{2\times2}\otimes\tau^x)\psi_{-k}$.因此作用于单粒子哈密顿$\hat{H}(k)$的空间反演变换可以写成$\hat{\pi}=(I_{2\times2}\otimes\tau^x$.对于空间反演不变性的要求自然有$\hat{\pi}^{-1}\hat{H}(k)\hat{\pi}=\hat{H}(-k)(\hat{\pi}^\dagger=\pi^{-1}=\hat{\pi})$.

对于Kane-Mele模型,我们发现,

$$\hat{\Theta}^{-1}\hat{H}(k)\hat{\Theta}=\begin{pmatrix}\tau^x & 0\\ 0 & \tau^x\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{H}_\uparrow(k) & 0\\ 0 & \hat{H}_\downarrow(k)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\tau^x & 0\\ 0 & \tau^x\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\tau^x\hat{H}_\uparrow(k)\tau^x & 0\\ 0 & \tau^x\hat{H}_\downarrow(k)\tau^x\end{pmatrix} \tag{10.190}$$

这样空间反演不变性$\hat{\pi}^{-1}\hat{H}(k)\hat{\pi}=\hat{H}(-k)$要求$\tau^x\hat{H}_{\sigma=\uparrow,\downarrow}(k)\tau^x=\hat{H}_{\sigma=\uparrow,\downarrow}(-k)$.对于$\hat{H}_\uparrow(k)=-t\mathrm{Re}f(k)\hat{\tau}^x+t\mathrm{Im}f(k)\hat{\tau}^y+2t'g(k)\hat{\tau}^z$,空间反演后第二和第三项改变一个负号,同时利用$\mathrm{Re}f(-k)=\mathrm{Re}f(k),\mathrm{Im}f(-k)=-\mathrm{Im}f(k),g(-k)=-g(k)$我们发现确实满足空间反演不变性的要求.

时空反演不变性与Fu-Kane公式

由上面关于时间反演和空间反演的讨论可以看到,Kane-Mele模型在这两者操作下都不变,因此具有时间和空间反演不变性.

事实上,4×4矩阵$\hat{H}(k)$可以利用单位矩阵I,五个Dirac矩阵Γ^a以及十个Dirac矩阵的对易子$\Gamma^{ab}=[\Gamma^a,\Gamma^b]/(2i)$写成如下一般的形式,

$$\hat{H}(k)=d_0(k)I+\sum_{a=1}^{5}d_a(k)\Gamma^a+\sum_{a<b}d_{ab}(k)\Gamma^{ab}, \tag{10.191}$$

这里d_0,d_a,d_{ab}都是动量依赖的实系数(来自$\hat{H}(k)$厄密性的要求),Dirac矩阵Γ^a的一个常用表示是

$$\Gamma^{1,2,3,4,5}=(I_{2\times2}\otimes\tau^x,I_{2\times2}\otimes\tau^y,s^x\otimes\tau^z,s^y\otimes\tau^z,s^z\otimes\tau^z) \tag{10.192}$$

我们可以验证

$$\begin{aligned}
&\hat{\Theta}^{-1}\Gamma^1\hat{\Theta}=\Gamma^1\\
&\hat{\Theta}^{-1}\Gamma^a\hat{\Theta}=-\Gamma^a \quad (a>1)\\
&\hat{\Theta}^{-1}\Gamma^{1b}\hat{\Theta}=\Gamma^{1b} \quad (b>1)\\
&\hat{\Theta}^{-1}\Gamma^{ab}\hat{\Theta}=-\Gamma^{ab} \quad (1<a<b)\\
&\hat{\pi}^{-1}\Gamma^1\hat{\pi}=\Gamma^1\\
&\hat{\pi}^{-1}\Gamma^a\hat{\pi}=-\Gamma^a \quad (a>1)\\
&\hat{\pi}^{-1}\Gamma^{1b}\hat{\pi}=-\Gamma^{1b} \quad (b>1)\\
&\hat{\pi}^{-1}\Gamma^{ab}\hat{\pi}=\Gamma^{ab} \quad (1<a<b).
\end{aligned}$$

下面,让我们考虑时间反演和空间反演对称性对于实系数d_0,d_a,d_{ab}的要

求.首先,时间反演变换下有

$$\Theta^{-1}\hat{H}(k)\Theta = d_0(k)I + d_1(k)\Gamma^1 - \sum_{a=2}^{5} d_a(k)\Gamma^a + \sum_{b=2}^{5} d_{1b}(k)\Gamma^{1b} - \sum_{1<a<b}^{5} d_{ab}(k)\Gamma^{ab}, \tag{10.193}$$

对比$\hat{H}(-k)$可知时间反演对称性要求$d_0, d_1, d_{1,b}$是k的偶函数而d_a, d_{ab}是奇函数.接下来,在空间反演变换下有

$$\pi^{-1}\hat{H}(k)\pi = d_0(k)I + d_1(k)\Gamma^1 - \sum_{a=2}^{5} d_a(k)\Gamma^a - \sum_{b=2}^{5} d_{1b}(k)\Gamma^{1b} + \sum_{1<a<b}^{5} d_{ab}(k)\Gamma^{ab}, \tag{10.194}$$

对比$\hat{H}(-k)$可知空间反演对称性要求d_0, d_1, d_{ab}是k的偶函数而d_a, d_{1b}是奇函数.因此,一个同时具有时间与空间反演对称性的体系其所有Γ^{ab}的系数都为零,即时间与空间反演不变的哈密顿量可以写成

$$\boxed{\hat{H}(k) = d_0(k)I + \sum_{a=1}^{5} d_a(k)\Gamma^a} \tag{10.195}$$

并且$d_0(-k) = d_0(k), d_1(-k) = d_1(k), d_{a>1}(-k) = -d_{a>1}(k)$.例如Kane-Mele模型的哈密顿量$\hat{H}(k) = d_1(k)\Gamma^1 + d_2(k)\Gamma^2 + d_5(k)\Gamma^5$.($d_1(k) = -t\mathrm{Re}f(k), d_2(k) = -t\mathrm{Im}f(k), d_5(k) = 2t'g(k)$)

我们知道,在布里渊区中,点$\vec{k}$与相差任意个倒格矢$\vec{G}$的点$\vec{k}+\vec{G}$是等价的.考虑到时间反演对称把$\vec{k}$与$-\vec{k}$联系在一起,而$-\vec{k}$与$-\vec{k}+\vec{G}$等价.这样存在一些动量$\vec{k}$使得$\vec{k} = -\vec{k}+\vec{G}$成立,满足这个关系的点叫做时间反演不变点,记为$\vec{\Gamma}_i$,(其他等价的点这里就不明确写出了)

$$\vec{\Gamma}_i = \frac{1}{2}\vec{G}. \tag{10.196}$$

对于d维超立方晶格有$\vec{G} = n_1 2\pi(1,0...0) + n_2 2\pi(0,1...0) + n_d 2\pi(0,0...1)(n_i = 0,1)$.例如在一维就是两个点,即布里渊区中心点$k=0$和边界点$\pi$,二维正方晶格有四个点,即$\Gamma$点$(0,0)$,$M$点$(\pm\pi,0),(0\pm\pi)$和$K$点$(\pi,\pi)$.

现在,时空反演不变的哈密顿量$\hat{H}(k) = d_0(k)I + \sum_{a=1}^{5} d_a(k)\Gamma^a$在$\vec{\Gamma}_i$简化为$\hat{H}(\vec{\Gamma}_i) = d_0(\vec{\Gamma}_i)I + d_1(\vec{\Gamma}_i)\Gamma^1$.(利用$d_{a>1}(-k) = -d_{a>1}(k)$和$\vec{\Gamma}_i = -\vec{\Gamma}_i + \vec{G}$可得其他系数为零)

既然$\Gamma^1 = \hat{\pi}$,那么我们设时间反演不变点$\vec{\Gamma}_i$处$\hat{H}(\vec{\Gamma}_i)$的本征态为$|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle$,这样有

$$\hat{H}(\vec{\Gamma}_i)|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle = (d_0(\vec{\Gamma}_i)I + d_1(\vec{\Gamma}_i)\Gamma^1)|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle = \lambda_\pm|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle, \quad \lambda_\pm = d_0(\vec{\Gamma}_i) \pm |d_1(\vec{\Gamma}_i)|$$

由于我们研究的是绝缘体,可以设电子占据能量更低的λ_-对应的本征态.我们知道体系具有空间反演对称性,因此可以计算λ_-本征态在$\hat{\pi}$下的本征值,也就是宇称δ_i,即

$$\hat{\pi}|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle = \Gamma^1|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle = \delta_i|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle. \tag{10.197}$$

对本征方程$(d_0(\vec{\Gamma}_i)I + d_1(\vec{\Gamma}_i)\Gamma^1)|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle = \lambda_-|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle$ 变形可得

$$\Gamma^1|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle = \frac{\lambda_- - d_0(\vec{\Gamma}_i)}{d_1(\vec{\Gamma}_i)}|u(\vec{\Gamma}_i)\rangle \tag{10.198}$$

这说明宇称$\delta_i = \frac{\lambda_- - d_0(\vec{\Gamma}_i)}{d_1(\vec{\Gamma}_i)} = -\frac{|d_1(\vec{\Gamma}_i)|}{d_1(\vec{\Gamma}_i)}$. 换句话说,$\vec{\Gamma}_i$处占据态波函数的宇称$\delta_i$就系数$d_1(\vec{\Gamma}_i)$决定,即[50]

$$\boxed{\delta_i = -\text{sign}(d_1(\vec{\Gamma}_i))} \tag{10.199}$$

利用所有时间反演不变点的宇称δ_i就可以定义Z_2拓扑不变量ν:

$$\boxed{(-1)^\nu = \prod_i \delta_i} \tag{10.200}$$

这个结果在文献中称为Fu-Kane公式.当$\nu = 0$时称为平凡的绝缘体而$\nu = 1$称为拓扑绝缘体(topological insulator).(更明确地说,Z_2拓扑不变量的定义依赖于时间反演不变性,因此这类通过Z_2指标表征的拓扑绝缘体又叫做时间反演不变或者时间反演对称保护的拓扑绝缘体)

- 量子自旋Hall绝缘体也被称为二维的时间反演不变的拓扑绝缘体.[51]
- 拓扑绝缘体可以用Z_2拓扑不变量来刻画,对于Kane-Mele模型而言相当于具有非零自旋Chern数对应拓扑绝缘体,而为零的自旋Chern数对应通常的能带绝缘体(拓扑平凡的).

  更一般的,对于仅有时间反演对称的体系,δ_i由下式定义,

$$\delta_i = \frac{\sqrt{\det[w(\vec{\Gamma}_i)]}}{\text{Pf}[w(\vec{\Gamma}_i)]} = \pm 1. \tag{10.201}$$

这里w矩阵的矩阵元是$w_{mn}(k) = \langle u_m(-k)|\hat{\Theta}|u_n(k)\rangle$,$(w_{mn}(\Gamma_i) = -w_{mn}(\Gamma_i))|u_n(k)\rangle$是Bloch哈密顿量$\hat{H}(k)$的已被电子占据的本征态.det, Pf分别是矩阵的行列式和Pfaffian.[52]在三维空间,时间反演不变动量可以写成$\vec{\Gamma}_{i=(n_1n_2n_3)} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$,$n_{i=1,2,3} = 0, 1$,$\vec{b}_{i=1,2,3}$ 为动量空间的基矢.这样我们可以定义四个Z_2指标,即$\nu_0, \nu_1, \nu_2, \nu_3$:[53]

$$\begin{aligned}(-1)^{\nu_0} &= \prod_{n_1,n_2,n_3=0,1} \delta_{n_1n_2n_3} \\ (-1)^{\nu_{i=1,2,3}} &= \prod_{n_{j\neq i}=0,1, n_i=1} \delta_{n_1n_2n_3}.\end{aligned} \tag{10.202}$$

[50][Fu,Kane,Topological insulators with inversion symmetry,Phys.Rev.B **76**,045302(2007)]

[51]拓扑绝缘体的简单定义:与通常绝缘体一样具有体能隙,但表面是时间反演对称保护的无能隙态.

[52]对于实反对称矩阵A 有$\det[A] = (\text{Pf}[A])^2$.例如$A = \begin{pmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{pmatrix}$,那么$\text{Pf}[A] = a$而$\det[A] = a^2$.当$a > 0$时,$\sqrt{\det[A]} = \text{Pf}[A]$而$a < 0$时$\sqrt{\det[A]} = -\text{Pf}[A]$, 因此$\sqrt{\det[A]}/\text{Pf}[A] = \pm 1$.

[53][Fu,Kane,Mele, Topological Insulators in Three Dimensions, Phys.Rev.Lett. **98**, 106803(2007)]

当$\nu_0=1$时体系为强拓扑绝缘体,$\nu_0=0$,有某个$\nu_{i=1,2,3}=1$则为弱拓扑绝缘体,最后所有指标都为0对应平凡的绝缘体.当体系存在无序或者相互作用时,弱拓扑绝缘体可以绝热演化为平凡绝缘体,因此在物理上我们可以把弱拓扑绝缘体看作是平凡绝缘体.

- 对于具体的材料体系,$Pb_xSn_{1-x}Te$是弱拓扑绝缘体,Bi0.9Sb0.1是强拓扑绝缘体;
- Bi_2Te_3和Sb_2Te_3的每个表面都只有一个Dirac cone,因此是最为简单的强拓扑绝缘体;
- 对于时间反演不变的拓扑绝缘体,其背向散射(backscattering)为零,也就是说对于非磁性杂质散射势$\hat{V}$,$\langle -k,\downarrow|\hat{V}|k,\uparrow\rangle$.由于背向散射为零,拓扑绝缘体不容易出现无序导致的局域化现象,这被称为反局域化现象.
- 对于拓扑绝缘体更具体的讨论可以参考沈顺清的专著《Topological Insulators:Dirac Equation in Condensed Matter》,Bernevig,Hughes的书《Topological Insulators and Topological Superconductors》以及Asbóth,Oroszlány,Pályi的书《A Short Course on Topological Insulators:Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions》;
- 关于无相互作用拓扑绝缘体与超导体的研究实际上已经很成熟,[54] 因此当前的研究主要关注相互作用拓扑绝缘体的分类和表征以及实验检验. [55]

作为这一部分的结尾,让我们考虑一个简单的例子,也就是有自旋的Su-Schrieffer-Heeger(SSH)模型:

$$H_{SSH}=-(t-\delta t)\sum_{k\sigma}(\hat{c}^\dagger_{Ak\sigma}\hat{c}_{Bk\sigma}+\hat{c}^\dagger_{Bk\sigma}\hat{c}_{Ak\sigma})-(t+\delta t)\sum_{k\sigma}(e^{ik}\hat{c}^\dagger_{Bk\sigma}\hat{c}_{Ak\sigma}+e^{-ik}\hat{c}^\dagger_{Ak\sigma}\hat{c}_{Bk\sigma})$$

其对应的Bloch哈密顿量可以写成$\hat{H}(k)=d_1(k)\Gamma^1+d_2(k)\Gamma^2$,$d_1(k)=-(t-\delta t)-(t+\delta t)\cos k$, $d_2(k)=-(t+\delta t)\sin k$.由于$d_1(k)$为偶函数,$d_2(k)$为奇函数,因此有

[54] [Schnyder,Ryu,Furusaki,Ludwig, Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions, Phys.Rev.B **78**,195125(2008);Kitaev, Periodic table for topological insulators and superconductors, AIP Conf. Proc. **1134**,22(2019);Chiu,Teo,Schnyder,Ryu, Classification of topological quantum matter with symmetries, Rev.Mod.Phys. **88**,035005(2016)]

[55] [Fidkowski,Kitaev, Effects of interactions on the topological classification of free fermion systems, Phys.Rev.B **81**, 134509(2010);Pollmann,Berg,Turner,Oshikawa, Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems, Phys.Rev.B **85**,075125(2012);Levin,Stern, Fractional Topological Insulators, Phys.Rev.Lett. **103**,196803(2009);Hohenadler,Assaad,Correlation effects in two-dimensional topological insulators,J. Phys.:Condens.Matter **25**,143201(2013);Chen,Gu,Liu,Wen, Symmetry protected topological orders and the group cohomology of their symmetry group, Phys.Rev.B textbf87,155114(2013);Rachel, Interacting topological insulators:a review, Rep.Prog.Phys. **81**,116501(2018)]

自旋SSH模型具有时间和空间反演对称性.这样,根据先前的讨论,我们知道时空反演对称系统的Z_2拓扑不变量由时间反演不变点处宇称决定(Fu-Kane公式),在当前的一维体系中即有($\Gamma_i = 0, \pi$)

$$(-1)^{\nu} = \delta_{k=0}\delta_{k=\pi} \tag{10.203}$$

而$\delta(\Gamma_i) = -\text{sign}(d_1(\Gamma_i))$,代入$d_1$的具体形式可得

$$(-1)^{\nu} = \text{sign}(-t)\text{sign}(\delta t) = -\text{sign}(t)\text{sign}(\delta t) \tag{10.204}$$

这样我们发现当$t, \delta t$同号时$\nu = 1$,这对应一维拓扑绝缘体,而两者异号时$\nu = 0$对应平凡的绝缘体.注意到这个结果与先前Berry相位和单位d矢量的计算结果相吻合.($t, \delta t$同号时Berry相位是π,异号时Berry相位是0,这样拓扑绝缘态对应非零的Berry相位而平庸态对应为零的Berry相位)

- 有相互作用SSH模型的相图和拓扑态的表征可以参考文献中的详细计算.[56]

相互作用体系的拓扑不变量

另外,注意到先前讨论的Z_2不变量原则上仅对无相互作用电子体系成立,其相互作用推广对于理解电子关联和能带拓扑之间的关系具有重要意义.例如汪忠等建议的Green 函数形式或者拓扑哈密顿量形式.[57]让我们考虑自旋守恒的体系,例如Kane-Mele模型,在Green函数形式中,最核心的是体系零温极限下的自旋为σ的单电子Green函数$G_\sigma(i\omega, k)$的逆所满足的本征方程:

$$(G_\sigma(i\omega, k))^{-1}|\alpha(i\omega, k)\rangle = \mu_\alpha(i\omega, k)|\alpha(i\omega, k)\rangle \tag{10.205}$$

利用零频极限时的本征态$|k\alpha\rangle \equiv |\alpha(i\omega = 0, k)\rangle$,我们可以把自旋依赖的Chern数表示为

$$C_1^\sigma = \frac{1}{2\pi}\int d^2k\mathcal{F}_{xy} \tag{10.206}$$

$\mathcal{F}_{xy} = \partial_{k_x}\mathcal{A}_y - \partial_{k_y}\mathcal{A}_x, \mathcal{A}_i = -i\sum_{\mu_\alpha>0}\langle k\alpha|\partial_{k_i}|k\alpha\rangle$.这样自旋Chern数就是$C_1^{spin} = C_1^{\uparrow} - C_1^{\downarrow}$.进一步,我们可以把零频Green函数的逆定义为所谓的拓扑哈密顿量,

$$h_t(k) \equiv -G^{-1}(i\omega = 0, k). \tag{10.207}$$

然后就可以把拓扑哈密顿量按照正常的电子哈密顿量那样进行分析来得到体系的拓扑表征.需要说明,这种形式通常只有当体系能够绝热演化回无相互作用极限时才严格成立.

[56][Guo,Shen,Topological phase in a one-dimensional interacting fermion system, Phys.Rev.B **84**,195107(2011)]

[57][Wang,Zhang,Simplified Topological Invariants for Interacting Insulators,Phys.Rev.X **2**,031008 (2012);Wang,Yan,Topological Hamiltonian as an exact tool for topological invariants,J.Phys.:Condens.Matter **25**,155601(2013)]

这里,让我们再介绍另一种适用于相互作用和无序情况的形式.回忆在讨论费米液体的Luttinger定理时,我们对于一维费米子体系引入了扭转算符$U = e^{i\frac{2\pi}{L_x}\sum_{j=1}^{N_s} x_j \hat{n}_j}(x_j = ja, L = N_s a)$.根据Gilardoni等的讨论,让我们把一维扭转算符推广为如下形式: [58]

$$\hat{Z}_\sigma(\delta\vec{k}) = e^{i\delta\vec{k}\cdot\sum_j \vec{R}_j \hat{n}_{j\sigma}} \tag{10.208}$$

这里$\hat{n}_{j\sigma}$是自旋为σ电子在j格点的粒子数算符,$\vec{R}_j$是j格点的空间坐标,$\delta\vec{k}$是扭转动量.若$\hat{n}_{j\sigma} = \sum_\eta \hat{c}^\dagger_{j\eta\sigma}\hat{c}_{j\eta\sigma}$,$\hat{c}_{j\eta\sigma}$是$j$格点,自旋为$\sigma$,轨道(子格)指标为$\eta$ 的电子算符,那么容易得到$\hat{Z}_\sigma(\delta\vec{k})\hat{c}^\dagger_{j\eta\sigma}\hat{Z}^\dagger_\sigma(\delta\vec{k}) = e^{i\delta\vec{k}\cdot\vec{R}_j}\hat{c}^\dagger_{j\eta\sigma}$.这样,对于有能隙的体系$\hat{H}$,若$|\Psi_0\rangle$是周期边界下的(非简并)基态,那么$\hat{Z}_\sigma(\delta\vec{k})|\Psi_0\rangle \equiv |\Psi_0(\delta\vec{k})\rangle$就是哈密顿量$\hat{Z}_\sigma(\delta\vec{k})\hat{H}\hat{Z}^\dagger_\sigma(\delta\vec{k})$的基态.因此,

$$\langle\Psi_0|\hat{Z}_\sigma(\delta\vec{k})|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\Psi_0(\delta\vec{k})\rangle. \tag{10.209}$$

对于Kane-Mele和Bernevig-Hughes-Zhang模型,由上式可以构造如下量:

$$\rho_\sigma = \frac{\langle\Psi_0|\hat{Z}_\sigma(\delta k_x, \delta k_y)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\hat{Z}_\sigma(\delta k_x, 0)|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\hat{Z}_\sigma(0, \delta k_y)|\Psi_0\rangle} = |\rho_\sigma|e^{i\pi C_1^\sigma}. \tag{10.210}$$

这里$\delta k_x, \delta k_y$可以取为$2\pi/L_x, 2\pi/L_y$(L_x, L_y是x, y方向的尺度).可以看到ρ_σ的相位与体系的自旋依赖Chern数C_1^σ 直接相关.

- 扭转算符的基态平均值可用来区分拓扑绝缘体与拓扑平庸绝缘体.

[58] [Gilardoni,Becca,Marrazzo,Parola,A real-space many-body marker for correlated Z_2 topological insulators,Phys.Rev.B **106**,L161106(2022).]

Kitaev超导链模型:玩具也好用*

在一维量子横场Ising模型一节的讨论中,通过Jordan-Wigner变换我们已经得到了Kitaev超导链模型

$$\boxed{\hat{H}=-t\sum_n(\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+1}+\hat{c}_{n+1}^\dagger\hat{c}_n)+\Delta\sum_n(\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_{n+1}^\dagger+\hat{c}_{n+1}\hat{c}_n)-\mu\sum_n\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_n} \tag{10.211}$$

系统的三个参数是化学势μ,最近邻跃迁t和最近邻配对强度Δ,为讨论简单已假设配对强度是实数.如果把复费米子$\hat{c}$分解为两个Majorana费米子$\hat{c}_n=\frac{1}{2}(\hat{\gamma}_n^1+i\hat{\gamma}_n^2)$,那么这个模型也有如下的形式

$$\hat{H}=-\frac{it}{2}\sum_n(\hat{\gamma}_n^1\hat{c}_{n+1}^2-\hat{\gamma}_n^2\hat{\gamma}_{n+1}^1)-\frac{i\Delta}{2}\sum_n(\hat{\gamma}_n^1\hat{\gamma}_{n+1}^2+\hat{\gamma}_n^2\hat{\gamma}_{n+1}^1)-\frac{\mu}{2}\sum_n(1+\hat{\gamma}_n^1\hat{\gamma}_n^2) \tag{10.212}$$

注意到当$t=\Delta=0$时,我们只剩下同格点的Majorana费米子,而如果$\mu=0,t=\Delta$并考虑开边界,那么我们发现$\hat{H}=-it\sum_{n=1}^{N_s-1}\hat{\gamma}_n^1\hat{\gamma}_{n+1}^2$, 这表明体系存在两个零能的Majorana模式$\hat{\gamma}_1^2$和$\hat{\gamma}_{N_s}^1$, 这两个模式完全局域化在边界上,就是Majorana 零模.在一般情况下,我们引入Nambu旋量$\hat{\Psi}=(\hat{c}_1,\hat{c}_2...\hat{c}_{N_s},\hat{c}_1^\dagger,\hat{c}_2^\dagger...\hat{c}_{N_s}^\dagger)^T$这样我们得到

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\hat{\Psi}^\dagger H_{BdG}\hat{\Psi} \tag{10.213}$$

我们给出开边界时4格点的H_{BdG}矩阵

$$H_{BdG}=\begin{pmatrix}-\mu&-t&0&0&0&\Delta&0&0\\-t&-\mu&-t&0&-\Delta&0&\Delta&0\\0&-t&-\mu&-t&0&-\Delta&0&\Delta\\0&0&-t&-\mu&0&0&-\Delta&0\\0&-\Delta&0&0&\mu&t&0&0\\\Delta&0&-\Delta&0&t&\mu&t&0\\0&\Delta&0&-\Delta&0&t&\mu&t\\0&0&\Delta&0&0&0&t&\mu\end{pmatrix} \tag{10.214}$$

这里采用的基矢由粒子空穴空间$\hat{\tau}^z$和格点态$|n\rangle=(0,0...1...0)^T$ 直乘构成的,那

么有

$$\hat{\Psi}^\dagger\hat{\tau}^z|n\rangle\langle n|\hat{\Psi} = \hat{\Psi}^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{\Psi}$$

$$= \hat{\Psi}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{\Psi} = \hat{c}_n^\dagger\hat{c}_n - \hat{c}_n\hat{c}_n^\dagger = 2\hat{c}_n^\dagger\hat{c}_n - 1$$

这样我们可以写出H_{BdG}的抽象形式

$$H_{BdG} = -\mu\sum_n \hat{\tau^z}|n\rangle\langle n| - \sum_n[(t\hat{\tau}^z + i\Delta\hat{\tau}^y)|n\rangle\langle n+1| + \text{h.c.}] \tag{10.215}$$

根据上一节给出的粒子空穴变换算符的定义$\hat{P} = \hat{\tau}^x K$,我们有 $\hat{P}\hat{\tau}^z\hat{P}^{-1} = -\hat{\tau}^z$,$\hat{P}i\hat{\tau}^y\hat{P} = -i\hat{\tau}^y$. 因此在粒子空穴变化下BdG哈密顿量是$\hat{P}H_{BdG}\hat{P}^{-1} = -H_{BdG}$,即满足粒子空穴对称性.显然,$\hat{P}^2 = +1$,且由于系统哈密顿量矩阵取实值,因此也满足时间反演对称且$\hat{T}^2 = +1$,那么根据十重分类表可知其是DI类.(如果认为电子已经在外磁场下极化,则是D类)

相变*

通过在实空间直接研究BdG哈密顿量的能谱,我们会发现只要满足条件$|\mu| < 2|t|$,那么体系总存在对称分布的准零能态.注意到这个准零能态实际上从$\Delta = \mu = 0$演化而来因而就是在极限情况下分析的Majorana零模态,只不过对于有限系统,两个零模态实际上在空间总是有有限的耦合,这导致能量不是精确的零能,而是相对零能的一个指数小能级(e^{-N_s}).当$|\mu| > 2|t|$时,零能态消失,体系只存在块体能级,这对应没有Majorana边界态的平凡态情况.(如图10.15)

我们也可以从对称性的角度来理解Majorana边界态的稳定性.首先注意到系统的哈密顿量描述一个超导体,因此有粒子空穴对称性,这样系统的单粒子能谱关于零能对称.当化学势等于零时,我们有两个简并能级对应于空间上彼此分离的局域化Majorana费米子模式.此时我们尝试把其中一个能级从零能移走是不可能的,因为这样违背粒子空穴对称性.可能的方式是把两个局域Majoranna费米子模式互相耦合,但是由于两者空间上分离且有能隙,这种耦合也不可能.因此,唯一劈裂Majorana零模式的方式是封闭能隙,而这就是在化学势μ很大时发

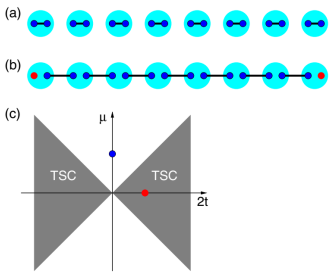


Figure 10.15: Kitaev链模型的两类相:(a)平凡相中每个格点的Majorana费米子可看成束缚为通常费米子;(b) 拓扑相中相邻格点的Majoranas费米子束缚着使得链边界有未配对的Majorana费米子.(c)Kitaev链模型的相图显示拓扑态与平凡态.[14]

生的物理.这样,我们看到Kitaev链边界上的分离零能模式由正负能之间的对称性(粒子空穴对称性)以及块体没有零能激发两个条件保护,而并不需要模型参数的精细调节.

动量空间哈密顿量*

我们也可以完全排除边界态,从具有周期性的块体能谱或者说体系的动量空间结构来审视相变的特性. 做如下傅里叶变换:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikn}|k\rangle, \quad |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_n e^{-ikn}|n\rangle \tag{10.216}$$

周期边界条件可以表述为$\langle k|n=0\rangle = \langle k|n=N_s\rangle$, 即有$1=e^{ikN_s}$ 则所有动量的取值是$k=2\pi/N_s p, p=0,1,2...(N_s-1)$共有$N_s$ 个.当体系的格点数目足够巨大时,动量的取值范围可以几乎连续地取遍第一布里渊区$[-\pi,\pi]$.由于H_{BdG} 具有平移不变性,那么动量空间中的BdG 哈密顿量可以化为简单的2×2矩阵

$$H(k) = \langle k|H_{BdG}|k\rangle = \frac{1}{N_s}\sum_{n',n''} e^{ik(n'-n'')}\langle n'|H_{BdG}|n''\rangle \tag{10.217}$$

$$\langle n'|H_{BdG}|n''\rangle = -\mu\sum_n \hat{\tau}^z\langle n'|n\rangle\langle n|n''\rangle - \sum_n[(t\hat{\tau}^z + i\Delta\hat{\tau}^y)\langle n'|n\rangle\langle n+1|n''\rangle + (t\hat{\tau}^z - i\Delta\hat{\tau}^y)\langle n'|n+1\rangle\langle n|n''\rangle]$$
$$= -\mu\hat{\tau}^z\delta_{n',n''} - [(t\hat{\tau}^z + i\Delta\hat{\tau}^y)\delta_{n',n''-1} + (t\hat{\tau}^z - i\Delta\hat{\tau}^y)\delta_{n',n''+1}]$$

这样我们得到

$$\langle k|H_{BdG}|k\rangle = -\mu\hat{\tau}^z - [(t\hat{\tau}^z + i\Delta\hat{\tau}^y)e^{-ik} + (t\hat{\tau}^z - i\Delta\hat{\tau}^y)e^{ik}] = (-2t\cos k - \mu)\hat{\tau}^z - 2\Delta\sin k\hat{\tau}^y$$
$$= \begin{pmatrix} -2t\cos k - \mu & 2i\Delta\sin k \\ -2i\Delta\sin k & +2t\cos k + \mu \end{pmatrix}$$

那么完整的动量空间模型是

$$H_{BdG} = \sum_k H(k)|k\rangle\langle k| \tag{10.218}$$

动量空间粒子空穴变换的效果*

动量空间本身并不影响BdG哈密顿量的粒子空穴对称性.但是,当作基矢变换时,我们对于反幺正算符处理时总是要小心,因为复共轭算符会受到基矢的影响.在我们当前的模型中有

$$\hat{P}|k\rangle|\tau\rangle = \hat{P}\left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_n e^{-ikn}|n\rangle|\tau\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_n (e^{-ikn})^*|n\rangle\hat{\tau}^x|\tau\rangle = |-k\rangle\hat{\tau}^x|\tau\rangle \tag{10.219}$$

可以看到粒子空穴变换对动量态$|k\rangle$的效果是把它变为$|-k\rangle$.

$$\hat{P}H_{BdG}\hat{P}^{-1} = \sum_k \hat{P}H(k)|k\rangle\langle k|\hat{P}^{-1} = \sum_k \hat{\tau}^x H(k)^*\hat{\tau}^x|-k\rangle\langle -k| = \sum_k \hat{\tau}^x H(-k)^*\hat{\tau}^x|k\rangle\langle k| \tag{10.220}$$

由于粒子空穴对称性要求$\hat{P}H_{BdG}\hat{P}^{-1} = -H_{BdG}$,那么有

$$\sum_k \hat{\tau}^x H(-k)^*\hat{\tau}^x|k\rangle\langle k| = -\sum_k H(k)|k\rangle\langle k| \tag{10.221}$$

这相当于对所有动量k

$$\hat{\tau}^x H(-k)^*\hat{\tau}^x = -H(k) \tag{10.222}$$

对于我们这里明确已知的哈密顿量可以简单证明以上的一般性结果

$$\hat{\tau}^x H(-k)^*\hat{\tau}^x = (-2t\cos k - \mu)(-\hat{\tau}^z) + 2\Delta\sin k(-\hat{\tau}^y) = -H(k) \tag{10.223}$$

动量空间的能谱和拓扑不变量*

对角化2×2矩阵$H(k)$,我们发现其能谱是

$$E(k) = \pm\sqrt{(-2t\cos k - \mu)^2 + (2\Delta\sin k)^2} \tag{10.224}$$

当我们调节μ/t时,我们会发现仅当$\mu/t = \pm 2$时体系能隙为零,否则系统总是存在有限的激发能隙. $\mu/t = -2$对应的能隙为零点是$k = 0$,而$\mu/t = +2$对应的能隙为零点是$k = \pi$.在先前的讨论中,我们已经知道 $-2 < \mu/t < 2$对应的是拓扑态,但是这里的能带结构本身并不能很直接地反映这一点.

然后我们先前已经引入了哈密顿量的Pfaffian的符号作为判断超导体系是否是拓扑态的依据,那么在这里我们将采用这个量,那么有

$$\begin{aligned} Q &= \mathrm{sign}\left(\prod_{k=-\pi}^{\pi}\mathrm{Pf}(H(k))\right) = \mathrm{sign}\left(\mathrm{Pf}(H(0))\mathrm{Pf}(H(\pi)))\prod_{k\neq 0,,\pi}E(k)\right) \\ &= \mathrm{sign}\left(\mathrm{Pf}(H(0))\mathrm{Pf}(H(\pi))\prod_{0<k<\pi}E(k)E(-k)\right) \end{aligned} \tag{10.225}$$

对于我们当前的系统,显然对于一般的动量总是有$E(k) = E(-k)$,但是$k = 0$与$k = \pi$只有一个,故需要单独处理. 显然对于成对出现的$E(k) = E(-k)$其并不对最后的符号有贡献,这样唯一有贡献的就是$H(0)$ 和$H(\pi)$,

$$Q = \text{sign}\left(\text{Pf}(H(0))\text{Pf}(H(\pi))\right) \tag{10.226}$$

我们有

$$H(0) = (-2t - \mu)\hat{\tau}^z, \quad H(\pi) = (+2t - \mu)\hat{\tau}^z \tag{10.227}$$

$$Q = \text{sign}\left((-2t - \mu)(+2t - \mu)\right) = \left\{ \begin{array}{ll} +1, & |\mu| > 2|t| \\ -1, & |\mu| < 2|t| \end{array} \right\} \tag{10.228}$$

这样我们发现拓扑不变量的取值± 1与直接对角化计算和能带分析都是一致的.$Q = -1$对应具有Majorana边界零模的拓扑态,而$Q = 1$对应拓扑平凡态.

Kitaev超导模型的物理实现/对应*

通过上一节的讨论,我们已经知道动量空间的Kitaev哈密顿量是

$$H(k) = (-2t\cos k - \mu)\hat{\tau}^z - 2\Delta \sin k\hat{\tau}^y \tag{10.229}$$

在这一节,我们讨论如何在物理上物理上实现这个模型或者类似的模型.

首先,一般的凝聚态物理系统的可控性并不好,一旦材料制备好则绝大多数参数都确定而无法自由调节,相对而言半导体系统具有比较好的可调控性,因此我们考虑一个半导体.在半导体中电子浓度很低,化学势基本上在能带底附近$\mu \sim -2t$,因此可以展开$\cos k \approx 1 - \frac{1}{2}k^2$,那么有

$$-2t\cos k - \mu \approx tk^2 - (\mu + 2t) \equiv \frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu} \tag{10.230}$$

因此拓扑平凡态与非平凡态的分界点是$\tilde{\mu} = 0$.

当然,任何半导体本身都不是超导的,但是我们可以利用超导临近效应,就是把半导体和超导体黏在一起,这样链接附近的半导体电子也会感受到超导体中超导电子的作用而产生等效的超导配对,这样超导项就可产生.当然超导能隙Δ远小于能带能量$4t$, 因此也可以展开$\sin k \approx k$.这样我们在连续近似下的模型是

$$H(k) = \left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)\hat{\tau}^z - 2\Delta k\hat{\tau}^y \tag{10.231}$$

对于真实的电子系统,电子总是携带自旋因而我们的模型还需要添加自旋自由度,用$\hat{\sigma}$表示自旋空间的Pauli矩阵.最简单的方式当然是直接考虑自旋,而哈密顿量参数完全与自旋无关.但是注意到一旦如此操作那么相当于是有两个等效的Kitaev 超导链,而在一个边界附近就有两个Majorana费米子.然而两个Majorana 费米子实际上等价于一个普通的复费米子,这样体系的性质完全就改变了.因此,我们给体系加入Zeeman 磁场

$$H(k) = \left(\frac{k^2}{2m}\hat{\sigma}^0 - \tilde{\mu}\hat{\sigma}^0 - B\hat{\sigma}^z\right) \otimes \hat{\tau}^z - 2\Delta k\hat{\sigma}^0 \otimes \hat{\tau}^y \tag{10.232}$$

这个$\hat{\sigma}^0$是二维的单位矩阵.可以看到,只要$|B| >> \tilde{\mu}$,那么总有一个自旋部分处于拓扑态而另一个处于平凡态.

注意到Kitaev模型中的超导配对实际上是所谓的p波配对,而一般的元素超导体显示s 波,复杂的氧化物等显示的是d波,目前并没有足够的证据表明那种材料具有很明显的p 波配对.一般而言,由于s波超导体更为简单的性质,我们一般用这些超导体来制造异质结,此时的配对形式是 $\Delta(c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger + c_\downarrow c_\uparrow)$. 为了处理的方便,利用时间反演变换$\hat{T} = \hat{U}K$以得到新的基矢,即把BdG 哈密顿写为如下形式

$$H_{BdG} = \begin{pmatrix} H & \Delta \\ -\Delta^* & -H^* \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} H & \Delta' \\ -(\Delta')^\dagger & -\hat{T}H\hat{T}^{-1} \end{pmatrix}, \quad \Delta' = \Delta\hat{U}^\dagger \tag{10.233}$$

在这种基矢下,s波配对总是单位矩阵,并且如果电子部分哈密顿是$H(B)$那么空穴部分便是$-H(-B)$. 当然粒子空穴变换本身形式就复杂一些$\hat{P} = \hat{\sigma}^y\hat{\tau}^y K$.这样我们的模型具有如下形式

$$H(k) = \left(\frac{k^2}{2m} - \tilde{\mu}\right)\hat{\tau}^z + B\hat{\sigma}^z + \Delta k\hat{\tau}^x \tag{10.234}$$

其在$k = 0$的能谱是$\pm B \pm \sqrt{\tilde{\mu}^2 + \Delta^2}$,我们可以期待$B^2 >> \tilde{\mu}^2 + \Delta^2$时体系是非平凡的.然而一个严重的问题是由于$B\hat{\sigma}^z$守恒自旋的$z$分量,这也就是说每一自旋分量的电子是守恒的,但是我们知道Majorana费米子应该并不携带自旋自由度,也就是说我们必须破坏自旋守恒,这可以通过加入自旋轨道耦合,例如$H_{so} = \alpha\sigma^y k$来实现.这样,我们的最终哈密顿量是

$$H_{wire} = \left(\frac{k^2}{2m} + \alpha\sigma^y k - \tilde{\mu}\right)\hat{\tau}^z + B\hat{\sigma}^z + \Delta k\hat{\tau}^x \tag{10.235}$$

本章小结和进一步阅读

本章小结 物质的拓扑态由与拓扑不变量刻画;整数量子Hall效应是所有拓扑态的原型.

本章关键词 拓扑物态;Landau能级;量子振荡;Hofstadter模型;Haldane模型;拓扑绝缘体;Fu-Kane公式;Kitaev超导链

进一步阅读 戴希撰写的《凝聚态材料中的拓扑相与拓扑相变》;S.Shen的《Topological Insulators:Dirac Equation in Condensed Matter》第三到第六章

附录

Hall电导的Kubo公式

让我们考虑如下在恒定磁场$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}=B\vec{e}_z$和扰动$\vec{A}'$下的二维电子系统哈密顿量:

$$\hat{H}=\int dr\hat{\psi}^\dagger(r)\left[\frac{(\hat{\vec{p}}-q\vec{A}-q\vec{A}')^2}{2m}\right]\hat{\psi}(r)+... \tag{10.236}$$

在Coulomb规范下的电流密度算符为$\hat{\vec{J}}_e=-\frac{\delta\hat{H}}{\delta\vec{A}'}$

$$\hat{\vec{j}}_e(r)=q\hat{\psi}^\dagger(r)\frac{\hat{\vec{p}}-q\vec{A}-q\vec{A}'}{m}\hat{\psi}(r)=q\hat{\psi}^\dagger(r)\hat{\vec{v}}(r)\hat{\psi}(r)-\frac{q^2\vec{A}'}{m}\hat{\psi}^\dagger(r)\hat{\psi}(r). \tag{10.237}$$

这里定义了速度算符$\hat{\vec{v}}=\frac{\hat{\vec{p}}-q\vec{A}}{m}$.这样,包含恒定磁场的新顺磁流的形式是

$$\hat{J}_e^\alpha(r)=q\hat{\psi}^\dagger(r)\hat{v}^\alpha(r)\hat{\psi}(r) \tag{10.238}$$

其对应的虚时关联函数为(流−流关联函数)

$$\langle\hat{T}_\tau\hat{J}_e^\alpha(r,\tau)\hat{J}_e^\beta(r')\rangle=-q^2\left(\hat{v}^\beta(r')G(r',r,-\tau)\right)\left(\hat{v}^\alpha(r)G(r,r',\tau)\right) \tag{10.239}$$

这里定义了Green函数$G(r,r',\tau)=-\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}(r,\tau)\hat{\psi}^\dagger(r')\rangle$. 注意速度算符只对其右边最近的Green函数作用.在Landau规范下,让我们用Landau能级的本征态$\phi_{n,k_y}(x,y)=\frac{1}{\sqrt{L_y}}e^{ik_yy}\phi_n(x)$来展开场算符,则有$\hat{\psi}(r)=\sum_{n,k_y}\phi_{n,k_y}(x,y)\hat{c}_{n,k_y}$,$\hat{c}_{n,k_y}$是费米子算符满足标准的反对易关系$[\hat{c}_{n,k_y},\hat{c}^\dagger_{n',k'_y}]_+=\delta_{n,n'}\delta_{k_y,k'_y}$, 而本征态$\phi_{n,k_y}$具有正交归一性$\int dxdy\phi^*_{n,k_y}(x,y)\phi_{n',k'_y}(x,y)=\delta_{n,n'}\delta_{k_y,k'_y}$. 由此可得

$$G(r',r,-\tau)=\sum_{n,k_y}\phi_{n,k_y}(r')\phi^*_{n,k_y}(r)\langle-\hat{T}_\tau\hat{c}_{n,k_y}(-\tau)\hat{c}^\dagger_{n,k_y}\rangle=\sum_{n,k_y}\phi_{n,k_y}(r')\phi^*_{n,k_y}(r)G_{n,k_y}(-\tau)$$

$$G(r,r',\tau)=\sum_{n,k_y}\phi_{n,k_y}(r)\phi^*_{n,k_y}(r')\langle-\hat{T}_\tau\hat{c}_{n,k_y}(\tau)\hat{c}^\dagger_{n,k_y}\rangle=\sum_{n,k_y}\phi_{n,k_y}(r)\phi^*_{n,k_y}(r')G_{n,k_y}(\tau)$$

注意到$\vec{A}'=0$时,利用场算符的展开可以把系统哈密顿量化为对角形式

$$\hat{H}=\sum_{n,k_y}\varepsilon_n\hat{c}^\dagger_{n,k_y}\hat{c}_{n,k_y},\varepsilon_n=(n+1/2)\frac{qB}{m} \tag{10.240}$$

这样有

$$G_{n,k_y}(\omega_n)=\int d\tau e^{i\omega_n\tau}G_{n,k_y}(\tau)=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_n}. \tag{10.241}$$

则利用Green函数的定义后可把流−流关联函数化为

$$\langle\hat{T}_\tau\hat{J}_e^\alpha(r,\tau)\hat{J}_e^\beta(r')\rangle=-q^2\sum_{n,k_y}\sum_{n',k'_y}W^{\alpha\beta}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r')G_{n,k_y}(-\tau)G_{n',k'_y}(\tau) \tag{10.242}$$

其中

$$W^{\alpha\beta}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r') = \left(\hat{v}^{\beta}(r')\phi_{n,k_y}(r')\phi^{*}_{n,k_y}(r)\right)\left(\hat{v}^{\alpha}(r)\phi_{n',k'_y}(r)\phi^{*}_{n',k'_y}(r')\right). \tag{10.243}$$

由

$$\int d\tau e^{i\Omega_n\tau}G_{n,k_y}(-\tau)G_{n',k'_y}(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}G_{n,k_y}(\omega_n)G_{n',k'_y}(\omega_n+\Omega_n) = \frac{f_F(\varepsilon_n)-F_F(\varepsilon_{n'})}{i\Omega_n-\varepsilon_{n'}+\varepsilon_n} \tag{10.244}$$

得到虚时关联函数的傅里叶变换为

$$\Lambda_{\alpha\beta}(r,r',\Omega_n) = \int d\tau e^{i\Omega_n\tau}\langle\hat{T}_\tau\hat{J}^{\alpha}_{e}(r,\tau)\hat{J}^{\beta}_{e}(r')\rangle = -q^2\sum_{n,k_y}\sum_{n',k'_y}W^{\alpha\beta}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r')\frac{f_F(\varepsilon_n)-F_F(\varepsilon_{n'})}{i\Omega_n-\varepsilon_{n'}+\varepsilon_n}.$$

做解析延拓可得推迟关联函数:

$$\Lambda^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega) = -q^2\sum_{n,k_y}\sum_{n',k'_y}W^{\alpha\beta}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r')\frac{f_F(\varepsilon_n)-F_F(\varepsilon_{n'})}{\omega-\varepsilon_{n'}+\varepsilon_n}.$$

回忆第二章线性响应理论可知,空间位置r处t时刻的电流密度平均值为

$$\langle\hat{j}_\alpha(r,t)\rangle = \int_{-\infty}^{t}dt'\int dr'\Pi^{R}_{\alpha\beta}(r,t;r',t')A'_\beta(r',t') \tag{10.245}$$

对上式两边做傅里叶变换得到

$$\langle\hat{j}_\alpha(r,\omega)\rangle = \int dr'\Pi^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega)A'_\beta(r',\omega) = \frac{1}{i\omega}\int dr'\Pi^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega)E'_\beta(r',\omega) \tag{10.246}$$

这样我们可以定义空间依赖的电导率

$$\sigma_{\alpha\beta}(r,\omega) = \frac{1}{i\omega}\int dr'\Pi^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega) \tag{10.247}$$

通常实验测量的是样品电导率的宏观平均,这使得我们可以定义平均电导率为

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{i\omega}\int\frac{dr}{S}\int dr'\Pi^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega) \tag{10.248}$$

这里S是系统的面积.对一般意义下电导而言,起作用的是顺磁流,这只需要把$\Pi^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega)$替换为$\Lambda^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega)$即可.因此系统的静态电导率为

$$\sigma_{\alpha\beta} = \lim_{\omega\to0}\frac{1}{i\omega}\int\frac{dr}{S}\int dr'\Lambda^{R}_{\alpha\beta}(r,r',\omega). \tag{10.249}$$

代入当前系统的流–流关联函数可得

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\lim_{\omega\to0}\frac{q^2}{i\omega}\int\frac{dr}{S}\int dr'\sum_{n,k_y}\sum_{n',k'_y}W^{\alpha\beta}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r')\frac{f_F(\varepsilon_n)-F_F(\varepsilon_{n'})}{\omega-\varepsilon_{n'}+\varepsilon_n}. \tag{10.250}$$

现在,让我们计算Hall电导σ_{xy}.我们对上式做一些化简.首先,$\omega \to 0$时有

$$\frac{1}{\omega - \varepsilon_{n'} + \varepsilon_n} = \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} \left(1 - \frac{\omega}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} + ...\right) \tag{10.251}$$

这里展开第一项会与抗磁流部分抵消,因此有贡献的是第二项,这样有

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= \frac{q^2}{iS} \int dr \int dr' \sum_{n,k_y} \sum_{n',k'_y} W^{xy}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r') \frac{f_F(\varepsilon_n) - F_F(\varepsilon_{n'})}{(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)^2} \\
&= \frac{q^2}{iS} \sum_{n,k_y} \sum_{n',k'_y} \int dr \int dr' (W^{xy}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r') - W^{xy}_{n',k'_y,n,k_y}(r,r')) \frac{f_F(\varepsilon_n)}{(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)^2}
\end{aligned}$$

现在,在Landau规范下让我们计算对空间的积分

$$\begin{aligned}
&\int dr \int dr' (W^{xy}_{n,k_y,n',k'_y}(r,r') - W^{xy}_{n',k'_y,n,k_y}(r,r')) \\
=& \int dr \int dr' \hat{v}^y(r') \phi_{n,k_y}(r') \phi^*_{n,k_y}(r) \hat{v}^x(r) \phi_{n',k'_y}(r) \phi^*_{n',k'_y}(r') - (n, k_y \rightleftharpoons n', k'_y) \\
=& \int dx dy \int dx' dy' \frac{-i\partial_{y'} - qBx'}{m} \phi_{n,k_y}(x',y') \phi^*_{n,k_y}(x,y) \frac{-i\partial_x}{m} \phi_{n',k'_y}(x,y) \phi^*_{n',k'_y}(x',y') - (n, k_y \rightleftharpoons n', k'_y) \\
=& \delta_{k_y,k'_y} \int dx' \phi^*_{n'}(x') \frac{k_y - qBx'}{m} \phi_n(x') \int dx \phi^*_n(x) \frac{-i\partial_x}{m} \phi_{n'}(x) - (n, k_y \rightleftharpoons n', k'_y) \\
=& \delta_{k_y,k'_y} \frac{iqB}{m^2} \int dx' \varphi^*_{n'}(x') x' \varphi_n(x') \int dx \varphi^*_n(x) \partial_x \varphi_{n'}(x) - (n, k_y \rightleftharpoons n', k'_y) \\
=& \delta_{k_y,k'_y} \frac{iqB}{m^2} \frac{(n+1)\delta_{n',n+1} - n\delta_{n',n-1}}{2} - (n, k_y \rightleftharpoons n', k'_y) \\
=& \delta_{k_y,k'_y} \frac{iqB}{m^2} ((n+1)\delta_{n',n+1} - n\delta_{n',n-1})
\end{aligned}$$

这里利用了$\phi_n(x) = \varphi_n(x - x_0), x_0 = k_y/(qB)$以及谐振子本征态$\varphi_n(x)$的基本性质

$$x\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2qB}}(\sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x) + \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x)), \ \partial_x \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{qB}{2}}(-\sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x) + \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x)). \tag{10.252}$$

这样

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= q^2 \frac{qB}{m^2 S} \sum_{k_y} \sum_n f_F(\varepsilon_n) \sum_{n'} \frac{(n+1)\delta_{n',n+1} - n\delta_{n',n-1}}{(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)^2} \\
&= q^2 \frac{qB}{m^2 S} \sum_{k_y} \sum_n f_F(\varepsilon_n) \frac{1}{(qB/m)^2} \\
&= q^2 \frac{qB}{m^2 S} \frac{BS}{h/q} \sum_n f_F(\varepsilon_n) \frac{1}{(qB/m)^2} \\
&= \frac{q^2}{h} \sum_n f_F(\varepsilon_n)
\end{aligned} \tag{10.253}$$

在零温时我们假设恰好有N个Landau能级被占据,并代入电子电荷$q = -e$可得Hall电导率的最终结果为$\sigma_{xy} = N\frac{e^2}{h}$,这自然是熟知的结果. [59]$T > 0$时,所

[59]同理可得$T = 0$时的纵向电导$\sigma_{xx} = 0$.

有Landau能级都有占据概率,因此Hall电导不在量子化为整数,而是成为某个分数.不过只要温度远低于Landau能级间隔$\hbar\omega_c = \hbar\frac{eB}{m}$,那么量子化还是相当明显的.对于晶格系统,把场算符用Bloch函数展开并采用类似上述的推导可以给出著名的TKNN公式.

对于三维体系,z方向是自由运动,因此单电子能级成为$\varepsilon_{n,k_z} = (n+1/2)\frac{qB}{m} + \frac{k_z^2}{2m}$.同时本征函数是二维基础上乘以$z$方向的平面波,即$\phi_{n,k_y,k_z}(x,y,z) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}}\frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L_z}}\phi_n(x)$. 把场算符用该正交归一本征态展开可得$\hat{\psi}(x,y,z) = \sum_{n,k_y,k_z}\phi_{n,k_y,k_z}(x,y,z)\hat{c}_{n,k_y,k_z}$. 这样系统的哈密顿量成为

$$\hat{H} = \sum_{n,k_y,k_z}\varepsilon_{n,k_z}\hat{c}^\dagger_{n,k_y,k_z}\hat{c}_{n,k_y,k_z} \tag{10.254}$$

与二维同样操作可以发现所得公式形式几乎相同,例如Hall电导率为

$$\sigma_{xy} = \frac{q^2}{iSL_z}\sum_{n,k_y,k_z}\sum_{n',k_y',k_z'}\int dr\int dr'(W^{xy}_{n,k_y,k_z,n',k_y',k_z'}(r,r') - W^{xy}_{n',k_y',k_z',n,k_y,k_z}(r,r'))\frac{f_F(\varepsilon_{n,k_z})}{(\varepsilon_{n',k_z'} - \varepsilon_{n,k_z})^2}$$

注意到对W^{xy}的积分与二维时几乎相同,唯一差别是多了因子$\delta_{k_z,k_z'}$,这样我们发现

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= q^2\frac{qB}{m^2S}\sum_{k_y}\frac{1}{L_z}\sum_{k_z}\sum_{n}f_F(\varepsilon_{n,k_z})\sum_{n'}\frac{(n+1)\delta_{n',n+1} - n\delta_{n',n-1}}{(\varepsilon_{n',k_z} - \varepsilon_{n,k_z})^2} \\
&= q^2\frac{qB}{m^2S}\frac{BS}{h/q}\int\frac{dk_z}{2\pi}\sum_n f_F(\varepsilon_{n,k_z})\frac{1}{(qB/m)^2} \\
&= \frac{q^2}{h}\sum_n\int\frac{dk_z}{2\pi}f_F\left(\varepsilon_n + \frac{k_z^2}{2m}\right)
\end{aligned} \tag{10.255}$$

在零温时,费米分布成为阶跃函数,这使得$\varepsilon_n + \frac{k_z^2}{2m} < E_F$,这里$E_F$为费米能.因此,对$k_z$的积分上限为$\sqrt{2m(E_F - \varepsilon_n)}$,则有

$$\sigma_{xy} = \frac{q^2}{h}\sum_n\frac{\sqrt{2m(E_F - \varepsilon_n)}}{\pi} \tag{10.256}$$

显然对n求和一般不再是整数,这说明三维系统不会有量子Hall效应.

拓扑与有能隙量子系统

拓扑研究的是物体在连续形变下是否能够彼此变换.在凝聚态物理中,我们关心的是两个量子系统的哈密顿量是否能够连续地彼此变换.如果可以,我们称这两个系统拓扑等价.

现在,考虑没有任何限制的所有哈密顿量,那么每个哈密顿量都能够连续地形变到任意一个,则所有系统都拓扑等价.如果仅限于考虑有能隙的量子系统,那么情况就有很大的不同.这时,从系统的基态产生一个激发需要需要一个有限的

能量,这意味着如果能隙存在,那么系统的哈密顿量在费米能附近区域将不会有本征值.

这样,我们可以采用如下的判据:

- 当且仅当哈密顿量能够连续形变而不封闭能隙时,两个有能隙量子系统拓扑等价.

假设有两个哈密顿量H和H',并且假设两者之间可以通过某一个路径相互联系,即有

$$H(\alpha) = \alpha H' + (1-\alpha)H \tag{10.257}$$

其中α是一个调节参数.如果可以通过调节α从0连续变化到1而不封闭能隙,那么H, H'拓扑等价.那么如何有效地判断哈密顿量之间的拓扑等价性呢?

拓扑不变量

仅考虑一个零维系统,例如能级分立的孤立量子点,为了判断哈密顿量H, H'之间是否存在一条演化路径而不封闭能隙,我们可以计数费米能以下的能级个数,也就是被电子完全占据的能级个数.这个方式是可行的,因为有能隙哈密顿量的本征值只要不穿过费米能就能够自由地移动.因此,连续变换在具有相同占据能级数的哈密顿量之间严格存在.既然这个数目在有能隙哈密顿量的连续变换下不改变,那么我们称之为拓扑不变量,记为Q.

换句话说,我们可以计数在连续形变下占据能级的个数来判断系统是否拓扑等价,如果能级个数发生变化,那么就不是拓扑等价.当然,更简单的方式是不需计数占据能级的个数,而是观察能级穿越费米能的情况,(能级交叉)只要能级穿越费米能,那么占据能级数目一定变化.这样能级交叉会改变拓扑不变量,交叉前后的哈密顿拓扑不等价,即对应两类不同的物理状态,我们称此时发生了拓扑相变.

如果两个哈密顿量有不同的拓扑不变量,那么它们肯定由拓扑相变分开.换句话说,并不可能从一个哈密顿量连续演化到另一个拓扑不等价的哈密顿而不封闭能隙.一旦我们定出了拓扑不变量,那么我们可以根据拓扑不变量的取值分类所有量子哈密顿量.通过这种方式能够产生所有拓扑等价的哈密顿量,并找到这些哈密顿量所支持的所有不同的拓扑物态.

对称性与拓扑态的分类

我们考虑一个$N \times N$矩阵形式的哈密顿量H,根据量子力学的一般要求,即哈密顿量矩阵是厄米共轭的$H = H^\dagger$.并且满足相应的本征值方程

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{10.258}$$

在量子力学中,如果一个操作对应的幺正算符/矩阵$\hat{U}(\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$或$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1})$与哈密顿量$H$对易$([\hat{U}, H] = 0)$,(注意时间反演用反幺正算符描

述)我们说相应的操作是体系的一个对称操作,且有相应的守恒量.实际来说,可以用守恒量来分块对角化哈密顿量H,不过这并没有给哈密顿量太多限制.接下来讨论的对称性其特点是都对哈密顿量有一定程度限制,这在讨论体系拓扑性质的时候尤为重要.

时间反演对称性

如果一个系统的哈密顿量H在时间反演(time-reversal)操作$\hat{T}$下满足如下要求,那么相应的系统具有时间反演不变性.

$$\boxed{\hat{T}H\hat{T}^{-1}=H} \tag{10.259}$$

当然,时间反演操作$\hat{T}$本身满足

$$\hat{T}\hat{T}^{\dagger}=\hat{T}^{\dagger}\hat{T}=1 \tag{10.260}$$

通常,对于反幺正的时间反演操作$\hat{T}$可以写成一个幺正矩阵$\hat{U}$和复共轭的乘积形式,即

$$\hat{T}=\hat{U}K \tag{10.261}$$

无自旋系统

对于无自旋系统,时间反演算符$\hat{T}$可以定义为一个简单的取复共轭操作K,即

$$\hat{T}=K \tag{10.262}$$

注意到取两次复共轭等价于没有操作,体系必定还原,这显然意味着

$$\hat{T}^2=K^2=1 \tag{10.263}$$

对于无自旋系统的哈密顿量矩阵H,在时间反演变换下有

$$\hat{T}H\hat{T}^{-1}=KHK=H^* \tag{10.264}$$

也就是说时间反演变换下哈密顿矩阵都取了复共轭,如果体系具有时间反演对称性,那么时间反演后的哈密顿矩阵H^*应该与没做时间反演操作的哈密顿矩阵H完全相同,即如果

$$H=\hat{T}H\hat{T}^{-1}=H^*\Rightarrow H=H^* \tag{10.265}$$

那么我们说体系具有时间反演对称性.实际上,这个公式说明无自旋系统的哈密顿量如果是实数矩阵,那么其必然满足时间反演对称性.

自旋$S=1/2$系统

当然,我们真正关心的电子总是携带1/2的自旋自由度,此时,时间反演操作定义为

$$\hat{T}=i\hat{\sigma}^{y}K \tag{10.266}$$

这里的Pauli矩阵作用于自旋空间.也就是说对于$S=1/2$系统,除了要取复共轭以外,还要改变自旋部分的波函数.此外,取复共轭操作K与作用在自旋空间的$i\hat{\sigma}^{y}$完全独立,因此K并不会对$i\hat{\sigma}^{y}$产生作用.注意到与无自旋情况不同,这里$\hat{T}^{2}=i^{2}(\hat{\sigma}^{y})^{2}K^{2}=i^{2}=-1$. 在时间反演操作下,我们发现

$$\hat{T}H\hat{T}^{-1}=(i\hat{\sigma}^{y}K)H(-Ki\hat{\sigma}^{y})=\hat{\sigma}^{y}(KHK)\hat{\sigma}^{y}=\hat{\sigma}^{y}H^{*}\hat{\sigma}^{y} \tag{10.267}$$

如果体系具有时间反演对称性,那么必然有

$$H=\hat{\sigma}^{y}H^{*}\hat{\sigma}^{y} \tag{10.268}$$

如果$|\psi\rangle=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$是能量为$E$的本征态,$a$和$b$代表自旋上与自旋下部分的波函数系数,那么有

$$H(T|\psi\rangle)=TH|\psi\rangle=ET|\psi\rangle=E\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}K\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}-b^{*}\\a^{*}\end{pmatrix} \tag{10.269}$$

这说明对于时间反演不变的系统,$|\psi\rangle$和它的时间反演态$\hat{T}|\psi\rangle$ 是两个能量完全简并的态,这就是Kramers简并.这样时间反演不变的自旋$S=1/2$ 系统的能级总是二重简并.

- 根据系统在时间反演对称操作$\hat{T}$下的性质,可以分类为(1)不具有时间反演对称;(2)具有时间反演对称且$\hat{T}^{2}=1$;(3)具有时间反演对称且$\hat{T}^{2}=-1$.

最后,如果考虑孤立量子点情况,费米能以下占据能级数作为的拓扑不变量Q,那么由Kramers简并可知,当有能级穿过费米能时,由于能级双重简并,那么Q的变化总是偶数.因此,时间反演对称性限制拓扑不变量Q仅改变偶数值,这是系统拓扑性质由分立对称性影响的一个简单例子.

子格/手征对称性

我们定义手征操作为反幺正算符$\hat{C}$,($\hat{C}^{2}=1$)如果其与哈密顿量H反对易,那么系统便具有手征对称性或者子格对称性,即

$$\boxed{\hat{C}H\hat{C}^{-1}=-H} \tag{10.270}$$

现在考虑一个系统,这个系统可以分为A和B两部分,例如一个具有双子格的系统(比如六角晶格),哈密顿量矩阵的非零元只涉及不同部分之间的耦合,而同一

部分之间的矩阵元都为零,即

$$H=\begin{pmatrix}0 & H_{AB}\\ H_{AB}^{\dagger} & 0\end{pmatrix} \tag{10.271}$$

我们引入子格变换操作$\hat{C}=\hat{\sigma}^z$,其在A子格时为1,在B子格时为-1,那么

$$\hat{\sigma}^z H\hat{\sigma}^z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & H_{AB}\\ H_{AB}^{\dagger} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -H_{AB}\\ -H_{AB}^{\dagger} & 0\end{pmatrix}=-H \tag{10.272}$$

此时我们说体系满足子格(sublattice)对称性,或者说手征(chiral)对称性.显然如果$|\psi\rangle=(\psi_A,\psi_B)^T$是体系能量为$E$的本征态,那么可以证明$\hat{C}|\psi\rangle=(\psi_A,-\psi_B)^T$是能量为$-E$的本征态.也就是说体系具有子格对称性,其本征值关于零能对称分布.

当考虑费米能以下占据能级数作为的拓扑不变量Q时,既然哈密顿量的本征值关于零能对称分布,那么并不会出现占据能级的变化,换句话说,所有具有子格对称的系统都可以连续变化而不封闭能隙.这说明附加对称性可以使得某些系统的拓扑分类变得平凡.

粒子空穴对称性

定义粒子空穴操作为幺正算符$\hat{P}$,($\hat{P}^2=\pm 1$)若满足以下关系,则系统具有粒子空穴对称性:

$$\boxed{\hat{P}H\hat{P}^{-1}=-H} \tag{10.273}$$

最常见的具有粒子空穴对称性的系统是超导系统,其二次量子哈密顿量是

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\sum_{n,m}H_{n,m}\hat{c}_n^{\dagger}\hat{c}_m+\frac{1}{2}(\Delta_{n,m}\hat{c}_n^{\dagger}\hat{c}_m^{\dagger}+\Delta_{n,m}^{*}\hat{c}_m\hat{c}_n)\\ &=\frac{1}{2}\sum_{n,m}(H_{n,m}\hat{c}_n^{\dagger}\hat{c}_m-H_{n,m}\hat{c}_m\hat{c}_n^{\dagger}+H_{n,m}\delta_{n,m})+\frac{1}{2}(\Delta_{n,m}\hat{c}_n^{\dagger}\hat{c}_m^{\dagger}+\Delta_{n,m}^{*}\hat{c}_m\hat{c}_n)\end{aligned} \tag{10.274}$$

引入Nambu旋量型的基矢$\hat{\Psi}=(\hat{c}_1,\hat{c}_2...\hat{c}_N,\hat{c}_1^{\dagger},\hat{c}_2^{\dagger}...\hat{c}_N^{\dagger})^T$ 那么体系的哈密顿量可以写为如下分块形式

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\hat{\Psi}^{\dagger}\begin{pmatrix}H & \Delta\\ -\Delta^{*} & -H^{*}\end{pmatrix}\hat{\Psi}=\frac{1}{2}\hat{\Psi}^{\dagger}H_{BdG}\hat{\Psi},H_{BdG}=\begin{pmatrix}H & \Delta\\ -\Delta^{*} & -H^{*}\end{pmatrix} \tag{10.275}$$

H_{BdG}是Bogoliubov-de Gennes哈密顿量,这个哈密顿量作用的波函数是消灭算符和产生算符作用的态. 对于H_{BdG},可以定义反幺正的粒子空穴变换算符$\hat{P}=\hat{\tau}^x K$,其中K 是取复共轭操作,而 $\hat{\tau}^x$是作用于粒子空穴空间的Pauli矩阵.在这个算符的作用下,我们发现

$$\begin{aligned}\hat{P}H_{BdG}\hat{P}^{-1}&=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}K\begin{pmatrix}H & \Delta\\ -\Delta^{*} & -H^{*}\end{pmatrix}K\hat{\tau}^x\\ &=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H^{*} & \Delta^{*}\\ -\Delta & -H\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-H & -\Delta\\ \Delta^{*} & H^{*}\end{pmatrix}=-H_{BdG}\end{aligned}$$

也就是说粒子空穴变换算符与哈密顿量是反对易的,这实际上导致能级关于零能的对称,即如果 $|\psi\rangle = (\mu, \nu)^T$是能量为$E$的本征态,那么$\hat{P}|\psi\rangle = (\nu^*, \mu^*)^T$ 是能量为$-E$的本征态.这说明与子格对称性类似,粒子空穴对称性也导致能谱关于零能的对称,但是注意到只要是超导系统就有粒子空穴对称,而子格对称性的存在却需要精细地调节哈密顿量,因此超导系统的粒子空穴对称是稳定的对称.

- 与时间反演对称相似,也可以把系统按照粒子空穴对称变换下的性质分为三类,即(1)不具有粒子空穴对称;(2)具有粒子空穴对称且$\hat{P}^2 = 1$;(3) 具有粒子空穴对称且$\hat{P}^2 = -1$.

对称性的结果

幺正算符表示的对称性对应守恒量,例如总粒子数$\hat{N}$与哈密顿量对易,则体系的粒子数守恒;如果总自旋$\hat{S}$与哈密顿对易,则自旋是守恒量.对于这里讨论时间反演,粒子空穴和子格对称性,其本身并不对应明确的物理守恒量.但如果可定义相应的拓扑不变量,则这些对称性可以得到反映.

如果我们定义体系的费米能为$E_F = 0$,并且把费米能以下占据的能级数作为刻画系统的一个拓扑不变量Q, 显然改变哈密顿量中的参数时,Q可能会发生变化,这种变化直接体现在某些能级随参数变化而穿过费米能.让我们审视一下对称性的效果: 1)如果体系具有时间反演对称,则每一个能级都是双重简并的,此时穿过费米能的能级数必定是偶数,这样Q的变化值总是偶数.2)当体系具有子格对称时,能级关于费米能对称分布,此时Q并不会改变.3)最后当我们考虑超导系统时,体系自动有粒子空穴对称,此时情况与子格对称基本相同.不过注意到,无论如何改变超导哈密顿量,其费米能以下的能级数目始终是不变的,这样Q就不是一个刻画不同超导态的好的量.但是超导(平均场)模型的费米子宇称(费米子数的奇偶性)是守恒的,那么可以定义一个相应的拓扑不变量,即Pfaffian的符号。

让我们把H_{BdG}哈密顿利用粒子空穴空间的幺正变换写成反对称矩阵形式

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{BdG} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} H_{BdG} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} H - H^* + \Delta - \Delta^* & -iH - iH^* + i\Delta + i\Delta^* \\ iH + iH^* + i\Delta + i\Delta^* & H - H^* - \Delta + \Delta^* \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{10.276}$$

这种反对称矩阵具有一个重要性质就是其本征值总是正负成对出现,即如果E_n是本征值,那么$-E_n$也是本征值,这样该反对称矩阵的行列式是$\det\tilde{H}_{BdG} = \prod_n(-E_n^2)$, 而 (矩阵的)Pfaffian指的就是对行列式开根号,即$\mathrm{Pf}(\tilde{H}_{BdG}) = \sqrt{\prod_n(-E_n^2)} = \pm i\prod_n E_n$. 当体系存在超导准粒子激发时，费米子宇称会发生改变,此时某一个E_n会改变符号,这样Pfaffian会改变符号. 这样我们可以定义Pfaffian的符号作为超导体系的拓扑不变量

$$Q_{BdG} = \mathrm{sign}(\mathrm{Pf}(iH_{BdG})) \tag{10.277}$$

这里多加了虚数因子i使得最后结果是实数.

无相互作用费米子系统的十个对称类(ten symmetry class)

对于无相互作用费米子系统,根据系统哈密顿量在时间反演,粒子空穴以及手征对称下的性质,可以把系统分为十类,即十重对称性分类.

我们已经知道,时间反演对称下可以分为三类,即$\hat{T}^2=+1$,$\hat{T}^2=-1$ 和$\hat{T}^2=0$(表示不具有时间反演对称).而粒子空穴对称下也可以分为 $\hat{P}^2=+1$,$\hat{P}^2=-1$和$\hat{P}^2=0$. 此外,$\hat{T},\hat{P},\hat{C}$彼此并不是完全独立的,即有$\hat{C}=\hat{T}\hat{P}$, 因此当系统同时具有$\hat{T},\hat{P}$对称时,其也会同时具有$\hat{C}$,这样独立的对称类共有10类.

1. A类,即没有任何$\hat{T},\hat{P},\hat{C}$对称性,典型系统是整数量子霍尔效应和Chern绝缘体.
2. AIII类,即只有手征对称性,此时$\hat{C}^2=1$,典型系统是Su-Schrieffer-Heeger模型.
3. AI类,即$\hat{T}^2=+1$,典型系统是无自旋或整数自旋费米子.
4. AII类,即$\hat{T}^2=-1$,典型系统是$S=1/2$自旋费米子,例如时间反演对称的Z_2拓扑绝缘体.
5. D类,即$\hat{P}^2=+1$,典型系统是$p+ip$或$p-ip$波超导体.
6. C类,即$\hat{P}^2=-1$,典型系统是$d\pm id$波超导体,例如Majorana费米子链.
7. BDI类,即$\hat{T}^2=+1,\hat{P}^2=+1$.
8. CI类,即$\hat{T}^2=+1,\hat{P}^2=-1$,典型系统是$d_{x^2-y^2}$ 或d_{xy}波超导体.
9. DIII类,即$\hat{T}^2=-1,\hat{P}^2=+1$, 典型系统是$p\pm ip$波超导体.
10. CII类,即$\hat{T}^2=-1,\hat{P}^2=-1$.

通常也把A,AI,AII称为标准类或者Wigner-Dyson类,把$AIII,BDI,CII$称为手征类,把$D,C,DIII,CI$称为Bogoliubov-de Gennes(BdG)类.这些类的名称来源于E.Cartan 在1926 年关于对称空间分类的工作.

图10.16给出了无相互作用费米子拓扑绝缘体和超导体的10个对称性分类表.$Z,2Z,Z_2$表示拓扑不变量的取值分别是整数,偶整数,$0,1(\pm1)$, 没有则表示相应的情况下没有拓扑非平庸态.拓扑不变量为Z 的典型例子是量子霍尔效应,其拓扑不变量为Chern数,每一个取值表示手性边界态的数目和传播方向.$2Z$ 的例子是具有时间反演不变且$\hat{T}^2=-1$的量子点,其拓扑不变量是费米能级下占据能级的数目,是偶整数.Z_2 的例子有Majorana 费米子链,其拓扑不变量是Pfaffian,其取值表明边界是否有局域化的Majorana费米子.此外,时间反演不变的拓扑绝缘体也是Z_2的重要例子.

		$\mathcal{T}$	$\mathcal{P}$	$\mathcal{C}$	$d=1$	2	3
Standard	A (unitary)	0	0	0	–	Z	–
	AI (orthogonal)	+1	0	0	–	–	–
	AII (symplectic)	−1	0	0	–	Z_2	Z_2
Chiral	AIII (unitary)	0	0	1	Z	–	Z
	BDI (orthogonal)	+1	+1	1	Z	–	–
	CII (sympletic)	−1	−1	1	2Z	–	Z_2
BdG	D	0	+1	0	Z_2	Z	–
	C	0	−1	0	–	2Z	–
	DIII	−1	+1	1	Z_2	Z_2	Z
	CI	+1	−1	1	–	–	2Z

Figure 10.16: 无相互作用费米子拓扑绝缘体和超导体的10个对称性分类表.$Z2Z, Z_2$表示拓扑不变量的取值分别是整数,偶整数,$0, 1(\pm 1)$,没有则表示相应的情况下没有拓扑非平庸态.

- 在超导体中总是存在粒子空穴对称性,不过由于Bogoliubov准粒子来源于电子,其必须满足$\hat{P}^2 = -\hat{T}^2$,因此BDI和CII类的出现需要精细调节哈密顿量.

第十章习题

习题1:一些概念

Q1:如何判断两个有能隙量子系统拓扑等价.

Q2:无相互作用费米子系统的十个对称类是根据哪三个对称性进行分类的.

Q3:解释什么是Chern绝缘体.

习题2:时间反演

Q1:证明动量空间基矢$|k\rangle$在时间反演操作$\hat{T}=K$下有$\hat{T}|k\rangle=|-k\rangle$.($K$为复共轭操作)

Q2:对于时间反演不变的无自旋系统$\hat{H}=\sum_k h_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k$,证明$h_k=h_{-k}$.($h_k$是数而非矩阵)

Q3:对自旋$S=1/2$系统其时间反演操作是$\hat{T}=i\sigma^y K$,则有$\hat{T}|k\rangle|\uparrow\rangle=|-k\rangle|\downarrow\rangle$,$\hat{T}|k\rangle|\downarrow\rangle=-|-k\rangle|\uparrow\rangle$, 即$\hat{T}\hat{c}_{k\uparrow}\hat{T}^{-1}=\hat{c}_{-k\downarrow}$, $\hat{T}\hat{c}_{k\downarrow}\hat{T}^{-1}=-\hat{c}_{-k\uparrow}$. 试讨论自旋$S=1/2$的哈密顿量$\hat{H}=\sum_{k\sigma}h_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}^\dagger\hat{c}_{k\sigma}$在何种情况下满足时间反演对称性.

Bibliography

[1] M. A. Paalanen, D. C. Tsui, and A. C. Gossard, Quantized Hall effect at low temperatures, Phys. Rev. B **25**, 5566 (1982).

[2] R. B. Laughlin, Quantized Hall conductvty in two dimensons, Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981).

[3] B. S. Tan et al., Unconventional Fermi surface in an insulating state, Science **349**, 287 (2015).

[4] Z. Xiang et al., Quantum oscillations of electrical resistivity in an insulator, Science **362**, 65 (2018).

[5] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale and M. den Nijs, Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).

[6] Anton Akhmerov, Jay Sau, Bernard van Heck, Bas Nijholt, Irfan Muhammad and Tomas Orn Rosdahl, Topology in Condensed Matter, https://topocondmat.org/

[7] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, The electronic properties of graphene, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

[8] V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives, Rev. Mod. Phys. **84**, 1067 (2012).

[9] M. Z. Hasan and C. L. Kane, Colloquium: Topological insulators, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).

[10] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Topological insulators and superconductors, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).

[11] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif and T. Esslinger, Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions, Nature **515**, 237 (2014).

[12] R. Peierls, Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen, Z. Phys. **80**, 763 (1933).

[13] D. R. Hofstadter, Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976).

[14] S. R. Elliott and M. Franz, Colloquium: Majorana fermions in nuclear, particle, and solid-state physics, Rev. Mod. Phys. **87**, 137 (2015).

Chapter 11

超流Mott相变:玻色子成为囚徒

玻色凝聚与超流:低温物理的奇遇

我们知道,自由玻色子在低温下会发生Bose-Einstein凝聚现象.然而对实际玻色子体系例如碱金属气体,其凝聚温度过低因此在上世纪90年代才在实验上得以观测到玻色凝聚.历史上,更早的玻色凝聚候选者是He原子的玻色型同位素,即He-4液体.He原子由于质量小外加有很大的零点振动能量,因此其在常压低温下不会形成固态,而是以液体存在.实验上当温度低于$T_c = 2.17$K时,He-4原子的流体发生相变并可观察到超流现象.[1]

- 这里超流指的流体可以无粘滞性地流动.

对于超流He-4而言,其可以在10^{-7}m量级的毛细血管里面没有阻尼的流动.在有限温度下,可以像通常测量液体粘滞性那样,通过观测盘子浸在流体中转动的损耗,观测到未消失的粘性.这说明超流He-4中即存在有粘滞性的部分,也有无粘滞的超流部分.历史上,基于此提出了二流体模型,即假设超流体中的原子分为正常原子和超流的原子,其密度分别为n_n, n_s.正常原子贡献粘滞性且携带熵,而超流原子无粘滞且熵为零.当$T < T_c$ 时n_s取有限值,而$T = 0$时所有原子都为超流原子,即$n_s(T = 0) = n_{tot}$.London认为超流相变与玻色凝聚有直接关系,即所谓超流原子就是玻色凝聚的原子,而正常态原子则是非凝聚的原子.事实证明,London的猜测正确但是对于He-4,其并非是无相互作用的玻色流体,反而是相互作用很强的系统,因此即使在零温下,处于凝聚态的原子数也只有总粒子数的百分之14($n_s/n_{tot} = 0.14$).

基本模型

现在我们将从相互作用玻色子模型出发,从微观角度尝试理解玻色凝聚和相关的超流现象.首先,相互作用玻色子的二次量子化哈密顿量是

$$\hat{H} = \int d^d x \hat{\psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x) \right] \hat{\psi}(x) + \int d^d x \int d^d y \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) V(x-y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x) \tag{11.1}$$

其中玻色子场算符满足如下对易关系:

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)] = \delta(x-y), \quad [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)] = [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(y)] = 0 \tag{11.2}$$

- 这里并没有明确考虑玻色子的内部自由度,例如自旋,赝自旋等.
- 相互作用已经写成标准形式,即正规有序形式以扣除自相互作用.
- 三体以上的相互作用并没有考虑,需要时可以再计入.

[1] He-3在更低温度下显示超流现象,不过其物理来源更接近超导.

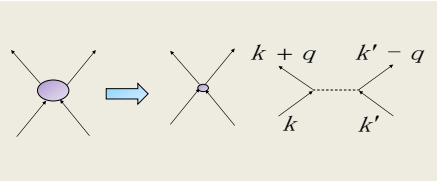


Figure 11.1: 相互作用的简化,即把复杂的相互作用近似为接触相互作用,相互作用保证能量– 动量守恒.

短程相互作用下的模型

通常,仅考虑短程相互作用,其最简单形式是接触相互作用,也叫做δ作用势:

$$V(x-y)=g\delta(x-y) \tag{11.3}$$

这样相互作用可以简化为

$$\hat{H}_{int}=g\int d^dx\int d^dy\delta(x-y)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)=g\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x) \tag{11.4}$$

这样,在接触相互作用的情况下,体系哈密顿量写为

$$\boxed{\hat{H}=\int d^dx\left\{\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)+g\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x)\right\}} \tag{11.5}$$

在下面的讨论中如无特殊说明,我们讨论的就是这个模型.

- 这个短程势模型可以应用于超流He-4以及冷原子物理研究中的稀薄玻色气体系统.

接下来,推导平面波展开下的形式,即引入场算符的傅里叶变换

$$\hat{\psi}(x)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikx}\hat{b}_k \tag{11.6}$$

以及逆变换

$$\hat{b}_k=\frac{1}{\sqrt{V}}\int d^dxe^{-ikx}\hat{\psi}(x) \tag{11.7}$$

那么

$$\begin{aligned}[\hat{b}_k,\hat{b}^\dagger_{k'}] &= \frac{1}{V}\int d^dxd^dye^{-ikx}e^{ik'y}[\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(y)]=\frac{1}{V}\int d^dxd^dye^{-ikx}e^{ik'y}\delta(x-y)\\ &= \frac{1}{V}\int d^dxe^{-i(k-k')x}=\delta_{k,k'}\end{aligned} \tag{11.8}$$

同理可得另外的对易关系$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger] = 0$.

对于动能部分,我们有

$$\begin{aligned}\int d^d x \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right) \hat{\psi}(x) &= \sum_{k,k'} \int \frac{d^d x}{V} e^{i(k-k')x} \frac{k^2}{2m} \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_k = \sum_{k,k'} \delta_{k,k'} \frac{k^2}{2m} \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_k \\ &= \sum_k \frac{k^2}{2m} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \end{aligned} \tag{11.9}$$

而外势部分可以化为

$$\int d^d x \hat{\psi}^\dagger(x) U(x) \hat{\psi}(x) = \sum_{k,k'} \int \frac{d^d x}{V} e^{i(k-k')x} U(x) \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_k \tag{11.10}$$

$$= \sum_{k,k'} U_{k'-k} \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_k \tag{11.11}$$

在这里我们定义了外势的傅里叶变换$U_q = \frac{1}{V} \int d^d x e^{-iqx} U(x)$.

最后,对于相互作用部分有

$$\begin{aligned}\int d^d x g \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x) &= \frac{g}{V^2} \sum_{k_1,k_2,k_3,k_4} \int d^d x e^{-i(k_1+k_2-k_3-k_4)x} \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2}^\dagger \hat{b}_{k_3} \hat{b}_{k_4} \\ &= \frac{g}{V} \sum_{k,k',q} \hat{b}_{k+q}^\dagger \hat{b}_{k'-q}^\dagger \hat{b}_{k'} \hat{b}_k \end{aligned} \tag{11.12}$$

这样整个模型在平面波基矢下的形式是

$$\hat{H} = \sum_k \frac{k^2}{2m} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \sum_{k,k'} U_{k'-k} \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_k + \frac{g}{V} \sum_{k,k',q} \hat{b}_{k+q}^\dagger \hat{b}_{k'-q}^\dagger \hat{b}_{k'} \hat{b}_k \tag{11.13}$$

类型	凝聚	非对角长程序	集体激发
玻色凝聚	√	√	无
超流	√	√	声子+旋子
Bose-Mott绝缘体	???	???	无

Table 11.1: 玻色子体系中常见物态的性质.

玻色-爱因斯坦凝聚与超流:到底谁才是主人

自由空间的玻色-爱因斯坦凝聚

在这一部分,我们假设体系的相互作用可以忽略,并且处于自由空间中,即有$U_{k'-k}=g=0$, 此时哈密顿量是自由玻色子的哈密顿量(为了讨论方便,我们已加入了化学势μ)

$$\hat{H}=\sum_k\left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k=\sum_k\varepsilon_k\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k \tag{11.14}$$

对于每个动量态的粒子占据数,我们有

$$\begin{aligned}
n_k &= \langle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\rangle=\frac{Tr\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k e^{-\beta\sum_k(\frac{k'^2}{2m}-\mu)\hat{b}_{k'}^\dagger\hat{b}_{k'}}}{Tre^{-\beta\sum_k(\frac{k'^2}{2m}-\mu)\hat{b}_{k'}^\dagger\hat{b}_{k'}}}=\frac{\sum_{n_k=0,1,2...}n_k e^{-\beta(\frac{k^2}{2m}-\mu)n_k}\prod_{k'\neq k}\sum_{n_{k'}=0,1,2...}e^{-\beta(\frac{k'^2}{2m}-\mu)n_{k'}}}{\prod_{k'}\sum_{n_{k'}=0,1,2...}e^{-\beta(\frac{k'^2}{2m}-\mu)n_{k'}}} \\
&= \frac{\frac{\partial}{-\partial(\beta\varepsilon_k)}\frac{1}{1-e^{-\beta\varepsilon_k}}\prod_{k'\neq k}\frac{1}{1-e^{-\beta(\frac{k'^2}{2m}-\mu)}}}{\prod_{k'}\frac{1}{1-e^{-\beta(\frac{k'^2}{2m}-\mu)}}}=\frac{\partial}{-\partial(\beta\varepsilon_k)}\ln\frac{1}{1-e^{-\beta\varepsilon_k}}=\frac{e^{-\beta\varepsilon_k}}{1-e^{-\beta\varepsilon_k}} \qquad (11.15)\\
&= \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k-1}}=\frac{1}{e^{\beta(\frac{k^2}{2m}-\mu)-1}} \qquad (11.16)
\end{aligned}$$

即标准的玻色分布函数.

此时,体系的总粒子数是

$$N_{tot}=\sum_k\langle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\rangle=\sum_k\frac{1}{e^{\beta(\frac{k^2}{2m}-\mu)-1}}=V\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{e^{\beta(\frac{k^2}{2m}-\mu)-1}} \tag{11.17}$$

注意到,对于总粒子数固定的体系,当我们降低温度时,化学势增加.但是由于玻色分布函数必须大于等于零,这要求$\mu_{max}=\frac{k^2}{2m}|_{min}=0$,这表明化学势最大值是体系单粒子能量的最小值,对自由粒子而言就是零.也就是说当体系温度降低到某个温度,记为T_{BEC},即所谓的玻色-爱因斯坦凝聚温度,化学势将会取极大值零,在更低的温度下也是零.

显然,在$T=T_{BEC}$时体系的总粒子数必然满足

$$N_{tot}=V\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{e^{\frac{k^2}{2mT_{BEC}}-1}} \tag{11.18}$$

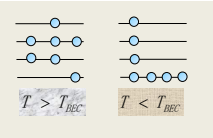


Figure 11.2: 玻色凝聚与非凝聚时的粒子占据数分布.

下面我们只讨论空间维度$d = 3$的情况,此时有

$$N_{tot} = 4\pi V \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\frac{k^2}{2mT_{BEC}}-1}} = \frac{V}{4\pi^2}(2mT_{BEC})^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}dx}{e^x - 1} = \frac{V}{4\pi^2}(2mT_{BEC})^{3/2} 1.31\sqrt{\pi} \tag{11.19}$$

我们得到凝聚温度的表达式是

$$T_{BEC} = \frac{\pi}{2m}\left(\frac{4}{1.31}\right)^{2/3}\left(\frac{N_{tot}}{V}\right)^{2/3} \propto \frac{n_{tot}^{2/3}}{m} \tag{11.20}$$

可以看到凝聚温度正比于体系总粒子数密度的2/3次,反比于质量,也就是说体系密度越大,粒子质量越轻,体系凝聚温度越高.

当系统的温度低于T_{BEC}时,非零动量态的总粒子数表示如下

$$N(T) = 4\pi V \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\frac{k^2}{2mT}-1}} = \frac{V}{4\pi^2}(2mT)^{3/2} 1.31\sqrt{\pi} \tag{11.21}$$

显然,由于$T < T_{BEC}$,则非零动量的粒子数实际上小于总粒子数$N(T) < N_{tot}$,这说明在凝聚温度以下,多余的粒子全部占据到最低能量态(零动量态),记这些粒子数为N_0,那么有

$$N_{tot} = N_0 + N(T) \tag{11.22}$$

玻色子在低温下大量占据最低能量态的行为称为玻色-爱因斯坦凝聚.此时,最低能量态的粒子比例是

$$\frac{N_0}{N_{tot}} = \frac{N_{tot} - N(T)}{N_{tot}} = 1 - \left(\frac{T}{T_{BEC}}\right)^{3/2} \propto 1 - T^{3/2} \tag{11.23}$$

换句话说,当$T = T_{BEC}$最低能态开始占据,随着温度进一步降低,占据数增加,到零温时,所有粒子都占据最低能量态.也就是零温时玻色凝聚是完全的,所有粒子都有相同的能量动量,相干性很好,实验上以此来做精准的时钟和原子激光器.

当我们考虑$d = 2$或$d = 1$的低维系统时,非凝聚粒子的数目是发散的,也就是说有限粒子数系统的粒子并不需要占据零能态,这样这些系统就不会有玻色凝聚发生.

- 对于粒子数守恒的玻色子系统,玻色凝聚可以发生,但对于玻色子数目不守恒的系统,例如声子或磁振子以及光子,他们的最低能量态是占据数为零的态,这样就不会有粒子数的宏观占据,因为此时根本没有粒子,所以一般而言不会有凝聚发生.

如果从相变的角度来看,若定义凝聚粒子比例为体系的序参量,那么在凝聚温度以下有

$$\frac{N_0}{N_{tot}}=1-\left(\frac{T}{T_{BEC}}\right)^{3/2}=1-\left(1-\frac{T_{BEC}-T}{T_{BEC}}\right)^{3/2}\propto T_{BEC}-T \tag{11.24}$$

这样序参量的临界指数为$\beta=1$.

而在凝聚温度下,体系的能量是(注意零能态能量自然为零)

$$E=\sum_k\frac{k^2}{2m}\langle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\rangle=V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{k^2/(2m)}{e^{\frac{k^2}{2mT}}-1}=\frac{V}{4\pi^2}T(2mT)^{3/2}\int_0^\infty\frac{x^{3/2}dx}{e^x-1}=\frac{V}{4\pi^2}T(2mT)^{3/2}1.34\frac{3}{4}\sqrt{\pi} \tag{11.25}$$

那么体系的能量密度为

$$\frac{E}{V}=0.25\left(\frac{2m}{\pi}\right)^{3/2}T^{5/2}\propto m^{3/2}T^{5/2} \tag{11.26}$$

那么体系的热容是

$$C_V=\frac{\partial E/V}{\partial T}\propto(mT)^{3/2}\propto\left(1-\frac{T_{BEC}-T}{T_{BEC}}\right)^{3/2}\propto T-T_{BEC} \tag{11.27}$$

这样热容对应的临界指数是$\alpha=-1$.

- 在三维自由空间,自由玻色子经历玻色凝聚从自由气体态相变至玻色凝聚态,这个相变是连续相变,其序参量是凝聚粒子数密度,具有相应的临界指数.

简谐势阱中的玻色-爱因斯坦凝聚

尽管Einstein早在1924年便在理论上预言了理想玻色气体的玻色凝聚.但是直到低温冷却技术(激光冷却与蒸发冷却)在80年代完全发展成熟后才能在实际系统中观测到.在实验上,玻色爱因斯坦凝聚最早是1995年在碱金属原子的稀薄气体中观测到.实验上通常用磁场或者光场产生近似的简谐势阱来束缚原子,这样,我们在理论研究中就必须考虑简谐势阱的影响.

我们首先忽略原子之间的相互作用,那么体系的哈密顿量是

$$\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x) \tag{11.28}$$

$U(x)$代表三维简谐势

$$U(x)=\frac{1}{2}m(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2+\omega_z^2z^2) \tag{11.29}$$

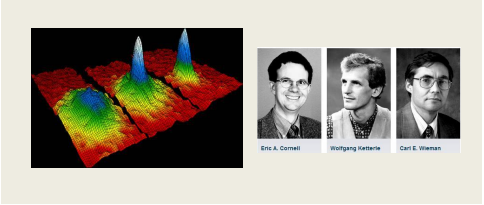


Figure 11.3: 稀薄气体的玻色凝聚和相关实验的主要领导者,Eric A. Cornell(1961−),Wolfgang Ketterle(1957−) 和Carl E. Wieman(1951−).三人因为碱金属原子的稀薄气体中Bose-Einstein凝聚的实现以及凝聚体性质的早期基础性研究共同获得2001年诺贝尔物理学奖.

与简单的一维谐振子类似,这个三维谐振子的本征能量是

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\omega_z \tag{11.30}$$

回忆一维谐振子的基态波函数$\varphi(x) \propto m^{1/4}\omega^{1/4}e^{-\frac{m}{2}\omega x^2}$,那么当前系统的单粒子基态波函数是

$$\varphi(x,y,z) \propto m^{3/4}\bar{\omega}^{3/4}e^{-\frac{m}{2}(\omega_x x^2+\omega_y y^2+\omega_z z^2)} \tag{11.31}$$

其中平均谐振子频率$\bar{\omega} = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$.

接下来,我们以三维谐振子的波函数$\varphi_N(x)$为基矢展开场算符

$$\hat{\psi}(x) = \sum_N \varphi_N(x)\hat{b}_N \tag{11.32}$$

那么体系的哈密顿量对角化为如下形式

$$\hat{H} = \sum_N E_N \hat{b}_N^\dagger \hat{b}_N, \quad E_N = E_{n_x,n_y,n_z} \tag{11.33}$$

为了讨论体系的玻色凝聚,我们注意到化学势的最大取值是

$$\mu_{max} = E_{n_x,n_y,n_z}|_{min} = \frac{1}{2}(\omega_x + \omega_y + \omega_z) \tag{11.34}$$

这样系统的玻色凝聚温度由下式决定

$$N_{tot} = \sum_N \langle \hat{b}_N^\dagger \hat{b}_N \rangle = \sum_{n_x,n_y,n_z} \frac{1}{e^{\frac{E_{n_x,n_y,n_z}-\mu_{max}}{T_{BEC}}} - 1} = \int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{1}{e^{\varepsilon/T_{BEC}} - 1} \tag{11.35}$$

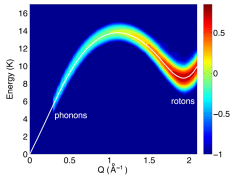


Figure 11.4: 中子散射测得的超流He-4色散关系.[4]

在这里我们假定能级间距足够密集而把对能级的求和换为对能量的积分并引入如下的态密度

$$\begin{aligned} N(\varepsilon) &= \sum_{n_x,n_y,n_z} \delta(\varepsilon - n_x\omega_x - n_y\omega_y - n_z\omega_z) = \int \frac{dE_x}{\omega_x}\frac{dE_y}{\omega_y}\frac{dE_z}{\omega_z}\delta(\varepsilon - E_x - E_y - E_z) \\ &= \frac{1}{\omega_x\omega_y\omega_z}\int_0^{\varepsilon} dE_x \int_0^{E_x} dE_y = \frac{\varepsilon^2}{2\omega_x\omega_y\omega_z} = \frac{\varepsilon^2}{2\bar{\omega}^3} \end{aligned} \tag{11.36}$$

因此有

$$N_{tot} = \frac{1}{2\bar{\omega}^3}\int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon^2}{e^{\varepsilon/T_{BEC}} - 1} = \frac{1.2}{\bar{\omega}^3}T_{BEC}^3 \tag{11.37}$$

则简谐势中的三维玻色气体的凝聚温度是

$$T_{BEC} = N_{tot}^{1/3}\frac{\bar{\omega}}{1.2^{1/3}} \tag{11.38}$$

当体系温度低于凝聚温度时,有宏观量级的粒子占据能量最低态,记此占据数为N_0, 那么有

$$N_{tot} = N_0 + \frac{1.2}{\bar{\omega}^3}T^3 \tag{11.39}$$

同时凝聚的粒子数比例为

$$\frac{N_0}{N_{tot}} = 1 - \left(\frac{T}{T_{BEC}}\right)^3 \tag{11.40}$$

注意到这个温度三次方的依赖与铷原子的实验结果是符合的.

弱相互作用的玻色子体系:液氦-4的超流理论

实验上在玻色型He-4原子的流体中观察到超流现象.

- 中子散射测量的体系激发谱由Landau分析可知存在动量线性依赖的分支($\varepsilon_k \sim |k|$)以及有能隙分支($\varepsilon_k \sim \Delta + \frac{(k-k_0)^2}{2m}$), 一般称为声子谱(phonon)和旋子谱(roton).

为了解释实验观察到激发谱,Bogoliubov从弱相互作用玻色气体出发建立了He-4的超流理论,即Bogoliubov超流理论.我们假定系统的哈密顿量不包含杂质散射

势的贡献,那么此时哈密顿量具有如下形式

$$\boxed{\hat{H}=\sum_k\left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\frac{g}{V}\sum_{k,k',q}\hat{b}_{k+q}^\dagger\hat{b}_{k'-q}^\dagger\hat{b}_{k'}\hat{b}_k} \tag{11.41}$$

一般而言,该模型适合描述弱相互作用的玻色系统,但是液氦本身其实是强相互作用的体系,所以其可靠性需要注意.

我们知道,在低温下玻色子倾向于占据最低能级,这里是$k=0$的零动量态,那么这意味着零动量态的占据是宏观的,也就是占据数很大

$$\langle\hat{b}_{k=0}^\dagger\hat{b}_{k=0}\rangle=N_0>>1 \tag{11.42}$$

同时注意到根据玻色子对易关系有$\hat{b}_0\hat{b}_0^\dagger-\hat{b}_0^\dagger\hat{b}_0=1(\hat{b}_{k=0}=\hat{b}_0)$, 这表明对于凝聚的粒子,对易关系其实是不重要的,因而我们可以用算符的平均值来代替算符本身,即

$$\langle\hat{b}_0^\dagger\rangle\approx\langle\hat{b}_0\rangle\approx\sqrt{N_0}\equiv b_0 \tag{11.43}$$

原则上b_0可以有相位的任意性即$\langle\hat{b}_0\rangle=b_0e^{i\phi}$, 但我们可以直接选择相位为零,即把相位规范掉,这样b_0就是一个实数.

这样我们可以把动能部分中的零动量态分离出来

$$\sum_k\left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k=-\mu b_0^2+\sum_{k\neq0}\left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k \tag{11.44}$$

而对于相互作用部分,我们也可以分离出零动量部分,这样总共可得12项

$$\begin{aligned}\frac{g}{V}\sum_{k,k',q}\hat{b}_{k+q}^\dagger\hat{b}_{k'-q}^\dagger\hat{b}_{k'}\hat{b}_k &= \frac{g}{V}b_0^4+2\frac{g}{V}b_0\sum_{k,q\neq0}(\hat{b}_{k+q}^\dagger\hat{b}_{-q}^\dagger\hat{b}_k+\hat{b}_{k+q}^\dagger\hat{b}_q\hat{b}_k)+4\frac{g}{V}b_0^2\sum_{k\neq0}\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\\ &+\frac{g}{V}b_0^2\sum_{k\neq0}(\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger+\hat{b}_{-k}\hat{b}_k) \qquad (11.45)\\ &+\frac{g}{V}\sum_{k,k',q\neq0}\hat{b}_{k+q}^\dagger\hat{b}_{k'-q}^\dagger\hat{b}_{k'}\hat{b}_k \qquad (11.46)\end{aligned}$$

在低温并且假定相互作用是比较弱的情况下,我们认为凝聚部分是主要的,这样近似到$\mathcal{O}(b_0^2)$相互作用是

$$\frac{g}{V}\sum_{k,k',q}\hat{b}_{k+q}^\dagger\hat{b}_{k'-q}^\dagger\hat{b}_{k'}\hat{b}_k=\frac{g}{V}b_0^4+\frac{g}{V}b_0^2\sum_{k\neq0}(4\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger+\hat{b}_{-k}\hat{b}_k)+O(b_0)$$

这样哈密顿量近似为二次型的形式:

$$\hat{H}\simeq E_0+\sum_{k\neq0}\left(\frac{k^2}{2m}-\mu+4\frac{g}{V}b_0^2\right)\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\frac{g}{V}b_0^2\sum_{k\neq0}(\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger+\hat{b}_{-k}\hat{b}_k),\quad E_0=-\mu b_0^2+\frac{g}{V}b_0^4$$

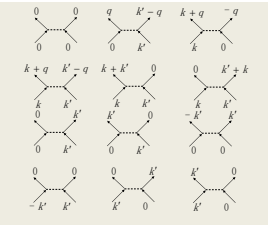


Figure 11.5: 12个相互作用项.

其中E_0是只包含凝聚部分的能量.这个模型就是Bogoliubov处理He-4的简化模型. [2]

在最简单Landau平均场的近似下,我们可忽略所有非零动量态的贡献,此时系统的能量就是E_0,对E_0求极值可得

$$\frac{\partial E_0}{\partial b_0^2}=0\Rightarrow b_0^2=\frac{\mu V}{2g} \tag{11.47}$$

- 注意到$\mu>0$时才给出非零的凝聚;
- 当$\mu=0$时是一个临界点,而$\mu<0$只给出正常态的解;
- 当这种相变在零温发生时,体系实际上经历了化学势调节的量子相变.

当我们考虑超越Landau平均场的效应时,需要明确对角化哈密顿量

$$\boxed{\hat{H}\simeq E_0+\sum_{k>0}\left[\varepsilon_k(\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k+\hat{b}_{-k}^\dagger\hat{b}_{-k})+2\frac{g}{V}b_0^2(\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger+\hat{b}_{-k}\hat{b}_k)\right]} \tag{11.48}$$

这里引入了$\varepsilon_k=\frac{k^2}{2m}-\mu+4\frac{g}{V}b_0^2=\frac{k^2}{2m}+\mu$. 注意到这个哈密顿量与我们先前遇到的反铁磁自旋波的哈密度量在形式上完全一致,因此回忆那时候用到的玻色子Bogoliubov 变换,我们仅需要把$\hat{b}_k$模式理解为反铁磁自旋波处理中的$\hat{a}_k$模式,则有如下Bogoliubov 变换

$$\boxed{\begin{pmatrix}\hat{b}_k\\ \hat{b}_{-k}^\dagger\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cosh\theta_k & -\sinh\theta_k\\ -\sinh\theta_k & \cosh\theta_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{\alpha}_k\\ \hat{\beta}_k^\dagger\end{pmatrix}}. \tag{11.49}$$

[2]注意到哈密顿量出现了粒子数不守恒的部分,即有$\hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger,\hat{b}\hat{b}$ 类型,但对于实际的液氦和冷原子体系,实际上粒子总是都是给定的,这里的粒子数不守恒指的是正常态的粒子数不守恒,如果加上凝聚的粒子,那么体系的总粒子数守恒. 如果恢复b_0的相位部分,那么我们有$b_0^2\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger$,实际上表示凝聚态中的两个粒子在相互作用下散射成两个动量为$\pm k$ 的正常态粒子;而$(b_0^*)^2\hat{b}_{-k}\hat{b}_k$表示两个正常态粒子散射后进入凝聚体当中.

把反铁磁自旋波的计算过程翻译过来就得到

$$\begin{aligned}\hat{H} &= E_0+\sum_{k>0}\left[\varepsilon_k(\cosh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k)-\sinh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger+\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k)+\cosh 2\theta_k-1)\right]\\ &+\sum_{k>0}2\frac{g}{V}b_0^2\left[-\sinh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k)+\cosh 2\theta_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\beta}_k^\dagger+\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k)-\sinh 2\theta_k\right]\end{aligned}\tag{11.50}$$

令非对角项系数为零可得$-\varepsilon_k\sinh 2\theta_k+2\frac{g}{V}b_0^2\cosh 2\theta_k=0$, 也就是

$$\tanh 2\theta_k=\frac{2gb_0^2/V}{\varepsilon_k}=\frac{\mu}{\varepsilon_k}=\frac{\sinh 2\theta_k}{\cosh 2\theta_k}=\frac{\sqrt{\cosh^2 2\theta_k-1}}{\cosh 2\theta_k}\tag{11.51}$$

可以解得$\cosh 2\theta_k=\frac{1}{\sqrt{1-(\mu/\varepsilon_k)^2}}$,$\sinh 2\theta_k=\frac{\mu}{\varepsilon_k}\cosh 2\theta_k=\frac{\mu/\varepsilon_k}{\sqrt{1-(\mu/\varepsilon_k)^2}}$. 因此,哈密顿量对角化为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= E_0+\sum_{k>0}\left[(\varepsilon_k\cosh 2\theta_k-\mu\sinh 2\theta_k)(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k)+(\varepsilon_k\cosh 2\theta_k-\mu\sinh 2\theta_k-\varepsilon_k)\right]\\ &= E_0+\sum_{k>0}E_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k+\hat{\beta}_k\hat{\beta}_k^\dagger)+\sum_{k>0}(E_k-\varepsilon_k)\end{aligned}\tag{11.52}$$

这里定义了对角化后的Bogoliubov准粒子$\hat{\alpha}_k,\hat{\beta}_k$(是标准玻色子算符)能谱

$$E_k=\sqrt{\varepsilon_k^2-\left(2\frac{g}{V}b_0^2\right)^2}=\sqrt{\varepsilon_k^2-\mu^2}=\sqrt{\frac{k^2}{2m}\left(\frac{k^2}{2m}+2\mu\right)}\tag{11.53}$$

- 当$k\to 0$时,$E_k\approx\sqrt{\mu/m}|k|$,这是类似于声子的激发模式,来源于体系自发破缺了规范对称性.(选定b_0的相位破坏了$U(1)$整体规范对称性,导致低能出现无能隙的Goldstone声子型模式.)
- 当$k>>0$时,$E_k\approx\frac{k^2}{2m}$,这是类似于自由粒子的激发.
- 低温下体系只有类声子型激发,此时热容估计为$C_V=\frac{dE}{dT}\propto\frac{d}{dT}\int d^3k\frac{kT}{k}\propto T^3$

我们可以计算裸粒子$\hat{b}_k(k\neq 0)$的占据数

$$\langle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\rangle=\cosh^2\theta_k\langle\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k\rangle+\sinh^2\theta_k\langle\hat{\beta}_k\hat{\beta}_k^\dagger\rangle\tag{11.54}$$

当$T=0$时,我们有

$$\langle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\rangle_{T=0}=\sinh^2\theta_k=\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon_k}{E_k}-1\right)\tag{11.55}$$

这样所有非零态的裸粒子总数是

$$\begin{aligned}\sum_k\langle\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k\rangle_{T=0} &= \sum_k\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon_k}{E_k}-1\right)=\frac{V}{2}\int_0^\infty\frac{4\pi k^2dk}{(2\pi)^3}\left[\frac{k^2+2m\mu}{\sqrt{k^2(k^2+4m\mu)}}-1\right]\\ &= \frac{V}{4\pi^2}\sqrt{2m\mu}\int_0^\infty x^2dx\left[\frac{x^2+1}{x^2(x^2+2)}-1\right]\qquad(11.56)\\ &= \frac{V}{4\pi^2}\sqrt{2m\mu}\frac{\sqrt{2}}{3}\qquad(11.57)\end{aligned}$$

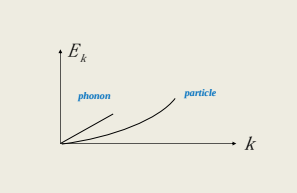


Figure 11.6: 声子与粒子的色散.

这样我们发现非零动量的粒子(非凝聚粒子)与凝聚粒子的比例是

$$\frac{\sum_k \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \rangle_{T=0}}{b_0^2} = \frac{g}{3\pi^2}\sqrt{\frac{m}{\mu}} \tag{11.58}$$

可以看到,当相互作用比较弱时,多数玻色子凝聚在零动量态,这与开始的假定自洽.另一方面零温时仍有粒子不在凝聚的零动量态,这是相互作用玻色系统的典型特点,这也与He-4的实验结果定性符合. [3]

另外,实际He-4超流体中的激发还包括的旋子,其出现在某个动量以上,并不能由这里的Bogoliubov理论直接解释.物理上,旋子极小值是液氦中强相互作用特性的表现,它反映了形成氦固体的倾向性.理论上考虑旋子谱的半定量理论是下面要讨论的Feynman变分理论.

液氦-4的Feynman理论*

为了解释液氦-4完整的激发谱,Feynman通过引入激发态波函数

$$\psi = \left(\sum_{j=1}^{N} f(r_j)\right)\psi_0 = F\psi_0 \tag{11.59}$$

这里ψ_0为体系的基态波函数.现在考虑N个玻色子系统的一次量子化哈密顿量为

$$H = \frac{-\hbar^2}{2M}\sum_{j=1}^{N}\nabla_j^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(r_{ij}) \tag{11.60}$$

[3]1957年李政道和杨振宁计算了三维弱相互作用玻色子模型的基态能量,他们的近似计算给出$\frac{\langle \hat{H}\rangle}{V} = \frac{2\pi a}{m}n^2(1+\frac{128}{15\sqrt{\pi}}(a^3n)^{1/2}+\mathcal{O}(na^3))$.[5] 这里$a = \frac{mg}{4\pi}$是$s$波散射长度,$n$是系统的粒子数密度.这相当于是低密度展开,也就是玻色子之间的距离$n^{-1/3}$远低于粒子之间相互作用的有效距离a时是良好的近似.

M为原子质量.这样,所构造的激发态的激发能是

$$\varepsilon = \langle\psi|(H-E_0)|\psi\rangle = \int d^N r\psi^*(H-E_0)\psi = \frac{\hbar^2}{2M}\sum_j \int d^N r\psi_0^2(\nabla_j f^*(r_j))\cdot(\nabla_j f(r_j)) \tag{11.61}$$

由于每个粒子并无区别,对N粒子积分转化为对某一个粒子积分乘以粒子密度$\rho = \int d^{N-1}r\psi_0^2$. 对巨大的均匀系统,$\rho$是常数.这样有

$$\varepsilon = \frac{N\hbar^2\rho}{2M}\int dr(\nabla f^*(r))\cdot(\nabla f(r)). \tag{11.62}$$

另一方面,归一化要求计算$J = \langle\psi|\psi\rangle$,

$$J = \int dr^N\psi_0^2\sum_{ij} f^*(r_i)f(r_j) = N\rho\int dr|f(r)|^2 + N(N-1)\int dr_1\int dr_2\rho_2(r_1,r_2)f^*(r_1)f(r_2) \tag{11.63}$$

这里第一项来自$i=j$贡献,第二项是$i\neq j$的贡献.$\rho_2 = \int dr_3...dr_N\psi_0^2$ 是两粒子密度,其与对关联函数有直接联系,

$$g(|r_1-r_2|) = \delta(r_1-r_2) + \frac{N}{\rho}\rho_2(r_1,r_2) \tag{11.64}$$

这样$J = N\rho\int dr_1\int dr_2 g(r_1,r_2)f^*(r_1)f(r_2)$.现在构造泛函$F = \varepsilon - \hbar\omega J$,其形式类似于一个Hartree-Fock 近似下的能量密度,

$$F = N\rho\left[\int dr f^*(r)\frac{-\hbar^2}{2M}\nabla^2 f(r) - \hbar\omega\int dr\int dr' g(r,r')f^*(r)f(r')\right] \tag{11.65}$$

这里$\hbar\omega$为拉格朗日乘子.由F对f^*取变分极值可得:

$$\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 f(r) + \hbar\omega\int dr' g(r')f(r+r') = 0. \tag{11.66}$$

令试探解为波动解$f(r) = C(k)e^{ikr}$,并代入上式有

$$\frac{\hbar^2k^2}{2M} - \hbar\omega\int dr g(r)e^{ikr} = 0 \tag{11.67}$$

显然右边积分部分是$g(r)$的傅里叶变换系数$S(k)$,即系统的结构因子,因此我们发现

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2MS(k)}. \tag{11.68}$$

将波动解代入ε可得$\varepsilon = \frac{\hbar^2k^2}{2M}N\rho VC^2(k)$,代入$J$可得$J = N\rho VC^2(k)S(k)$.这样,系统激发谱为

$$\varepsilon_k = \frac{\langle\psi|(H-E_0)|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\varepsilon}{J} = \frac{\hbar^2k^2}{2MS(k)} \tag{11.69}$$

- 这样,Feynman采用变分法把激发谱ε_k与非弹性中子散射测量的结构因子$S(k)$相联系.通过输入实验测量的$S(k)$,Feynman理论成功解释了激发谱的结构.

更一般地,Feynman这种处理称为单模式近似,广泛用于冷原子气体和量子磁体的激发谱研究.

序参量和规范对称破缺*

在玻色凝聚和超流理论中,我们发现系统的序参量是处于零动量粒子的产生/湮灭算符的平均值,即$\Phi=\langle\hat{b}_k\rangle$.当$T>T_{BEC}$时,$\Phi=0$,而$T<T_c$时$\Phi\neq 0$.对于这个序参量,原则上我们应用复数描述:

$$\Phi=\langle\hat{b}_0\rangle=\sqrt{N_0}e^{i\varphi} \tag{11.70}$$

在T_c以下,系统的相位φ基本是确定的,因此我们可以说处于超流态的系统是相位相干的.但是,处于凝聚态的粒子数事实上总是在涨落,这类似与量子力学中的$\hat{x},\hat{p}$,也就是系统的粒子数和相位是一对正则共轭变量,这说明两者具有如下不确定关系:

$$\Delta N_0\Delta\varphi\simeq\hbar \tag{11.71}$$

这个关系说明系统的粒子数足够确定,那么它的相位就有很大的涨落,反之,相位确定的系统,粒子数也有很多的涨落.我们知道玻色凝聚时系统相位确定,因此其粒子数自然不确定了.从对称性的角度来说,对于非凝聚的系统,它的相位可以任意变换,这就是量子力学所说的波函数相位的规范不变性.但是当系统降温进入凝聚态时,相位确定,因此相位的任意性或者规范不变性就自动丧失了,这称为玻色凝聚系统中规范对称性的自发破缺.因此,文献中一般称玻色凝聚系统和超流系统都破缺了规范对称性.

既然玻色凝聚系统自发破坏的时可以连续变化的规范对称性,那么根据Goldstone定理,必然有倾向于恢复原先对称性的无能隙玻色型激发出现,在这里自然是我们通过Bogoliubov变换对角化得到的低能声波型模式.

事实上,根据章节开始的一般性哈密顿量

$$\hat{H}=\int d^dx\left\{\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}-\mu\right]\hat{\psi}(x)+g\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x)\right\} \tag{11.72}$$

若我们采用路径积分的描述形式,我们会得到如下配分函数:

$$\mathcal{Z}=\int\mathcal{D}\psi e^{-\int_0^\beta d\tau\int d^dx[\psi^*(\partial_\tau-\frac{\nabla^2}{2m}-\mu)\psi+g|\psi|^4]} \tag{11.73}$$

这里ψ是$\hat{\psi}$在玻色子相干态下的本征值.若ψ在虚时轴上变化不大,那么对虚时的积分就成为$\beta=1/T$,由此剩下的部分就等效为先前研究Landau相变理论中熟悉的形式:

$$\mathcal{Z}=\int\mathcal{D}\psi e^{-\beta\int d^dx[\psi^*(-\frac{\nabla^2}{2m}-\mu)\psi+g|\psi|^4]} \tag{11.74}$$

若整个配分函数的求和由极值路径,也就是使得自由能极小的ψ决定,那么忽略涨落的影响并记极值为Φ,我们得到如下熟悉的形式:

$$F=\int d^dx\left[\Phi^*\left(-\frac{\nabla^2}{2m}-\mu\right)\Phi+g|\Phi|^4\right] \tag{11.75}$$

显然,这就是一个具有$O(2)$对称性的Landau-Ginzburg自由能.由此我们就可以完全采用标准的连续相变理论分析超流相变.

非对角长程序*

对相互作用玻色系统何时出现玻色凝聚,杨振宁给出了非对角长程序的概念:

- 单粒子密度矩阵利用玻色场算符可写为$\rho(r,r')=\langle\hat{\psi}(r)\hat{\psi}^{\dagger}(r')\rangle=N_0\psi_0(r)\psi_0^*(r')+G(r-r')$. 这里$\psi_0(r)$是凝聚体的波函数,$G(r-r')$描写短程关联.当$|r-r'|\to\infty$ 时,若$\rho(r,r')$有限且与粒子密度同量级,则称体系具有非对角长程有序.

在Bogoliubov的超流理论中,单粒子密度矩阵可写为

$$\begin{aligned}\rho(r,r')&=\langle\hat{\psi}(r)\hat{\psi}^{\dagger}(r')\rangle=\frac{1}{V}\sum_{k,k'}e^{i(kr-k'r')}\langle\hat{b}_k\hat{b}_{k'}^{\dagger}\rangle\\&=\frac{1}{V}\langle\hat{b}_0\hat{b}_0^{\dagger}\rangle+\frac{1}{V}\sum_{k\neq0}e^{ikr}\langle\hat{b}_k\hat{b}_0^{\dagger}\rangle+\frac{1}{V}\sum_{k'\neq0}e^{i(-k'r')}\langle\hat{b}_0\hat{b}_{k'}^{\dagger}\rangle+\frac{1}{V}\sum_{k,k'\neq0}e^{i(kr-k'r')}\langle\hat{b}_k\hat{b}_{k'}^{\dagger}\rangle\end{aligned}$$

注意到$\langle\hat{b}_0\hat{b}_0^{\dagger}\rangle=\langle\hat{b}_0\rangle\langle\hat{b}_0^{\dagger}\rangle$, 其他模式的奇数个算符平均都为零,则有

$$\rho(r,r')=\langle\hat{\psi}(r)\hat{\psi}^{\dagger}(r')\rangle\simeq\frac{1}{V}\langle\hat{b}_0\rangle\langle\hat{b}_0^{\dagger}\rangle+\frac{1}{V}\sum_{k,k'\neq0}e^{i(kr-k'r')}\langle\hat{b}_k\hat{b}_{k'}^{\dagger}\rangle\tag{11.76}$$

显然,$\langle\hat{b}_0\rangle,\langle\hat{b}_0^{\dagger}\rangle$都是$N_0$ 量级,而$\langle\hat{b}_k\hat{b}_{k'}^{\dagger}\rangle$仅给出小的修正,因此Bogoliubov理论确实显示非对角长程有序.

当然,玻色凝聚也可在晶格模型中实现,例如接下来会讨论的Bose-Bubbard模型.在晶格问题中,玻色子算符定义在晶格格点j上,即有$\hat{b}_j^{\dagger},\hat{b}_j$. 这样我们也可以定义相应的单粒子密度矩阵

$$\rho_{ij}=\langle\hat{b}_i^{\dagger}\hat{b}_j\rangle,\tag{11.77}$$

这里的平均可以对基态求也可对热平衡态求.对于有N_s格点组成的系统,ρ_{ij}是$N_s\times N_s$的矩阵,记其本征值为λ_n.当体系没有玻色凝聚时,所有密度矩阵本征值都是1的量级,而当存在玻色凝聚时,最大本征值,记为λ_0,是N_s 的量级,同时其他本征值仍是1的量级.利用λ_0, 我们可以估计系统的玻色凝聚所占比例为$\frac{\lambda_0}{N}$, 也就是凝聚分数,当这个分数随着温度,相互作用等参数进入$\mathcal{O}(1)$ 量级时,系统可以认为出现了玻色凝聚现象.

进一步,如果是费米子系统,那么判断是否有玻色凝聚的标准需要更改为费米子对(很多时候是Cooper对)算符的密度矩阵是否具有类似性质,例如费米子对算符为$\hat{b}_i^{\dagger}=\hat{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\hat{c}_{i\downarrow}^{\dagger}$, 那么单粒子密度矩阵为

$$\rho_{ij}=\langle\hat{b}_i^{\dagger}\hat{b}_j\rangle=\langle\hat{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\hat{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}\rangle\tag{11.78}$$

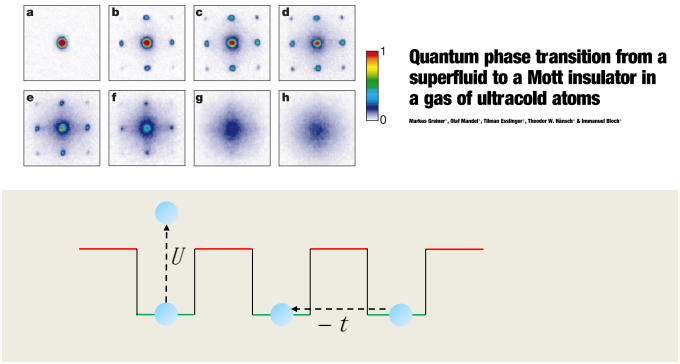


Figure 11.7: Bose-Hubbard模型和它的超冷原子实验实现.[11]

晶格中的玻色子:Bose-Hubbard模型初探

实验上在2002年,德国I.Bloch组在^{87}Rb冷原子体系实现了从超流态到Mott绝缘态的相变.在他们的实验中,玻色型的Rb原子首先被冷却至极低温(nk量级),然后再把它们装载到由三对相向传播的激光形成的光学晶格中.[8]通过增加周期势的深度等效减少原子在晶格中运动的动能[4],他们把体系从超流态调节至玻色子的绝缘态,这种绝缘态是相互作用导致的,一般称为Mott 绝缘态,相应的相变称为超流-Mott 相变.

超流-Mott相变的经典理论研究来自文献[9],Fisher等人考虑了周期势和随机势场下相互作用玻色子的零温相图以及相变行为.在周期势,也就是玻色子处于晶格中的情况下,他们发现系统基态是超流态或Mott 绝缘态,加入随机势(无序势)后会出现玻色玻璃态.Mott态的特征是具有整数的粒子填充密度,粒子空穴激发具有有限能隙,压缩率为零.玻色玻璃态是绝缘的,但有有限的压缩率,粒子-空穴激发无能隙,其类似于电子系统在强无序势中形成的Anderson绝缘体.进一步,Jaksch等人在理论上研究了光晶格中的超流-Mott 相变[10],他们建议把玻色凝聚气体装载到光晶格当中并通过调节光晶格势的深度以实现超流-Mott 相变.以这些理论研究为基础,Greiner等人最终在2002 年观测到超流Mott 相变.[11]

在前面几节中,我们已经讨论了弱相互作用玻色子系统中超流态的Bogoliubov理论,在这一节我们讨论这里提到的Mott 绝缘态以及相关的量子相变.

[4]也可用Feshbach共振技术调节原子之间相互作用的强度

回忆我们的基本模型哈密顿量,

$$\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]\hat{\psi}(x)+g\int d^dx\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x) \quad (11.79)$$

实验中的原子处于光晶格形成的周期性晶格势当中,对三维系统的晶格势可近似为

$$U(x,y,z)=V_0(\sin^2(kx)+\sin^2(ky)+\sin^2(kz)), \quad (11.80)$$

$k=2\pi/\lambda, V_0$分别是产生光晶格的驻波激光场的波矢和势的最大值.实验上产生的系统大约有15000个格点,即三维空间的每一个方向有65个格点,平均每个格点的原子数为$1-3$.[11]在这里,我们把场算符用Wannier函数展开(当然也可以用Bloch函数展开,但不便于Mott态的讨论)

$$\hat{\psi}(x)=\sum_j w(x-R_j)\hat{b}_j \quad (11.81)$$

$\hat{b}_j,\hat{b}_j^\dagger$代表在晶格的$j$格点产生或湮灭一个玻色子,而$w(x-R_j)$代表以原子实所在位置$R_j$为中心Wannier波函数,一般而言是随着空间位置快速衰减的函数,类似于Gauss 函数,通常衰减长度在几个格点的尺度.此外我们还假定只有最低能带起作用,这样Wannier函数本身就不包含能带指标,在通常的冷原子实验中都近似符合这个假定.

逆变换是$\hat{b}_j=\int d^dxw^*(x-R_j)\hat{\psi}(x)$,这样,我们可以证明$\hat{b}_j,\hat{b}_j^\dagger$是标准的玻色子算符满足

$$[\hat{b}_j,\hat{b}_m^\dagger]=\int d^dx\int d^dyw^*(y-R_j)w(x-R_m)[\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(y)]=\int d^dxw^*(x-R_j)w(x-R_m)=\delta_{jm} \quad (11.82)$$

同理可得$[\hat{b}_j,\hat{b}_m]=[\hat{b}_j^\dagger,\hat{b}_m^\dagger]=0$, 换句话说不同格点的玻色子总是对易的,只有同一个格点的产生湮灭算符才有非零的对易子.

代入Wannier函数展开的形式,我们得到

$$\hat{H}_0=\sum_{j,m}\int d^dxw^*(x-R_j)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]w(x-R_m)\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_m \quad (11.83)$$

为了方便讨论,我们定义如下几个积分

$$\int d^dxw^*(x-R_j)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]w(x-R_j)=\varepsilon_j \quad (11.84)$$

$$\int d^dxw^*(x-R_j)\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right]w(x-R_m)=-t_{jm},\quad j\neq m \quad (11.85)$$

这样体系的单粒子动能部分可以表示为

$$\hat{H}_0=\sum_{j,m}(-t_{jm}+\varepsilon_j\delta_{jm})\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_m \quad (11.86)$$

既然是周期性晶格系统,那么其必然满足周期性,也就是任意一个格点的能量ε_j都应相同, 此时该能量为常数,可以直接舍去而不影响动力学.另一方面,由于Wannier函数的空间快速衰减,我们可以认为格点间的跃迁能t_{jm}仅在相邻的几个晶格尺度内非零,并且一般是最近邻跃迁主导.作为近似,我们仅考虑最近邻跃迁,故而模型简化为

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{<j,m>} \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_m \tag{11.87}$$

对于相互作用部分有

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= g \sum_{jklm} \int d^d x w^*(x-R_j) w^*(x-R_k) w(x-R_l) w(x-R_m) \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_m \\ &= \sum_{jklm} g_{jklm} \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_m \end{aligned} \tag{11.88}$$

如果我们假定相互作用中最重要的部分是同格点的相互作用,也就是$g_{j=k=l=m} \equiv \frac{U}{2}$, 那么我们有

$$\hat{H}_{int} \simeq \frac{U}{2} \sum_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_j = \frac{U}{2} \sum_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j (\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j - 1) \tag{11.89}$$

结合动能$\hat{H}_0$以及势能$\hat{H}_{int}$并引入化学势,我们得到著名的Bose-Hubbard模型:

$$\boxed{\hat{H}_{BH} = -t \sum_{<j,m>} \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_m - \mu \sum_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j (\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j - 1)} \tag{11.90}$$

- 化学势μ是均匀的,但是如果我们考虑体系处在额外的简谐势阱中,那么还需要加上相关的贡献,在Tomas-Fermi近似下相当于把化学势μ直接改写为$\mu - \frac{1}{2}\omega^2(\vec{j} - \vec{j}_0)^2$,这里$\vec{j}_0$为势阱中心的格点,而$\vec{j}$为所考虑的格点.
- 我们仅仅保留了同一个格点的相互作用能U,原则上多格点相互作用g_{jklm}对物理性质也会有影响.
- 粒子之间的跃迁也只保留了最近邻部分,原则上可以包含更长程的跃迁.

几个极限分析

$U = 0$极限:无相互作用玻色子

当相互作用$U = 0$时,我们得到无相互作用玻色子哈密顿量

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{<j,m>} \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_m - \mu \sum_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \tag{11.91}$$

利用傅里叶变换$\hat{b}_j = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{ikR_j} \hat{b}_k$ 可得

$$\hat{H}_0 = \sum_k (\varepsilon_k - \mu) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \tag{11.92}$$

这里能带色散$\varepsilon_k = -t\sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}}$,$\vec{\delta}$ 是最近邻格点之间的位置矢量.对于d维的超立方体,可以得到$\varepsilon_k = -2t\sum_{i=1,..,d}\cos k_i = -2t\cos k_x - 2t\cos k_y - 2t\cos k_z - ....$在低温时,玻色凝聚会出现,玻色子占据能量最低态.当$t > 0$ 时,$k = (0, 0, ..., 0)$ 是凝聚动量,也就是玻色子大量占据的态. [5]

小U情况:弱相互作用玻色子

利用傅里叶变换,我们得到动量空间的哈密顿量是

$$\hat{H} = \sum_k(\varepsilon_k - \mu)\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k + \frac{U}{2}\sum_{k,k',q}\hat{b}_{k+q}^\dagger\hat{b}_{k'-q}^\dagger\hat{b}_{k'}\hat{b}_k \tag{11.93}$$

注意到此哈密顿量与我们先前讨论的超流He-4的Bogoliubov理论形式完全一致,利用那里的结果,可以得到

$$\hat{H} \approx (\varepsilon_{k=0} - \mu)b_0^2 + \frac{U}{2}b_0^4 + \sum_{k\neq 0}(\varepsilon_k - \mu)\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k + \frac{U}{2}b_0^2\sum_{k\neq 0}(4\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k + \hat{b}_k^\dagger\hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_{-k}\hat{b}_k) = \sum_k E_k\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + ...$$

准粒子能谱$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \mu + 4\frac{U}{2}b_0^2)^2 - (\frac{U}{2}b_0^2)^2}$.

$t = 0$:零能带宽度极限

此时,体系的哈密顿量退耦合为每个孤立格点的求和形式,即

$$H_U = \sum_j\left[-\mu\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j + \frac{U}{2}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j(\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j - 1)\right] \tag{11.94}$$

此时,我们利用每个格点的粒子数或者占据数态$|n_b\rangle$,可得某个格点的能量

$$E_b = -\mu n_b + \frac{U}{2}n_b(n_b - 1) \tag{11.95}$$

这样具有$n_b + 1$个粒子的态$|n_b + 1\rangle$与具有n_b个粒子的态$|n_b\rangle$的能级差是

$$\Delta E_b = E_b(n_b + 1) - E_b(n_b) = -\mu + Un_b \tag{11.96}$$

显然,可以看到能级差是粒子数依赖的,也就是非均匀的.例如

$$E_b(1) - E_b(0) = -\mu \tag{11.97}$$

$$E_b(2) - E_b(1) = -\mu + U \tag{11.98}$$

$$E_b(3) - E_b(2) = -\mu + 2U \tag{11.99}$$

物理上来说,这里能级差实际上反映的是由于相互作用的原因,给体系添加一个粒子需要付出额外的排斥能,其大小等于添加的粒子与之前所有粒子的相互作用总和,即Un_b.

[5] 当ε_k存在多个不等价的最小值时,玻色子会在这些最小值之间任意占据,此时任然会有玻色凝聚发生.但是当极小值数目足够多,以至于趋于无穷时,平均每个极小值动量占据的数目已经不是宏观量级,此时玻色凝聚不会发生.这种现象类似于磁性系统中的阻挫效应.

- $\Delta E_b = -\mu + Un_b > 0$:这表示在一个格点上添加一个粒子需要消耗有限的能量,这看起来像是绝缘体的行为.
- $\Delta E_b = -\mu + Un_b < 0$:这导致体系倾向于在一个格点占据更多的粒子,这表现得像无能隙的流体.
- $\Delta E_b = -\mu + Un_b = 0$:这相当于是绝缘体与流体态之间的临界点.

$t << U$极限

当体系的跃迁能远小于相互作用能时,我们可以像铁磁体的自旋波那样,考虑在每个格点都填充了n_b 个粒子的系统中存在粒子或者空穴激发.为了方便参考,我们定义

$$\hat{H}_{BH} = \hat{H}_t + \hat{H}_U,\ \ \hat{H}_t = -t\sum_{<j,m>}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_m,\ \ \hat{H}_U = \sum_j\left[-\mu\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j + \frac{U}{2}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j(\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j - 1)\right] \tag{11.100}$$

对于在m格点具有一个空穴的态,其波函数是

$$|\phi_m^h\rangle = |n_b - 1\rangle_m \prod_{j\neq m}|n_b\rangle_j \tag{11.101}$$

而在m格点多一个粒子的粒子态是

$$|\phi_m^p\rangle = |n_b + 1\rangle_m \prod_{j\neq m}|n_b\rangle_j \tag{11.102}$$

对这两个态作用哈密顿量$\hat{H}_U$可得对应的能量

$$\hat{H}_U|\phi_m^h\rangle = E_{n_b}^h|\phi_m^h\rangle,\ \ E_{n_b}^h = E_b(n_b)(N_s - 1) + E_b(n_b - 1) \tag{11.103}$$

$$\hat{H}_U|\phi_m^p\rangle = E_{n_b}^p|\phi_m^p\rangle,\ \ E_{n_b}^p = E_b(n_b)(N_s - 1) + E_b(n_b + 1) \tag{11.104}$$

另一方面,$\hat{H}_t$对于$|\phi_m^{h/p}\rangle$的作用是

$$\hat{H}_t|\phi_m^h\rangle = -tn_b(|\phi_{m-1}^h\rangle + |\phi_{m+1}^h\rangle) + ... \tag{11.105}$$

这里我们只给出一维情况的形式,并且忽略了产生两个空穴激发的情况,(多空穴会有更高的能量,在$t/U \to 0$时忽略它们是合理的近似)对于d维超立方体,上式右边是对所有m格点的最近邻态求和,共有$2d$项.同理有

$$\hat{H}_t|\phi_m^p\rangle = -t(n_b + 1)(|\phi_{m-1}^p\rangle + |\phi_{m+1}^p\rangle) + ... \tag{11.106}$$

这样体系的单空穴或粒子激发的(近似)本征态可通过每个格点的空穴或粒子态叠加而成,叠加系数是傅里叶系数e^{ikR_m}:

$$|\Psi_k^{h/p}\rangle = \sum_m e^{ikR_m}|\phi_m^{h/p}\rangle \tag{11.107}$$

代入定态Schödinger方程可得

$$\hat{H}_{BH}|\Psi_k^h\rangle = \sum_m e^{ikR_m} E_{n_b}^h |\phi_m^h\rangle - tn_b \sum_m e^{ikR_m}(|\phi_{m-1}^h\rangle + |\phi_{m+1}^h\rangle) = E|\Psi_k^h\rangle = \sum_m e^{ikR_m} E|\phi_m^h\rangle \tag{11.108}$$

比较方程两边系数并适当移动$-t$项的指数因子,我们得到

$$\sum_m [e^{ikR_m} E_{n_b}^h - tn_b(e^{ik(R_m+1)} + e^{ik(R_m-1)}) - e^{ikR_m} E]|\phi_m^h\rangle = 0 \tag{11.109}$$

这样我们得到单空穴态的能量

$$E = E_{n_b}^h - 2tn_b \cos k \tag{11.110}$$

而对于单粒子态,则有类似的形式

$$\sum_m [e^{ikR_m} E_{n_b}^p - t(n_b+1)(e^{ik(R_m+1)} + e^{ik(R_m-1)}) - e^{ikR_m} E]|\phi_m^p\rangle = 0 \tag{11.111}$$

其能量是

$$E = E_{n_b}^p - 2t(n_b+1)\cos k \tag{11.112}$$

这样我们得到体系在强耦合情况下的单粒子与空穴激发的能量

$$E_k^p = E_{n_b}^p - 2t(n_b+1)\cos k \tag{11.113}$$

$$E_k^h = E_{n_b}^h - 2tn_b \cos k \tag{11.114}$$

- 需要指出,我们这里的单粒子/空穴态能谱是近似的,因为忽略了多空穴和粒子激发的贡献.
- 单粒子态和空穴态在$t << U$情况下相对于每个格点都占据n_b个粒子态是低能激发态,我们用这些激发态近似系统的真正低能激发态.

此时,我们注意到E_k^h和E_k^p相当于把原来的单个能级$E_{n_b}^h$ 和$E_{n_b}^p$扩展为宽度$4tn_b$和$4t(n_b+1)$的能带.这样粒子态与空穴态的能量差是

$$E_k^p - E_k^h = U(2n_b - 1) - 2\mu - 2t\cos k \tag{11.115}$$

而相应的能带能隙则是

$$\Delta E = E_k^p - E_k^h - 2t(n_b+1) \tag{11.116}$$

当能隙大于零时,体系是一个绝缘体,这样当前的绝缘态实际上来自于相互作用U,也就是说这里存在相互作用导致的绝缘态,一般称为Mott绝缘态.

- 这里的能带,其实并不是传统能带理论中的能带,而是多体系统的激发能谱,可以明确的看到,当相互作用关闭时,此能带直接消失,而传统的能带理论显然独立于相互作用存在.
- 此外,能带理论中的能带并不依赖与粒子的占据,而这里的能带宽度明显依赖占据数n_b.

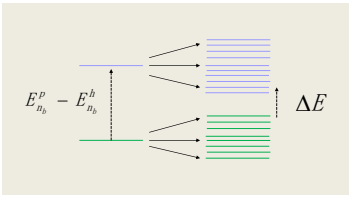


Figure 11.8: Bose-Hubbard模型的强耦合极限物理.

超流-Mott相变的平均场理论

根据前面几小节的讨论,我们已经知道当相互作用$U << t$时,体系是处于超流态

$$|\Psi_{SF}\rangle \propto (\hat{b}_0^\dagger)^N|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_j \hat{b}_j^\dagger\right)^N |0\rangle \tag{11.117}$$

而当$U >> t$并且每个格点填充整数个粒子时,系统是处于Mott绝缘态

$$|\Psi_{Mott}\rangle \propto \prod_{j=1}^{N_s} (\hat{b}_j^\dagger)^{N/N_s}|0\rangle \tag{11.118}$$

既然这两个极限下的物态完全不同那么我们期待两个态之间可能存在相变,这就是晶格玻色子系统中特有的超流-Mott 相变,特别是这个相变发生在$T = 0$,因此是量子相变.

为了讨论相变,我们这里只采用最粗糙的平均场近似,即

$$\begin{aligned}\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_m &= \left(\langle\hat{b}_j^\dagger\rangle + \hat{b}_j^\dagger - \langle\hat{b}_j^\dagger\rangle\right)\left(\langle\hat{b}_m\rangle + \hat{b}_m - \langle\hat{b}_m\rangle\right) \\ &\approx \langle\hat{b}_j^\dagger\rangle\hat{b}_m + \hat{b}_j^\dagger\langle\hat{b}_m\rangle - \langle\hat{b}_j^\dagger\rangle\langle\hat{b}_m\rangle\end{aligned}$$

这意味着对于$\hat{H}_t$存在如下退耦合近似:

$$\hat{H}_t = -t\sum_{<j,m>}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_m \approx -t\sum_{<j,m>}\left[\langle\hat{b}_j^\dagger\rangle\hat{b}_m + \hat{b}_j^\dagger\langle\hat{b}_m\rangle - \langle\hat{b}_j^\dagger\rangle\langle\hat{b}_m\rangle\right] \tag{11.119}$$

进一步我们假定体系具有平移不变性,且通过选择相位使序参量成为实常数,即有$\langle\hat{b}_j^\dagger\rangle = \langle\hat{b}_m\rangle = b_0$, 这样体系哈密顿量近似为

$$\hat{H}_{BH} \approx tb_0^2 N_s z + \hat{H}_{MFT} \tag{11.120}$$

这里z是配位数而$\hat{H}_{MFT}$代表平均场哈密顿量.

$$\boxed{\hat{H}_{MFT}=\sum_j \hat{H}_{site}=\sum_j\left[-tb_0z(\hat{b}_j^\dagger+\hat{b}_j)-\mu\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j+\frac{U}{2}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j(\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j-1)\right]} \tag{11.121}$$

对于每个格点的等效哈密顿量$\hat{H}_{site}$,我们可以分成两项

$$\hat{H}_{site}=\hat{H}_{site}^t+\hat{H}_{site}^U \tag{11.122}$$

$$\hat{H}_{site}^t=-tb_0z(\hat{b}_j^\dagger+\hat{b}_j) \tag{11.123}$$

$$\hat{H}_{site}^U=-\mu\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j+\frac{U}{2}\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j(\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j-1) \tag{11.124}$$

接下来,如果我们假定$\hat{H}_{site}^t$贡献远小于$\hat{H}_{site}^U$,那么利用量子力学中的非简并微扰理论可得体系能量的微扰修正是

$$E_b'(n_b)=E_b(n_b)+\langle n_b|\hat{H}_{site}^t|n_b\rangle+\sum_{m\neq n_b}\frac{|\langle m|\hat{H}_{site}^t|n_b\rangle|^2}{E_b(n_b)-E_b(m)}+... \tag{11.125}$$

一阶微扰修正$\langle n_b|\hat{H}_{site}^t|n_b\rangle$由于$\hat{H}_{site}^t$改变粒子数因而该期望值为零.更一般地,任意奇数阶修正改变粒子数为奇数次,这样相应的修正都为零,(文献[6]研究了四阶修正的结果)这样我们得到一般形式的能量表达式:

$$E_b'(n_b)=E_b(n_b)+A(n_b)b_0^2+B(n_b)b_0^4+... \tag{11.126}$$

注意到这个表达式与Landau自由能$F=r\phi^2+u\phi^4+...$关于序参量ϕ的展开形式上完全一致,因此当系数$B(n_b)>0$时,二次项系数$A(n_b)<0$对应的状态是序参量$b_0\neq 0$的超流态,而$A(n_b)<0$对应$b_0=0$的Mott态,因此$A(n_b)=0$决定了超流-Mott相变点的位置.

直接计算我们发现准确到二阶修正的能量是

$$\begin{aligned}E_b'(n_b) &= E_b(n_b)+\frac{(-tb_0z\sqrt{n_b+1})^2}{E_b(n_b)-E_b(n_b+1)}+\frac{(-tb_0z\sqrt{n_b})^2}{E_b(n_b)-E_b(n_b-1)}\\ &= E_b(n_b)+(tb_0z)^2\left[\frac{n_b+1}{\mu-Un_b}+\frac{n_b}{U(n_b-1)-\mu}\right]\end{aligned} \tag{11.127}$$

当我们添加常数能量项tb_0^2z后,体系的平均每格点能量是

$$E'=E_b(n_b)+\left\{(tz)^2\left[\frac{n_b+1}{\mu-Un_b}+\frac{n_b}{U(n_b-1)-\mu}\right]+tz\right\}b_0^2 \tag{11.128}$$

根据Landau相变理论,序参量b_0的二次项系数为零决定体系的相变点,这样我们得到超流相与Mott绝缘相的相变边界由下式定出:

$$(tz)^2\left[\frac{n_b+1}{\mu-Un_b}+\frac{n_b}{U(n_b-1)-\mu}\right]+tz=0 \tag{11.129}$$

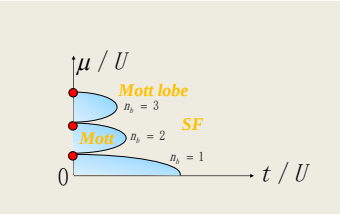


Figure 11.9: Bose-Hubbard模型的平均场基态相图,显示玻色子的Mott态和超流态.

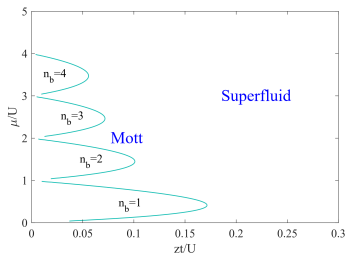


Figure 11.10: 实际计算得到的平均场基态相图.(公式11.130)

令$\tilde{t}=t/U$和$\tilde{\mu}=\mu/U$并参数化上述方程,我们得到

$$(\tilde{t}z)\left[\frac{n_b+1}{\tilde{\mu}-n_b}+\frac{n_b}{(n_b-1)-\tilde{\mu}}\right]+1=0 \tag{11.130}$$

$$n_b=1:\quad \tilde{t}z=\frac{1}{\frac{1}{\tilde{\mu}}+\frac{2}{1-\tilde{\mu}}} \tag{11.131}$$

$$n_b=2:\quad \tilde{t}z=\frac{1}{\frac{2}{\tilde{\mu}-1}+\frac{3}{3-\tilde{\mu}}} \tag{11.132}$$

这样可以在给定粒子占据数n_b数的情况下得到$\tilde{t}z$对$\tilde{\mu}$的函数,由于$\tilde{t}z>0$,我们可以得到一系列与坐标轴(μ轴)相交的圆弧,这些圆弧内部是Mott 绝缘态,而圆弧以外的区域是超流态,我们通常把这种结构叫做$Mott\ \ lobe$.

此外,对固定的n_b我们可以反解出化学势μ,并且令解出的化学势相等可得发生超流-Mott相变所需要的最小相互作用强度,即

$$\frac{U}{zt}=2n_b+1+\sqrt{(2n_b+1)^2-1} \tag{11.133}$$

对于$n_b=1$给出$\frac{U}{zt}\simeq 5.83$,此时对三维立方晶格系统有$U/t=34.98$,这个结果与后来Greiner等人的实验测量结果$U/t\simeq 36$相当接近. [11]

超越平均场理论*

事实上,利用路径积分形式并引入超流序参量作为辅助场,我们可以积掉原子自由度以获得系统的粒子-空穴激发谱,[6]

$$\omega_{k\pm} = -\mu + \frac{U}{2}(2n_b - 1) - \frac{\varepsilon_k}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_k^2 - (4n_b + 2)U\varepsilon_k + U^2} \tag{11.134}$$

这其实就是先前$t << U$极限讨论时得到的两支多体能带,那么能隙由$\omega_{k+} - \omega_{k-}$确定,在大$U$ 极限下能隙近似为U.实验上,人们通过倾斜光晶格使得处于Mott态的临近原子在格点能量差等于能隙时可发生隧穿过程得以探测激发能隙.[11]进一步,具有格点尺度分辨能力的实验直接探测了每个格点原子的占据情况,并且显示出明显的Mott壳层结构.[12][6]

无穷大U极限:变换至自旋模型

当$U = \infty$时,每一个格点的玻色子占据数只有两个值,即

$$n_b = 0, 1 \tag{11.135}$$

因此在每一个格点我们只有两个状态$|1\rangle_j, |0\rangle_j$,这可以对应于一个自旋$S = 1/2$系统,

$$|0\rangle_j \to |\downarrow\rangle_j, |1\rangle_j \to |\uparrow\rangle_j \tag{11.136}$$

同时算符对应关系是

$$\hat{b}_j^\dagger \to \hat{S}_j^\dagger, \hat{b}_j \to \hat{S}_j^-, \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \to \hat{S}_j^z + \frac{1}{2} \tag{11.137}$$

这样我们得到无穷大U时的Bose-Hubbard模型

$$\hat{H}_{BH}^{U=\infty} = -t \sum_{<j,m>} \hat{S}_j^\dagger \hat{S}_m - \mu \sum_j \left(\hat{S}_j^z + \frac{1}{2}\right) \tag{11.138}$$

这实际上就是横场下的量子XY模型. 当$\langle \hat{S}_j^\dagger \rangle \neq 0$时,自旋系统进入磁有序态,这对应于玻色子系统的超流态

$$\langle \hat{S}_j^\dagger \rangle \propto < \hat{b}_j^\dagger > \neq 0 \tag{11.139}$$

而当$\langle \hat{S}_j^\dagger \rangle = 0$时,自旋系统进入磁无序态,而玻色子系统则成为Mott绝缘态

$$\langle \hat{S}_j^\dagger \rangle \propto < \hat{b}_j^\dagger > = 0 \tag{11.140}$$

类似量子Ising模型的处理,利用路径积分形式,我们可以证明这里的量子XY模型等价于各向异性的$d+1$ 维经典XY模型,特别是临界性质可以由经典模型直接模拟得到.(经典模型的蒙特卡洛模拟没有符号问题,可以得到可靠的数值估计.)例如二维量子XY模型的零温量子相变点的临界指数与三维经典XY模型的有限温度相变临界指数相同.

[6]壳层结构来自约束外势导致的空间非均匀性

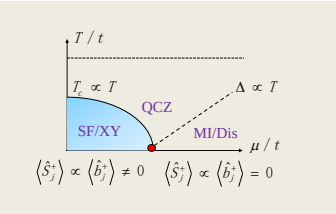


Figure 11.11: 无穷大U下的Bose-Hubbard模型的等效量子XY模型的相图.

注意到一维的量子XY模型是可以通过Jordan-Wigner变换求解,即

$$\hat{H}_{BH}^{U=\infty} = -t\sum_j (\hat{f}_j^\dagger \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^\dagger \hat{f}_j) - \mu \sum_j \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j \tag{11.141}$$

并且硬核玻色子算符与费米子算符的对应关系是

$$\boxed{\hat{b}_j^\dagger = \hat{S}_j^+ = \hat{f}_j e^{i\pi \sum_{n<j} \hat{f}_n^\dagger \hat{f}_n}, \quad \hat{f}_j^\dagger = S_j^+ e^{-\pi \sum_{n<j} (\hat{S}_j^z + \frac{1}{2})} = \hat{b}_j e^{-i\pi \sum_{n<j} \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n}} \tag{11.142}$$

$$\boxed{\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j = \hat{S}_j^z + \frac{1}{2} = \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j} \tag{11.143}$$

- 一维无穷大U下的Bose-Hubbard模型等价于无自旋费米子模型和横场下的量子XY 模型.
- 一维无自旋费米子可以用硬核玻色子玻色化,而硬核玻色子反过来可用费米子费米化.

这样无穷大U下的一维Bose-Bubbard模型就转化为自由费米子模型.对于后者,$T=0$时调节化学势μ 导致系统发生Lifshitz相变,即从金属态转变为没有费米子占据的绝缘态.把费米子翻译为玻色子,那么Lifshitz相变意味着玻色子从准长程有序的正常流体态($\langle \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger \rangle \sim \frac{1}{|R_i - R_j|^{2K}} = \frac{1}{|R_i - R_j|^2}$, 这里对应一维自由费米子因此Luttinger参数$K=1$.)转变为Mott绝缘态.根据外磁场下一维XY 模型的讨论,相变发生在$2t/\mu = \pm 1$处,此时电荷极化率χ_c以幂律$\frac{1}{\sqrt{|2t/\mu|-1}}$发散,而粒子数涨落满足简单的平方反比关系,即$\langle (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i - \langle \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \rangle)(\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j - \langle \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \rangle) \rangle \sim \frac{1}{|R_i - R_j|^2}$.

本章小结与进一步阅读

本章小结 弱相互作用玻色子形成超流;强相互作用晶格玻色子形成Mott态.

本章关键词 超流;玻色凝聚;非对角长程序;Bose-Hubbard模型

进一步阅读 Lancaster和Blundell合著的《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》第四十二章;冯端和金国钧合著《凝聚态物理学》(上卷)第十八章第一节和(下卷)第二十六章第四节

附录

超流体的临界速度

这一部分讨论来自M.Franz在PI的网络课程视频.[2]

最后我们简单讨论一下超流体的临界速度问题.我们考虑一个质量为M的宏观物体在超流体中流动,速度为$\vec{V}$,在流动过程中可能激发一个类声子型模式(假定只考虑低能的情况),其能量动量为$\hbar\omega_{\vec{k}}$和$\hbar\vec{k}$.在这个声子型模式激发后,宏观物体的速度变为$\vec{V}'$,那么根据能量守恒和动量守恒,可以得到两个方程

$$\frac{1}{2}M\vec{V}^2 = \frac{1}{2}M\vec{V}'^2 + \hbar\omega_{\vec{k}} \tag{11.144}$$

$$M\vec{V} = M\vec{V}' + \hbar\vec{k} \tag{11.145}$$

从第二个方程解出速度$\vec{V}'$并代入第一个方程可得

$$\hbar\vec{V}\cdot\vec{k} = \frac{(\hbar\vec{k})^2}{2M} + \hbar\omega_{\vec{k}} \tag{11.146}$$

由于是宏观物体,其质量相比对微观粒子而言是大量,故$\frac{(\hbar\vec{k})^2}{2M}$可以忽略,这样有

$$\hbar\vec{V}\cdot\vec{k} = \hbar\omega_{\vec{k}} \tag{11.147}$$

在低温下,体系的声子激发的能谱近似为$\hbar\omega_{\vec{k}} \approx \hbar c|k|$,其中$c$是声子的有效速度,那么方程简化为

$$|\vec{V}|\cos\theta = c \tag{11.148}$$

角度θ表示与物体速度与声子动量的夹角.显然当宏观物体的速度V小于声子速度c 时,体系不会有声子激发,超流体得以稳定,反过来说,如果物体不动,超流体以速度V运动,那么这表明超流体具有临界速度.在该速度以上会有声子激发而导致超流性丧失,而在该临界速度以下,超流体处于稳定状态,没有低能激发,依然保持超流动性不变.

超流Mott相变与量子转子模型

我们已经知道在整数填充时改变相互作用与格点间跃迁的比值会诱导超流-Mott相变,但是相变的更为基本的性质并不能从简单的平均场理论获知,因此在这一节我们将试图采用量子转子模型描述相变的物理内容。

首先,我们注意到对于定义在每一个格点上的玻色子算符$\hat{b}_j$可以分解为相位算符$\hat{\theta}_j$和粒子数算符$\hat{n}_j$:

$$\boxed{\hat{b}_j = e^{i\hat{\theta}_j}\sqrt{\hat{n}_j},\quad \hat{b}_j^\dagger = \sqrt{\hat{n}_j}e^{-i\hat{\theta}_j}} \tag{11.149}$$

那么有

$$\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j = \sqrt{\hat{n}_j}e^{-i\hat{\theta}_j}e^{i\hat{\theta}_j}\sqrt{\hat{n}_j} = \hat{n}_j \tag{11.150}$$

即$\hat{n}_j$表示格点上的玻色子数.进一步我们知道生灭算符满足对易关系$[\hat{b}_j, \hat{b}_j^\dagger] = 1$,代入相位粒子数算符可得

$$\hat{b}_j\hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j = e^{i\hat{\theta}_j}\hat{n}_j e^{-i\hat{\theta}_j} - \hat{n}_j = 1 \tag{11.151}$$

为了满足对易关系的要求,我们发现只要令$\hat{n}_j, \hat{\theta}_j$满足正则对易关系

$$[\hat{n}_j, \hat{\theta}_j] = i \tag{11.152}$$

那么有

$$[\hat{n}_j, e^{-i\hat{\theta}_j}] = [\hat{n}_j, \hat{\theta}_j]\frac{\partial e^{-i\hat{\theta}_j}}{\partial\hat{\theta}_j} = e^{-i\hat{\theta}_j} \Rightarrow \hat{n}_j e^{-i\hat{\theta}_j} = e^{-i\hat{\theta}_j}(1+\hat{n}_j) \tag{11.153}$$

这样对易关系就可以得到满足$\hat{b}_j\hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_j^\dagger\hat{b}_j = e^{i\hat{\theta}_j}\hat{n}_j e^{-i\hat{\theta}_j} - \hat{n}_j = 1 + \hat{n}_j - \hat{n}_j = 1$。注意到不同格点间的玻色子算符是完全对易的,这样我们得到如下重要的对易关系

$$\boxed{[\hat{n}_j, \hat{\theta}_l] = i\delta_{jl}} \tag{11.154}$$

在这里,我们看到相位与粒子数是一对共轭的正则变量,类似于坐标与动量的关系.利用它们可以重写Bose-Hubbard模型如下:

$$\boxed{\hat{H}_{BH} = -t\sum_{\langle j,m\rangle}\sqrt{\hat{n}_j\hat{n}_m}(e^{-i(\hat{\theta}_j-\hat{\theta}_m)} + e^{+i(\hat{\theta}_j-\hat{\theta}_m)}) - \mu\sum_j\hat{n}_j + \frac{U}{2}\sum_j\hat{n}_j(\hat{n}_j-1)}$$

现在假定我们只关心整数填充时的物理,也就是说$\langle\hat{n}_j\rangle = integer = n_0$,那么我们可以忽略跃迁项中粒子数的涨落而用平均值$n_0$代替,我们得到以下模型(粒子数的一次项已经忽略,因为其只影响能量的位置,不改变动力学)

$$\boxed{\hat{H}_{rotor} = \frac{U}{2}\sum_j\hat{n}_j^2 - 2tn_0\sum_{\langle j,m\rangle}\cos(\hat{\theta}_j - \hat{\theta}_m)} \tag{11.155}$$

这就是Bose-Hubbard模型在整数填充时对应的量子转子模型(quantum rotor model). 注意到$\hat{n}$与$\hat{\theta}$是共轭变量,那么粒子数完全确定的态其相位完全不确定,而相位完全确定的态,其粒子数也不确定.更明确的说,我们知道超流态是相位(几乎)完全确定的态,那么每一个格点的粒子数平均值虽然恒定,但是粒子数具有很大的涨落,相反玻色子系统Mott态时每个格点粒子数基本确定,粒子数涨落由于能隙的存在而变得很小,但是相位涨落却很大.这说明量子转子模型中$\hat{n}$反映Mott态的倾向,而$\hat{\theta}$反映超流态的倾向,这与原始Bose-Hubbard 模型的基本图像是一致的.也就是大U下系统形成Mott态,此时转子模型的基态是 $\prod_j|n_j\rangle$(粒子数完全确定,没有涨落,即Mott态),而大t下形成超流态,转子模型给出的基态是$\prod_j|\theta_j = \theta_0\rangle$(相位完全有序态,即超流态).在两个(对称性不同的)相之间应该存在相变,物理上对应超流Mott相变.

量子转子模型的路径积分形式

那么如何看出转子模型相变的普适性质,或者说相变可以用哪种普适类描述?这就需要把量子模型映射到等效的经典模型以分析其临界行为.对于量子转子模型,可以证明它对应的虚时作用量是

$$\boxed{S=\int_0^\beta d\tau\mathcal{L}(\theta,\partial_\tau\theta)=\int_0^\beta d\tau\left[\frac{1}{2U}\sum_j(\partial_\tau\theta_j)^2-2tn_0\sum_{\langle j,m\rangle}\cos(\theta_j-\theta_m)\right],\quad \mathcal{Z}=\int D\theta e^{-S}} \tag{11.156}$$

要证明这个结果,我们首先把虚时形式写成实时形式($\tau=it$)

$$S=\int dt\mathcal{L}(\theta,\partial_t\theta)=\int dt\left[\frac{1}{2U}\sum_j(\partial_t\theta_j)^2+2tn_0\sum_{\langle j,m\rangle}\cos(\theta_j-\theta_m)\right],\quad \mathcal{Z}=\int D\theta e^{iS} \tag{11.157}$$

对于拉格朗日量$\mathcal{L}$,其对应的正则动量是$\Pi_j=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\theta_j}=\frac{1}{U}\partial_t\theta_j$, 那么哈密顿量是

$$\mathcal{H}=\sum_j\Pi_j\partial_t\theta_j-\mathcal{L}=\frac{U}{2}\sum_j\Pi_j^2-2tn_0\sum_{\langle j,m\rangle}\cos(\theta_j-\theta_m) \tag{11.158}$$

最后,利用正则量子化的规则,即赋予正则对易关系$[\hat{\theta}_j,\hat{\Pi}_l]=i\delta_{jl}$,可得

$$\hat{H}=\frac{U}{2}\sum_j\hat{\Pi}_j^2-2tn_0\sum_{\langle j,m\rangle}\cos(\hat{\theta}_j-\hat{\theta}_m) \tag{11.159}$$

注意到$\hat{n}$与$\hat{\Pi}$只差一个负号,那么令$\hat{n}=-\hat{\Pi}$就得到量子转子模型.

转子模型对应XY模型

既然已经得到了转子模型的虚时作用量,那么当我们取作用量的连续极限时,可以发现

$$S=\int_0^\beta d\tau\int d^dx\left[\frac{1}{2Ua^d}(\partial_\tau\theta)^2+\frac{tn_0}{a^{d-2}}(\nabla\theta)^2\right] \tag{11.160}$$

这里a相当于晶格间距,$\theta=\theta(\tau,x)$.令$\theta\to\theta\sqrt{tn_0a^d}$并且定义$g=\frac{U}{tn_0},v_s=\sqrt{2tn_0Ua^2}$,我们可以把作用量重写为

$$S=\int_0^\beta d\tau\int d^dx\frac{1}{2g}\left[(\partial_\tau\theta)^2+v_s^2(\nabla\theta)^2\right] \tag{11.161}$$

可以看到,这就是连续极限下的$d+1$维XY模型,只不过具有各向异性,即空间方向与时间方向有不同的速度v_s 并且时间方向是紧致化在$[0,\beta]$的区间.(θ 在时间方向满足周期边界条件($\theta(\tau,x)=\theta(\tau+\beta,x)$))

- d维量子转子模型对应于$d+1$维经典XY模型.从对称性来看,转子模型在$\hat{\theta}_j \to \hat{\theta}_j + \alpha$的$U(1)$相位变换下是不变的,而XY 模型中也具有$\theta \to \theta + \alpha$的相位不变性,也就是说两个模型具有同样的整体对称性,因而两者之间的对应也是合理的.($O(2) \simeq U(1)$)

- 我们知道经典XY模型在$d \geq 2$维有相变发生,这说明量子转子模型在$d \geq 1$维时存在量子相变,并且相变的普适类就是XY普适类.而注意到作用量中空间与时间导数是同阶的,这说明动力学临界指数$z = 1$,而其他临界指数都可以通过$d+1$维XY模型的临界指数而获得.这样我们也发现超流Mott相变的临界行为由$d+1$ 维XY模型描述.

超流Mott相变的场论描述

采用玻色场相干态路径积分,我们可以很容易地得到Bose-Hubbard模型的虚时作用量:

$$\boxed{S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j - t \sum_{<j,m>} \phi_j^* \phi_m + \frac{U}{2} \sum_j \phi_j^* \phi_j (\phi_j^* \phi_j - 1) \right]} \tag{11.162}$$

在弱耦合,即$U \leq t$时,我们可以用Bogoliubov理论计算上述作用量,但是现在我们主要关心的是强耦合时($U \gg t$)的物理,这提示我们需要对跃迁部分做适当的处理.利用Hubbard-Stratonovich变换引入辅助场Φ退耦合跃迁部分,我们可以得到如下作用量[6]

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j - t \sum_{<j,m>} (\Phi_j^* \Phi_m + \Phi_j^* \phi_m + \phi_j^* \Phi_m) + \frac{U}{2} \sum_j \phi_j^* \phi_j (\phi_j^* \phi_j - 1) \right]$$

如果我们做变量代换$\Phi_j \to \Phi_j - \phi_j$,并且积掉二次型的辅助场,那么我们就重新得到原始的作用量.接下来,我们尝试积掉所有ϕ_j以得到关于辅助场Φ_j的有效作用量

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \int D\Phi e^{\int d\tau t \sum_{\langle jm \rangle} \Phi_j^* \Phi_m} \int D\phi e^{-\int d\tau \sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j - t \sum_{<j,m>} (\Phi_j^* \phi_m + \phi_j^* \Phi_m) + \frac{U}{2} \sum_j \phi_j^* \phi_j (\phi_j^* \phi_j - 1)} \\
&= \int D\Phi e^{\int d\tau t \sum_{\langle jm \rangle} \Phi_j^* \Phi_m} \int D\phi e^{-\int d\tau \sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j + \frac{U}{2} \sum_j \phi_j^* \phi_j (\phi_j^* \phi_j - 1)} e^{\int d\tau t \sum_{<j,m>} (\Phi_j^* \phi_m + \phi_j^* \Phi_m)} \\
&= \int D\Phi e^{\int d\tau t \sum_{\langle jm \rangle} \Phi_j^* \Phi_m} \int D\phi e^{-\int d\tau \sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j + \frac{U}{2} \sum_j \phi_j^* \phi_j (\phi_j^* \phi_j - 1)} \langle e^{\int d\tau t \sum_{<j,m>} (\Phi_j^* \phi_m + \phi_j^* \Phi_m)} \\
&= \int D\phi e^{-\int d\tau \sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j + \frac{U}{2} \sum_j \phi_j^* \phi_j (\phi_j^* \phi_j - 1)} \int D\Phi e^{-S_{eff}}
\end{aligned} \tag{11.163}$$

这里的有效作用量定义为

$$e^{-S_{eff}} \equiv e^{\int d\tau t \sum_{\langle jm \rangle} \Phi_j^* \Phi_m} \langle e^{\int d\tau t \sum_{<j,m>} (\Phi_j^* \phi_m + \phi_j^* \Phi_m)} \rangle_0 \tag{11.164}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle_0 \equiv \frac{\int D\phi \mathcal{O} e^{-\int d\tau \sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j + \frac{U}{2}\sum_j \phi_j^* \phi_j(\phi_j^* \phi_j - 1)}}{\int D\phi e^{-\int d\tau \sum_j \phi_j^*(\partial_\tau - \mu)\phi_j + \frac{U}{2}\sum_j \phi_j^* \phi_j(\phi_j^* \phi_j - 1)}} \tag{11.165}$$

显然直接展开计算可以得到关于Φ场的有效作用量.在低能下可以得到如下有效作用量[1]

$$S = \int \tau \int d^d x \left[K_1 \Phi^* \partial_\tau \Phi + K_2 |\partial_\tau \Phi|^2 - K_3 \Phi^* \nabla^2 \Phi + r|\Phi|^2 + \frac{u}{2}|\Phi|^4 \right] \tag{11.166}$$

注意到时间导数既有一阶也有二阶,在低能下,如果一阶项存在,那么其会主导最低能的行为,(傅里叶变换后一阶导数对应Ω_n而二阶导数对应Ω_n^2, 当$\Omega_n \to 0$时二次项更快趋于零,因此一阶项是主导项)此时有

$$S_{fb} = \int \tau \int d^d x \left[K_1 \Phi^* \partial_\tau \Phi - K_3 \Phi^* \nabla^2 \Phi + r|\Phi|^2 + \frac{u}{2}|\Phi|^4 \right] \tag{11.167}$$

注意到前面两项就是自由空间玻色子的行为,因为傅里叶变换给出的色散是$\Omega \sim k^2$.如果时间一阶导数项为零,那么系统就是

$$S_{XY} = \int \tau \int d^d x \left[K_2 |\partial_\tau \Phi|^2 - K_3 \Phi^* \nabla^2 \Phi + r|\Phi|^2 + \frac{u}{2}|\Phi|^4 \right] \tag{11.168}$$

可以看到该作用量基本上就是量子转子模型的或者XY模型的作用量,现在这在物理上对应这相互作用驱动的超流Mott 相变的描述.而一次时间导数对应的是改变化学势导致的超流Mott相变.从这里来看两者的相变行为由不同的作用量描述,具有不同的临界行为.

第十一章习题

习题1:一些概念

Q1:写出三维自由空间自由玻色子玻色凝聚相变的临界指数α, β.

Q2:证明Bogoliubov变换引入算符$\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_{k'}^{\dagger}(k, k' > 0)$满足标准玻色子对易关系.

Q3:解释Bose-Hubbard中Mott绝缘体的能带与通常绝缘体能带的差别.

习题2:Bose-Hubbard模型

Q:试讨论一维Bose-Hubbard模型在$U = \infty$时的基态相图.

Bibliography

[1] Piers Coleman, Introduction to Many-Body Physics, 第四章

[2] Marcel Franz, Condensed Matter, http://pirsa.org/C14035

[3] Alexander L. Fetter and John Dirk Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, 第十章

[4] B. J. Powell, Emergent particles and gauge fields in quantum matter, arXiv:2008.08799v1.

[5] T. D. Lee, K. Huang and C. N. Yang, Eigenvalues and Eigenfunctions of a Bose System of Hard Spheres and Its Low-Temperature Properties, Phys. Rev. **106**, 1135 (1957).

[6] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. C. Stoof, Quantum phases in an optical lattice, Rhys. Rev. A **63**, 053601 (2001).

[7] Subir Sachdev, Quantum Phase Transitions (2nd), 第九章

[8] I. Bloch, J. Dalibard and W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).

[9] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein and D. S. Fisher, Boson localization and the superfluid-insulator transition, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).

[10] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner and P. Zoller, Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108(1998).

[11] M. Greiner, O. Mandel, T.Esslinger, T. W. Hansch and I. Bloch, Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms, Nature **415**, 39 (2002).

[12] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Folling, L. Pollet and M. Greiner, Probing the Superfluid to Mott Insulator Transition at the Single Atom Level, Science **329**, 547 (2010).

Chapter 12

声子和光子:量子场的集体舞蹈

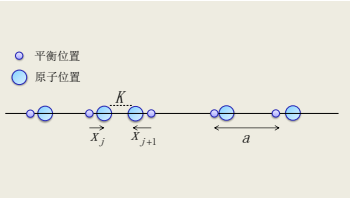


Figure 12.1: 晶格间距为a,弹性系数为K的耦合一维原子链,其中每个原子偏离平衡位置的位移是x_j.

晶格振动与声子:电子无处不在的伙伴

晶格振动的量子声子以及电磁场的量子光子是我们最熟悉的玻色型粒子.在这一章,我们将讨论相关的理论形式并对电声相互作用,拓扑激发,Dirac磁单极等相关话题做简要介绍.需要指出,描述量子电磁场与物质相互作用的最精妙理论是量子电动力学(QED),其建立于上世纪40 年代,是最成功的量子场论也是至今为止最精确的物理理论.

一维原子链的经典描述

考虑一个由N_s个原子组成的一维原子链,晶格间距为a,原子质量是M,原子之间通过弹性系数K 的弹簧相联,每个原子偏离平衡位置的位移是x_j,(平衡位置是每个原子间距a 的排列,即$q_j = ja$) 体系的拉格朗日量是

$$\boxed{\mathcal{L} = \sum_j \frac{1}{2} M \dot{x}_j^2 - \frac{K}{2} \sum_j (x_{j+1} - x_j)^2} \tag{12.1}$$

如果我们准备用哈密顿形式来描述同样的系统,那么我们定义 (正则)动量为$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}$ 则有

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_j} = M \dot{x}_j \tag{12.2}$$

那么,根据勒让德变换可知

$$\mathcal{H} = \sum_j p_j \dot{x}_j - \mathcal{L} = \sum_j \frac{p_j^2}{2M} + \frac{K}{2} \sum_j (x_{j+1} - x_j)^2 \tag{12.3}$$

我们知道,粒子的坐标与动量满足哈密顿运动方程

$$\dot{x}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} = \frac{p_j}{M} \tag{12.4}$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} = K(x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1}) \tag{12.5}$$

这样我们得到第j个原子运动的方程是

$$\ddot{x}_j = \frac{\dot{p}_j}{M} = \frac{K}{M}(x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1}) \tag{12.6}$$

考虑波动解,即$x_j(t) = x^0 e^{ikR_j} e^{-i\omega t}$,那么上式化为

$$-\omega^2 = \frac{K}{M}(e^{ika} - 2 + e^{-ika}) \tag{12.7}$$

这样我们得到原子链中传播的波(通常叫做固体中的声波)的频率是

$$\omega = \sqrt{2\frac{K}{M}(1 - \cos ka)} = \sqrt{\frac{4K}{M}}|\sin\frac{ka}{2}| \tag{12.8}$$

当体系具有周期边界条件时,$x_j = x_{j+N_s}$,那么有

$$x^0 e^{ikR_j} e^{-i\omega t} = x^0 e^{ik(R_j+Na)} e^{-i\omega t} \Rightarrow e^{ikR_j} = e^{ik(R_j+N_s a)} \Rightarrow e^{ikN_s a} = 1 \tag{12.9}$$

即晶格振动的声波传播的波矢取一系列分离的值

$$k = \frac{2\pi}{N_s a} n = \frac{2\pi}{L} n, \quad n \in Z \tag{12.10}$$

注意到波动解x_j在k平移$2\pi/a$后是完全不变的,这表明并不是所有k都是独立的,只有限制在所谓布里渊区的k才是独立的.也就是我们可以取一个$2\pi/a$周期内的k作为独立的波动状态的描述,常用的是取在第一布里渊区($-\frac{\pi}{a} \leqslant k \leqslant -\frac{\pi}{a}$). 这样独立的$k$的取值恰好是格点的数目,即共有$N_s$个不等价的波矢.显然这与$N_s$个不同原子在一维时的$N_s$个总自由度是吻合的.

注意到,在小动量激发的情况下,晶格声波的色散可以近似为

$$\omega \approx \sqrt{\frac{K}{M}} a|k| \tag{12.11}$$

即低动量下声波激发是动量/波矢的线性函数,波速为$v_s = \sqrt{\frac{K}{M}} a$,且正比于弹性系数的1/2 次,反比于原子质量$M$的1/2次.

一维原子链的量子描述

根据一次量子化规则,动量与位移满足正则对易关系 $[\hat{x}_j, \hat{p}_{j'}] = i\delta_{j,j'}$,那么体系的量子哈密顿量是

$$\boxed{\mathcal{H} \to \hat{H} = \sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2M} + \frac{K}{2}\sum_j (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2} \tag{12.12}$$

对动量和位移做傅里叶变换(假定系统满足周期边界条件)

$$\hat{p}_j = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{ikR_j} \hat{p}_k \tag{12.13}$$

$$\hat{x}_j = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{ikR_j} \hat{x}_k \tag{12.14}$$

那么有

$$\sum_j \hat{p}_j^2 = \sum_{k,k'} \frac{1}{N_s} \sum_j e^{ikR_j} e^{ik'R_j} \hat{p}_k \hat{p}_{k'} = \sum_{k,k'} \delta_{k+k'=0} \hat{p}_k \hat{p}_{k'} = \sum_k \hat{p}_k \hat{p}_{-k} \tag{12.15}$$

$$\begin{aligned} &\sum_j (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2 = \sum_j (\hat{x}_{j+1}^2 + \hat{x}_j^2 - \hat{x}_{j+1}\hat{x}_j - \hat{x}_j \hat{x}_{j+1}) = \sum_k (2 - e^{ika} - e^{-ika}) \hat{x}_k \hat{x}_{-k} \\ &= \sum_k 2(1 - \cos ka) \hat{x}_k \hat{x}_{-k} \end{aligned} \tag{12.16}$$

傅里叶变换后,我们得到

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \sum_k \hat{p}_k \hat{p}_{-k} + \frac{M}{2} \sum_k \omega_k^2 \hat{x}_k \hat{x}_{-k} \tag{12.17}$$

我们定义了原子链的色散$\omega_k^2 = 2\frac{K}{M}(1-\cos ka)$. 代入傅里叶变换可得$[x_k, p_{-k'}] = i\delta_{k,k'}$.

定义算符

$$\hat{a}_k = \sqrt{\frac{M\omega_k}{2}} \hat{x}_k + i \frac{1}{\sqrt{2M\omega_k}} \hat{p}_k \tag{12.18}$$

$$\hat{a}_k^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega_k}{2}} \hat{x}_{-k} - i \frac{1}{\sqrt{2M\omega_k}} \hat{p}_{-k} \tag{12.19}$$

可以证明

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger] = -\frac{i}{2}[\hat{x}_k, \hat{p}_{-k}] + \frac{i}{2}[\hat{p}_k, \hat{x}_{-k}] = 1 \tag{12.20}$$

同理可得

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0 \tag{12.21}$$

换句话说,a_k是标准的玻色子算符,满足对易关系.

零模与总动量

- 但是,注意到当$k = 0$时,$\omega_k = 0$,以上变换会出现无穷大的奇异性,这说明即使对简单的一维谐振子链,我们也需要更仔细地考虑量子化过程.

既然零动量态会导致奇异性,那么我们需要把哈密顿量分解为不包含零动量态(零模)的部分和零模部分:

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\sum_{k\neq 0}\hat{p}_k\hat{p}_{-k}+\frac{M}{2}\sum_{k\neq 0}\omega_k^2\hat{x}_k\hat{x}_{-k}+\frac{\hat{p}_{k=0}^2}{2M}+\frac{M}{2}\omega_{k=0}^2\hat{x}_{k=0}^2 \tag{12.22}$$

注意到位移部分由于$\omega_{k=0}=0$而自动为零,则只有动能部分有贡献:

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\sum_{k\neq 0}\hat{p}_k\hat{p}_{-k}+\frac{M}{2}\sum_{k\neq 0}\omega_k^2\hat{x}_k\hat{x}_{-k}+\frac{\hat{p}_{k=0}^2}{2M} \tag{12.23}$$

根据(逆)傅里叶变换我们知道

$$\hat{p}_{k=0}=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_j e^{-i0R_j}\hat{p}_j=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_j\hat{p}_j \tag{12.24}$$

可以看到,$\hat{p}_{k=0}$是每一个格点动量的和,也就是系统的(质心)总动量(严格来说与总动量$\sum_j\hat{p}_j$差了因子N_s).既然是总动量,并且也没有动量耗散出现,那么也是系统的守恒量($[\hat{p}_{k=0},\hat{H}]=0$),也就是说谐振子系统的总动量是守恒的.那么零模对应的总动量p_0取值到底是多少呢?(既然是守恒量,我们可以用本征值代替算符)

首先,整体运动的哈密顿量是自由粒子型的$\frac{\hat{p}_{k=0}^2}{2M}$,那么对应的解就是平面波$\Psi_0(x_{k=0})=e^{ip_{k=0}x_{k=0}}$.($x_{k=0}=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_j x_j$ 相当于系统整体的位移)接下来,我们知道对于当前的原子链(谐振子链),如果每一个原子的位置都相对于各自的平衡移动一个晶格长度a,也相当于每一个原子跳到自己的临近格点,那么整个系统在物理上是不变的,即$|\{x_j\}\rangle\simeq|\{x_j+a\}\rangle$,即有

$$\Psi_0(x_{k=0})=\Psi_0(x_{k=0}+\sqrt{N_s}a),\quad x_{k=0}\to\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_j(x_j+a)=x_{k=0}+\sqrt{N_s}a \tag{12.25}$$

这说明波函数具有$\sqrt{N_s}a$的周期性,那么我们发现

$$e^{ip_{k=0}\sqrt{N_s}a}=1\Rightarrow p_{k=0}=\frac{2\pi m}{\sqrt{N_s}a},\quad m\in Z \tag{12.26}$$

这样,零模(整体运动)的能量是一些列分离的能级

$$E_0=\frac{1}{2MN_s}\left(\frac{2\pi m}{a}\right)^2\propto\frac{1}{N_sM} \tag{12.27}$$

注意能量反比于系统的总质量N_sM,这也说明p_0确实联系系统的整体运动.

- 更一般地,如果系统破缺连续对称性并且是有限大小,那么会有以上讨论的零模出现.特别是当零模与守恒量相关时(这里是总动量)会导致不同能量间隔的一些列分离能级,这就是所谓的tower of states. 在磁性研究中称为Anderson Tower of States, 在晶格规范理论中称为Rotator spectrum. 在热力学极限时$N_s\to\infty$,所有的整体运动态能量相同,产生高度的简并,对应着自发对称破缺.

- 在Mossbauer效应中可以看到tower of states或者说晶格的质心运动的重要效果.当高能光子在固体中散射时,有些散射事件涉及零声子模式,也就是集体运动对应的零模式,这意味着所有的动量都转移到质心上(因为真实固体的质心质量趋于无穷大($N_s \to \infty$)),而几乎没有反冲效应.与自由空间中随机反冲的原子相比,晶体中会出现非常明锐的吸收线宽.

原子链的量子化

在考虑了系统的整体运动后,我们可以利用$\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger (k \neq 0)$来量子化一维原子链. 那么用玻色子算符重写哈密顿量可得

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_k \omega_k(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger) + \frac{\hat{p}_{k=0}^2}{2M} = \sum_k \omega_k(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2}) + \frac{\hat{p}_{k=0}^2}{2M}} \tag{12.28}$$

通常整体运动并不直接影响系统组元的独立运动,那么我们可以忽略整体运动的零模得到如下标准的形式:

$$\hat{H} = \sum_k \omega_k(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2}) \tag{12.29}$$

即一维原子链的量子化描述是一些列不同频率的自由玻色子.体系的任何量子态都可以通过对真空态(零粒子数态)作用玻色子产生算符得到

$$|n_{k_1}, n_{k_2}, ...\rangle = \frac{(a_{k_1}^\dagger)^{n_{k_1}}(a_{k_2}^\dagger)^{n_{k_2}}...}{\sqrt{n_{k_1}!}\sqrt{n_{k_2}!}...}|0\rangle \tag{12.30}$$

当然,如果我们考虑零模态,那么系统的总量子态是粒子占据数态与零模态的直积$|n_{k_1}, n_{k_2}, ...\rangle \bigotimes |p_{k=0}\rangle$.

注意到非零模的$\hat{x}_k$和$\hat{p}_k$满足

$$\begin{aligned}\hat{x}_k &= \frac{1}{\sqrt{2M\omega_k}}(\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger) \\ \hat{p}_k &= \frac{1}{i}\sqrt{\frac{M\omega_k}{2}}(\hat{a}_k - \hat{a}_{-k}^\dagger)\end{aligned} \tag{12.31}$$

这里已经利用能谱的空间反演对称$\omega_k = \omega_{-k}$.这样我们发现

$$\hat{x}_j = \frac{1}{\sqrt{2MN_s}}\sum_{k\neq 0} e^{ikR_j}\frac{1}{\sqrt{\omega_k}}(\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger) + \frac{\hat{x}_{k=0}}{\sqrt{N_s}} = \frac{1}{\sqrt{2MN_s}}\sum_{k\neq 0}\frac{1}{\sqrt{\omega_k}}(e^{ikR_j}\hat{a}_k + e^{-ikR_j}\hat{a}_k^\dagger) + \frac{\hat{x}_{k=0}}{\sqrt{N_s}}$$

$$\hat{p}_j = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{M}{2N_s}}\sum_{k\neq 0} e^{ikR_j}\sqrt{\omega_k}(\hat{a}_k - \hat{a}_{-k}^\dagger) + \frac{\hat{p}_{k=0}}{\sqrt{N_s}} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{M}{2N_s}}\sum_{k\neq 0}\sqrt{\omega_k}(e^{ikR_j}\hat{a}_k - e^{-ikR_j}\hat{a}_k^\dagger) + \frac{\hat{p}_{k=0}}{\sqrt{N_s}}$$

- 当然,对于严格意义上的一维量子原子链,平移对称性并不会自发破缺,因为声子热激发本身会破坏对称破缺态.(这是Mermin-Wagner定理的要求,例如计算热容会发现热容的发散行为.)

对于真实的三维固体,用同样的方式可得简谐近似下的晶格振动的等效自由声子模型哈密顿量

$$\hat{H}=\sum_{k\lambda}\omega_{k\lambda}(\hat{a}^{\dagger}_{k\lambda}\hat{a}_{k\lambda}+\frac{1}{2}) \tag{12.32}$$

这里的λ代表不同的极化分支,体现了高维系统振动有更多的自由度(既有横向也有纵向).

声子Green函数

现在,让我们定义声子的推迟Green函数和虚时Green函数:

$$D^R(q,t)=-i\theta(t)\langle[\hat{\phi}_q(t),\hat{\phi}^{\dagger}_q]\rangle,\quad D(q,\tau)=-\langle\hat{T}_{\tau}\hat{\phi}_q(\tau)\hat{\phi}^{\dagger}_q\rangle \tag{12.33}$$

这里$\hat{\phi}_q=\hat{a}_q+\hat{a}^{\dagger}_{-q}$.对于哈密顿量$\hat{H}=\sum_q\omega_q(\hat{a}^{\dagger}_q\hat{a}_q+\frac{1}{2}),\omega_q=\omega_{-q}$, 利用Heisenberg运动方程可知$\hat{a}_q(\tau)=\hat{a}_qe^{-\tau\omega_q}$,$\hat{a}^{\dagger}_q(\tau)=\hat{a}^{\dagger}_qe^{\tau\omega_q}$, 那么

$$\begin{aligned}
D(q,\tau) &= -\theta(\tau)\langle(\hat{a}_q(\tau)+\hat{a}^{\dagger}_{-q}(\tau))(\hat{a}^{\dagger}_q+\hat{a}_{-q})\rangle-\theta(-\tau)\langle(\hat{a}^{\dagger}_q+\hat{a}_{-q})(\hat{a}_q(\tau)+\hat{a}^{\dagger}_{-q}(\tau))\rangle\\
&= -\theta(\tau)\langle\hat{a}_q(\tau)\hat{a}^{\dagger}_q+\hat{a}^{\dagger}_{-q}(\tau)\hat{a}_{-q}\rangle-\theta(-\tau)\langle\hat{a}^{\dagger}_q\hat{a}_q(\tau)+\hat{a}_{-q}\hat{a}^{\dagger}_{-q}(\tau)\rangle\\
&= -\theta(\tau)e^{-\tau\omega_q}\langle\hat{a}_q\hat{a}^{\dagger}_q\rangle-\theta(\tau)e^{\tau\omega_q}\langle\hat{a}^{\dagger}_{-q}\hat{a}_{-q}\rangle-\theta(-\tau)e^{-\tau\omega_q}\langle\hat{a}^{\dagger}_q\hat{a}_q\rangle-\theta(-\tau)e^{\tau\omega_q}\langle\hat{a}_{-q}\hat{a}^{\dagger}_{-q}\rangle\\
&= -\theta(\tau)e^{-\tau\omega_q}(f_B(\omega_q)+1)-\theta(\tau)e^{\tau\omega_q}f_B(\omega_q)-\theta(-\tau)e^{-\tau\omega_q}f_B(\omega_q)-\theta(-\tau)e^{\tau\omega_q}(f_B(\omega_q)+1)
\end{aligned}$$

我们对$D(q,\tau)$做傅里叶变换可得

$$\begin{aligned}
D(q,\Omega_n) &= \int_0^{\beta}d\tau e^{i\Omega_n\tau}D(q,\tau)=-\int_0^{\beta}d\tau e^{i\Omega_n\tau}e^{-\tau\omega_q}(f_B(\omega_q)+1)-\int_0^{\beta}d\tau e^{i\Omega_n\tau}e^{\tau\omega_q}f_B(\omega_q)\\
&= -\frac{e^{-\beta\omega_q}-1}{i\Omega_n-\omega_q}(f_B(\omega_q)+1)-\frac{e^{\beta\omega_q}-1}{i\Omega_n+\omega_q}f_B(\omega_q)\\
&= \frac{1}{i\Omega_n-\omega_q}-\frac{1}{i\Omega_n+\omega_q}\\
&= \frac{2\omega_q}{(i\Omega_n)^2-\omega_q^2}
\end{aligned} \tag{12.34}$$

则对应的推迟Green函数为

$$D^R(q,\omega)=\frac{2\omega_q}{\omega^2-\omega_q^2+i0^+}. \tag{12.35}$$

声子气体的热容

在简谐近似下,晶格振动等效于一堆无相互作用的玻色子,即声子,的自由气体.我们可以写出对应的在温度为T 时的能量平均值

$$E(T)=\sum_k\omega_k\langle\hat{a}^{\dagger}_k\hat{a}_k\rangle=\sum_k\frac{\omega_k}{e^{\omega_k/T}-1}=L^d\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{\omega_k}{e^{\omega_k/T}-1} \tag{12.36}$$

当体系温度足够高时,$\omega_k/T << 1$,那么有$e^{\omega_k/T}-1 \approx \omega_k/T$,此时

$$E(T) \approx L^d \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} T \tag{12.37}$$

这样系统的高温热容是

$$C_V = \frac{dE(T)}{dT} = 1 = k_B \tag{12.38}$$

这就是经典的Dulong-Peti定律,即高温下系统的热容趋近于常数.

而在低温下,我们把色散关系$k=0$附近做小动量展开,可以发现$\omega_k \approx v_s k,\ v_s = \sqrt{\frac{K}{M}}a$,对一个三维的声子气体,我们得到

$$E(T) = V\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{v_s|k|}{e^{v_s|k|/T}-1} = \frac{V}{2\pi^2}\int_0^\infty k^2 dk \frac{v_s k}{e^{v_s k/T}-1} = \frac{V}{2\pi^2 v_s^3}T^4\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x-1} = \frac{V}{2\pi^2 v_s^3}T^4\frac{\pi^4}{15} \tag{12.39}$$

那么系统的热容是

$$C_V = \frac{dE(T)}{dT} = \frac{2\pi^4 V}{15\pi^2 v_s^3}T^3 \tag{12.40}$$

对于三维固体,声学支声子有三个极化模式,则最后的热容需要乘以因子三.文献中一般把低温下这种热容行为称为为Debye的T^3律.

当然,固体中也存在光学支声子,最简单的光学声子模型是Einstein模型,即假定所有声子具有同样的振动频率 $\omega_k = \omega_E$.这样,体系的热容容易求得为

$$C_V = \frac{dE(T)}{dT} = V\omega_E \frac{d}{dT}\frac{1}{e^{\omega_E/T}-1} = V\frac{e^{\omega_E/T}}{(e^{\omega_E/T}-1)^2}\frac{\omega_E^2}{T^2} \tag{12.41}$$

在低温下,Einstein声子模型给出指数型抑制的热容温度依赖关系

$$C_V/V \approx e^{-\omega_E/T}\frac{\omega_E^2}{T^2} \tag{12.42}$$

而在高温极限下给出Dulong - Petit定律的结果:

$$C_V/V \approx 3k_B \tag{12.43}$$

这里我们重新加上了因子k_B并且考虑三维固体有三个振动方向.

一维固体的电子-声子相互作用

对于一维固体,我们可以用上一节讨论的原子链作为离子实部分运动的近似描述.当我们考虑电子与晶格,更确切的说是与离子实相互作用时,一般的相互作用势能是

$$V_{el-i} = \sum_{ij} V(r_i - R_j) \tag{12.44}$$

这代表每一个电子r_i与每一个离子实之间的相互作用,如果我们认为晶格的振动是比较弱的,那么可以按照平衡位置展开相互作用

$$V_{el-i} = \sum_{ij}[V(r_i - R_j^0) - x_j\frac{\partial V(r_i - R_j^0)}{\partial R_j^0}] + ... \tag{12.45}$$

第一项表示电子与固定的晶格背景的相互作用,在处理中已经被吸收到电子感受到的周期势当中,所以重点考虑第二项.

我们把离子偏离平衡位置的坐标x_j量子化可得

$$\hat{x}_j = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_q e^{iqR_j^0} \hat{x}_q = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_q e^{iqR_j^0} \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}} (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \tag{12.46}$$

那么在空间r处电子感受到的声子相互作用是

$$V_{el-p}(r) = -\sum_j \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_q e^{iqR_j^0} \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}} (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \frac{\partial V(r - R_j^0)}{\partial R_j^0} \tag{12.47}$$

为了简化计算,我们考虑电子离子势的傅里叶变换

$$V(r) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{ikr} V_k \tag{12.48}$$

把这个表达式代入相互作用后得到

$$\begin{aligned} V_{el-p}(r) &= -i \frac{1}{N_s} \sum_k \sum_j \sum_q k V_k e^{iqR_j^0} e^{ik(r-R_j^0)} \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}} (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \\ &= -i \sum_k \sum_q k V_k e^{ikr} \delta_{k,q} \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}} (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \qquad (12.49) \\ &= -i \sum_q q V_q e^{iqr} \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}} (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \qquad (12.50) \end{aligned}$$

记$M_q = -iqV_q \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}}$,可得$M_{-q} = M_q^*$.则有

$$V_{el-p}(r) = \sum_q e^{iqr} M_q (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \tag{12.51}$$

在电子的二次量子化描述中,我们有

$$\begin{aligned} \hat{H}_{el-p} &= \sum_\sigma \int d^d r \hat{\psi}_\sigma^\dagger(r) V_{el-p}(r) \hat{\psi}_\sigma(r) \\ &= \sum_\sigma \sum_q M_q (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \int d^d r e^{iqr} \frac{1}{V} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')r} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma} \\ &= \sum_\sigma \sum_q M_q (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \sum_{k,k'} \delta_{k-k'-q} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma} \\ &= \sum_\sigma \sum_q M_q (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \sum_k \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k-q\sigma} \\ &= \sum_{k,q,\sigma} M_q \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger) \qquad (12.52) \end{aligned}$$

这样我们得到二次量子化的电子-声子相互作用的哈密顿量是

$$\boxed{\hat{H}_{el-p} = \sum_{k,q,\sigma} M_q \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} (\hat{a}_q + \hat{a}_{-q}^\dagger)} \tag{12.53}$$

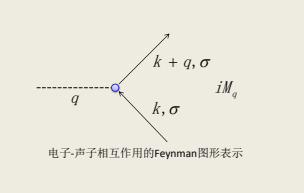


Figure 12.2: 电子−声子相互作用的Feynman图形表示,这里的过程描述动量为k, 自旋为σ的电子经过动量为q的声子的散射转变为动量为$k+q$,自旋为σ的电子态,相关的相互作用顶角为iM_q。

- 对于更一般的三维固体,其电-声相互作用也有类似的形式,只是M_q更复杂,包含极化方向以及其他因子.

在后面我们会看到,电子-声子相互作用对于电子而言会诱导电子之间的有效吸引相互作用进而实现超导.当然,与声子耦合也会对单个电子运动产生修正,进而形成电子与周围声子的复合体,即极化子(polaron).[1]对于声子而言,与电子的耦合对其能谱会产生修正,数学上可以用如下形式描述:[2]

$$D^R(q,\omega)=\frac{2\omega_q}{\omega^2-\omega_q^2+|M_q|^2\omega_q^2\chi_0(q,\omega)} \tag{12.54}$$

显然,分母为零定义了新的声子色散关系,

$$\omega^2=\omega_q^2(1-|M_q|^2\chi_0(q,\omega)). \tag{12.55}$$

我们知道,对于自由电子气而言,$\chi_0(q,0)$在$q=2k_F$显示奇异性,尤其在一维时,$\chi_0(2k_F,0)$对数发散(正的对数),显然,这会使得$\omega^2\leq 0$. 声子色散小于零自然对应系统的不稳定性,此时晶格会自发发生畸变以避免电子气的$2k_F$奇异性,这称为Peierls不稳定性.

- Peierls不稳定性:一维晶格因与电子气耦合而发生的自发晶格畸变.
- Peierls不稳定性实验上可在一维有机分子和聚合物中观察到.

对于电子系统而言,在发生Peierls不稳定性后,$q=2k_F$的晶格势会使其在$\pm k_F$处产生能隙,这样电子极化函数$\chi_0(q)$的奇异性就会被消除,同时系统成为绝缘体.

对于高维系统,电子气极化函数$\chi_0(2k_F,0)$没有发散行为,但导数的奇异性仍存在,因此声子谱在$q=2k_F$仍有反常,这称为Kohn反常.

[1]简要的讨论请参照本章附录.

- Kohn反常(Kohn anomaly):声子谱在$q=2k_F$由于与电子气耦合而导致的反常.

层展的标量(量子)场*

依照单粒子路径积分表示,我们知道一维原子链配分函数可以写成如下的路径积分

$$\mathcal{Z}=\int\prod_j Dx_j e^{-S},\quad S=\int_0^\beta d\tau\left[\sum_j\frac{M}{2}(\partial_\tau x_j)^2+\frac{K}{2}\sum_j(x_{j+1}-x_j)^2\right] \tag{12.56}$$

接下来,让我们取连续极限,也就是晶格常数趋于零($a\to 0$)并且晶格格点数趋于无穷大($N_s\to\infty$)但是晶格长度是固定的有限值($L=N_sa$), 此时原子链的坐标从分离的一些列量趋近于连续变化的函数

$$\begin{aligned}&\sum_j\to\frac{1}{a}\int_0^L dx\quad(x\simeq aj)\\&x_j(\tau)\to\phi(x,\tau)\\&x_{j+1}(\tau)-x_j(\tau)\simeq\phi(x,\tau)+a\partial_x\phi(x,\tau)-\phi(x,\tau)=a\partial_x\phi(x,\tau)\end{aligned} \tag{12.57}$$

那么我们得到作用量为

$$S=\int_0^\beta d\tau\int_0^L dx\left[\frac{M}{2a}(\partial_\tau\phi)^2+\frac{Ka}{2}(\partial_x\phi)^2\right] \tag{12.58}$$

重标场$\phi\to\phi\sqrt{\frac{a}{M}}$,可以发现

$$S=\int_0^\beta d\tau\int_0^L dx\left[\frac{1}{2}(\partial_\tau\phi)^2+\frac{Ka^2}{2M}(\partial_x\phi)^2\right]=\int_0^\beta d\tau\int_0^L dx\frac{1}{2}\left[(\partial_\tau\phi)^2+v_s^2(\partial_x\phi)^2\right] \tag{12.59}$$

即有

$$S=\int_0^\beta d\tau\int_0^L dx\mathcal{L},\quad\mathcal{L}=\frac{1}{2}\left[(\partial_\tau\phi)^2+v_s^2(\partial_x\phi)^2\right] \tag{12.60}$$

这个作用量与量子场论中的标量场作用量形式上完全相同.相应的Lagrangian运动方程是

$$0=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}-\partial_\tau\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\tau\phi)}-\partial_x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_x\phi)} \tag{12.61}$$

当代入拉格朗日密度时可得如下方程

$$(\partial_\tau^2+v_s\partial_x^2)\phi(x,\tau)=0 \tag{12.62}$$

做Wick转动$\tau\to it$,则以上方程化为标准的一维波动方程

$$(\partial_t^2-v_s\partial_x^2)\phi(x,t)=0 \tag{12.63}$$

这个波动方程的平面波解($\phi(x,t) \sim e^{ikx-i\omega t}$)就是能量为$v_s|k|$的声波.如果把声速$v_s$ 换成光速c,那么整个方程实际上是场论中一维空间无质量Klein-Gordon方程.(一般情况的KG方程是$(\partial_t^2 - c^2\nabla^2 + m^2)\phi = 0$)

当然,我们也可以得到标量场的正则量子化哈密顿形式.首先我们把虚时形式转化为实时形式($\tau \to it$)

$$\mathcal{Z} = \int D\phi e^{-S} \to \mathcal{Z} = \int D\phi e^{iS} \tag{12.64}$$

$$S = \int_0^\beta d\tau \int_0^L dx\mathcal{L} \to S = \int_{-\infty}^\infty dt \int_0^L dx\mathcal{L} \tag{12.65}$$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left[(\partial_\tau\phi)^2 + v_s^2(\partial_x\phi)^2\right] \to \mathcal{L} = \frac{1}{2}\left[(\partial_t\phi)^2 - v_s^2(\partial_x\phi)^2\right] \tag{12.66}$$

然后根据标准定义得到正则坐标ϕ对应的正则动量Π

$$\Pi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\phi)} = \partial_t\phi \tag{12.67}$$

再利用哈密顿量与拉格朗日量的关系式

$$\mathcal{H} = \Pi\partial_t\phi - \mathcal{L} = \Pi\partial_t\phi - \frac{1}{2}(\partial_t\phi)^2 + \frac{v_s^2}{2}(\partial_x\phi)^2 = \frac{1}{2}\left[\Pi^2 + v_s^2(\partial_x\phi)^2\right] \tag{12.68}$$

这一系统的总哈密顿量是

$$H = \int_0^L dx\frac{1}{2}\left[\Pi^2 + v_s^2(\partial_x\phi)^2\right] \tag{12.69}$$

既然我们已经知道系统的正则坐标与正则动量,那么采用量子力学的标准处理,即赋予相应的对易关系

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\Pi}(x')] = i\delta(x - x') \tag{12.70}$$

我们最终得到系统的正则量子化哈密顿形式

$$\hat{H} = \int_0^L dx\frac{1}{2}\left[\hat{\Pi}^2 + v_s^2(\partial_x\hat{\phi})^2\right] \tag{12.71}$$

仿照先前的处理,我们利用傅里叶变换$\hat{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k e^{ikx}\hat{\phi}_k, \hat{\Pi}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k e^{ikx}\hat{\Pi}_k$得到

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}\left[\hat{\Pi}_k\hat{\Pi}_{-k} + \omega_k^2\hat{\phi}_k\hat{\phi}_{-k}\right] + \frac{\Pi_{k=0}^2}{2}, \quad \omega_k = v_s|k| \tag{12.72}$$

对于非零动量模式引入产生湮灭算符$\hat{a}_k = \sqrt{\frac{\omega_k}{2}}\hat{\phi}_k + i\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\hat{\Pi}_k, \hat{a}_k^\dagger = \sqrt{\frac{\omega_k}{2}}\hat{\phi}_{-k} - i\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\hat{\Pi}_{-k}$ 注意$\hat{\phi}_k^\dagger = \hat{\phi}_{-k}, \hat{\Pi}_k^\dagger = \hat{\Pi}_{-k}$, 可以得到

$$\hat{H} = \sum_{k\neq 0}\omega_k(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \frac{1}{2}) + \frac{\Pi_{k=0}^2}{2} \tag{12.73}$$

相应的正则坐标和动量用生灭算符表示为

$$\hat{\phi}(x)=\frac{1}{\sqrt{2L}}\sum_{k\neq 0}\frac{1}{\sqrt{\omega_k}}(e^{ikx}\hat{a}_k+e^{-ikx}\hat{a}_k^\dagger)+\frac{\hat{\phi}_{k=0}}{\sqrt{L}}$$
$$\hat{\Pi}(x)=\frac{1}{i}\frac{1}{\sqrt{2L}}\sum_{k\neq 0}\sqrt{\omega_k}(e^{ikx}\hat{a}_k-e^{-ikx}\hat{a}_k^\dagger)+\frac{\hat{\Pi}_{k=0}}{\sqrt{L}} \tag{12.74}$$

标量场的拓扑解:扭结*

在上一节我们已经看到耦合原子链的连续极限描述其实是(1+1)维的标量场理论,特别是在简谐近似下,所得到的是自由场论场论,没有任何相互作用项.此时,我们可以用平面波展开求解相应的场论模型,得到的解就是能量没有耗散的一些列平面波,其量子化得到的量子就是长波极限下的声学支声子.

如果我们超越简谐近似,那么相应的场论模型就会包含相互作用项,我们现在研究一个简单的相互作用模型:

$$S=\int d\tau dx\left[\frac{1}{2}(\partial_\tau\phi)^2+\frac{1}{2}(\partial_x\phi)^2+U(\phi)\right],\quad U(\phi)=\frac{u}{4}(\phi^2-\varrho^2)^2 \tag{12.75}$$

在这里我们已经令声速$v_s=1$并且引入了相互作用项$U(\phi)=\frac{u}{4}(\phi^2-\varrho^2)^2$,$\varrho$是固定的非零实常数.从比较经典的角度来看,要让场$\phi$对配分函数有大的贡献,就要求相应的作用量要足够的小,显然我们看到均匀解$\phi(x,\tau)=\pm\varrho$ 可以给出最小能量/作用量的解,此时的作用量恰好为零.(注意作用量中的时间空间的梯度项,如果ψ在时间或者空间有变化都会增加能量.)注意当我们确定$\psi=+\varrho$ 或者$\psi=-\varrho$后,系统的Z_2对称性就被破缺了.(原先系统在Z_2变换$\psi\to-\psi$ 下是不变的.)

那么除了这种均匀解以外还有没有别的有意义的解呢?答案当然是有,对于当前的问题,存在一种空间上变化而时间上不变的解,称为扭结解(kink),简称扭结.基本而言,扭结解大体上是如下的样子:

$$\phi(x,\tau)\simeq\begin{cases}+\varrho, & \text{x>>}\ x_0;\\ -\varrho, & \text{x<<}\ x_0.\end{cases} \tag{12.76}$$

也就是说,在远离某个参考点,也就是扭转点x_0的区域,场ϕ在一边取值为$-\varrho(\psi(-\infty,\tau)=-\varrho)$而在另一边取值为$+\varrho(\psi(\infty,\tau)=+\varrho)$,显然远离$x_0$区域贡献的能量几乎是零,只有在$x_0$ 附近的区域内才有非零的能量贡献,换句话说扭结是能量局域化在一定空间区域内的一种解.仔细观察,我们发现扭结实际上联系了系统的两个对称破缺解,而这里扭结的意思就是指场的符号发生了扭转.一个明确的扭结解是[2]

$$\boxed{\phi(x,\tau)=\varrho\tanh\frac{x-x_0}{\xi},\quad \xi=\sqrt{2/(u\varrho^2)}} \tag{12.77}$$

[2]把下面解的空间依赖换成时间依赖就得到了最简单的瞬子解,也就是能量集中在某个时间范围内的解.(Schwichtenberg,No-nonsense Quantum Field Theory,16 章)

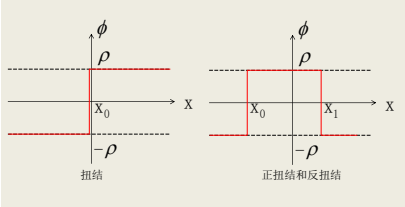


Figure 12.3: 一维标量场的静态扭结解和正反扭结对.

注意到$\psi(x << x_0,\tau) = -\varrho, \psi(x >> x_0,\tau) = +\varrho$,而$\xi$相当于扭结的特征长度,当$|x-x_0| >> \xi$时场趋于$\pm\varrho$,我们可以说场的扭转发生在$x_0$为中心,宽度在$\xi$的区域内. 当然,为了了解扭结是否可以稳定存在,我们需要计算一个扭结存在时的能量,如果能量是有限的,那么说明在某种情况下可以独立存在,否则则说明单个扭结无法稳定存在.这个解的能量是

$$E = 2\frac{u}{4}\varrho^4\int_{-\infty}^{\infty} dx(\tanh^2\frac{x-x_0}{\xi}-1)^2 = 2\frac{u}{4}\varrho^4\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\mathrm{sec}\,h^4\frac{x-x_0}{\xi} = 2\frac{u}{4}\varrho^4\frac{4}{3}\xi = \sqrt{\frac{u}{2}}\frac{4}{3}\varrho^3 \tag{12.78}$$

更一般地,根据拉格朗日运动方程我们得到

$$(\partial_\tau^2+\partial_x^2)\phi = \frac{\partial U(\phi)}{\partial\phi} \tag{12.79}$$

然后我们知道扭结是时间无关的,那么就有$\partial_x^2\phi = \frac{\partial U(\phi)}{\partial\phi}$,对方称两边积分可得$\frac{1}{2}(\partial_x\phi)^2 = U(x)$,这样系统的能量可以计算为(把作用量改写为哈密顿量并令正则动量为零)

$$\begin{aligned} E &= \int dx\left[\frac{1}{2}(\partial_x\phi)^2+U(\phi)\right] = \int dx 2U(\phi) = 2\int d\phi\frac{dx}{d\phi}U(\phi) \\ &= 2\int d\phi\frac{1}{\sqrt{2U}}U = \int_{-\varrho}^{\varrho} d\phi\sqrt{2U} = \sqrt{\frac{u}{2}}\frac{4}{3}\varrho^3 \end{aligned} \tag{12.80}$$

这显然代表有个有限能量的解,最后我们回忆以上模型作用量实际上来自于一般性的ϕ^4场论

$$S = \int d\tau dx\left[\frac{1}{2}(\partial_\tau\phi)^2+\frac{1}{2}(\partial_x\phi)^2+r\phi^2+\frac{u}{4}\phi^4\right] \tag{12.81}$$

当$r<0$导致自发对称破缺时,我们有$\phi^2 = -2r/u \equiv \varrho^2$,代入$\varrho$的明确形式可得扭结的能量为

$$E = \sqrt{\frac{u}{2}}\frac{4}{3}(-2r/u)^{3/2} = \frac{8}{3}\frac{(-r)^{3/2}}{u} \tag{12.82}$$

最后,我们从另一个角度讨论扭结的稳定性,显然,当系统存在一个扭结时,如果我们要消除这个扭结以恢复均匀解,那么我们需要在空间的每一点都改变场的取值,既然场定义在$(-\infty,\infty)$之间,那么这种操作实际上需要耗费无穷大的能量,因而是无法实现的,也就是说单个扭结一旦形成,那么它是很稳定的.(对于一个有限系统,消耗的能量正比于系统的长度,在热力学极限下则显示发散的特性)既然单个扭结是稳定的,那么要消除一个扭结实际上可以需要另一个反扭结,让两个扭结像正反粒子那样湮灭就可以消除扭结.数学上,我们考虑如下近似的正反扭结场位形

$$\phi(x,\tau)=\varrho\theta(\tilde{x}-x)\tanh\frac{x-x_0}{\xi}-\varrho\theta(x-\tilde{x})\tanh\frac{x-x_1}{\xi} \tag{12.83}$$

对于这个位形而言,$x<x_0$时$\phi\to-\varrho$,$x_0<x<x_1$时$\phi\to+\varrho$, $x>x_1$时$\phi\to-\varrho$.我们看到在x_0附近有一个扭结,而在x_1 处有一个反扭结. 当我们让x_0与x_1彼此接近时,场为正的区域一直减小,直到x_0与x_1 重合,空间各处场值为$-\varrho$,扭转特性消失,这就是扭结-反扭结的湮灭.如果我们赋予扭结所谓的拓扑荷,那么正扭结为$Q=+1$, 而反扭结为$Q=-1$.一个没有扭结的空间$Q=0$,正反扭结的湮灭描述为$+1-1=0$. 定义拓扑流为

$$\boxed{J_T^\mu=\frac{1}{2\varrho}\varepsilon_{\mu\nu}\partial_\nu\phi} \tag{12.84}$$

那么一个扭结的拓扑荷为

$$Q=\int_{-\infty}^{\infty}dxJ_T^0=\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{1}{2\varrho}\partial_x\phi=\frac{1}{2\varrho}(\phi(\infty,\tau)-\phi(-\infty,\tau))=+1 \tag{12.85}$$

并且我们发现拓扑流是守恒的

$$\boxed{\partial_\mu J_T^\mu=\frac{1}{2\varrho}\varepsilon_{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu\phi=\frac{1}{2\varrho}(\partial_\tau\partial_x-\partial_x\partial_\tau)\phi=0} \tag{12.86}$$

注意这里等式右边为零来自于对时间和空间的导数是可以交换的,这样拓扑流守恒就显而易见.

- 扭结,涡旋与磁单极是场论中三种重要的拓扑稳定解,其一般形式可以总结为$d+1$ 维时空中的具有d个分量的实标量场具有时间无关的解$\vec{\phi}(\vec{r})\sim\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|},|\vec{r}|\to\infty$。
- 在(1+1)维,单个实场的扭结解是$\phi(x)\sim\frac{x}{|x|}=\begin{cases}+1, & x>0;\\ -1, & x<0.\end{cases}$,这个结果就是一个位于$x=0$处的扭结,与前面(1+1)维$\phi^4$模型讨论的情况完全相符.
- 在$2+1$维,我们需要两分量的实场,那么涡旋解是$\vec{\phi}(\vec{r})\sim\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|},|\vec{r}|\to\infty$, 如果写成复场的形式就是$\Psi(x,y)\sim e^{i\theta}$这里$\theta=\arctan\frac{y}{x}$.
- 在$3+1$维,考虑三分量实场与$SO(3)$非阿贝尔规范场耦合,并且假定系统处于对称破缺态,那么此时求解运动方程可以给出磁单极解$\vec{\phi}(\vec{r})\sim\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|},|\vec{r}|\to\infty$, 这就是著名的t'Hooft-Polyakov 磁单极解.

Noether定理

现在,我们考虑各向同性的二维原子链模型,那么可以发现如下的两分量或者矢量场论模型

$$S=\int d\tau d^dx\left[(\partial_\mu\vec{\phi})^2+r\vec{\phi}^2+\frac{u}{2}(\vec{\phi}^2)^2\right],\quad (\partial_\mu\vec{\phi})^2=(\partial_\tau\vec{\phi})^2+(\nabla\vec{\phi})^2=\sum_\alpha(\partial_\tau\phi_\alpha)^2+\sum_\alpha(\nabla\phi_\alpha)^2 \tag{12.87}$$

这里$\vec{\phi}=(\phi_1,\phi_2)$是两实分量场构成的矢量场,当然我们也可以此构造复场$\Phi=\phi_1+i\phi_2$,那么作用量可写为

$$S=\int d\tau d^dx\left[|\partial_\mu\Phi|^2+r|\Phi|^2+\frac{u}{2}(|\Phi|^2)^2\right]=\int d\tau d^dx\left[\partial_\mu\Phi^*\partial_\mu\Phi+r\Phi^*\Phi+\frac{u}{2}(\Phi^*\Phi)^2\right] \tag{12.88}$$

注意到这个作用量在任意的相位变换下保持不变$\Phi'=e^{i\theta}\Phi$,我们说该系统具有连续的$U(1)$对称性.

- 一般地,如果一个系统具有连续对称性,那么就有相应的守恒流以及守恒量,这就是著名的Noether定理.

作为最简单的例子,让我们考虑二维原子链模型的整体$U(1)$变换:$\Phi'=e^{i\theta}\Phi\simeq(1+i\theta)\Phi=\Phi+i\theta\Phi$, 这里$\delta\Phi=i\theta\Phi$,代入守恒流的公式可得

$$J_\mu=\frac{\partial}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\delta\Phi+\frac{\partial}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)}\delta\Phi^*=\frac{\partial}{\partial(\partial_\mu\Phi)}i\theta\Phi+\frac{\partial}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)}(-i\theta\Phi^*)=(i\Phi\partial_\mu\Phi^*-i\Phi^*\partial_\mu\Phi)\theta \tag{12.89}$$

既然角度θ是任意的小量,那么守恒流就是

$$J_\mu=i(\Phi\partial_\mu\Phi^*-\Phi^*\partial_\mu\Phi) \tag{12.90}$$

这实际上就是广义形式的电流,而流守恒条件$\partial_\mu J_\mu=0$就对应熟悉的电荷守恒定律$\partial_t\rho+\nabla\cdot\vec{j}=0$.(代入具体形式并结合运动方程以及做Wich转动$\tau\to it$)

电磁场与光子:重新理解光*

Maxwell方程与规范条件*

我们知道经典电动力学的基本方程是如下Maxwell方程组(真空中,选取Gauss单位制,令光速$c=1$)[3]

$$\boxed{\nabla\cdot\vec{E}=\rho \quad \nabla\times\vec{E}=-\partial_t\vec{B} \quad \nabla\cdot\vec{B}=0 \quad \nabla\times\vec{B}=\partial_t\vec{E}+\vec{J}} \tag{12.91}$$

为了便于数学上的处理,引入标量势ϕ和矢量势$\vec{A}$

$$\boxed{\vec{E}=-\nabla\phi-\partial_t\vec{A};\quad \vec{B}=\nabla\times\vec{A}} \tag{12.92}$$

代入Maxwell方程可得

$$\nabla\cdot\vec{E}=-\nabla^2\phi-\partial_t(\nabla\cdot\vec{A})=\rho\Rightarrow-\nabla^2\phi-\partial_t(\nabla\cdot\vec{A})=\rho \tag{12.93}$$

$$\nabla\times\vec{E}=-\nabla\times\nabla\phi-\partial_t(\nabla\times\vec{A})=-\partial_t\vec{B}\Rightarrow\nabla\times\nabla\phi=0 \tag{12.94}$$

$$\nabla\cdot\vec{B}=\nabla\cdot(\nabla\times\vec{A})=0\Rightarrow\nabla\cdot(\nabla\times\vec{A})=0 \tag{12.95}$$

$$\nabla\times(\nabla\times\vec{A})=\nabla(\nabla\cdot\vec{A})-\nabla^2\vec{A}=\partial_t(-\nabla\phi-\partial_t\vec{A})+\vec{J} \tag{12.96}$$

而通过矢量分析的知识,我们知道标量场的梯度是无旋的,矢量场的旋度是无散的,那么$\nabla\times\nabla\phi=0,\nabla\cdot(\nabla\times\vec{A})=0$对任意$\phi,\vec{A}$都成立,这样独立的方程只有两个:

$$\nabla^2\phi+\partial_t(\nabla\cdot\vec{A})=-\rho \tag{12.97}$$

$$\nabla(\nabla\cdot\vec{A})-\nabla^2\vec{A}=\partial_t(-\nabla\phi-\partial_t\vec{A})+\vec{J} \tag{12.98}$$

注意到$\phi,\vec{A}$在如下规范变换下给出同样的$\vec{E},\vec{B}$

$$\vec{A}\to\vec{A}-\nabla\lambda,\quad \phi\to\phi+\partial_t\lambda \tag{12.99}$$

$$\vec{E}\to-\nabla(\phi+\partial_t\lambda)-\partial_t(\vec{A}-\nabla\lambda)=\vec{E} \tag{12.100}$$

$$\vec{B}\to\nabla\times(\vec{A}-\nabla\lambda)=\vec{B} \tag{12.101}$$

因此,在用$\phi,\vec{A}$描述电磁场时引入了多余的自由度,即所谓的规范自由度.为了去除/减少规范自由度的影响,我们可以采用规范固定条件,即对$\phi,\vec{A}$做一定的限制.常用的规范条件是Coulomb规范

$$\boxed{\nabla\cdot\vec{A}=0} \tag{12.102}$$

和Lorentz规范

$$\boxed{\nabla\cdot\vec{A}+\partial_t\phi=0} \tag{12.103}$$

在这里为了讨论方便,我们选取Coulomb规范,这样得到

$$\boxed{\nabla^2\phi = -\rho, \quad (\nabla^2 - \partial_t^2)\vec{A} = \partial_t(\nabla\phi) - \vec{J}} \tag{12.104}$$

注意到标量势完全由电荷分布决定,所以有时Coulomb规范也称为辐射规范.对于没有自由电荷和电流分布的电磁场,可以直接选择令$\phi = 0$,那么我们得到只包含矢量势的方程:

$$(\nabla^2 - \partial_t^2)\vec{A} = 0 \tag{12.105}$$

注意到在动量空间,Coulomb规范对应为$\vec{k}\cdot\vec{A}(k) = 0$,也就是矢量场与其传播动量是正交的,换句话说,Coulomb规范下的真空电磁场是横波.(横波指波的传播方向与振动方向垂直.)

如果我们取Lorentz规范,那么有

$$(\partial_t^2 - \nabla^2)\phi = \rho, \quad (\partial_t^2 - \nabla^2)\vec{A} = \vec{J}. \tag{12.106}$$

这说明Lorentz规范下Maxwell方程简化为矢量和标量势的波动方程.

在相对论中,我们可以把Maxwell方程可以写成更紧凑,或者说协变的形式以体现Lorentz不变性.让我们引入四维坐标$x^\mu = (t, \vec{x}) = (t, x^j)$,这把时间以及空间统一写在一起,体现相对论下时空的统一性.进一步,引入度规$g_{\mu\nu}$可以把不同惯性坐标系下不变的时空间隔$ds^2 = dt^2 - d\vec{x}\cdot d\vec{x}$ 改写为$ds^2 = g_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu$,这里$g_{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1)$,可看成一个对角矩阵.当然我们也可以定义相应的逆矩阵,即$g^{\mu\nu}$,其矩阵元与$g_{\mu\nu}$相同,这样有$g^{\mu\nu}g_{\nu\lambda} = \delta^\mu_\lambda$形成一个单位矩阵.利用度规我们可以把上指标的四维量转变为下指标的四维量,例如$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = (t, -\vec{x})$,因此$ds^2 = dx^\mu dx_\mu$.

对于时空傅里叶相因子$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$,我们认为其是Lorentz不变的,因此我们定义四维动量$k^\mu = (\omega, \vec{k})$,这样$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} = e^{-ik^\mu x_\mu} = e^{-ik_\mu x^\mu} = e^{-ikx}$.那么时空坐标的函数$f(x)$的傅里叶变换是

$$f(x) = \int dtd^3\vec{x}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}f(\omega, \vec{k}) = \int d^4xe^{-ikx}f(k) \tag{12.107}$$

而逆变换是

$$f(k) = \int \frac{d\omega d^3\vec{k}}{(2\pi)^4}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}+\omega t)}f(t, \vec{x}) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{ikx}f(x). \tag{12.108}$$

我们也可以定义四维流密度$J^\mu = (\rho, \vec{J})$和四维势$A^\mu = (\phi, \vec{A}) = (\phi, A^j)$,那么Lorentz规范可写成,

$$\nabla\cdot\vec{A} + \partial_t\phi = 0 \Rightarrow \partial_\mu A^\mu = 0 \tag{12.109}$$

这里$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = (\partial_t, \nabla)$代表四维梯度.($\partial^2 = \partial_\mu\partial^\mu = \partial_t^2 - \nabla^2$)流守恒方程可改写为

$$\partial_t\rho + \nabla\cdot\vec{J} = 0 \Rightarrow \partial_\mu J^\mu = 0 \tag{12.110}$$

至于Maxwell方程则需要引入反对称的电磁场张量$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu$,注意$A_\mu=g_{\mu\nu}A^\nu=(\phi,-\vec{A})$, 那么有

$$F_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0&E^1&E^2&E^3\\-E^1&0&B^3&-B^2\\-E^2&-B^3&0&B^1\\-E^3&B^2&-B^1&0\end{pmatrix} \tag{12.111}$$

注意到电磁场张量是反对称的($F_{\mu\nu}=-F_{\nu\mu}$),因此对角元素都为零.从上面的矩阵形式可以看到电磁场张量的分量与电场$\vec{E}=(E^1,E^2,E^3)$和磁场$\vec{B}=(B^1,B^2,B^3)$的关系是$F_{oj}=-F_{j0}=E^j,j=1,2,3$而$\varepsilon^{ijk}F_{jk}=B^i$(注意这里重复指标不求和).我们同样可以定义

$$F^{\mu\nu}=\partial^\mu A^\nu-\partial^\nu A^\mu=g^{\mu\alpha}g^{\nu\beta}(\partial_\alpha A_\beta-\partial_\beta A_\alpha)=g^{\mu\alpha}g^{\nu\beta}F_{\alpha\beta} \tag{12.112}$$

其具体形式是

$$F^{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0&-E^1&-E^2&-E^3\\E^1&0&-B^3&B^2\\E^2&B^3&0&-B^1\\E^3&-B^2&B^1&0\end{pmatrix} \tag{12.113}$$

因此有

$$\begin{aligned}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}&=(\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu)(\partial^\mu A^\nu-\partial^\nu A^\mu)=\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu-\partial_\mu A_\nu\partial^\nu A^\mu-\partial_\nu A_\mu\partial^\mu A^\nu+\partial_\nu A_\mu\partial^\nu A^\mu\\&=2(\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu-\partial_\mu A_\nu\partial^\nu A^\mu)\\&=2(-\partial_t A^j\partial_t A_j-\partial_j\phi\partial_j\phi+\partial_j A^k\partial_j A^k-\partial_j\phi\partial_t A^j-\partial_t A^j\partial_j\phi-\partial_j A^k\partial_k A^j)\end{aligned} \tag{12.114}$$

注意到空间部分

$$\partial_j A^k\partial_j A^k-\partial_j A^k\partial_k A^j=\varepsilon_{ijk}\partial_j A^k\varepsilon_{imn}\partial_m A^n=(\nabla\times\vec{A})^2=\vec{B}^2 \tag{12.115}$$

而剩下的部分恰好构成$-\vec{E}^2$,因此电磁场张量的乘积为

$$F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}=2(\vec{B}^2-\vec{E}^2). \tag{12.116}$$

利用电磁场张量我们可以构造电磁场的经典作用量

$$S=\int dtd^3x\frac{1}{2}(\vec{E}^2-\vec{B}^2)=\int dtd^3x\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}=\int dtd^3x\overbrace{\frac{-1}{4}(\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu)^2}^{\mathcal{L}} \tag{12.117}$$

利用Euler-Lagragian方程

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial A_\mu}-\partial_\nu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu A_\mu)}=0 \tag{12.118}$$

并且利用$\mathcal{L}=-\frac{1}{2}(\partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu-\partial_\mu A_\nu \partial^\nu A^\mu)$, 我们发现$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu}=0$而

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu A_\mu)}=-(\partial^\nu A^\mu-\partial^\nu A^\mu)=-F^{\nu\mu}\Rightarrow \partial_\nu F^{\nu\mu}=0 \tag{12.119}$$

对于源的情况,即包含物质场导致的流J_μ时,系统的作用量是

$$\boxed{S=\int dtd^3x\left[\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-J^\mu A_\mu\right]} \tag{12.120}$$

此时利用Euler-Lagragian方程得到

$$-J_\mu-\partial_\nu(-F^{\nu\mu})=0\Rightarrow \partial_\nu F^{\nu\mu}=J^\mu \tag{12.121}$$

当$\mu=0$时我们有$\partial_j F^{j0}=\partial_j(-\partial_j\phi-\partial_t A^j)=\partial_j E^j=\rho$,这就是电场散度的方程.同理可得其他三个Maxwell方程.当然我们也能用定义直接求电磁场方程,这在计算复杂系统时比直接套用拉格朗日方程更为方便.考虑拉式量在A的任意变化下有$\delta\mathcal{L}=0$:

$$\delta\mathcal{L}=\frac{-1}{4}(\delta F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}+F_{\mu\nu}\delta F^{\mu\nu})-J^\nu\delta A_\nu \tag{12.122}$$

这里

$$\delta F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}=(\partial_\mu\delta A_\nu-\partial_\nu\delta A_\mu)F^{\mu\nu}=(-\partial_\mu F^{\mu\nu}\delta A_\nu+\partial_\nu F^{\mu\nu}\delta A_\mu) \tag{12.123}$$

利用场强张量$F^{\mu\nu}$的反对称性质有$\partial_\nu F^{\mu\nu}\delta A_\mu=-\partial_\nu F^{\nu\mu}\delta A_\mu=-\partial_\mu F^{\mu\nu}\delta A_\nu$, 则有

$$\delta F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}=-2\partial_\mu F^{\mu\nu}\delta A_\nu \tag{12.124}$$

同理有

$$F_{\mu\nu}\delta F^{\mu\nu}=F_{\mu\nu}(\partial^\mu\delta A^\nu-\partial^\nu\delta A^\mu)=-2\partial^\mu F_{\mu\nu}\delta A^\nu. \tag{12.125}$$

利用$F_{\mu\nu}=g_{\mu\rho}g_{\nu\sigma}F^{\rho\sigma}$有

$$F_{\mu\nu}\delta F^{\mu\nu}=-2\partial^\mu g_{\mu\rho}F^{\rho\sigma}g_{\nu\sigma}\delta A^\nu=-2\partial_\rho F^{\rho\sigma}\delta A^\sigma=-2\partial_\mu F^{\mu\nu}\delta A^\nu \tag{12.126}$$

因此我们发现$F_{\mu\nu}\delta F^{\mu\nu}$与$\delta F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$相同.综合这些结果我们得到正确的电磁场方程

$$\delta\mathcal{L}=\frac{-1}{4}(-4)\partial_\mu F^{\mu\nu}\delta A^\nu-J^\nu\delta A_\nu=0\Rightarrow(\partial_\mu F^{\mu\nu}-J^\nu)\delta A_\nu=0\Rightarrow\partial_\mu F^{\mu\nu}=J^\nu \tag{12.127}$$

利用拉格朗日形式,我们能够构造系统的哈密顿量.首先,我们认为系统的广义坐标是A^μ或者说是ϕ和$\vec{A}$,这样用$\phi,\vec{A}$明确表示的电磁场拉氏量是$\vec{L}=\frac{1}{2}(\vec{E}^2-\vec{B}^2)=\frac{1}{2}(\nabla\phi+\partial_t\vec{A})^2-\frac{1}{2}(\nabla\times\vec{A})^2$. 相应的广义动量为

$$\vec{\Pi}_A=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_t\vec{A}}=\nabla\phi+\partial_t\vec{A},\quad \Pi_\phi=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_t\phi}=0 \tag{12.128}$$

可以看到ϕ的广义动量为零,这说明ϕ没有动力学,这样我们研究系统的动力学性质时可以设$\phi=0$, 这有时也称为幺正规范.下面,我们把$\vec{\Pi}_A$记为$\vec{\Pi}=\partial_t\vec{A}$.因此电磁场的哈密顿量密度为

$$\mathcal{H}=\vec{\Pi}\cdot\partial_t\vec{A}-\mathcal{L}=\frac{\vec{\Pi}^2}{2}+\frac{\vec{B}^2}{2}=\frac{\vec{E}^2+\vec{B}^2}{2} \tag{12.129}$$

这就是熟知的Maxwell电磁场的能量密度.需要指出,电场$E^j(x)$几乎可以看作是矢量势$A^j(x)$的广义动量.

修改Maxwell方程:Dirac磁单极*

在Maxwell方程中,我们看到电与磁是不对称的,这体现在电场由电荷产生,而磁场却没有通过相应的磁荷来产生.基于电与磁的可能存在的对称特性,Dirac建议修改Maxwell 方程,即加入磁荷ρ_m以及相应的磁流J_m

$$\boxed{\nabla\cdot\vec{E}=\rho_e\quad\nabla\times\vec{E}=-\partial_t\vec{B}-\vec{J}_m\quad\nabla\cdot\vec{B}=\rho_m\quad\nabla\times\vec{B}=\partial_t\vec{E}+\vec{J}_e} \tag{12.130}$$

对于一个放置在原点的点电荷q,我们有$\nabla\cdot\vec{E}=q\delta(\vec{r})$,这个方程的解就是熟知的点电荷的电场 $\vec{E}=\frac{q}{4\pi r^2}\hat{\vec{r}}$.既然磁荷的方程与电荷完全类似,那么对于原点处的磁荷g 有

$$\boxed{\nabla\cdot\vec{B}=g\delta(\vec{r}),\qquad\vec{B}=\frac{g}{4\pi r^2}\hat{\vec{r}}} \tag{12.131}$$

我们知道磁场是矢量场的旋度,那么我们也可以反过来定义磁荷对应的矢量场,然后事情并没有那么简单. 根据高斯定理,我们知道包围磁荷的闭合曲面的磁通量等于该磁荷的大小,即

$$g=\int d\vec{S}\cdot\vec{B} \tag{12.132}$$

然而,如果我们此时再把磁场表示为矢量势$\vec{A}$的旋度,那么有

$$\int d\vec{S}\cdot\vec{B}=\int d\vec{S}\cdot(\nabla\times\vec{A})=\int dV\nabla\cdot(\nabla\times\vec{A})=0 \tag{12.133}$$

如果矢量场$\vec{A}$是非奇异的,那么上式严格成立,这说明若要想得到正确的结果,磁荷对应的矢量场必定具有奇异性.物理上,这可以理解为磁荷是某个半无限长并且半径无穷小螺线管的其中一个磁极,另一个磁极则在无限远处.现在,当我们尝试用闭合曲面取包围一个磁荷时,螺线管本身必定会穿过闭合曲面,此时该曲面因为被扎出一个洞,因而严格意义上不是封闭曲面了,这产生了奇异性.也就是说我们定义磁荷时必定需要额外的磁通管,这里的磁通管称为Dirac 弦,而磁荷称为Dirac磁单极(Dirac monopole).

让我们考虑一个位于原点处的Dirac磁单极的一种可能的矢量势(这里选取标准的球坐标):

$$\vec{A}^N=\frac{g}{4\pi r}\frac{1-\cos\theta}{\sin\theta}\vec{e}_\varphi=\frac{g}{4\pi r}\tan\frac{\theta}{2}\vec{e}_\varphi\quad(\theta<\pi) \tag{12.134}$$

注意到当$\theta = \pi$时矢量势发散,也就是说坐标系的$-z$轴就是Dirac弦所在的位置.我们也可以定义另一个矢量势

$$\vec{A}^S = -\frac{g}{4\pi r}\frac{1+\cos\theta}{\sin\theta}\vec{e}_\varphi = \frac{g}{4\pi r}\cot\frac{\theta}{2}\vec{e}_\varphi \quad (\theta > 0) \tag{12.135}$$

这个矢量势的奇异性在$\theta = 0$,也就是$+z$轴是Dirac弦的位置.如果我们把这两个矢量势相减,那么我们发现

$$\boxed{\vec{A}^N - \vec{A}^S = \frac{g}{2\pi r}\frac{1}{\sin\theta}\vec{e}_\varphi = \nabla\left(\frac{g\varphi}{2\pi}\right)} \tag{12.136}$$

即两个矢量势之差可以表示为一个标量势的梯度,显然这与两者对应同一个磁场是相符合的.[3]

现在我们考虑一个带电为q的量子粒子在以上磁单极的场中运动,那么其波函数为

$$\psi = e^{i\frac{q}{\hbar}\int \vec{A}\cdot d\vec{l}}\psi_0 \tag{12.137}$$

ψ_0代表动力学部分,最多明确依赖于磁场而不会依赖于矢量势.在$\vec{A}_N$下我们有

$$\psi_N = e^{i\frac{q}{\hbar}\int \vec{A}^N\cdot d\vec{l}}\psi_0 \tag{12.138}$$

在$\vec{A}_S$下有

$$\psi_S = e^{i\frac{q}{\hbar}\int \vec{A}^S\cdot d\vec{l}}\psi_0 \tag{12.139}$$

那么消去ψ_0可以得到ψ_N与ψ_S的依赖关系

$$\psi_N = e^{i\frac{q}{\hbar}\int(\vec{A}^N-\vec{A}^S)\cdot d\vec{l}}\psi_S \tag{12.140}$$

注意其中的相位因子可以改写为

$$e^{i\frac{q}{\hbar}\int(\vec{A}^N-\vec{A}^S)\cdot d\vec{l}} = e^{i\frac{q}{\hbar}\int\nabla\left(\frac{q\varphi}{2\pi}\right)\cdot d\vec{l}} = e^{i\frac{q}{\hbar}\int\frac{g}{2\pi r}\frac{1}{\sin\theta}\vec{e}_\varphi\cdot(r\sin\theta\vec{e}_\varphi d\varphi)} = e^{i\frac{q}{\hbar}\frac{g}{2\pi}\int d\varphi} \tag{12.141}$$

对一个封闭路径,$\int d\varphi = 2\pi n, n \in Z$,那么有

$$\psi_N = e^{i\frac{qg}{\hbar}n}\psi_S \tag{12.142}$$

如果我们要求不同矢量场的选择导致同样的波函数,那么有量子化条件:

$$\boxed{qg = 2\pi\hbar m = mh, \quad m \in Z} \tag{12.143}$$

- 在Dirac磁单极存在的情况下,磁荷和电荷的乘积应是普朗克常数的整数倍,这就是Dirac 量子化条件.
- 如果我们发现了量子化的磁单极,那么这就可以解释电荷的量子化.当然,Dirac磁单极并不必须存在,但是如果找到了它们,那么这提供了电荷量子化的一个合理解释.

[3]标量场梯度取旋度后并不影响物理上可观测的磁场

- 非阿贝尔规范场论中通过求解经典方程也得到了磁单极,其与相对任意的Dirac磁单极不同,来源是场方程的解并且基本参数由理论本身确定. [4]

电磁场的量子哈密顿量*

Coulomb规范下的量子化

回忆真空电磁场的能量是

$$\begin{aligned} H &= \int d^3x \frac{1}{2}(\vec{E}^2+\vec{B}^2) = \int d^3x \frac{1}{2}[(\partial_t\vec{A})^2+(\nabla\times\vec{A})^2] = \int d^3x \frac{1}{2}[(\partial_t\vec{A})^2-\vec{A}\cdot(\nabla^2\vec{A})-(\nabla\cdot\vec{A})^2] \\ &= \int d^3x \frac{1}{2}[(\partial_t\vec{A})^2-\vec{A}\cdot(\nabla^2\vec{A})] \end{aligned} \tag{12.144}$$

在得到最后一个公式时已经利用了Coulomb规范.如果我们把这个能量当成系统的哈密顿量,并且认为系统的正则坐标是矢量势$\vec{A}$(已经令$\phi=0$),那么注 意到此时$\vec{E}=-\partial_t\vec{A}$,也就是说系统的正则动量几乎就是电场矢量$\vec{\Pi}=-\vec{E}$,(拉格朗日量是$\mathcal{L}=\frac{1}{2}[(\partial_t\vec{A})^2-(\nabla\times\vec{A})^2]$,那么正则动量是$\hat{\Pi}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\vec{A})}=\partial_t\vec{A}$) 那么仿照先前的情况,我们赋予矢量势和电场如下的正则对易关系:[5]

$$[\hat{A}^j(\vec{x}),\hat{E}^l(\vec{x}')] = -i\delta^{j,l}\delta(\vec{x}-\vec{x}') \tag{12.145}$$

此时系统的量子化哈密顿量是

$$\hat{H} = \int d^3x \frac{1}{2}(\hat{\vec{E}}^2+(\nabla\times\hat{\vec{A}})^2) = \int d^3x \frac{1}{2}[\hat{\vec{E}}^2-\hat{\vec{A}}\cdot(\nabla^2\hat{\vec{A}})]. \tag{12.146}$$

然而如果对上面的对易关系求导会发现

$$[\partial_j\hat{A}^j(\vec{x}),\hat{E}^l(\vec{x}')] = -i\partial_j\delta^{j,l}\delta(\vec{x}-\vec{x}') = -i\partial^l\delta(\vec{x}-\vec{x}') \tag{12.147}$$

然而根据Coulomb规范$\partial_j\hat{A}^j=\nabla\cdot\hat{\vec{A}}=0$.这说明我们采用的对易关系并不正确.物理上Coulomb规范把三个独立的矢量势分量($\vec{A}=(A^1,A^2,A^3)$)限制为两个,($\partial_1A^1+\partial_2A^2+\partial_3A^3=0$) 在物理上表明真空电磁波是横波,因此Coulomb规范称为横向规范.换句话说,$\vec{A}$中只有两个分量是独立的,考虑$\vec{A}=\vec{\epsilon}e^{-ikx}$($k=(\omega_{\vec{k}},\vec{k})$)沿着传播方向也就是动量$\vec{k}$ 的方向分解为平行$\vec{k}$的部分和垂直$\vec{k}$的部分,这也称为纵向和横向部分,记为$\vec{A}_L$和$\vec{A}_T$

$$\vec{A}_L = \frac{\vec{A}\cdot\vec{k}}{|\vec{k}|}\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}, \quad \vec{A}_T = \vec{A}-\vec{A}_L \tag{12.148}$$

写成分量形式有

$$A_L^i = \frac{k^ik^j}{\vec{k}^2}A^j, \quad A_T^i = A^i-\frac{k^ik^j}{\vec{k}^2}A^j = \left(\delta^{ij}-\frac{k^ik^j}{\vec{k}^2}\right)A^j. \tag{12.149}$$

[4]例如Lancaster书$453-455$页讨论的$SO(3)$非阿贝尔规范场论中的t' Hooft-Polyakov 磁单极解.

[5]电磁场的正则量子化,可以参考Stone书《The Physics of Quantum Fields》$83-88$页或Lancaster书$120-124$页和$131-133$页.

现在,我们把A_T^i的因子$\delta^{ij}-\frac{k^ik^j}{\vec{k}^2}$放入先前的对易关系,那么有

$$[\hat{A}^j(\vec{x}),\hat{E}^l(\vec{x}')]=-i\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\left(\delta^{jl}-\frac{k^jk^l}{\vec{k}^2}\right)=-i\delta_{tr}(\vec{x}-\vec{x}') \quad (12.150)$$

这里$\delta_{tr}(\vec{x}-\vec{x}')$称为横向$\delta$函数.进一步引入生灭算符就可以把以上哈密顿量写成类似于晶格振动情况的谐振子求和的形式,不过注意到我们工作在Coulomb规范下,因而还需要考虑这个约束条件的限制,这导致以下的傅里叶模式展开

$$\hat{\vec{A}}(x)=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}\sum_{\lambda=1,2}(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\vec{\epsilon}_\lambda(k)e^{-ikx}+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)e^{ikx}) \quad (12.151)$$

对$\hat{\vec{A}}$作用∇并要求Coulomb规范得以满足,那么极化矢量满足$\vec{k}\cdot\vec{\epsilon}_\lambda(k)=0$.此外它们还满足$\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}_{\lambda'}(k)=\delta_{\lambda\lambda'}$ 和极化求和规则$\sum_\lambda(\epsilon^i_\lambda)^*(k)\epsilon^j_\lambda(k)=\delta^{ij}-k^ik^j/|\vec{k}|$.

生灭算符$\hat{a}^\dagger_{k\lambda},\hat{a}_{k\lambda}$代表极化为$\lambda$,动量为$k$的光子,满足玻色子的对易关系$[\hat{a}_{\vec{k}\lambda},\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'\lambda'}]=\delta_{\lambda\lambda'}(2\pi)^3\delta(\vec{k}-\vec{k}')$. 我们可把$\hat{\vec{A}}$的展开具体写出,即

$$\begin{pmatrix}\hat{A}^1(x)\\ \hat{A}^2(x)\\ \hat{A}^3(x)\end{pmatrix}=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}\sum_{\lambda=1,2}\left(\begin{pmatrix}\epsilon^1_\lambda(k)\\ \epsilon^2_\lambda(k)\\ \epsilon^3_\lambda(k)\end{pmatrix}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}e^{-ikx}+\begin{pmatrix}\epsilon^{1*}_\lambda(k)\\ \epsilon^{2*}_\lambda(k)\\ \epsilon^{3*}_\lambda(k)\end{pmatrix}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}e^{ikx}\right). \quad (12.152)$$

如果考虑动量方向是沿着z轴,此时两个线性独立的正交归一的极化矢量(线偏振)可以选为

$$\vec{\epsilon}_1(k)=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\quad \vec{\epsilon}_2(k)=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \quad (12.153)$$

这样$\hat{A}^0=\hat{A}^3=0$而

$$\hat{A}^1(x)=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}(\hat{a}_{\vec{k}1}e^{-ikx}+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}1}e^{ikx})$$
$$\hat{A}^2(x)=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}(\hat{a}_{\vec{k}2}e^{-ikx}+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}2}e^{ikx}).$$

进一步,利用$\vec{E}=-\partial_t\vec{A},\phi=A^0=0$可得电场强度的展开形式:

$$\hat{\vec{E}}(x)=i\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{\omega_{\vec{k}}}{2}}\sum_{\lambda=1,2}(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\vec{\epsilon}_\lambda(k)e^{-ikx}-\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)e^{ikx}) \quad (12.154)$$

由$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$可得磁场强度的表达式

$$\vec{B}(x)=i\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\sum_{\lambda=1,2}\vec{k}\times(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\vec{e}_\lambda(k)e^{-ikx}-\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\vec{e}^*_\lambda(k)e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}) \quad (12.155)$$

代入这些表达式于哈密顿量可得

$$\begin{aligned}\int d^3x\hat{\vec{E}}^2 &= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{\omega_k}{2}\sum_{\lambda\lambda'}(-\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{-\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}_{\lambda'}(-k)-\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{-\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}^*_{\lambda'}(-k)\\ &+ \hat{a}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}^*_{\lambda'}(k)+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}_{\lambda'}(k))\end{aligned}$$

同理磁场部分的贡献是

$$\begin{aligned}-\int d^3x\hat{\vec{A}}\cdot\nabla^2\hat{\vec{A}} &= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{\omega_k}{2}\sum_{\lambda\lambda'}(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{-\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}_{\lambda'}(-k)+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{-\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}^*_{\lambda'}(-k)\\ &+ \hat{a}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}^*_{\lambda'}(k)+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}_{\lambda'}(k))\end{aligned}$$

把电场与磁场贡献相加便消去了非对角项$\hat{a}\hat{a},\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger$,这样有

$$\int d^3x(\hat{\vec{E}}^2-\hat{\vec{A}}\cdot\nabla^2\hat{\vec{A}})=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\omega_k\sum_{\lambda\lambda'}(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}^*_{\lambda'}(k)+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda'}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}_{\lambda'}(k))$$

注意到相同动量时极化矢量的正交归一性$\vec{\epsilon}_\lambda(k)\cdot\vec{\epsilon}^*_{\lambda'}(k)=\delta_{\lambda\lambda'}$, 则有

$$\int d^3x(\hat{\vec{E}}^2-\hat{\vec{A}}\cdot\nabla^2\hat{\vec{A}})=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\omega_k\sum_{\lambda}(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda})$$

最后,利用玻色子的对易关系$[\hat{a}_{\vec{k}\lambda},\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'\lambda'}]=(2\pi)^3\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\vec{k}-\vec{k}')$, 我们发现电磁场的哈密顿量成为

$$\hat{H}=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\sum_\lambda\omega_k\left(\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}+\frac{1}{2}(2\pi)^3\delta(0)\right). \tag{12.156}$$

对于一个体积为V的'大盒子',上述积分变成求和,则有对易关系$[\hat{a}_{\vec{k}\lambda},\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'\lambda'}]=\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$,

$$\hat{\vec{A}}(x)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}\lambda=1,2}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\vec{\epsilon}_\lambda(k)e^{-ikx}+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\vec{\epsilon}^*_\lambda(k)e^{ikx}) \tag{12.157}$$

这样

$$\hat{H}=\sum_{\vec{k}\lambda}\omega_k\left(\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}+\frac{1}{2}\right). \tag{12.158}$$

这说明真空电磁场也可以像晶格振动那样,量子化为一些列谐振子的集合体,这些量子就是光子.

Lorentz规范下的量子化

为了在Lorentz规范下做电磁场的量子化,我们修改电磁场的拉氏量:

$$\mathcal{L}=\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-\frac{1}{2}\xi(\partial_\mu A^\mu)^2 \tag{12.159}$$

只要Lorentz规范得以满足,那么上式引入的项$-\frac{1}{2}\xi(\partial_\mu A^\mu)^2$不会引入非物理的内容.让我们选取$\xi=1$,这样拉式量具有简单形式:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{-1}{4}(\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu+\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu-\partial_\mu A_\nu\partial^\nu A^\mu-\partial_\nu A_\mu\partial^\mu A^\nu)-\frac{1}{2}\partial_\mu A^\mu\partial_\nu A^\nu\\ &= \frac{-1}{2}(\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu-\partial_\mu A_\nu\partial^\nu A^\mu)-\frac{1}{2}\partial_\mu A^\mu\partial_\nu A^\nu\\ &= -\frac{1}{2}\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu=-\frac{1}{2}\partial_0 A_\nu\partial^0 A^\nu-\frac{1}{2}\partial_j A_\nu\partial^j A^\nu\\ &= -\frac{1}{2}(\partial_0 A^0)^2+\frac{1}{2}(\partial_0 A^j)^2-\frac{1}{2}\partial_j A_\nu\partial^j A^\nu=-\frac{1}{2}\dot{\phi}^2+\frac{1}{2}\dot{\vec{A}}^2-\frac{1}{2}\partial_j A_\nu\partial^j A^\nu\end{aligned}$$

这样正则动量是

$$\Pi_\phi=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}=-\dot{\phi}\qquad\vec{\Pi}_{\vec{A}}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\vec{A}}}=\dot{\vec{A}}\tag{12.160}$$

这能够统一写成$\Pi^\mu=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_0 A_\mu}=-\partial^0 A^\mu$.这样系统的哈密顿量是

$$\begin{aligned}H &= \int dx^3(\Pi_\phi\dot{\phi}+\vec{\Pi}_{\vec{A}}\cdot\dot{\vec{A}}-\mathcal{L})=\int dx^3\frac{1}{2}(-\dot{\phi}^2+\dot{\vec{A}}^2+\partial_j A_\nu\partial^j A^\nu)\\ &= \int dx^3\left(-\frac{1}{2}\Pi^\mu\Pi_\mu+\frac{1}{2}\partial_j A_\nu\partial^j A^\nu\right)\end{aligned}\tag{12.161}$$

我们发现由于$\dot{\phi}^2$项的系数为负,因此体系的能量不正定.

类似Coulomb规范我们赋予对易关系:

$$[\hat{A}^\mu(\vec{x}),\hat{\Pi}^\nu(\vec{x}')]=ig^{\mu\nu}\delta(\vec{x}-\vec{x}')\qquad[\hat{A}^\mu(\vec{x}),\hat{A}^\nu(\vec{x}')]=[\hat{\Pi}^\mu(\vec{x}),\hat{\Pi}^\nu(\vec{x}')]=0.\tag{12.162}$$

这样我们把$\hat{A}^\mu$用生灭算符表示有

$$\hat{A}^\mu(x)=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}\sum_{\lambda=0}^{3}(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\epsilon^\mu_\lambda(k)e^{-ikx}+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}(\epsilon^\mu_\lambda)^*(k)e^{ikx})\tag{12.163}$$

这里极化矢量$\epsilon^\mu_\lambda(k)$满足$\epsilon^\mu_\lambda(k)\epsilon^*_{\lambda'\mu}(k)=g_{\lambda\lambda'}$,$\sum_\lambda g_{\lambda\lambda}\epsilon^\mu_\lambda(k)(\epsilon^\nu_{\lambda'})^*(k)=g^{\mu\nu}$. 生灭算符满足$[\hat{a}_{\vec{k}\lambda},\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'\lambda'}]=-g_{\lambda\lambda'}(2\pi)^3\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\vec{k}-\vec{k}')$. 代入电磁场哈密顿量后有(忽略零点能)

$$\hat{H}=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\omega_k\left(\sum_{\lambda=1}^{3}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}-\hat{a}^\dagger_{\vec{k}0}\hat{a}_{\vec{k}0}\right).\tag{12.164}$$

显然,这说明极化为$\lambda=0$的光子,也就是时间光子的能量是$-\omega_k$.因此时间光子(标量光子)的能量为负.[6]我们知道电磁场物理上是横波,也就是说只有两个自由度.在先前Coulomb规范中对应两个极化$\lambda=1,2$.现在我们有四个极化,因此需要去掉多余的非物理的两个极化态$\lambda=0,3$.一般而言,我们要求物理上允许的状态$|\Phi\rangle$满足$\partial_\mu\hat{A}^\mu|\Phi\rangle=0$,也就是只有满足Lorentz规范的状态是物理上允许的状态.但是这个要求过强,一个弱一点的要求是

$$\partial_\mu\hat{A}^{\mu(+)}|\Phi\rangle=0\tag{12.165}$$

[6]这一般称为负能模式或负模态

这里$\hat{A}^{\mu(+)}$代表$\hat{A}_\mu$的正频率部分(对应$\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\epsilon^\mu_\lambda(k)e^{-ikx}$).代入$\hat{A}_\mu$的具体形式有

$$\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}\sum_{\lambda=0}^{3}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}(-ik_\mu)\epsilon^\mu_\lambda(k)e^{-ikx}|\Phi\rangle=0 \tag{12.166}$$

让我们设电磁场沿着z方向传播,那么有$k^\mu=(k^z,0,0,k^z)(k_\mu=(k^z,0,0,-k^z))$而四个极化矢量是[7]

$$\epsilon^\mu_0(k)=(1,0,0,0),\epsilon^\mu_1(k)=(0,1,0,0),\epsilon^\mu_2(k)=(0,0,1,0),\epsilon^\mu_3(k)=(0,0,0,1). \tag{12.167}$$

因此只有$\lambda=0,3$的光子模式有贡献,即$(k_\mu\epsilon^\mu_0(k)=k^z,k_\mu\epsilon^\mu_3(k)=-k^z,k_\mu\epsilon^\mu_{1,2}(k)=0)$

$$\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}(\hat{a}_{\vec{k}0}-\hat{a}_{\vec{k}3})(-ik^z)e^{-ikx}|\Phi\rangle=0 \tag{12.168}$$

上式恒成立要求

$$(\hat{a}_{\vec{k}3}-\hat{a}_{\vec{k}0})|\Phi\rangle=0\Rightarrow\hat{a}_{\vec{k}3}|\Phi\rangle=\hat{a}_{\vec{k}0}|\Phi\rangle. \tag{12.169}$$

取共轭有$\langle\Phi|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}3}=\langle\Phi|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}0})$.这样我们发现

$$\langle\Phi|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}3}\hat{a}_{\vec{k}3}|\Phi\rangle=\langle\Phi|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}0}\hat{a}_{\vec{k}0})|\Phi\rangle \tag{12.170}$$

因此电磁场在任意物理态下的能量期望值有

$$\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\omega_k\left(\sum_{\lambda=1}^{2}\langle\Phi|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}|\Phi\rangle+\langle\Phi|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}3}\hat{a}_{\vec{k}3}|\Phi\rangle-\hat{a}^\dagger_{\vec{k}0}\hat{a}_{\vec{k}0}\right)=\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\omega_k\sum_{\lambda=1}^{2}\langle\Phi|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}|\Phi\rangle. \tag{12.171}$$

这样极化为$\lambda=0,3$的非物理光子贡献互相抵消,只有物理的光子对能量有贡献.

电磁场的路径积分形式*

对Maxwell电磁场而言,有效且系统化的量子化方法是路径积分方法,其基本点是系统的配分函数是对电磁场经典拉格朗日量构成的作用量的权重求和,即

$$\mathcal{Z}[J]=\int DAe^{iS},\quad S=\int dtd^3x\left(\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-J^\mu A_\mu\right) \tag{12.172}$$

这等价于加入源项$\hat{H}_J=-\int d^3xJ(x)\hat{A}(x)$后电磁场哈密顿量在基态$|\Omega\rangle$之间的期望值,即$\mathcal{Z}[J]=\lim_{T\to\infty}\langle\Omega|e^{-i(\hat{H}+\hat{H}_J)T}|\Omega\rangle=\lim_{T\to\infty}e^{-iE_\Omega T}$.当源项为零是就是真空态之间的期望值$\mathcal{Z}[0]=\lim_{T\to\infty}\langle0|e^{-i\hat{H}T}|0\rangle=\lim_{T\to\infty}e^{-iE_0T}$, 因此

$$\lim_{T\to\infty}e^{-i(E_\Omega-E_0)T}=\frac{\mathcal{Z}[J]}{\mathcal{Z}[0]}=\lim_{T\to\infty}\frac{\int DAe^{i\int_0^T dt\int d^3x(\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-J^\mu A_\mu)}}{\int DAe^{i\int_0^T dt\int d^3x\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}}\equiv\lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\int dtd^3xJ^\mu A_\mu}\rangle$$

[7]虽然我们取了z方向传播电磁场这个特例但利用Lorentz变换能证明一般性.

这样通过计算期望值$\langle e^{-i\int dtd^3xJ^\mu A_\mu}\rangle$就可以得到有源时基态能量的变化$\Delta E = E_\Omega - E_0$.

当我们需要给体系加上Lorentz规范时,可以在积分测度上加上相应的限制:

$$\mathcal{Z}[J] = \int DA\delta(\partial_\mu A^\mu)e^{iS} \tag{12.173}$$

我们可以把这个限制转移至作用量中

$$S = \int dtd^3x\left[\frac{-1}{4}(\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu - \partial_\nu A_\mu\partial^\mu A^\nu) - \frac{1}{2\xi}(\partial_\mu A^\mu)^2 - J^\mu A_\mu\right] \tag{12.174}$$

当$\xi \to 0$时,只有满足Lorentz规范的A_μ才对积分有贡献,这样就是实现了规范条件对系统的限制.实际操作时通常假定有限的ξ,然后在计算的最后取$\xi \to 0$的极限.当然,由于系统的规范不变性,(物理上是流守恒$\partial_\mu J^\mu = 0$的结果)在具体物理量或者粒子散射截面都不依赖于ξ的选取,因此我们可以任意选择ξ.$\xi = 1$对应Feynman规范而$\xi = 0$是Landau 规范.

我们发现

$$\begin{aligned} S &= \int dtd^3x\left[\frac{-1}{2}(\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu - \partial_\nu A_\mu\partial^\mu A^\nu) - \frac{1}{2\xi}(\partial_\mu A^\mu)^2 - J^\mu A_\mu\right] \\ &= \int dtd^3x\left[\frac{-1}{2}(-A_\nu\partial_\mu\partial^\mu A^\nu + A^\nu\partial_\nu(\partial^\mu A_\mu)) - \frac{1}{2\xi}\partial^\mu A_\mu\partial^\nu A_\nu - J^\mu A_\mu\right] \\ &= \int dtd^3x\left[\frac{1}{2}A_\nu\left(g^{\nu\mu}\partial^2 + \frac{1-\xi}{\xi}\partial^\mu\partial^\nu\right)A_\mu - J^\mu A_\mu\right] \end{aligned}$$

现在,让我们积掉A_μ.回忆

$$\mathcal{Z}[J] = \int \mathcal{D}\vec{x}e^{-\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T + \vec{J}\cdot\vec{x}^T} = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det(A)}}e^{\frac{1}{2}\vec{J}\cdot A^{-1}\cdot\vec{J}^T}$$

那么只需要令$A \to -iA, J \to -iJ$即有

$$\mathcal{Z}[J] = \int \mathcal{D}\vec{x}e^{i\frac{1}{2}\vec{x}\cdot A\cdot\vec{x}^T - i\vec{J}\cdot\vec{x}^T} = \sqrt{\frac{(2\pi i)^N}{\det(A)}}e^{-i\frac{1}{2}\vec{J}\cdot A^{-1}\cdot\vec{J}^T}$$

那么有

$$\mathcal{Z}[J] = \mathcal{Z}[0]e^{-i\int dx\int dy\frac{1}{2}J^\mu(x)D_{\mu\nu}(x-y)J^\nu(y)} \tag{12.175}$$

这里$D_{\mu\nu}(x-y)$由下式确定

$$\left(g^{\nu\mu}\partial^2 + \frac{1-\xi}{\xi}\partial^\mu\partial^\nu\right)D_{\mu\lambda}(x-y) = \delta^\nu_\lambda\delta(x-y) \tag{12.176}$$

注意$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$,做傅里叶变换$D_{\mu\lambda}(x-y) = \int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{-ik^\alpha(x_\alpha - y_\alpha)}D_{\mu\lambda}(k)$可得

$$\left(-g^{\nu\mu}k^2 - \frac{1-\xi}{\xi}k^\mu k^\nu\right)D_{\mu\lambda}(k) = \delta^\nu_\lambda \tag{12.177}$$

可以验证$D_{\mu\lambda}(k)$满足如下形式:

$$D_{\mu\lambda}(k)=\frac{-g^{\mu\lambda}+(1-\xi)\frac{k^\mu k^\lambda}{k^2}}{k^2}. \tag{12.178}$$

我们可以验证如下

$$\begin{aligned}
&\left(-g^{\nu\mu}k^2-\frac{1-\xi}{\xi}k^\mu k^\nu\right)D_{\mu\lambda}(k)=\left(-g^{\nu\mu}k^2-\frac{1-\xi}{\xi}k^\mu k^\nu\right)\frac{-g^{\mu\lambda}+(1-\xi)\frac{k^\mu k^\lambda}{k^2}}{k^2}\\
=&\left(-g^{\nu\mu}-\frac{1-\xi}{\xi}\frac{k^\mu k^\nu}{k^2}\right)\left(-g^{\mu\lambda}+(1-\xi)\frac{k^\mu k^\lambda}{k^2}\right)\\
=&\ g^{\nu\mu}g^{\mu\lambda}-g^{\nu\mu}(1-\xi)\frac{k^\mu k^\lambda}{k^2}+\frac{1-\xi}{\xi}\frac{k^\mu k^\nu}{k^2}g^{\mu\lambda}-\frac{1-\xi}{\xi}\frac{k^\mu k^\nu}{k^2}(1-\xi)\frac{k^\mu k^\lambda}{k^2}\\
=&\ \delta^\nu_\lambda-(1-\xi)\frac{k^\nu k_\lambda}{k^2}+\frac{1-\xi}{\xi}\frac{k^\nu k_\lambda}{k^2}-\frac{1-\xi}{\xi}\frac{k^\nu k_\lambda}{k^2}(1-\xi)\\
=&\ \delta^\nu_\lambda.
\end{aligned} \tag{12.179}$$

现在,我们可以用源场方法也就是对配分函数求导数来计算四维势的关联函数

$$\begin{aligned}
\langle A_\mu(x)A_\nu(y)\rangle_0 &= \frac{1}{\mathcal{Z}[0]}\int DAe^{iS(J=0)}A_\mu(x)A_\nu(y)=\frac{\delta\ln\mathcal{Z}[J]}{\delta(-i)J^\mu(x)\delta(-i)J^\nu(y)}\\
&= -\frac{\delta\ln\mathcal{Z}[J]}{\delta J^\mu(x)\delta J^\nu(y)}=iD_{\mu\nu}(x-y)
\end{aligned} \tag{12.180}$$

做傅里叶变换有

$$\langle A_\mu(k)A_\nu(-k)\rangle_0=iD_{\mu\nu}(k)=i\frac{-g_{\mu\nu}+(1-\xi)\hat{k}_\mu\hat{k}_\nu}{k^2} \tag{12.181}$$

在Feynman规范下简化为容易计算的形式$\langle A_\mu(k)A_\nu(-k)\rangle=\frac{-ig_{\mu\nu}}{k^2}$.注意到取$\mu=\nu=0$有$D_{00}(k)=\frac{-1}{k^2}=\frac{-1}{\omega^2-c^2\vec{k}^2}$.在$c\to\infty$也就是非相对论极限下$D_{00}(k)\simeq\frac{1}{\vec{k}^2}$这就是两个同号单位电荷之间的排斥Coulomb势.

虚时形式/欧式形式

在凝聚态物理中,为研究有限温度平衡态的性质,我们会采用所谓的虚时形式.这在场论中又称为欧几里得形式,即欧氏形式,相应的场论称为欧氏场论.在为了方便过渡到虚时形式,我们重新定义四维量,例如四维坐标定义为$x_\mu=(it,\vec{x})$,四维势是$A_\mu=(i\phi,\vec{A})$,四维梯度是$\partial_\mu=(\frac{1}{i}\partial_t,\nabla)$,四维动量是$k_\mu=(i\omega,\vec{k})$,最后四维流密度是$J_\mu=(i\rho,\vec{J})$.通过这样的定义,度规成为单位矩阵,上下指标的量相同,因此我们可以不用区分上下指标.例如,流守恒方程是$\partial_\mu J_\mu=0$,Lorentz规范条件是$\partial_\mu A_\mu=0$.电磁场作用量是

$$S=\int dtd^3x\left(\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}+J_\mu A_\mu\right) \tag{12.182}$$

注意到原先电磁场与流的耦合项是$-J^\mu A_\mu = -\rho\phi + \vec{J}\cdot\vec{A}$而采用新定义后是$J_\mu A_\mu$.此外,注意电磁场张量与电场有关的分量多出一个$i$:

$$F_{0j} = \partial_0 A_j - \partial_j A_0 = -i(\partial_t A_j + \partial_j \phi) = iE_j \tag{12.183}$$

不过$F_{0j}F_{0j} = -(E^j)^2$与原先上下标形式是一致的.由于$-J^\mu A_\mu \to J_\mu A_\mu$,现在的Maxwell方程是

$$\partial_\mu F_{\mu\nu} = -J_\mu \tag{12.184}$$

若取$\nu = 0$则有$\partial_j F_{j0} = -i\rho$.由于$F_{j0} = -F_{0j} = -iE^j$我们回到经典结果$\partial_j E_j = \rho$.

- 对于$(3+1)$维空间,可以利用电磁场张量构造另一个物理量,即$\vec{E}\cdot\vec{B}$项

$$\vec{E}\cdot\vec{B} = \frac{1}{i}F_{0i}\epsilon_{ijk}\partial_j A_k = \frac{\epsilon_{0ijk}}{i}F_{0i}F_{ij} = \frac{\epsilon_{\mu\nu\lambda\rho}}{8i}F_{\mu\nu}F_{\lambda\rho} \tag{12.185}$$

  这样我们得到相应的作用量

$$\boxed{S_\theta = \frac{\theta}{32\pi i}\int dt d^3x \epsilon_{\mu\nu\lambda\rho}F_{\mu\nu}F_{\lambda\rho}} \tag{12.186}$$

  这里θ称为轴子场(axion field),选为常数.根据维度约化机制可以证明时间反演不变性要求$\theta = 0, \pi$.这个作用量加上通常的Maxwell项就构成了研究三维拓扑绝缘体电动力学的基础.

现在,让我们过渡到虚时间形式,也就是做Wick转动$t = -i\tau$.τ是虚时间,在量子场论中仅仅是数学上方便而引入的记号.这样有:

$$\begin{aligned}
&x_\mu = (it, \vec{x}) \to x_\mu = (\tau, \vec{x})\\
&k_\mu = (i\omega, \vec{k}) \to k_\mu = (\omega_4, \vec{k})\\
&\partial_\mu = (\frac{1}{i}\partial_t, \nabla) \to \partial_\mu = (\partial_\tau, \nabla)\\
&A_\mu = (i\phi, \vec{A}) \to A_\mu = (\phi_4, \vec{A})\\
&J_\mu = (i\rho, \vec{J}) \to J_\mu = (\rho_4, \vec{J}).
\end{aligned} \tag{12.187}$$

因此实际上需要改变的是

$$t = -i\tau \quad \omega = -i\omega_4 \quad \phi = -i\phi_4 \quad \rho = -i\rho_4 \tag{12.188}$$

这样有

$$e^{-ik_\mu x^\mu} = e^{ik_\mu x_\mu} = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}+\omega_4\tau)} \tag{12.189}$$

$$\partial_\mu A^\mu = \partial_\mu A_\mu = \partial_t\phi + \nabla\cdot\vec{A} = \partial_\tau\phi_4 + \nabla\cdot\vec{A} \tag{12.190}$$

$$\partial_\mu J^\mu = \partial_\mu J_\mu = \partial_t\rho + \nabla\cdot\vec{J} = \partial_\tau\rho_4 + \nabla\cdot\vec{J}. \tag{12.191}$$

因此我们有

$$\mathcal{Z}[J]=\int DAe^{i\int dtd^3x\left(\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}+J_\mu A_\mu\right)}=\int DAe^{\int d\tau d^3x\left(\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}+J_\mu A_\mu\right)} \tag{12.192}$$

这说明真空态之间的期望值$\mathcal{Z}[J]$成为热力学平均$\int DAe^{iS}\to\int DAe^{-S_E}$:

$$\mathcal{Z}[J]=\int DAe^{-S_E},\quad S_E=\int d\tau d^3x\left(\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}-J^\mu A_\mu\right) \tag{12.193}$$

这里S_E是欧氏场论形式下的电磁场作用量.对于作用量中的场强乘积部分,我们有

$$F_{0j}F_{0j}=(\partial_\tau A_j-\partial_j\phi_4)^2 \tag{12.194}$$

注意到如果我们用Wick转动$t=-i\tau$则这一项给出$(iE_j)^2=-E_j^2$.这说明我们能够定义欧氏场论中的电场为$F_{0j}=\tilde{E}_j$它与真实电场相差一个虚数因子i.这样的定义使得Maxwell方程形式不变,例如$\partial_j\tilde{E}_j=\phi_4$.

利用傅里叶变换有

$$S=\int d\tau d^3x\left[\frac{1}{2}A_\mu(\delta_{\mu\nu}\partial^2+\frac{1-\xi}{\xi}\partial_\mu\partial_\nu)A_\nu\right]=\frac{1}{2}\sum_k A_\mu(-k)(-\delta_{\mu\nu}k^2-\frac{1-\xi}{\xi}k_\mu k_\nu)A_\nu(k),\quad k_\mu=(\omega_n,\vec{k})$$

而关联函数有

$$\langle A_\mu(-k)A_\nu(k)\rangle_0=\frac{\delta_{\mu\nu}-(1-\xi)\hat{k}_\mu\hat{k}_\nu}{\vec{k}^2+\omega_n^2}. \tag{12.195}$$

拓扑场论与轴子电动力学*

在凝聚态物理中,我们能够用拓扑场论描述一些拓扑系统的低能性质,例如量子霍尔系统和拓扑绝缘体.我们首先讨论4维量子霍尔效应.4维空间的量子霍尔效应由张首晟和胡江平提出.他们提出的动机是扩展二维空间的量子霍尔效应到更高的维度.对于绝缘体,原则上我们把电子的自由度完全积分积掉后,剩下的自由度就是电磁场,在4 维空间,(加上时间就是五维时空)除了通常的Maxwell电磁场部分,如下部分也对电磁场的作用量有贡献:

$$S_{eff}=\frac{C_2}{24\pi^2}\int dtd^4x\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau}A_\mu\partial_\nu A_\rho\partial_\sigma A_\tau \tag{12.196}$$

这里$d^4x=dxdydzdw$,$A_\mu=(A_0,A_x,A_y,A_z,A_w)=(A_0,\vec{A})$是五维时空的矢量势.$w$方向是第四个空间维度,也就是额外维.在时间反演操作,$A_0\to A_0,\vec{A}\to-\vec{A}$,这样上述作用量具有时间反演不变性.一般而言,系数C_2(对无相互作用相同就是第二Chern 数,是一个整数)能够用电子的单粒子Green函数$G(k)=G(\omega,\bar{k})$表示:

$$C_2=\frac{\pi^2}{15}\int\frac{d^5k}{(2\pi)^5}\mathrm{Tr}[\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau}G\partial_\mu G^{-1}G\partial_\nu G^{-1}G\partial_\rho G^{-1}G\partial_\sigma G^{-1}G\partial_\tau G^{-1}] \tag{12.197}$$

让我们把S_{eff}对A_μ做变分就得到相应的流J_μ:

$$J_\mu = \frac{\delta S_{eff}}{\delta A_\mu} = \frac{C_2}{2\pi^2}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau}\partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau. \tag{12.198}$$

现在考虑一个简单的情况,即$A_x = 0, A_y = B_z x, A_z = -E_z t, A_w = A_t = 0$.这里$A_w$是第四个空间维度的分量.这样的矢量势选择对应$z$方向有均匀磁场$B_z$和稳定电场$E_z$.此时非零的流是$w$方向的流$J_w = \frac{C_2}{4\pi^2}B_z E_z$.然后我们对$x, y$坐标积分有

$$\int dxdy J_w = \frac{C_2}{4\pi^2}\left(\int dxdy B_z\right)E_z = \frac{C_2 N_{xy}}{2\pi}E_z \tag{12.199}$$

N_{xy}是穿过xy平面的磁通量子个数.因此,我们看到z方向的电场与磁场诱导了w方向的电流,相应的电导是$\frac{C_2 N_{xy}}{2\pi} = C_2 N_{xy}\frac{e^2}{h}$. •

下面,我们将采用维度约化的方法得到3维拓扑绝缘态的拓扑场论描述.我们假定三维空间的矢量势$A_\mu = (A_0, A_x, A_y, A_z)$不依赖于第四个维度$w$,并且$A_w$依赖于所有时空坐标.然后假设$w$方向是紧致的,也就是满足周期边界条件而成为一个圆环.这样我们对额外维积分有

$$S_{eff} = \frac{C_2}{24\pi^2}\int dtd^3x\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau}\oint dw A_\mu \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau = \frac{\alpha}{32\pi^2}\int dtd^3x\theta(t,x)\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\mu\nu}F_{\rho\sigma} \tag{12.200}$$

这里$\alpha = e^2/\hbar c$是精细结构常数.

$$\theta(t,x) = C_2\oint dw A_w(t,x,w) \tag{12.201}$$

可以看成穿过额外维的磁通.$\theta(t,x)$在场论中称为轴子场(axion field).为了保证时空的时间与空间平移不变性,θ应是常数而非一个动力学的场. 根据时间反演不变性的要求$\theta 0$或$\pi C_2 = 1$,$\theta = 0$对应普通的绝缘体而$\theta = \pi$是拓扑绝缘体.如果我们定义$P_3 = \theta/(2\pi)$,那么在有S_{eff}的情况下Maxwell方程修改为:

$$\nabla\cdot\vec{D} = 4\pi\rho + 2\alpha(\nabla P_3\cdot\vec{B})$$

$$\nabla\times\vec{H} - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} - 2\alpha(\nabla P_3\times\vec{E} + \frac{1}{c}\partial_t P_3\vec{B}) \tag{12.202}$$

$$\nabla\times\vec{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} = 0 \tag{12.203}$$

$$\nabla\times\vec{B} = 0 \tag{12.204}$$

这些方程也叫做轴子电动力学方程.注意到如果θ仅是常数,也就是没有时空上的变化,那么上述方程就回到Maxwell方程的情形.当轴子场存在时,典型的物理效应有1)半量子霍尔效应:三维拓扑绝缘体表面若存在一个空间变化的θ就可能导致$\frac{e^2}{2h}$的量子霍尔电导;2)拓扑磁电效应:时间依赖的θ在均匀磁场存在时诱导电荷极化;3)Witten效应:时间依赖的θ会使得磁单极获得电荷.[8]

[8]这几个效应的简要讨论可以参考漆晓亮和张首晟的综述文章[Rev.Mod.Phys.83.1057]

电磁场与物质的相互作用:量子电动力学速成班*

Dirac费米子*

当我们考虑电磁场与物质的相互作用,那么就需要添加物质场的作用量,例如Dirac费米子:

$$S_{Dirac}=\int dtd^3x\mathcal{L}(\bar{\psi},\psi)=\int dtd^3x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi. \tag{12.205}$$

在四维时空,ψ是四行一列的旋量,

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} \tag{12.206}$$

$\bar{\psi}=\psi^\dagger\gamma^0$是共轭旋量.$\gamma^\mu=(\gamma^0,\gamma^1,\gamma^2,\gamma^3)$是$4\times4$的矩阵,满足Clifford代数,也就是反对易关系$[\gamma^\mu,\gamma^\nu]_+=2g^{\mu,\nu}$.当然,一般也会定义与$\gamma^\mu$反对易的$\gamma^5=i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$.$m$是Dirac费米子的质量.对于$\gamma$矩阵有如下性质:

$$\mathrm{Tr}\gamma^\mu=0\quad \mathrm{Tr}\gamma^\mu\gamma^\nu=4g^{\mu\nu}\quad \mathrm{Tr}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma=4(g^{\mu\nu}g^{\rho\sigma}-g^{\mu\rho}g^{\nu\sigma}+g^{\mu\sigma}g^{\nu\rho}) \tag{12.207}$$

$$\mathrm{Tr}\gamma^5=0\quad \mathrm{Tr}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^5=0\quad \mathrm{Tr}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^5=-4i\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}. \tag{12.208}$$

由拉格朗日方程$\frac{\partial\mathcal{L}(\bar{\psi},\psi)}{\partial\bar{\psi}}=0$可得著名的Dirac方程

$$\boxed{(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi=0} \tag{12.209}$$

即

$$i\gamma^0\partial_0\psi=-i\gamma^i\partial_i\psi+m\psi \tag{12.210}$$

对上式右边左乘γ^0并定义$\alpha^i=\gamma^0\gamma^i,\beta=\gamma^0$可得Schödinger方程形式的Dirac方程:

$$i\hbar\partial_t\psi=(-i\hbar c\vec{\alpha}\cdot\nabla+\beta mc^2)\psi. \tag{12.211}$$

这里重新引入了$\hbar,c$.对Dirac方程取共轭并右乘γ^0可以得到$\bar{\psi}$满足的方程:

$$-i\partial_0\psi^\dagger(\gamma^0)^\dagger\gamma^0-i\partial_i\psi^\dagger(\gamma^i)^\dagger\gamma^0-m\psi^\dagger\gamma^0=0 \tag{12.212}$$

利用$(\gamma^0)^\dagger=\gamma^0,(\gamma^i)^\dagger=-\gamma^i$以及$\gamma^0$与$\gamma^i$反对易有

$$\boxed{i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu+m\bar{\psi}=0}. \tag{12.213}$$

类似Schödinger方程,对于Dirac方程,其连续性/流守恒方程是

$$\partial_t\rho+\nabla\cdot\vec{J}=0,\quad \rho=\psi^\dagger\psi\quad \vec{J}=c\psi^\dagger\vec{\alpha}\psi. \tag{12.214}$$

或写成协变形式有

$$\partial_\mu J^\mu = 0, \quad J^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi. \tag{12.215}$$

实际上,利用Dirac方程可以直接证明流守恒方程

$$\partial_\mu J^\mu = (\partial_\mu\bar{\psi})\gamma^\mu\psi + \bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi = im\bar{\psi}\psi + \bar{\psi}(-im\psi) = 0. \tag{12.216}$$

- 注意到$\rho = \sum_{j=1}^4 |\psi|_j^2 \geq 0$,因此$\rho = \psi^\dagger\psi$可以解释为概率,这克服了早期相对论性方程,即Klein-Gordon方程的负概率困难.

不过Dirac方程本身还是有负能解,这可以对$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0$左乘$i\gamma^\mu\partial_\mu + m$并取$\psi \sim e^{-ikx} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}-i\omega t}$ 的平面波解得以验证,即

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu + m)(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = -(\gamma^\mu\gamma^\nu\partial_\mu\partial_\nu + m^2)\psi = 0 \Rightarrow (\partial^2 + m^2)\psi = 0. \tag{12.217}$$

代入平面波解可得$\omega = \pm\sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$,这样$\omega < 0$的负能量解依然存在.为解决负能问题,Dirac提出了Dirac海的概念,这是说在基态时,所有的负能量态都被电子所填满而正能态没有占据.当Dirac海激发出一个电子时,Dirac海空出的负能态可以解释为电荷$+e$能量为$+\sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$的反电子.(类似于固体物理中的空穴)

规范不变性

现在,我们对Dirac旋量ψ做$U(1)$相位因子变换:

$$\psi \to e^{i\theta}\psi \tag{12.218}$$

这里$\theta = \theta(x)$是时空依赖的函数.那么此时Dirac费米子的作用量变成

$$\begin{aligned} S_{Dirac} &= \int dtd^3x\bar{\psi}e^{-i\theta}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)e^{i\theta}\psi = \int dtd^3x\bar{\psi}(i\gamma^\mu(\partial_\mu + e^{-i\theta}\partial_\mu e^{i\theta}) - m)\psi \\ &= \int dtd^3x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m - \gamma^\mu\partial_\mu\theta)\psi \end{aligned} \tag{12.219}$$

这样我们发现相位因子变化下多出了对θ的导数项,(也就是$\partial_\mu \to \partial_\mu + e^{-i\theta}\partial_\mu e^{i\theta}$)此时如果我们对$S_{Dirac}$做变分会发现Dirac方程会出多一项:

$$(\overbrace{i\gamma^\mu\partial_\mu - m}^{Dirac} - \gamma^\mu\partial_\mu\theta)\psi = 0 \tag{12.220}$$

显然,物理上Dirac方程是描述自旋1/2费米子的标准模型,这样多出的部分自然是非物理的,因此需要适当的手段去除这一项使方程形式不变.一个简单的办法是通过最小耦合引入$U(1)$规范场也就是电磁场A_μ,也就是把Dirac费米子作用量中的导数∂_μ换成协变导数$D_\mu \equiv \partial_\mu - ieA_\mu$.这样,系统的总作用量为

$$S = \int dtd^3x\bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = \int dtd^3x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi + \overbrace{e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi}^{-J^\mu}A_\mu - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{12.221}$$

e是电子电荷,$-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$是电磁场的拉格朗日量.仍然做场$\psi$的相位因子变换,那么有

$$S=\int dtd^3x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m-\gamma^\mu\partial_\mu\theta+e\gamma^\mu A_\mu)\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{12.222}$$

为了使作用量形式不变,我们可以让电磁势做规范变换$A_\mu\to A_\mu+\frac{1}{e}\partial_\mu\theta$, 这样恰好就抵消了$-\gamma^\mu\partial_\mu\theta$而使系统形式不变.($F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu\to\partial_\mu(A_\nu+\frac{1}{e}\partial_\nu\theta)-\partial_\nu(A_\mu+\frac{1}{e}\partial_\mu\theta)=F_{\mu\nu}$.)

因此,系统作用量的形式不变要求Dirac物质场相位因子变换的同时$U(1)$电磁规范场做相应的规范变换.换句话说,系统在规范变换下保持不变,这自然要求物质场与电磁场的耦合.

- $U(1)$规范不变性($U(1)$相位因子变换不变)导致物质场与$U(1)$电磁场的耦合.

Dirac方程的平面波解

让我们讨论Dirac方程的平面波解,我们可以设$\psi(x)=u(p)e^{-ikx}=u(p)e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}-i\omega t}$.$u(p)$是动量依赖的旋量.我们知道Dirac方程有正能和负能解,$\omega=p^0=\pm\sqrt{\vec{k}^2+m^2}$.下面,我们先考虑正能解.把平面波解代入Dirac方程可得

$$(\gamma^\mu p_\mu-m)u(p)=0 \tag{12.223}$$

对于静止的粒有$p_\mu=(p^0,0)=(m,0)$,

$$m(\gamma^0-1)u(p)=0 \tag{12.224}$$

继续计算需要γ矩阵的具体形式,例如在Wely表示下有

$$\gamma^0=\begin{pmatrix}0&I\\I&0\end{pmatrix}\quad\gamma^i=\begin{pmatrix}0&\sigma^i\\-\sigma^i&0\end{pmatrix} \tag{12.225}$$

I是2×2单位矩阵,σ^i是Pauli矩阵.这样有

$$m\begin{pmatrix}-I&I\\I&-I\end{pmatrix}u(p)=0 \tag{12.226}$$

上述方程的解是

$$u^s(p)=\sqrt{m}\begin{pmatrix}\xi^s\\\xi^s\end{pmatrix},\quad\xi^{s=1}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\quad\xi^{s=2}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{12.227}$$

两分量波函数ξ^s满足正交归一条件$(\xi^s)^\dagger\xi^r=\delta^{sr}$,即

$$(\xi^1)^\dagger\xi^1=\begin{pmatrix}1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=1,\quad(\xi^1)^\dagger\xi^2=\begin{pmatrix}1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=0. \tag{12.228}$$

对于负能解则有

$$v^s(p)=\sqrt{m}\begin{pmatrix}\eta^s\\-\eta^s\end{pmatrix},\quad \eta^{s=1}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\quad \eta^{s=2}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{12.229}$$

物理上,ξ^1代表电子自旋沿z轴向上,ξ^2代表向下.η^1代表反电子自旋沿z轴向下,η^2代表向上.

进一步,设粒子沿着z轴运动,$p^\mu=(E,0,0,p_z)$那么两个正能解为

$$u^{s=1}(p)=\begin{pmatrix}\sqrt{E-p_z}\\0\\\sqrt{E+p_z}\\0\end{pmatrix}\quad u^{s=2}(p)=\begin{pmatrix}0\\\sqrt{E+p_z}\\0\\\sqrt{E-p_z}\end{pmatrix}. \tag{12.230}$$

负能解是

$$v^{s=1}(p)=\begin{pmatrix}\sqrt{E-p_z}\\0\\-\sqrt{E+p_z}\\0\end{pmatrix}\quad v^{s=2}(p)=\begin{pmatrix}0\\\sqrt{E+p_z}\\0\\-\sqrt{E-p_z}\end{pmatrix}. \tag{12.231}$$

一般来说,定义$\bar{u}=u^\dagger\gamma^0,\bar{v}=v^\dagger\gamma^0$,我们有

$$\bar{u}^s(p)u^r(p)=2m(\xi^s)^\dagger\xi^r=2m\delta^{sr},\quad \bar{v}^s(p)v^r(p)=-2m(\eta^s)^\dagger\eta^r=-2m\delta^{sr},\quad \bar{u}^s(p)v^r(p)=0, \tag{12.232}$$

$$(u^s)^\dagger(p)u^r(p)=2E_p\delta^{sr},\quad (v^s)^\dagger(p)v^r(p)=2E_p\delta^{sr},\quad \bar{u}^s(\vec{p})v^r(-\vec{p})=0, \tag{12.233}$$

$$\sum_s u^s(p)\bar{u}^s(p)=\gamma^\mu p_\mu+m,\quad \sum_s v^s(p)\bar{v}^s(p)=\gamma^\mu p_\mu-m. \tag{12.234}$$

Dirac方程的成功与缺陷

由Dirac费米子与电磁场的耦合系统的作用量可得电磁场存在下的Dirac方程:

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu-m+e\gamma^\mu A_\mu)\psi=0\Rightarrow(i\hbar\partial_t+e\phi)\psi=\left((-i\hbar c\nabla+e\vec{A})\cdot\vec{\alpha}+\beta mc^2\right)\psi. \tag{12.235}$$

如我们考虑氢原子问题,可设$\vec{A}=0,\phi=\frac{e}{4\pi r}$,那么设$\psi(t,\vec{x})=e^{-iEt}\psi(\vec{x})$可得本征能量为[9]

$$E_{n,j}=\frac{mc^2}{\sqrt{1+\frac{\alpha^2}{(n-j-\frac{1}{2}+\sqrt{(j+\frac{1}{2})^2-\alpha^2})}}}\simeq mc^2\left[1-\frac{\alpha^2}{2n^2}-\frac{\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)+...\right] \tag{12.236}$$

[9]Dirac方程的氢原子问题可以参考Sakurai书《Modern Quantum Mechanics》第二版8.4节.

n为主量子数,j为总角动量量子数,$\alpha=\frac{e^2}{4\pi\hbar c}\simeq\frac{1}{137}$是精细结构常数.这里$\alpha^4$项与实验吻合.

现在让我们考虑磁场的影响.设$\phi=0$而$\vec{A}\neq 0$则有(采用Wely表示):

$$\begin{pmatrix} -m & i\partial_t+\vec{\sigma}\cdot(i\nabla-e\vec{A}) \\ i\partial_t-\vec{\sigma}\cdot(i\nabla-e\vec{A}) & -m \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix}=0 \tag{12.237}$$

即有

$$(i\partial_t+\vec{\sigma}\cdot(i\nabla-e\vec{A}))\varphi=m\chi,\quad (i\partial_t-\vec{\sigma}\cdot(i\nabla-e\vec{A}))\chi=m\varphi. \tag{12.238}$$

这样我们可以解出φ:

$$\left[(i\partial_t)^2-(\vec{\sigma}\cdot(i\nabla-e\vec{A}))^2\right]\varphi=m^2\varphi. \tag{12.239}$$

利用Pauli自旋算符的公式$(\vec{\sigma}\cdot\vec{W})^2=\vec{W}^2+i\vec{\sigma}\cdot\vec{W}\times\vec{W}$ 有[10]

$$(\vec{\sigma}\cdot(i\nabla-e\vec{A}))^2=(i\nabla-e\vec{A})^2+i\vec{\sigma}\cdot(i\nabla-e\vec{A})\times(i\nabla-e\vec{A})=(\hat{p}+e\vec{A})^2+e\vec{\sigma}\cdot\vec{B} \tag{12.240}$$

则有

$$\left[(i\partial_t)^2-(\hat{p}+e\vec{A})^2-e\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\right]\varphi=m^2\varphi. \tag{12.241}$$

设$\varphi=\phi e^{-imt}$而ϕ是时间上缓慢变化的函数,那么忽略ϕ的时间二阶导数后得到(即非相对论近似)

$$(i\partial_t)^2\varphi\simeq 2ime^{-imt}\partial_t\phi+m^2e^{-imt}\phi \tag{12.242}$$

代入方程就能消去$m^2\varphi$项得到最终的形式:

$$i\hbar\partial_t\phi=\left(\frac{(\hat{p}+e\vec{A})^2}{2m}+\frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\right)\phi \tag{12.243}$$

这就是电磁场中电子的Schödinger方程,也称为Pauli方程.$\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$表示电子的自旋与磁场的相互作用,其系数$\frac{e\hbar}{2m}$就是电子的磁矩的单位,即Bohr磁子μ_B.

考虑z方向的磁场B,在对称规范下$\vec{A}=\frac{1}{2}(-By,Bx,0)$那么上式写成(回忆电子自旋的$z$方向算符是$S^z=\frac{\hbar}{2}\sigma^z$,轨道角动量$z$方向算符是$L^z=xp_y-yp_x$)

$$i\hbar\partial_t\phi=\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{e^2B^2(x^2+y^2)}{8m}+\frac{e}{2m}(L^z+2S^z)B\right)\phi \tag{12.244}$$

这里S^z与L^z系数的比值就是原子物理中熟知的Landé的g因子,由Dirac方程取非相对论近似我们发现$g=2$.如果我们考虑电子在原子中的运动,那么B^2项

[10]注意到算符作用于波函数才有实际意义则有$(i\nabla-e\vec{A})\times(i\nabla-e\vec{A})\varphi=-\nabla\times\nabla\varphi-ie\nabla\times(\vec{A}\phi)-ie\vec{A}\times\nabla\varphi+e^2\vec{A}\times\vec{A}\varphi=-ie\nabla\times(\vec{A}\phi)-ie\vec{A}\times\nabla\varphi=-ie\varphi\nabla\times\vec{A}=-ie\vec{B}\varphi$.这里$\nabla\times(\vec{A}\phi)=\varepsilon_{ijk}\partial_j(A_k\varphi)=\varphi\varepsilon_{ijk}\partial_jA_k+\varepsilon_{ijk}A_k\partial_j\varphi=\varphi\varepsilon_{ijk}\partial_jA_k-\varepsilon_{ikj}A_k\partial_j\varphi=\varphi\nabla\times\vec{A}-\vec{A}\times\nabla\varphi$.

在原子物理中描述的是抗磁性,因为这一项相当于是给出微扰论意义下的一阶能量修正$\Delta E_{diag}=\frac{e^2B^2}{8m}\langle x^2+y^2\rangle$,$\langle x^2+y^2\rangle$对所考虑的电子能级求平均.[11]显然$\langle x^2+y^2\rangle>0$那么$B^2$项所诱导的磁矩是$M_{diag}=-\frac{\partial\Delta E_{diag}}{\partial B}=-\frac{e^2B}{4m}\langle x^2+y^2\rangle<0$,磁化率是$\chi_{diag}=\frac{\partial M}{\partial B}=-\frac{e^2}{4m}\langle x^2+y^2\rangle<0$.负的磁化率和磁矩都说明$B^2$项确实导致抗磁性(也就是磁矩与磁场方向相反).[12]与之相反,角动量与磁场反方向时使得Zeeman能最低,这对应正的磁矩$M_{para}=-\frac{\partial\Delta E_{para}}{\partial B}=-\frac{e}{2m}(\langle L^z+2S^z\rangle)>0$,这体现为与磁场同方向的磁矩,因此角动量与外磁场的耦合给出顺磁性.

- Dirac方程成功地解释了电子磁矩$\frac{e\hbar}{2m}$和Landé因子$g=2$.

  但是,Dirac方程并不能解释I.Rabi实验上发现的电子反常磁矩:

$$\mu=\frac{e\hbar}{2m}(1.00118\pm0.00003). \tag{12.245}$$

反常磁矩的理论解释由J.Schwinger利用量子电动力学给出,即$\mu=\frac{e\hbar}{2m}(1+\frac{\alpha}{2\pi})=\frac{e\hbar}{2m}1.00116$.这是量子电动力学最重要的成就之一.很多时候我们也把磁矩的修正归并到电子的Landég因子中,那么实验值就是$g=2+0.00236(6)$而理论值是$g=2+\alpha/\pi=2+1.00232$.

同时Dirac方程也与氢原子的Lamb移动的测量不符.Lamb移动说的是氢原子的$2S_{1/2}$与$2P_{1/2}$能级之间存在1000MHz的劈裂.按照Dirac理论,也就是上面的能级公式$E_{n,j}$,这两个能级应是简并的,不应存在劈裂.

- Dirac方程不能解释电子反常磁矩和Lamb移动,正确的解释需要量子电动力学.

Wely费米子

四维时空中的Dirac旋量ψ可以用两分量的所谓Wely旋量ψ_L,ψ_R改写为

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_L\\ \psi_R\end{pmatrix} \tag{12.246}$$

如果用粒子的语言来说,这说明一个Dirac费米子等价于两个Wely费米子.利用Wely旋量和γ矩阵的Wely表示可以把Dirac方程写成如下形式:

$$\begin{pmatrix}-m & i\partial_t+i\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}\\ i\partial_t-i\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} & -m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_L\\ \psi_R\end{pmatrix}=0 \tag{12.247}$$

$$\begin{aligned}i(\partial_t+\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})\psi_R-m\psi_L=0\\ i(\partial_t-\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})\psi_L-m\psi_R=0\end{aligned} \tag{12.248}$$

[11]二阶能量修正将会给出van Vleck顺磁性

[12]这种抗磁性虽然在所有材料中都存在,但其效应通常都可忽略

当$m=0$时上述两个方程退耦和,此时我们得到两个独立的方程,即Wely方程:

$$\begin{aligned} i(\partial_t+\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})\psi_R&=0\\ i(\partial_t-\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})\psi_L&=0. \end{aligned} \tag{12.249}$$

在文献中ψ_L,ψ_R也称为左右手性场(chiral)而$m=0$代表手性极限,也就是左右手费米子在无质量的情况下彼此独立.为了简化符号,我们定义$\sigma^\mu=(1,\vec{\sigma})$和$\bar{\sigma}^\mu=(1,-\vec{\sigma})$,这样Wely表示下的$\gamma$矩阵可写成

$$\gamma^\mu=\begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu\\ \bar{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix} \tag{12.250}$$

而Dirac方程有

$$\begin{aligned} i\sigma^\mu\partial_\mu\psi_R-m\psi_L&=0\\ i\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\psi_L-m\psi_R&=0. \end{aligned} \tag{12.251}$$

最后,在Wely表示下

$$\gamma^5=\begin{pmatrix} -1_{2\times2} & 0\\ 0 & 1_{2\times2} \end{pmatrix} \tag{12.252}$$

那么可以用γ^5把Dirac旋量分解为左右手费米子:

$$\frac{1+\gamma^5}{2}\psi=\begin{pmatrix} 0\\ \psi_R \end{pmatrix},\quad \frac{1-\gamma^5}{2}\psi=\begin{pmatrix} \psi_L\\ 0 \end{pmatrix}. \tag{12.253}$$

Dirac费米子的作用量用Wely费米子可写成

$$S_{Dirac}=\int d^4x(\psi_R^\dagger i\sigma^\mu\partial_\mu\psi_R+\psi_L^\dagger i\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\psi_L-m\psi_R^\dagger\psi_L-m\psi_L^\dagger\psi_R). \tag{12.254}$$

由于$\sigma^0=1$,因此$\psi_{R,L}^\dagger=\bar{\psi}_{R,L}$即有

$$S_{Dirac}=\int d^4x(\bar{\psi}_R i\sigma^\mu\partial_\mu\psi_R+\bar{\psi}_L i\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\psi_L-m\bar{\psi}_R\psi_L-m\bar{\psi}_L\psi_R). \tag{12.255}$$

在不引起混乱的情况下,一般也把$(0,\psi_R)^T$直接记为ψ_R而$(\psi_R,0)^T$记为ψ_L,那么Dirac旋量$\psi=\psi_L+\psi_R$而Dirac作用量写成

$$S_{Dirac}=\int d^4x(\bar{\psi}_R i\gamma^\mu\partial_\mu\psi_R+\bar{\psi}_L i\gamma^\mu\partial_\mu\psi_L-m\bar{\psi}_R\psi_L-m\bar{\psi}_L\psi_R). \tag{12.256}$$

当$m=0$时上述作用量中ψ_L,ψ_R退耦,如果定义左手与右手流$J_L^\mu=\bar{\psi}_L\gamma^\mu\psi_L, J_R^\mu=\bar{\psi}_R\gamma^\mu\psi_R$. 利用Dirac方程可知这两个流分别守恒:

$$\partial_\mu J_L^\mu=0,\quad \partial_\mu J_R^\mu=0 \tag{12.257}$$

这说明系统存在左右手场的对称性,文献中称为手征对称性.如果引入轴矢流$J^{\mu5}=\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$,那么上述流守恒等价于轴矢流守恒,即$\partial_\mu J^{\mu5}=0$.

Dirac费米子的关联函数*

对Dirac费米子,我们考虑如下具有源场$J,\bar{J}$的配分函数

$$\mathcal{Z}[J]=\int D\bar{\psi}D\psi e^{i\int d^4x(\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi+\bar{J}\psi+\bar{\psi}J)} \tag{12.258}$$

这里$\psi(x),\bar{\psi}(x),J(x),\bar{J}(x)$都是互相独立的Grassman场.为计算上述配分函数,先考虑单个Grassman数$\eta,\bar{\eta}$的情况,

$$Z=\int d\bar{\eta}d\eta e^{i(\bar{\eta}K\eta+\bar{J}\eta+\bar{\eta}J)}=e^{-i\bar{J}K^{-1}J}\int d\bar{\eta}d\eta e^{i\bar{\eta}K\eta} \tag{12.259}$$

这个结果可以通过展开指数并积分验证.因此,

$$\mathcal{Z}[J]=\mathcal{Z}[0]e^{-i\int d^4x\int d^4y\bar{J}(x)\overbrace{(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)^{-1}}^{S(x-y)}J(y)} \tag{12.260}$$

而Dirac费米子的自由Green函数$S(x-y)$由下列方程确定

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)S(x-y)=\delta(x-y) \tag{12.261}$$

对$S(x-y),\delta(x-y)$都做傅里叶变换可得

$$\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{-ik_\mu x^\mu}(\gamma^\mu k_\mu-m)S(k)=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{-ik_\mu x^\mu} \tag{12.262}$$

即有

$$(\gamma^\mu k_\mu-m)S(k)=1\Rightarrow S(k)=(\gamma^\mu k_\mu-m)^{-1}=\frac{\gamma^\nu k_\nu+m}{(\gamma^\mu k_\mu-m)(\gamma^\nu k_\nu+m)} \tag{12.263}$$

分母为$(\gamma^\mu k_\mu-m)(\gamma^\nu k_\nu+m)=\gamma^\mu\gamma^\nu k_\mu k_\nu-m^2=\frac{1}{2}[\gamma^\mu,\gamma^\nu]_+k_\mu k_\nu-m^2=\eta^{\mu\nu}k_\mu k_\nu-m^2=k^2-m^2$. 因此,

$$S(k)=(\gamma^\mu k_\mu-m)^{-1}=\frac{\gamma^\mu k_\mu+m}{k^2-m^2}. \tag{12.264}$$

通过配分函数的导数有

$$\frac{\partial^2\ln\mathcal{Z}[J]}{\partial\bar{J}(x)\partial J(y)}=\frac{\partial}{\partial\bar{J}(x)}(-i)\int d^4x\bar{J}(x)S(x-y)(-1)=iS(x-y) \tag{12.265}$$

另一方面

$$\frac{\partial\ln\mathcal{Z}[J]}{\partial J(y)}=\frac{1}{\mathcal{Z}[J]}\int D\bar{\psi}D\psi e^{i\int d^4x(\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi+\bar{J}\psi+\bar{\psi}J)}(-i\bar{\psi}(y)) \tag{12.266}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\ln\mathcal{Z}[J]}{\partial\bar{J}(x)\partial J(y)}&=\frac{1}{\mathcal{Z}[J]}\int D\bar{\psi}D\psi e^{i\int d^4x(\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi+\bar{J}\psi+\bar{\psi}J)}(i\psi(x))(-i\bar{\psi}(y))\\-&\frac{1}{\mathcal{Z}^2[J]}\int D\bar{\psi}D\psi e^{i\int d^4x(\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi+\bar{J}\psi+\bar{\psi}J)}i\psi(x)\int D\bar{\psi}D\psi e^{i\int d^4x(\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi+\bar{J}\psi+\bar{\psi}J)}(-i\bar{\psi}(y))\end{aligned}$$

现在,取$J,\bar{J}=0$的极限可得自由Dirac费米子的关联函数

$$\langle\psi(x)\bar{\psi}(y)\rangle_0=\frac{\partial^2\ln\mathcal{Z}[J]}{\partial\bar{J}(x)\partial J(y)}|_{J=0}=\frac{1}{\mathcal{Z}[0]}\int D\bar{\psi}D\psi e^{i\int d^4x(\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi)}\psi(x)\bar{\psi}(y)=iS(x-y).$$

而其傅里叶变换是

$$\langle\psi(k)\bar{\psi}(k)\rangle_0=iS(k)=i\frac{\gamma^\mu k_\mu+m}{k^2-m^2}. \tag{12.267}$$

当然,我们也可用正则量子化形式计算Dirac费米子的关联函数,其核心是把$\psi(x)$提升为算符并做傅里叶展开:

$$\hat{\psi}(x)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2E_k}}\sum_{s=1,2}(\hat{a}_k^s u^s(k)e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}+(\hat{b}_k^s)^\dagger v^s(k)e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}) \tag{12.268}$$

这里$\hat{a}_k^s$是能量为E_k动量为$\vec{k}$电子的湮灭算符,$(\hat{b}_k^s)^\dagger$是能量为E_k动量为$\vec{k}$空穴(反电子)的产生算符,它们满足反对易关系

$$\{\hat{a}_k^r,(\hat{a}_p^s)^\dagger\}=(2\pi)^3\delta(k-p)\delta^{rs},\quad \{\hat{b}_k^r,(\hat{b}_p^s)^\dagger\}=(2\pi)^3\delta(k-p)\delta^{rs}. \tag{12.269}$$

同理有

$$\hat{\bar{\psi}}(x)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2E_k}}\sum_{s=1,2}((\hat{a}_k^s)^\dagger\bar{u}^s(k)e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}+\hat{b}_k^s\bar{v}^s(k)e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}). \tag{12.270}$$

$$\begin{aligned}
\{\hat{\psi}(x),\hat{\bar{\psi}}(y)\} &= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{4E_kE_p}}\sum_{s,r}\{\hat{a}_p^s,(\hat{a}_k^r)^\dagger\}u^s(p)\bar{u}^r(k)e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}-i\vec{k}\cdot\vec{y}}\\
&+ \{(\hat{b}_p^s)^\dagger,\hat{b}_k^r\}v^s(p)\bar{v}^r(k)e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}+i\vec{k}\cdot\vec{y}}\\
&= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}\sum_s u^s(p)\bar{u}^s(p)e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}+v^s(p)\bar{v}^s(p)e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}\\
&= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}((\gamma^\mu p_\mu+m)e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}+(\gamma^\mu p_\mu-m)e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})})\\
&= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}((\gamma^0p^0-\vec{\gamma}\cdot\vec{p}+m)e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}+(\gamma^0p^0+\vec{\gamma}\cdot\vec{p}-m)e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})})\\
&= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\overbrace{p^0}^{1}}{E_p}e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}\gamma^0=\delta(x-y)1_{4\times4}\gamma^0
\end{aligned} \tag{12.271}$$

即有$\{\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(y)\}=\delta(x-y)1_{4\times4}$.这样每个分量间的反对易关系是$\{\hat{\psi}_a(x),\hat{\psi}_b^\dagger(y)\}=\delta(x-y)\delta_{ab}$.把场算符代入Dirac场的哈密顿量有

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \int d^3x\hat{\psi}^\dagger(-i\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\nabla+m\gamma^0)\hat{\psi}=\int d^3x\hat{\bar{\psi}}(-i\vec{\gamma}\cdot\nabla+m)\hat{\psi}\\
&= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}\sum_{s,r}(\hat{a}_p^s)^\dagger\hat{a}_p^r\bar{u}^s(p)(\vec{\gamma}\cdot\vec{p}+m)u^r(p)+(\hat{a}_p^s)^\dagger(\hat{b}_{-p}^r)^\dagger\bar{u}^s(p)(\vec{\gamma}\cdot\vec{p}+m)v^r(-p)\\
&+ \hat{b}_p^s\hat{a}_{-p}^r\bar{v}^s(p)(-\vec{\gamma}\cdot\vec{p}+m)u^r(-p)+\hat{b}_p^s(\hat{b}_p^r)^\dagger\bar{v}^s(p)(-\vec{\gamma}\cdot\vec{p}+m)v^r(p)
\end{aligned} \tag{12.272}$$

利用Dirac方程$(\gamma^\mu p_\mu - m)u(p) = 0$得到$(\vec{\gamma}\cdot\vec{p}+m)u(p) = \gamma^0 E_p u(p)$而$(\vec{\gamma}\cdot\vec{p} - m)v(p) = \gamma^0 E_p v(p)$.那么哈密顿量化简为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}\sum_{s,r}(\hat{a}_p^s)^\dagger \hat{a}_p^r E_p (u^s)^\dagger(p)u^r(p) - (\hat{a}_p^s)^\dagger(\hat{b}_{-p}^r)^\dagger E_p(u^s)^\dagger(p)v^r(-p)\\ &+ \hat{b}_p^s\hat{a}_{-p}^r E_p(v^s)^\dagger(p)u^r(-p) - \hat{b}_p^s(\hat{b}_p^r)^\dagger E_p(v^s)^\dagger(p)v^r(p) \qquad (12.273)\end{aligned}$$

再利用u,v的正交归一关系$(u^s)^\dagger(p)u^r(p) = (v^s)^\dagger(p)v^r(p) = 2E_p\delta^{sr}, \bar{u}^s(\vec{p})v^r(-\vec{p}) = 0$ 有

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{s=1,2} E_p\left((\hat{a}_p^s)^\dagger\hat{a}_p^s - \hat{b}_p^s(\hat{b}_p^s)^\dagger\right)\\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{s=1,2} E_p\left((\hat{a}_p^s)^\dagger\hat{a}_p^s + (\hat{b}_p^s)^\dagger\hat{b}_p^s - (2\pi)^3\delta(0)\delta^{ss}\right)\\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sum_{s=1,2} E_p\left((\hat{a}_p^s)^\dagger\hat{a}_p^s + (\hat{b}_p^s)^\dagger\hat{b}_p^s\right) + E_0. \qquad (12.274)\end{aligned}$$

这里$E_0 = -2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}(2\pi)^3\delta(0)$是Dirac场的负真空能.[13]对应的真空态记为$|0\rangle$,满足 $(\hat{a}_p^r)^\dagger|0\rangle = (\hat{b}_p^r)^\dagger|0\rangle = 0$,也就是真空既没有电子也没有反电子.

动量为$\vec{p}$自旋为s电子的单粒子态定义为$|\vec{p},s\rangle = \sqrt{2E_p}(a_p^s)^\dagger|0\rangle$而反电子为$|\vec{p},s\rangle = \sqrt{2E_p}(b_p^s)^\dagger|0\rangle$.这样动量态的归一化是

$$\langle\vec{p}',s'|\vec{p},s\rangle = \sqrt{4E_pE_{p'}}\langle 0|a_{p'}^{s'}(a_p^s)^\dagger|0\rangle = \sqrt{4E_pE_{p'}}\langle 0|(2\pi)^3\delta(p-p')\delta^{ss'} - (a_p^s)^\dagger a_{p'}^{s'}|0\rangle = 2E_p(2\pi)^3\delta(p-p')\delta^s \qquad (12.275)$$

而正则量子化中的Dirac费米子关联函数定义为

$$iS(x-y) = \langle 0|T_t\hat{\psi}(x)\hat{\bar{\psi}}(y)|0\rangle = \theta(x^0-y^0)\langle 0|\hat{\psi}(x)\hat{\bar{\psi}}(y)|0\rangle - \theta(y^0-x^0)\langle 0|\hat{\bar{\psi}}(y)\hat{\psi}(x)|0\rangle \qquad (12.276)$$

直接计算有

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{\psi}(x)\hat{\bar{\psi}}(y)|0\rangle &= \int\frac{d^3pd^3k}{(2\pi)^6}\frac{1}{\sqrt{4E_pE_k}}\sum_{s,r}\langle 0|\hat{a}_k^s(\hat{a}_k^r)^\dagger|0\rangle u^s(p)\bar{u}^r(k)e^{-ipx}e^{iky}\\ &= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}\sum_s u^s(p)\bar{u}^s(p)e^{-ip(x-y)}\\ &= \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}e^{-ip(x-y)}(\gamma p + m) \qquad (12.277)\end{aligned}$$

$$\langle 0|\hat{\bar{\psi}}(y)\hat{\psi}(x)|0\rangle = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}e^{ip(x-y)}(\gamma p - m) \qquad (12.278)$$

对$iS(x-y)$做傅里叶变换可以证明这个关联函数与路径积分的结果相同.

[13]注意到玻色场真空能为正,因此如果费米子与玻色子质量相同则真空能发散互相抵消.这就是所谓的超对称(supersymmetry),也就是玻色子与费米子之间的对称.在这类理论中玻色子与费米子互相变换使系统保持不变.当然目前的实验观测表面超对称是破缺的,因此互相对称的粒子如果存在,那么其质量必须相差悬殊.

量子电动力学*

物质场与电磁场的耦合系统就是量子电动力学.对于Dirac费米子型的物质场,系统的配分函数是

$$\mathcal{Z}=\int D\bar{\psi}D\psi DAe^{i\int d^4x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m-\gamma^\mu\partial_\mu\theta+eA_\mu\gamma^\mu)\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}. \tag{12.279}$$

流守恒与Ward恒等式

在经典物理中,我们有流守恒$\partial_\mu J^\mu=0$,而在量子物理中,如果流守恒依然成立,那么我们要求其平均值为零,也就是

$$\langle\partial_\mu J^\mu(x)\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int D\bar{\psi}D\psi DAe^{i\int d^4x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m-\gamma^\mu\partial_\mu\theta+eA_\mu\gamma^\mu)\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}\partial_\mu J^\mu(x). \tag{12.280}$$

当然,在实际计算时,我们通常只能进行微扰计算,也就是展开$e^{i\int d^4xeA_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi}$:

$$e^{i\int d^4xeA_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi}=1+i\int d^4xeA_\nu\bar{\psi}\gamma^\nu\psi+\frac{(ie)^2}{2}\int d^4xA_\nu(x)\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x)\int d^4yA_\lambda(y)\bar{\psi}(y)\gamma^\lambda\psi(y)+... \tag{12.281}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}\langle\partial_\mu J^\mu(x)\rangle &= \partial_\mu\langle J^\mu(x)\rangle_0+ie\int d^4y\partial_\mu\langle J^\mu(x)A_\nu(y)\bar{\psi}(y)\gamma^\nu\psi(y)\rangle_0\\ &+ \frac{(ie)^2}{2}\int d^4yd^4z\partial_\mu\langle J^\mu(x)A_\nu(y)A_\lambda(z)\bar{\psi}(y)\gamma^\nu\psi(y)\bar{\psi}(z)\gamma^\lambda\psi(z)\rangle_0+...\end{aligned}$$

这里$\langle\mathcal{O}\rangle_0$是对$e=0$也就是物质场与电磁场无耦合时的配分函数求平均:

$$\langle\mathcal{O}\rangle_0=\frac{\int D\bar{\psi}D\psi DAe^{i\int d^4x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m-\gamma^\mu\partial_\mu\theta)\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}\mathcal{O}}{\int D\bar{\psi}D\psi DAe^{i\int d^4x\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m-\gamma^\mu\partial_\mu\theta)\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}}. \tag{12.282}$$

让我们计算直到e^2项的贡献.首先,

$$\begin{aligned}\langle J^\mu(x)\rangle_0 &= \lim_{y\to x}\langle\bar{\psi}(y)\gamma^\mu\psi(x)\rangle_0=-i\lim_{y\to x}\mathrm{Tr}\left(S(x-y)\gamma^\mu\right)\\ &= -i\lim_{y\to x}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{-ik_\nu(x^\nu-y^\nu)}\mathrm{Tr}\left(\frac{\gamma^\nu k_\nu+m}{k^2-m^2}\gamma^\mu\right)\\ &= -i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\frac{k_\nu\mathrm{Tr}\gamma^\nu\gamma^\mu+m\mathrm{Tr}\gamma^\mu}{k^2-m^2}\end{aligned} \tag{12.283}$$

利用$\mathrm{Tr}\gamma^\mu=0,\mathrm{Tr}\gamma^\nu\gamma^\mu=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\gamma^\nu\gamma^\mu+\gamma^\mu\gamma^\nu)=4g^{\mu\nu}$, 那么对$k_\nu$的积分为零,因此流密度的平均值$\langle J^\mu(x)\rangle_0=0$.

注意到e的一次方项可以写成

$$ie\int d^4y\partial_\mu\langle J^\mu(x)\bar{\psi}(y)\gamma^\nu\psi(y)\rangle_0\langle A_\nu(y)\rangle_0$$

而电磁场的平均值$\langle A_\nu(y)\rangle_0=0$,这样$e$的一次方项贡献为零.对$e^2$项有

$$\frac{(ie)^2}{2}\int d^4yd^4z\partial_\mu\langle\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\bar{\psi}(y)\gamma^\nu\psi(y)\bar{\psi}(z)\gamma^\lambda\psi(z)\rangle_0\langle A_\nu(y)A_\lambda(z)\rangle_0$$

上式中费米子的平均$\langle ...\rangle_0$共有六项,其中四项与分母抵消,[14]剩下的两项贡献相同,恰好抵消$\frac{1}{2}$ 因子,则有

$$\begin{aligned} & -(ie)^2\int d^4yd^4z\partial_\mu \mathrm{Tr}\left(\gamma^\mu iS(x-y)\gamma^\nu iS(y-z)\gamma^\lambda iS(z-x)\right) iD_{\nu\lambda}(y-z) \\ = \quad & -(ie)^2 i^4\int d^4yd^4z\partial_\mu \mathrm{Tr}\left(\gamma^\mu S(x-y)\gamma^\nu S(y-z)\gamma^\lambda S(z-x)\right) D_{\nu\lambda}(y-z) \end{aligned}$$

额外的负号源自把$\bar{\psi}(x)$移动到最右边产生的费米子交换负号$(-1)^5=-1$.把上式中的Green函数S,D做傅里叶变换可得

$$\begin{aligned} & -(ie)^2\int d^4yd^4z\int \frac{d^4k_1}{(2\pi)^4}\frac{d^4k_2}{(2\pi)^4}\frac{d^4k_3}{(2\pi)^4}\frac{d^4k_4}{(2\pi)^4}\partial_\mu e^{-ik_1(x-y)-ik_2(y-z)-ik_3(z-x)-ik_4(y-z)} \\ \times \quad & \mathrm{Tr}\left(\gamma^\mu S(k_1)\gamma^\nu S(k_2)\gamma^\lambda S(k_3)\right) D_{\nu\lambda}(k_4) \\ = \quad & -(ie)^2\int \frac{d^4k_1}{(2\pi)^4}\frac{d^4k_2}{(2\pi)^4}\frac{d^4k_3}{(2\pi)^4}\frac{d^4k_4}{(2\pi)^4} i(k_3-k_1)_\mu e^{i(k_3-k_1)x}(2\pi)^8\delta(k_1-k_2-k_4)\delta(k_2-k_3+k_4) \\ \times \quad & \mathrm{Tr}\left(\gamma^\mu S(k_1)\gamma^\nu S(k_2)\gamma^\lambda S(k_3)\right) D_{\nu\lambda}(k_4) \end{aligned} \tag{12.284}$$

注意到两个δ函数要求$k_3-k_1=0$,这恰好使∂_μ产生的因子$i(k_3-k_1)_\mu=0$.这样上式自动为零.总结以上讨论,我们发现直到e^2阶,$\partial_\mu\langle J^\mu\rangle=0$成立.事实上,利用Ward−Takahashi(沃德−高桥)恒等式可以证明e的任意阶都满足流守恒.也就是说流守恒在量子电动力学总是成立.[15]

简单来说,设流密度J^μ在任何物理态$|i\rangle,|f\rangle$之间期望值的傅里叶变换为

$$\mathcal{M}(q)=\int\frac{d^4q}{(2\pi)^4}e^{iqx}\langle f|J^\mu(x)|i\rangle \tag{12.285}$$

那么Ward−Takahashi恒等式告诉我们

$$\boxed{q_\mu\mathcal{M}(q)=0} \tag{12.286}$$

这等价于

$$\partial_\mu\langle f|J^\mu(x)|i\rangle=\int d^4x\partial_\mu e^{-iqx}\mathcal{M}(q)=\int d^4xe^{-iqx}(-i)\overbrace{q_\mu\mathcal{M}(q)}^{=0}=0 \tag{12.287}$$

即任何物理态下$\partial_\mu J^\mu=0$成立.

- 量子电动力学(Quantum Electrodynamics,QED)中流守恒$\partial_\mu J^\mu=0$成立.

QED的Feynman规则

为了便于实际计算,特别是高阶微扰论的系统化处理,我们可以引入QED的动量空间Feynman规则(实空间是类似的):(图12.4(a))

[14]也就是只有连通图有贡献

[15]Peskin书238 − 243和311页.

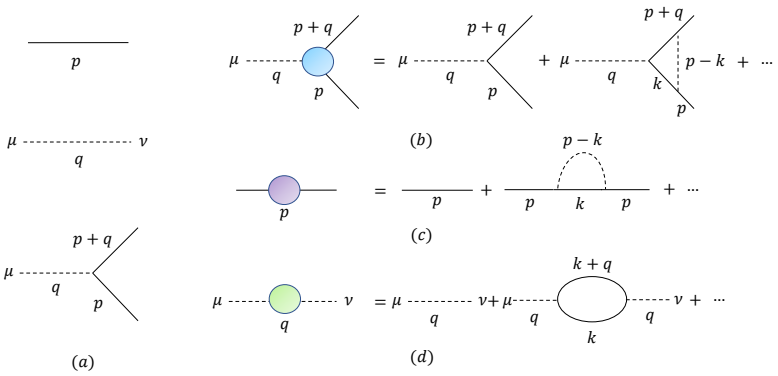


Figure 12.4: (a)QED的基本Feynman规则;(b)顶角修正;(c)电子自能;(d)真空极化.

- 每条电子内线(实线)对应$iS(k)$;
- 每条光子内线(虚线)对应$iD_{\mu\nu}(q)$;
- 每个顶角对应$ie\gamma^{\mu}$,顶点处动量守恒;
- 每个封闭的电子圈给出一个负号;
- 对所有内部动量积分,对所有内部指标求和或求迹.

需要说明,所谓内线指的是虚粒子,也就是不满足Einstein能量−动量关系$E^2 = \vec{k}^2 + m^2$(或$k^2 - m^2 = 0$)的粒子,原则上其能量和动量可以任意大.与之相对,真实的粒子总满足能量−动量关系,场论中称为on-shell条件. 如图12.4所示,(a)图从上到下分别代表Dirac费米子的关联函数;光子的关联函数以及电磁场A_{μ}与Dirac费米子的相互作用顶角,我们赋予其因子$ie\gamma^{\mu}$.一般地,如图12.4(b)所示,相互作用修正后的顶角通常记为$ie\Gamma^{\mu}(p, p+q)$,其通过一个具体的Ward−Takahashi恒等式与Dirac 费米子的Green函数S相联系:

$$\boxed{S(p+q)ieq_{\mu}\Gamma^{\mu}(p, p+q)S(k) = ie(S(p) - S(p+q))} \tag{12.288}$$

或者等价的形式

$$q_{\mu}\Gamma^{\mu}(p, p+q) = S^{-1}(p+q) - S^{-1}(p). \tag{12.289}$$

注意上述关系左右两边应是计算到相同微扰论阶数的量.这些关系可以取无相互作用的顶角$\Gamma^{\mu} = \gamma^{\mu}$以及Green函数$S(p) = (\gamma^{\mu}p_{\nu} - m)^{-1}$直接验证.进一步,对公

式12.288两边乘上$ie\gamma^\nu$再取迹并对p积分可得

$$q_\mu(ie)^2\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{Tr}\gamma^\nu S(p+q)\Gamma^\mu(p,p+q)S(p)=(ie)^2\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{Tr}\gamma^\nu(S(p)-S(p+q)). \tag{12.290}$$

方程左边可以用极化函数$\Pi^{\mu\nu}(q)$化简为$-iq_\mu\Pi^{\mu\nu}(q)$,而方程右边是

$$(ie)^2\mathrm{Tr}\gamma^\nu\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}(S(p)-S(p+q)) \tag{12.291}$$

在对$S(p+q)$积分时,我们总是可以移动变量$p\to p-q$,这样对$S(p+q)$积分就与$S(p)$的积分抵消,因此有[16]

$$\boxed{q_\mu\Pi^{\mu\nu}(q)=0} \tag{12.292}$$

另一方面,通过线性线性响应理论,我们知道电流密度的傅里叶变换正比于(经典)电磁场,即

$$\int d^4xe^{iqx}e\langle J^\mu(x)\rangle=e\langle J^\mu(q)\rangle=\Pi^{\mu\nu}(q)A_\nu(q) \tag{12.293}$$

这样有

$$q_\mu\langle J^\mu(q)\rangle=\frac{i}{-e}i\overbrace{q_\mu\Pi^{\mu\nu}(q)}^{=0}A_\nu(q)=0 \tag{12.294}$$

做傅里叶变换就是流守恒条件$\partial_\mu\langle J^\mu(x)\rangle=0$.

- Ward−Takahashi恒等式$\Leftrightarrow\partial_\mu J^\mu(x)=0$.

电子自能

图12.4(c)图表示动量为p的电子不断受到光子散射,其最低阶修正是(c)图右边的第二项:

$$\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}iS(p)(ie\gamma^\mu)iS(k+p)(ie\gamma^\nu)iS(p)iD_{\mu\nu}(k). \tag{12.295}$$

在微扰论的高阶图形中,有很多类似的结构,这样可以把它们做几何级数求和,相应的结果可以归结为电子的自能函数$\Sigma(p)$.这样精确的Green函数$S_{ext}(p)$可以用自能表示为

$$S_{ext}(p)=\frac{1}{S^{-1}(p)-\Sigma(p)}=\frac{1}{\gamma^\mu p_\mu-m-\Sigma(p)}. \tag{12.296}$$

在最低阶近似下($\mathcal{O}(e^2)$),自能由(c)图右边第二项去掉两边的Green函数来获得,也就是

$$-i\Sigma(p)=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}(ie\gamma^\mu)iS(k+p)(ie\gamma^\nu)iD_{\mu\nu}(k). \tag{12.297}$$

[16]回忆Coulomb电子气问题时我们计算了相应的极化函数,这说明那些极化函数也满足$q_\mu\Pi^{\mu\nu}(q)=0$.

代入$S(k+p)$和$D(k)$的具体形式可得(取Feynman规范$\xi=1$以简化计算)

$$\begin{aligned}
-i\Sigma(p) &= (ie)^2 i^2 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4}\gamma^\mu \frac{\gamma^\lambda(k+p)_\lambda + m}{(k+p)^2-m^2}\gamma^\nu \frac{-g_{\mu\nu}+(1-\xi)\hat{k}_\mu\hat{k}_\nu}{k^2} \\
&= -e^2\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4}\frac{\overbrace{\gamma^\mu\gamma^\lambda\gamma_\mu}^{=-2\gamma^\lambda}(k+p)_\lambda + m\overbrace{\gamma^\mu\gamma_\mu}^{=4}}{(k+p)^2-m^2}\frac{1}{k^2} \\
&= 2e^2\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4}\frac{\gamma^\lambda(k+p)_\lambda - 2m}{(k+p)^2-m^2}\frac{1}{k^2} \\
&= 2e^2\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4}\frac{\gamma^\lambda k_\lambda - 2m}{(k-p)^2(k^2-m^2)} \qquad (12.298)
\end{aligned}$$

上式中我们已经移动了积分变量$k\to k-p$.为了计算上述积分,特别是处理分母,我们引入Feynman参数化方法,例如

$$\frac{1}{AB}=\int_0^1 dx\frac{1}{[xA+(1-x)B]^2}=\int_0^1 dxdy\delta(x+y-1)\frac{1}{[xA+yB]^2} \qquad (12.299)$$

这样分母写成

$$\frac{1}{(k-p)^2(k^2-m^2)}=\int_0^1 dxdy\delta(x+y-1)\frac{1}{[x(k-p)^2+y(k^2-m^2)]^2} \qquad (12.300)$$

进一步设$k=l+xp$就可以去掉l和p的耦合项,此时分母为

$$\int_0^1 dx\frac{1}{[l^2-\Delta]^2},\qquad \Delta=-x(1-x)p^2+(1-x)m^2. \qquad (12.301)$$

注意到分子在$k=l+xp$的代换下成为$\gamma^\lambda(l_\lambda+xp_\lambda)-2m$,

$$-i\Sigma(p)=2e^2\int_0^1 dx\int\frac{d^4l}{(2\pi)^4}\frac{\gamma^\lambda(l_\lambda+xp_\lambda)-2m}{(l^2-\Delta)^2}=2e^2\int_0^1 dx(x\gamma^\lambda p_\lambda-2m)\int\frac{d^4l}{(2\pi)^4}\frac{1}{(l^2-\Delta)^2}.$$

现在我们需要计算对l的积分($l^\mu=(l^0,\vec{l})$),但直接计算有些复杂,更加有效的方式是先做Wick转动,也就是把l^0改写为il^0_E,空间分量不变$\vec{l}=\vec{l}_E$,$l^2=(l^0)^2-\vec{l}^2=-(l^0_E)^2-\vec{l}^2_E=-l^2_E$, 这样

$$\begin{aligned}
&\int\frac{d^4l}{(2\pi)^4}\frac{1}{(l^2-\Delta)^2}=\int\frac{dl^0d^3l}{(2\pi)^4}\frac{1}{(l^2-\Delta)^2}=\frac{i}{(-1)^2}\int\frac{dl^0_Ed^3l_E}{(2\pi)^4}\frac{1}{(l^2_E+\Delta)^2} \\
=\ &\frac{i(-1)^2}{(2\pi)^4}\overbrace{\int d\Omega_4}^{2\pi^2}\int_0^\infty dl_E\frac{l^3_E}{(l^2_E+\Delta)^2}=\frac{i}{8\pi^2}\int_0^\infty dl_E\frac{l^3_E}{(l^2_E+\Delta)^2} \qquad (12.302)
\end{aligned}$$

根据量纲分析,$\int_0^\infty dl_E\frac{l^3_E}{(l^2_E+\Delta)^2}\sim\int_0^\infty dl_E\frac{1}{l_E}\sim\ln\frac{\infty}{\sqrt{\Delta}}$, 因此该积分当积分变量趋于无穷大时出现对数发散.显然,这个发散源自光子动量k能够取任意大值.

事实上,在经典电磁理论中也有无限大出现.例如一个静止电子的电场是$\vec{E}=\frac{-e}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\vec{r}$,那么电子与其自身电场组成的系统的总能量是$W=mc^2+$

$\frac{\varepsilon_0}{2}\int d^3r\vec{E}^2$,其中

$$\frac{\varepsilon_0}{2}\int d^3r\vec{E}^2=\frac{e^2}{32\pi^2\varepsilon_0}\lim_{r_0\to 0}\int_{r_0}^{\infty}4\pi r^2dr\frac{1}{r^4}=\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\lim_{r_0\to\infty}\frac{1}{r_0}\to\infty. \quad (12.303)$$

由于电子和它的电场并不能分离开,因此我们认为实验上直接测量的是这个系统的总能量,即$W\equiv m_ec^2=mc^2+\infty$.这里$m_e$是测量到的电子质量而$m$ 是不考虑电场时的质量.为了让实验测量或者说物理上有意义的质量m_e有限,我们只能假定$m=-\infty$然后这个$-\infty$与电场能量的正∞抵消得到很小的电子质量$0.5Mev/c^2$.[17]在量子场论中,有各式各样的无穷大发散,整个场论的发展很大程度上就是和这些无穷大的不断斗争.

为了克服场论中的发散困难,我们需要采用所谓的正规化方法,也就是让发散行为变得可以理论处理.场论中有很多种正规化方案,例如

- Pauli-Villars正规化;
- 维度正规化;
- 晶格正规化,即晶格规范场论.

这里采用最简单最暴力的正规化方案,也就是硬动量截断正规化,其做法是设动量积分上限为一个有限但很大的值,记为Λ,则有

$$\int_0^{\Lambda}dl_E\frac{l_E^3}{(l_E^2+\Delta)^2}=\frac{1}{2}\int_0^{\Lambda^2}dl_E^2\frac{l_E^2+\Delta-\Delta}{(l_E^2+\Delta)^2}=\frac{1}{2}\ln\frac{\Lambda^2+\Delta}{\Delta}+\frac{\Delta}{2}\left(\frac{1}{\Lambda^2+\Delta}-\frac{1}{\Delta}\right)\simeq\frac{1}{2}\ln\frac{\Lambda^2}{\Delta} \quad (12.304)$$

那么自能可以写成

$$\begin{aligned}\Sigma(p) &= 2e^2\int_0^1dx(2m-x\gamma^\lambda p_\lambda)\frac{1}{(4\pi)^2}\ln\frac{\Lambda^2}{\Delta}\\ &= \frac{\alpha}{2\pi}\int_0^1dx(2m-x\gamma^\lambda p_\lambda)\ln\frac{\Lambda^2}{\Delta}\\ &= \frac{\alpha}{\pi}m\int_0^1dx\ln\frac{\Lambda^2}{\Delta}-\frac{\alpha}{2\pi}\gamma^\lambda p_\lambda\int_0^1dxx\ln\frac{\Lambda^2}{\Delta}\end{aligned} \quad (12.305)$$

$\alpha=e^2/(4\pi)\simeq 1/137$是精细结构常数.在低能下$\gamma^\lambda p_\lambda\simeq m$,则

$$\begin{aligned}\Sigma(m) &= \frac{\alpha}{2\pi}m\int_0^1dx(2-x)\ln\frac{\Lambda^2}{(1-x)^2m^2}\\ &= \frac{\alpha}{2\pi}m\ln\frac{\Lambda^2}{m^2}\int_0^1dx(2-x)-\frac{\alpha}{2\pi}2m\int_0^1dx(2-x)\ln(1-x)\\ &= \frac{3\alpha}{4\pi}m\ln\frac{\Lambda^2}{m^2}+\frac{5\alpha}{4\pi}m\end{aligned} \quad (12.306)$$

对比公式12.296可知这一项能够看成对电子质量的修正(忽略有限修正项的贡献):

$$m_e=m+\delta m=m\left(1+\frac{3\alpha}{4\pi}\ln\frac{\Lambda}{m}\right). \quad (12.307)$$

[17]两个无穷大抵消得到有限的小量,这就像魔法一样.

数学上,我们要取$\Lambda=\infty$,但在物理上,我们知道有一个基本动量/质量尺度,即普朗克质量$M_p=\frac{\hbar c}{G}\sim 2.2\times 10^{-8}kg$.通常认为在这个尺度以上量子引力效应必须计入,那么单纯的QED会失效,因此物理的动量截断$\Lambda\sim M_p$.那么m用电子质量代入有$\ln\frac{M_p}{m}\sim 23$,则对电子质量的修正只有0.04的量级.这样我们发现对数发散在QED中并不导致真正严重的困难.[18]

在QED中,类似经典电磁理论对电子质量发散的处理,我们认为所有对电子质量的修正都能够吸收到实验可观测/物理质量m_e的定义当中,只要我们坚持认为m_e是有限的,那么无论m或者δm发散都没有问题.这样,我们把自能在物理质量m_e附近展开

$$\Sigma(p)=\Sigma(m_e)+(\gamma^\mu p_\mu-m_e)\frac{d\Sigma(p)}{dp}|_{\gamma^\mu p_\mu=m_e}+... \tag{12.308}$$

这样精确的电子Green函数可以写成

$$S_{ext}(p)=\frac{1}{\gamma^\mu p_\mu-m-\Sigma(m_e)-(\gamma^\mu p_\mu-m_e)\frac{d\Sigma(p)}{dp}|_{\gamma^\mu p_\mu=m_e}}+... \tag{12.309}$$

若定义$m_e=m+\Sigma(m_e)$,

$$S_{ext}(p)=\frac{1}{(\gamma^\mu p_\mu-m_e)(1-\frac{d\Sigma(p)}{dp}|_{\gamma^\mu p_\mu=m_e})}+...=\frac{Z_2}{\gamma^\mu p_\mu-m_e}+... \tag{12.310}$$

这里定义了波函数重整化因子Z_2:

$$Z_2=\frac{1}{1-\frac{d\Sigma(p)}{dp}|_{\gamma^\mu p_\mu=m_e}}. \tag{12.311}$$

物理上,波函数重整化因子告诉我们当考虑电子与虚光子的的相互作用后,自由电子的权重降低,但总体上还可以看成近自由的电子.

光子自能与真空极化

现在,我们讨论(d)图.这可以看成真空中涨落诱导的正反电子对(类似于固体物理中的电子空穴对)对光子传递的相互作用的修正,特别是其中的单个圆圈代表最低阶的修正,即光子的极化函数:

$$i\Pi^{\mu\nu}(q)=-\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{Tr}\left(ie\gamma^\mu iS(k+q)ie\gamma^\nu iS(k)\right) \tag{12.312}$$

我们知道$q_\mu\Pi^{\mu\nu}=0$,那么$\Pi^{\mu\nu}$应具有如下形式:

$$\Pi^{\mu\nu}(q)=(q^2g^{\mu\nu}-q^\mu q^\nu)\Pi(q^2) \tag{12.313}$$

这样光子的精确Green函数能够写成

$$iD^{ext}_{\mu\nu}(q)=iD_{\mu\nu}(q)+iD_{\mu\rho}(q)i\Pi^{\rho\sigma}(q)iD_{\sigma\nu}(q)+...=\frac{-i(g_{\mu\nu}-q_\mu q_\nu/q^2)}{q^2(1-\Pi(q^2))}+\frac{-i}{q^2}\frac{q_\mu q_\nu}{q^2}. \tag{12.314}$$

[18]对数发散也许是物理中最好处理的发散,而自然选择这种发散也是有趣的事.

在物理量的计算中,由于Ward恒等式,我们总是可以扔掉$q_\mu q_\nu/q^2$这个因子,因此精确的光子Green函数可以简化为

$$iD^{ext}_{\mu\nu}(q)=\frac{-ig_{\mu\nu}}{q^2(1-\Pi(q^2))}. \tag{12.315}$$

与电子自能函数计算类似,通过Feynman参数和Wick转动,最低阶的极化函数,即公式可化成如下形式:

$$i\Pi^{\mu\nu}(q)=-4ie^2\int_0^1 dx\int\frac{d^4l_E}{(2\pi)^4}\frac{\frac{1}{2}g^{\mu\nu}l_E^2-2x(1-x)q^\mu q^\nu+g^{\mu\nu}(m^2+x(1-x)q^2)}{(l_E^2+\Delta)^2} \tag{12.316}$$

这里$\Delta=m^2-x(1-x)q^2$.自然,这个积分也是对数发散,需要采用正规化的操作.这里,我们采用't Hooft和Veltman提出的维度正规化技术.简单来说,维度正规化说的是假设我们把所考虑的系统放在d维时空,例如原先四维时空的积分成为d维积分:

$$\int\frac{d^dl_E}{(2\pi)^d}\frac{1}{(l_E^2+\Delta)^2}=\int\frac{d\Omega_d}{(2\pi)^d}\int_0^\infty dl_E\frac{l_E^{d-1}}{(l_E^2+\Delta)^2} \tag{12.317}$$

这里$\int\Omega_d$是单位球的表面积,其取值为$\frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$.[19]对于剩下的积分,我们可以把它表示成欧拉的B函数,

$$\int_0^\infty dl_E\frac{l_E^{d-1}}{(l_E^2+\Delta)^2}=\frac{1}{2}\int_0^\infty dl_E^2\frac{(l_E^2)^{d/2-1}}{(l_E^2+\Delta)^2}=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\Delta}\right)^{2-d/2}\overbrace{\int_0^1 dx x^{1-d/2}(1-x)^{d/2-1}}^{B(2-d/2,d/2)=\frac{\Gamma(2-d/2)\Gamma(d/2)}{\Gamma(2)}}. \tag{12.318}$$

因此,d维时空的积分是

$$\boxed{\int\frac{d^dl_E}{(2\pi)^d}\frac{1}{(l_E^2+\Delta)^2}=\frac{1}{(4\pi)^{d/2}}\frac{\Gamma(2-d/2)}{\Gamma(2)}\left(\frac{1}{\Delta}\right)^{2-d/2}} \tag{12.319}$$

注意到Γ函数的极点是所有的负整数和零,这说明$d=4$是$\Gamma(2-d/2)$的极点,因此我们可以在该极点附近展开,$(4-d=\epsilon)$

$$\Gamma(2-d/2)=\Gamma(\epsilon/2)=\frac{2}{\epsilon}-\gamma+\mathcal{O}(\epsilon),\qquad \gamma\simeq 0.5772 \tag{12.320}$$

由此我们得到$d\to 4$时的积分为

$$\int\frac{d^dl_E}{(2\pi)^d}\frac{1}{(l_E^2+\Delta)^2}=\frac{1}{(4\pi)^2}\left(\frac{2}{\epsilon}-\gamma-\ln\Delta+\ln 4\pi+\mathcal{O}(\epsilon)\right). \tag{12.321}$$

利用上述结果,我们发现

$$i\Pi^{\mu\nu}(q)=(q^2g^{\mu\nu}-q^\mu q^\nu)i\Pi(q^2),\quad \Pi(q^2)=\frac{-8e^2}{(4\pi)^{d/2}}\int_0^1 dx x(1-x)\frac{\Gamma(2-d/2)}{\Delta^{2-d/2}}. \tag{12.322}$$

[19] $(\sqrt{\pi})^d=(\int dxe^{-x^2})^d=\int d^dxe^{-\sum_{j=1}^d x_j^2}=\int\Omega_d\int_0^\infty dxx^{d-1}e^{-x^2}=\int\Omega_d\frac{1}{2}\int_0^\infty dx^2(x^2)^{\frac{d}{2}-1}e^{-x^2}=\int\Omega_d\frac{1}{2}\Gamma(d/2)$.

这个结果的一个有趣应用是讨论量子反常.比如一维无质量Dirac费米子的量子电动力学中电磁场的极化函数是

$$i\Pi^{\mu\nu}(q)=(q^2g^{\mu\nu}-q^\mu q^\nu)i\frac{-2e^2}{4\pi}\overbrace{\mathrm{Tr}[1]}^{=2}\int_0^1 dxx(1-x)\frac{1}{-x(1-x)q^2}. \quad (12.323)$$

即有

$$\Pi^{\mu\nu}(q)=(q^2g^{\mu\nu}-q^\mu q^\nu)\overbrace{\frac{e^2}{\pi}\frac{1}{q^2}}^{\Pi(q^2)}. \quad (12.324)$$

Schwinger证明过上述结果对一维量子电动力学是精确的.由此把这一项计入光子Green函数就得到精确的光子Green函数:

$$iD^{ext}_{\mu\nu}(q)=\frac{-ig_{\mu\nu}}{q^2(1-\frac{e^2}{\pi}\frac{1}{q^2})}=\frac{-ig_{\mu\nu}}{q^2-\frac{e^2}{\pi}}. \quad (12.325)$$

如果把e^2/π解释为质量,那么$1+1$维时空的光子通过真空中电子−空穴对激发的涨落而获得质量.

由于$1+1$维时空中$\gamma^\mu\gamma^5=-\epsilon^{\mu\nu}\gamma_\nu$,因此流密度$J^\mu(x)=\bar\psi(x)\gamma^\mu\psi(x)$和轴矢流密度$J^{\mu5}(x)=\bar\psi(x)\gamma^\mu\gamma^5\psi(x)$的真空期望值有如下关系$\langle J^{\mu5}(x)\rangle=-\epsilon^{\mu\nu}\langle J_\nu(x)\rangle$,在动量空间则有

$$\langle J^{\mu5}(q)\rangle=-\epsilon^{\mu\nu}\langle J_\nu(q)\rangle=-\epsilon^{\mu\nu}\frac{1}{e}\Pi^{\nu\lambda}(q)A_\lambda(q)=-\epsilon^{\mu\nu}\frac{e}{\pi}\left(A_\nu(q)-\frac{q_\nu q^\lambda}{q^2}A_\lambda(q)\right) \quad (12.326)$$

这里我们利用了流密度与经典电磁场之间的线性响应关系$e\langle J_\mu(q)\rangle=\Pi^{\mu\nu}(q)A_\nu(q)$.这样

$$q_\mu\langle J^{\mu5}(q)\rangle=-\frac{e}{\pi}\left(\epsilon^{\mu\nu}q_\mu A_\nu(q)-\frac{\overbrace{\epsilon^{\mu\nu}q_\mu q_\nu}^{=0}q^\lambda}{q^2}A_\lambda(q)\right)=-\frac{e}{\pi}\epsilon^{\mu\nu}q_\mu A_\nu(q). \quad (12.327)$$

这个结果做傅里叶变换就得到

$$\partial_\mu\langle J^{\mu5}\rangle=-\frac{e}{2\pi}\epsilon^{\mu\nu}F_{\mu\nu}. \quad (12.328)$$

这说明原本守恒的轴矢流($m=0$时用拉格朗日方程可证明$\partial_\mu J^{\mu5}=0$)在与外加电磁场耦合后由于量子涨落变得不再守恒,这就是量子反常.对于$3+1$维时空也有量子反常,其结果是$\partial_\mu\langle J^{\mu5}\rangle=-\frac{e^2}{16\pi^2}\epsilon^{\mu\nu\rho\lambda}F_{\mu\nu}F_{\rho\lambda}$, 这称为Adler-Bell-Jackiw(ABJ)反常.

让我们回到光子精确Green函数

$$iD^{ext}_{\mu\nu}(q)=\frac{-ig_{\mu\nu}}{q^2(1-\Pi(q^2))} \quad (12.329)$$

若$q^2 \to 0$时$\Pi(q^2)$是非奇异的(解析的),那么上式表明$q^2 = 0$总是光子Green函数的单极点,(把$D^{ext}_{\mu\nu}(q)$看成以q为变量的复变函数)物理上这说明光子总是无质量的.这样这个极点对应的留数是

$$Z_3 = \frac{1}{1-\Pi(0)}. \tag{12.330}$$

这样

$$iD^{ext}_{\mu\nu}(q) = \frac{-ig_{\mu\nu}}{q^2(1-\Pi(0)+\Pi(0)-\Pi(q^2))} = \frac{-iZ_3 g_{\mu\nu}}{q^2}\frac{1}{1+\frac{\Pi(0)-\Pi(q^2)}{1-\Pi(0)}} \simeq \frac{-iZ_3 g_{\mu\nu}}{q^2}\frac{1}{1-(\Pi(q^2)-\Pi(0))} \tag{12.331}$$

这样在低阶近似下有(利用公式12.322)

$$\tilde{\Pi}(q^2) = \Pi(q^2) - \Pi(0) = \frac{-2\alpha}{\pi}\int_0^1 dx x(1-x)\ln\frac{m^2}{m^2 - x(1-x)q^2}. \tag{12.332}$$

如果我们考虑两个电子之间的Coulomb散射,那么在非相对论极限下$-D^{ext}_{\mu\nu}(q)$对应如下相互作用势:

$$V(\vec{q}) = \frac{Z_3 e^2}{\vec{q}^2}\frac{1}{1-\tilde{\Pi}(\vec{q}^2)} \tag{12.333}$$

显然,我们需要把$Z_3 e^2$定义为电子的物理电荷e^2_{phy},这就是电荷重整化.利用公式12.322我们可以直接计物理电荷e^2_{phy}:

$$e^2_{phy} = Z_3 e^2 = \frac{e^2}{1-\Pi(0)} \simeq \frac{e^2}{1+\frac{e^2}{6\pi^2\epsilon}} \tag{12.334}$$

在四维时空$\epsilon \to 0$因而e^2_{phy}字面上是发散的.不过与先前讨论电子的质量重整化一样,我们要求物理电荷是实验测量值,而$\epsilon \to 0$的发散与不可观测的电荷e^2抵消.这样在下面的讨论中电荷都是指物理电荷.

让我们进一步讨论$V(\vec{q})$分母部分$1-\tilde{\Pi}(\vec{q}^2)$,这代表真空极化对Coulomb势$1/\vec{q}^2$的量子修正.对$V(\vec{q})$做傅里叶变换并设$\vec{q}^2 << m^2$有

$$V(\vec{x}) \simeq \frac{\alpha}{r} + \frac{4\alpha^2}{15m^2}\delta(\vec{x}). \tag{12.335}$$

在氢原子中,这个修正后的Coulomb势能够导致氢原子s态能级的移动:

$$\Delta E = -\int d^3x|\psi(x)|^2\frac{4\alpha^2}{15m^2}\delta(\vec{x}) = -\frac{4\alpha^2}{15m^2}|\psi(0)|^2. \tag{12.336}$$

对于$2s$态有$\Delta E = -\frac{\alpha^5 m}{30\pi} = -1.123\times 10^{-7}eV$.这就是著名的氢原子能级Lamb移动现象.

顶角修正与电子反常磁矩

最后让我们来看顶角修正的物理结果.在QED中,由Lorentz不变性和Ward恒等式的分析能够得到$\Gamma^\mu(p,p+q)$的一般形式:

$$\Gamma^\mu(p,p+q) = \gamma^\mu F_1(q^2) + \frac{i\sigma^{\mu\nu}q_\nu}{2m}F_2(q^2) \tag{12.337}$$

这里$i\sigma^{\mu\nu}=-\frac{1}{2}[\gamma^\mu,\gamma^\nu]$.对电子有$F_1(0)=1$,而$F_2(0)$给出Lande因子$g$的修正,即$g-2=2F_2(0)$.历史上,Schwinger最早考虑了图12.4(b)右边第二项,也就是对顶角的最低阶修正:

$$ie\delta\Gamma^\mu(p,p+q)=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}ie\gamma^\nu iS(k)ie\gamma^\mu iS(k+q)ie\gamma^\lambda iD_{\nu\lambda}(p-k) \quad (12.338)$$

其具体形式是

$$\delta\Gamma^\mu(p,p+q)=(ie)^2i^3\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\gamma^\nu\frac{\gamma^\rho k_\rho+m}{k^2-m^2}\gamma^\mu\frac{\gamma^\sigma(k+q)_\sigma+m}{(k+q)^2-m^2}\frac{-\gamma_\nu}{(p-k)^2}. \quad (12.339)$$

化简γ矩阵并利用Feynman参数化和正规化方案可得如下形式

$$\frac{\alpha}{2\pi}\int dxdydz\delta(x+y+z-1)\left(\gamma^\mu\left[\ln\frac{z\Lambda^2}{\Delta}+\frac{(1-x)(1-y)q^2+(1-4z+z^2)m^2}{\Delta}\right]+\frac{i\sigma^{\mu\nu}q_\nu}{2m}\frac{2m^2z(1-z)}{\Delta}\right) \quad (12.340)$$

这里$\Delta=-xyq^2+(1-z)^2m^2$.对比顶角函数的一般形式可知

$$F_2(q^2)=\frac{\alpha}{2\pi}\int dxdydz\delta(x+y+z-1)\frac{2m^2z(1-z)}{-xyq^2+(1-z)^2m^2} \quad (12.341)$$

这样$F_2(0)$是

$$F_2(0)=\frac{\alpha}{2\pi}\int dxdydz\delta(x+y+z-1)\frac{2m^2z(1-z)}{(1-z)^2m^2}=\frac{\alpha}{2\pi}\int_0^1dz\int_0^{1-z}dy\frac{2z}{1-z}=\frac{\alpha}{2\pi}. \quad (12.342)$$

这样我们就得到了电子反常磁矩的最低阶修正$g-2=2F_2(0)\simeq\frac{\alpha}{\pi}=0.00232$.这个结果与当时的实验值0.00236(6)符合很好.

- 历史上,人们利用Feynman图形方法成功地研究了QED,解释了氢原子能级的Lamb移动和电子的反常磁矩现象,[20]这使QED成为有史以来最精确的物理理论.

推广的电动力学:走马观花Yang-Mills非阿贝尔规范场*

$SU(N)$规范理论*

$SU(2)$的例子

在QED中,物质场在局域相位变换下的不变性导致了其与$U(1)$规范场(电磁场)的耦合.历史上,杨振宁与Mills把局域相位不变性推广到非阿贝尔的情况,得到了非阿贝尔规范场理论.

[20]具体计算和讨论参照Peskin 书$184-198$ 和$244-256$页.

让我们考虑一个简单的情况,例如有两种不同的Dirac费米子,记为ψ_1,ψ_2,系统的拉格朗日量为

$$\mathcal{L}=\bar{\psi}_1(i\gamma^\mu\partial_\mu-m_1)\psi_1+\bar{\psi}_2(i\gamma^\mu\partial_\mu-m_2)\psi_2 \tag{12.343}$$

现在引入一个双重态的Dirac旋量,即

$$\Psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \tag{12.344}$$

这样系统可写成更为紧凑的形式,即

$$\mathcal{L}=\begin{pmatrix}\bar{\psi}_1 & \bar{\psi}_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}i\gamma^\mu\partial_\mu-m_1 & 0\\ 0 & i\gamma^\mu\partial_\mu-m_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\bar{\Psi}[(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)I-\delta m\tau^z]\Psi \tag{12.345}$$

这里I是2×2的单位矩阵,τ^x,τ^y,τ^z是作用在Ψ所在旋量空间的Pauli矩阵.$m=(m_1+m_2)/2,\delta m=(m_1-m_2)/2$.可以看到,当$\delta m=0$也就是Dirac费米子质量相同时,任意$2\times2$幺正矩阵$U$(由于$\Psi$是复数值的场,因此采用幺正矩阵而非更为熟悉的正交矩阵)都使得上述形式不变,即

$$\mathcal{L}=\bar{\Psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\Psi=\overbrace{\bar{\Psi}U^{-1}}^{\bar{\Psi}'}U(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)U^{-1}\overbrace{U\Psi}^{\Psi'}=\bar{\Psi}'(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\Psi' \tag{12.346}$$

在Yang-Mills的原始考虑中,ψ_1,ψ_2分别代表质子和中子.Ψ把质子与中子统一在一起,类似于非相对论量子力学中把电子自旋上态与下态写在一起,因此也称为同位旋(isotopic spin).[21]这样U就代表同位旋空间中的转动,一般称为$SU(2)$转动.所有这些转动构成一个群,即$SU(2)$ 群.若系统在$SU(2)$转动下不变则称系统具有$SU(2)$对称性或不变性.当然,由于质子和中子质量并不相等,因此同位旋对称性是破缺的.

每一个转动U可以用三个实参数$\theta^x,\theta^y,\theta^z$以及三个Pauli矩阵表示为($\theta=\theta^a\frac{\tau^a}{2}$)

$$U=e^{i\theta}=e^{i\theta^a\frac{\tau^a}{2}}=e^{\frac{i}{2}(\theta^x\tau^x+\theta^y\tau^y+\theta^z\tau^z)} \tag{12.347}$$

例如$\theta^x=\theta^y=0$,则有

$$U=e^{i\frac{\theta^z}{2}\tau^z}=\sum_{n=0}^{\infty}\left(i\frac{\theta^z}{2}\tau^z\right)^n=I+i\frac{\theta^z}{2}\tau^z-\frac{(\theta^z)^2}{2^2}I-i\frac{(\theta^z)^3}{2^3}\tau^z+...=I\cos\frac{\theta^z}{2}+i\tau^z\sin\frac{\theta^z}{2}. \tag{12.348}$$

然后,仿照QED,把整体的$SU(2)$不变性提升为局域不变性,也就是让θ成为时空位置的函数,即$U=U(x)=U(\theta(x))$.这样每个空间位置的场$\Psi(x)$被转动为$\Psi'(x)=U(x)\Psi(x)$,此时系统的拉格朗日量变为

$$\mathcal{L}=\bar{\Psi}U^{-1}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)(U\Psi)=\bar{\Psi}U^{-1}(iU\gamma^\mu\partial_\mu+i\gamma^\mu\partial_\mu U-Um)\Psi=\bar{\Psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu+i\gamma^\mu U^{-1}\partial_\mu U-m)\Psi. \tag{12.349}$$

[21]Heisenberg最早提出了同位旋的概念

我们发现多出了$\bar{\Psi}(i\gamma^\mu U^{-1}\partial_\mu U)\Psi$.为了消除这一项,我们可以通过最小耦合引入与$U$所对应矩阵同阶的规范场,这里就是所谓的$SU(2)$规范场$A_\mu = A_\mu^a \frac{\tau^a}{2}$,

$$\boxed{\partial_\mu \to D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu^a \frac{\tau^a}{2}} \tag{12.350}$$

这里$A_\mu^a \tau^a = A_\mu^x \tau^x + A_\mu^y \tau^y + A_\mu^z \tau^z$是$2\times 2$矩阵,具体形式为

$$A_\mu^a \tau^a = \begin{pmatrix} A_\mu^z & A_\mu^x - iA_\mu^y \\ A_\mu^x + iA_\mu^y & -A_\mu^z \end{pmatrix} \tag{12.351}$$

g是规范场与物质场Ψ的耦合系数.此时系统可以写成

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu + g\gamma^\mu A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} - m)\Psi = \bar{\Psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\Psi.. \tag{12.352}$$

重新做$SU(2)$版本的相位变换$\Psi(x) \to U(x)\Psi(x)$有

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu + g\gamma^\mu U^{-1} A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} U + i\gamma^\mu U^{-1}\partial_\mu U - m)\Psi. \tag{12.353}$$

现在规范场如何做规范变换呢？由于U是$\theta^a\tau^a$的指数形式而不利于计算,我们考虑无穷小变换,也就是设$\theta^a \to 0$,这样就可以展开指数得到$U = 1 + \frac{i}{2}\theta^a\tau^a$,

$$i\gamma^\mu U^{-1}\partial_\mu U = i\gamma^\mu \left(1 - \frac{i}{2}\theta^a\tau^a\right)\partial_\mu \left(1 + \frac{i}{2}\theta^a\tau^a\right) = -\gamma^\mu \partial_\mu \theta^a \frac{\tau^a}{2} + O(\theta^2) \tag{12.354}$$

$$g\gamma^\mu U^{-1} A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} U = g\gamma^\mu \left(1 - \frac{i}{2}\theta^b\tau^b\right) A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} \left(1 + \frac{i}{2}\theta^c\tau^c\right) = g\gamma^\mu \left(A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} + \frac{i}{4} A_\mu^a \theta^b [\tau^a, \tau^b] + \mathcal{O}(\theta^2)\right) \tag{12.355}$$

只要令

$$A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} \to A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} + \frac{1}{g}\partial_\mu \theta^a \frac{\tau^a}{2} - \frac{i}{4} A_\mu^a \theta^b [\tau^a, \tau^b] \tag{12.356}$$

就抵消了拉式量中的$-\gamma^\mu \frac{1}{2}\partial_\mu \theta^a \tau^a$以及$g\gamma^\mu U^{-1} A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} U$中的对易部分.注意到Pauli矩阵间的对易关系$[\tau^a, \tau^b] = 2i\epsilon^{abc}\tau^c$,则

$$A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} \to A_\mu^a \frac{\tau^a}{2} + \frac{1}{g}\partial_\mu \theta^a \frac{\tau^a}{2} + \epsilon^{abc} A_\mu^a \theta^b \frac{\tau^c}{2} \tag{12.357}$$

上述变换关系也可以简写成矢量形式,即$A_\mu \to A_\mu + \frac{1}{g}\partial_\mu \theta + A_\mu \times \theta$.当然,与电磁场不同,$SU(2)$规范场变换时多出了$A_\mu \times \theta$.

现在,我们把物质场与规范场进行了耦合,系统还缺少规范场本身的动力学,仿照电磁场,我们定义$SU(2)$规范场的场强[22]

$$\boxed{F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig[A_\mu, A_\nu] = \partial_\mu A_\nu^a \frac{\tau^a}{2} - \partial_\nu A_\mu^b \frac{\tau^b}{2} - i\frac{g}{4} A_\mu^a A_\nu^b [\tau^a, \tau^b]} \tag{12.358}$$

[22]历史上杨振宁和Mills通过不断尝试才得到这个正确的形式

由于$SU(2)$规范场是矩阵形式的场,彼此并不对易,所以上式中引入了规范场之间的对易关系.场强可写成

$$F_{\mu\nu}=F^a_{\mu\nu}\frac{\tau^a}{2},\quad F^a_{\mu\nu}=\partial_\mu A^a_\nu-\partial_\nu A^a_\mu+g\epsilon^{abc}A^b_\mu A^c_\nu \tag{12.359}$$

这样我们就得到了完整的$SU(2)$规范理论拉式量:

$$\mathcal{L}=\bar{\Psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu+g\gamma^\mu A^a_\mu\frac{\tau^a}{2}-m)\Psi-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}. \tag{12.360}$$

这里

$$\boxed{\mathcal{L}_{YM}=-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}=-\frac{1}{8}F^a_{\mu\nu}F^{\mu\nu,b}\overbrace{\mathrm{Tr}\tau^a\tau^b}^{2\delta^{ab}}=-\frac{1}{4}F^a_{\mu\nu}F^{\mu\nu,a}.} \tag{12.361}$$

是纯Yang-Mill规范场部分.与电磁场不同,$F^a_{\mu\nu}$包含A^2项,这样$\mathcal{L}_{YM}$中包含场的自相互作用项$A^aA^b\partial A^c$和$A^aA^bA^cA^d$.

- 纯Yang-Mill规范场是一个相互作用的场论模型.

$SU(N)$的例子

进一步,我们可以考虑更复杂的转动操作,例如$SO(3),SU(3)$.注意到这些操作都是非阿贝尔的,(彼此之间不对易)因此它们升级为局域对称性之后引入的规范场都类似$SU(2)$ 规范理论的情况.一般统称为Yang-Mills非阿贝尔规范场理论.例如,我们考虑N种质量相同的Dirac费米子,那么可以写出N分量的旋量:

$$\Psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ ...\\ ...\\ \psi_N\end{pmatrix},\quad \bar{\Psi}=\begin{pmatrix}\bar{\psi}_1 & \bar{\psi}_2 & .. & ... & \bar{\psi}_N\end{pmatrix} \tag{12.362}$$

这样Dirac费米子部分的拉式量是

$$\mathcal{L}_{Dirac}=\bar{\Psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu-m)\Psi \tag{12.363}$$

注意到每个Dirac费米子都用复场描述,因此N维旋量Ψ的转动需要用$SU(N)$矩阵描述.相应的转动用N^2-1维参数$\theta=(\theta^1,\theta^2...\theta^{N^2-1})$和$SU(N)$群的$N^2-1$个生成元$T=(T^1,T^2...T^{N^2-1})$产生:[23]

$$U=e^{i\theta T}=e^{i\theta^aT^a}. \tag{12.364}$$

[23]如果考虑的是实标量场则需要采用$SO(N)$群,其生成元个数是$N(N-1)/2$.

当θ是时空坐标的函数时,U代表$SU(N)$规范变换.为了使系统拉格朗日量在$SU(N)$规范变换下不变,我们需要引入$N\times N$的$SU(N)$规范场$B_\mu = B_\mu^a T^a$,这个规范场有N^2-1个分量.通过把普通时空导数改为协变导数有

$$\partial_\mu \to D_\mu = \partial_\mu - igB_\mu^a T^a \tag{12.365}$$

而相应的场强是

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu B_\nu - \partial_\nu B_\mu - ig[B_\mu, B_\nu] = \partial_\mu B_\nu^a T^a - \partial_\nu B_\mu^a T^a - igB_\mu^a B_\nu^b [T^a, T^b] \tag{12.366}$$

注意到$SU(N)$群的生成元T^a满足对易关系$[T^a, T^b] = if^{abc}T^c$,f^{abc}称为结构常数,是一些确定的常数.一般我们要求f^{abc}具有ϵ^{abc}的全反对称性.这样场强写成$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu B_\nu^a - \partial_\nu B_\mu^a + gf^{abc}B_\mu^b B_\nu^c$, 那么整个系统的拉式量是[24]

$$\mathcal{L}_{SU(N)} = \bar\Psi(i\gamma^\mu D_\mu - m)\Psi - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = \bar\Psi(i\gamma^\mu\partial_\mu + g\gamma^\mu B_\mu^a T^a - m)\Psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu,a}. \tag{12.367}$$

现在利用拉格朗日方程可得费米子和规范场的经典方程:

$$\frac{\partial\mathcal{L}_{SU(N)}}{\partial\bar\Psi} = 0 \Rightarrow (i\gamma^\mu\partial_\mu + g\gamma^\mu B_\mu^a T^a - m)\Psi = 0 \tag{12.368}$$

这是一个广义的Dirac方程,其可以具体写成N个耦合的常规Dirac方程.对规范场我们用$\delta\mathcal{L}=0$的定义:

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L} &= g\bar\Psi\gamma^\nu T^a\Psi\delta B_\nu^a - \frac{1}{2}\delta F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu,a} \\
&= g\bar\Psi\gamma^\nu T^a\Psi\delta B_\nu^a - \frac{1}{2}(-\partial_\mu F^{\mu\nu,a}\delta B_\nu^a + \partial_\nu F^{\mu\nu,a}\delta B_\mu^a + gf^{abc}F^{\mu\nu,a}(B_\nu^c\delta B_\mu^b + B_\mu^b\delta B_\nu^c)) \\
&= g\bar\Psi\gamma^\nu T^a\Psi\delta B_\nu^a - \frac{1}{2}(-2\partial_\mu F^{\mu\nu,a}\delta B_\nu^a + 2gf^{abc}F^{\mu\nu,a}B_\nu^c\delta B_\mu^b) \\
&= g\bar\Psi\gamma^\nu T^a\Psi\delta B_\nu^a + \partial_\mu F^{\mu\nu,a}\delta B_\nu^a + gf^{abc}F^{\nu\mu,a}B_\nu^c\delta B_\mu^b \\
&= g\bar\Psi\gamma^\nu T^a\Psi\delta B_\nu^a + \partial_\mu F^{\mu\nu,a}\delta B_\nu^a + gf^{abc}B_\nu^b F^{\nu\mu,c}\delta B_\mu^a.
\end{aligned} \tag{12.369}$$

令$\delta\mathcal{L}=0$得到

$$\partial_\mu F^{\mu\nu,a} + gf^{abc}B_\mu^b F^{\mu\nu,c} = -gJ^{\nu,a} \tag{12.370}$$

这就是规范场的场方程.$J^{\mu,a} = \bar\Psi\gamma^\nu T^a\Psi$是规范场$a$分量所对应的费米子流密度.与电磁场不同,当不存在物质时,非阿贝尔规范场有自相互作用,这说明非阿贝尔规范场是自身场的源.

- 在凝聚态物理中,高温超导,量子自旋液体以及分数量子霍尔效应等强关联现象能用非阿贝尔规范场理论进行统一描述.

[24]这里我们选取归一化使得$\mathrm{Tr}T^aT^b = \frac{1}{2}\delta^{ab}$

渐进自由与禁闭*

让我们进一步讨论非阿贝尔规范理论.与QED相比,非阿贝尔规范理论的一大特点是存在渐近自由(asymptotic freedom)现象.简单来说,渐近自由是指系统的相互作用参数g会随着能量尺度的升高而逐渐降低,也就说当我们探测非阿贝尔规范理论的高能行为时相互作用会变得比较小而使微扰理论计算能够得到可靠的结果.历史上David Gross,David Politzer和Frank Wilczek最早发现渐近自由现象,他们三人也因此获得2004年诺贝尔物理学奖.

让我们考虑具有N_f个费米子的$SU(N)$规范理论:

$$\mathcal{L}=\sum_{k=1}^{N_f}\bar{\Psi}_k(i\gamma^\mu\partial_\mu+g\gamma^\mu B_\mu^a T^a-m)\Psi_k-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu,a}. \tag{12.371}$$

为了得到g随着能量尺度的变化情况,我们首先需要量子化$SU(N)$规范理论.标准的方法是利用路径积分形式并采用Faddeev-Popov方案,[25]其结果是系统的拉式量会多出QED中的规范固定项以及非阿贝尔规范场特有的反对易的标量费米子场,这个虚拟的费米场也称为Faddeev-Popov鬼场:

$$\mathcal{L}=\sum_{k=1}^{N_f}\bar{\Psi}_k(i\gamma^\mu D_\mu-m_k)\Psi_k-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu,a}-\frac{1}{2\xi}(\partial^\mu B_\mu^a)^2+\bar{C}^a\partial^\mu D_\mu^{ab}C^b. \tag{12.372}$$

这里C是Faddeev-Popov鬼场,$D_\mu^{ab}=\delta^{ab}\partial_\mu-gf^{abc}B_\mu^c$.

接下来通过直接计算所有单圈Feynman图就能够得到$SU(N)$规范理论的β函数:[26]

$$\frac{dg}{d\ln\Lambda}=\beta(g)=-\frac{g^3}{(4\pi)^2}\left(\frac{11}{3}N-\frac{2}{3}N_f\right) \tag{12.373}$$

这里Λ可以看作是动量截断值或者感兴趣的能量区间.注意到当N_f比较小时$\beta(g)<0$,这意味着随着动量截断值的不断提高,有效耦合常数$g(\Lambda)$不断减小,当Λ足够大时$g(\Lambda)$会足够小.物理上这说明高能时粒子之间通过规范场传递的相互作用会很小,也就是渐近自由.另一方面,如果我们不断减小Λ,那么$g(\Lambda)$反而会不断增大,这意味着低能下耦合常数会非常大,这意味着基于Feynman图形的微扰论处理将会失效.

取$N=3$也就是采用$SU(3)$规范理论就能用来构造描述强相互作用的量子色动力学(QCD)理论.在那里,B_μ^a描述传递强相互作用的规范粒子,也就是胶子,由于$SU(3)$群有$3^2-1=8$个生成元,这样我们有8种夸克.($a=1,2...8$)三行一列的旋量Ψ_k描述夸克,旋量的三个分量称为夸克的色自由度.因此$SU(3)$不变性就是在色空间转动的不变性.此外,不同的k代表不同的夸克(例如上和下夸克),这称为夸克的味自由度,m_k是不同夸克的质量.g是强相互作用的耦合常数.

- 旋量Ψ_k的分量个数=色(colour)自由度

[25]可以参考Peskin书16.2节

[26]例如Peskin书16.5节的讨论

- 不同旋量Ψ_k的总数=味(flavor)自由度

深度非弹性散射实验的结果与渐近自由现象符合,这确立了夸克模型与QCD的物理基础.另一方面,我们从未观测到自由夸克的事实说明夸克在强相互作用下只能形成束缚态,而这些束缚态就是质子,中子以及介子.这个现象就是夸克禁闭现象也称为色禁闭.如何从理论上完整理解色禁闭是留给21世界物理学的主要问题之一.

有趣的是,注意到$SU(N)$规范理论β函数与先前章节中讨论过的近藤杂质问题的Anderson标度方程$\frac{dg}{d\ln D}=-2g^2$,$g=J\rho_0$的相似性.我们知道这个标度方程在$D\to 0$的低能极限正确预言了体系流向强耦合,也就是$g=\infty$的不动点的事实.[27]因此,如果我们相信单圈图计算所得的QCDβ函数可以工作在强耦合,那么当$\Lambda\to 0$时系统也会到达强耦合不动点,这时夸克与胶子系统的物理由$g=\infty$不动点支配.此时我们需要非微扰技术来研究低能QCD的行为,这里面最有希望的是Wilson所建立的晶格规范场论(lattice gauge field).[28]在强耦合时,晶格规范场预言粒子之间存在随距离线性增加的相互作用势,这说明夸克之间不能远离,只能束缚在很小的区域中而以束缚态的形式存在,这样晶格规范场就给出了色禁闭的可能.

对称破缺与质量产生*

在先前Landau相变理论的讨论中,我们知道随着温度降低,物质系统可以发生自发的对称性破缺,这种破缺使得低温相相比于高温相具有更低的对称性.进一步,我们发现与电磁场耦合的复序参量场发生对称性破缺会导致电磁场获得能隙/质量而序参量场自身具有质量.这种通过对称性破缺获得质量的方式就是著名的Anderson-Higgs机制.这种一部分,我们将讨论非阿贝尔规范场论中的Anderson-Higgs机制.

- 结合$SU(2),U(1)$规范理论以及Anderon-Higgs机制,Sheldon Glashow,Abdus Salam和Steven Weinberg成功建立了描述弱相互作用与电磁相互作用的弱电统一模型.($SU(2)\otimes U(1)$)他们因此荣获1979年诺贝尔物理学奖.

$SO(3)$模型

我们的出发点是具有$SO(3)$旋转不变性的模型:

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}\partial^\mu\vec{\Phi}\cdot\partial_\mu\vec{\Phi}-\frac{m^2}{2}\vec{\Phi}\cdot\vec{\Phi}-\frac{\lambda}{4}(\vec{\Phi}\cdot\vec{\Phi})^2 \tag{12.374}$$

这里$\vec{\Phi}$是具有三个实分量的矢量$\vec{\Phi}=(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)^T$.写成分量形式有

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}(\partial^\mu\Phi_1\partial_\mu\Phi_1+\partial^\mu\Phi_2\partial_\mu\Phi_2+\partial^\mu\Phi_3\partial_\mu\Phi_3)-\frac{m^2}{2}(\Phi_1^2+\Phi_2^2+\Phi_3^2)-\lambda(\Phi_1^2+\Phi_2^2+\Phi_3^2)^2 \tag{12.375}$$

[27]由Wilson发明的非微扰数值重整化群计算确认.

[28]后续章节会专门讨论晶格规范场

对于这个模型,$SO(3)$旋转不变性意味着$\mathcal{L}$在三维空间的矢量旋转下不变.如果转动角度$\vec{\theta}$足够小,那么转动操作相当于如下形式:

$$\vec{\Phi} \to \vec{\Phi}' = \vec{\Phi} - \vec{\theta} \times \vec{\Phi} \tag{12.376}$$

这样

$$\vec{\Phi}' \cdot \vec{\Phi}' = \vec{\Phi} \cdot \vec{\Phi} - 2\vec{\Phi} \cdot (\vec{\theta} \times \vec{\Phi}) + \mathcal{O}(\theta^2) \tag{12.377}$$

利用矢量计算的公式$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A})$有$\vec{\Phi} \cdot (\vec{\theta} \times \vec{\Phi}) = \vec{\theta} \cdot (\vec{\Phi} \times \vec{\Phi}) = 0$, 这样$\vec{\Phi}' \cdot \vec{\Phi}' = \vec{\Phi} \cdot \vec{\Phi}$.同理$\partial^\mu \vec{\Phi}' \cdot \partial_\mu \vec{\Phi}' = \partial^\mu \vec{\Phi} \cdot \partial_\mu \vec{\Phi}$, 因此系统具有$SO(3)$不变性.

由拉格朗日方程$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\Phi}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \vec{\Phi}} = 0$可得上述模型的运动方程是

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2 + \lambda \vec{\Phi}^2)\vec{\Phi} = 0 \tag{12.378}$$

当$m^2 > 0$时上述方程就是有自相互作用的Klein-Gordon方程.此时系统的基态是$\langle \vec{\Phi} \rangle = 0$的真空态.

另一方面,若$m^2 < 0$,那么系统的基态就会发生变化.假设$\vec{\Phi}$与时空坐标无关,那么系统的能量密度是

$$E = \frac{m^2}{2}\vec{\Phi} \cdot \vec{\Phi} + \frac{\lambda}{4}(\vec{\Phi} \cdot \vec{\Phi})^2 \tag{12.379}$$

$m^2 < 0$时$\vec{\Phi}$场的基态期望值$\langle \vec{\Phi} \rangle$应由能量最小原理确定,也就是满足$\partial E / \partial \vec{\Phi}^2 = 0$.我们发现非零解是

$$\vec{\Phi}^2 = \frac{-m^2}{\lambda} \tag{12.380}$$

这样我们看到$m^2 < 0$时$\vec{\Phi}$场的基态期望值非零.在实际系统中,由于各种扰动的影响,基态时的矢量场$\vec{\Phi}$会选择某个方向,所有我们就不能任意做$SO(3)$转动而使系统保持不变.因此我们说负质量的$\vec{\Phi}$场自发破缺了连续的$SO(3)$旋转对称性.

自发破缺的$SO(3)$规范场

现在,仿照之前$SU(N)$规范理论的讨论,我们把$SO(3)$对称性升级为局域对称性,这样就得到了$SO(3)$规范场模型:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}D^\mu \vec{\Phi} \cdot D_\mu \vec{\Phi} - \frac{m^2}{2}\vec{\Phi} \cdot \vec{\Phi} - \frac{\lambda}{4}(\vec{\Phi} \cdot \vec{\Phi})^2 - \frac{1}{4}\vec{G}_{\mu\nu} \cdot \vec{G}^{\mu\nu} \tag{12.381}$$

这里协变导数$D_\mu \vec{\Phi} = \partial_\mu \vec{\Phi} - g\vec{\Phi} \times \vec{W}_\mu$,$\vec{W}_\mu = W_\mu^a T^a$是$SO(3)$规范场,$T^a$是$SO(3)$群的生成元(可以理解为角动量算符).规范场场强$\vec{G}_{\mu\nu} = \partial_\mu \vec{W}_\nu - \partial_\nu \vec{W}_\mu + g\vec{W}_\mu \times \vec{W}_\nu$.直接计算可以证明$\mathcal{L}$在如下无穷小$SO(3)$变换下不变:

$$\vec{\Phi} \to \vec{\Phi} - \vec{\theta} \times \vec{\Phi}, \quad \vec{W}_\mu \to \vec{W}_\mu + \frac{1}{g}\partial_\mu \vec{\theta} - \vec{\theta} \times \vec{W}_\mu. \tag{12.382}$$

让我们假设$m^2<0$,那么$\vec{\Phi}$场会自发破缺$SO(3)$对称性,为简单起见,设$\vec{\Phi}$的方向取在Φ_3方向,其大小为$\Phi_0=\sqrt{\frac{-m^2}{\lambda}}>0$:

$$\vec{\Phi}=\begin{pmatrix}\Phi_1\\ \Phi_2\\ \Phi_0+\chi\end{pmatrix} \tag{12.383}$$

这里Φ_1,Φ_2,χ是相对于$\langle\vec{\Phi}\rangle=\Phi_0\vec{e}_z$的涨落.把这个结果代入$\mathcal{L}$可得

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{1}{2}D^\mu\vec{\Phi}\cdot D_\mu\vec{\Phi}+\frac{\lambda\Phi_0^2}{2}(\Phi_1^2+\Phi_2^2+(\Phi_0+\chi)^2)\\ &- \frac{\lambda}{4}(\Phi_1^2+\Phi_2^2+(\Phi_0+\chi)^2)^2-\frac{1}{4}\vec{G}_{\mu\nu}\cdot\vec{G}^{\mu\nu}\end{aligned} \tag{12.384}$$

下面我们化简上述表达式.首先势能部分是

$$\frac{\lambda\Phi_0^2}{2}(\Phi_1^2+\Phi_2^2+(\Phi_0+\chi)^2)-\frac{\lambda}{4}(\Phi_1^2+\Phi_2^2+(\Phi_0+\chi)^2)^2=-\lambda\Phi_0^2\chi^2-\frac{\lambda}{4}\Phi_0^4+\mathcal{O}(\Phi_1^3,\Phi_2^3,\chi^3)$$

然后

$$\begin{aligned}&D^\mu\vec{\Phi}\cdot D_\mu\vec{\Phi}=\partial^\mu\vec{\Phi}\cdot\partial_\mu\vec{\Phi}-2g\partial^\mu\vec{\Phi}\cdot\vec{\Phi}\times\vec{W}+g^2(\vec{\Phi}\times\vec{W}^\mu)\cdot(\vec{\Phi}\times\vec{W}_\mu)\\ =\;&\partial^\mu\vec{\Phi}\cdot\partial_\mu\vec{\Phi}+2g\Phi_0(W_{2\mu}\partial^\mu\Phi_1-W_{1\mu}\partial^\mu\Phi_2)+g^2\Phi_0^2\vec{W}^\mu\cdot\vec{W}_\mu-g^2\Phi_0^2W_3^\mu W_{3\mu}+...\end{aligned}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{1}{2}\partial^\mu\Phi_1\partial_\mu\Phi_1+\frac{1}{2}\partial^\mu\Phi_2\partial_\mu\Phi_2+\frac{1}{2}\partial^\mu\chi\partial_\mu\chi-\lambda\Phi_0^2\chi^2-\frac{\lambda}{4}\Phi_0^4+g\Phi_0(W_{2\mu}\partial^\mu\Phi_1-W_{1\mu}\partial^\mu\Phi_2)\\ &+ \frac{g^2}{2}\Phi_0^2(W_1^\mu W_{1\mu}+W_2^\mu W_{2\mu})-\frac{1}{4}\vec{G}_{\mu\nu}\cdot\vec{G}^{\mu\nu}+...\end{aligned} \tag{12.385}$$

为了进一步简化上述结果,我们用所谓的unitary规范,也就是设$\vec{\Phi}(x)=(\Phi_0+\chi)\vec{e}_z$.这样所有涉及$\Phi_1,\Phi_2$导数项的部分都为零,于是有

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}\partial^\mu\chi\partial_\mu\chi-\lambda\Phi_0^2\chi^2+\frac{g^2}{2}\Phi_0^2(W_1^\mu W_{1\mu}+W_2^\mu W_{2\mu})-\frac{1}{4}\vec{G}_{\mu\nu}\cdot\vec{G}^{\mu\nu}+...$$

上式说明χ场的质量是$m_\chi=\sqrt{2\lambda}\Phi_0$而规范场$W_1^\mu,W_2^\mu$也获得了质量$g\Phi_0$.注意$W_3^\mu$仍然保持无质量.

在弱电统一理论的Weinberg-Salam模型中,电磁场就像W_3^μ场一样是无质量的而有质量的规范场W_1^μ,W_2^μ以及额外的场Z^μ成为传递弱相互作用的$W^\pm,Z^0$等粒子.[29]χ场则对应标准模型中最后一个被发现的上帝粒子,也就是Higgs粒子.

- 利用规范理论,人们构造了成功描述微观粒子世界普遍规律的粒子物理标准模型,把自然界四种基本相互作用中的强力,弱力和电磁力纳入到一个统一的框架内,这是二十世纪最伟大的科学理论之一.[30]

[29]严格来说我们需要额外的$U(1)$规范场B_μ,然后B_μ与W_μ^3的组合分别给出电磁场$A_\mu=\sin\theta W_\mu^3+\cos\theta B_\mu$和$Z_0$粒子的场$Z_\mu=\cos\theta W_\mu^3-\sin\theta B_\mu$.这里$\theta$称为Weinberg角.

[30]非阿贝尔规范场和标准模型的详细讨论可参考Peskin书15 − 21章,Zee书$IV.5,VII$以及Lancaster 书46 − 47 章.

类型	稳定性	实验是否发现	局域化
磁单极	√	???	三维空间
瞬子	√	???	四维时空

Table 12.1: 场论中的磁单极和瞬子解.

磁单极与瞬子*

't Hooft-Polyakov磁单极

在先前Maxwell电磁场的讨论中,我们指出如果允许磁单极解,那么根据规范不变性必然要求电荷是量子化的.然而,没有任何更深层次的原因或者理论要求Maxwell理论必须存在磁单极,因此我们对从未观测到磁单极这个事实并不奇怪.

我们已经知道微观的粒子世界的基本模型是基于非阿贝尔规范场论的标准模型,那么一个明显的问题是在非阿贝尔规范理论中是否存在磁单极解呢？历史上,'t Hooft和Polyakov在1974年于非阿贝尔规范理论中找到了场方程中的磁单极解.下面我们基于$SO(3)$规范理论进行简要的讨论.我们写出$SO(3)$规范理论的拉式量:

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}D^{\mu}\vec{\Phi}\cdot D_{\mu}\vec{\Phi}-\frac{m^2}{2}\vec{\Phi}\cdot\vec{\Phi}-\frac{\lambda}{4}(\vec{\Phi}\cdot\vec{\Phi})^2-\frac{1}{4}\vec{G}_{\mu\nu}\cdot\vec{G}^{\mu\nu} \tag{12.386}$$

考虑$m^2<0$的负质量情形.根据先前的讨论,场$\vec{\Phi}$会发生对称破缺而有非零的真空期望值,例如$\langle\vec{\Phi}\rangle=\Phi_0\vec{e}_z$.现在我们假设真空期望值能够有空间上的变化,那么一个可能的解是

$$\vec{\Phi}=\Phi_0\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}=\Phi_0\frac{x\vec{e}_x+y\vec{e}_y+z\vec{e}_z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}},\quad |\vec{r}|\to\infty \tag{12.387}$$

把这个解代入哈密顿量并同时设规范场的真空期望值为零,可得

$$H=\frac{1}{2}(\nabla\vec{\Phi})^2+\frac{m^2}{2}\vec{\Phi}^2+\frac{\lambda}{4}\vec{\Phi}^4=\frac{1}{2}(\nabla\vec{\Phi})^2-\frac{\lambda}{4}\Phi_0^4=\frac{1}{2}\frac{2\Phi_0^2}{\vec{r}^2}-\frac{\lambda}{4}\Phi_0^4 \tag{12.388}$$

因此系统相对于均匀真空解的能量差是

$$\Delta E=\int d^3r\frac{\Phi_0^2}{\vec{r}^2}=4\pi\Phi_0^2\int_0^{\infty}dr\to\infty \tag{12.389}$$

为了让这个真空解稳定,我们可设$|\vec{r}|\to\infty$时$D_{\mu}\vec{\Phi}=0$即有

$$\partial_{\mu}\vec{\Phi}=g\vec{\Phi}\times\vec{W}_{\mu}\Rightarrow\partial_{\mu}\Phi^a=g\epsilon^{abc}\Phi^bW_{\mu}^c \tag{12.390}$$

代入$\Phi^a=\Phi_0\frac{r^a}{|\vec{r}|}$得

$$\partial_{\mu}\frac{r^a}{|\vec{r}|}=g\epsilon^{abc}\frac{r^b}{|\vec{r}|}W_{\mu}^c\Rightarrow\partial_j\frac{r^a}{|\vec{r}|}=g\epsilon^{abc}\frac{r^b}{|\vec{r}|}W_j^c\quad W_0^c=0 \tag{12.391}$$

上述方程的解是$W_j^c = -\epsilon^{jcd}\frac{r^d}{g\vec{r}^2}$.验证如下:

$$g\epsilon^{abc}\frac{r^b}{|\vec{r}|}W_j^c = \epsilon^{cab}\epsilon^{cjd}\frac{r^b r^d}{|\vec{r}|^3} = \delta^{aj}\frac{r^b r^b}{|\vec{r}|^3} - \frac{r^j r^a}{|\vec{r}|^3} = \partial_j\frac{r^a}{|\vec{r}|}. \tag{12.392}$$

注意到电磁场中磁场与场强的关系是$-\frac{\varepsilon^{ijk}}{2}F_{jk} = B^i$那么对于非阿贝尔场则有三种不同的磁场:

$$B^{ia} = -\frac{\varepsilon^{ijk}}{2}G_{jk}^a. \tag{12.393}$$

在一般情况下,我们可以定义一个'标量'场强$F_{\mu\nu} = \frac{\vec{\Phi}}{|\vec{\Phi}|}\cdot\vec{G}_{\mu\nu}$这样有

$$B^i = -\frac{\varepsilon^{ijk}}{2}F_{jk} = -\frac{\varepsilon^{ijk}}{2}\frac{\vec{\Phi}}{|\vec{\Phi}|}\cdot\vec{G}_{jk} \tag{12.394}$$

代入$\vec{\Phi}$和W_j^c的具体形式并经过单调的计算可知$F_{jk} = -\epsilon^{jkl}\frac{r^l}{g\vec{r}^3}$,那么有

$$\vec{B} = \frac{\vec{r}}{g\vec{r}^3}. \tag{12.395}$$

取包围$\vec{B}$中心$r=0$的闭合曲面并计算磁通量有

$$\int d\vec{S}\cdot\vec{B} = \frac{4\pi r^2}{gr^2} = \frac{4\pi}{g} \tag{12.396}$$

这说明我们得到的磁荷/磁单极的大小是$\Phi_m = \frac{4\pi}{g}$.注意到耦合常数g可以看成规范'电荷',这样我们发现非阿贝尔规范场的电磁对偶关系:

$$g\Phi_m = 4\pi \Rightarrow g\Phi_m = 4\pi\hbar \Rightarrow g = \frac{2h}{\Phi_m}. \tag{12.397}$$

't Hooft估计这些磁单极的质量大约是$11TeV$,因此目前的实验还看不到't Hooft-Polyakov磁单极.

- 最近的LHC实验在很大参数范围(质量在75Gev以下,磁荷大小为h/e到$3h/e$)内排除了Schwinger机制产生磁单极的可能.[31]

瞬子与θ真空

瞬子(instanton)是四维欧氏空间中的孤子解,顾名思义,其是时间和空间上都局域的解.我们先前遇到的孤子解,例如涡旋和磁单极都只是空间上局域的解.在欧氏时空中,我们知道电磁场作用量是$S_E = \int d^4x\mathcal{L}_E, \mathcal{L}_E = \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}$.与之相同,$SU(2)$非阿贝尔规范场的欧氏时空作用量是

$$S_E = \int d^4x\mathcal{L}_E, \quad \mathcal{L}_E = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}. \tag{12.398}$$

[31]Schwinger机制是指强电场下Dirac 费米海中自发产生电子,类似的,强磁场也可能产生磁单极,其物理本质可类比于固体物理中的Landau-Zener隧穿效应(强电场使得不同能带能级相近的电子从占据能带隧穿至空占据能带).[Acharya et al.,Search for magnetic monopoles produced via the Schwinger mechanism,Nature **602**,63(2022)]

显然,系统作用量的最小值零($F_{\mu\nu}=0$或$A_{mu}=0$),也就是真空的情形.回忆$SU(2)$规范理论费米子部分的拉氏量是

$$\mathcal{L}=\bar{\Psi}(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-g\gamma^{\mu}A_{\mu}-m)\Psi \tag{12.399}$$

此时我们做$SU(2)$规范变换会使得系统多出$i\gamma^{\mu}U^{-1}\partial_{\mu}U$项.由于基态时$A_{\mu}=0$,那么为了抵消规范变换的贡献,我们可以令

$$A_{\mu}=\frac{i}{g}U^{-1}\partial_{\mu}U \tag{12.400}$$

这也叫做纯规范变换.对于这类纯规范变换,数学上可以证明如下定义的荷Q是一个拓扑不变量:

$$Q=\frac{g^2}{16\pi^2}\int d^4x\mathrm{Tr}\tilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu}. \tag{12.401}$$

$\tilde{F}_{\mu\nu}=\frac{\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}}{2}F_{\rho\sigma}$是对偶张量.$Q$的取值是所有整数.那些$Q\neq 0$的规范场的解就是瞬子.一个典型的瞬子解是:

$$A_{\mu}=\frac{i}{g}\frac{r^2}{r^2+\lambda^2}U^{-1}\partial_{\mu}U \quad r=\sqrt{\tau^2+\vec{x}} \tag{12.402}$$

这个瞬子解对应$Q=1$.

因此,欧氏时空作用量可以写成

$$S_E=\frac{1}{2}\int d^4x\mathrm{Tr}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}=\frac{8\pi^2}{g^2}Q. \tag{12.403}$$

这说明对于荷Q的真空而言,其真空到真空的跃迁振幅正比于$e^{-S_E}=e^{-\frac{8\pi^2}{g^2}Q}$.现在,我们记荷为$Q$的真空态为$|Q\rangle$,然后把所有不同的真空按如下方式叠加:

$$|\theta\rangle=\sum_{Q=-\infty}^{\infty}e^{iQ\theta}|Q\rangle \tag{12.404}$$

$|\theta\rangle$称为θ真空.注意到时间反演变换由于存在取复共轭的操作,因此会使$e^{iQ\theta}\to e^{-iQ\theta}$.因此,除非$\theta=0,\pi$否则$\theta$真空破坏时间反演对称.实验上给出时间反演对称破坏的上限是$\theta<10^{-9}$.

对于上述θ真空,我们可以把它类比于一个圆环上自由运动的粒子的状态.这个粒子的本征方程是

$$-\frac{1}{2m}\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi(\theta)=E\psi(\theta) \tag{12.405}$$

ρ是圆环的半径,θ是以圆环中心为原点建立的极坐标的极角.显然,我们知道本征函数是$\psi(\theta)=e^{-iQ\theta}=\langle\theta|Q\rangle$,$Q=0,\pm1,\pm2....|\theta\rangle$说明粒子处于角度$\theta$的位置.本征能量是$E_Q=\frac{Q^2}{2m\rho^2}$.因此

$$|\theta\rangle=\sum_{Q}|Q\rangle\langle Q|\theta\rangle=\sum_{Q}e^{iQ\theta}|Q\rangle \tag{12.406}$$

我们发现粒子处于角度θ位置的状态等价于各种圆环运动本征态$|Q\rangle$的叠加.注意到这个波函数形式与θ真空完全一致.不过圆环运动电子的基态是唯一的($n=0$),这并不符合场论中有大量真空的要求.为了模拟场论中的情况,我们添加一个势能项,这样哈密顿变成

$$H=-\frac{1}{2m}\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-g\cos 2\theta. \tag{12.407}$$

对于上述模型,只要g足够大($g>0$),那么所有$|Q\rangle$的能量都近似相同,这样满足时间反演对称的解$\theta=0,\pi$就是系统的真实基态.

最后,让我们考虑不同θ真空间的跃迁概率,这等价于计算$\lim_{T\to\infty}\langle\theta|e^{-i\hat{H}T}|\theta'\rangle$.利用路径积分形式,我们有

$$\begin{aligned}\lim_{T\to\infty}\langle\theta|e^{-i\hat{H}T}|\theta'\rangle &= \sum_{Q,Q'}e^{i(Q'\theta'-Q\theta)}\lim_{T\to\infty}\langle Q|e^{-i\hat{H}T}|Q'\rangle\\ &= \sum_{Q,Q'}e^{i(Q'\theta'-Q\theta)}\int_{Q'-Q}DAe^{i\int d^4\mathcal{L}}\\ &= \sum_{Q,\varrho}e^{i\varrho\theta'}e^{iQ(\theta'-\theta)}\int_{\varrho}DAe^{i\int d^4\mathcal{L}}\\ &= \sum_{Q}e^{iQ(\theta'-\theta)}\mathcal{Z}[\theta']\end{aligned} \tag{12.408}$$

这里$\mathcal{Z}[\theta]$是以$e^{iQ\theta}$为权重的不同荷的真空之间的跃迁概率:

$$\mathcal{Z}[\theta]=\sum_{Q}e^{iQ\theta}\int_{Q}DAe^{i\int d^4\mathcal{L}} \tag{12.409}$$

利用$Q=\frac{g^2}{16\pi^2}\int d^4x\mathrm{Tr}\tilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu}$,我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}[\theta] &= \sum_{Q}e^{iQ\theta}\int_{Q}DAe^{i\int d^4\mathcal{L}}\\ &= \sum_{Q}\int_{Q}DAe^{i\int d^4\mathcal{L}+iQ\theta}\\ &= \sum_{Q}\int_{Q}DAe^{i\int d^4(\mathcal{L}+\frac{g^2\theta}{16\pi^2}\mathrm{Tr}\tilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu})}\end{aligned} \tag{12.410}$$

这说明由于瞬子和θ真空的存在,非阿贝尔规范场的拉氏量多出了所谓θ项:

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}_{YM}+\frac{g^2\theta}{16\pi^2}\mathrm{Tr}\tilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu}. \tag{12.411}$$

前面已经提到,实验指出$\theta<10^{-9}$,因此θ项对于以QCD为代表的Yang-Mills非阿贝尔规范场到底重要性如何仍是一个问题.

本章小结与进一步阅读

本章小结 晶格振动的量子是声子;光子是电磁场的量子;规范理论是理解基本相互作用的核心工具.

本章关键词 电声相互作用;Peierls不稳定性;Dirac磁单极;Ward-Takahashi恒等式;瞬子

进一步阅读 Lancaster和Blundell合著的《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》第十四,二十九,四十九,五十章;P.Phillips的《Advanced Solid State Physics》第十一章

附录

极化子

我们提到,电子可与其周围的声子形成复合体,即为极化子.极化子在离子晶体中是基本的载流子,因为离子晶体中当电子通过一个晶格区域时会吸引正离子而排斥负离子,这样就产生等效的电偶极矩.这个电偶极矩产生的极化电场反过来会改变电子的有效质量与能量,并且会随着电子一起运动.这类电子与其极化电场的复合体就是极化子.通常极化子可以分为大极化子和小极化子,两者的差异在于电子所引起的晶格畸变区域的大小,前者对应畸变区域远大于晶格常数,而后者的畸变区域与晶格尺度相当.因此,大极化子可以用连续理论处理,而后者则必须用晶格模型研究.

如果我们考虑极化子是由电子与光学支声子的耦合而成,那么若设光学声子能量为$\hbar\omega_L$,电子能量为$\frac{\hbar^2k^2}{2m}$,则电子吸收一个光学声子的能量改变为

$$\frac{\hbar^2(\delta k)^2}{2m}=\hbar\omega_L \tag{12.412}$$

因此电子的波矢变化为$\delta k=\sqrt{2m\omega_L/\hbar}$,那么根据动量-位置不确定度关系可得极化子在空间扩展的程度或者说其空间大小为

$$\delta x\sim\frac{\hbar}{\hbar\delta k}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_L}}. \tag{12.413}$$

这样,电子质量越小的系统,其极化子在空间上尺度越大,反之重的电子会对应小极化子.对于典型的光学支声子$\hbar\omega_L\sim 1eV$,并且采用自由电子的质量可得$\delta x\sim 10^{-10}m$, 这与晶格常数相当,这说明若参与形成极化子的电子是自由电子,那么相应的极化子是小极化子.在不少半导体中,电子有效质量是自由电子质量的1/100,此时形成的应是大极化子.与之相反,d和f 电子系统中电子有效质量都比自由电子质量更大,因此这些系统的极化子若能存在都应属于小极化子.

对于大极化子,研究往往从以下哈密顿量出发:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\sum_q\hbar\omega_L\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_q+\sum_q(V_q\hat{a}_qe^{iqr}+V_q^*\hat{a}_q^\dagger e^{-iqr}) \tag{12.414}$$

$V_q=i\frac{\hbar\omega_L}{q}(\frac{\hbar}{2m\omega_L})^{1/4}\sqrt{4\pi\alpha}$,这里$\alpha>0$是依赖于$\omega_L$和介电常数的无量纲耦合系数,其表达式为$\alpha=\frac{e^2}{2\hbar\omega_L}\sqrt{\frac{2m\omega_L}{\hbar}}(\epsilon_\infty-\epsilon_0)$, 这里$\epsilon_\infty,\epsilon_0$ 分别是高频和静态介电常数.当相互作用为零时,系统的状态是电子的动量态$|k\rangle$与声子占据数态$|n_q\rangle$的乘积.在$T=0$ 时有$|\Phi_k\rangle=|k\rangle|0,0,0,...0\rangle$.假设相互作用足够小,那么通过量子力学的非简并微扰论可得系统$|\Phi_k\rangle$在微扰后的能量为

$$E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\left(1-\frac{\alpha}{6}\right)-\alpha\hbar\omega_L \tag{12.415}$$

显然微扰后系统总能量降低,因此倾向于形成极化子,E_k为极化子的能量.另一方面,我们可以把$1-\alpha/6$吸收到有效质量的定义中,即有

$$\frac{m^*}{m}=\frac{1}{1-\alpha/6}. \tag{12.416}$$

事实上,上述微扰理论仅在$\alpha << 1$时成立,而绝大多数的离子晶体其$\alpha > 1$,只有InP,InSb等半导体的α才满足$\alpha << 1$.因此,离子晶体中的极化子问题应是强耦合问题.

为了处理α较大的情况,Lee,Low和Pines先用正则变换$\hat{U}=e^{-i\sum_q \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q \vec{q}\cdot\vec{r}}$消去电子坐标$\vec{r}$得到如下哈密顿量:

$$\hat{H}=\frac{(\vec{P}-\sum_q \hbar\vec{q}\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_q)^2}{2m}+\sum_q \hbar\omega_L\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_q+\sum_q(V_q\hat{a}_q+V_q^*\hat{a}_q^\dagger). \tag{12.417}$$

这里$\vec{P}$是系统的总动量,其是守恒量.接下来,他们提出了一种变分波函数,[5]

$$|\Phi_{LLP}\rangle=e^{\sum_q(\hat{a}_q^\dagger f(q)-\hat{a}_q f^*(q))}|0,0,0...0\rangle|\vec{P}\rangle \tag{12.418}$$

$f(q)$由变分极值确定.这个波函数的主要特点是忽略声子之间的关联但考虑了任意多虚声子激发,通过变分计算他们发现

$$E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m(1+\alpha/6)}-\alpha\hbar\omega_L \tag{12.419}$$

因此有效质量为$m^*/m=1+\alpha/6$.进一步,利用微扰论可以估计这个理论的适用范围是$\alpha<6$ 的弱到中间耦合范围.

历史上关于大极化子问题比较好的理论是Feynman基于路径积分的变分理论,[6]其理论几乎适用于所有α的取值,也就是说既适用于弱耦合,也能良好工作在中间耦合和强耦合.Feynman 处理的出发点是把系统改写为路径积分形式:

$$\mathcal{Z}=\int\mathcal{D}x\mathcal{D}a^*\mathcal{D}ae^{-S},\quad S=\int d\tau\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2+\sum_q a_q^*(\partial_\tau+\omega_L)a_q+\sum_q(V_qa_qe^{iqx}+V_q^*a_q^*e^{-iqx})\right]. \tag{12.420}$$

这里我们采用虚时形式以简化形式.然后既然a_q,a_q^*仅有二次和一次项,那么积掉声子自由度可得

$$S=\int d\tau\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2-\int d\tau'\sum_q e^{iqx(\tau)}\frac{|V_q|^2}{\partial_\tau+\omega_L}e^{-iqx(\tau')}\right]. \tag{12.421}$$

注意到对q求和部分的求导逆操作就是声子Green函数$\langle\hat{T}_\tau\hat{a}_q(\tau)\hat{a}_q\rangle=\theta(\tau)e^{-\omega_L\tau}(1+f_B(\omega_L))+\theta(-\tau)e^{-\tau\omega_L}f_B(\omega_L)$, 同时注意到求导操作实际上可以对其前后两边作用,因此实际效果是$e^{-\omega_L|\tau-\tau'|}$, 这里仅采用零温的结果.于是有

$$S=\int d\tau\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2-\int d\tau' e^{-\omega_L|\tau-\tau'|}\sum_q|V_q|^2e^{iq(x(\tau)-x(\tau'))}\right]. \tag{12.422}$$

代入V_q具体形式并注意到对q的积分就是$1/|x(\tau)-x(\tau')|$的傅里叶变换,那么有

$$S=\int d\tau\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2-\alpha\frac{\omega_L^2}{\sqrt{2m\omega_L}}\int d\tau'\frac{e^{-\omega_L|\tau-\tau'|}}{|x(\tau)-x(\tau')|}\right]. \tag{12.423}$$

在Feynman的原文中,他令$\omega_L=m=1$,则有

$$S=\int d\tau\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2-2^{-3/2}\alpha\int d\tau'\frac{e^{-\omega_L|\tau-\tau'|}}{|x(\tau)-x(\tau')|}\right]. \tag{12.424}$$

接下来,人为引入一个未知形式的作用量S_1,则有

$$\int\mathcal{D}x e^{-(S-S_1)}e^{-S_1}=\langle e^{-(S-S_1)}\rangle\geq e^{-\langle S-S_1\rangle} \tag{12.425}$$

通过适当选取S_1的形式并在其中设置变分参数就可以得到相应的变分解.Feynman主要采用的S_1形式是

$$S_1=\int d\tau\frac{1}{2}\dot{x}^2+\frac{1}{2}C\int d\tau\int d\tau'(x(\tau)-x(\tau'))^2e^{-w|\tau-\tau'|} \tag{12.426}$$

C,w是变分参数,由$\langle S-S_1\rangle$的极值决定.通过直接的计算,上述形式可以得到令人满意的结果,具体细节可参考原文.

- 上述Feynman方法或者称为变分路径积分方法与图形蒙特卡洛有很好的符合度.[32]
- 如果考虑玻色型的大极化子,上述Feynman方法做适当修改后(主要是把声子Green函数部分用一般性的记忆核(memory kernel)代替)可得与图形蒙特卡洛相符的结果.[33]

  至于小极化子问题则更为困难,通常可用如下哈密顿量:

$$\hat{H}=-\sum_{ij}t_{ij}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j+\sum_q\omega_q\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_q+\sum_{q,j}M_q e^{iqj}(\hat{a}_q+\hat{a}_{-q}^\dagger)\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j. \tag{12.427}$$

在低温时,小极化子可以形成能带结构,称为极化子能带.随着温度升高,声子激发变强,最终小极化子能带失稳,极化子本身成为比较局域的粒子,只能依靠热声子的辅助在晶格中跃迁.当然,这些结果都是近似后的图像性概括,实际上,如果考虑电子自旋,那么我们可以用费米子的行列式量子蒙特卡洛方法直接模拟系统的平衡态性质而无需任何的不可控近似.

除了电子与晶格的集体振动所形成的极化子,带电载流子与其他集体模式也可以形成极化子,例如与磁振子,自旋子.一个有趣的进展是人们利用超冷原子技术在所模拟的二维Hubbard模型中观察到了电子与反铁磁背景所形成的磁性极化子.[7]

[32][Mishchenko,Prokof'ev,Sakamoto,Svistunov,Diagrammatic quantum Monte Carlo study of the Fröhlich polaron,Phys.Rev.B **62**,6317(2000)]

[33][Ichmoukhamedov,Tempere,General memory kernels and further corrections to the variational path integral approach for the Bogoliubov-Fröhlich Hamiltonian,Phys.Rev.B **105**,104304(2022)]

第十二章习题

习题1:一些概念

Q1:写出声子-电子相互作用的简化哈密顿量并解释其物理意义.

Q2:解释Dirac量子化条件.

习题2:流守恒

Q1:证明拉格朗日量$\mathcal{L} = i\psi^*\partial_t\psi - \frac{1}{2m}\nabla\psi^*\nabla\psi - U\psi^*\psi$给出Schödinger方程$i\partial_t\psi = (-\frac{\nabla^2}{2m} + U)\psi$;

Q2:证明在$U(1)$变换下系统的概率流守恒$\partial_t\rho + \nabla\cdot\vec{j} = 0$,其中$\rho = \psi^*\psi, \vec{j} = \frac{i}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$.

习题3:Maxwell方程

Q1:证明$\partial_\lambda F_{\lambda 0} = -J_0$等价于$\nabla\cdot\vec{E} = \rho$;

Q2:证明$\partial_\lambda F_{\lambda z} = -J_z$等价于$(\nabla\times\vec{B})_z = \partial_t E_z + J_z$.

习题4:Dirac方程的Landau量子化

Q1:考虑二维空间的Dirac方程$(i\gamma^\mu\partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu)\psi = 0$,这里$\gamma^0 = -\sigma^z, \gamma^1 = \sigma^x, \gamma^2 = \sigma^y$,$\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$是两分量的旋量.假设电子感受到垂直二维平面的磁场$\vec{B} = -B\hat{e}_z$,其可以用矢量势$A_\mu = (0, By, 0)$表示.此时的Dirac方程是

$$\begin{pmatrix} -i\partial_t & i\partial_x + \partial_y + eBy \\ i\partial_x - \partial_y + eBy & i\partial_t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0 \tag{12.428}$$

设$\psi_1(t,x,y) = e^{-iEt}e^{ikx}\phi_1(y), \psi_2(t,x,y) = e^{iEt}e^{ikx}\phi_2(y)$,证明Dirac方程可以写成

$$\begin{pmatrix} 0 & -k + \partial_y + eBy \\ -k - \partial_y + eBy & 0 \end{pmatrix}\phi(y) = E\phi(y), \quad \phi(y) = \begin{pmatrix} \phi_1(y) \\ \phi_2(y) \end{pmatrix}. \tag{12.429}$$

Q2:定义特征长度$l_B = \sqrt{\frac{1}{eB}}$,回旋共振频率$\omega_c = \sqrt{2}\frac{1}{l_B}$和无量纲坐标$\xi = \frac{y}{l_B} - l_B k$,试证明如下谐振子算符满足对易关系$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$:(提示:定义$\xi$的共轭动量$p_\xi = -i\partial_\partial$,这样它们满足对易关系$[\xi, p_\xi] = i$)

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_\xi + \xi), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\partial_\xi + \xi). \tag{12.430}$$

这样我们发现

$$\omega_c\begin{pmatrix} 0 & \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & 0 \end{pmatrix}\phi(\xi) = E\phi(\xi) \tag{12.431}$$

或者用态矢量记号可写成$\omega_c\hat{a}|\phi_2\rangle = E|\phi_1\rangle, \omega_c\hat{a}^\dagger|\phi_1\rangle = E|\phi_2\rangle$.

Q3:由$\omega_c\hat{a}|\phi_2\rangle = E|\phi_1\rangle, \omega_c\hat{a}^\dagger|\phi_1\rangle = E|\phi_2\rangle$ 证明体系的本征态是

$$|\phi_{N,\pm}\rangle = \begin{pmatrix} \pm|\psi_{N-1}\rangle \\ |\psi_N\rangle \end{pmatrix} \tag{12.432}$$

对应的本征能量是$E_{N,\pm} = \pm\omega_c\sqrt{N}$.这里$|\psi_N\rangle$是谐振子的第$N$个本征态.(提示:$\hat{a}^\dagger\hat{a}$的本征值为$N = 0, 1, 2...$,$\omega_c\hat{a}^\dagger\hat{a}|\phi_2\rangle = E\hat{a}^\dagger|\phi_1\rangle = E^2/\omega_c|\phi_2\rangle$. 这样本征值$E^2 = \omega_c^2 N$而$|\phi_2\rangle$是谐振子本征态记为$|\psi_N\rangle$,再利用$|\phi_1\rangle = \frac{\omega_c}{E}\hat{a}|\phi_2\rangle = \frac{\omega_c}{E}\sqrt{n}|\psi_{N-1}\rangle$.)

Bibliography

[1] Philip Phillips, Advanced Solid State Physics, 第十一章

[2] Daniel I. Khomskii, Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids, 第九章

[3] Tom Lancaster and Stephen J. Blundell, Quantum Field Theory for the Gifted Amateur, page 7.

[4] 李正中, 固体理论, 第九章

[5] T. D. Lee, F. E. Low, and D. Pines, The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal, Phys. Rev. **90**, 297 (1953).

[6] R. Feynman, Slow Electrons in a Polar Crystal, Phys. Rev. **97**, 660 (1955).

[7] J. Koepsell, J. Vijayan, P. Sompet, F. Grusdt, T. A. Hilker, E. Demler, G. Salomon, I. Bloch, and C. Gross, Imaging magnetic polarons in the doped Fermi – Hubbard model, Nature **572**, 358 (2019).

Chapter 13

超导:拥有BCS理论的幸运？

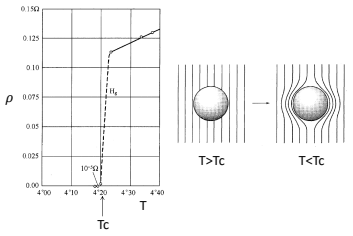


Figure 13.1: 水银样品的电阻与绝对温度的关系,Onnes绘制的这一曲线标志了超导电性的发现.超导体在相变温度T_c一下显示完全抗磁性,内部总磁场为零.

超导:神秘的宏观量子现象

什么是超导

超导(superconductivity)是物理学中一个重要的现象,其本质是组成物质的微观粒子的量子力学效应,并不能用经典物理框架理解.

- 超导是低温下物质的一类宏观量子现象,其基本特征是在某个特征温度(又称为临界温度T_c)下,系统电阻为零,同时显示完全抗磁性(超导体内部总磁场为零,也称为Meissner效应).[1]

- 从正常金属态到超导态经历了一个热力学相变,(二级相变)其热容在相变临界温度T_c附近显示跳变行为.

- 超导体的宏观物理性质可以通过Ginzburg-Landau方程得到很好的描述,但其微观物理的描述则复杂很多,目前研究的多数超导材料其微观物理我们并不清楚.

超导简史

超导研究历史上的重大发现:

- 1911年荷兰Leiden大学的Kammerling Onnes发现Hg超导,因此水银是人类发现的第一个超导材料.[2]

[1]实际确认一个材料是否是超导体,既需要测量电阻也需要测量其内部的磁场情况,两者缺一不可.这是因为,对于理想的导体,其电子不受到任何晶格的散射,电阻也为零,但是金属电子在磁场下显示Pauli顺磁性,而不是超导体中的抗磁性.这样通过Meissner效应可以区分理想导体与超导体.

[2]令人遗憾的是超导发源地荷兰Leiden大学早已不是超导研究的中心,目前研究超导的人手已很少.当前超导研究最多的国家是美国,日本和我国.中日两国研究多从材料和测量角度出发,老美更喜欢提概念和玩花活.

图13.1显示了水银样品的电阻与绝对温度的关系,Onnes绘制的这一曲线标志了超导电性的发现.Onnes 的原始动机是通过测量低温电阻检测Drude模型的有效性.(电阻率$\rho=\frac{m}{ne^2}\tau^{-1}\propto\rho_0+T^2+...$)他发现金和铂满足Drude理论,然而当他在$4K$温度以下测量水银的电阻却发现了电阻突然为零的现象,这就是超导电性的发现.

根据欧姆定律我们知道$\vec{j}=\sigma\vec{E}=\frac{1}{\rho}\vec{E}$,既然超导体电阻率$\rho$为零(电导率$\sigma$无穷大),而电流非零,那么这只能说明超导体内部电场$\vec{E}$为零.当然,表明$\rho=0$的最佳现象是超导环里面的持续电流,只要$\rho\neq0$,电流就会逐渐减小,然而实验表明连续几年的观测也从未发现电流变小,因此超导体内确实是零电阻的.

- 1933年Meissner和Ochsenfeld发现超导体具有完全抗磁性,也就是Meissner效应.

所谓完全抗磁性实际上表明超导体可以把施加在其上的弱外磁场$\vec{H}$完全抵消,也就是系统自发的磁化与外磁场相反$\vec{M}=-\vec{H}(\vec{B}=\mu_0(\vec{H}+\vec{M})=0)$.这样超导体的磁化率$\chi=dM/dH|_{H=0}=-1$,我们知道负的磁化率说明体系的抗磁特性,例如金属中的Landau抗磁性.既然超导体能完全抵消外磁场,因此称其具有完全抗磁性.[3]

需要指出,这里的完全抗磁性对第一类超导体完全适用.这实际上是指当我们增大磁场后,只要体系还是超导,那么其内部磁场B总是零.系统能够保持超导态不至于被破坏的最大磁场称为临界磁场,通常记为H_c.但对于第二类超导体,其有两个临界磁场,即下临界磁场H_{c1}和上临界磁场H_{c2}.当$H<H_{c1}$时$M=-H$ 仍然成立,而当$H_{c1}<H<H_{c2}$时超导态还存在,但磁场可以进入超导体内部,这样完全抗磁性已不存在,$M<|H|$ 导致$B\neq0$.在这个区域,系统存在大量的涡旋,这些涡旋的核心可以穿过磁场,而其他地方依然没有磁场,这就是所谓的第二类超导体的磁通态.

- 1935年London兄弟提出了描述超导体电磁性质的London方程.

首先,回忆Drude模型,我们知道电导率为$\sigma(\omega)=\frac{ne^2}{m}\frac{\tau}{1-i\omega\tau}$.然后我们取$\tau=\infty$极限,这样电导率可写为实部和虚部:[4]

$$\sigma(\omega)=\frac{\pi ne^2}{m}\delta(\omega)+\frac{ne^2}{-i\omega m}. \tag{13.1}$$

受到液氦二流体理论的启发,London兄弟假定超导体中的电子可分为超导电子(其密度为n_s)和正常电子(密度为n_n),这样体系的总电子密度为$n=n_s+n_n$.这里超导电子有无穷大寿命$\tau=\infty$而正常电子寿命$\tau\neq0$.因此,超导电子对电导率的贡献是

$$\sigma_s(\omega)=\frac{\pi n_se^2}{m}\delta(\omega)+\frac{n_se^2}{-i\omega m} \tag{13.2}$$

[3]探测磁化率因而是探索位置材料是否超导的重要方式,毕竟从$\chi>0$突然转变至$\chi=-1$是容易观测的.

[4]注意$\delta(x)=\lim_{\Gamma\to0}\frac{\Gamma/\pi}{x^2+\Gamma^2}$

而超导体的电导率是

$$\sigma(\omega)=\sigma_s(\omega)+\sigma_n(\omega)=\frac{\pi n_s e^2}{m}\delta(\omega)+\frac{n_s e^2}{-i\omega m}+\frac{n_n e^2}{m}\frac{\tau}{1-i\omega\tau}. \tag{13.3}$$

我们通常测量的静态电阻率$\rho=1/\mathrm{Re}\sigma(\omega\to 0)$,因此虽然超导体既存在超导电子也有正常电子,但是由于超导电子贡献$\mathrm{Re}\sigma_s(\omega\to 0)=\infty$,这样正常电子对电阻率的有限贡献相当于被短路,系统的总电阻率为零:

$$\rho=\mathrm{Re}\frac{1}{\sigma_s(0)+\sigma_n(0)}=\mathrm{Re}\frac{1}{\infty+\frac{n_n e^2}{m}\tau}=0. \tag{13.4}$$

在零温时,我们认为所有电子都是超导电子而有限温度或有外场时存在正常电子.由上述讨论我们发现只要系统还存在超导电子,那么静态电阻就由超导电子主导,也就是说超导体尽管存在正常电子但电阻依然是零.

现在,我们对欧姆定律$\vec{j}=\sigma(\omega)\vec{E}$两边求旋度可得

$$\nabla\times\vec{j}=\sigma(\omega)\times\vec{E}=-\sigma\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} \tag{13.5}$$

假设$\vec{B},\vec{j}$的时间依赖都是$e^{-i\omega t}$形式,那么有$\partial\vec{B}/\partial_t=-i\omega\vec{B}$,于是有

$$\nabla\times\vec{j}=i\omega\sigma(\omega)\vec{B} \tag{13.6}$$

假设电导率由超导电子主导,那么代入其表达式可得[5]

$$\nabla\times\vec{j}=\frac{\pi n_s e^2}{m}i\omega\delta(\omega)-\frac{n_s e^2}{m}\vec{B}=-\frac{n_s e^2}{m}\vec{B} \tag{13.7}$$

由于$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$,我们得到London方程

$$\boxed{\vec{j}=-\frac{n_s e^2}{m}\vec{A}}. \tag{13.8}$$

进一步,对$\nabla\times\vec{B}=\mu_0\vec{j}$[6]取旋度可得

$$\nabla^2\vec{B}-\mu_0\frac{n_s e^2}{m}\vec{B}=0 \tag{13.9}$$

这样上述方程满足解$\vec{B}=\vec{B}_0e^{-x/\lambda_L}$,这里$B_0$是外磁场强度,$x>0$代表超导体内部,$\lambda_L=\sqrt{\frac{m}{n_s e^2\mu_0}}$是超导体的London穿透深度,其表示磁场穿透入超导体内部的特征距离.这样,这类解说明磁场只能进入超导体表面附近λ_L长度的尺度,这自然解释了超导体内部磁场为零,也就是Meissner效应.对于一般导体,若取$n_s\sim 10^{23}/cm^3$,那么磁场穿透深度为$\lambda_L\sim 10^{-6}cm$.

进一步,Pippard给出了推广的London方程形式,即

$$\vec{j}(\vec{r})=-\frac{n_s e^2}{m}\frac{3}{4\pi\xi_0}\int d\vec{r}'e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{r_0}}(\vec{r}-\vec{r}')\frac{(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{A}(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|^4} \tag{13.10}$$

[5]注意$x\delta(x)=0$

[6]超导体中电场$\vec{E}=0$因而只要没有自发电极化那么电位移矢量总是零.

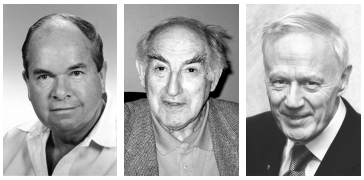


Figure 13.2: Alexei A. Abrikosov(1928 – 2017),Vitaly L. Ginzburg(1916 – 2009)和Anthony J. Leggett(1938–).他们三人因超导和超流理论的开创贡献荣获2003年诺贝尔物理学奖.

这个方程表明对$\vec{r}$处电流有贡献的矢量势是$\vec{r}$附近r_0尺度内的.而$r_0 = \frac{\xi_0 l}{\xi_0 + l}$,$l$是电子的平均自由程,$\xi_0 \simeq \frac{v_F}{\pi\Delta}$是超导体的相干长度,($\Delta$是超导能隙大小)大体是Cooper电子对在空间的距离.

这样,我们知道超导体有三个特征长度,即穿透深度λ_L,相干长度ξ_0 以及平均自由程l.若$l >> \xi_0$,我们说超导体处于清洁极限(clean limit),而$l << \xi_0$称为脏极限(dirty limit).另外,定义$\kappa = \lambda_L/\xi_0$,Abrikosov指出$\kappa < 1/\sqrt{2}$是第一类超导体而$\kappa > 1/\sqrt{2}$对应第二类超导体.这样我们可以通过相干长度和磁场穿透深度大小之比把超导体分为第一和第二类超导体.穿透深度大的是第二类,相干长度大的则是第一类.常见的元素超导是第一类,铜氧化物超导是第二类.

- 1950年Ginzburg和Landau基于二级相变理论建立了描述超导体宏观性质的Ginzburg-Landau 理论.

Ginzburg-Landau理论的出发点是假定超导体的序参量是一个复标量场$\Psi(x)$,然后根据1937年Landau建立的二级相变理论的基本精神,我们可以把系统自由能密度写成如下形式:

$$f_{GL} = \frac{1}{2m^*}|(\nabla - iq\vec{A})\Psi|^2 + r|\Psi|^2 + \frac{u}{2}(|\Psi|^2)^2 + \frac{1}{2\mu_0}(\nabla \times \vec{A})^2 \qquad (13.11)$$

这里m^*是有效质量,q是有效电荷.Gor'kov由BCS理论发现$m^* = 2m$,即是电子质量的两倍,而$q = -2e$,也就是一对电子的电荷,实际上就是Cooper对的电荷,$\Psi(x) \propto \langle\hat{\psi}_\uparrow(x)\hat{\psi}_\downarrow(x)\rangle$相当于实空间Cooper对算符的热力学平均值.由$\partial f_{GL}/\partial\Psi^* = 0$可得

$$\left(\frac{-1}{2m^*}(\nabla - iq\vec{A})^2 + r + u|\Psi|^2\right)\Psi = 0 \qquad (13.12)$$

而由$f_{GL}/\partial\vec{A} = 0$可得

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0\vec{j} \qquad (13.13)$$

这两个方程就是Ginzburg-Landau方程,其中电流为

$$\vec{j} = \frac{iq}{2m^*}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \frac{q^2}{m^*}\Psi^*\Psi\vec{A}. \qquad (13.14)$$

在低温下,我们知道序参量$\Psi \neq 0$,此时可设$\Psi = \Psi_0 e^{i\theta}$,$\Psi_0$为实常数,那么电流可写成

$$\vec{j} = -\frac{q\Psi_0^2}{m^*}\nabla\theta - \frac{q^2}{m^*}\Psi_0^2\vec{A}. \tag{13.15}$$

对于空间均匀的超导体,其相位θ必然与空间位置无关,即$\nabla\theta = 0$,这样我们就得到了London方程

$$\vec{j} = -\frac{q^2}{m^*}\Psi_0^2\vec{A} = -\frac{e^2}{m}\overbrace{2\Psi_0^2}^{=n_s}\vec{A}. \tag{13.16}$$

可以看到,当我们把$2\Psi_0^2$定义为超导电子密度n_s时,上述方程与London 的原始形式一致.

进一步,利用Ginzburg-Landau理论还可以说明超导体有涡旋存在时的磁通是量子化的.简单来说,我们可以把$\Psi = \Psi_0 e^{i\theta}$代入自由能密度$f_{GL}$ 可得:

$$f_{GL} = \frac{\Psi_0^2}{2m^*}(\nabla\theta - q\vec{A})^2 + r\Psi_0^2 + \frac{u}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2\mu_0}(\nabla\times\vec{A})^2. \tag{13.17}$$

在XY模型的讨论中,我们知道当存在涡旋时,相位梯度的闭合回路积分是2π的整数倍,即$\oint d\vec{l}\cdot\nabla\theta = 2\pi m$. 同时该涡旋存在时系统的能量随着系统大小对数发散,因此为了抑制这种发散,那么在远离涡旋中心时必有$\nabla\theta - \frac{q}{\hbar}\vec{A} = 0$(我们重新引入了$\hbar$),那么有

$$\Phi = \int d\vec{S}\cdot\vec{B} = \oint d\vec{l}\cdot\vec{A} = \frac{\hbar}{q}\oint d\vec{l}\cdot\nabla\theta = \frac{\hbar}{q}2\pi m = m\frac{h}{q} \tag{13.18}$$

代入$q = -2e$可得包围超导涡旋的磁场包含的磁通量Φ量子化为基本磁通$\Phi_0 = \frac{h}{e}$的$m/2$ 倍.这就是超导体体中的磁通量子化,显然这只能出现在第二类超导体中($H_{c1} < H < H_{c2}$的范围内).注意磁通量子化只有在磁场穿透超导体且形成涡旋时才成立,若只有磁场穿透而未有涡旋,那么磁通不会量子化,可以任意取值.很多时候我们也说一个超导涡旋最少可以束缚半个磁通量子.此外,Abriksov还进一步证明超导涡旋可以形成规则的阵列,例如三角晶格(Pb和Nb)和正方晶格($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$和Sr_2RuO_4)阵列.

- 1957年Bardeen,Cooper和Schrieffer建立了超导的微观理论,简称BCS理论. [7]

BCS理论是量子场论方法在凝聚态物理研究中取得的最重大成果.虽然目前发现的很多超导体其电子配对机制难以解决,然而这些材料一旦进入超导态,其绝大多数行为都可用BCS理论框架去理解.例如铜氧化物超导体其正常态和配对机制一直没有弄清,但进入超导态后可用d波配对的BCS模型解释其绝大多数超导态的实验测量结果.[8]

[7] Bohr,Heisenberg,Feynman,Einstein等的超导理论尝试都失败了.

[8] BCS 理论的一些历史可以参考BCS理论50周年纪念文集[1].



Figure 13.3: John Bardeen(1908 – 1991),Leon Neil Cooper(1930–)和John Robert Schrieffer(1931 – 2019).他们三人因提出超导电性的微观理论而荣获1972 年诺贝尔物理学奖.此外Bardeen 也因半导体的研究和二极管效应荣获1956年诺贝尔物理学奖.

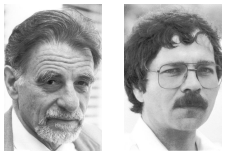


Figure 13.4: K. Alexander Müller(1927–)和J. Georg Bednorz(1950–).他们两人因在发现陶瓷材料(铜氧化物)中的超导电性所作出的突破性贡献荣获1987年诺贝尔物理学奖.

- 1976年德国Steglich组发现重费米超导体$CeCu_2Si_2$.

当Steglich组报告他们的发现时,当时的凝聚态物理专家们普遍质疑他们结果的可靠性.这主要是因为在当时,人们还普遍相信所有的超导电性都可以由经典的BCS超导理论或者强耦合的Eliashberg理论来描述.在这些传统超导理论框架内,磁性对于超导配对具有强烈的破坏作用,少量磁性杂质就可完全破坏Hg或者Pb的超导态.相反,Anderson定理[9]表明非磁性杂质对于传统超导配对的性质不会有定性的改变.对于重费米子材料,未满壳层的f电子一般会使体系显示磁性或表现强烈的磁性涨落,根据传统理解,在这类体系当中不太可能存在超导电性.这样的状况直到铜氧化物高温超导体被发现后才有根本性的改变.在铜氧化物超导体中,超导态通过对反铁磁的母体进行电子或空穴掺杂而获得,磁性被认为与超导的产生有密切的关系.

- 1986年瑞士苏黎世IBM研究实验室的Bednorz和Müller发现了铜氧化物高温超导体$La_{2-x}Ba_xCuO_4$.

铜氧化物高温超导体的发现是超导研究史上的重要标志.自此开始,电子强关联效应,规范场理论,数值模拟以及实验测量技术共同作用发展的时代终于到

[9] Gor'kov也得到了相同的结果.

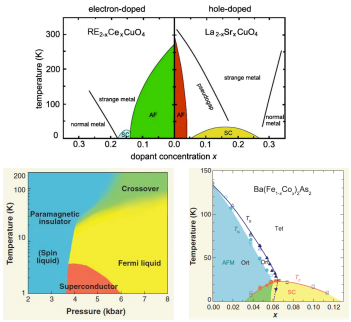


Figure 13.5: 铜氧化物,有机与铁基超导体的基本相图.铜氧化物与铁基超导相图调节电子相对于未掺杂时的浓度,有机超导体通过外加压力调节.

来.经过30 多年的研究,虽然铜氧化物超导体的所有反常性质都没有彻底解决,但却伴随其发展起来了新一代实验技术例如角分辨光电子谱,中子散射,扫描隧穿谱和强有力的数值计算方法例如量子蒙特卡洛,动力学平均场以及密度矩阵重整化群.

- 2006年日本东京工业大学Hosono(细野秀雄)团队发现了铁基超导体LaFeOP,两年后又发现了超导T_c=26K 的$LaO_{1-x}F_xFeAs$.

在铁基超导体的发现之前,超导研究人数量不断减少,很多人转行.铁基超导发现后超导再一次成为热门话题,在这当中我国超导研究者做出了相当大的贡献.不过注意到铁基体系与铜氧化物很不相同,因此其是否能对铜氧化物核心问题(例如电子配对机制,赝能隙和奇异金属态的物理起源)的理解有所帮助目前还不清楚.[10]

图13.5显示了铜氧化物,有机与铁基超导体的基本相图.这些系统通常具有强烈的准二维特性,因此电子关联效应十分重要,这导致超导临界温度以上的所谓正常态物理性质并不能用金属或者费米液体理论简单理解.例如,在铜氧化物中,通过对母体化合物进行电子或者空穴掺杂,在T_c之上可以观察到所谓的奇异金属态(strange metal)和赝能隙态(pseudogap).[3]

图13.6显示了目前普遍采用的空穴掺杂铜氧化物超导体的温度-掺杂相图.[11]可以看到在赝能隙区存在电荷密度波态(CDW),主要出现在$p = 1/8$,也就是空穴掺杂浓度大约为0.125的区域附近.虽然CDW态的成因仍有争议,不过其可看成是一类费米面重构的费米液体,因此其显示量子振荡并且满足Wiedmann-Franz定律(电导率与热导率之比为温度的线性函数且比例系数为普适常数,即$\frac{\sigma}{T\kappa} = \frac{\pi}{3}\frac{k_B^2}{e^2}$).

[10]最近人们首次在超高压力$(140 - 275GPa)$条件下的碳-硫-氢系统中观测到了室温下(最高为$287K$,即15摄氏度)的超导电性.[2]

[11][Proust,Taillefer,The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors,Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**,409(2019)]

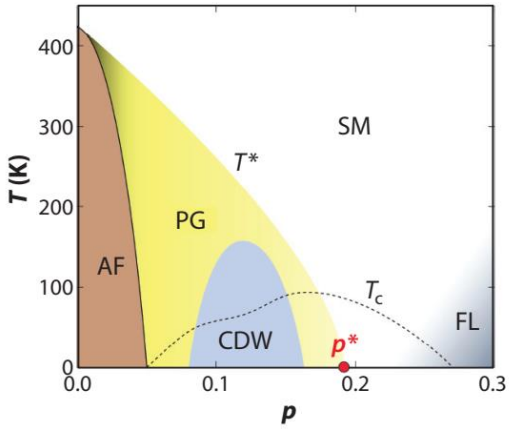


Figure 13.6: 空穴掺杂铜氧化物超导体的温度-掺杂($T-p$)相图.AF:反铁磁态;PG:赝能隙态;CDW:电荷密度波态;SM:奇异金属态;FL:费米液体态;T_c: 超导相变温度;T^*:赝能隙出现的特征温度;p^*:赝能隙消失的临界掺杂浓度.

奇异金属态的最主要特点是系统电阻从T_c到几千K的巨大温度范围内都是温度的线性函数,即$\rho(T)\sim T$,电子的散射率正比于能量或者温度.通过施加强磁场抑制超导态,人们发现低温下电阻率在相当大的范围内也会显示线性电阻行为,这说明奇异金属态可能是系统的稳定基态.对于固定的温度,电阻率的磁场依赖也显示线性,即$\rho(H)\sim H$.因此,人们可以把奇异金属态的电阻率写成明显的标度形式$\rho(T,H)=\rho_0+AT\Phi(T/H)$.赝能隙态是指系统在$T_c$以上就出现能隙,这体现在实验中发现在$T^*$以下热容的抑制,磁化率的下降以及费米能附近态密度的减少(例如费米圆弧(Fermi arc)).一般认为赝能隙的动量依赖关系与d波超导能隙近似相同但其物理本质与超导并不相同.通过抑制超导态,人们发现赝能隙随着掺杂浓度p的演化存在一个特殊点$p=p^*$,在$p<p^*$时,赝能隙存在,系统显示小费米面,霍尔系数显示的载流子浓度是p.当$p>p^*$时,赝能隙消失,体系出现大费米面,霍尔系数对应的载流子浓度是$1+p$.这样,$p=p^*$相当于一个量子临界点,其相应的临界行为表现为比热系数的发散和霍尔系数的突变. (如图13.7[12])

赝能隙态的几个基本特点(排除超导态和电荷密度波之后):

- 在$p<p^*$存在费米圆弧(反节点有能隙);
- 在$p<p^*$存在电子态密度下降(STM谱测量显示能隙类型的信号);
- 在p^*附近载流子浓度从p转变为$1+p$(霍尔系数测量);

[12][Proust,Taillefer,The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors,Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**,409(2019)]

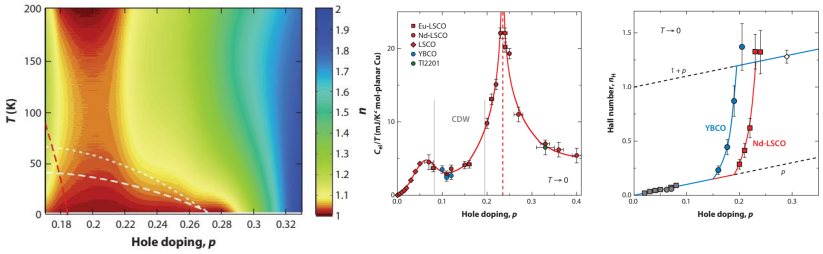


Figure 13.7: 空穴掺杂铜氧化物超导体在赝能隙消失的临界掺杂浓度p^*附近比热与霍尔系数的反常.

- Wiedmann-Franz定律成立,体系仍然是金属性的(载流子是费米子且同时参与电输运和热输运);[13]
- 零温时在$p = p^*$发生相变,有限温度下在$T = T^*$出现渡越;
- 在$p = p^*$附近显示量子临界信号($C_v \sim T \ln T, \rho(T) \sim T$).

理论上,赝能隙的起源主要有以下几种可能性:[14]

1. 由超导涨落或者正常态预先存在的Copper对所导致的配对能隙;
2. 破缺空间对称性的有序态所导致的能带折叠能隙;
3. 破缺$U(1)$电荷对称性和空间对称性的序参量所产生的杂化能隙,如配对密度波(pair density wave);
4. 与任何破缺对称性无关的Mott物理相关的谱能隙.

对于奇异金属态的起源,从实验观点来看,对于铁基超导体,一般认为其是量子临界点附近反铁磁临界涨落的直接结果,但对于空穴掺杂的铜氧化物超导体,反铁磁涨落/电荷密度波涨落/条纹相涨落在赝能隙消失的量子临界点p_c附近已经没有实质贡献.[15]因此,如果赝能隙消失临界点确实是量子相变点,那么我们

[13]这个特性似乎有争议

[14][Li,A short review of the recent progresses in the study of the cuprate superconductivity,arXiv:2103:13595]

[15][Taillefer,Scattering and Pairing in Cuprate Superconductors,Annu. Rev. Condens. Matter Phys.**1**,51(2010)]认为电荷有序是驱动赝能隙形成和量子临界的主因;[Proust,Taillefer,The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors,Annu. Rev. Condens.

目前没有发现这个相变点与任何已知的对称性破缺相关,也就是说这个相变没有找到相应的序参量,Landau相变理论在这里必然失效.目前还不存在能够完整描述铜氧化物高温超导体的低能有效理论.[16]

超导的应用

作为重要的物理现象,超导的实际应用举例为:

- 超导电缆;(超低功耗的电缆)
- 超导量子干涉仪;(测量微小磁场变化)
- 超导磁悬浮列车;(低阻力高速列车)
- 科学研究和医院使用的核磁共振仪;(精密探测物质或人体结构变化)

既然超导有不少实际应用,那么一个现实的问题是如何寻找超导体/材料.对于这个问题,材料学家Matthias在1954年给出一个经验规则:

1. High symmetry is best;
2. Peak in DOS is good;
3. Stay away from oxygen;
4. Stay away from magnetism;
5. Stay away from insulators;
6. Stay away from theorist.

然而,事实证明Matthias规则虽然在常规超导体[17]中适用,但在铜氧化物,铁基等新发现的超导材料面前都不正确.从后面会详细讨论的BCS理论出发可自然地理解Matthias规则$1-5$,但对铜氧化物等超导体,BCS理论并非正确的出发点因而偏离规则的现象亦是自然. [18] 可以形象地说,目前新超导材料尤其是高临界温度

Matter Phys. **10**,409(2019)]放弃了电荷序起主导作用的想法;[Hussey,Buhot,Licciardello,A tale of two metals: contrasting criticalities in the pnictides and hole-doped cuprates,Rep. Prog. Phys. **81**,052501(2018)]比较了铁基和铜基超导在热力学和输运性质上的差异,作者认为两者的量子临界性完全不同.

[16]同时包括巡游电子和局域电子(磁矩)自由度的唯象理论可能是一个突破点.(例如自旋-费米子模型[Millis,Monien,Pines,Phenomenological model of nuclear relaxation in the normal state of $YBa_2Cu_3O_7$,Phys.Rev.B **42**,167(1990);Abanov,Chubukov,Schmalian, Quantum-critical theory of the spin-fermion model and its application to cuprates: Normal state analysis,Advances in Physics **52**,119(2003);Berg,Metlitski,Sachdev,Sign-Problem-Free Quantum Monte Carlo of the Onset of Antiferromagnetism in Metals,Science **338**,1606(2012)])

[17]例如Hg为代表的元素超导和Nb_3Ge为代表的合金超导

[18]2018年在转角双层石墨烯里面发现的超导也被认为不能用传统BCS理论机制解释.[4]

超导体的搜索有些类似欧洲中世纪的炼金术,依赖于强烈的直觉和经验,没有特别靠谱的理论指导和原则.

在当前这个拓扑主导的凝聚态物理研究时代,超导研究也不免俗,我们根据超导系统是否具有非平凡拓扑结构可把超导体分类为拓扑平凡超导体和拓扑超导体.在BCS 理论框架下,拓扑超导体指的是超导基态波函数(BCS型波函数)在参数空间(典型的是动量空间)具有非平凡结构,通常可用取值为整数的拓扑不变量加以表征.

当前超导理论的困难

虽然新的超导体,特别是$T_c > 40$K的超导材料不断被发现,但是我们关于这些体系为何超导的理论理解却很肤浅,因此虽然文献中有数以万计的论文致力于解释这些材料超导的起源,甚至很多作者声明已经解决了部分体系的超导问题或者成功预言了超导电性,但客观的说,至今没有任何公认的理论框架或者模型可以真正描述实际系统的超导特性和正常态的反常行为.

让我们回答一个更为简单的问题,即什么样的理论是一个真正的或者成功的超导理论?这个问题的答案实际上参考BCS 理论就可得到回答:

- 首先,作为一个超导理论,必须回答电子如何超导,也就是发生电子配对的原因为何.BCS理论中电子配对的来源是通过交换声子诱导的电子-电子之间的有效吸引相互作用.

- 其次,根据电子配对的机制,应当可以得到电子配对的具体结构并且计算得到的热力学,电子谱,光学和电磁学性质应与实验一致或能预言新的实验信号.BCS 理论发现电子配对的内部波函数是各向同性的s波,热容在T_c附近显示热力学相变的奇异性,低温下是温度的指数抑制型函数,电子隧穿谱,光学电导具有明显的能隙结构,磁化率(Knight位移)测量在T_c处下降,核磁共振在T_c附近有尖峰行为,同位素效应显著.这些理论结果与当时所有的实验都良好符合.

- 进一步,T_c以上的正常态性质也由同样的理论框架得以理解.BCS理论在T_c以上可以看作是自由费米气体,其基本物理性质与常规超导体的测量定性一致.

- 最后,可以预言或者解释新的实验现象.BCS理论提出后,实验上很快发现了约瑟夫森效应,这个超导体独有的电子对隧穿效应可以用BCS理论得到完美的解释.

对于任何严肃的超导理论,以上这些要求都必须满足,但实际上,目前的超导理论很难满足第三和第四个要求,也就是它们基本上无法解释正常态的物理性质,更不能用来理解和预言新的现象.需要说明的是,一个系统一旦进入超导态,其绝大多数超导态的性质都与其正常态无关,(很多时候可以用唯象的BCS模型描述)也

就是说不同配对机制只要得到相同的超导配对结构,那么剩下的超导物性是基本独立于何种配对机制的,这实际上表明通过超导态的研究并不能很好的反推出导致电子配对的原因.因此三十多年的实验数据积累仍然无法重构出铜氧化物超导体中电子配对的起源.

在铜氧化物研究的早期,反铁磁自旋涨落理论和共振价键理论都预言了电子配对的d波结构,然而这并不能说明理论的正确性,原因是这些理论都不能正确描述前面提到的奇异金属态和赝能隙态,[19]更不用说这些理论解释后面发现的电荷有序态和条纹态.

- 因此,从目前的超导理论研究来看,我们距离一个能够描述铜氧化物,铁基超导或者重费米子超导电性的靠谱的超导理论框架还十分遥远,当前任何号称是超导理论的理论都不是可靠的超导理论.

最后,我们以David Pines总结的为何是Bardeen而不是其他伟大物理学家,能够成功解决常规超导问题做为这一部分的结束:

- 首先,通过阅读和私下交流关注于实验结果;
- 发展能够综合不同实验结果的唯象描述;
- 探索可选的物理图像和数学描述而不是执着于特定的一个;
- 热力学和其他宏观讨论先于微观计算;
- 关注于物理上的理解而非数学上的优雅性,使用最简单的数学描述;
- 紧跟理论技术的新进展,其中一个可能有用;
- 面对问题的解决,确定一个模型哈密顿量或波函数是倒数第二次序的事情;
- 选择正确的合作者;
- 不要放弃,关注问题直到其被解决.

[19]通过分析多腿阶梯模型,Yang-Rice-Zhang提出了一个基于RVB思想的赝能隙态的唯象理论.[5]

拓扑平凡的超导:从Cooper开始

Cooper不稳定性

在1956年的秋天,伊利诺伊州立大学香槟分校教授John Bardeen的博士后Leon Cooper[20]在经历用Feynman图和泛函积分技术尝试和搜寻Schiff 书并不成功后,[21]求解了超导问题中最重要的热身问题,即Cooper不稳定性问题.通过考虑金属中费米面上的两个电子,Cooper发现任意弱的电子–电子吸引相互作用总会诱导两粒子束缚态使得费米面不稳定.[22]

现在,让我们重新考虑Cooper当年思考的问题.考虑费米面外的两个电子r_1和r_2,相互作用是$V(r_1-r_2)$且与自旋无关,进一步假定这两个电子与费米球内电子没有相互作用,那么两电子系统的哈密顿量是

$$H=-\frac{\nabla_1^2+\nabla_2^2}{2m}+V(r_1-r_2) \tag{13.19}$$

先把电子坐标换为质心坐标$R=(r_1+r_2)/2$与相对坐标$r=r_1-r_2$

$$\nabla_1=\frac{\partial}{\partial r_1}=\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial R}{\partial r_1}+\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial r_1}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial R}+\frac{\partial}{\partial r} \tag{13.20}$$

$$\nabla_2=\frac{\partial}{\partial r_2}=\frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial R}{\partial r_2}+\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial r_2}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial R}-\frac{\partial}{\partial r} \tag{13.21}$$

$$\nabla_1^2+\nabla_2^2=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial R^2}+2\frac{\partial^2}{\partial r^2} \tag{13.22}$$

这样两电子系统的哈密顿量写为

$$H=-\frac{1}{4m}\frac{\partial^2}{\partial R^2}-2\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+V(r) \tag{13.23}$$

这样我们发现质心运动与相对运动分离,且质心部分是自由运动,系统波函数可写为

$$\Psi(r_1,r_2)=\Psi(R,r)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}}\psi(r) \tag{13.24}$$

对应的本征方程是

$$H\Psi=E\Psi\Rightarrow\left[-2\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+V(r)\right]\psi(r)=\left(E-\frac{q^2}{4m}\right)\psi(r) \tag{13.25}$$

对相对运动波函数以及相互作用势做傅丽叶变换可得

$$\psi(r)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikr}g(k) \tag{13.26}$$

$$V(r)=\sum_{k'}e^{ik'r}V_{k'} \tag{13.27}$$

[20]当时Bardden 给很多人包括李政道和杨振宁写信寻找具备当时最时尚理论技术(即Feynman图,重整化以及泛函/路径积分)的年轻人,然后毫无超导基础的Cooper就加入了Bardeen的小组.

[21]Feynman用微扰论研究后指出成功的理论必须超越微扰层次.

[22]Cooper最早尝试从N电子的多体问题出发,但很显然并不成功.

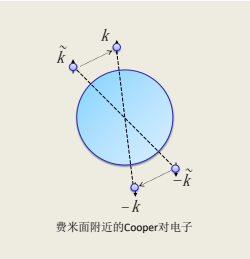


Figure 13.8: 费米面附近的Cooper对电子,这里显示自旋单重态配对.

$$\sum_k \left(2\frac{k^2}{2m} - E + \frac{q^2}{4m}\right) e^{ikr} g(k) + \sum_{k,k'} e^{i(k+k')r} g(k) V_{k'} = 0 \tag{13.28}$$

令$k + k' = \tilde{k}$,则有$k' = \tilde{k} - k$

$$\sum_k \left(2\frac{k^2}{2m} - E + \frac{q^2}{4m}\right) e^{ikr} g(k) + \sum_{k,\tilde{k}} e^{i\tilde{k}r} g(k) V_{\tilde{k}-k} = 0 \tag{13.29}$$

让我们交换上式右边的k与$\tilde{k}$,可得

$$\sum_k \left(2\frac{k^2}{2m} - E + \frac{q^2}{4m}\right) e^{ikr} g(k) + \sum_{k,\tilde{k}} e^{ikr} g(\tilde{k}) V_{k-\tilde{k}} = 0 \tag{13.30}$$

这样整理可得

$$\sum_k \left[\left(2\frac{k^2}{2m} - E + \frac{q^2}{4m}\right) g(k) + \sum_{\tilde{k}} V_{k-\tilde{k}} g(\tilde{k})\right] e^{ikr} = 0 \tag{13.31}$$

$$\left(2\frac{k^2}{2m} - E + \frac{q^2}{4m}\right) g(k) + \sum_{\tilde{k}} V_{k-\tilde{k}} g(\tilde{k}) = 0 \tag{13.32}$$

引入相对于费米面的单电子能量$\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m} - E_F$,则上式简化为

$$\left(2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}\right) g(k) + \sum_{\tilde{k}} V_{k-\tilde{k}} g(\tilde{k}) = 0 \tag{13.33}$$

在Cooper的原始处理中,他假定了一个模型相互作用势:

$$V_{k-\tilde{k}} = \left\{ \begin{array}{c} -\frac{g}{V}, \quad 0 < \varepsilon_k, \varepsilon_{\tilde{k}} < \omega_c \\ 0, \quad otherwise \end{array} \right\} \tag{13.34}$$

也就是说只有在费米能以上能量为ω_c的薄层内电子才会感受到吸引相互作用.这个假定与我们刚开始考虑的费米面外电子的要求相符合.

在这个模型势近似下,我们得到

$$\left(2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}\right) g(k) - \frac{g}{V}\sum_{\tilde{k}} g(\tilde{k}) = 0 \tag{13.35}$$

$$g(k) = \frac{1}{\left(2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}\right)} \frac{g}{V}\sum_{\tilde{k}} g(\tilde{k}) \tag{13.36}$$

两边对k求和后得到

$$\sum_k g(k) = \frac{g}{V}\sum_k \frac{1}{\left(2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}\right)} \sum_{\tilde{k}} g(\tilde{k}) \tag{13.37}$$

如果对$g(k)$的求和$C = \sum_k g(k)$不为零,那么两边可以同时除以这个因子得到(波函数傅里叶分量是$g(k) = \frac{gC}{V}\frac{1}{2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}}$)

$$1 = \frac{g}{V}\sum_k \frac{1}{2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}} \tag{13.38}$$

也即有

$$\boxed{1 = \frac{g}{V}\sum_k \frac{1}{2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}}} \tag{13.39}$$

求和换为积分并考虑常数态密度,有

$$1 = gN(0)\int_0^{\omega_c} d\varepsilon \frac{1}{2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}} = \frac{gN(0)}{2}\ln\frac{2\omega_c + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}}{2E_F - E + \frac{q^2}{4m}} \tag{13.40}$$

这样得到

$$E = 2E_F + \frac{q^2}{4m} - \left(2\omega_c + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}\right) e^{-\frac{2}{gN(0)}} \tag{13.41}$$

在弱耦合极限下$gN(0) << 1$,这表明上式右边是小量,$E \to 2E_F + \frac{q^2}{4m}$,得到

$$E \approx 2E_F + \frac{q^2}{4m} - 2\omega_c e^{-\frac{2}{gN(0)}} \tag{13.42}$$

这就是两电子系统的本征能量.注意到如果两电子的质心动量为零$q = 0$,那么这个本征能量便小于两个电子自由时候的能量$2E_F$,也就是会有一个束缚态产生.因此体系的最小能量是

$$\boxed{E_{min} = 2E_F - 2\omega_c e^{-\frac{2}{gN(0)}} < 2E_F} \tag{13.43}$$

注意到束缚能对相互作用g非解析,意思是不能展开成g的泰勒级数形式,换句话说,对g微扰计算不会成功,这就是超导电子配对问题的非微扰性.

到这里我们还没有考虑电子自旋自由度的影响.首先,对于自旋无关的相互作用,自旋部分波函数可以是三重态$|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$, 也可以是单重态$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)$. 由于两电子总波函数的反对称性,当电子自旋波函数是单重态时,空间部分对称,这要求 $\psi(r) = \psi(-r)$.此时相应的傅里叶系数有如下关系:

$$\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikr}g(k) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{-ikr}g(k) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{ikr}g(k) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\tilde{k}} e^{i\tilde{k}r}g(-\tilde{k}) \tag{13.44}$$

对比两边系数得到$g(k) = g(-k)$.[23]

我们知道最小能量束缚态(E_{min})对应质心动量为零,[24]并且两个电子自旋是处于单重态,换句话说,在(无论多小的)吸引相互作用存在的情况下,自旋相反(并不是两个电子得自旋反铁磁排列而是形成总自旋为零的自旋单重态,所以自旋相反的说法并不严格),动量相反的电子会倾向于配成对而使体系能量降低.这个自旋相反,动量相反的电子对就是著名的Cooper对.

费米面的作用:如果没有费米面,那么对动量的求和将会求至无穷,这意味着束缚态解依赖于相互作用与体系维度的细节,并不能导致配对这种一般性的不稳定性,换句话说费米面存在降低了束缚态出现的条件,只要有吸引相互作用就可以,无需考虑过多的微观细节.从这个意义上说,具有费米面的费米子系统总是具有配对不稳定性.

非常规Cooper配对*

自铜氧化物高温超导体发现以来,越来越多的超导体显示出非s波配对的特性,通常把非s 波配对称为非常规配对,也就是配对相互作用与电子的动量有关. 而在原始理论中,已经假定$V_{k-\tilde{k}}$与动量无关,是s波配对相互作用.在实验上,超导配对对称性的确定通常需要综合不同实验手段的结果加以整体考虑.一般常见的测量量有热容,磁场穿透深度,隧穿谱,核磁共振,超声衰减,光电导以及光电子谱.但是绝大多数的测量都不能准确分辨配对对称性的相位特性,只有少量实验,例如相位敏感的Josephson结可以较为明确地给出相位信息.铜氧化物的d波配对对称性通过分析相位敏感实验而得到最终确认.

当讨论非常规配对时,为简单起见,我们假定相互作用势可分离为

$$V_{k-\tilde{k}} = -\frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{\tilde{k}} \tag{13.45}$$

[23]在自旋三重态情况下,相对运动波函数满足$\psi(r) = -\psi(-r)$, 这要求$g(k) = -g(-k)$.这样在三重态情况下$C = \sum_k g(k) = 0$,这样上面所有结果都没有意义,也就是说,这里得到的两电子束缚态只对单重态成立.因此,为了得到有意义的三重态解,我们一般需要自旋明确依赖的相互作用.

[24]在磁场下,最小能量束缚态的质心动量可以非零,此时形成的超导态配对电子有非零的总动量,这种超导态称为Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov超导态,简称FFLO 态.目前在超冷费米气体和磁性超导体中存在FFLO 态的证据.

那么有(只考虑零动量配对态)[25]

$$(2\varepsilon_k + 2E_F - E)\, g(k) - \frac{g}{V}\gamma_k \sum_{\tilde{k}} \gamma_{\tilde{k}} g(\tilde{k}) = 0 \tag{13.46}$$

令$\tilde{C} = \sum_{\tilde{k}} \gamma_{\tilde{k}} g(\tilde{k})$并且两边乘以$\gamma_k$,再对$k$积分消掉 $\tilde{C}$有

$$1 = \frac{g}{V} \sum_k \frac{\gamma_k^2}{2\varepsilon_k + 2E_F - E} \tag{13.47}$$

一般,我们称$\gamma_k = \cos k_x - \cos k_y$为$d_{x^2-y^2}$波, $\gamma_k = \cos k_x + \cos k_y$为$s^{+-}$或各向异性$s$波,$\gamma_k = \sin k_x, \sin k_y$为$p$波. 注意到,在三重态的情况下,$\tilde{C} = \sum_{\tilde{k}} \gamma_{\tilde{k}} g(\tilde{k})$在p波情况下并不为零,也就是说电子的三重配对可能出现在p波通道,有时候我们也说p波配对的是自旋三重态的电子.

我们也看到

$$g(k) = \frac{g}{V}\tilde{C}\frac{\gamma_k}{2\varepsilon_k + 2E_F - E} \tag{13.48}$$

换句话说,相互作用(尤其是γ_k因子)决定电子波函数的行为,在超导研究中,一般也叫做配对相互作用决定超导行为本身.

我们还发现,对于这里的各向异性配对,并不要求配对相互作用总是吸引的,对于$V_{k-\tilde{k}} = -\frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{\tilde{k}}$,由于因子$\gamma_k$ 的动量依赖,有些区域相互作用是吸引的,另一些则是排斥的,只要总的效果是吸引的,那么配对总会发生.

- 既然两个电子可以在吸引相互作用下形成Cooper对,那么更多电子的情况如何呢?这就是BCS理论所回答的问题.

在Cooper对的讨论中,我们并没有说明吸引相互作用的来源,而显然直接的Coulomb相互作用是排斥的,那么到底吸引作用来自于什么?这就是超导配对的机制问题,这是所有超导研究的核心.对于传统的金属与合金超导体,BCS 理论的答案是声子诱导电子配对,但是对于这三十年来不断发现的新材料,人们一般认为是电子−电子相互作用导致了配对.但是到底哪种机制导致铜氧化物,铁基超导,重费米子等系统的电子配对,目前并没有答案,这仍然是物理学研究的最重要问题之一.

[25]如果考虑非零动量配对态,那么其将对应所谓的对密度波态(pair density-wave(PDW)),这可能有助于理解欠掺杂铜氧化物,Kagome 金属或者过渡金属硫化物的反常性质.当考虑这里的Cooper对问题时,我们可以选取配对势为$V_{k-\tilde{k}}(q) = -\frac{g}{V} f_{k,q} f_{\tilde{k},q}$,$f_{k,q} = (\gamma_{k+q/2} + \gamma_{k-q/2})/2$.同时电子的能量分别是$\varepsilon_{k+q/2}, \varepsilon_{k-q/2}$,所得的方程是$1 = \frac{g}{V}\sum_k \frac{f_{k,q}^2}{\varepsilon_{k+q/2}+\varepsilon_{k-q/2}+2E_F-E}$.关于对密度波Cooper对问题和BCS型变分波函数的计算可以参考文献[Setty et al.,Exact solution for finite center-of-mass momentum Cooper pairing,arXiv:2209.10568]其核心结果是只有当非常规配对的强度g大于某个临界值时$q \neq 0$的有限动量解(对密度波)才会压倒$q = 0$的平凡解而成为稳定解.

BCS超导的平均场理论:Bardeen-Cooper-Schrieffer的成功

Cooper的讨论说明费米面附近两个电子在吸引作用下可以配对,但真实情况是我们需要考虑费米面附近几乎无穷多的电子在吸引相互作用下的困难多体问题.Cooper 认为我们需要寻找相应的多电子波函数,这个波函数最终由Bardeen的研究生Schrieffer所捕获,即后来的BCS基态波函数.

在这一部分,我们将考虑超导配对的一个有效平均场处理.历史上,超导平均场理论最早的形式归功于Lev Gor'kov,他对Green函数运动方程做平均场近似,等价于直接在哈密顿量中对电子对算符做平均.而BCS原始论文中则从BCS变分波函数出发处理基态和激发态,这与平均场计算等价,我们将从平均场近似的角度来讨论.

现在,考虑如下模型配对哈密顿量,即著名的BCS哈密顿量:

$$\boxed{\hat{H}=\sum_{k\sigma}(\varepsilon_k-\mu)\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k,k'}V_{k,k'}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}} \tag{13.49}$$

假定配对势$V_{k,k'}$是可分离动量依赖的形式,即

$$V_{k,k'}=-\frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{k'},\quad g>0 \tag{13.50}$$

则哈密顿量可以写为

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}(\varepsilon_k-\mu)\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}-\frac{g}{V}\left(\sum_k\gamma_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}\right). \tag{13.51}$$

在上一节的讨论中,我们已经知道任意弱的吸引相互作用会导致电子配对(Cooper对),即$\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}$在体系的基态下应该有不为零的取值,如果定义Cooper对算符:

$$\hat{b}^\dagger_k=\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}, \tag{13.52}$$

那么哈密顿量可写为(设$\varepsilon_k=\varepsilon_{-k}$)

$$\hat{H}_b=\overbrace{\sum_{k\in S_1}\varepsilon_k(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k\downarrow})}^{\hat{H}_1}+\overbrace{\sum_{k\in S_2}2(\varepsilon_k-\mu)\hat{b}^\dagger_k\hat{b}_k-\frac{g}{V}\sum_{k,k'\in S_2}\gamma_k\gamma_{k'}\hat{b}^\dagger_k\hat{b}_{k'}}^{\hat{H}_2}. \tag{13.53}$$

这里S_1指的是$k,\uparrow$电子与$-k,\downarrow$电子仅有其中一个被占据而S_2指的是两者都被占据.因此S_1,S_2分别是不同的子空间这样$\hat{H}_1,\hat{H}_2$退耦.(此时的本征态是两者的直积)

计算不同动量构成的Cooper对算符的对易关系会发现

$$[\hat{b}_k,\hat{b}^\dagger_{k'}]=\delta_{k,k'}(\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{-k'\downarrow}+\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k'\uparrow})=\delta_{k,k'}(2-\hat{n}_k),\quad \hat{n}_k=\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow} \tag{13.54}$$

这表明,不同动量的Cooper对彼此之间可以看成玻色子,仅当动量相同时显示费米子特性.注意到玻色子可以出现玻色凝聚,这样我们期待$\langle\hat{b}_k\rangle \neq 0$.这提示我们如果做平均场近似,那么配对型的平均$\langle\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\rangle = \langle\hat{b}^\dagger_k\rangle$ 应取非零值.

- 需要指出,如果$\gamma_k = 1$,也就是s波对配势的情况,那么BCS哈密顿量$\hat{H}_b$可以精确求解而无需涉及平均场近似.通常我们也把这类可解的BCS 配对模型称为Richardson-Gaudin模型,其精确求解的过程等价于一维量子多体系统求解所采用的Bethe ansatz方法,有趣的是当电子数足够多时精确解将会接近下面讨论的平均场解.[26]

  这样,配对相互作用的平均场近似如下所示

$$\begin{aligned}
&\left(\sum_k \gamma_k \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\right)\left(\sum_{k'} \gamma_{k'}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}\right) = \left(\sum_k \gamma_k \hat{b}^\dagger_k\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\hat{b}_{k'}\right)\\
&\approx \left(\sum_k \gamma_k\langle\hat{b}^\dagger_k\rangle\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\hat{b}_{k'}\right) + \left(\sum_k \gamma_k\hat{b}^\dagger_k\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\langle\hat{b}_{k'}\rangle\right) - \left(\sum_k \gamma_k\langle\hat{b}^\dagger_k\rangle\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\langle\hat{b}_{k'}\rangle\right)\\
&= \left(\sum_k \gamma_k\langle\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\rangle\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}\right) + \left(\sum_k \gamma_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\langle\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}\rangle\right)\\
&- \left(\sum_k \gamma_k\langle\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\rangle\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\langle\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}\rangle\right)
\end{aligned} \tag{13.55}$$

定义超导配对能隙函数Δ_k为如下平均

$$\Delta_k = \Delta\gamma_k = -\frac{g}{V}\gamma_k\sum_{k'}\gamma_{k'}\langle\hat{b}_{k'}\rangle = -\frac{g}{V}\gamma_k\sum_{k'}\gamma_{k'}\langle\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}\rangle \tag{13.56}$$

那么平均场哈密顿量是

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma}(\varepsilon_k-\mu)\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \sum_k\left(\Delta_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} + \Delta^*_k\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 \tag{13.57}$$

定义相对于化学势的单电子能量$\xi_k = \varepsilon_k - \mu$并改写哈密顿量有

$$\boxed{\hat{H} = \sum_k \xi_k(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow} - \hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}) + \sum_k\left(\Delta_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} + \Delta^*_k\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k\xi_k} \tag{13.58}$$

[26] [Richardson,A restricted class of exact eigenstates of the pairing-force Hamiltonian,Physics Letters **3**,277(1963);Asorey,Falceto,Sierra,Chern – Simons theory and BCS superconductivity,Nuclear Physics B **622**,593 (2002)]

现在,让我们对这个哈密顿量做时间反演操作,那么其结果是对哈密顿量中的系数取复共轭,而算符则有$\hat{c}_{k,\sigma} \to \sigma \hat{c}_{-k,-\sigma}$,这样变换后的哈密顿量为

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \sum_k \xi_k^*(\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k\downarrow} - \hat{c}_{-k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\uparrow}) - \sum_k \left(\Delta_k^* \hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow} + \Delta_k \hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}_{-k\downarrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k^* \\ &= \sum_k \xi_k^*(\hat{c}^\dagger_{-k\uparrow}\hat{c}_{-k\uparrow} - \hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}) + \sum_k \left(\Delta_k^* \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} + \Delta_k \hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k^* \\ &= \sum_k \xi_{-k}^*(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow} - \hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}) + \sum_k \left(\Delta_k^* \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} + \Delta_k \hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k^*\end{aligned}$$

同时,注意到$\hat{H}$的厄密性要求$\xi_k = \xi_k^*$,这样

$$\hat{H}' = \sum_k \xi_{-k}(\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow} - \hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}) + \sum_k \left(\Delta_k^* \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} + \Delta_k \hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k.$$

因此,若系统具有时间反演不变性就要求

$$\xi_{-k} = \xi_k, \quad \Delta_k^* = \Delta_k \tag{13.59}$$

也就是单电子能量ξ_k满足空间反演对称而配对函数Δ_k是实函数.对于时间反演不变的配对态,$\Delta_k^* = \Delta_k$,也就是配对函数是实数,这对应于前面提到过的s, p, d波态,而对于$p + ip, d + id$这类时间反演破缺的配对,显然配对函数不是实数.在下面的讨论中我们假定电子的单粒子能谱ξ_k具有空间反演对称以简化讨论.

- 考虑空间反演操作,那么$\hat{c}_{k,\sigma} \to (-1)^l \hat{c}_{-k,\sigma}$,这里$l$代表电子的轨道角动量.体系哈密顿里在空间反演后变为 $\hat{H}' = \sum_k \xi_k(\hat{c}^\dagger_{-k\uparrow}\hat{c}_{-k\uparrow} - \hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}) + \sum_k \left(\Delta_k \hat{c}^\dagger_{-k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow} + \Delta_k^* \hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}_{-k\uparrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k$,要求空间反演不变($\hat{H} = \hat{H}'$)得到$\xi_k = \xi_{-k}, \Delta_k = \Delta_{-k}$.这说明如果体系破坏空间反演不变性,那么这两个条件至少有一个不满足.我们通常把不具有空间反演不变性的超导称为非中心对称超导(noncentrosymmetric superconductor).

- 非中心对称超导最大的特点是超导配对可以是单重态和三重态配对的混合,这导致这类超导出现非平凡的磁电效应和表面态.[27]

Bogoliubov变换

为进一步处理,我们把哈密顿量写成矩阵形式:

$$\hat{H} = \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} & \hat{c}_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} \\ \hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} \end{pmatrix} + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k. \tag{13.60}$$

[27]进一步的细节可以参考[Yip,Noncentrosymmetric Superconductors,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **5**,15(2014)]

对于这里费米子的二次型形式,其可以通过正则变换实现哈密顿量的对角化.这里所用到的正则变换就是著名的费米子的Bogoliubov变换,其本质是一个2×2幺正变换矩阵:[28]

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k \\ \hat{\beta}_k^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_k & \nu_k \\ -\nu_k^* & \mu_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} \\ \hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \tag{13.61}$$

为了使得变换后的费米子$\hat{\alpha},\hat{\beta}$满足费米子的标准反对易关系,我们发现

$$\begin{aligned}
&[\hat{\alpha}_k,\hat{\alpha}_{k'}^\dagger]_+ = \hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_{k'}^\dagger + \hat{\alpha}_{k'}^\dagger\hat{\alpha}_k \\
&= (\mu_k\hat{c}_{k\uparrow}+\nu_k\hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger)(\mu_{k'}^*\hat{c}_{k'\uparrow}^\dagger+\nu_{k'}^*\hat{c}_{-k'\downarrow}) + (\mu_{k'}^*\hat{c}_{k'\uparrow}^\dagger+\nu_{k'}^*\hat{c}_{-k'\downarrow})(\mu_k\hat{c}_{k\uparrow}+\nu_k\hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger) \\
&= \mu_k\mu_{k'}^*\overbrace{[\hat{c}_{k\uparrow},\hat{c}_{k'\uparrow}^\dagger]_-}^{=\delta_{k,k'}} + \mu_k\nu_{k'}^*\overbrace{[\hat{c}_{k\uparrow},\hat{c}_{-k'\downarrow}]_-}^{=0} + \nu_k\mu_{k'}^*\overbrace{[\hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger,\hat{c}_{k'\uparrow}^\dagger]_-}^{=0} + \nu_k\nu_{k'}^*\overbrace{[\hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger,\hat{c}_{-k'\downarrow}]_-}^{=\delta_{k,k'}} \\
&= (|\mu_k|^2+|\nu_k|^2)\delta_{k,k'},
\end{aligned} \tag{13.62}$$

因此只要$|\mu_k|^2+|\nu_k|^2=1$,$\hat{\alpha},\hat{\beta}$便是标准的费米子算符.此外,既然系统具有空间反演对称,那么应该有$\mu_k=\mu_{-k},\nu_k=\nu_{-k}$.这样,利用Bogoliubov变换可把电子算符$\hat{c}$变换为费米型的Bogoliubov准粒子算符$\hat{\alpha},\hat{\beta}$.剩下的任务便是具体算出变换系数$\mu_k,\nu_k$并同时对角化哈密顿量.

为便于讨论,让我们引入Nambu的旋量记号,即

$$\hat{\psi}_k \equiv \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} \\ \hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \hat{\tilde{\psi}}_k \equiv \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k \\ \hat{\beta}_k^\dagger \end{pmatrix} \tag{13.63}$$

同时Bogoliubov变换矩阵用$\hat{U}_k$表示,

$$\hat{U}_k = \begin{pmatrix} \mu_k & \nu_k \\ -\nu_k^* & \mu_k^* \end{pmatrix} \tag{13.64}$$

那么系统哈密顿量简写为

$$\hat{H} = \sum_k \hat{\psi}_k^\dagger\hat{h}_k\hat{\psi}_k + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k \tag{13.65}$$

这里

$$\hat{h}_k = \begin{pmatrix} \xi_k & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -\xi_k \end{pmatrix}, \quad \hat{\psi}_k^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-k\downarrow} \end{pmatrix}. \tag{13.66}$$

现在,让我们对上述哈密顿量进行Bogoliubov变换,则

$$\sum_k \hat{\psi}_k^\dagger\hat{h}_k\hat{\psi}_k = \sum_k (\hat{\psi}_k^\dagger\hat{U}_k^{-1})(\hat{U}_k\hat{h}_k\hat{U}_k^{-1})(\hat{U}_k\hat{\psi}_k) = \sum_k \hat{\tilde{\psi}}_k^\dagger(\hat{U}_k\hat{h}_k\hat{U}_k^{-1})\hat{\tilde{\psi}}_k \tag{13.67}$$

[28] 一般的2×2幺正矩阵是$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$并满足$|a|^2+|b|^2=1$.

这样只要$\hat{U}_k\hat{h}_k\hat{U}_k^{-1}$为对角矩阵,那么我们就对角化了哈密顿量本身.记对角化后的本征值为$\pm E_k$,那么对角矩阵的要求等价于

$$E_k\hat{\sigma}_z = \hat{U}_k\hat{h}_k\hat{U}_k^{-1} \Rightarrow E_k\hat{\sigma}_z\hat{U}_k = \hat{U}_k\hat{h}_k \Rightarrow \begin{pmatrix} E_k\mu_k & E_k\nu_k \\ E_k\nu_k^* & -E_k\mu_k^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_k\xi_k + \nu_k\Delta_k^* & \mu_k\Delta_k - \nu_k\xi_k \\ -\nu_k^*\xi_k + \mu_k^*\Delta_k^* & -\nu_k^*\Delta_k - \mu_k^*\xi_k \end{pmatrix} \tag{13.68}$$

对比左右两边矩阵的系数,我们得到两个方程

$$(E_k - \xi_k)\mu_k = \Delta_k^*\nu_k \tag{13.69}$$

$$\Delta_k\mu_k = (E_k + \xi_k)\nu_k \tag{13.70}$$

这两个方程左右两边分别相除可得

$$\frac{E_k - \xi_k}{\Delta_k} = \frac{\Delta_k^*}{E_k + \xi_k} \Rightarrow E_k^2 = \xi_k^2 + |\Delta_k|^2 \Rightarrow E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2} \tag{13.71}$$

再利用第一个方程可得

$$\nu_k = \frac{E_k - \xi_k}{\Delta_k^*}\mu_k \tag{13.72}$$

把ν_k的表达式代入归一化条件$|\mu_k|^2 + |\nu_k|^2 = 1$可得

$$|\mu_k|^2 = \frac{1}{1 + \frac{(E_k - \xi_k)^2}{|\Delta_k|^2}} = \frac{1}{1 + \frac{(E_k - \xi_k)^2}{E_k^2 - \xi_k^2}} = \frac{1}{1 + \frac{E_k - \xi_k}{E_k + \xi_k}} = \frac{E_k + \xi_k}{2E_k} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right) \tag{13.73}$$

这样变换系数满足

$$|\mu_k|^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right) \tag{13.74}$$

$$|\nu_k|^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right) \tag{13.75}$$

在实际使用时,可以令μ_k为实系数

$$\mu_k = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right)} \tag{13.76}$$

那么此时ν_k一般是复数

$$\nu_k = \frac{E_k - \xi_k}{\Delta_k^*}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right)} = \frac{\sqrt{(E_k - \xi_k)^2}}{\Delta_k^*}\sqrt{\frac{E_k + \xi_k}{2E_k}} = \frac{\sqrt{E_k^2 - \xi_k^2}}{\Delta_k^*}\sqrt{\frac{E_k - \xi_k}{2E_k}} = \frac{|\Delta_k|}{\Delta_k^*}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right)} \tag{13.77}$$

因此,采用Bogoliubov变换后的对角化哈密顿量是

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_k \hat{\tilde{\psi}}_k^\dagger (E_k\hat{\sigma}_z)\hat{\tilde{\psi}}_k + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k \\ &= \sum_k \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k^\dagger & \hat{\beta}_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_k & 0 \\ 0 & -E_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k \\ \hat{\beta}_k^\dagger \end{pmatrix} + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k \\ &= \sum_k E_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k - \hat{\beta}_k\hat{\beta}_k^\dagger) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k \xi_k \\ &= \sum_k E_k(\hat{\alpha}_k^\dagger\hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger\hat{\beta}_k) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 + \sum_k (\xi_k - E_k) \end{aligned} \tag{13.78}$$

也就是两类自由费米子(Bogoliubov准粒子)的哈密顿量加上常数部分.对角化化哈密顿量所得的Bogoliubov准粒子能谱是

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}. \tag{13.79}$$

BCS超导波函数

历史上,在Cooper发现配对不稳定性之后,Bardeen,Cooper和Schrieffer花费了整整六个月的时间搜寻正确的超导基态波函数并建立起超导的微观理论.根据J. Robert Schrieffer回忆,他在听完Tomonaga研究极化子波函数的报告后,在地铁上潦草地写下了波函数并开始计算期望值,他惊讶的认识到形式很简单.(形式简单说明走在正确道路上)然后他在朋友家的下午和晚上一直在肝这个问题.终于在第二天早上,他利用变分法导出了能隙方程并求解了该方程.他写下的变分波函数就是日后大名鼎鼎的BCS波函数. [29]

我们知道凝聚态物理发展史上有三类重要的波函数,即先前提到的Bethe ansatz波函数,这里的BCS波函数以及分数量子Hall效应的Laughlin波函数.需要指出,这些波函数的提出往往不是直接推理的结果,而是连蒙带猜的产物.但这些发现无一不是对问题长期思考的结果,只不过突然在某一天顿悟,得到问题的答案.

现在,让我们来寻找BCS波函数.对于对角化后的BCS平均场哈密顿量,其基态$|\psi_{BCS}\rangle$是Bogoliubov 准粒子的真空态,即有$\hat{\alpha}_k|\psi_{BCS}\rangle = \hat{\beta}_k|\psi_{BCS}\rangle = 0$, 这个态就是BCS 超导态.既然$|\psi_{BCS}\rangle$是准粒子的真空态,那么我们可以构造如下的波函数

$$\prod_k \hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k|0\rangle \tag{13.80}$$

[29]Schrieffer在找到BCS波函数之前曾想过放弃超导话题而转做别的,这时候Schrieffer幸运地遵从了Bardeen的著名建议:"再花一个月时间继续工作,也许会发生点什么".(Give it (superconductivity) another month...keep working...maybe something will happen...)

这个波函数必定被所有准粒子湮灭算符消灭.代入$\hat{\alpha}_k, \hat{\beta}_k$的具体形式,我们得到

$$\prod_k \hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k|0\rangle = \prod_k(\mu_k\hat{c}_{k\uparrow}+\nu_k\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow})(-\nu_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}+\mu_k\hat{c}_{-k\downarrow})|0\rangle = \prod_k(-\mu_k\nu_k-\nu_k\nu_k\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow})|0\rangle \tag{13.81}$$

为了归一化,可去掉一个系数ν_k

$$\prod_k \hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k|0\rangle \sim \prod_k(\mu_k + \nu_k\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow})|0\rangle \tag{13.82}$$

这样得到BCS基态波函数(调整算符顺序并把负号吸收到ν_k的定义中)

$$\boxed{|\psi_{BCS}\rangle = \prod_k(\mu_k + \nu_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow})|0\rangle} \tag{13.83}$$

这个波函数的模是

$$\langle\psi_{BCS}|\psi_{BCS}\rangle = \langle 0|\prod_{k,k'}(\mu^*_{k'} + \nu^*_{k'}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow})(\mu_k + \nu_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow})|0\rangle \tag{13.84}$$

显然,只有$k = k'$项才有可能得到非零的值,那么

$$\begin{aligned}\langle\psi_{BCS}|\psi_{BCS}\rangle &= \prod_k\langle 0|(|\mu_k|^2 + \nu^*_k\mu_k\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow} + \mu^*_k\nu_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} + |\nu_k|^2\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow})|0\rangle \\ &= \prod_k(|\mu_k|^2 + |\nu_k|^2) = 1\end{aligned} \tag{13.85}$$

这样BCS波函数是归一化的.在Bardeen-Cooper-Schrieffer的原始论文中,他们在假设这个波函数的基础上采用变分法处理了模型配对哈密顿量,而变分参 数就是μ_k, ν_k并同时考虑化学势以固定平均电子数.毫无疑问,变分计算的结果与平均场计算一致.如果考虑BCS超导态与正常电子的费米球态$|FS\rangle = \prod_k \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|0\rangle$ 的重叠度,那么有

$$\langle\psi_{BCS}|FS\rangle = \langle 0|\prod_{k,k'}(\mu^*_{k'} + \nu^*_{k'}\hat{c}_{-k'\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow})\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|0\rangle \tag{13.86}$$

由于正常费米球态电子数是固定的,比如$2N$,在占据数表示下是$|111...11100000\rangle$,但是BCS态中粒子数并不固定,展开$|\psi_{BCS}\rangle$得到的几乎所有项由于占据粒子数与$|FS\rangle$不同,其重叠为零,只有恰好展开的态与$|FS\rangle$一样时,才恰好不为零,不过注意到还有相乘的因子$\prod_k \nu_k, ...$,那么对于一个宏观系统,由于每个ν_k小于一,则它们的大量乘积趋于零. 因此对于宏观大小的系统(或热力学极限下),BCS超导态与电子的正常态(费米球/费米气体/费米液体)正交.例如,考虑k仅有k_1, k_2两个取值的情况,此时展开BCS 波函数可得

$$\begin{aligned}|\psi_{BCS}\rangle &= (\mu_{k_1} + \nu_{k_1}\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k_1\downarrow})(\mu_{k_2} + \nu_{k_2}\hat{c}^\dagger_{k_2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k_2\downarrow})|0\rangle \\ &= \mu_{k_1}\mu_{k_2}|0\rangle + \mu_{k_1}\nu_{k_2}\hat{c}^\dagger_{k_2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k_2\downarrow}|0\rangle + \nu_{k_1}\mu_{k_2}\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k_1\downarrow}|0\rangle + \nu_{k_1}\nu_{k_2}\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k_1\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k_2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k_2\downarrow}|0\rangle\end{aligned}$$

由此,我们发现这个BCS态包括零费米子态,两费米子态以及四费米子态,这说明该BCS态粒子数并不守恒,没有明确的粒子数.进一步,对于有m个动量的BCS态,可具有的最大费米子数为2^m,在热力学极限下,BCS态具有无穷大粒子数态,这样任意确定粒子数的费米气体与BCS态的重叠度仅仅涉及有限的粒子数态,在热力学极限下这些态对重叠度的贡献趋于零.这就是BCS超导态与电子正常态的正交性.

最后,BCS波函数可以看成是玻色子体系的相干态.首先,我们改写波函数

$$\begin{aligned}|\psi_{BCS}\rangle &= \prod_k(\mu_k+\nu_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow})|0\rangle=\prod_k\mu_k(1+\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow})|0\rangle \\ &= \prod_k\mu_k e^{\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}}|0\rangle\sim e^{\sum_k\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}}|0\rangle \end{aligned} \tag{13.87}$$

然后用Cooper对算符$\hat{b}^\dagger_k=\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{-k\downarrow}$改写可得 $|\psi_{BCS}\rangle\sim e^{\sum_k\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{b}^\dagger_k}|0\rangle$. 要证明是相干态只要证明其是湮灭算符的本征态即可.

$$\hat{b}_{k'}e^{\sum_k\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{b}^\dagger_k}|0\rangle=e^{\sum_{k\neq k'}\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{b}^\dagger_k}\hat{b}_{k'}e^{\frac{\nu_{k'}}{\mu_{k'}}\hat{b}^\dagger_{k'}}|0\rangle \tag{13.88}$$

然而我们知道$[\hat{b}_k,\hat{b}^\dagger_k]=\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}+\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}$并非标准的对易关系,但是如果对BCS平均场哈密顿求热力学平均会发现上式右边是$1+\frac{\xi_k}{E_k}(1-2f_F(E_k))$.因此,若$k$在原先正常态系统的费米面上,那么对易关系成立,这样有$\hat{b}_{k'}e^{\frac{\nu_{k'}}{\mu_{k'}}\hat{b}^\dagger_{k'}}|0\rangle=\frac{\nu_{k'}}{\mu_{k'}}e^{\frac{\nu_{k'}}{\mu_{k'}}\hat{b}^\dagger_{k'}}|0\rangle$.这样有

$$\hat{b}_{k'}e^{\sum_k\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{b}^\dagger_k}|0\rangle=\frac{\nu_k}{\mu_k}e^{\sum_k\frac{\nu_k}{\mu_k}\hat{b}^\dagger_k}|0\rangle \tag{13.89}$$

这说明BCS波函数确实可近似为玻色子系统的相干态.

超导平均场方程

既然体系已经转化为两类自由费米子的哈密顿量,那么其自由能是(考虑时间反演对称情况,即Δ为实数)

$$F=\frac{V}{g}\Delta^2+\sum_k(\xi_k-E_k)-2T\sum_k\ln(1+e^{-\beta E_k}) \tag{13.90}$$

自由能对序参量,即超导配对强度Δ求极值有

$$\frac{\partial F}{\partial\Delta^2}=0\Rightarrow\frac{V}{g}-\sum_k(1-2f_F(E_k))\frac{\partial E_k}{\partial\Delta^2}=0 \tag{13.91}$$

代入$\frac{\partial E_k}{\partial\Delta^2}=\frac{\gamma_k^2}{2E_k}$可得超导的能隙方程

$$1=\frac{g}{V}\sum_k\frac{\gamma_k^2}{2E_k}\tanh\frac{E_k}{2T} \tag{13.92}$$

而总电子数密度由下式定出

$$n_c = -\frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial \mu} = -\frac{1}{V}\sum_k \left[\frac{\partial \xi_k}{\partial \mu} - (1-2f_F(E_k))\frac{\partial E_k}{\partial \mu}\right] = \frac{1}{V}\sum_k \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\tanh\frac{E_k}{2T}\right) \tag{13.93}$$

当然,也可根据电子总密度的定义来推导相应的方程

$$n_c = \frac{1}{V}\sum_k \left(\langle \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\rangle + \langle \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}\rangle\right) \tag{13.94}$$

利用Bogoliubov变换的逆变换$\hat{c}_{k\uparrow} = \mu_k\hat{\alpha}_k - \nu_k\hat{\beta}^\dagger_k, \hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} = \nu_k\hat{\alpha}_k + \mu_k\hat{\beta}^\dagger_k$

$$\langle \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\rangle + \langle \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}\rangle = \mu_k^2\langle \hat{\alpha}^\dagger_k\hat{\alpha}_k\rangle + \nu_k^2\langle \hat{\beta}_k\hat{\beta}^\dagger_k\rangle + \mu_{-k}^2\langle \hat{\alpha}^\dagger_k\hat{\alpha}_k\rangle + \nu_{-k}^2\langle \hat{\beta}_k\hat{\beta}^\dagger_k\rangle \tag{13.95}$$

利用$\mu_k = \mu_{-k}, \nu_k = \nu_{-k}$我们得到

$$\langle \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\rangle + \langle \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}\rangle = \mu_k^2\langle \hat{\alpha}^\dagger_k\hat{\alpha}_k\rangle + \nu_k^2\langle \hat{\beta}_k\hat{\beta}^\dagger_k\rangle + \mu_k^2\langle \hat{\alpha}^\dagger_k\hat{\alpha}_k\rangle + \nu_k^2\langle \hat{\beta}_k\hat{\beta}^\dagger_k\rangle = 2\nu_k^2 + 2(\mu_k^2 - \nu_k^2)f_F(E_k) \tag{13.96}$$

代入ν_k^2, μ_k^2具体形式,立即得自由能求导得到的结果.显然,对于能隙(配对)函数,也可以通过定义直接得到相应的超导能隙方程.同时,我们注意到电子的分布函数

$$\langle \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\rangle = \mu_k^2\langle \hat{\alpha}^\dagger_k\hat{\alpha}_k\rangle + \nu_k^2\langle \hat{\beta}_k\hat{\beta}^\dagger_k\rangle \tag{13.97}$$

在$T = 0$时,得到

$$\langle \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\rangle_{T=0} = \nu_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right) \tag{13.98}$$

在正常态电子的费米面上$\xi_k = 0$,电子占据数为1/2,费米面以下大于1/2,费米面以上则小于1/2,换句话说,在超导态电子在费米面上的跳变消失或准粒子权重$Z = 0$,(体系不是费米液体)即超导态与自由电子形成的正常态正交.

- 超导态与正常态(费米气体)正交,这反映了体系发生了相变,低能自由度完全重构,相变前后的波函数重叠度为零.

  无论哪种方式,我们的任务是求解两个超导平均场自洽方程:

$$1 = \frac{g}{V}\sum_k \frac{\gamma_k^2}{2E_k}\tanh\frac{E_k}{2T} \tag{13.99}$$

$$n_c = \frac{1}{V}\sum_k \left[1 - \frac{\xi_k}{E_k}\tanh\frac{E_k}{2T}\right] \tag{13.100}$$

一般而言,在给定配对形状因子γ_k,单电子色散ξ_k以及相互作用强度g后,需要数值求解以上两个方程来定出超导能隙Δ以及化学势μ. 为了进一步讨论,我们将采用一些近似来得到定性或半定量结果.

我们主要关心超导能隙方程,

$$\boxed{1 = \frac{g}{V}\sum_k \frac{\gamma_k^2}{2E_k}\tanh\frac{E_k}{2T}} \tag{13.101}$$

Gor'kov的Green函数方法*

历史上,在BCS的原始理论提出以后,铁幕另一边的俄国物理学家Gor'kov采用系统化的Green函数方法重新导出了BCS的主要结果,并由他的形式得到了Ginzburg-Landau自由能.

作为出发点,我们写出BCS配对哈密顿量的实空间形式:

$$\hat{H}=\int d^dx\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}_\sigma(x)+\int d^dx\int d^dyV(x-y)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(y)\hat{\psi}_\downarrow(y)\hat{\psi}_\uparrow(x) \tag{13.102}$$

对于BCS采用的简化相互作用,其实空间相互作用可以近似为接触相互作用,即$V(x-y)=-g\delta(x-y),g>0$.这样哈密顿量简化为

$$\hat{H}=\int d^dx\left[\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}_\sigma(x)-g\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x)\hat{\psi}_\downarrow(x)\hat{\psi}_\uparrow(x)\right] \tag{13.103}$$

为了建立关于Green函数的方程,我们首先计算四个对易关系

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}_\uparrow(x),\hat{H}]&=+\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}_\uparrow(x)-g\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x)\hat{\psi}_\downarrow(x)\hat{\psi}_\uparrow(x)\\
[\hat{\psi}_\downarrow(x),\hat{H}]&=+\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}_\downarrow(x)-g\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x)\hat{\psi}_\uparrow(x)\hat{\psi}_\downarrow(x)\\
[\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x),\hat{H}]&=-\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x)+g\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x)\hat{\psi}_\downarrow(x)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x)\\
[\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x),\hat{H}]&=-\left(-\frac{\nabla^2}{2m}+U(x)\right)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x)+g\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x)\hat{\psi}_\uparrow(x)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x)
\end{aligned}$$

由此可得($-\partial_\tau\hat{\mathcal{O}}(\tau)=[\hat{\mathcal{O}},\hat{H}]$)

$$\begin{aligned}
-\partial_\tau\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle&=+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle-g\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle\\
-\partial_\tau\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle&=-\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle+g\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle\\
-\partial_\tau\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle&=-\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle+g\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle\\
-\partial_\tau\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle&=+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle-g\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle
\end{aligned}$$

可以看到,相互作用g部分依然涉及四算符的平均,因此一般情况下并不能精确处理.Gor'kov认为既然超导出现时的主要特征是相反自旋的电子配对,那么g项中只要挑出这一贡献即可,这提示我们做近似:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle&\simeq-\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(x\tau)\rangle\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle\\
\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle&\simeq+\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x\tau)\rangle\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle\\
\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle&\simeq+\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x\tau)\rangle\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle\\
\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle&\simeq-\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(x\tau)\rangle\langle\hat{T}_\tau\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle.
\end{aligned}$$

让给我们定义Green函数:

$$\begin{aligned}
G_{\uparrow\uparrow}(x\tau,y) &= -\langle \hat{T}_\tau \hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle \\
G_{\downarrow\downarrow}(x\tau,y) &= -\langle \hat{T}_\tau \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle \\
F_{\downarrow\uparrow}(x\tau,y) &= -\langle \hat{T}_\tau \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(y)\rangle \\
F_{\uparrow\downarrow}(x\tau,y) &= -\langle \hat{T}_\tau \hat{\psi}_\uparrow(x\tau)\hat{\psi}_\downarrow(y)\rangle
\end{aligned} \tag{13.104}$$

这样我们得到Green函数的四个运动方程:

$$\begin{aligned}
\partial_\tau G_{\uparrow\uparrow}(x\tau,y) &= -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)G_{\uparrow\uparrow}(x\tau,y)+gF_{\uparrow\downarrow}(0)F_{\downarrow\uparrow}(x\tau,y) \\
\partial_\tau G_{\downarrow\downarrow}(x\tau,y) &= +\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)G_{\downarrow\downarrow}(x\tau,y)+gF_{\downarrow\uparrow}(0)F_{\uparrow\downarrow}(x\tau,y) \\
\partial_\tau F_{\downarrow\uparrow}(x\tau,y) &= +\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)F_{\downarrow\uparrow}(x\tau,y)+gF_{\downarrow\uparrow}(0)G_{\uparrow\uparrow}(x\tau,y) \\
\partial_\tau F_{\uparrow\downarrow}(x\tau,y) &= -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)F_{\uparrow\downarrow}(x\tau,y)+gF_{\uparrow\downarrow}(0)G_{\downarrow\downarrow}(x\tau,y)
\end{aligned}$$

这套实空间的方程适合于处理非均匀超导的情况,例如有杂质或系统本身是超导合金.对于均匀系统,$U(x)=0$, 我们可以做傅里叶变换得到简单的形式:

$$\begin{aligned}
(i\omega_n-\varepsilon_k)G_{\uparrow\uparrow}(k,\omega_n) &= -gF_{\uparrow\downarrow}(0)F_{\downarrow\uparrow}(k,\omega_n) \\
(i\omega_n+\varepsilon_k)G_{\downarrow\downarrow}(k,\omega_n) &= -gF_{\downarrow\uparrow}(0)F_{\uparrow\downarrow}(k,\omega_n) \\
(i\omega_n+\varepsilon_k)F_{\downarrow\uparrow}(k,\omega_n) &= -gF_{\downarrow\uparrow}(0)G_{\uparrow\uparrow}(k,\omega_n) \\
(i\omega_n-\varepsilon_k)F_{\uparrow\downarrow}(k,\omega_n) &= -gF_{\uparrow\downarrow}(0)G_{\downarrow\downarrow}(k,\omega_n)
\end{aligned}$$

令$gF_{\uparrow\downarrow}(0)=\Delta, gF_{\downarrow\uparrow}(0)=\Delta^*$, 则可解得

$$\begin{aligned}
G_{\uparrow\uparrow}(k,\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k-\frac{\Delta|^2}{i\omega_n+\varepsilon_k}} \\
G_{\downarrow\downarrow}(k,\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n+\varepsilon_k-\frac{|\Delta|^2}{i\omega_n-\varepsilon_k}} \\
F_{\downarrow\uparrow}(k,\omega_n) &= \frac{-\Delta^*}{(i\omega_n-\varepsilon_k)(i\omega_n+\varepsilon_k)-|\Delta|^2} \\
F_{\uparrow\downarrow}(k,\omega_n) &= \frac{-\Delta}{(i\omega_n-\varepsilon_k)(i\omega_n+\varepsilon_k)-|\Delta|^2}.
\end{aligned}$$

由此我们得到了四个Green函数的具体形式,同时,Δ由定义来确定:

$$\Delta = gF_{\uparrow\downarrow}(0) = T\sum_{\omega_n}\frac{g}{V}\sum_k\frac{-\Delta}{(i\omega_n-\varepsilon_k)(i\omega_n+\varepsilon_k)-|\Delta|^2} = \frac{g}{V}\sum_k\frac{\Delta}{2E_k}\tanh\frac{E_k}{2T} \tag{13.105}$$

显然,上式两边消去Δ就得到熟悉的超导能隙方程.需要指出,当空间非均匀时,超导能隙原则上是随空间位置变化的,此时我们有

$$\Delta(x) = gF_{\uparrow\downarrow}(x,x) = -g\langle \hat{T}_\tau\hat{\psi}_\uparrow(x,0^-)\hat{\psi}_\downarrow(x)\rangle = g\langle\hat{\psi}_\downarrow(x)\hat{\psi}_\uparrow(x)\rangle \tag{13.106}$$

这说明所谓的超导序参量就是Cooper对算符在实空间的统计平均值.

简单的s波超导

如果假定配对形状因子与动量无关$\gamma_k = 1(\Delta_k = \Delta)$,即考虑各向同性s波,那么方程简化为

$$1 = \frac{g}{V}\sum_k \frac{1}{2\sqrt{\xi_k^2+\Delta^2}} \tanh\frac{\sqrt{\xi_k^2+\Delta^2}}{2T} \tag{13.107}$$

把对动量的求和换为对(自由电子)态密度的积分后有

$$1 = g\int d\xi \frac{N(\xi)}{2\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} \tanh\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T} \tag{13.108}$$

假设态密度与能量近似无关$N(\xi) = N(0)$,那么有

$$1 = gN(0)\int d\xi \frac{1}{2\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} \tanh\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T} \tag{13.109}$$

在零温时$\tanh\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T}|_{T=0} = 1$,那么有

$$1 = 2gN(0)\int_0^{\omega_c} d\xi \frac{1}{2\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} \tag{13.110}$$

注意额外的因子2来源于负数区间对积分的贡献,而为保证积分的有限性,引入了能量截断ω_c.把右边的积分积出来后($\int dx\frac{1}{\sqrt{x^2+a^2}} = \ln(x+\sqrt{x^2+a^2})$),我们得到

$$\frac{1}{gN(0)} = \ln\frac{\omega_c+\sqrt{\omega_c^2+\Delta^2}}{\Delta} \Rightarrow \Delta = (\omega_c+\sqrt{\omega_c^2+\Delta^2})e^{-\frac{1}{gN(0)}} \tag{13.111}$$

在弱耦合近似下$gN(0) << 1$同时$\omega_c >> \Delta$,s波超导体的零温能隙表达式是

$$\boxed{\Delta = 2\omega_c e^{-\frac{1}{gN(0)}}} \tag{13.112}$$

注意这个结果与Cooper不稳定性中得到的两电子束缚态能量相似,即都是关于耦合强度的指数依赖,并且正比于能量截断ω_c.从本质上说,两电子束缚态降低的能量就是体系进入超导态打开的能隙.

- 在相反的强耦合极限下$gN(0) >> 1$,我们发现$\Delta = \frac{\omega_c}{gN(0)}$,这表明能隙随着耦合强度增大而减小.结合这里的强弱耦合讨论,我们能够估计超导相变温度随吸引相互作用增大而先增加后减少,这与冷原子物理中很重要的BEC-BCS渡越(crossover)现象基本一致.(如图13.9)

- 理论上,我们可以用吸引(负U)Hubbard模型$\hat{H} = -t\sum_{\langle i,j\rangle\sigma}\hat{c}_{i\sigma}^\dagger\hat{c}_{j\sigma} + U\sum_j \hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow} - \mu\sum_{j\sigma}\hat{n}_{j\sigma}$ 描述格点上电子的配对行为和相关的BEC-BCS渡越.[30]基本结

[30] 负UHubbard模型已通过光晶格实现(虽然并未看到超导配对态).[Mitra et al.,Quantum gas microscopy of an attractive Fermi‐Hubbard system,Nature Physics**14**,173(2018)]

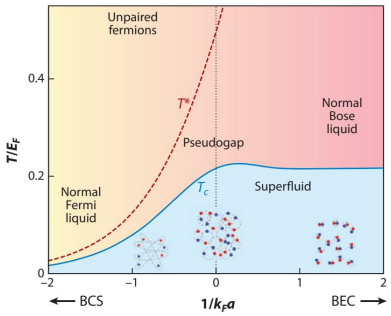


Figure 13.9: BEC-BCS渡越的定性相图,弱耦合时存在BCS超导和高温的费米液体,强耦合时低温下形成玻色凝聚而高温时存在正常玻色流体.中间耦合区超导配对涨落导致赝能隙态的出现.[7]

果是当电子相互作用比较弱时,体系高温下是费米液体,低温下显示超导配对,而当相互作用较强时,高温态是具有能隙的电子配对态,(赝能隙或者预配对(preformed pairing)态)也就是说电子在超导相变温度之上就已经发生配对,但是由于没有相干性而未进入超导态.当然,在半填满时由于电荷密度波与超导态的竞争,体系不存在超导相变.[31]

- 半满Hubbard模型中电荷密度波与超导态的竞争可以用赝自旋解释,[32]也就是定义$\hat{\eta}_j^z = \frac{1}{2}(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1), \eta_j^+ = (-1)^j \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger, \hat{\eta}_j^- = (-1)^j \hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}$.可以看到赝自旋的$z$方向分量$\hat{\eta}_j^z$代表电子密度而横向分量$\hat{\eta}_j^\pm$代表交错的电子配对.这样系统的总赝自旋可以写成$\hat{\eta}^z = \sum_j \eta_j^z, \hat{\eta}^\pm = \sum_j \eta_j^\pm$.容易证明总赝自旋满足对易关系$[\hat{H}, \hat{\eta}^\pm] = \pm(U - 2\mu)\hat{\eta}^\pm, [\hat{H}, \hat{\eta}^z] = 0$.当$\mu = U/2$,也就是半满时,赝自旋与系统哈密顿里对易,这说明体系存在赝自旋的$SU(2)$对称性.[33]若体系不存在自发破缺赝自旋对称性,那么必然有$\langle\hat{\eta}_j^z\hat{\eta}_{j+\delta}^z\rangle_c = \langle\hat{\eta}_j^x\hat{\eta}_{j+\delta}^x\rangle_c (\langle\hat{A}\hat{B}\rangle_c = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle, \hat{\eta}^x = (\eta^+ + \eta^-)/2)$.若我们定义$s$波配对算符$\hat{\Delta}_j^s = \hat{c}_\uparrow\hat{c}_\downarrow - \hat{c}_\uparrow^\dagger\hat{c}_\downarrow^\dagger$, 那么赝自旋关联函数就等价

[31]负UHubbard模型由于不存在费米子的负符号问题因而可通过行列式量子蒙特卡洛方法直接模拟低温和大尺寸下的物性,相关研究可以参考[Micnas et al.,Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions,Rev.Mod.Phys.**62**,113(1990);Kyung,Allen,Tremblay,Pairing fluctuations and pseudogaps in the attractive Hubbard model,Phys.Rev.B**64**,075116(2001);Fontenele et al.,The 2D attractive Hubbard model and the BCS-BEC crossover,arXiv:2201.02156(2022)]

[32]这个观念最早由杨振宁提出,结合自旋的$SU(2)$对称性($\hat{S}^\pm = \sum_j \hat{S}_j^\pm, \hat{S}^z = \sum_j \hat{S}_j^z, \hat{S}_j^+ = \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger\hat{c}_{j\downarrow}, \hat{S}_j^- = \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger\hat{c}_{j\uparrow}, \hat{S}_j^z = (\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow})/2$) 就得到半满对称Hubbard模型所具有的巨大对称性,即$SO(4) = SU(2) \times SU(2)/Z_2$对称($Z_2$源自当总格点数为偶数(奇数)时$S^z + \eta^z$是整数(半整数)).[C.N.Yang,$\eta$ Pairing and Off-Diagonal Long-Range Order in a Hubbard Model,Phys.Rev.Lett.**63**,2144(1989);C.N.Yang,S.C.Zhang,$SO(4)$ symmetry in a Hubbard model,Mod.Phys.Lett.B**4**,759(1990)]

[33]可以证明$|\Psi_N\rangle = (\eta^+)^N|0\rangle$是系统的本征态并具有$s$波配对的非对角长程序

于$\langle\hat{\Delta}_j^s\hat{\Delta}_{j+\delta}^s\rangle_c = \langle\hat{n}_j\hat{n}_{j+\delta}\rangle_c$, 这说明半满体系的超导关联与电荷密度关联强度相同,这样系统自然不存在超导基态.

此外,利用有限温度的超导能隙方程,并令温度等于超导相变温度$T_c(\Delta=0)$,得到

$$1 = gN(0)\int_0^{\omega_c} d\xi \frac{1}{\xi}\tanh\frac{\xi}{2T_c} = gN(0)\left[0.819 + \ln\frac{\omega_c}{2T_c}\tanh\frac{\omega_c}{2T_c}\right] \tag{13.113}$$

考虑到$\omega_c >> 2T_c(\tanh\frac{\omega_c}{2T_c}\to 1)$, 有

$$\boxed{T_c = \frac{1}{2}e^{0.819}\omega_c e^{-\frac{1}{gN(0)}} = 1.13\omega_c e^{-\frac{1}{gN(0)}}} \tag{13.114}$$

- 这样我们发现对于s波超导体,其零温能隙与超导相变温度之间满足以下的普适关系:

$$\frac{2\Delta}{T_c} = \frac{4\omega_c e^{-\frac{1}{gN(0)}}}{\frac{1}{2}e^{0.819}\omega_c e^{-\frac{1}{gN(0)}}} = \frac{8}{e^{0.819}} = 3.53 \tag{13.115}$$

  对于实际超导体,若$\frac{2\Delta}{T_c}\sim 3.53$那么相应的超导体称为弱耦合超导体而$\frac{2\Delta}{T_c} >> 3.53$称为强耦合超导体.

- 此外,注意到在电-声诱导的常规超导配对中,声子频率与振动原子质量的1/2次成反比$\omega_k\sim M^{-1/2}$,那么对应的特征Debye频率也有$\omega_c\sim M^{-1/2}$.既然已经得到$T_c\sim\omega_c$,那么就解释了同位素效应.[34]

$$T_c M^{1/2} = const. \tag{13.116}$$

很多时候我们需要计算Bogoliubov准粒子的态密度$N(E)$,利用$N(E)dE = N(0)d\xi$可得

$$N(E) = N(0)\left|\frac{d\xi}{dE}\right| = N(0)\frac{|E|}{|\xi|} = N(0)\frac{|E|}{\sqrt{E^2-\Delta^2}}\theta(|E|-\Delta) \tag{13.117}$$

这个态密度在能量小于能隙Δ时为零,表示激发能过小无法激发准粒子.在$|E| = \Delta$处有奇异性,而在$|E| >> \Delta$即高能极限下趋近于正常态电子的态密度.实验上一般采用隧穿谱技术测量准粒子态密度,并以此确定能隙的大小.(隧穿谱或者STM能够直接测量的是隧穿电流,而隧穿电流与电压的比例关系即微分电导在低温下正比于准粒子态密度)

- 序参量:在超导研究中,我们通常选取超导能隙Δ作为超导态的序参量.Δ原则上是复数序参量,可有相位部分即$\Delta = |\Delta|e^{i\phi}$,但在当前的BCS平均场理论中,我们发现相位的信息完全没有贡献.回忆相变的讨论,我们知道系统真

[34] 由于曼哈顿计划,二战后人们有了分离同位素的能力,这使得同位素效应的观测成为可能.而同位素效应使得Bardeen把超导的起源关注到正确的轨道,即电−声子相互作用上来.

正的有序态必然是相位相干的,也就是说体系形成超导态,一方面其超导能隙不为零,另一方面相位部分也应有序$\lim_{|x-y|\to\infty}\langle e^{i\phi(x)}e^{-i\phi(y)}\rangle \neq 0$.尽管平均场理论告诉我们$T_c \propto \Delta$, 但这个结果仅在完全忽略相位涨落情况下得到,实际系统中,例如铜氧化物超导体,人们认为欠掺杂区超导能隙可能已经打开,但由于电子之间的强关联效应导致相位相干并未形成,因此体系并未超导.(预配对理论)只有当相位相干得以建立时,体系才进入超导态.

- d波超导的临界温度满足$T_c = 1.134\omega_c e^{-\frac{2}{gN(0)}}$,其零温能隙是$\Delta = 2.426\omega_c e^{-\frac{2}{gN_F}}$.因此$d$ 波态有$\frac{2\Delta}{T_c} = 4.28$. [35] 注意到这些简化关系是在假定常数态密度$N(0)$和对称色散ξ_k下得到的,因此实际系统中由于具体能带结构导致的偏离在所难免.

最后,对于温度依赖的能隙$\Delta(T)$存在一个有用的近似公式:

$$\Delta(T)/\Delta(0) = \tanh\left(\frac{\pi T_c}{\Delta(0)}\sqrt{a\left(\frac{T_c}{T}-1\right)}\right) \tag{13.118}$$

对s波有$\Delta(0) = 1.76T_c, a = 1$,而$d$波有$\Delta(0) = 2.14T_c, a = 4/3$.

熵和热容*

由自由能可得热力学熵的表达式[36]

$$S = \frac{E-F}{T} = 2\sum_k \left[\frac{1}{T}E_k f_F(E_k) + \ln(1+e^{-\beta E_k})\right]. \tag{13.119}$$

不同配对对称性其低温熵表现行为不同,d波态由于低能准粒子是Dirac费米子$S \sim T^2$而s波是$\sim e^{-\Delta/T}$.

比热系数由下式给出

$$\gamma(T) \equiv \frac{C_V}{T} = \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{2}{T}\sum_k E_k\frac{\partial f_F(E_k)}{\partial T} = \frac{2}{T}\sum_k \frac{e^{\beta E_k}}{(1+e^{\beta E_k})^2}\left(\frac{E_k^2}{T^2} - \frac{E_k}{T}\frac{\partial f_F(E_k)}{\partial T}\right),$$

第一部分来自热激发准粒子的贡献而后面一项反应能隙的温度依赖.在T_c附近,正常金属态热容是

$$\begin{aligned} C_N(T) &= 2\sum_k \frac{e^{\beta\xi_k}}{(1+e^{\beta\xi_k})^2}\frac{\xi_k^2}{T^2} = 2\int d\xi N(\xi)\frac{e^{\xi/T}}{(1+e^{\xi/T})^2}\frac{\xi^2}{T^2} \simeq \frac{2N(0)}{T^2}\int d\xi\xi^2\frac{e^{\xi/T}}{(1+e^{\xi/T})^2}, \\ &= \frac{2N(0)}{T^2}\frac{\pi^2T^3}{3} = \frac{2\pi^2}{3}N(0)T. \end{aligned}$$

[35] $E \ll \Delta$时d波超导体的低能准粒子态密度是能量的线性函数$N(E) \sim |E|$.相应的准粒子是无质量的Dirac 费米子.详细的讨论参见向涛老师的书.[8]

[36] 这个表达式可用电子态密度$N(E)$改写为$S = 2\int dE N(E)(\frac{1}{T}Ef_F(E) + \ln(1+e^{-\beta E}))$,如果知道电子态密度和熵的测量数据,那么利用这个形式可近似判定电子在超导形成时的熵贡献,这已成功应用于过掺杂铜氧化物超导体$(Bi,Pb)_2Sr_2CaCu_2O_{8+}$.[Chen et al.,Unconventional spectral signature of Tc in a pure d-wave superconductor,Nature **601**,562(2022)]

超导态的额外热容(即热容在临界温度时的跳变值)在T_c附近是

$$\begin{aligned}\Delta C_S(T_c) &= 2\sum_k \frac{e^{\xi_k/T_c}}{(1+e^{\xi_k/T_c})^2}\left(-\frac{\xi_k}{T_c}\frac{\partial E_k}{\partial T}\right)=\sum_k \frac{e^{\xi_k/T_c}}{(1+e^{\xi_k/T_c})^2}\left(-\frac{\xi_k}{T_c}\frac{\gamma_k^2}{E_k}\frac{\partial \Delta^2}{\partial T}\right)\\ &= c_2^2\sum_k \gamma_k^2\frac{e^{\xi_k/T_c}}{(1+e^{\xi_k/T_c})^2}\\ &= c_2^2\int\frac{d\varphi}{2\pi}\gamma_\varphi^2\int d\xi N(\xi)\frac{e^{\xi/T_c}}{(1+e^{\xi/T_c})^2}=c_2^2N(0)T_c\langle\gamma_\varphi^2\rangle_{FS}.\end{aligned}$$

这里使用了$\Delta^2(T)=c_2^2T_c^2(1-T/T_c)(T\to T_c$,$c_2=3.063(s$ 波),$3.537(d$波)).

$$\frac{\Delta C_S(T_c)}{C_N(T_c)}=\frac{3c_2^2\langle\gamma_\varphi^2\rangle_{FS}}{2\pi^2}.$$

对s波有无维度系数1.43而d波值是0.95.实际上,这个比值常用于定性分析非常规超导体.

超流密度*

超流密度指的是处于超导态电子的浓度.在BCS理论中零温时所有电子皆是超导电子,温度逐渐升高产生热激发准粒子不断减少超导电子密度,最后在相变时超导电子密度为零.实验上通过London穿透深度测量得到超流密度,即$\frac{\rho_s e^2}{m}=\frac{1}{\mu_0\lambda^2}$.让我们估计London穿透深度的量级.由 $e=1.6\times10^{-19}C$,$m=9.1\times10^{-31}kg$,$\mu_0=12.6\times10^{-7}N/A^2$, $\frac{\mu_0e^2}{m}=10^{-13}cm$,$\rho_s(0)\sim10^{23}cm^{-3}$ 可得 $\lambda(0)\sim10^{-5}cm=10^2nm$.对于重费米子超导体$CeCoIn_5$,表面阻抗测量给出$\lambda(0)\simeq190nm$.

在表面阻抗测量中直接测量的物理量是复阻抗Z_s,其与复电导$\sigma=\sigma'+i\sigma''$通过下式相联系

$$Z_s=R_s+iX_s=\left(\frac{i\mu_0\omega}{\sigma}\right)^{1/2}.$$

为了解释该类实验,通常选用二流体模型

$$\sigma=\frac{ne^2}{m^*}\left[\frac{f_s}{-i\omega}+\frac{f_n\tau}{1-i\omega\tau}\right].$$

m^*是有效质量,f_s是超导电子比例,f_n是正常电子比例且满足$f_s+f_n=1$.因此,电导的零频虚部给出超流密度$\rho_s=nf_s$的信息.在微观层次上,电导由体系的流−流关联函数$\Pi(\omega)$ 决定

$$\sigma=\frac{\Pi(\omega)}{-i\omega}=\frac{\mathrm{Re}\Pi(\omega)}{-i\omega}+i\frac{\mathrm{Im}\Pi(\omega)}{-i\omega},$$

因此$\sigma'=\frac{\mathrm{Im}\Pi(\omega)}{-\omega}$,$\sigma''=\frac{\mathrm{Re}\Pi(\omega)}{\omega}$. 这样可得超流密度取决于零频流−流关联函数实部$\rho_s=\frac{m}{e^2}\mathrm{Re}\Pi(0)$.

对于简单的BCS模型,根据附录中关于ReΠ的计算结果可知其超流密度具有如下简单形式

$$\rho_s^\mu = m_\mu \sum_k \left[-\frac{\partial^2 \xi_k}{\partial k_\mu^2} \frac{\xi_k}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2T}\right) + 2\left(\frac{\partial \xi_k}{\partial k_\mu}\right)^2 \frac{\partial f_F(E_k)}{\partial E_k} \right]. \quad (13.120)$$

第一项是抗磁流的贡献,第二项来自顺磁流.当温度接近临界温度时,顺磁项逐渐抵消抗磁项贡献并使超流密度趋于零.低温下($T < 0.35T_c$),我们发现d波超导体超流密度随温度线性变化

$$\rho_d(T)/\rho_d(0) \approx 1 - \frac{2\ln 2}{\Delta(0)} T \quad (13.121)$$

而s波超导体则显示指数抑制行为

$$\rho_s(T)/\rho_s(0) \approx 1 - \sqrt{\frac{\pi\Delta(0)}{2T}} \exp^{-\Delta(0)/T}. \quad (13.122)$$

实验上,单晶铜氧化物BSCCO-2212的面内超流密度测量表明其低温线性行为.当温度足够低时,线性行为逐渐过渡到非磁性杂质主导的T^2行为.

配对机制	声子	反铁磁自旋涨落	共振价键	CDW/条纹	全息超导
适用体系	元素/合金超导	铁基超导	???	???	???
smoking gun	同位素效应	费米面嵌套	自旋液体	???	全息原理
精确性	Migdal定理	???	???	???	大N极限

Table 13.1: 超导研究中的一些配对机制.

超越BCS平均场理论:搜寻超导配对的踪迹

在先前的讨论中,我们已经看到,通过配对哈密顿量的平均场近似,我们得到了平均场近似下BCS超导体的一般性质.但是,注意到平均场理论也存在如下缺点:

1. 配对哈密顿量中的配对相互作用$V_{k,k'}$仅包含动量依赖而没有频率依赖,这忽略了电子配对的动力学.这种忽略对于以声子为媒介的超导配对是比较粗糙的近似;

2. 超导态中形成的Cooper对可看作是玻色子,这些玻色子凝聚后(所对应的玻色场)不仅有振幅涨落还存在相位涨落,相位涨落对于理解二维超导体的相变尤其重要,但先前的BCS平均场处理完全忽略了相位涨落;

3. 一般认为BCS理论是弱相互作用电子系统(费米液体)在弱配对相互作用下的直接结果,但很多强相互作用体系(例如一些非费米液体态)也存在超导配对,这并不能用BCS平均场理论简单理解.

这里的第一个问题实际上涉及电子发生超导配对的原因,也就是电子配对的机制,我们将会讨论声子诱导的配对以及局域磁性交换导致的配对.第二个问题的关键是需要重新在平均场理论的基础上引入相位涨落,这将通过路径积分形式得以实现.第三个问题相对比较复杂,也比较技术化,因此相关问题将不做讨论.[37]

配对机制:电子吸引相互作用的来源

- 在BCS理论中,电子之间的等效吸引相互作用来自于传递声子导致的有效电子-电子相互作用.[38]

[37]关于非费米液体超导配对问题可以参考相关的重整化群研究以及该文章所引用的更早期的文献[Metlitski,Mross,Sachdev,Senthil,Cooper pairing in non-Fermi liquids,Phys.Rev.B **91**,115111(2015)]

[38]交换玻色子得到费米子之间的相互作用这一机制是量子场论的基本结果.对于同种'电荷'的粒子,交换标量玻色子(例如π介子)产生吸引粒子间的吸引相互作用;交换矢量玻色子(例如光子)产生排斥相互作用; 交换二阶张量型玻色子(例如未被发现的引力子)产生吸引相互作用.更详细的讨论是Zee的QFT书的I4与I5章.既然低能下的(声学支)声子是标量玻色子,那么我们预期其能够导致电子之间的吸引力.

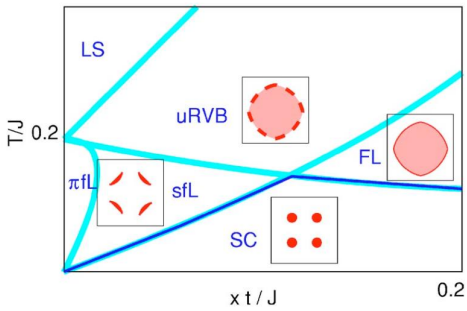


Figure 13.10: $t-J$模型在$SU(2)$平均场近似下的相图.[14]

- 但在非常规超导体当中,一般认为电子-电子相互作用导致配对,有些理论例如反铁磁自旋涨落理论认为电子之间通过传递顺磁振子(类似于声子)而获得配对的驱动力(配对胶水pairing glue),但另一些理论例如RVB理论强调并不用交换什么玻色子,电子之间的自旋交换足以产生配对,目前我们尚不清楚正确的配对来自何种机制.[9]

文献中的配对机制:

1. 反铁磁自旋涨落交换;[10, 11](交换单个(顺)磁振子+RPA或Eliashberg方程计算[12])
2. 共振价键理论;[13, 14](多数辅助粒子规范理论都属于这类,一个基本相图如图13.10所示)
3. 量子临界;(某种玻色型涨落贡献配对胶水)
4. 配对密度波;(来自预配对理论或者规范理论)
5. 电荷/自旋条纹;[15](基本是唯像讨论)
6. 价涨落;(主要针对部分重费米子化合物)
7. 极化子;(包括双极化子理论)
8. $SO(5)$理论;[16](唯象理论)

传递声子导致的等效相互作用

我们考虑简化的电子-声子相互作用模型,即著名的Frohlich哈密顿量

$$\hat{H}_0=\sum_{k\sigma}\xi_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_q\omega_q\hat{b}^\dagger_q\hat{b}_q,\quad \hat{H}_{int}=\sum_{k,q,\sigma}M_q(\hat{b}_q+\hat{b}^\dagger_{-q})\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\quad (13.123)$$

我们的目标是得到等效的只包含电子-电子之间相互作用的模型,其形式类似于前面BCS 平均场理论开头采用的配对哈密顿量$\hat{H} = \sum_{k\sigma}(\varepsilon_k - \mu)\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}$.

显然,在微扰理论的二阶计算中,必然出现H^2_{int}项,此时有

$$\sum_{k,k',q,q',\sigma,\sigma'} \left(M_q(\hat{b}_q + \hat{b}^\dagger_{-q})\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\right)\left(M_{q'}(\hat{b}_{q'} + \hat{b}^\dagger_{-q'})\hat{c}^\dagger_{k'+q'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\right) \tag{13.124}$$

此时,如果对声子做平均就可以消掉声子自由度得到纯电子的哈密顿量.

$$\begin{aligned}&\sum_{k,k',q,q',\sigma,\sigma'} M_q M_{q'}\left\langle(\hat{b}_q + \hat{b}^\dagger_{-q})(\hat{b}_{q'} + \hat{b}^\dagger_{-q'})\right\rangle \hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'+q'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\\ &\sim \sum_{k,k',q,q',\sigma,\sigma'} M_q M_{q'} V_q \delta_{q,-q'}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'+q'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\end{aligned} \tag{13.125}$$

在数学上,可采用正则变换,费曼图或者路径积分的办法得到有效的相互作用.在这里我们采用传统的正则变换,即考虑如下本征方程:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{13.126}$$

定义正则变换$e^{-\hat{S}}$使得

$$\hat{\tilde{H}} = e^{-\hat{S}}\hat{H}e^{\hat{S}}, \quad |\tilde{\psi}\rangle = e^{-\hat{S}}|\psi\rangle \tag{13.127}$$

显然可得变换后的哈密顿量$\hat{\tilde{H}}$与本征波函数$|\tilde{\psi}\rangle$ 依然满足

$$\hat{\tilde{H}}|\tilde{\psi}\rangle = E|\tilde{\psi}\rangle \tag{13.128}$$

也就是说求解变换后的本征方程等价于求解原先的方程.在实际使用中,变换后的哈密顿量也无法精确求解,但是由于正则变换的引入,使得我们有一定的自由度可以重写哈密顿量,物理上来说相当于重组相关的自由度以得到更为关心的低能物理.也就是可以得到等效哈密顿量,这在凝聚态理论研究中是广泛采用的技术手段.

$$\begin{aligned}\hat{\tilde{H}} &= e^{-\hat{S}}\hat{H}e^{\hat{S}} = \left(1 - \hat{S} + \frac{\hat{S}^2}{2} + ...\right)\hat{H}\left(1 + \hat{S} + \frac{\hat{S}^2}{2} + ...\right) = \hat{H} + [\hat{H},\hat{S}]_- + \frac{1}{2}[[\hat{H},\hat{S}]_-,\hat{S}]_- + \mathcal{O}(\hat{S}^\\ &\approx H_0 + H_{int} + [\hat{H}_0,\hat{S}]_- + [\hat{H}_{int},\hat{S}]_- + \frac{1}{2}[[\hat{H},\hat{S}]_-,\hat{S}]_-\end{aligned} \tag{13.129}$$

既然我们希望消掉声子的贡献,那么可以令$\hat{H}_{int} + [\hat{H}_0,\hat{S}]_- = 0$以消去直接的电-声相互作用,那么有

$$\hat{\tilde{H}} \approx H_0 + [\hat{H}_{int},\hat{S}]_- + \frac{1}{2}[\overbrace{[\hat{H}_0,\hat{S}]_-}^{-\hat{H}_{int}} + [\hat{H}_{int},\hat{S}]_-,\hat{S}]_- \tag{13.130}$$

$$= H_0 + [\hat{H}_{int},\hat{S}]_- - \frac{1}{2}[\hat{H}_{int},\hat{S}]_- + \frac{1}{2}[[\hat{H}_{int},\hat{S}]_-,\hat{S}]_- \tag{13.131}$$

$$\approx \hat{H}_0 + \frac{1}{2}[\hat{H}_{int},\hat{S}]_- + O(\hat{S}^2) \tag{13.132}$$

也就是说有效哈密顿量是

$$\hat{\tilde{H}} = \hat{H}_0 + \frac{1}{2}[\hat{H}_{int}, \hat{S}]_- \tag{13.133}$$

现在,我们需要找的是变换$\hat{S}$的具体形式,既然其与$\hat{H}_0$对易之后等于$-\hat{H}_{int}$,那么一个好的$\hat{S}$猜测形式必然与$\hat{H}_{int}$ 相似,所以我们假设$\hat{S}$具有如下形式

$$\hat{S} = \sum_{k,q,\sigma} M_q (B_{k,q}\hat{b}_q + A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q})\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma} \tag{13.134}$$

注意到相比于$\hat{H}_{int}$我们只是给声子算符添加上了待定系数.把这个$\hat{S}$代入$[\hat{H}_0, \hat{S}]_-$做一些对易关系的计算,我们发现

$$\left[\sum_{k'\sigma'} \xi_{k'}\hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}, \hat{S}\right] = \sum_{kq\sigma} M_q (B_{k,q}\hat{b}_q + A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q})(\xi_{k+q} - \xi_k)\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$$

$$\left[\sum_{q'} \omega_{q'}\hat{b}^\dagger_{q'}\hat{b}_{q'}, \hat{S}\right] = \sum_{kq\sigma} M_q (-\omega_q B_{k,q}\hat{b}_q + \omega_{-q}A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q})\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$$

那么有

$$[\hat{H}_0, \hat{S}] = \sum_{kq\sigma} M_q \left((\xi_{k+q} - \xi_k - \omega_q)B_{k,q}\hat{b}_q + (\xi_{k+q} - \xi_k + \omega_{-q})A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q}\right)\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$$

对比$-\hat{H}_{int}$可知待定系数满足以下的关系:

$$A_{k,q} = -\frac{1}{\xi_{k+q} - \xi_k + \omega_{-q}} \tag{13.135}$$

$$B_{k,q} = -\frac{1}{\xi_{k+q} - \xi_k - \omega_q} \tag{13.136}$$

这样,我们定出了变换$\hat{S}$的具体形式,把这个形式代入$[\hat{H}_{int}, \hat{S}]_-$有

$$\sum_{k,k',q,q',\sigma,\sigma'} M_q M_{q'}[(\hat{b}_{q'} + \hat{b}^\dagger_{-q'})(B_{k,q}\hat{b}_q + A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q})\hat{c}^\dagger_{k'+q'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$$
$$-(B_{k,q}\hat{b}_q + A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q})(\hat{b}_{q'} + \hat{b}^\dagger_{-q'})\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'+q'\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}]$$

既然我们想要纯粹的电子-电子相互作用,那么可对上式的玻色子部分做平均(以自由声子部分$\sum_q \omega_q \hat{b}^\dagger_q \hat{b}_q$为参考),如果只对基态感兴趣,那么有

$$\langle(\hat{b}_{q'} + \hat{b}^\dagger_{-q'})(B_{k,q}\hat{b}_q + A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q})\rangle_{T=0} = A_{k,q}\delta_{q,-q'} \tag{13.137}$$

$$\langle(B_{k,q}\hat{b}_q + A_{k,q}\hat{b}^\dagger_{-q})(\hat{b}_{q'} + \hat{b}^\dagger_{-q'})\rangle_{T=0} = B_{k,q}\delta_{q,-q'} \tag{13.138}$$

这样得到

$$\begin{aligned}[\hat{H}_{int}, \hat{S}]_- &= \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} M_q M_{-q}\left[A_{k,q}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma} - B_{k,q}\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\right] \\ &= \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} |M_q|^2(A_{k,q} - B_{k,q})\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} + ... \end{aligned} \tag{13.139}$$

这里忽略了简单的势能散射项.最后声子诱导的等效电子-电子相互作用是

$$\hat{H}_{int}^{eff}=\frac{1}{2}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\frac{2\omega_q|M_q|^2}{(\xi_{k+q}-\xi_k)^2-\omega_q^2}\hat{c}_{k+q\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{k'-q\sigma'}^{\dagger}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{13.140}$$

此时,电子部分的哈密顿量是

$$\hat{H}^{eff}=\sum_{k\sigma}\xi_k\hat{c}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{k\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\frac{2\omega_q|M_q|^2}{(\xi_{k+q}-\xi_k)^2-\omega_q^2}\hat{c}_{k+q\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{k'-q\sigma'}^{\dagger}\hat{c}_{k'\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{13.141}$$

注意到相互作用

$$V_{k,q}=\frac{2\omega_q|M_q|^2}{(\xi_{k+q}-\xi_k)^2-\omega_q^2} \tag{13.142}$$

在$(\xi_{k+q}-\xi_k)^2<\omega_q^2$的区间内是吸引的,显然如果电子能量都在费米面附近$\xi_{k+q}-\xi_k\sim 0$,那么相互作用几乎总是吸引,也就是说费米面附近电子之间存在吸引相互作用.[39]如果我们用Debey频率ω_c代替ω_q并且忽略M_q 的动量依赖,那么我们获得了一个模型相互作用:

$$V_{k,q}=\left\{\begin{array}{ll}-\frac{g}{V}, & |\varepsilon_{k+q}|,|\varepsilon_q|<\omega_c\\ 0, others & \end{array}\right\},\quad \frac{g}{V}\equiv\frac{2|M|^2}{\omega_c} \tag{13.143}$$

这就是Cooper等采用的模型相互作用.

经过前面的分析,我们已经知道自旋无关的吸引相互作用会导致自旋单重态配对,这样我们把哈密顿量改写为

$$\hat{H}^{eff}=\sum_{k\sigma}\xi_k\hat{c}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k,k',q}V_{k,q}\hat{c}_{k+q\uparrow}^{\dagger}\hat{c}_{k'-q\downarrow}^{\dagger}\hat{c}_{k'\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow} \tag{13.144}$$

回忆之前Cooper不稳定性的讨论,当相互作用为吸引时,电子会自发配对形成总动量为零的态(能量降低最多),这显然说明上述哈密顿量的相互作用部分中最重要的是配对部分,即$\hat{c}_{k+q\uparrow}^{\dagger}\hat{c}_{k'-q\downarrow}^{\dagger}$中最主要的是动量相反的情况,这要求$k+q=-(k'-q)$,即$k=-k'$.因此,我们只保留$k'=-k$的部分,则哈密顿量简化为

$$\hat{H}^{eff}=\sum_{k\sigma}\xi_k\hat{c}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k,q}V_{k,q}\hat{c}_{k+q\uparrow}^{\dagger}\hat{c}_{-k-q\downarrow}^{\dagger}\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow} \tag{13.145}$$

令$k+q=k'$,得到

$$\hat{H}^{eff}=\sum_{k\sigma}\xi_k\hat{c}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k',k}V_{k',k}\hat{c}_{k'\uparrow}^{\dagger}\hat{c}_{-k'\downarrow}^{\dagger}\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow},\quad V_{k',k}=\frac{2\omega_{k'-k}|M_{k'-k}|^2}{(\xi_{k'}-\xi_k)^2-\omega_{k'-k}^2} \tag{13.146}$$

这就是讨论BCS平均场时采用的配对哈密顿量.当然,对于实际的电子系统,电子之间的(屏蔽)Coulomb相互作用总是存在,因此包含传递声子后的总相互作用

[39]这个结果最早由Fröhlich得到.

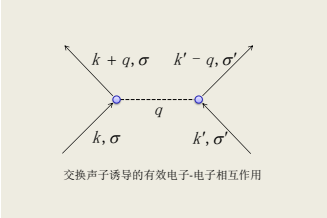


Figure 13.11: 交换声子诱导的等效电子−电子之间的相互作用,这是常规超导体中电子配对的基本成因.

为[40]

$$V_{eff}(k,q)=\frac{2\omega_q|M_q|^2}{(\xi_{k+q}-\xi_k)^2-\omega_q^2}+\frac{4\pi e^2}{q^2+\kappa_{TF}^2} \tag{13.147}$$

对于V_{eff},屏蔽的Coulomb相互作用是静态的,并且总是排斥相互作用,而声子诱导的相互作用在费米面附近是吸引的,且依赖于传递声子的频率ω_q.为了简化讨论,我们用$N(0)^{-1}\mu$代替屏蔽的Coulomb相互作用,而声子诱导的相互作用用$-N(0)^{-1}\lambda\theta(\omega_c-|\omega_q|)$ 代替.如果我们观察相互作用V_{eff}在时间上的变化,那么有

$$N(0)V_{eff}(t)=\int\frac{d\omega_q}{2\pi}e^{-i\omega_q t}N(0)V_{eff}(\omega_q)=\mu\delta(t)-\lambda\int_{-\omega_c}^{\omega_c}\frac{d\omega_q}{2\pi}e^{-i\omega_q t}=\mu\delta(t)-\frac{\lambda\omega_c}{\pi}\frac{\sin(\omega_c t)}{(\omega_c t)} \tag{13.148}$$

这样,我们发现屏蔽的Coulomb相互作用实际上对于两电子而言仅在两者刚发生相互作用时有效,接下来则是推迟的吸引相互作用主导,这体现的就是晶格畸变产生的吸引相互作用在时间尺度上的吸引势.因此,交换声子或者更一般的交换具有特征能量尺度(例如ω_c)的玻色子诱导的相互作用总是推迟的,这类推迟相互作用在时间尺度上可以克服排斥的Coulomb势而实现吸引的相互作用.

局域磁性相互作用*

- 目前研究的绝大多数超导材料,特别是与电子关联紧密相关的,一般认为其电子配对来源于磁性相互作用.[41]

对于磁性相互作用,通过前面几讲的讨论,我们知道可以根据形成磁性的电子的类型分为局域磁性与巡游磁性.在局域磁性中.电子由于强Coulomb排斥而(发

[40]这个结果来自Pines和Bardeen对Fröhlich结果的扩展.Bardeen指出电−声相互作用对电子自能的修正并不能给出超导能隙.

[41]关于磁性相互作用诱导超导配对的问题最早由Berk和Schrieffer研究.(Effect of Ferromagnetic Spin Correlations on Superconductivity,Phys.Rev.Lett.**17**,433(1966)) 他们的工作表明铁磁自旋涨落抑制单重态的s波电子配对.进一步研究表明铁磁自旋涨落能诱导三重态电子配对(例如p波).

生Mott局域化)局域在各自的格点上,通过量子力学允许的虚跃迁而跃迁到双占据能级降低能量产生反铁磁交换相互作用.对于多轨道系统,同格点的不同轨道电子为避免大的Coulomb 排斥而自发倾向于形成铁磁排列,这对应直接的铁磁型交换相互作用.在巡游电子系统中,Coulmob相互作用导致自发的等效内磁场的产生,使得体系形成自旋密度波态,磁性的具体类型依赖于能带结构.在重费米子材料中,局域与巡游电子共存,此时磁性行为更加复杂,但基本图像是近藤效应与磁性交换相互作用的竞争决定体系的磁性结构.

毫无疑问,实际的磁性相互作用极其复杂,所以这里假定一个等效的格点间交换相互作用

$$J\sum_{<j,m>}\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_m=\frac{J}{2}\sum_{<j,m>}\left[\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{m\downarrow}\hat{c}_{m\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{m\uparrow}\hat{c}_{m\downarrow}+\frac{1}{2}\left(\sum_\sigma\sigma\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}\right)\left(\sum_{\sigma'}\sigma'\hat{c}^\dagger_{m\sigma'}\hat{c}_{m\sigma'}\right)\right] \tag{13.149}$$

这个相互作用的第一项是横向自旋密度耦合$\hat{S}^+\hat{S}^-$的贡献,第二项是纵向部分$\hat{S}^z\hat{S}^z$的贡献.显然,$J>0$与$J<0$导致完全不同的结果,这里讨论反铁磁的情况$J>0$,而$J<0$的情况可以简单推广反铁磁的讨论.

既然我们假定电子自旋密度之间有反铁磁型耦合,那么其对应的超导配对应该是自旋单重态,(回忆两个自旋时单重态与三重态的能量差别),所以从上述相互作用哈密顿量中尝试分离出自旋单态配对的项.由傅里叶变换可得

$$\sum_{<j,m>}\left[\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}^\dagger_{m\downarrow}\hat{c}_{m\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{m\uparrow}\hat{c}_{m\downarrow}\right]=\frac{1}{N_s}\sum_{k,k',q}\sum_\delta e^{iq\delta}\left[\hat{c}^\dagger_{k+q\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k'-q\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k'-q\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow}\right] \tag{13.150}$$

$$\sum_{<j,m>}\left[\left(\sum_\sigma\sigma\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}\right)\left(\sum_{\sigma'}\sigma'\hat{c}^\dagger_{m\sigma'}\hat{c}_{m\sigma'}\right)\right]=\frac{1}{N_s}\sum_{k,k',q}\sum_\delta e^{iq\delta}\sum_{\sigma,\sigma'}\sigma\sigma'\hat{c}^\dagger_{k+q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{k'-q\sigma'}\hat{c}_{k'\sigma'} \tag{13.151}$$

对于$\hat{c}^\dagger_{k+q\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k'-q\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}$, 利用反对易关系可得$-\hat{c}^\dagger_{k+q\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k'-q\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}$(忽略势散射项).与先前处理电声相互作用情况类似,我们仅考虑两电子配对总动量为零的情况,这要求$k=-k'$,则有

$$-e^{iq\delta}\hat{c}^\dagger_{-k'+q\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k'-q\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow} \tag{13.152}$$

再令$-k'+q=k$可得

$$-e^{i(k+k')\delta}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow} \tag{13.153}$$

同理,有

$$-e^{i(k+k')\delta}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{-k\uparrow}\hat{c}_{-k'\uparrow}\hat{c}_{k'\downarrow} \tag{13.154}$$

令$k\to-k,k'\to-k'$

$$-e^{-i(k+k')\delta}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow} \tag{13.155}$$

这样我们发现

$$\frac{J}{2}\sum_{<j,m>}\left[\hat{c}^{\dagger}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{m\downarrow}\hat{c}_{m\uparrow}+\hat{c}^{\dagger}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{m\uparrow}\hat{c}_{m\downarrow}\right]=-\frac{1}{N_s}\sum_{k,k'}J_{k+k'}\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+...,\ \ J_q=\frac{J}{2}\sum_{\delta}(e^{iq\delta}+e^{-iq\delta}) \tag{13.156}$$

采用同样的处理,可以得到(只考虑自旋单态)

$$\frac{J}{4}\sum_{<j,m>}\left[\left(\sum_{\sigma}\sigma\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}\right)\left(\sum_{\sigma'}\sigma'\hat{c}^{\dagger}_{m\sigma'}\hat{c}_{m\sigma'}\right)\right]=-\frac{1}{2N_s}\sum_{k,k'}J_{k-k'}\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}+... \tag{13.157}$$

综合横向与纵向自旋密度耦合相互作用,得到如下配对相互作用

$$\hat{H}_p=-\frac{1}{N_s}\sum_{k,k'}J_{k,k'}\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow},\ \ J_{k,k'}=J_{k+k}+\frac{1}{2}J_{k-k'} \tag{13.158}$$

加上电子的自由部分,最终得到一个等效的配对哈密顿量

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\xi_k\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}-\frac{1}{N_s}\sum_{k,k'}J_{k,k'}\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow} \tag{13.159}$$

举一个例子,即考虑正方晶格上的最近邻反铁磁交换耦合,此时有

$$J_q=J(\cos q_x+\cos q_y)\Rightarrow J_{k,k'}=\frac{3J}{2}(\cos k_x\cos k'_x+\cos k_y\cos k'_y)-\frac{J}{2}(\sin k_x\sin k'_x+\sin k_y\sin k'_y) \tag{13.160}$$

$$\begin{aligned}J_{k,k'} &= \frac{3J}{4}[(\cos k_x-\cos k_y)(\cos k'_x-\cos k'_y)+(\cos k_x+\cos k_y)(\cos k'_x+\cos k'_y)]\\ &- \frac{J}{2}[\sin k_x\sin k'_x+\sin k_y\sin k'_y]\\ &= \frac{3J}{4}[\gamma_k^{d_{x^2-y^2}}\gamma_{k'}^{d_{x^2-y^2}}+\gamma_k^{s_{+-}}\gamma_{k'}^{d_{+-}}]-\frac{J}{2}[\gamma_k^{p_x}\gamma_{k'}^{p_x}+\gamma_k^{p_y}\gamma_{k'}^{p_y}]\end{aligned} \tag{13.161}$$

可以看到,最近邻的反铁磁耦合在正方晶格上可以诱导的配对是$d_{x^2-y^2}$和s_{+-}波,两个p波显然不用考虑因为它们对应的是能量很高的三重态配对.到底是哪一个配对通道最后形成超导态需要比较相应的自由能,但一般而言,费米面与配对函数取值大的区域重叠度越高越容易成为可能的超导配对态,即费米面与配对形状因子的匹配问题.

对于铜氧化物超导体,其费米面与$d_{x^2-y^2}$波重叠度更大,因而d波配对是系统倾向的配对方式.在铁基超导体中,由于体系的多带特性,s_{+-}波是更好的配对方式.

- 这里的磁性相互作用是静态的,没有频率依赖,只有动量或者空间的依赖.这强调了电子为了避免之间的 Coulomb相互作用而选择在空间的不同位置发生配对.在BCS模型中我们可以认为是空间中同一个区域的配对,只不过电子通过推迟效应,也就是避免同时呆在一个位置来克服Coulomb相互作用.

- 实际的配对相互作用既包含动量依赖,也有频率依赖,是十分复杂的函数,我们目前并不清楚其真实的形式.

超导体的相位涨落*

为了讨论超导体的相位涨落,我们将采用路径积分形式,当然,如果仅考虑时间无关的涨落,那么最后可重新用哈密顿量表示.为了简单起见,我们考虑最简单的s波超导体,其配对哈密顿量如下:

$$\hat{H}=\sum_{ij,\sigma}(-t_{ij}-\mu\delta_{ij})\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}-g\sum_{j}\hat{c}^{\dagger}_{j\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow} \tag{13.162}$$

这里我们假设体系定义在二维正方晶格上且$g>0$.原则上,这个哈密顿量可看作是负UHubbard模型($g=|U|$).现在,利用路径积分可以得到体系的配分函数和作用量:

$$\mathcal{Z}=\int\mathcal{D}\bar{c}\mathcal{D}c e^{-S}$$

$$S=\int d\tau\left[\sum_{ij,\sigma}\bar{c}_{i\sigma}(\tau)(\partial_\tau\delta_{ij}-t_{ij}-\mu\delta_{ij})c_{j\sigma}(\tau)-g\sum_{j}\bar{c}_{j\uparrow}(\tau)\bar{c}_{j\downarrow}(\tau)c_{j\downarrow}(\tau)c_{j\uparrow}(\tau)\right].$$

利用Hubbard-Stratonovich变换可把费米子的四次方改写为更方便处理的平凡形式,

$$e^{g\int d\tau\sum_j\bar{c}_{j\uparrow}(\tau)\bar{c}_{j\downarrow}(\tau)c_{j\downarrow}(\tau)c_{j\uparrow}(\tau)}=\int D\Delta^*D\Delta e^{-\int d\tau(\sum_j(\Delta^*_j(\tau)\bar{c}_{j\uparrow}(\tau)\bar{c}_{j\downarrow}(\tau)+\Delta_j(\tau)c_{j\uparrow}(\tau)c_{j\downarrow}(\tau)+\frac{|\Delta_j(\tau)|^2}{g}))}$$

此时体系的有效作用量是

$$\begin{aligned}S &= \int d\tau\sum_{ij,\sigma}\bar{c}_{i\sigma}(\tau)(\partial_\tau\delta_{ij}-t_{ij}-\mu\delta_{ij})c_{j\sigma}(\tau)\\ &+ \sum_j\left(\Delta^*_j(\tau)\bar{c}_{j\uparrow}(\tau)\bar{c}_{j\downarrow}(\tau)+\Delta_j(\tau)c_{j\uparrow}(\tau)c_{j\downarrow}(\tau)+\frac{|\Delta_j(\tau)|^2}{g}\right).\end{aligned}$$

这样我们得到了用辅助场$\Delta_j(\tau)$表示配对哈密顿量的精确路径积分形式.显然,如果假设辅助场与时空无关,也就是$\Delta_j(\tau)=\Delta$,那么上述作用量就对应前面讨论的BCS平均场理论.为了超越平均场而计入相位涨落,我们可以把$\Delta_j(\tau)$写成振幅和相位的形式,即$\Delta_j(\tau)=\sqrt{\rho_j(\tau)}e^{i\theta_j(\tau)}$,这样作用量成为

$$\begin{aligned}S &= \int d\tau\sum_{ij,\sigma}\bar{c}_{i\sigma}(\tau)(\partial_\tau\delta_{ij}-t_{ij}-\mu\delta_{ij})c_{j\sigma}(\tau)\\ &+ \sum_j\left(\sqrt{\rho_j(\tau)}e^{-i\theta_j(\tau)}\bar{c}_{j\uparrow}(\tau)\bar{c}_{j\downarrow}(\tau)+\sqrt{\rho_j(\tau)}e^{i\theta_j(\tau)}c_{j\uparrow}(\tau)c_{j\downarrow}(\tau)+\frac{\rho_j(\tau)}{g}\right).\end{aligned}$$

在超导态,我们知道辅助场$\Delta_j(\tau)$描述的是配对能隙,此时振幅自由度可以看作常数,这样有$\sqrt{\rho_j(\tau)}=\Delta$.同时,如果我们只想研究$\theta$的行为,那么可以把费米子自由

度以及振幅自由度积掉,相位自由度的理论.对于s波超导体,费米子自由度始终存在能隙,因而只需要考虑单圈图贡献,此时得到的作用量描述$2+1$维XY模型:

$$S=\int d\tau d^2r\left[\frac{1}{2}(\partial_\tau\theta(r,\tau))^2+\frac{\rho_s}{2}(\nabla\theta(r,\tau))^2\right] \tag{13.163}$$

这里ρ_s代表超流刚度(与超导电子密度成正比).在有限温度时($\beta=1/T$远小于体系的空间尺度),相位的时间依赖并不重要,这样上述模型就退化为简单的二维XY模型,其基本性质已在前述章节中详细讨论.在这个意义上,我们常说二维超导体的相位涨落可以用二维XY模型或者说相应的KT相变理论描述.

- 若超导态费米子存在无能隙激发(例如铜氧化物超导体中的d配对态),那么费米子部分积分在单圈图下会贡献耗散项,这会导致相变性质偏离标准的KT理论,其与所谓玻色金属有一定相关性.[42]

另一方面,如果我们关心费米子自由度与相位涨落的关系,那么一个简单的处理方式是假设相位和振幅自由度的时间依赖都可忽略,这样有

$$\begin{aligned}S &= \int d\tau\sum_{ij,\sigma}\bar{c}_{i\sigma}(\tau)(\partial_\tau\delta_{ij}-t_{ij}-\mu\delta_{ij})c_{j\sigma}(\tau)\\ &+ \sum_j\left(\sqrt{\rho_j}e^{-i\theta_j}\bar{c}_{j\uparrow}(\tau)\bar{c}_{j\downarrow}(\tau)+\sqrt{\rho_j}e^{i\theta_j}c_{j\uparrow}(\tau)c_{j\downarrow}(\tau)+\frac{\rho_j}{g}\right).\end{aligned}$$

由于振幅和相位已经失去时间依赖,其可看作是经典场,那么上述作用量所对应的哈密顿量是

$$\hat{H}=\sum_{ij,\sigma}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}(-t_{ij}-\mu\delta_{ij})\hat{c}_{j\sigma}+\sum_j\left(\sqrt{\rho_j}e^{-i\theta_j}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}+\sqrt{\rho_j}e^{i\theta_j}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}+\frac{\rho_j}{g}\right).$$

如果定义$V_j=\sqrt{\rho_j}$则有

$$\hat{H}=\sum_{ij,\sigma}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}(-t_{ij}-\mu\delta_{ij})\hat{c}_{j\sigma}+\sum_j V_j\left(e^{-i\theta_j}\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}+e^{i\theta_j}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}\right)+\sum_j\frac{V_j^2}{g}.$$

上述哈密顿量的热力学和电子谱函数可通过配分函数$\mathcal{Z}=\int\mathcal{D}V\mathcal{D}\theta\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}$并结合经典蒙特卡洛模拟获得.

一个有趣的例子是图13.12(c)所示的相图,[43]这里研究的模型相当于令$V_j=g$,也就是仅有相位自由度的s 波超导模型.可以看到体系存在费米液体(FM),Cooper对金属(CPM)以及超流(SF,超导态),这里Cooper对金属存在单粒子能隙但电导的温度依赖是金属性的.

[42][Zhu,Hou,Varma,Quantum criticality in the two-dimensional dissipative quantum XY model,Phys.Rev.B **94**,235156(2016);Yang et al.,Signatures of a strange metal in a bosonic system,Nature **601**,205(2022)]

[43][Maśka,Trivedi,Temperature-driven BCS-BEC crossover and Cooper-paired metallic phase in coupled boson-fermion systems,Phys.Rev.B **102**,144506(2020)]

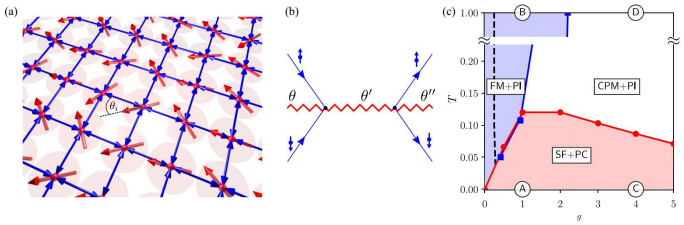


Figure 13.12: (a)费米子与相位自由度的耦合模型;(b)交换费米子诱导的相位之间的相互作用;(c)正方晶格上的温度–相互作用相图$(T-g)$,FM表示费米液体金属态,SF表示超流态;CPM表示Cooper对金属态,PC, PI分别代表相位自由度是否相干/不相干(有序或无序).

更有趣的情况是考虑d波超导体,那么在计入相位涨落后超导态之上的正常态会出现费米弧,同时单粒子态密度也显示赝能隙行为. [44]图13.13显示了费米弧的温度演化以及布里渊区反节点处单粒子能隙的打开.[45]注意到费米弧长度随温度升高逐渐增加,反节点能隙与实验数据定性符合.这个现象其实对应的是铜氧化物超导体赝能隙态的一类理论,也就是本章之前提及的预配对理论或者说超导涨落理论.当然,我们注意到在铜氧化物中赝能隙态随空穴掺杂会先于超导态消失,而这里过于简化的模型计算并不能说明赝能隙随空穴掺杂消失这一问题.因此,预配对理论对赝能隙的真实相关性仍需要进一步研究.

关联电子系统超导配对的确定*

对于一般的关联电子系统,我们如何判断其电子的超导配对或者说体系出现超导态的条件呢? 一个简单的方案是考查所谓超导配对关联函数,其定义为

$$G(k,k',\tau)=\langle T_\tau \hat{c}_{-k'\downarrow}(\tau)\hat{c}_{k'\uparrow}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\rangle. \tag{13.164}$$

[44][Alvarez,Dagotto,Fermi Arcs in the Superconducting Clustered State for Underdoped Cuprate Superconductors,Phys.Rev.Lett. **101**, 177001(2008);Zhong,Li,Han,Monte Carlo study of thermal fluctuations and Fermi-arc formation in d-wave superconductors,Phys.Rev.B**84**,024522(2011);Singh,Kadge,Bang,Majumdar,Fermi arcs and pseudogap phase in a minimal microscopic model of d-wave superconductivity,arXiv:2112:10965]这些蒙特卡洛数值模拟所采用的travelling cluster,Chebyshev多项式展开以及twisted边界条件算法对于其他研究问题有很强的借鉴价值.

[45][Singh,Kadge,Bang,Majumdar,Fermi arcs and pseudogap phase in a minimal microscopic model of d-wave superconductivity,arXiv:2112:10965]

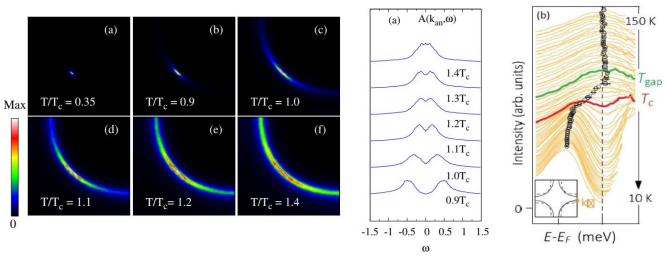


Figure 13.13: 左边(a)-(f):单粒子谱函数在费米能上随温度的演化,可以看到从低温的Dirac点演化($T < T_c$,T_c为超导临界温度)为高温下的费米弧($T > T_c$);右边(a)显示布里渊区反节点处单粒子谱函数的温度演化,其与(b)中铜氧化物超导体在过掺杂区的角分辨光电子谱实验数据基本符合.

对于BCS配对模型$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\hat{c}_{-k'\downarrow}\hat{c}_{k'\uparrow}$, 我们可以用微扰展开方法计算$G(k,k',\tau)$.当然,物理上更关心的是$G(k,k',\tau)$的傅里叶变换$G(k,k',\Omega_n)$,特别是$\Omega_n = 0$的部分,

$$G(k,k',\Omega_n = 0) = \int d\tau G(k,k',\tau) \tag{13.165}$$

当不考虑相互作用时,我们可以直接计算得到

$$G(k,k',\Omega_n = 0) = \int d\tau \langle T_\tau \hat{c}_{-k'\downarrow}(\tau)\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}\rangle_0 \langle T_\tau \hat{c}_{k'\uparrow}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\rangle_0 = \delta_{kk'}\int d\tau G^{(0)}_\downarrow(-k,\tau)G^{(0)}_\uparrow(k,\tau) \tag{13.166}$$

对于顺磁态$G^{(0)}_\uparrow(k,\tau) = G^{(0)}_\uparrow(k,\tau) = G^{(0)}(k,\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}G^{(0)}(k,\omega_n)$. 由此可得

$$\begin{aligned} G(k,k',\Omega_n = 0) &= \delta_{kk'}\int d\tau \frac{1}{\beta}\sum_{\omega'_n} e^{-i\omega'_n\tau}G^{(0)}(-k,\omega'_n)\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}G^{(0)}(k,\omega_n) \\ &= \delta_{kk'}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} G^{(0)}(-k,-\omega_n)G^{(0)}(k,\omega_n) \end{aligned} \tag{13.167}$$

这样我们发现其依赖于$\delta_{kk'}G^{(0)}(-k,-\omega_n)G^{(0)}(k,\omega_n)$,因此,我们可以定义粒子−粒子通道的关联函数$G(k,\omega_n,k',\omega'_n) = \langle c_{-k'\downarrow}(-\omega'_n)\hat{c}_{k'\uparrow}(\omega'_n)\hat{c}_{k\uparrow}(\omega_n)\hat{c}_{-k\downarrow}(-\omega_n)\rangle$来表示两个电子对于配对的贡献,[46]其微扰展开的最低阶贡献就是$\delta_{kk'}G^{(0)}(-k,-\omega_n)G^{(0)}(k,\omega_n)$,而高阶贡献可由Feynamn图形求和简单表示.在文献中,一般定义不可约粒子−粒子通道关联函数$G^{irr}(k,\omega_n,k',\omega'_n)$,其排除了所有不涉及粒子之间相互作用的部分,例如$\delta_{kk'}G^{(0)}(-k,-\omega_n)G^{(0)}(k,\omega_n)$.对于BCS配对模型,典型$G^{irr}(k,\omega_n,k',\omega'_n)$的图形表示如图13.14所示. 把图形的结果翻译为公式可得,(为简单起见将不明确

[46]这里的定义适用于路径积分表示

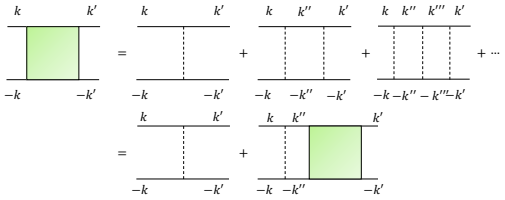


Figure 13.14: BCS配对模型的不可约粒子–粒子通道关联函数的图形表示.

写出频率依赖)

$$\begin{aligned} G^{irr}(k,k') &= G^{(0)}(k)G^{(0)}(-k)(-V_{k,k'})G^{(0)}(k')G^{(0)}(-k') \\ &+ G^{(0)}(k)G^{(0)}(-k)\sum_{k''}(-V_{k,k''})G^{(0)}(k'')G^{(0)}(-k'')(-V_{k'',k'})G^{(0)}(k')G^{(0)}(-k')+... \\ &= G^{(0)}(k)G^{(0)}(-k)\left[(-V_{k,k'})G^{(0)}(k')G^{(0)}(-k')+\sum_{k''}(-V_{k,k''})G^{irr}(k'',k')\right] \end{aligned}$$

事实上,这个结果相当于定义了配对相互作用顶角函数$\Gamma(k,k')$,

$$\Gamma(k,k') = -V_{k,k'} - \sum_{k''} V_{k,k''}G^{(0)}(k'')G^{(0)}(-k'')\Gamma(k'',k'). \tag{13.168}$$

这里$\Gamma(k,k')$的意义是频率和动量依赖的电子配对有效相互作用($V_{eff} = -\Gamma(k,k')$).一般而言,我们无法严格求解上述积分方程,但是在常用的所谓阶梯图(ladder diagram)近似下,也就是假设所有高阶图形与低阶图共同组成一个无穷的等比级数,那么相应的结果是(注意到BCS配对模型中$V_{k,k'} = -\frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{k'}$)

$$\begin{aligned} \Gamma(k,k') &\simeq \frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{k'} + \frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{k'}\sum_{k''}\frac{g}{V}\gamma_{k''}^2 G^{(0)}(k'')G^{(0)}(-k'')+... \\ &= \frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{k'}(1+\frac{g}{V}\sum_{k''}\gamma_{k''}^2 G^{(0)}(k'')G^{(0)}(-k'')+...) \\ &= \frac{\frac{g}{V}\gamma_k\gamma_{k'}}{1-g\chi_{pp}^{(0)}(T)} \qquad \chi_{pp}^{(0)} \equiv \frac{1}{V}\sum_k \gamma_k^2 G^{(0)}(k)G^{(0)}(-k) \end{aligned} \tag{13.169}$$

当$\Gamma(k,k')$分母为零,也就是体系发生超导配对时,我们有$1 = g\chi_{pp}^{(0)}(T=T_c)$,此时无相互作用电子配对极化率$\chi_{pp}^{(0)}$的温度定义了超导临界温度$T_c$.对频率求和可得

$$1 = \frac{g}{V}\sum_k \frac{\tanh\frac{\varepsilon_k}{2T_c}}{2\varepsilon_k} \tag{13.170}$$

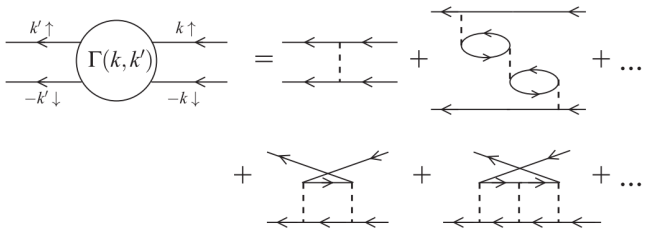


Figure 13.15: Hubbard模型在自旋涨落交换图像下的配对相互作用顶角函数.

注意到上式与BCS超导体的平均场方程在$T = T_c$时形式一致,因此我们看到配对相互作用顶角函数的有限温度奇异性能够刻画相互作用体系中的超导配对形成.

- 对于Hubbard模型($U > 0$),若假设相互作用U远小于能带宽度,那么仿照上述方法可得相应的配对顶角函数(图13.15)$\Gamma(k,k') = \frac{U}{1-U^2(\chi^{(0)}(k+k'))^2} + \frac{U^2\chi^{(0)}(k'-k)}{1-U\chi^{(0)}(k'-k)}$.[47] 进一步,$\Gamma(k,k') = U + \frac{3}{2}U^2\frac{\chi^{(0)}(k'-k)}{1-U\chi^{(0)}(k'-k)} - \frac{1}{2}U^2\frac{\chi^{(0)}(k'-k)}{1+U\chi^{(0)}(k'-k)}$, 这三部分分别对应裸相互作用,自旋涨落以及电荷涨落在RPA层次上的贡献.这种利用RPA近似得到自旋涨落对超导配对贡献的方式就是高温超导研究中著名的自旋涨落交换理论.

- 对正方晶格单带Hubbard模型在弱耦合低空穴掺杂的研究表明上述顶角倾向于给出$d_{x^2-y^2}$波配对,主要动量依赖是反铁磁波矢$k - k' = Q = (\pi,\pi)$;

- 关于正方晶格和Kagome晶格Hubbard模型RPA近似超导配对的详细内容可以参考B.M.Andersen组最近一些年的论文;[48](图13.16和图13.17)

- 需要指出,对于铜氧化物超导体,普遍认为若用Hubbard模型描述其性质,那么$U/t \sim 8$,也就是相互作用强度与能带宽度相当,此时弱耦合微扰论所得配对顶角的可靠性值得怀疑并且电荷与自旋涨落本征也会导致自旋和电荷有序态,这些态与超导态的竞争使问题更为复杂.

[47]这里我们采用文献[Scalapino,A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors,Rev.Mod.Phys. **84**,1383(2012)]中的定义,这与我们的关于顶角的定义相差一个负号.

[48][Rømer et al.,Pairing symmetry of the one-band Hubbard model in the paramagnetic weak-coupling limit: A numerical RPA study,Phys.Rev.B **92**,104505(2015);Rømer et al.,Superconductivity from repulsive interactions on the kagome lattice,Phys.Rev.B **106**,174514(2022)]

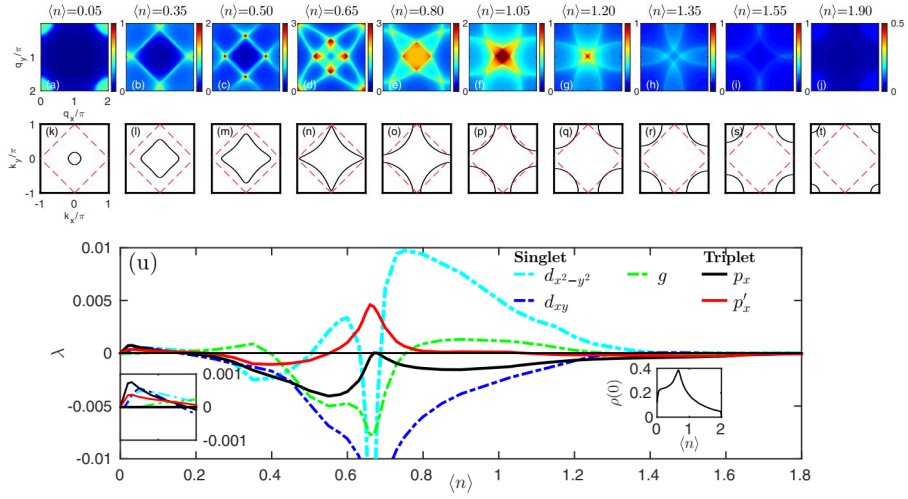


Figure 13.16: 正方晶格Hubbard模型RPA(自旋涨落交换)近似下的自旋极化率$\chi_s(q) = \frac{\chi^{(0)}(q)}{1-U\chi^{(0)}(q)}$((a)-(j)),自由电子情况下的费米面((k)-(t)),以及超导配对强度λ随电子密度$\langle n\rangle$的变化(u).

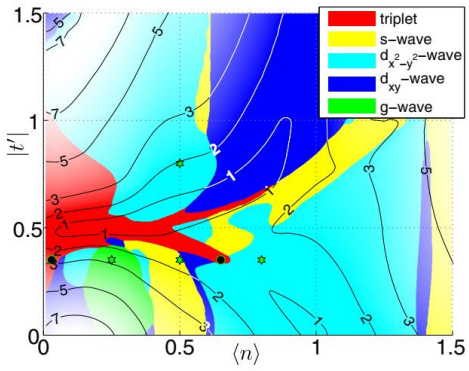


Figure 13.17: 正方晶格Hubbard模型RPA(自旋涨落交换)近似下主导的超导配对对称性随电子密度$\langle n\rangle$与次近邻跃迁t'的变化.(等高线代表相互作用U的强度)可以看到半满附近且t'不太大时$d_{x^2-y^2}$波配对是最主导的.

当然,上述方法主要适用于解析计算,对于数值模拟而言,判断体系是否进入超导态的方式是计算超流权重D_s,[49]

$$\frac{D_s}{\pi e^2}=\frac{\langle -\hat{K}_x\rangle}{N_s\hbar^2}-\Pi_{xx}(q_x=0,q_y\to 0,\Omega_n=0) \tag{13.171}$$

以及Drude权重

$$\frac{D}{\pi e^2}=\frac{\langle -\hat{K}_x\rangle}{N_s\hbar^2}-\Pi_{xx}(q_x=0,q_y=0,\Omega_n\to 0) \tag{13.172}$$

上述两个关系可通过在跃迁系数中引入矢量势$e^{i\int_n^m d\vec{l}\cdot\vec{A}}$(Peierls代换)并展开至$\vec{A}$的平方项,然后利用线性响应理论获得.这里$\langle -\hat{K}_x\rangle=\sum_{k\sigma}\frac{\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}}{m^s_k}$ 表示x 方向的平均动能,$m^x_k=(\partial^2\varepsilon_k/\partial k_x^2)^{-1}$是有效质量.$\Pi_{xx}$是顺磁流−流关联函数,其定义为$\Pi_{xx}(q,\tau)=\frac{1}{N_s}\langle T_\tau\hat{j}_x(q,\tau)\hat{j}_x(-q,0)\rangle$,$\hat{j}_x(q)=\frac{1}{\hbar}e^{iq_x/2}\sum_{k\sigma}v^x_{k+q/2}\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}_{k+q\sigma}$是$x$方向的流密度算符,$v^x_k=\partial\varepsilon_k/\partial k_x$是电子的群速度.最后$\Pi_{xx}(q,\Omega_n)=\int d\tau e^{i\Omega_n\tau}\Pi_{xx}(q,\tau)$.在零温且没有杂质散射时,在热力学极限下,$D_s\neq 0,D\neq 0$对应超导态,$D_s=0,D\neq 0$对应金属态,$D_s=0,D=0$对应绝缘态.

需要指出,数值计算Π_{xx}这类关联函数的时间/频率依赖通常比较困难,(尤其对量子蒙特卡洛模拟而言)因此一个可选的方式是计算配对关联函数,例如

$$P(\vec{r}_i)=\langle\hat{\Delta}(\vec{r}_i)\hat{\Delta}^\dagger(0)\rangle \tag{13.173}$$

对于$d_{x^2-y^2}(s^{+-})$波配对有$\hat{\Delta}(\vec{r}_i)=\hat{c}_{i\downarrow}\hat{c}_{i+x\uparrow}-\hat{c}_{i\downarrow}\hat{c}_{i+y\uparrow}(\hat{\Delta}(\vec{r}_i)=\hat{c}_{i\downarrow}\hat{c}_{i+x\uparrow}+\hat{c}_{i\downarrow}\hat{c}_{i+y\uparrow})$.当$\vec{r}_i\to\infty$时若体系处于超导态,那么$P(\vec{r}_i\to\infty)\simeq\langle\hat{\Delta}(\infty)\rangle\langle\hat{\Delta}^\dagger(0)\rangle\neq 0$.对有限体系,$\vec{r}_i\to\infty$替换为格点间的最大距离.类似的,我们也可以用配对极化率

$$\chi_{pp}=\frac{1}{N_s}\sum_{\vec{r}_i,\vec{r}_j}\int d\tau\langle\hat{\Delta}(\vec{r}_i,\tau)\hat{\Delta}^\dagger(\vec{r}_j,0)\rangle \tag{13.174}$$

在超导态,$\chi_{pp}\sim\int d\tau\langle\hat{\Delta}(\vec{r}_i)\rangle\langle\hat{\Delta}^\dagger(\vec{r}_j,0)\rangle\sim\beta|\langle\hat{\Delta}^\dagger(0,0)\rangle|^2$,因此随温度增加最后趋于发散的配对极化率说明超导态的出现.

经典超导体有拓扑序*

一个有趣的事实是有能隙BCS超导体实际上具有拓扑序.[18]这里的拓扑序由文小刚定义,即体系没有局域序参量,对潜在流形的整体拓扑具有敏感性并显示出量子数的分数化.不要和拓扑绝缘体中的拓扑序相混淆.超导体中拓扑序来源十分简单.超导涡旋携带半个单位磁通$\Phi_0=\frac{2\pi\hbar}{2e}$而系统准粒子携带电荷$e$. 因此,交换准粒子和涡旋产生的统计角是$\theta=\frac{1}{2}\Phi_0\frac{e}{\hbar}=\frac{\pi}{2}$,这样它们可称为半子(seminon), 一类特殊的任意子. 相关的性质可由如下背景场作用量描述(BF作用量)

$$S=\int dtd^2x\left[\frac{1}{\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu b_\lambda-j^q_\mu a_\mu-j^v_\mu b_\mu\right],$$

[49][Scalapino,White,Zhang,Superfluid density and the Drude weight of the Hubbard model,Phys.Rev.Lett. **68**,2830(1992)]作者利用量子蒙特卡洛计算了Hubbard模型的D_s,D.

这里第一项描述准粒子j_μ^q(涡旋)和j_μ^v(超导准粒子)间的半子统计,剩下两项是粒子流与有效规范场耦合.然而,BCS超导体中的涡旋通常是静态的,因此交换粒子实际上并没有在物理上得以实现,BCS超导体中拓扑序也没在实验中观测到.

拓扑超导/超流:孕育量子计算的宠儿?

通常认为^{3}He-A与^{3}He-B是拓扑超流态,其块体由非零的拓扑不变量描述,而边界则显示非平凡的边界模式.(例如手性Majonana费米子)电子系统Sr_2RuO_4和$Cu_xBi_{1-x}Se_3$目前是普遍推测的拓扑超导态候选者.

无自旋/自旋极化费米子的$p+ip$波态

我们考虑如下无自旋或者自旋完全极化费米子的BCS平均场哈密顿量:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_k \left[\xi_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \frac{1}{2}(\Delta_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{-k}^\dagger + \Delta_k^* \hat{c}_{-k}\hat{c}_k)\right] \qquad (13.175)\\ &= \frac{1}{2}\sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_k^\dagger & \hat{c}_{-k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_k & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -\xi_{-k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_k \\ \hat{c}_{-k}^\dagger\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\sum_k \xi_{-k}\\ &= \frac{1}{2}\sum_k \hat{\psi}_k^\dagger \hat{h}_k \hat{\psi}_k + \frac{1}{2}\sum_k \xi_{-k} \qquad (13.176)\end{aligned}$$

通常的p_x波和p_y波的配对函数在连续空间中的形式是

$$p_x:\ \ \Delta_k = \Delta k_x;\ \ p_y:\ \ \Delta_k = \Delta k_y \qquad (13.177)$$

而我们这里关心的拓扑超流或者超导态主要涉及的是$p_x \pm ip_y$ 波,即

$$p_x + ip_y:\ \ \Delta_k = \Delta(k_x + ik_y);\ \ p_x - ip_y:\ \ \Delta_k = \Delta(k_x - ik_y) \qquad (13.178)$$

我们接下来以$p_x + ip_y$为代表的手征态为例,研究相关的二维拓扑超流态.一般而言,自由粒子色散ξ_k是动量的偶函数(这来自于系统的中心反演对称性),且在极值点展开有如下自由粒子形式

$$\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu = \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m} - \mu \qquad (13.179)$$

这样动量依赖的有效哈密顿量可写为如下形式:

$$\hat{h}_k = \begin{pmatrix} \frac{k^2}{2m} - \mu & \Delta(k_x + ik_y) \\ \Delta(k_x - ik_y) & -(\frac{k^2}{2m} - \mu)\end{pmatrix} = \Delta k_x \hat{\sigma}^x - \Delta k_y \hat{\sigma}^y + \left(\frac{k^2}{2m} - \mu\right)\hat{\sigma}^z \equiv \vec{d}(\vec{k})\cdot\hat{\vec{\sigma}} \qquad (13.180)$$

这里的$\vec{d}$矢量定义为

$$\vec{d} = (d_x, d_y, d_z) = \left(\Delta k_x, -\Delta k_y, \frac{k^2}{2m} - \mu\right). \qquad (13.181)$$

现在,让我们考虑Bogoliubov变换$\hat{\alpha}_k = \mu_k \hat{c}_k - \nu_k \hat{c}_{-k}^\dagger, \hat{\alpha}_{-k}^\dagger = -\nu_{-k}^* \hat{c}_k + \mu_{-k}^* \hat{c}_{-k}^\dagger$.注意到这个变换与先前除了拓扑平凡超导时采用的形式不同,其原因是我们处理的是无自旋的超导配对体系.这个BCS 型哈密顿量可以对角化为

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_k E_k(\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k - \hat{\alpha}_{-k}\hat{\alpha}_{-k}^\dagger) + \frac{1}{2}\sum_k \xi_k = \sum_k E_k \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \frac{1}{2}\sum_k (\xi_k - E_k) \qquad (13.182)$$

而且$E_k=\sqrt{\xi_k^2+|\Delta_k|^2}$,

$$\mu_k=\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi_k}{E_k}\right)},\quad \nu_k=-\frac{\Delta_k}{|\Delta_k|}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi_k}{E_k}\right)}. \tag{13.183}$$

如果我们取$k=0,\mu=0$,那么立即发现$\hat{\alpha}_0=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}_0+\hat{c}_0^\dagger)$,这表明$\hat{\alpha}_0=\hat{\alpha}_0^\dagger$,也就是说$\hat{c}_0$是Majorana费米子.事实上,通过后面的计算可以知道$\mu>0$时体系是拓扑超导态而$\mu<0$时是平凡超导态.(取$m>0$)因此Majorana费米子恰好出现在两者转变点处,换句话说,如果考虑拓扑超导和平凡超导的异质结构,也就是把它们两者黏在一起,然后两者的界面处μ从>0连续变化至<0,那么我们期待两者粘连的地方会出现Majorana费米子.

同时,体系的基态由BCS波函数描述,即

$$|\Omega\rangle=\prod_k{}'(\mu_k+\nu_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger)|0\rangle=\prod_k{}'\mu_k(1+g_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger)|0\rangle\sim e^{\sum_k g_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger}|0\rangle. \tag{13.184}$$

这里$'$表示仅对$k,-k$求一次,$g_k=\nu_k/\mu_k=-(E_k-\xi_k)/\Delta_k^*$.

当然,我们也可以把本征值问题改写为$[\hat{h}_k,\hat{\alpha}_k]=E_k\alpha_k$,即有

$$E_k\mu_k=\xi_k\mu_k-\Delta_k^*\nu_k,\quad E_k\nu_k=-\Delta_k\mu_k-\xi_k\nu_k. \tag{13.185}$$

这相当于

$$i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\mu_k\\ \nu_k\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\xi_k & -\Delta_k^*\\ -\Delta_k & -\xi_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu_k\\ \nu_k\end{pmatrix} \tag{13.186}$$

Berry相位

如果把Bogoliubov变换系数看成是等效能带绝缘体的波函数

$$|\psi_k\rangle=\begin{pmatrix}\mu_k\\ \nu_k\end{pmatrix} \tag{13.187}$$

那么对于二维系统而言可以定义动量空间的Berry联络/规范势

$$\vec{a}(k)=(a_x,a_y) \tag{13.188}$$

$$a_x=i\langle\psi_k|\frac{\partial}{\partial k_x}|\psi_k\rangle=i(\mu_k^*\partial_{k_x}\mu_k+\nu_k^*\partial_{k_x}\nu_k) \tag{13.189}$$

$$a_y=i\langle\psi_k|\frac{\partial}{\partial k_y}|\psi_k\rangle=i(\mu_k^*\partial_{k_y}\mu_k+\nu_k^*\partial_{k_y}\nu_k) \tag{13.190}$$

那么对应的Berry曲率或者说Berry规范场强/等效磁感应强度是

$$b_z=f_{xy}=\partial_{k_x}a_y-\partial_{k_y}a_x=i(\partial_{k_x}\mu_k^*\partial_{k_y}\mu_k-\partial_{k_y}\mu_k^*\partial_{k_x}\mu_k+\partial_{k_x}\nu_k^*\partial_{k_y}\nu_k-\partial_{k_y}\nu_k^*\partial_{k_x}\nu_k) \tag{13.191}$$

对于晶格系统,动量空间可限制于第一布里渊区,那么Berry规范场在第一布里渊区的环量,或者说等效磁场通过第一布区的磁通量是

$$Q_M = \oint d\vec{l}\cdot\vec{a} = \int dk_x dk_y b_z = \int dk_x dk_y f_{xy} \tag{13.192}$$

$$\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi} dk_x dk_y(\partial_{k_x}\mu_k^*\partial_{k_y}\mu_k - \partial_{k_y}\mu_k^*\partial_{k_x}\mu_k) = \int_0^{2\pi} dk_y \int_0^{2\pi} dk_x \partial_{k_x}(\mu_k^*\partial_{k_y}\mu_k)\\
&-\int_0^{2\pi} dk_x \int_0^{2\pi} dk_y \partial_{k_x}(\mu_k^*\partial_{k_x}\mu_k)\\
&=\int_0^{2\pi} dk_y[\mu_k^*(2\pi,k_y)\partial_{k_y}\mu_k(2\pi,k_y) - \mu_k^*(0,k_y)\partial_{k_y}\mu_k(0,k_y)]\\
&-\int_0^{2\pi} dk_x[\mu_k^*(k_x,2\pi)\partial_{k_x}\mu_k(k_x,2\pi) - \mu_k^*(k_x,0)\partial_{k_x}\mu_k(k_x,0)]
\end{aligned}$$

注意到$\mu_{2\pi,k_x}$与μ_{0,k_x}物理上应该对应同一个状态(直到一个相位差),那么我们可以设

$$\mu_k(2\pi,k_y) = e^{i\phi(2\pi,k_y)}\mu_k(0,k_y) \tag{13.193}$$

同理有

$$\mu_k(k_x,2\pi) = e^{i\phi(k_x,2\pi)}\mu_k(k_x,0) \tag{13.194}$$

这样我们得到

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} dk_x dk_y(\partial_{k_x}\mu_k^*\partial_{k_y}\mu_k - \partial_{k_y}\mu_k^*\partial_{k_x}\mu_k) &= \int_0^{2\pi} dk_y|\mu_k^*(0,k_y)|^2 i\partial_{k_y}\phi(2\pi,k_y)\\
&+\int_0^{2\pi} dk_x|\mu_k^*(k_x,0)|^2 i\partial_{k_x}\phi(k_x,0)
\end{aligned}$$

采用同样的处理可得(注意ν_k与μ_k有相同的相位,这是由于它们构成的$|\psi_k\rangle$在相同的相位下不变)

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} dk_x dk_y(\partial_{k_x}\nu_k^*\partial_{k_y}\nu_k - \partial_{k_y}\nu_k^*\partial_{k_x}\nu_k) &= \int_0^{2\pi} dk_y|\nu_k^*(0,k_y)|^2 i\partial_{k_y}\phi(2\pi,k_y)\\
&+\int_0^{2\pi} dk_x|\nu_k^*(k_x,0)|^2 i\partial_{k_x}\phi(k_x,0)
\end{aligned}$$

这样我们发现

$$\begin{aligned}
Q_M &= i[\int_0^{2\pi} dk_y(|\mu_k^*(0,k_y)|^2 + |\nu_k^*(0,k_y)|^2) i\partial_{k_y}\phi(2\pi,k_y)\\
&+ \int_0^{2\pi} dk_x(|\mu_k^*(k_x,0)|^2 + |\nu_k^*(k_x,0)|^2) i\partial_{k_x}\phi(k_x,0)]\\
&= -\left[\int_0^{2\pi} dk_y\partial_{k_y}\phi(2\pi,k_y) + \int_0^{2\pi} dk_x\partial_{k_x}\phi(k_x,0)\right] \qquad (13.195)\\
&= -[\phi(2\pi,2\pi) - \phi(2\pi,0) + \phi(2\pi,0) - \phi(0,0)] \qquad (13.196)
\end{aligned}$$

同时,我们知道

$$|\psi_{2\pi,2\pi}\rangle = e^{i\phi(2\pi,2\pi)}|\psi_{0,2\pi}\rangle = e^{i\phi(2\pi,2\pi)}e^{i\phi(0,2\pi)}|\psi_{0,0}\rangle = e^{i(\phi(2\pi,2\pi)+\phi(0,2\pi))}e^{-i(\phi(2\pi,0)+\phi(0,0))}|\psi_{2\pi,2\pi}\rangle \tag{13.197}$$

由于波函数的单值性,必须要求

$$\phi(2\pi,2\pi) - \phi(2\pi,0) + \phi(2\pi,0) - \phi(0,0) = 2\pi n, \quad n \in \mathcal{Z} \tag{13.198}$$

这样可得磁通量或者说Berry相位是2π的整数倍

$$\gamma_c \equiv Q_M = 2\pi n \tag{13.199}$$

如果定义所谓的第一Chern数

$$C_1 = \frac{\gamma_c}{2\pi} \in \mathcal{Z} \tag{13.200}$$

其取值必定为整数,可以用来刻画不同的状态.对于当前的模型,可以证明其Chern数满足以下公式

$$\boxed{\mathcal{C}_1 = \frac{1}{4\pi}\int d^2k\hat{\vec{d}}\cdot\left(\frac{\partial\hat{\vec{d}}}{\partial k_x}\times\frac{\partial\hat{\vec{d}}}{\partial k_y}\right)} \tag{13.201}$$

拓扑不变量

如果只需要准粒子的能谱,那么直接对角化2×2矩阵h_{eff}就可求得体系的能谱

$$E_\pm = \pm E_k = \pm|\vec{d}(k)| = \pm\sqrt{\Delta^2k^2 + \left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)^2} \tag{13.202}$$

对于这个能谱,可以看到当且仅当$\mu = 0$时体系能谱为零,否则总是存在一个有限能隙分开准粒子的激发态与基态.既然基态与激发态之间存在能隙,那么我们可以定义拓扑不变量.考虑到(系统定义的动量)空间是二维的,单位$\vec{d}$矢量$\hat{\vec{d}} = \vec{d}/|\vec{d}|$有两个独立分量,最直接的尝试是所谓的Chern数(系统不具有时间反演对称,因而Chern数可以非零)

$$\mathcal{C}_1 = \frac{1}{4\pi}\int d^2k\hat{\vec{d}}\cdot\left(\frac{\partial\hat{\vec{d}}}{\partial k_x}\times\frac{\partial\hat{\vec{d}}}{\partial k_y}\right) = \frac{1}{4\pi}\int d^2k\frac{1}{|d|^3}\vec{d}\cdot\left(\frac{\partial\vec{d}}{\partial k_x}\times\frac{\partial\vec{d}}{\partial k_y}\right) \tag{13.203}$$

对于晶格系统,Chern数计算中的积分是对第一布里渊区积分,此时因子4π应换为相应的第一布里渊区面积.对于连续系统,积分扩展至无穷.对于当前的模型,我们有

$$\partial_{k_x}\vec{d} = \left(\Delta, 0, \frac{k_x}{m}\right) \tag{13.204}$$

$$\partial_{k_y}\vec{d} = \left(0, -\Delta, \frac{k_y}{m}\right) \tag{13.205}$$

$$\vec{d}\cdot(\partial_{k_x}\vec{d}\times\partial_{k_y}\vec{d}) = \Delta^2\left(\frac{k^2}{2m}+\mu\right) \tag{13.206}$$

这样

$$\mathcal{C}_1 = \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} kdk \frac{\Delta^2\left(\frac{k^2}{2m}+\mu\right)}{[\Delta^2k^2+\left(\frac{k^2}{2m}-\mu\right)^2]^{3/2}} \tag{13.207}$$

$$= \frac{\Delta^2\pi}{4\pi}\int_0^{\infty} dk^2 \frac{\frac{k^2}{2m}+\mu}{[\Delta^2k^2+(\frac{k^2}{2m}-\mu)^2]^{3/2}} \tag{13.208}$$

$$= \frac{2m\Delta^2\pi}{4\pi} 2\frac{|\mu|+\mu\frac{2m\Delta^2}{|2m\Delta^2|}}{2m\mu\Delta^2} \tag{13.209}$$

$$= \frac{1}{2}\left[\mathrm{sign}(\mu)+\mathrm{sign}(m)\right] \tag{13.210}$$

换句话说,如果我们假定粒子质量$m>0$,那么当化学势$\mu>0$时体系的Chern数$\mathcal{C}_1=1$,而当化学势小于零时,体系的Chern数为零,$\mu=0$是Chern数为不同取值的分界线.注意到这个行为与一维横场量子Ising 模型以及SSH模型的相似性,我们认为不同Chern数代表了系统的不同状态,特别是Chern数非零的态是拓扑非平凡的态,即拓扑超流/超导态,而Chern数为零的则是拓扑平凡态,代表简单的超流/超导态.

此外,我们也注意到$\mu>0$的自由粒子基态是大量填充的费米海,而$\mu<0$相当于没有填充的真空态,一般我们称前者是弱配对态,而后者是强配对态.这实际上说明没有超导的系统随化学势变化而发生Lifshitz相变.

- 历史上$p+ip$拓扑超导受到广泛的关注来自于Read和Green在2000年的一篇文章中指出其与分数量子霍尔效应中著名的Moore-Read Pfaffian态的直接联系. [50]当然对当前而言,拓扑超导态最大的特点在于其可能存在Majorana费米子激发,这种激发既可以出现在体系的边界附近,也可以存在于拓扑超导体的涡旋核心附近.无论是纯粹的拓扑超导还是Moore-Read态,其支持非阿贝尔任意子的特性使得相关研究可能对拓扑量子计算十分重要.

让我们考虑y方向是开边界的情况,也就是$y=0$处是体系的边界,$y>0$是体系的内部,而x方向仍然具有平移不变性.最简单的处理方法就是把BdG方程中的k_y替换为$-i\partial_y$,并且$\xi_k\simeq-\mu$,(既然考虑拓扑超导态,那么设$\mu>0$)即有

$$i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\mu(y)\\ \nu(y)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\mu & -\Delta(k_x-\partial_y)\\ -\Delta(k_x+\partial_y) & +\mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu(y)\\ \nu(y)\end{pmatrix} \tag{13.211}$$

设$\mu(y)=\mu_0e^{-iEt}e^{-\lambda y},\nu(y)=\nu_0e^{-iEt}e^{-\lambda y},(\lambda>0)$

$$E\begin{pmatrix}\mu_0\\ \nu_0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\mu & -\Delta(k_x+\lambda)\\ -\Delta(k_x-\lambda) & +\mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu_0\\ \nu_0\end{pmatrix} \tag{13.212}$$

[50][Read,Green,Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum Hall effect,Phys.Rev.B **61**,10267(2000)]

这样体系的本征能量是$E=\pm\sqrt{\mu^2+\Delta^2(k_x^2-\lambda^2)}$先考虑零能态的情况,也就是设$E=0,k_x=0$,此时有$\mu=\Delta\lambda$,

$$0=\mu\begin{pmatrix}-1 & -1\\ +1 & +1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu_0\\ \nu_0\end{pmatrix}\Rightarrow\mu_0=-\nu_0. \tag{13.213}$$

这说明零模态的波函数可以写成

$$|\Psi_0\rangle=\mu_0\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}e^{-\frac{\mu}{\Delta}y} \tag{13.214}$$

其对应的准粒子就是$\hat{\alpha}_0=\mu_0(\hat{c}_0+\hat{c}_0^\dagger)$,这显然是Majorana费米子.此外,当$k_x\neq 0$时,我们发现$E=\pm\Delta k_x$,或者写成$E=\pm|k_x|$.我们知道超导体的准粒子能量都大于零,因此需要取$E=\Delta|k_x|$.取$E=-\Delta k_x(k_x<0)$代入方程可得$(\mu-\Delta k_x)\mu_0=(-\mu-\Delta k_x)\nu_0$.(注意到$E=+\Delta k_x$并不能得到非零的解).所以我们发现体系在开边界附近确实存在一支能量为$E=-\Delta k_x,(k_x<0)$的边界模式,注意到每个动量k_x仅有一个模式,因此就做手性模式.同时注意到这些模式与零模类似,都是粒子空穴混合后形成的Majorana费米子,这样我们可以写出其二次量子化的哈密顿量

$$\hat{H}=\sum_{k_x>0}\Delta k_x\hat{\gamma}_{-k_x}\hat{\gamma}_{k_x}=\sum_{k_x>0}\Delta k_x\hat{\gamma}_{k_x}^\dagger\hat{\gamma}_{k_x}. \tag{13.215}$$

这里为了符号简单设$k_x\to -k_x$,上述哈密顿量描述手性Majorana费米子边界态.定性来说,拓扑超导态与边界外的真空态自然拓扑上不等价,因此作为两者分界面的边界上必然会有非平凡的模式,同时超导体并不守恒粒子数,因此通常的手性费米子边界态不会存在,取而代之的是天生就描述粒子数不守恒但费米子宇称(费米子总数的奇偶性,BCS超导态都具有这类对称性)守恒的Majorana费米子,这就是Majorana手性边界态出现的主要原因.

当然,在凝聚态物理中我们最常用的是晶格模型,上述拓扑超导体所对应的晶格模型是一个定义在正方晶格上的紧束缚模型,即

$$\hat{H}=-t\sum_{j,\delta=x,y}(\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_{j+\delta}+\text{H.c.})+\frac{\Delta}{2}\sum_j(-i\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_{j+x}^\dagger+\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_{j+y}^\dagger)+\frac{\Delta}{2}\sum_j(i\hat{c}_{j+x}\hat{c}_j+\hat{c}_{j+y}\hat{c}_j). \tag{13.216}$$

把上面每个部分做傅里叶变换可得

$$\begin{aligned}\sum_{j,\delta=x,y}(\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_{j+\delta}+\text{H.c.})&=\sum_k(e^{ik_x}+e^{ik_y})\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k+\text{H.c.}\\ \sum_j(-i\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_{j+x}^\dagger+\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_{j+y}^\dagger)&=\sum_k(-ii\sin k_x+i\sin k_y)\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger,\end{aligned} \tag{13.217}$$

这样哈密顿量是

$$\hat{H}=\sum_k\varepsilon_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k+\frac{1}{2}\sum_k(\Delta_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger+\Delta_k^*\hat{c}_{-k}\hat{c}_k). \tag{13.218}$$

$\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$,$\Delta_k = \Delta(\sin k_x + i \sin k_y)$.最后在$k = 0$附近展开就有$\varepsilon_k \simeq tk^2 - 2t \equiv \frac{k^2}{2m} - \mu$,$\Delta_k \simeq \Delta(k_x + ik_y)$.

为了讨论边界态,我们仅对x方向做傅里叶变换,由此可得$\hat{c}_j = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \sum_{k_x} e^{ik_x j_x} \hat{c}_{j_y}$,那么体系的哈密顿量是

$$\begin{aligned}
&\hat{H} = \sum_{k_x} \hat{H}(k_x) \\
&\hat{H}(k_x) = -t \sum_{j_y} (\hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}_{j_y+1}(k_x) + \hat{c}^\dagger_{j_y+1}(k_x)\hat{c}_{j_y}(k_x)) - 2t \cos k_x \sum_{j_y} \hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}_{j_y}(k_x) \\
&+ \frac{\Delta}{2} \sum_{j_y} (-ie^{ik_x} \hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}^\dagger_{j_y}(-k_x) + \hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}^\dagger_{j_y+1}(-k_x)) + \text{H.c.}
\end{aligned}$$

可以看到$\hat{H}(k_x)$与$\hat{H}(-k_x)$互相有耦合.这样可以引入$\bar{H}(k_x) = \hat{H}(k_x) + \hat{H}(-k_x)$,此时哈密顿量$\hat{H} = \sum_{k_x>0} \bar{H}(k_x)$,

$$\begin{aligned}
&\bar{H}(k_x) = -t \sum_{j_y} (\hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}_{j_y+1}(k_x) + \hat{c}^\dagger_{j_y+1}(k_x)\hat{c}_{j_y}(k_x) + \hat{c}^\dagger_{j_y}(-k_x)\hat{c}_{j_y+1}(-k_x) + \hat{c}^\dagger_{j_y+1}(-k_x)\hat{c}_{j_y}(-k_x)) \\
&+ \frac{\Delta}{2} \sum_{j_y} (\hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}^\dagger_{j_y+1}(-k_x) + \hat{c}^\dagger_{j_y}(-k_x)\hat{c}^\dagger_{j_y+1}(k_x) + \hat{c}_{j_y+1}(-k_x)\hat{c}_{j_y}(k_x) + \hat{c}_{j_y+1}(k_x)\hat{c}_{j_y}(-k_x)) \\
&-2t \cos k_x \sum_j (\hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}_{j_y}(k_x) + \hat{c}^\dagger_{j_y}(-k_x)\hat{c}_{j_y}(-k_x)) + \Delta \sin k_x \sum_{j_y} (\hat{c}^\dagger_{j_y}(k_x)\hat{c}^\dagger_{j_y}(-k_x) + \hat{c}_{j_y}(-k_x)\hat{c}_{j_y}(k_x)).
\end{aligned}$$

对角化这个哈密顿量就可以得到相应的本征值,特别是边界态的能量.

时间反演不变的拓扑超导态*

如果我们考虑$p_x - ip_y$态,那么相应的Chern数恰好与$p_x + ip_y$相差一个符号,即$-\mathcal{C}_1$. 显然,如果一个系统由完全一样的$p_x + ip_y$和$p_x - ip_y$构成,那么体系的总Chern数为零,这出现在时间反演不变的拓扑超导体当中.此时,自旋相反的电子之间各自满足相应的BCS哈密顿量且分别属于$p + ip$和$p - ip$态,

$$\begin{aligned}
\hat{H} \;=\; & \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{k\uparrow} & \hat{c}_{-k\uparrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & \Delta(k_x + ik_y) \\ \Delta(k_x - ik_y) & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} \\ \hat{c}^\dagger_{-k\uparrow} \end{pmatrix} \\
& + \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} & \hat{c}_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta(k_x - ik_y) \\ -\Delta(k_x + ik_y) & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\downarrow} \\ \hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

对于这类模型,时间反演操作的效果是

$$i \to -i, \quad \hat{c}_{k\uparrow} \to \hat{c}_{-k\downarrow}, \quad \hat{c}_{k\downarrow} \to -\hat{c}_{-k\uparrow} \tag{13.219}$$

注意哈密顿矩阵中的动量本身无需变换,但其中虚数因子i在取复共轭操作下需要改变.那么对于这个模型的自旋向上部分施加时间反演操作有

$$\begin{aligned}\hat{H}_\uparrow &\rightarrow \frac{1}{2}\sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} & \hat{c}_{k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & \Delta(k_x - ik_y) \\ \Delta(k_x + ik_y) & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{-k\downarrow} \\ \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} & \hat{c}_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta(k_x - ik_y) \\ -\Delta(k_x + ik_y) & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\downarrow} \\ \hat{c}^\dagger_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= H_\downarrow \end{aligned} \tag{13.220}$$

也就是说在时间反演变换下自旋向上部分变换为自旋向下部分,同理也有$\hat{H}_\downarrow \rightarrow \hat{H}_\uparrow$,当我们同时包含$\hat{H}_\uparrow$ 和$\hat{H}_\downarrow$时,体系时间反演不变,即时间反演不变的拓扑超导体.根据先前的讨论,我们有 $\mathcal{C}_{1\uparrow} = -\mathcal{C}_{1\downarrow} = \frac{1}{2}\left[\text{sign}(\mu) + \text{sign}(m)\right]$. 这样体系的总(电荷)Chern数为零

$$\mathcal{C}_{1tot} = \mathcal{C}_{1\uparrow} + \mathcal{C}_{1\downarrow} = 0 \tag{13.221}$$

而我们可以定义自旋Chern数

$$\mathcal{C}_{1spin} = \mathcal{C}_{1\uparrow} - \mathcal{C}_{1\downarrow} = \left[\text{sign}(\mu) + \text{sign}(m)\right] \tag{13.222}$$

这样时间反演不变超导体也可以分为两类,一类是拓扑的$\mathcal{C}_{1spin} = \pm 2$, 另一类是平凡的$\mathcal{C}_{1spin} = 0$.既然这里分类只有两类,我们也可以用$Z_2$不变量来刻画.

非阿贝尔任意子与拓扑量子计算*

量子计算

计算是指执行大量简单操作的过程.在经典计算机中,操作的对象是比特,也就是0和1,对比特的操作通过门来实现.尽管现代计算机计算能力已经大幅度增强,但是如费曼指出的那样,一般的多粒子量子系统难以用经典计算机模拟,因此人们进而希望用量子系统来建造更为有力的计算机,即量子计算机.从观念上来看,量子计算机是经典计算机的类比,只不过在量子计算机中,比特由量子比特代替,即量子版的$0, 1$:$|0\rangle, |1\rangle$.同时量子比特由量子门进行演化,这些演化由幺正算符描述并可以执行任意想要的状态变化.

量子计算机在实际应用中的主要障碍是如何在实验室当中实现,而非任何理论上的问题.我们知道一个可靠的量子计算需要在初始化量子比特,执行量子门操作以及读取计算结果三个方面都有高精度.然而,任何实验过程中都存在误差,并且当系统与外界耦合时也会导致误差.因此,人们提出量子误差修正(quantum error correction)的方案以克服这个问题.尽管原则上我们可以修正误差并执行有意义的量子信息处理,但是可靠的量子计算在当前实验条件下依然难以实现,(修正误差所用的量子比特甚至会远多于用来计算的比特数目)所以不断地寻找新的量子计算设备/载体是解决误差修正问题的一个有效途径.拓扑量子计算是其中一种可能的解决方案.在拓扑量子计算中,我们通过操作非阿贝尔

任意子来进行量子计算.初始状态的制备可通过产生和排列任意子实现,而量子门操作对应于任意子的交换,状态的测量对应任意子电荷的测量.

Majorana费米子与非阿贝尔任意子

我们知道全同粒子根据两个粒子交换导致的波函数相位改变一般分为玻色子,费米子以及任意子,即

$$\psi(r_1,...,r_i,...,r_j,...)=e^{i\theta}\psi(r_1,...,r_j,...,r_i,...) \tag{13.223}$$

这里$\theta=0$代表玻色子的相位,$\theta=\pi$代表费米子,而$\theta\neq 0,\pi$则对应任意子.同时,连续交换粒子导致的相位满足乘法的交换律,即$e^{i\theta_{12}}e^{i\theta_{34}}=e^{i\theta_{34}}e^{i\theta_{12}}$, 这样我们也把相应的操作称为阿贝尔的,即可交换的操作.对于交换后产生相位为θ的任意子,我们称其为阿贝尔任意子.进一步,可以设想如果一个多粒子系统的波函数在交换粒子后具有矩阵形式的相位,那么可称组成该系统的粒子为非阿贝尔任意子.

在相互作用起主导作用的分数量子霍尔效应中分析非阿贝尔任意子在理论上是一个困难的问题,因此我们转而讨论更为简单的$p+ip$波拓扑超导态.通过求解半量子涡旋(一个超导磁通)背景下的$p+ip$波态的本征值方程,我们会发现体系存在一个稳定的零能量模式,即Majorana零模态,类似于先前在一维Kitaev超导模型得到的Majoranna边界态模式.这个Majorana零能模式束缚在超导涡旋附近,在实际研究时我们可以把它们看成一个整体,当我们说Majoranna费米子时,实际指的是Majorana 费米子与涡旋的复合体,这一点在下面的讨论中是暗含的.假定通过适当调节可使得系统出现$2N$个Majorana零模,记为$\hat{\gamma}_j, j=1...2N$.注意到Majorana费米子可以两两组合成通常的复费米子$\hat{c}_i=(\hat{\gamma}_i+i\hat{\gamma}_{i+1})/2$, 这样得到$N$个$\hat{c}$费米子.

当交换$\hat{\gamma}_i$和$\hat{\gamma}_{i+1}$时,(对这类将要提到的非阿贝尔任意子而言交换操作也成称为braiding)Majorana费米子所在的涡旋改变2π 相位,得到

$$\hat{\gamma}_i\to\hat{\gamma}_{i+1} \tag{13.224}$$

$$\hat{\gamma}_{i+1}\to-\hat{\gamma}_i \tag{13.225}$$

$$\hat{\gamma}_j\to\hat{\gamma}_j,\quad j\neq i,\neq i+1 \tag{13.226}$$

第三个公式表明不参与交换的Majorana费米子不受任何影响.(实际上忽略了费米子本身交换的相位)数学上,可以用一些列算符来描述Majorana费米子的交换操作

$$\hat{T}_i\hat{T}_j=\hat{T}_j\hat{T}_i,\quad |i-j|>1 \tag{13.227}$$

$$\hat{T}_i\hat{T}_j\hat{T}_i=\hat{T}_j\hat{T}_i\hat{T}_j,\quad |i-j|=1 \tag{13.228}$$

具体而言,有

$$\boxed{\hat{T}_i = e^{\frac{\pi}{4}\hat{\gamma}_{i+1}\hat{\gamma}_i} = e^{\frac{\pi}{4}i(2\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_i-1)} = \cos\frac{\pi}{4} + i(2\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_i - 1)\sin\frac{\pi}{4} = \cos\frac{\pi}{4} + \hat{\gamma}_{i+1}\hat{\gamma}_i\sin\frac{\pi}{4} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\hat{\gamma}_{i+1}\hat{\gamma}_i)} \quad (13.229$$

现在考虑四个Majorana费米子$\hat{\gamma}_1,\hat{\gamma}_2,\hat{\gamma}_3,\hat{\gamma}_4$, 这样总共可以构成两个复费米子

$$c_1 = \frac{1}{2}(\hat{\gamma}_1 + i\hat{\gamma}_2) \tag{13.230}$$

$$c_2 = \frac{1}{2}(\hat{\gamma}_3 + i\hat{\gamma}_4) \tag{13.231}$$

对于这两个费米子,体系可以构成的简并态是四个粒子数态

$$|0,0\rangle,\ \ |1,0\rangle = \hat{c}_1^\dagger|0,0\rangle,\ \ |0,1\rangle = \hat{c}_2^\dagger|0,0\rangle,\ \ |1,1\rangle = \hat{c}_1^\dagger\hat{c}_2^\dagger|0,0\rangle \tag{13.232}$$

以这四个态为多体态的局域基矢,我们可以写出Majorana费米子交换算符的矩阵表达形式. 首先来看$\hat{T}_1$,

$$\hat{T}_1|0,0\rangle = e^{\frac{\pi}{4}\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_1}|0,0\rangle = e^{\frac{\pi}{4}i(2\hat{c}_1^\dagger\hat{c}_1-1)}|0,0\rangle = e^{-i\frac{\pi}{4}}|0,0\rangle \tag{13.233}$$

$$\hat{T}_1|1,0\rangle = e^{\frac{\pi}{4}i(2\hat{c}_1^\dagger\hat{c}_1-1)}|1,0\rangle = e^{+i\frac{\pi}{4}}|1,0\rangle \tag{13.234}$$

$$\hat{T}_1|0,1\rangle = e^{\frac{\pi}{4}i(2\hat{c}_1^\dagger\hat{c}_1-1)}|0,1\rangle = e^{-i\frac{\pi}{4}}|0,1\rangle \tag{13.235}$$

$$\hat{T}_1|1,1\rangle = e^{\frac{\pi}{4}i(2\hat{c}_1^\dagger\hat{c}_1-1)}|1,1\rangle = e^{+i\frac{\pi}{4}}|1,1\rangle \tag{13.236}$$

这样得到

$$\hat{T}_1 = e^{\frac{\pi}{4}\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_1} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\pi}{4}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{+i\frac{\pi}{4}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\frac{\pi}{4}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{+i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} \tag{13.237}$$

同理得

$$\hat{T}_3 = e^{\frac{\pi}{4}\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_3} = e^{\frac{\pi}{4}i(2\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_2-1)} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\pi}{4}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\pi}{4}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{+i\frac{\pi}{4}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{+i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} \tag{13.238}$$

注意到T_1和T_3都是对角矩阵.真正非平凡的是交换算符T_2的表示矩阵,

$$\hat{T}_2 = e^{\frac{\pi}{4}\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_2} = e^{i\frac{\pi}{4}(\hat{c}_2^\dagger+\hat{c}_2)(\hat{c}_1^\dagger-\hat{c}_1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[1 + i(\hat{c}_2^\dagger+\hat{c}_2)(\hat{c}_1^\dagger-\hat{c}_1)] \tag{13.239}$$

可以看到$\hat{T}_2$的常数部分保持态不变,而包含费米子算符部分则是改变状态,其总共有四种,即

$$i\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_1^\dagger,\ \ -i\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_1,\ \ i\hat{c}_2\hat{c}_1^\dagger,\ \ -i\hat{c}_2\hat{c}_1 \tag{13.240}$$

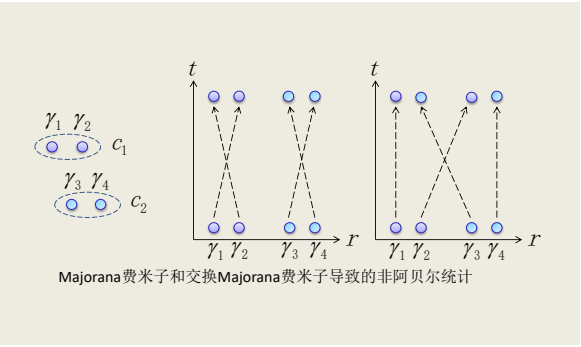


Figure 13.18: Majorana费米子和交换Majorana费米子导致的非阿贝尔统计.交换同一个复费米子的Majorana费米只会有阿贝尔统计,只有交换不同复费米子的Majorana费米子才会导致非阿贝尔统计,即简并基态之间的非对易矩阵操作.

在这四类算符作用下非零的矩阵元是

$$+i\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_1^\dagger|0,0\rangle = +i\hat{c}_2^\dagger|1,0\rangle = -i|1,1\rangle \tag{13.241}$$

$$-i\hat{c}_2^\dagger\hat{c}_1|1,0\rangle = -i\hat{c}_2^\dagger|0,0\rangle = -i|0,1\rangle \tag{13.242}$$

$$+i\hat{c}_2\hat{c}_1^\dagger|0,1\rangle = +i\hat{c}_2^\dagger|1,1\rangle = -i|1,0\rangle \tag{13.243}$$

$$-i\hat{c}_2\hat{c}_1|1,1\rangle = -i\hat{c}_2^\dagger|0,1\rangle = -i|0,0\rangle \tag{13.244}$$

$$\tag{13.245}$$

这样我们发现$\hat{T}_2$的矩阵表示是

$$\hat{T}_2 = e^{\frac{\pi}{4}\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{13.246}$$

这样,我们看到交换Majorana费米子导致多体简并基态获得矩阵形式的相因子,类比于一般的全同粒子交换和先前讨论的阿贝尔任意子统计,这里可以理解为非阿贝尔任意子.不过,我们注意到无论是简单的费米子,玻色子还是复杂一些的阿贝尔任意子,原则上只需要两个粒子就可以得到非平凡交换相因子,但是对于这里的情况,至少需要四个粒子,如果只有两个Majorana费米子,那么交换得到的总是对角矩阵,也就是只有阿贝尔任意子,所以从这个意义上来说,非阿贝尔任意子的非阿贝尔的含义与阿贝尔很不同.

- 注意到这里的交换操作实际上是非局域粒子构成的简并基态之间的变换,其非局域性说明简单的局域扰动并不会定性改变体系的基态波函数,如果可以把交换粒子操作作为操作量子比特的实际手段,那么这就是一种量子计算方案,特别是多体基态及其简并受到拓扑的保护,即拓扑量子计算.

- 这里的讨论利用了涡旋束缚的Majorana费米子,这给人的印象是只有这种涡旋束缚态才有非阿贝尔统计,实际上Kitaev超导链模型的Majorana边界态(Majorana end state)也可以具有非阿贝尔统计.考虑$2N$个平行排列的Kitaev链所形成的网络(network of chains or nanowires),那么每个链的边界都有一个Majorana费米子零模,然后每两个可以配成复费米子,这样体系的波函数就是2^N个简并态的叠加.当然注意到费米子数宇称 $\hat{P}=\prod_{j=1}^{N}\hat{P}_j=\prod_{j=1}^{N}(1-2\hat{c}_j^{\dagger}\hat{c}_j)$ 守恒,所以这2^N简并态实际上分为两类,每一类有2^{N-1}个简并态,分别对应$\hat{P}=\pm 1$.

本章小结与进一步阅读

本章小结 超导是宏观量子现象;常规超导机理由BCS理论描述;拓扑超导可产生Majorana费米子零模.

本章关键词 Meissner效应;Cooper不稳定性;Cooper对;BCS模型;BCS波函数;超导相位涨落;拓扑超导;Majorana费米子

进一步阅读 张广铭等撰写的《Majorana费米子与拓扑量子计算》;P.Phillips的《Advanced Solid State Physics》第十二章;T.Xiang和C.Wu的《D-Wave Superconductivity》第三和第四章;P.Coleman《Introduction to Many-body physics》第十四和十五章

附录

超导Green函数

BCS哈密顿量对应的单粒子Green函数定义为

$$\begin{aligned} G(k,i\omega_n) &= \begin{pmatrix} G(k,i\omega_n)_{\uparrow\uparrow} & G(k,i\omega_n)_{\uparrow\downarrow} \\ G(k,i\omega_n)_{\downarrow\uparrow} & G(k,i\omega_n)_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= (i\omega_n I - H_{BCS})^{-1} = \frac{1}{(i\omega_n)^2 - E_k^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \xi_k & \Delta_k^* \\ \Delta_k & i\omega_n - \xi_k \end{pmatrix} \\ &\equiv \begin{pmatrix} G_{11}(k) & G_{12}(k) \\ G_{21}(k) & G_{22}(k) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{13.247}$$

具体而言有

$$\begin{aligned} G_{11}(k) &= \frac{\mu_k^2}{i\omega_n - E_k} + \frac{\nu_k^2}{i\omega_n + E_k}, \\ G_{12}(k) &= \mu_k\nu_k \left(\frac{1}{i\omega_n - E_k} - \frac{1}{i\omega_n + E_k} \right), \\ G_{21}(k) &= \mu_k\nu_k \left(\frac{1}{i\omega_n - E_k} - \frac{1}{i\omega_n + E_k} \right), \\ G_{22}(k) &= \frac{\nu_k^2}{i\omega_n - E_k} + \frac{\mu_k^2}{i\omega_n + E_k}. \end{aligned} \tag{13.248}$$

因此

$$G_{k\uparrow}^R = G_{11}^R = \frac{u_k^2}{\omega - E_k} + \frac{v_k^2}{\omega + E_k} \tag{13.249}$$

而单粒子谱函数是

$$A(k,\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G_{k\sigma}^R = u_k^2\delta(\omega - E_k) + v_k^2\delta(\omega + E_k). \tag{13.250}$$

Nambu旋量

$\psi_k^\dagger = (c_{k\uparrow}^\dagger, c_{-k\uparrow})$称为Nambu旋量,用这种记号可以写出紧凑的BCS 哈密顿量,即

$$H_{BCS} = \sum_k \psi_k^\dagger \vec{h}_k \cdot \hat{\vec{\tau}} \psi_k + \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_k \xi_k,$$

$\vec{h}_k = (\mathrm{Re}\Delta_k, \mathrm{Im}\Delta_k, \xi_k)$,$\hat{\vec{\tau}} = (\hat{\tau}_x, \hat{\tau}_y, \hat{\tau}_z)$ 表示作用于粒子−空穴空间的Pauli 矩阵.这种形式的优势在于方程推导可更为简单和紧凑,特别是处理外电磁扰动时.

例如,z方向外磁场$\vec{B}_q = B_q\vec{e}_z$给出扰动

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{kq\alpha\beta} c^\dagger_{k+q\alpha}\left(\frac{\vec{\sigma}_{\alpha\beta}}{2}\cdot\vec{B}_q\right)c_{k\beta}, \\ &= \sum_{kq}\frac{B_q}{2}(c^\dagger_{k+q\uparrow}c_{k\uparrow} - c^\dagger_{k+q\downarrow}c_{k\downarrow}), \\ &= \sum_{kq}\frac{B_q}{2}(c^\dagger_{k+q\uparrow}c_{k\uparrow} + c_{-k-q\downarrow}c^\dagger_{-k\downarrow}), \\ &= \sum_{kq}\frac{B_q}{2}\psi^\dagger_{k+q}\psi_k. \end{aligned}$$

这说明磁场B_q产生一个简单的顶角(vertex)$\frac{1}{2}$.然后,纵向磁化率是

$$\begin{aligned} \chi_0^{BCS}(q) = \chi_{zz}(q) &= -\frac{1}{4}\sum_k \mathrm{Tr}[G(k)G(k+q)] \qquad (13.251) \\ &= -\frac{1}{4}\sum_k [G_{11}(k)G_{11}(k+q) + G_{12}(k)G_{21}(k+q) + G_{21}(k)G_{12}(k+q) \\ &\quad + G_{22}(k)G_{22}(k+q)]. \end{aligned}$$

通过计算可知静态纵向磁化率是

$$\chi^0_{zz} = -\frac{1}{4}\sum_k 2\left[\frac{\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}\right].$$

考虑电子声子相互作用产生的扰动

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{kq\sigma} g_q(b^\dagger_{-q} + b_q)c^\dagger_{k+q\sigma}c_{k\sigma} \\ &= \sum_{kq} g_q(b^\dagger_{-q} + b_q)(c^\dagger_{k+q\uparrow}c_{k\uparrow} + c^\dagger_{k+q\downarrow}c_{k\downarrow}) \\ &= \sum_{kq} g_q(b^\dagger_{-q} + b_q)(c^\dagger_{k+q\uparrow}c_{k\uparrow} - c_{-k\downarrow}c^\dagger_{-k-q\downarrow}) \\ &= \sum_{kq} g_q(b^\dagger_{-q} + b_q)\psi^\dagger_{k+q}\hat{\tau}_z\psi_k, \end{aligned}$$

此时裸顶角是$ig_q\hat{\tau}_z$.而对声子自能修正是

$$\begin{aligned} \Pi(q) &= +g_q^2\sum_k \mathrm{Tr}[G(k)\hat{\tau}_z G(k+q)\hat{\tau}_z] \qquad (13.252) \\ &= +g_q^2\sum_k [G_{11}(k)G_{11}(k+q) - G_{12}(k)G_{21}(k+q) - G_{21}(k)G_{12}(k+q) + G_{22}(k)G_{22}(k+q)]. \end{aligned}$$

考虑矢量势$\vec{A}_q$诱导的顺磁流

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{kq\sigma} e\vec{v}_k \cdot \vec{A}_q c^\dagger_{k+q\sigma} c_{k\sigma} \\ &= \sum_{kq} e\vec{v}_k \cdot \vec{A}_q (c^\dagger_{k+q\uparrow} c_{k\uparrow} + c^\dagger_{k+q\downarrow} c_{k\downarrow}) \\ &= \sum_{kq} e\vec{v}_k \cdot \vec{A}_q (c^\dagger_{k+q\uparrow} c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow} c^\dagger_{-k-q\downarrow}) \\ &= \sum_{kq} e\vec{v}_k \cdot \vec{A}_q \psi^\dagger_{k+q} \psi_k, \end{aligned}$$

裸顶角是$ie\vec{v}_k$.流−流关联函数是

$$\Pi(q)^p_{ij} = +e^2 \sum_k v^i_k v^j_{k+q} \mathrm{Tr}[G(k)G(k+q)]$$
$$= +e^2 \sum_k v^i_k v^j_{k+q} [G_{11}(k)G_{11}(k+q) + G_{12}(k)G_{21}(k+q) + G_{21}(k)G_{12}(k+q) + G_{22}(k)G_{22}(k+q)].$$

这样顺磁流($q=0$)对超流密度的贡献是

$$\mathrm{Re}\Pi(q=0)^p_{ij} = +2e^2 \sum_k v^i_k v^j_k \frac{\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}.$$

此外,抗磁流与$\vec{A}$通过以下方式耦合

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{kq\sigma} \frac{e^2}{2m} \vec{A}^\dagger_{k'-q} \vec{A}_{k'} c^\dagger_{k+q\sigma} c_{k\sigma} \\ &= \sum_{kq} \frac{e^2}{2m} \vec{A}^\dagger_{k'-q} \cdot \vec{A}_{k'} (c^\dagger_{k+q\uparrow} c_{k\uparrow} - c_{-k-q\downarrow} c^\dagger_{-k\downarrow}) \\ &= \sum_{kq} \frac{e^2}{2m} \vec{A}^\dagger_{k'-q} \cdot \vec{A}_{k'} \psi^\dagger_{k+q} \hat{\tau}_z \psi_k, \end{aligned}$$

因此顶角为$-(\frac{e^2}{2m})_{ij}\hat{\tau}_z$,相应的抗磁流关联函数是

$$\begin{aligned} \Pi(q)^d_{ij} &= +e^2 \sum_k \left(\frac{1}{m}\right)_{ij} \mathrm{Tr}[\hat{\tau}_z G(k)] \\ &= e^2 \sum_k \left(\frac{1}{m}\right)_{ij} (G_{11} - G_{22}) \\ &= e^2 \sum_k \left(\frac{1}{m}\right)_{ij} \left(-\frac{\xi_k}{E_k} \tanh \frac{E_k}{2T}\right). \end{aligned} \tag{13.253}$$

结合顺磁与抗磁部分可得

$$\Pi(q)_{ij} = e^2 \sum_k \left[\frac{1}{m_{ij}} \left(-\frac{\xi_k}{E_k} \tanh \frac{E_k}{2T}\right) + 2v^i_k v^j_k \frac{\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}\right].$$

这个结果可用于直接计算超导密度.

一些有用的关系和物理量

$$
\begin{aligned}
T\sum_{\omega_n}[G_{11}(k)G_{11}(k+q)+G_{22}(k)G_{22}(k+q)] &= (\mu_k^2\mu_{k+q}^2+\nu_k^2\nu_{k+q}^2)\frac{f_F(E_k)-f_F(E_{k+q})}{i\Omega_n-E_{k+q}+E_k} \\
&+(\mu_k^2\nu_{k+q}^2+\nu_k^2\mu_{k+q}^2)\frac{f_F(E_k)-f_F(-E_{k+q})}{i\Omega_n+E_{k+q}+E_k} \\
&+(\nu_k^2\mu_{k+q}^2+\mu_k^2\nu_{k+q}^2)\frac{f_F(-E_k)-f_F(+E_{k+q})}{i\Omega_n-E_{k+q}-E_k} \\
&+(\nu_k^2\nu_{k+q}^2+\mu_k^2\mu_{k+q}^2)\frac{f_F(-E_k)-f_F(-E_{k+q})}{i\Omega_n+E_{k+q}-E_k}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T\sum_{\omega_n}[G_{12}(k)G_{21}(k+q)+G_{21}(k)G_{12}(k+q)] &= 2\mu_k\mu_{k+q}\nu_k\nu_{k+q}\times[\frac{f_F(E_k)-f_F(E_{k+q})}{i\Omega_n-E_{k+q}+E_k} \\
&-\frac{f_F(E_k)-f_F(-E_{k+q})}{i\Omega_n+E_{k+q}+E_k} \\
&-\frac{f_F(-E_k)-f_F(+E_{k+q})}{i\Omega_n-E_{k+q}-E_k} \\
&+\frac{f_F(-E_k)-f_F(-E_{k+q})}{i\Omega_n+E_{k+q}-E_k}].
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
W^{\pm}(q,\Omega_n) &= T\sum_{\omega_n}[G_{11}G_{11}+G_{22}G_{22}\pm(G_{12}G_{21}+G_{21}G_{12})] \\
&= (\mu_k\mu_{k+q}\pm\nu_k\nu_{k+q})^2\frac{f_F(E_k)-f_F(E_{k+q})}{i\Omega_n-E_{k+q}+E_k} \\
&+(\mu_k\nu_{k+q}\mp\nu_k\mu_{k+q})^2\frac{f_F(E_k)-f_F(-E_{k+q})}{i\Omega_n+E_{k+q}+E_k} \\
&+(\nu_k\mu_{k+q}\mp\mu_k\nu_{k+q})^2\frac{f_F(-E_k)-f_F(+E_{k+q})}{i\Omega_n-E_{k+q}-E_k} \\
&+(\nu_k\nu_{k+q}\pm\mu_k\mu_{k+q})^2\frac{f_F(-E_k)-f_F(-E_{k+q})}{i\Omega_n+E_{k+q}-E_k}
\end{aligned}
$$

令$i\Omega_n\to\omega+i0^+$可得推迟响应函数.让我们看一些有用的极限:

1)$\omega=0$同时$\vec{q}\to 0$:

$$T\sum_{\omega_n}[G_{11}G_{11}+G_{22}G_{22}+G_{12}G_{21}+G_{21}G_{12}]=2\frac{\partial f_F(E_k)}{\partial E_k} \tag{13.254}$$

$$T\sum_{\omega_n}[G_{11}G_{11}+G_{22}G_{22}-G_{12}G_{21}-G_{21}G_{12}]=(2-8\mu_k^2\nu_k^2)\frac{\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}-8\mu_k^2\nu_k^2\frac{\tanh(\frac{E_k}{2T})}{2E_k}$$

2)自旋晶格弛豫率$\frac{1}{T_1}$由核磁共振测量(NMR):

$$\frac{1}{T_1}=T\sum_q\frac{\mathrm{Im}\chi(q,\omega)}{\omega}|_{\omega\to 0}. \tag{13.255}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{Im}\chi(q,\omega)}{\omega}|_{\omega\to 0} &= -\frac{1}{\omega}\sum_k \mathrm{Im}W^+(q,\Omega_n\to\omega+i0^+) \qquad (13.256)\\ &= \frac{2\pi}{\omega}\sum_k(\mu_k\mu_{k+q}+\nu_k\nu_{k+q})^2(f_F(E_k)-f_F(E_{k+q}))\delta(\omega-E_{k+q}+E_k)\\ &= \frac{2\pi}{\omega}\sum_k(f_F(E_k)-f_F(E_k+\omega))\delta(\omega-E_{k+q}+E_k)\\ &= 2\pi\sum_k\frac{-\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}\delta(E_k-E_{k+q})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{T_1T} &= 2\pi\sum_{k,q}\frac{-\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}\delta(E_k-E_{k+q}) \qquad (13.257)\\ &= 2\pi\int dE\int dE' N(E)N(E')\frac{-\partial f_F(E)}{\partial E}\delta(E-E')\\ &= 2\pi\int dE N^2(E)\frac{-\partial f_F(E)}{\partial E}\end{aligned}$$

在正常金属态,$(\frac{1}{T_1T})_n = 2\pi N^2(0)$.对$s$波有

$$\frac{(\frac{1}{T_1T})_s}{(\frac{1}{T_1T})_n} = \int dE\frac{E^2}{E^2-\Delta^2}\frac{-\partial f_F(E)}{\partial E}. \qquad (13.258)$$

由于态密度中的BCS相干峰,NMR弛豫率中在相变温度以下存在一个尖锐的峰,即Hebel-Slichter峰.对d 波态,由于没有真正的能隙,Hebel-Slichter峰消失,这可作为d波超导态的重要判据.

3)超声吸收系数$\alpha(T)$正比于电荷极化率$\Pi(q,\omega)$虚部的积分:

$$\begin{aligned}Im\Pi(q,\omega) &= -\sum_k \mathrm{Im}W^-(q,\Omega_n\to\omega+i0^+) \qquad (13.259)\\ &= 2\pi\sum_k(\mu_k^2-\nu_k^2)^2(f_F(E_k)-f_F(E_{k+q}))\delta(\omega-E_{k+q}+E_k)\\ &= 2\pi\sum_k\frac{E_k^2-\Delta_k^2}{E_k^2}(f_F(E_k)-f_F(E_k+\omega))\delta(\omega-E_{k+q}+E_k)\\ &\simeq 2\pi\omega\sum_k\frac{E_k^2-\Delta_k^2}{E_k^2}\frac{-\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}\delta(E_k-E_{k+q}),\end{aligned}$$

最后一行是在小超声频率ω下得到.这是由于在超声实验中声波频率小于10^9Hz,因此$\hbar\omega < 0.01\Delta$.

进一步,如果探测波矢$\vec{q}$很小则给出

$$Im\Pi(q,\omega)\simeq 2\pi\omega\sum_k\frac{E_k^2-\Delta_k^2}{E_k^2}\frac{-\partial f_F(E_k)}{\partial E_k}\delta\left(\vec{q}\cdot\frac{\partial E_k}{\partial\vec{k}}\right),$$

当超导准粒子速度垂直于探测波矢时给出非零结果.因此,超声衰减实验对于能隙函数角度依赖时敏感的,以此可用来区分节点d波态和扩展s波.

通常我们探测波矢$\vec{q}$平均后的超声衰减率,对均匀s波有

$$\begin{aligned}
\alpha_s(T) \propto \sum_q \mathrm{Im}\Pi(q,\omega) &= 2\pi\omega \int dE \int dE' N(E)N(E') \frac{E^2-\Delta^2}{E^2} \frac{-\partial f_F(E)}{\partial E} \delta(E-E') \\
&= 2\pi\omega \int dE N^2(E) \frac{E^2-\Delta^2}{E^2} \frac{-\partial f_F(E)}{\partial E} \\
&= 2\pi\omega N^2(0) \int dE \frac{-\partial f_F(E)}{\partial E} \theta(|E|-\Delta) \\
&= 2\pi\omega N^2(0) \frac{2}{e^{\Delta/T}+1}
\end{aligned}$$

在正常金属态有$\alpha_n(T) = 2\pi\omega N^2(0)$,因此可得归一化的超声衰减系数

$$\frac{\alpha_s(T)}{\alpha_n(T)} = \frac{2}{e^{\Delta/T}+1}$$

对节点d波态

$$\begin{aligned}
\alpha_s(T) \propto \sum_q \mathrm{Im}\Pi(q,\omega) &= 2\pi\omega \int dE \int dE' N(E)N(E') \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{E^2-\Delta^2(\varphi)}{E^2} \frac{-\partial f_F(E)}{\partial E} \delta(E-E') \\
&= 2\pi\omega \int dE N^2(E) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{E^2-\Delta^2\cos^2(2\varphi)}{E^2} \frac{-\partial f_F(E)}{\partial E} \\
&= 2\pi\omega \int dE N^2(E) \frac{E^2-\Delta^2/2}{E^2} \frac{-\partial f_F(E)}{\partial E} \\
&\approx 2\pi\omega N^2(0) \left[\int_{-\Delta}^{\Delta} dE \left(\frac{E}{\Delta}\right)^2 \frac{E^2-\Delta^2/2}{E^2} + \int_{-\infty}^{-\Delta} dE + \int_{\Delta}^{\infty} dE \right] \frac{-\partial f_F(E)}{\partial E} \\
&= 2\pi\omega N^2(0) \left[\frac{2}{e^{\Delta/T}+1} + \frac{1}{\Delta^2} \left(-\frac{\Delta^2}{2} \tanh\frac{\Delta}{2T} + T^2 \mathfrak{Q}(\Delta/T) \right) \right]
\end{aligned}$$

这里

$$\mathfrak{Q}(x) = x\left[x\tanh\frac{x}{2} - 2\ln(1+e^x)(1+e^{-x})\right] + 2\mathrm{PolyLog}[2,-\cosh x + \sinh x] - 2\mathrm{PolyLog}[2,-e^x].$$

注意到低温部分是T^2而非指数压制行为,这与YBCO系列铜氧化物以及重费米子超导体UPt_3实验结果符合.

4)Raman散射系数$R(\omega)$:

$$\begin{aligned} R(\omega) &\propto \sum_k \gamma_{1k}\gamma_{2k}\mathrm{Im}W^-(q=0,\Omega_n\to\omega+i0^+) \qquad (13.260)\\ &= -\pi\sum_k \gamma_{1k}\gamma_{2k}(2\mu_k\nu_k)^2[(2f_F(E_k)-1)\delta(\omega+2E_k)+(1-2f_F(E_k))\delta(\omega-2E_k)]\\ &= -\pi\sum_k \gamma_{1k}\gamma_{2k}\frac{\Delta_k^2}{E_k^2}\left[-\tanh\frac{E_k}{2T}\delta(\omega+2E_k)+\tanh\frac{E_k}{2T}\delta(\omega-2E_k)\right]\\ &= -\pi\sum_k \gamma_{1k}\gamma_{2k}\frac{4\Delta_k^2}{\omega^2}\tanh\frac{\omega}{4T}[\delta(\omega+2E_k)+\delta(\omega-2E_k)]\\ &= -\frac{4\pi}{\omega^2}\tanh\frac{\omega}{4T}\sum_k \gamma_{1k}\gamma_{2k}\Delta_k^2[\delta(\omega+2E_k)+\delta(\omega-2E_k)] \end{aligned}$$

5)非弹性中子散射(INS)实验探测动力学自旋磁化率的虚部:

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\chi(q,\omega) &= -\sum_k \mathrm{Im}W^+(q,\Omega_n\to\omega+i0^+) \qquad (13.261)\\ &= \sum_k[(\mu\mu'+\nu\nu')^2[f_F(E)-f_F(E')]\delta(\omega-E'+E)\\ &\quad +(\mu\nu'-\nu\mu')^2[f_F(E)-f_F(-E')]\delta(\omega+E'+E)\\ &\quad +(\nu\mu'-\mu\nu')^2[f_F(-E)-f_F(E')]\delta(\omega-E'-E)\\ &\quad +(\nu\nu'+\mu\mu')^2[f_F(-E)-f_F(-E')]\delta(\omega+E'-E)]\\ &= \sum_k\{(\mu\mu'+\nu\nu')^2[f_F(E)-f_F(E')](\delta(\omega-E'+E)-\delta(\omega+E'-E))\\ &\quad +(\mu\nu'-\nu\mu')^2[f_F(E)-f_F(-E')](\delta(\omega+E'+E)-\delta(\omega-E'-E))\} \end{aligned}$$

这里μ,ν,E依赖k,μ',ν',E'依赖$k+q$.对许多强反铁磁自旋涨落的系统,中子散射实验发现在反铁磁波矢$\vec{Q}\simeq(\pi,\pi)$有强共振信号,因此我们关注$\mathrm{Im}\chi(\vec{Q},\omega)$.假设一个有嵌套的能带$\xi_{k+Q}=-\xi_k$且考虑均匀$s$波$(\Delta)$与$d$-wave$(\Delta_{k+Q}=-\Delta_k)$ (扩展s波类似d波).则有$\xi'=-\xi$,$E'=E$,$\mu'^2=\nu^2$,$\nu'^2=\mu^2$.$\mu'\nu'=\mu\nu(s$ 波),$\mu'\nu'=-\mu\nu(d$波).

$$\mathrm{Im}\chi(\vec{Q},\omega)=\sum_k\left[(\mu^2\mp\nu^2)^2(\delta(\omega-2E)-\delta(\omega+2E))\tanh\frac{E}{2T}\right].$$

$-$对应s波,$+$对应d波.对s波有

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\chi^s(\vec{Q},\omega) &= \sum_k\frac{E^2-\Delta^2}{E^2}\left[(\delta(\omega-2E)-\delta(\omega+2E))\tanh\frac{E}{2T}\right] \qquad (13.262)\\ &= \int dEN_s(E)\frac{E^2-\Delta^2}{E^2}[\delta(\omega-2E)-\delta(\omega+2E)]\tanh\frac{E}{2T}\\ &= N_s(\omega/2)\frac{\omega^2-4\Delta^2}{\omega^2}\tanh\frac{\omega}{4T}\\ &= N(0)\frac{\sqrt{\omega^2-4\Delta^2}}{\omega}\tanh\frac{\omega}{4T}, \end{aligned}$$

s波态密度采用$N_s(\omega) = N(0)\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2-\Delta 2}}\theta(|\omega|-\Delta)$. 可以看到仅当$\omega > 2\Delta$时, $\mathrm{Im}\chi^s(\vec{Q},\omega)$有限,因此对$s$波超导体INS 实验应观察到$2\Delta$大小的能隙.

注意到自由电子气结果是 $\mathrm{Im}\chi_0(\vec{Q},\omega) = N(0)\tanh\frac{\omega}{4T}$,(令$\Delta = 0$可得)而RPA磁化率$\mathrm{Im}\chi(\vec{Q},\omega) = \frac{\chi_0(\vec{Q},\omega)}{1-U\chi_0(\vec{Q},\omega)}$ 给出$\frac{N(0)}{\tanh\frac{\omega}{4T}}(\omega >\mathrm{T})$或接近自由电子气结果($\omega <\mathrm{T}$).

对d波态

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\chi^d(\vec{Q},\omega) &= \sum_k[\delta(\omega-2E)-\delta(\omega+2E)]\tanh\frac{E}{2T}. \qquad (13.263)\\ &= \int dEN_d(E)[\delta(\omega-2E)-\delta(\omega+2E)]\tanh\frac{E}{2T}.\\ &= N_d(\omega/2)\tanh\frac{\omega}{4T}.\end{aligned}$$

既然d波态密度$N_d(\omega)$对所有非零ω都取有限值,因此INS中看不到能隙.此外在$\omega \simeq 2\Delta$处存在相干峰,这是超导体具有嵌套结构的 典型信号.即使系统远离嵌套,共振峰仍然可以观察到只是其峰宽变大.若采用BCS结果$\Delta \sim 2\mathrm{T}_c$,则峰的位置在$4\mathrm{T}_c$处.

第十三章习题

习题1:一些概念

Q1:解释什么是超导.

Q2:列举几种常见的超导配对机制.

Q3:简述什么是量子计算机并指出有意义的拓扑量子计算至少需要几个Majorana费米子零能模式.

习题2:BCS波函数

Q1:利用BCS波函数$|\psi_{BCS}\rangle=\prod_k(\mu_k+\nu_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow})|0\rangle$证明$\langle\psi_{BCS}|\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}|\psi_{BCS}\rangle=\nu_k^2,\langle\psi_{BCS}|\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}|\psi_{BCS}\rangle=\mu_k\nu_k$.(已知$\mu_k,\nu_k$为实且$\mu_k^2+\nu_k^2=1$)

Q2:利用以上结果证明以下哈密顿量在BCS态时能量为$E=\frac{V}{g}\Delta^2+\sum_k(\xi_k-E_k)$,$(\nu_k^2=\frac{1}{2}(1-\frac{\xi_k}{E_k}),\mu_k\nu_k=-\frac{\Delta_k}{2E_k})$

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\xi_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_k\left(\Delta_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-k\downarrow}+\Delta_k\hat{c}_{-k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}\right)+\frac{V}{g}\Delta^2. \tag{13.264}$$

习题3:d波超导

Q1:非常规超导体常见的电子配对是d波配,考虑二维正方系统,则在BCS平均场框架下可认为配对能隙函数$\Delta_k=\Delta(\cos k_x-\cos k_y)$.若电子色散为$\xi_k=-2t(\cos k_x+\cos k_y)$,试找出超导准粒子色散$E_k=\sqrt{\xi_k^2+\Delta_k^2}$的节点(能量为零点)位置.

Q2:试估计节点附近超导准粒子对热容的贡献.(设$\Delta=2t$以简化讨论)

习题4:Richardson模型

Q1:如下玻色子表示的BCS配对模型称为Richardson模型:

$$\hat{H}_b=\sum_f 2\varepsilon_f\hat{b}^\dagger_f\hat{b}_f-g\sum_{f,f'}\hat{b}^\dagger_f\hat{b}_{f'}. \tag{13.265}$$

这里$\hat{b}^\dagger_f=\hat{c}^\dagger_{f\uparrow}\hat{c}^\dagger_{f\downarrow}$.证明$\hat{b}_f^2=(\hat{b}^\dagger_f)^2=0$, $[\hat{b}_f,\hat{b}_{f'}]=[\hat{b}^\dagger_f,\hat{b}^\dagger_{f'}]=0$,$[\hat{b}_f,\hat{b}^\dagger_{f'}]=\delta_{f,f'}(2-\hat{c}^\dagger_{f\uparrow}\hat{c}_{f\uparrow}-\hat{c}^\dagger_{f\downarrow}\hat{c}_{f\downarrow})$.

Q2:设体系的本征态$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{f_1\ldots f_N}\psi(f_1\ldots f_N)\hat{b}^\dagger_{f_1}\ldots\hat{b}^\dagger_{f_N}|0\rangle$. 注意到不同的产生算符彼此对易而$\hat{b}_f^2=(\hat{b}^\dagger_f)^2=0$,这样波函数$\psi(f_1\ldots f_N)$任意交换指标是对称的而且任意指标相同时波函数为零,这样我们可以把波函数写成如下形式:

$$\psi(f_1\ldots f_N)=\theta(f_1\ldots f_N)\varphi(f_1\ldots f_N),\quad \theta(f_1\ldots f_N)=\prod_{i<j}(1-\delta_{f_i,f_j}) \tag{13.266}$$

而$\varphi(f_1...f_N)$关于指标交换是对称的.($\varphi(f_1...f_i...f_j...f_N)=\varphi(f_1...f_j...f_i...f_N)$).试证明

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{H}_b|\psi\rangle &= \sum_{f_1...f_N}(2\varepsilon_{f_1}+...+2\varepsilon_f)|\psi(f_1...f_N)|^2 \\ &- g\sum_{i=1}^{N}\sum_{f_1...f_N,f,f'}\psi^*(f_1...f_{i-1},f,f_{i+1}...f_N)\psi(f_1...f_{i-1},f',f_{i+1}...f_N).\end{aligned}$$

Q3:利用变分方程$\frac{\delta\langle\psi|\hat{H}_b-E|\psi\rangle}{\delta\psi^*}=0$证明

$$\begin{aligned}&(2\varepsilon_{f_1}+...+2\varepsilon_f-E)\theta(f_1...f_N)\varphi(f_1...f_N) \\ -\ &g\sum_{i=1}^{N}\sum_f\theta(f_1...f_N)\theta(f_1...f_{i-1},f,f_{i+1}...f_N)\varphi(f_1...f_{i-1},f,f_{i+1}...f_N)=0\end{aligned}$$

Q4:设$\varphi(f_1...f_N)=\sum_P\prod_{k=1}^{N}\frac{1}{2\varepsilon_{f_k}-E_{p_k}}$,这里$P$指的是不同动量$(p_1,p_2...p_N)$的$N!$个不同的排列.把这个波函数代入Q3的结果,试证明体系的本征能量是

$$E=\sum_{i=1}^{N}E_{p_i} \tag{13.267}$$

而N个不同E_{p_i}由下列方程决定,

$$1=g_i\sum_f\frac{1}{2\varepsilon_f-E_{p_i}},\quad g_i=g(1+2g\sum_{j=1,j\neq i}^{N}\frac{1}{E_{p_i}-E_{p_j}}) \tag{13.268}$$

这里当$i\neq j$时$E_{p_i}\neq E_{p_j}$.

习题5:可解的BCS-Hubbard模型

Q1:近年来,受到Kiatev六角晶格模型的启发,人们发现计入Hubbard相互作用的BSC(平均场)模型在对称点也可以严格求解,这就是说所谓的BCS-

Hubbard模型:[51]

$$
\begin{aligned}
&H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4,\\
&H_1 = \sum_{\langle ij\rangle\sigma}(t_1\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + t_2\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\bar{\sigma}}) + h.c.,\\
&H_2 = \sum_{\langle ij\rangle\sigma}(\Delta_1\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma} + \Delta_2\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\bar{\sigma}}) + h.c.,\\
&H_3 = U\sum_l(\hat{c}^\dagger_{l\uparrow}\hat{c}_{l\uparrow} - \frac{1}{2})(\hat{c}^\dagger_{l\downarrow}\hat{c}_{l\downarrow} - \frac{1}{2}),\\
&H_4 = -ih\sum_l(\hat{c}^\dagger_{l\uparrow}\hat{c}_{l\downarrow} - \hat{c}^\dagger_{l\downarrow}\hat{c}_{l\uparrow}).
\end{aligned}
\tag{13.269}
$$

这里$\langle ij\rangle$代表仅对最近邻格点求和,i表示A子格,j表示B子格.t_1, t_2是相应跃迁强度,Δ_1, Δ_2是配对强度,U是Hubbard相互作用,ih是y方向磁场,它导致了Zeeman能.在对称点,也就是$t_1 = \Delta_1, t_2 = \Delta_2$,上述哈密顿量等价于静态$Z_2$场下的自由Majorana费米子问题,这样我们就把复杂的多体问题转化单体问题,因此我们说这个模型是精确可解的.试证明当采用如下Majorana费米子表示时,

$$
\hat{c}_{l\uparrow} = \frac{\hat{\gamma}_{l1} + i\hat{\gamma}_{l2}}{2}, \quad \hat{c}_{l\downarrow} = \frac{\hat{\gamma}_{l3} + i\hat{\gamma}_{l4}}{2},
\tag{13.270}
$$

哈密顿量在$\Delta_1 = t_1, \Delta_2 = t_2$时可以改写为

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_s &= -i\sum_{\langle ij\rangle}[t_1(\hat{\gamma}_{i2}\hat{\gamma}_{j1} + \hat{\gamma}_{i4}\hat{\gamma}_{j3}) + t_2(\hat{\gamma}_{i2}\hat{\gamma}_{j3} + \hat{\gamma}_{i4}\hat{\gamma}_{j1})]\\
&- \frac{U}{4}\sum_l \hat{\gamma}_{l1}\hat{\gamma}_{l2}\hat{\gamma}_{l3}\hat{\gamma}_{l4} + \frac{ih}{2}\sum_l(\hat{\gamma}_{l1}\hat{\gamma}_{l3} + \hat{\gamma}_{l2}\hat{\gamma}_{l4}).
\end{aligned}
\tag{13.271}
$$

Q2:证明$\hat{D}_l = i\hat{\gamma}_{l1}\hat{\gamma}_{l3}\delta_{l\in A} + i\hat{\gamma}_{l2}\hat{\gamma}_{l4}\delta_{l\in B}$的本征值为$\pm 1$且与哈密顿量$\hat{H}_s$对易,即$[\hat{D}_l, \hat{H}_s] = 0$.

Q3:把$\hat{D}_l$的本征值记为D_l,那么Hubbard相互作用可以写成$\frac{U}{4}(\sum_{l\in A} D_l i\hat{\gamma}_{l2}\hat{\gamma}_{l4} + \sum_{l\in B} iD_l\hat{\gamma}_{l1}\hat{\gamma}_{l3})$,这样哈密顿量自然成为自由费米子问题.接下来,引入标准的费米子算符$\hat{a}_i = \frac{1}{2}(\hat{\gamma}_{i2} + i\hat{\gamma}_{i4}), \hat{a}_j = \frac{1}{2}(\hat{\gamma}_{i1} + i\hat{\gamma}_{i3})$, 证明哈密顿量可以改写为

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_s &= \sum_{\langle ij\rangle}[2it_1(\hat{a}^\dagger_j\hat{a}_i - \hat{a}^\dagger_i\hat{a}_j) - 2t_2(\hat{a}_i\hat{a}_j + \hat{a}^\dagger_j\hat{a}^\dagger_i)]\\
&+ \sum_l[(h - \frac{U}{2}D_l)(\hat{a}^\dagger_l\hat{a}_l - \frac{1}{2}) + \frac{h}{2}D_l].
\end{aligned}
\tag{13.272}
$$

[51][Chen,Li,Ng,Exactly Solvable BCS-Hubbard Model in Arbitrary Dimensions,Phys.Rev.Lett. **120**,046401(2018);Ezawa,Exact solutions for two-dimensional topological superconductors: Hubbard interaction induced spontaneous symmetry breaking,Phys.Rev.B **97**,241113(R)(2018);Miao et al.,Exact solution to the Haldane-BCS-Hubbard model along the symmetric lines:Interaction-induced topological phase transition,Phys.Rev.B **99**,245154(2019);Xu et al.,Phase Diagram of the BCS‐Hubbard Model in a Magnetic Field,Chin.Phys.Lett. **39**,067403(2022)]

需要指出,类似的方法也可以用来求解修改的Falicov-Kimball模型或者单杂质Anderson模型.[52]

[52] [Li,Chen,Ng,Generalized Falicov-Kimball models,Phys.Rev.B **100**,094519(2019);Shankar,Maciejko,Exactly solvable Majorana-Anderson impurity models,Phys.Rev.B **100**,241105(R)(2019)]

Bibliography

[1] BCS: 50 years, edited by Leon N. Cooper and Dmitri Feldman.

[2] E. Snider, N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, M. Debessai, H. Vindana, K. Vencatasamy, K. V. Lawler, A. Salamat and R. P. Dias, Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride, Nature **586**, 373 (2020).

[3] T. Timusk and B. Statt, The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey, Rep. Prog. Phys. **62**, 61 (1999)

[4] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras and P. Jarillo-Herrero, Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices, Nature **556**, 43 (2018).

[5] T. M. Rice, K. Y. Yang and F.C. Zhang, A phenomenological theory of the anomalous pseudogap phase in underdoped cuprates, Rep. Prog. Phys. **75**, 016502 (2012).

[6] Shun-Qing Shen(沈顺清), Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters, 第九章

[7] M. Randeria and E. Taylor, Crossover from Bardeen-Cooper-Schrieffer to Bose-Einstein Condensation and the Unitary Fermi Gas, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **5**, 209 (2014).

[8] 向涛, *d*-波超导体, 第一章

[9] W. Hanke, M.L. Kiesel, M. Aichhorn, S. Brehm, and E. Arrigoni, The 3-band Hubbard-model versus the 1-band model for the high-Tc cuprates: Pairing dynamics, superconductivity and the ground-state phase diagram, Eur. Phys. J. Special Topics **188**, 15 – 32 (2010).

[10] T. Moriya and K. Ueda, Antiferromagnetic spin fluctuation and superconductivity, Rep. Prog. Phys. **66**, 1299 – 1341 (2003).

[11] D. J. Scalapino, A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors, Rev. Mod. Phys. **84**, 1383 (2012).

[12] G. M. Eliashberg, Soriet Phys-JETP II, **696** (1960).

[13] P. W. Anderson, P. A. Lee, M. Randeria, T. M. Rice, N. Trivedi and F. C. Zhang, J. Phys.: Condens. Matter **16**, R755 – R769 (2004).

[14] Patrick A. Lee, Naoto Nagaosa, and Xiao-Gang Wen, Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).

[15] S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganesyan, J. M. Tranquada, A. Kapitulnik and C. Howald, How to detect fluctuating stripes in the high-temperature superconductors, Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003).

[16] E. Demler, W. Hanke and S. C. Zhang, SO(5) theory of antiferromagnetism and superconductivity, Rev. Mod. Phys. **76**, 909 (2004).

[17] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman and S. Das Sarma, Non-Abelian anyons and topological quantum computation, Rev. Mod, Phys. **80**, 1083 (2008).

[18] T. H. Hansson, V. Oganesyan and S. L. Sondhi, Annals of Physics **313**, 497 (2004).

Chapter 14

费米子的相变:金属走向何方?

Hubbard模型与费米子相变:迈不过去的一道坎

在先前的讨论中,我们发现半满单带Hubbard模型在强耦合极限下等效于反铁磁量子Heisenberg模型.对于无阻挫反铁磁Heisenberg模型,体系的基态接近经典的Neel 反铁磁态,子格磁化是序参量,取有限值.

- 凝聚态物理的基本问题:一般的电子浓度时Hubbard模型的基态是什么?

半满Hubbard模型的已知结果:

1. 一维晶格:只要$U > 0$,系统是Mott绝缘体并显示自旋电荷分离.(电荷有能隙,自旋自由度由等效的Heisenberg模型描述,对应自旋液体.)
2. 正方晶格:半满时基态总是反铁磁态.[1](随相互作用U增加显示从小U的Slater绝缘体过渡到大U的Mott反铁磁体.)
3. 六角晶格:半满基态是半金属或Mott反铁磁态.[2](两者之间存在相变,普适类是Gross-Neveu类.)

注意,这里仅考虑单带且只有最近邻跃迁的情况.反铁磁序既可以是局域自旋形成的Neel 态也可以由巡游电子形成,后者称为反铁磁自旋密度波态(spin-density-wave).一维的结果由Bethe ansatz严格给出,二维晶格结果由80年代发展起来的行列式量子蒙特卡洛(DQMC)模拟确定. [3]

偏离半满的Hubbard模型:

1. 一维晶格:基态是自旋电荷分离的Luttinger液体.
2. 二维晶格:不同的计算方法给出不同的相图结构.

Hartree-Fock平均场指出半满以及半满附近时是反铁磁自旋密度波态,偏离半满后铁磁态在大U下变得稳定.[4](图14.1)DQMC在偏离半满时由于符号问题而得不到低温物理信息.90年代以来的动力学平均场以及量子团簇微扰理论等在对空间关联做平均场近似的情况下发现半满附近的反铁磁态是稳定的,更大的电子浓度导致电荷有序甚至是超导态的出现.[5]目前看来单带Hubbard模型在偏离半满区并不会有超导基态,但会显示(动态)电荷序.[6]

[1] [Hirsch,Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study,Phys.Rev.B **31**,4403(1985)]

[2] Assaad,Herbut,Pinning the Order: The Nature of Quantum Criticality in the Hubbard Model on Honeycomb Lattice,Phys.Rev.X **3**,031010(2013)]

[3] [dos Santos,Introduction to Quantum Monte Carlo Simulationsfor Fermionic Systems,Brazilian Journal of Physics,**33**, no.1 (2003)]

[4] [Penn,Stability Theory of the Magnetic Phases for a Simple Model of the Transition Metals,Phys.Rev. **142**,350(1966)]

[5] [Kotliar,Savrasov,Haule,Oudovenko,Parcollet,Marianetti,Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory,Rev.Mod.Phys. **78**,865(2006)]

[6] [Qin,Chung,Shi,Vitali,Hubig,Schollwöck,White,Zhang,Absence of superconductivity in the pure two-dimensional Hubbard model,arXiv:1910.08931]

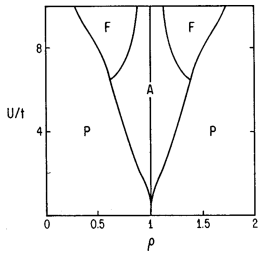


Figure 14.1: 正方晶格Hubbard模型的Hartree-Fock平均场相图,A代表反铁磁态,F代表铁磁态,P表示顺磁态.注意到一般性的螺旋磁或者自旋密度波态没有考虑.

在这一章,我们将讨论:

- 半满Hubbard模型的巡游反铁磁平均场理论;
- 一般填充下的Stoner巡游铁磁理论;
- Mott相变的Hubbard理论;
- Mott相变的可解模型,即Hatsugai-Kohmoto模型.

关于Hubbard模型性质的非技术化讨论可以参考最近的两篇综述文章:

1. Arovas,Berg,Kivelson,Raghu,The Hubbard Model,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **13**,239(2022);
2. Qin,Schäfer,Andergassen,Corboz,Gull,The Hubbard Model:A Computational Perspective,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **13**,275(2022).

第一篇文章介绍了一些解析和数值结果,前者涉及一些定理和弱耦合的重整化群计算.例如,

- 双子格半满体系具有粒子-空穴对称,即在$\hat{c}_{j\sigma} \to \eta_j \hat{c}_{j\sigma}$($\eta_j$在$A$子格为+1,在$B$子格为$-1$)变换下哈密顿量不变;
- $\hat{N} = \sum_{j\sigma} \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}$与哈密顿量对易,因此总粒子数守恒(具有$U(1)$对称性);
- 总自旋算符$\hat{S}^+ = \sum_j \hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}$,$\hat{S}^- = (\hat{S}^+)^\dagger$,$\hat{S}^z = \frac{1}{2}\sum_j (\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow})$ 构成$SU(2)$代数,并且$[\hat{S}^z, \hat{H}] = [\hat{S}^2, \hat{H}] = 0$,因此体系具有$SU(2)$自旋对称性;
- 对双子格体系,赝自旋算符$\hat{J}^+ = \sum_j \eta_j \hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}$,$\hat{J}^- = (\hat{J}^+)^\dagger$,$\hat{J}^z = \frac{1}{2}(\hat{N} - N_s)$ 也构成封闭的$SU(2)$代数($[\hat{J}^\alpha, \hat{J}^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{J}^\gamma$).由于$[\hat{H}, \hat{J}^\pm] = \pm(U - 2\mu)J^\pm$,因此$U = 2\mu$(半满)时体系具有额外的赝自旋$SU(2)$对称.这样双子格半满体系具有$SO(4) \cong SU(2) \times SU(2)/Z_2$对称,这里$Z_2$指的是$\hat{J}^z + \hat{S}^z$取值为整数($N_s$为偶数)或半整数($N_s$为奇数);

- Lieb定理.Lieb证明了对于吸引Hubbard模型,如果电子总数N为偶数,那么基态是唯一的并且总自旋$S = 0$.对于双子格上的排斥Hubbard模型,若总格点数$N_s = N_{As} + N_{Bs}$为偶数,那么总自旋$S = \frac{1}{2}(N_{As} - N_{Bs})$(设$N_{As} \geqslant N_{Bs}$)而简并度为$2S + 1$.

- Thouless-Nagaoka-Tasaki定理.对于$U = \infty$的Hubbard模型(满足$t_{jm} \geqslant 0$和$N = N_s - 1$也就是相对半满有单个空穴),基态总自旋为$S = N/2$且简并度为$2S + 1$.这说明体系存在完全极化的铁磁基态,也叫做Nagaoka铁磁态.至于有限空穴掺杂的情况($N < N_s - 1$)目前还不存在严格证明;

- Lieb-Schultz-Mattis-Oshikawa-Hastings定理(一般简称LSM定理).简单来说,LSM定理说明当电子填充不是偶整数时,有能隙的,无特性且唯一的绝缘基态并不存在.需要说明的是,这里无特性通常意味着没有平移对称性破缺.对于一维Hubbard模型,我们知道粒子数密度$n = N/N_s = 0, 2$时为能带绝缘体,而$n = 1$时是Mott绝缘体,这个绝缘体确实是无特性且唯一的,但其自旋激发是无能隙的,因此满足LSM定理的要求.[7]

此外,Arovas等人的文章还讨论了弱耦合重整化下的超导配对问题.其实质与80年代中期的RPA计算并无区别,一般认为更加准确的结果是计入不同类型相互作用通道的泛函重整化群(fRG),图形蒙特卡洛(diagrammatic Monte Carlo,diag-MC)或者动力学团簇近似(dynamical cluster approximation,DCA).我们指出,最近的弱耦合RPA超导计算结果与中间或强耦合的DCA和diag-MC结果看起来满足绝热连续性.[8]这暗示了RPA计算似乎比想象中更为可靠.

[7] LSM定理在二维和高维空间的证明并不严格,例如Oshikawa的证明方式就强烈依赖于绝热假设.

[8] [Rømer et al.,Pairing symmetry of the one-band Hubbard model in the paramagnetic weak-coupling limit:A numerical RPA study,Phys.Rev.B **92**,104505(2015);Rømer et al.,Pairing in the two-dimensional Hubbard model from weak to strong coupling,Phys.Rev.Research **2**,013108(2020)]

反铁磁自旋密度波平均场理论:最熟悉的陌生人

金属性的反铁磁体广泛存在于过渡金属和f电子化合物当中,特别是铜氧化物和铁基超导体系的发现使得人们仔细考虑反铁磁金属的基本物理.作为理解金属反铁磁性最初步的理论,我们将研究Hubbard模型的反铁磁平均场理论.为讨论方便,明确写出单带Hubbard模型:

$$\hat{H}_{Hubbard} = -\sum_{jm,\sigma} t_{jm}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma} + U\sum_{j}\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow} - \mu\sum_{j\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma} \tag{14.1}$$

这里t_{jm}一般而言是包含最近邻,次近邻以及再次近邻格点间的跃迁系数.例如,对于正方晶格,我们取最近邻为t,次近邻为t',再次近邻为t'',那么傅里叶变换后的电子色散关系为

$$\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t'\cos k_x \cos k_y - 4t''(\cos^2 k_x + \cos^2 k_y - 1). \tag{14.2}$$

对于Hubbard相互作用部分,我们可以把它改写为如下形式,即

$$\boxed{U\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow} = -\frac{U}{2}(\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow})^2 + \frac{U}{2}(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow})} \tag{14.3}$$

注意到括号中的$n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}$可以理解为$j$格点处电子的磁矩数,即$\hat{m}_j = n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}$,因而上式表明当Hubbard相互作用是排斥时($U > 0$),体系倾向于形成净磁矩$\hat{m}_j \neq 0$以降低能量.当体系形成大量磁矩时,磁矩之间的相互作用便会使得系统形成磁有序态,这样我们期待系统的基态可以是磁有序态.当然,Hubbard相互作用实际上关于自旋旋转对称,首先,利用Pauli矩阵或者说$SU(2)$代数的恒等式:

$$\hat{\sigma}^x_{\alpha\beta}\hat{\sigma}^x_{\gamma\delta} + \hat{\sigma}^y_{\alpha\beta}\hat{\sigma}^y_{\gamma\delta} + \hat{\sigma}^z_{\alpha\beta}\hat{\sigma}^z_{\gamma\delta} = \hat{\vec{\sigma}}_{\alpha\beta}\cdot\hat{\vec{\sigma}}_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \tag{14.4}$$

这样有

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{S}}^2_j &= \hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{S}}_j = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\left(\hat{c}^{\dagger}_{j\alpha}\frac{\hat{\vec{\sigma}}_{\alpha\beta}}{2}\hat{c}_{j\beta}\right)\cdot\left(\hat{c}^{\dagger}_{j\gamma}\frac{\hat{\vec{\sigma}}_{\gamma\delta}}{2}\hat{c}_{j\delta}\right)\\
&= \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta}\left(2\hat{c}^{\dagger}_{j\alpha}\hat{c}_{j\beta}\hat{c}^{\dagger}_{j\beta}\hat{c}_{j\alpha} - \hat{c}^{\dagger}_{j\alpha}\hat{c}_{j\alpha}\hat{c}^{\dagger}_{j\beta}\hat{c}_{j\beta}\right)\\
&= \frac{1}{4}\left(2(2\hat{n}_{j\uparrow} + 2\hat{n}_{j\downarrow} - 2\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}) - (\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow})(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow})\right)\\
&= \frac{1}{4}\left(3\hat{n}_{j\uparrow} + 3\hat{n}_{j\downarrow} - 6\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}\right)\\
&= \frac{3}{4}\hat{n}_j - \frac{3}{2}\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}
\end{aligned} \tag{14.5}$$

这样系统哈密顿为

$$\hat{H}_{Hubbard} = -\sum_{jm,\sigma} t_{jm}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma} + \left(\frac{U}{2} - \mu\right)\sum_{j\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma} - \frac{2U}{3}\sum_{j}\hat{\vec{S}}^2_j. \tag{14.6}$$

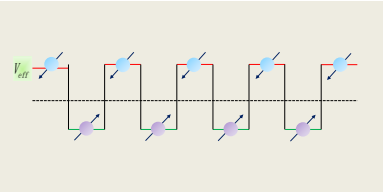


Figure 14.2: 反铁磁平均场等效于一个静态的格点依赖的交错势.

既然现在Hubbard项主要依赖于自旋密度的平方形式($\hat{\vec{S}}_j^2$),那么其在自旋转动下自然不变.

为了讨论磁有序态,我们将利用最简单的平均场近似进行处理.首先,我们定义磁性序参量

$$m_j = \langle \hat{m}_j \rangle = \langle \hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow} \rangle \tag{14.7}$$

那么根据平均场近似的一般形式$\hat{A}\hat{B} \approx \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \hat{A}\langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$,有

$$-\frac{U}{2}(\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow})^2 \approx -\frac{U}{2}[2m_j(\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}) - m_j^2] \tag{14.8}$$

对于电子填充半满或接近半满的双子格系统,例如正方,六角和立方晶格,实验和理论都表明我们可以将其磁有序态设为均匀的反铁磁(自旋密度波)态,对于序参量这等价于如下交错形式的解

$$m_j = m(-1)^{R_j} = me^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}, \quad \vec{Q} = (\pi, \pi, ...\pi) \tag{14.9}$$

这里m是序参量的强度,而平面波因子则代表磁有序在空间的分布或者振荡形式. 可以看到这里的反铁磁自旋密度波序参量与绝缘磁体中的经典Néel态几乎相同,这说明两者在物理上是类似的.$\vec{Q}$称为反铁磁特征波矢,对于正方,立方晶格具有上面的形式.这样,我们有

$$-\frac{U}{2}(\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow})^2 \approx -Ume^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}(\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}) + \frac{U}{2}m^2 \tag{14.10}$$

而平均场近似下的哈密顿量是

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma} - Um\sum_{j\sigma} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}\sigma\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \frac{U}{2}N_s m^2} \tag{14.11}$$

注意这里的色散关系ε_k已包含化学式项$-\mu$以及Hubbard项中的$U/2$部分.($\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - 4t''(\cos^2 k_x + \cos^2 k_y - 1) - \mu + U/2$)物

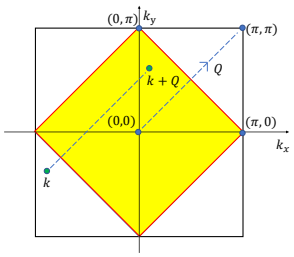


Figure 14.3: 二维正方晶格的磁布里渊区(黄色区域),其中$\vec{Q}=(\pi,\pi)$为反铁磁特征波矢.

理上,可以把相互作用做平均场之后的部分看做一个时间上静态但空间上变化的有效磁场.(图14.2)这个有效磁场强度由这些感受到磁场的电子自洽决定.

现在,让我们对哈密顿量中的第二项做傅里叶变换,

$$\begin{aligned}\sum_j e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}\sigma\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma} &= \frac{1}{N_s}\sum_j\sum_k\sum_{k'} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}e^{-ikR_j}e^{ik'R_j}\sigma\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k'}\\ &= \sum_k\sum_{k'}\delta_{k,k'+Q}\sigma\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k'}\\ &= \sum_k\sigma\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k-Q}\end{aligned}\tag{14.12}$$

这样,哈密顿量改写为

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}-Um\sum_{k\sigma}\sigma\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k-Q\sigma}+\frac{U}{2}N_sm^2\tag{14.13}$$

但是我们注意到上式第二项的形式看起来不是厄密的,因此,我们可以把对k的求和限制在约化布里渊区(也叫做磁布里渊区)以使得上式形式上更加对称.对于二维正方晶格,其约化布里渊区通常选取为以$(0,0)$为中心的小正方形,其顶点位于$(\pm\pi,0),(0,\pm\pi)$.(图14.3)这样,原先对整个第一布里渊区的求和实际上变成了对k 处于约化布里渊区内的求和以及$k+Q$的求和,即

$$\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}=\sum_{k\sigma}{}'(\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\varepsilon_{k+Q}\hat{c}^\dagger_{k+Q\sigma}\hat{c}_{k+Q\sigma})\tag{14.14}$$

这里求和号上的撇号表示对约化布里渊区求和.同理,我们有

$$-Um\sum_{k\sigma}\sigma\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k-Q\sigma}=-Um\sum_{k\sigma}{}'\sigma(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k-Q\sigma}+\hat{c}^\dagger_{k+Q\sigma}\hat{c}_{k\sigma})\tag{14.15}$$

注意到$2Q$实际上是倒格矢的整数倍,因此$k-Q$模式与$k+Q$是相同的,这样上式中的$\hat{c}_{k-Q\sigma}=\hat{c}_{k+Q\sigma}$,因而更对称形式为

$$-Um\sum_{k\sigma}\sigma\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k-Q\sigma}=-Um\sum_{k\sigma}{}'\sigma(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k+Q\sigma}+\hat{c}^\dagger_{k+Q\sigma}\hat{c}_{k\sigma})\tag{14.16}$$

我们发现系统的平均场哈密顿量可写为

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}{}'(\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\varepsilon_{k+Q}\hat{c}^\dagger_{k+Q\sigma}\hat{c}_{k+Q\sigma})-Um\sum_{k\sigma}{}'\sigma(\hat{c}^\dagger_{k+Q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k+Q\sigma})+\frac{U}{2}N_sm^2 \tag{14.17}$$

把哈密顿量写成矩阵形式则有

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{k\sigma}{}'\begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger_{k\sigma} & \hat{c}^\dagger_{k+Q\sigma}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_k & -\sigma Um\\ -\sigma Um & \varepsilon_{k+Q}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{k\sigma}\\ \hat{c}_{k+Q\sigma}\end{pmatrix}+\frac{U}{2}N_sm^2\\ &= \sum_{k\sigma}{}'[E_{k+}\hat{A}^\dagger_{k\sigma}\hat{A}_{k\sigma}+E_{k-}\hat{B}^\dagger_{k\sigma}\hat{B}_{k\sigma}]+\frac{U}{2}N_sm^2\end{aligned} \tag{14.18}$$

反铁磁平均场给出两支准粒子色散关系:

$$E_{k\pm}=\frac{1}{2}\left[\varepsilon_k+\varepsilon_{k+Q}\pm\sqrt{(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+Q})^2+4(Um)^2}\right] \tag{14.19}$$

对于只有最近邻跃迁的正方和立方晶格,当电子半满填充时,$\mu=-U/2$,那么单电子色散$\varepsilon_{k+Q}=-\varepsilon_k$,这称为嵌套条件.此时,

$$E_{k\pm}=\pm\sqrt{\varepsilon_k^2+(Um)^2}. \tag{14.20}$$

因此,当满足嵌套条件时,两支能带之间存在能隙$2Um$.对半满系统,电子完全占据下能带,这导致体系成为绝缘体.

- 注意到这里的绝缘性来自于填充反铁磁能带,文献中叫做Slater绝缘体,以区别于相互作用导致的Mott绝缘体.

此时,体系的配分函数为

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}=e^{-\beta UN_sm^2/2}\prod_{k\sigma}{}'(1+e^{-\beta E_{k+}})(1+e^{-\beta E_{k-}}) \tag{14.21}$$

对应的自由能是

$$F=\frac{U}{2}N_sm^2-2T\sum_k{}'[\ln(1+e^{-\beta E_{k+}})+\ln(1+e^{-\beta E_{k-}})] \tag{14.22}$$

自由能对磁化序参量求极值有:

$$\frac{\partial F}{\partial m^2}=\frac{U}{2}N_s+2\sum_k{}'[f_F(E_{k+})\frac{\partial E_{k+}}{\partial m^2}+f_F(E_{k-})\frac{\partial E_{k-}}{\partial m^2}]=0 \tag{14.23}$$

而直接计算可知$\frac{\partial E_{k\pm}}{\partial m^2}=\pm U^2/\sqrt{(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+Q})^2+4(Um)^2}$, 则有

$$\boxed{1+\frac{4U}{N_s}\sum_k{}'\frac{f_F(E_{k+})-f_F(E_{k-})}{\sqrt{(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+Q})^2+4(Um)^2}}=0} \tag{14.24}$$

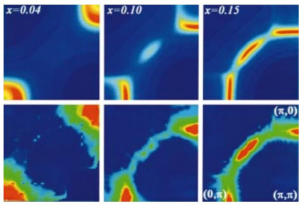


Figure 14.4: 电子掺杂铜氧化物$Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$正常态费米面随掺杂浓度演化的反铁磁平均场理论结果(上面三幅图)与实验(下面三幅图)的比较.

这个方程就是反铁磁的平均场方程,对于给定的温度,相互作用U,电子色散ε_k,数值求解该方程就能得到相应的平均场参数m.另一方面,系统的总粒子数密度n_c可由自由能密度对化学式求导获得,即

$$n_c = -\frac{1}{N_s}\frac{\partial F}{\partial \mu} = \frac{2}{N_s}\sum_k{}'[f_F(E_{k+}) + f_F(E_{k-})]. \tag{14.25}$$

为了进一步的解析讨论,我们在嵌套条件下简化关于m的方程,即有

$$1 + \frac{U}{N_s}\sum_k \frac{f_F(E_{k+}) - f_F(E_{k-})}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + (Um)^2}} = 0 \tag{14.26}$$

注意此时求和已经对整个第一布里渊区求和.

- 当前理论的一个有趣应用是关于电子掺杂铜氧化物$Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$正常态费米面随掺杂浓度的演化.[9]理论与实验的比较可参考图14.4.

零温

当$T = 0$时,$f_F(E_{k+}) = 0, f_F(E_{k-}) = 1$,我们得到

$$1 - \frac{U}{N_s}\sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + (Um)^2}} = 0 \tag{14.27}$$

在大U极限,我们得到$1 - U\frac{1}{U|m|} = 0 \Rightarrow |m| = 1$,$(m_j = \langle \hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}\rangle = m(-1)^{R_j})$也就是说在强耦合极限下每个子格完全极化,形成经典的Neel态,没有任何自旋涨落.

有限U时,平均场自洽方程需要数值求解.为得到定性物理,把对动量求和换为积分并采用模型态密度.

$$1 = U\int \frac{N(\varepsilon)d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon + (Um)^2}} \tag{14.28}$$

[9][Kusko,Markiewicz,Lindroos,Bansil,Fermi surface evolution and collapse of the Mott pseudogap in $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4\pm\delta}$,Phys. Rev. B **66**,140513(R)(2002)]

第一种模型态密度是$N(\varepsilon)=N(0)=\frac{1}{2D},\frac{1}{N_s}\sum_k\to N(0)\int_{-D}^{D}d\varepsilon$,$D$相当于传导(自由)电子能带半宽,(这种态密度适合近似描述正方和立方晶格)这样有

$$UN(0)\ln\frac{D+\sqrt{D^2+(Um)^2}}{-D+\sqrt{D^2+(Um)^2}}=1 \tag{14.29}$$

当$D>>U$时得到

$$m=\frac{2D}{U}e^{-\frac{1}{2UN(0)}}=\frac{2D}{U}e^{-\frac{D}{U}} \tag{14.30}$$

- 弱耦合极限下$D>>U$,我们发现序参量的指数型依赖行为.
- 我们没有找到序参量变为零的临界值,也就是说体系总是处于反铁磁态,这由费米面嵌套导致.

第二种模型态密度是$N(\varepsilon)=N(0)\frac{2|\varepsilon|}{D}=\frac{|\varepsilon|}{D^2}$,(这类态密度比较接近六角晶格半满时Dirac费米子主导的情况) 我们得到

$$UN(0)\frac{4}{D}\int_0^D\frac{\varepsilon d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+(Um)^2}}=1\Rightarrow 4UN(0)\left(\sqrt{1+\left(\frac{Um}{D}\right)^2}-\frac{Um}{D}\right)=1 \tag{14.31}$$

在$D>>U$情况下,

$$m=\frac{D}{U}\left(1-\frac{D}{2U}\right)\Rightarrow U_c=\frac{D}{2},\quad m=\frac{2U_c}{U}\left(1-\frac{U_c}{U}\right)\propto 1-\frac{U_c}{U}\Rightarrow\beta=1 \tag{14.32}$$

- 可以看到存在从顺磁态到反铁磁态的相变,由于相变发生在零温,这对应于量子相变.
- 临界指数与Landau平均场不同,这主要归于额外的费米子自由度的贡献.

对于实际晶格模型,半满正方晶格模型由于嵌套而总是处于反铁磁态.半满六角晶格模型有一个临界值U/t区分Dirac半金属态与反铁磁绝缘态,相变性质可由Gross-Neveu(Dirac费米子与ψ^4场的汤川耦合理论$\mathcal{L}_{GN}=\bar{\psi}i\gamma^\mu\partial_\mu\psi+\bar{\psi}\psi\phi+r\phi^2+u\phi^4$)理论描述.[10]其他更古怪晶格,例如Kagome晶格看起来并不支持任何明显的磁有序态,却对应无特性但却非平凡无序态.

有限温度

在有限温度时,令$T=T_N$代表反铁磁态的开启温度,此时平均场方程是$(m\to 0)$

$$1=\frac{U}{N_s}\sum_k\frac{\tanh\frac{|\varepsilon_k|}{2T}}{|\varepsilon_k|}\approx 2U\int_0^D N(\varepsilon)\frac{\tanh\frac{\varepsilon}{2T_N}}{\varepsilon} \tag{14.33}$$

[10][Herbut,Interactions and Phase Transitions on Graphene's Honeycomb Lattice,Phys.Rev.Lett. **97**,146401(2006)]

对于常数态密度$N(\varepsilon)=N(0)=\frac{1}{2D}$,并利用公式$\int_0^D \frac{\tanh\frac{\varepsilon}{2T_N}}{\varepsilon}=\ln\frac{D}{2T_N}\tanh\frac{D}{2T_N}+0.819$ 可得临界温度T_N的表达式(对于反铁磁态,该相变温度也叫Néel温度)

$$T_N=c_0De^{-\frac{1}{2UN(0)}}=c_0De^{-\frac{D}{U}},\quad c_0=1.13 \tag{14.34}$$

结合之前零温时序参量的表达式,我们得到反铁磁能隙的两倍($2Um$)与Neel温度的比是

$$\frac{2Um(T=0)}{T_N}=3.54 \tag{14.35}$$

注意到这个比值与BCS理论中两倍能隙与超导温度的比值一模一样.

对于$N(\varepsilon)=N(0)\frac{2|\varepsilon|}{D}=\frac{|\varepsilon|}{D^2}$ 型的态密度,利用公式 $\int_0^a dx\tanh x=\ln\cosh a$,我们发现

$$T_N=\frac{D}{2\ln 2}\left(1-\frac{D}{2U}\right)=\frac{U_c}{\ln 2}\left(1-\frac{U_c}{U}\right)\propto\frac{U_c}{U}(U-U_c),\quad \frac{2Um(T=0)}{T_N}=2.77 \tag{14.36}$$

- 强耦合时,反铁磁态对应偏离了的Néel态的反铁磁Mott绝缘体,而弱耦合时则是巡游电子填充磁能带构成的自旋密度波绝缘体.

- 注意到弱耦合时临界温度是耦合强度的指数依赖,而强耦合时应正比于反铁磁耦合$J=4t^2/U$,也就是反比于耦合强度,这样体系可能在中间耦合区出现最大的临界温度,也就是有最强的反铁磁有序.

超越平均场理论*

在前面的讨论中,我们已经简要讨论了平均场描述下的反铁磁自旋密度波态和它可能存在的相变.如果需要更仔细的讨论自旋密度波相关的问题,特别是它的相变问题,那么我们必须计入在平均场处理中忽略掉的涨落.这些涨落既包括热涨落也包含量子涨落.

关于自旋密度波相变的早期理论主要是由Hertz,Millis以及Moriya建立的HMM理论.[11]这个理论的基本想法是在微观模型,例如Hubbard模型的基础上通过Hubbard-Stratonovich变换引入自旋密度波序参量场,然后再积掉费米子自由度.此时所得的有效作用量完全由玻色型的序参量描述,当然这个有效作用量原则上可展开为序参量场的幂次,如果只保留二次和四次项就得到所谓的Hertz作用量,其完全由Landau阻尼的序参量场描述,不明确包含费米子信息:

$$S=\sum_q\left[r+a\vec{q}^2+\gamma|\Omega_n|\right]|\phi_\alpha(\vec{q},\Omega_n)|^2+\lambda\int d\tau d^dx\phi_\alpha^4(x,\tau). \tag{14.37}$$

[11] [Hertz,Quantum critical phenomena,Phys.Rev.B **14**,1165(1976);Millis,Effect of a nonzero temperature on quantum critical points in itinerant fermion systems,Phys.Rev.B **48**,7183(1993)]

这里$\gamma|\Omega_n|$代表Landau阻尼项,其在实频的形式是$-i|\omega|$,物理上是低能电子−空穴激发对序参量场动力学的直接修正.r是相变调节参数,$T=0$时$r<0$对应有序态$r>0$给出顺磁态.序参量场ϕ的二次项系数对应其RPA磁化率,

$$\chi(\vec{q},\omega)=\frac{1}{r+a\vec{q}^2-i\gamma|\omega|} \tag{14.38}$$

其物理来源是自由电子气极化图的单圈图修正.利用该磁化率,当$r=0$时,也就是序参量场处于临界状态时,量纲分析可以发现电子自能修正具有如下形式

$$\Sigma(0,\omega)\sim\omega^{\frac{d-1}{2}} \tag{14.39}$$

因此,$d=3$与$d=2$时的自能都偏离费米液体的预言,显示非费米液体行为.假设Boltzman方程可以处理这类体系的直流电阻行为,那么三维反铁磁自旋密度波体系在相变点附近的电阻是$\rho\sim T^{3/2}$.然而,需要指出,90年代以来很多重费米子化合物,例如$CeCu_{6-x}Au_x$和$YbRh_2Si_2$都不满足$T^{3/2}$的电阻行为.(甚至其磁化率也不是简单的RPA形式)这意味着HMM理论并非自旋密度波临界性问题的最终回答.

- 一般认为以上的Hertz理论在$d\geq 3$时成立,但对二维系统,积掉费米子产生的有效势具有奇异性,因而更合理的出发点是既包含费米子也具有序参量场的形式,即文献中的自旋-费米子模型:[1]

$$\begin{aligned}
&S=S_\psi+S_{\psi\phi}\\
&S_\psi=\int d\tau\int d^dx\left[\psi_{1a}^\dagger(\zeta\partial_\tau-i\vec{v}_1\cdot\nabla_x)\psi_{1a}+\psi_{2a}^\dagger(\zeta\partial_\tau-i\vec{v}_2\cdot\nabla_x)\psi_{2a}\right]\\
&S_{\psi\phi}=\int d\tau\int d^dx\left[\frac{1}{2}(\nabla\phi_\alpha)^2+\frac{r}{2}\phi_\alpha^2+\frac{u}{4}\phi_\alpha^4+\lambda\phi_\alpha\sigma_{ab}^\alpha(\psi_{1a}^\dagger\psi_{2b}+\psi_{2a}^\dagger\psi_{1b})\right]
\end{aligned}$$

这里ψ_1,ψ_2代表hot spot点也就是嵌套点附近的费米子和它共轭的费米子.[12](图14.5)S_ψ是两类费米子的自由部分,$\vec{v}_1,\vec{v}_2$是两者的费米速度.$S_{\psi\phi}$包括ϕ^4场论部分以及费米子和序参量的耦合.注意到耦合部分相当于$e^{i\vec{Q}\vec{R}_j}\vec{\phi}_j\cdot\vec{\sigma}_{ab}\hat{c}_{ja}^\dagger\hat{c}_{jb}$在连续空间的近似.当用重整化群和费米图展开讨论该作用量时,人们发现二维系统流向强耦合,因此解析处理遇到了根本性困难.[13]

[12]回忆平均场理论中有$m\sum_{k\sigma}\sigma\hat{c}_{k+Q\sigma}^\dagger\hat{c}_{k\sigma}$,因此如果只考虑费米面附近的电子,那么主要起作用的便是恰好被$\vec{Q}$联系在一起的费米面上的电子$\hat{c}_{k_F},\hat{c}_{k_F+Q}$,或者说是费米面与磁布里渊区的交点处的电子,其在连续空间记为ψ_1和ψ_2.

[13][Metlitski,Sachdev,Quantum phase transitions of metals in two spatial dimensions. II. Spin density wave order,Phys.Rev.B **82**,075128(2010)]

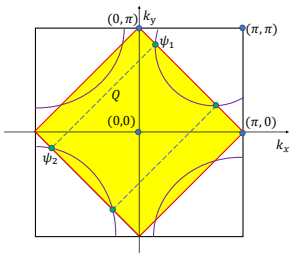


Figure 14.5: 二维正方晶格的hot spot点处的费米子ψ_1,ψ_2.

进一步的理解来自DQMC对于一类有效双带巡游反铁磁模型的数值求解.[14]

$$S = S_F + S_\varphi = \int d\tau (L_F + L_\varphi)$$

$$L_F = \sum_{ij,s,\alpha=x,y} \psi^\dagger_{\alpha is}[(\partial_\tau - \mu) - t_{\alpha,ij}]\psi_{\alpha js} + \lambda \sum_{i,s,s'} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_i}[\vec{s}\cdot\vec{\varphi}_i]_{ss'}\psi^\dagger_{xis}\psi_{yis'}$$

$$L_\varphi = \frac{1}{2}\sum_i \frac{1}{c^2}(\partial_\tau\vec{\varphi}_i)^2 + \frac{1}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}(\vec{\varphi}_i - \vec{\varphi}_j)^2 + \sum_i \left[\frac{r}{2}\vec{\varphi}_i^2 + \frac{u}{4}(\vec{\varphi}_i^2)^2\right]$$

这个作用量相当于之前自旋-费米子模型的晶格版本.注意到$\alpha = x, y$代表能带指标,分别指x, y方向的能带,这与之前自旋-费米子模型只有单个能带的情况是不同的.s是自旋指标.图14.6显示有限温度相图.低温区完全由超导态主导,小r 时存在反铁磁与超导态的共存,大r区仅有超导态,不存在电荷序.高温区显示超导涨落并且在正常态存在反铁磁序参量场的Landau阻尼行为,(费米液体的结果)然而费米子自能却显示能量温度的无关性,因而系统是非费米液体.图14.7显示了双带巡游反铁磁模型的正常态与反铁磁态电子占据数,显示费米面因反铁磁有序出现而重构.

然而,如何从理论上理解数值模拟结果依然是开放性的问题.[15]

[14][Berg,Metlitski,Sachdev,Sign-Problem - Free Quantum Monte Carlo of the Onset of Antiferromagnetism in Metals,Science **338**,1606(2012);Schattner,Gerlach,Trebst,Berg,Competing Orders in a Nearly Antiferromagnetic Metal,Phys.Rev.Lett. **117**,097002(2016)]

[15][Gerlach,Schattner,Berg,Trebst,Quantum critical properties of a metallic spin-density-wave transition,Phys.Rev.B **95**,035124(2017)]进一步的讨论可以参考综述文章[Berg,Lederer,Schattner,Trebst,Monte Carlo Studies of Quantum Critical Metals,Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**,63(2019)]

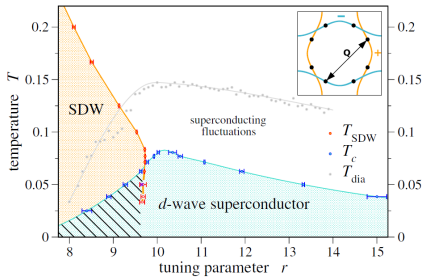


Figure 14.6: 双带巡游反铁磁模型的有限温度相图.低温区显示超导序,高温区表现反铁磁序以及非费米液体行为.右上角显示两支自由电子能带.

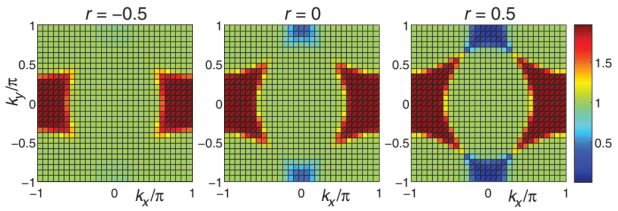


Figure 14.7: 双带巡游反铁磁模型的正常态与反铁磁态电子占据数,显示费米面因反铁磁有序出现而重构.($r=-0.5$对应反铁磁态,$r=0$在相变点($r^*=0.25$)附近,$r=0.5$处于正常态;14×14正方晶格,$c=1,\lambda=1,u=1,T=1/14$)

巡游铁磁态的平均场理论:金属铁磁性的起源

前面已经提到,早期研究Hubbard模型的主要动机是探索巡游铁磁性的基本物理,然而经过半个世纪的研究表明至少简单晶格中的单带Hubbard模型并不会显示巡游铁磁序.

在这以单带模型为例,介绍巡游铁磁性的基本物理.

$$\hat{H}=-\sum_{jm,\sigma}t_{jm}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{m\sigma}-Um\sum_{j\sigma}e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}\sigma\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+\sum_{j\sigma}\left(\frac{U}{2}-\mu_B B\sigma\right)\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+\frac{U}{2}N_s m^2 \tag{14.40}$$

这里为了讨论方面已经重新加入常数项以及Zeeman项的贡献.考虑铁磁序参量,$m_i=m,\vec{Q}=(0,0,...0)$, 并转换至动量空间,我们有

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\left[\varepsilon_k-(Um+\mu_B B)\sigma+\frac{U}{2}\right]\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\frac{U}{2}N_s m^2. \tag{14.41}$$

因此平均场近似下系统不同自旋有不同能带色散. 当$T=0$时,体系基态能是

$$\frac{E_g}{N_s}=\frac{1}{N_s}\sum_{k\sigma}E_{k\sigma}\theta(-E_{k\sigma})+\frac{U}{2}m^2,\quad E_{k\sigma}=\varepsilon_k-(Um+\mu_B B)\sigma+\frac{U}{2} \tag{14.42}$$

假定体系态密度可用常数态密度近似,那么有

$$\frac{E_g}{N_s}=\frac{U}{2}m^2+N(0)\sum_{\sigma}\int_{-D}^{\mu+Um\sigma+\mu_B B\sigma-U/2}d\varepsilon\left(\varepsilon-(Um+\mu_B B)\sigma+\frac{U}{2}\right) \tag{14.43}$$

计算可得

$$\frac{E_g}{N_s}=\frac{U}{2}m^2-\frac{N(0)}{2}\sum_{\sigma}\left(\mu+(Um+\mu_B B)\sigma-\frac{U}{2}+D\right)^2 \tag{14.44}$$

$$n=-\frac{\partial E_g}{N_s\partial\mu}=2N(0)\left[\mu-\frac{U}{2}+D\right]\Rightarrow\mu=\frac{U}{2}-D+\frac{n}{2N(0)} \tag{14.45}$$

$$0=\frac{\partial E_g}{N_s\partial m}=Um-2N(0)U[Um+\mu_B B]\Rightarrow m=\frac{2N(0)}{1-2N(0)U}\mu_B B \tag{14.46}$$

令$\tilde{U}=2U$,我们发现体系的静态磁化率是

$$\chi=\frac{2N(0)}{1-N(0)\tilde{U}} \tag{14.47}$$

可以看到,当分母为零即$1-N(0)\tilde{U}=0$有

$$N(0)\tilde{U}\to 1\Rightarrow\chi\to\infty \tag{14.48}$$

换句话说,当体系相互作用大于能带宽度时,磁极化率发散,表明体系倾向于形成铁磁有序.

- 这里$N(0)\tilde{U}=1$就是著名的Stoner铁磁不稳定性判据.它表明足够大的相互作用或者足够大的费米面附近态密度都有可能导致铁磁不稳定性.
- 当铁磁相变发生于零温时,其自然成为量子相变的典型例子.

有限温度下,体系自由能具有如下形式

$$\frac{F}{N_s}=\frac{U}{2}m^2-\frac{T}{N_s}\sum_{k\sigma}\ln(1+e^{-\beta E_{k\sigma}}) \tag{14.49}$$

对磁化m求极值后可得

$$m=\frac{1}{N_s}\sum_{k\sigma}\frac{1}{e^{\beta E_{k\sigma}}+1}=\frac{1}{N_s}\sum_{k}(\langle\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\rangle-\langle\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}\rangle) \tag{14.50}$$

把求和换为积分并考虑常数态密度以及为零的外磁场后,我们发现

$$m=N(0)\int_{-D}^{D}d\varepsilon\left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-Um+U/2-\mu)}+1}-\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon+Um+U/2-\mu)}+1}\right) \tag{14.51}$$

当体系接近相变温度T_c时有

$$m\approx N(0)\int_{-D}^{D}d\varepsilon\left(-2Um\frac{\partial f_F}{\partial\varepsilon}\right)|_{T=T_c}\Rightarrow 1=\tilde{U}N(0)\tanh\frac{D}{2T_c} \tag{14.52}$$

这样我们得到巡游铁磁的相变温度是

$$T_c=\frac{D}{2}\frac{1}{\tanh^{-1}\frac{1}{N(0)\tilde{U}}} \tag{14.53}$$

对于这个临界温度公式,我们发现

$$\tilde{U}N(0)>1:\quad T_c\approx\frac{D}{2}\frac{N(0)\tilde{U}}{2}=\frac{\tilde{U}}{8}\propto\tilde{U} \tag{14.54}$$

巡游铁磁态的自旋波激发

既然巡游铁磁态自发破缺连续的自旋旋转不变性,那么根据Goldstone定理我们期待巡游铁磁态应具有无能隙激发,也就是铁磁自旋波.现在让我们通过RPA近似来证明这一点.

首先,我们知道体系的磁化强度$\hat{\vec{M}}(x)=g\mu_B\hat{\vec{S}}(x)=g\mu_B\frac{1}{2}\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}(x)$而磁化强度与磁场$\vec{B}(x)$耦合:

$$\hat{V}=-\int d^dx\hat{\vec{M}}(x)\cdot\vec{B}(x)=-\int d^dx\hat{M}^\alpha(x)B^\alpha(x) \tag{14.55}$$

如果考虑上述耦合的(Heisenberg绘景下的)时间依赖则有

$$\hat{V}_H=-\int d^dx\hat{M}^\alpha(x,t)B^\alpha(x,t) \tag{14.56}$$

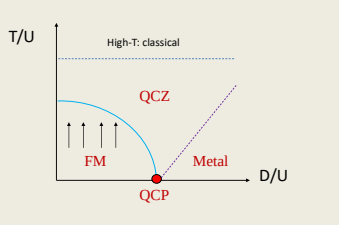


Figure 14.8: 巡游铁磁性的平均场相图,在相图左侧是巡游铁磁的金属而相图右边是正常的顺磁性金属,两个相之间是铁磁量子临界点和量子临界区.

这样根据一般的线性响应理论可知,

$$\hat{M}^{\alpha}(x,t)=\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{M}^{\alpha}(x)]-\frac{1}{i}\int_{-\infty}^{t}dt'\int d^{d}y\langle[\hat{M}^{\alpha}(x,t),\hat{M}^{\beta}(y,t')]\rangle B^{\beta}(y,t')$$

这样可以定义磁性磁化率

$$\chi^{\alpha\beta}(x,t;y,t')\equiv-\frac{1}{i}\theta(t-t')\langle[\hat{M}^{\alpha}(x,t),\hat{M}^{\beta}(y,t')]\rangle=-\frac{(g\mu_B)^2}{i}\theta(t-t')\langle[\hat{S}^{\alpha}(x,t),\hat{S}^{\beta}(y,t')]\rangle \tag{14.57}$$

其傅里叶变换是

$$\chi^{\alpha\beta}(q,\omega)=-(g\mu_B)^2\int dtd^{d}xe^{-iqx}e^{i\omega t}(-i)\theta(t)\langle[\hat{S}^{\alpha}(x,t),\hat{S}^{\beta}(0,0)]\rangle=-(g\mu_B)^2\langle\langle\hat{S}^{\alpha}_{q}|\hat{S}^{\beta}_{-q}\rangle\rangle_{\omega}. \tag{14.58}$$

取$\alpha=-,\beta=+$有

$$\chi^{-+}(q,\omega)=-(g\mu_B)^2\langle\langle\hat{S}^{-}_{q}|\hat{S}^{+}_{-q}\rangle\rangle_{\omega}. \tag{14.59}$$

这里

$$\hat{S}^{-}_{q}=\sum_{k}\hat{c}^{\dagger}_{k+q\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow},\qquad \hat{S}^{+}_{-q}=\sum_{k}\hat{c}^{\dagger}_{k-q\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}. \tag{14.60}$$

对于Hubbard模型,我们可以写出其动量空间的形式,即$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\frac{U}{N_s}\sum_{kk'q}\hat{c}^{\dagger}_{k+q\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}$. 这样无相互作用部分是$\hat{H}_0=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$而相互作用部分是$\hat{H}_1=\frac{U}{N_s}\sum_{kk'q}\hat{c}^{\dagger}_{k+q\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}$. 令$A=\hat{c}^{\dagger}_{k+q\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow},B=\hat{S}^{+}_{-q}$并利用推迟Green函数的运动方程$\omega\langle\langle A|B\rangle\rangle_{\omega}=\langle[A,B]\rangle-\langle\langle[H,A]|B\rangle\rangle_{\omega}$可得

$$[A,B]=\sum_{k'}\delta_{k',k+q}(\hat{c}^{\dagger}_{k+q\downarrow}\hat{c}_{k'\downarrow}-\hat{c}^{\dagger}_{k'-q\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}) \tag{14.61}$$

这样

$$\langle[A,B]\rangle=\langle\hat{c}^{\dagger}_{k+q\downarrow}\hat{c}_{k+q\downarrow}\rangle-\langle\hat{c}^{\dagger}_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\rangle\equiv\langle n_{k+q\downarrow}\rangle-\langle n_{k\uparrow}\rangle.$$

同时,我们发现

$$[\hat{H}_0, A] = \sum_{k'} \varepsilon_{k'} (\delta_{k+q,k'} \hat{c}^\dagger_{k'\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} - \delta_{k,k'} \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k'\uparrow}) = \omega_{kq} \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} \qquad (14.62)$$

这里$\omega_{kq} = \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k$.

$$[H_1, A] = -\frac{U}{N_s} \sum_{k',q'} (\hat{c}^\dagger_{k'+q'\uparrow} \hat{c}^\dagger_{k+q-q'\downarrow} \hat{c}_{k'\uparrow} \hat{c}_{k\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}^\dagger_{k'-q'\downarrow} \hat{c}_{k'\downarrow} \hat{c}_{k-q'\uparrow})$$

显然,如果我们不做近似就会涉及更高阶的Green函数.让我们做如下平均场近似以简化上述形式,

$$\hat{c}^\dagger_{k'+q'\uparrow} \hat{c}^\dagger_{k+q-q'\downarrow} \hat{c}_{k'\uparrow} \hat{c}_{k\uparrow} \simeq -\langle \hat{c}^\dagger_{k'+q'\uparrow} \hat{c}_{k'\uparrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q-q'\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} + \langle \hat{c}^\dagger_{k'+q'\uparrow} \hat{c}_{k\uparrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q-q'\downarrow} \hat{c}_{k'\uparrow}$$

$$\hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}^\dagger_{k'-q'\downarrow} \hat{c}_{k'\downarrow} \hat{c}_{k-q'\uparrow} \simeq -\langle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k'\downarrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k'-q'\downarrow} \hat{c}_{k-q'\uparrow} + \langle \hat{c}^\dagger_{k'-q'\downarrow} \hat{c}_{k'\downarrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k-q'\uparrow}$$

这里的平均是对铁磁平均场做,那么$\langle \hat{c}^\dagger_{k'+q'\uparrow} \hat{c}_{k'\uparrow} \rangle = \delta_{q'=0} \langle n_{k'\uparrow} \rangle$, $\langle \hat{c}^\dagger_{k'+q'\uparrow} \hat{c}_{k\uparrow} \rangle = \delta_{k'+q',k} \langle n_{k\uparrow} \rangle$,$\langle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k'\downarrow} \rangle = \delta_{k+q,k'} \langle n_{k+q\downarrow} \rangle$, $\langle \hat{c}^\dagger_{k'-q'\downarrow} \hat{c}_{k'\downarrow} \rangle = \delta_{q'=0} \langle n_{k'\downarrow} \rangle$. 这样我们发现

$$\begin{aligned}
[H_1, A] &= -\frac{U}{N_s} (-\sum_{k'} \langle n_{k'\uparrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} + \sum_{k'} \langle n_{k\uparrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{q+k'\downarrow} \hat{c}_{k'\uparrow} \\
&- \sum_{q'} \langle n_{k+q\downarrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q-q'\downarrow} \hat{c}_{k-q'\uparrow} + \sum_{k'} \langle n_{k'\downarrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow}) \\
&= \frac{U}{N_s} (\sum_{k'} \langle n_{k'\uparrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} - \sum_{k'} \langle n_{k\uparrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{q+k'\downarrow} \hat{c}_{k'\uparrow} \\
&+ \sum_{q'} \langle n_{k+q\downarrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{q+q'\downarrow} \hat{c}_{q'\uparrow} - \sum_{k'} \langle n_{k'\downarrow} \rangle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow}) \\
&= \frac{U}{N_s} (\sum_{k'} (\langle n_{k'\uparrow} \rangle - \langle n_{k'\downarrow} \rangle) \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} + (\langle n_{k+q\downarrow} \rangle - \langle n_{k\uparrow} \rangle) \hat{S}^-_q).
\end{aligned}$$

既然$\frac{1}{N_s} \sum_{k'} (\langle n_{k'\uparrow} \rangle - \langle n_{k'\downarrow} \rangle) = -m$,那么

$$[H_1, A] = -Um \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} + \frac{U}{N_s} (\langle n_{k+q\downarrow} \rangle - \langle n_{k\uparrow} \rangle) \hat{S}^-_q$$

由此我们发现

$$(\omega + \omega_{kq} - Um) \langle\langle \hat{c}^\dagger_{k+q\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} | \hat{S}^+_{-q} \rangle\rangle_\omega = (\langle n_{k+q\downarrow} \rangle - \langle n_{k\uparrow} \rangle)(1 - \frac{U}{N_s} \langle\langle \hat{S}^-_q | \hat{S}^+_{-q} \rangle\rangle_\omega)$$

两边同除以$\omega + \omega_{kq} + Um$并对$k$积分可得

$$\langle\langle \hat{S}^-_q | \hat{S}^+_{-q} \rangle\rangle_\omega = -\frac{\Gamma^{-+}(q,\omega)}{1 - \frac{U}{N_s} \Gamma^{-+}(q,\omega)} \qquad (14.63)$$

这里我们定义了($\langle n_{k\sigma}\rangle = f_F(E_{k\sigma}), E_{k\sigma} = \varepsilon_k + U\langle n_{k\bar{\sigma}}\rangle = \varepsilon_k + Un/2 - Um/2\sigma$是平均场近似下铁磁态的色散[16])

$$\Gamma^{-+}(q,\omega) = -\sum_k \frac{f_F(E_{k+q\uparrow}) - f_F(E_{k\downarrow})}{\omega + \omega_{kq} - Um + i0^+} = -\sum_k \frac{f_F(E_{k+q\uparrow}) - f_F(E_{k\downarrow})}{\omega + E_{k+q\uparrow} - E_{k\downarrow} + i0^+}. \tag{14.64}$$

因此

$$\chi^{-+}(q,\omega) = (g\mu_B)^2 \frac{\Gamma^{-+}(q,\omega)}{1 - \frac{U}{N_s}\Gamma^{-+}(q,\omega)} \tag{14.65}$$

类似于Coulomb电子气体中关于粒子-空穴激发和等离激元的讨论,$\chi^{-+}(q,\omega)$分母为零的点决定体系的集体激发谱,而$\Gamma^{-+}(q,\omega)$分母为零对应体系的粒子-空穴激发.展开$\Gamma^{-+}(q,\omega)$到q^2阶会发现此时的集体激发色散为$\omega \sim q^2$,也就是铁磁自旋波激发.

进一步的理论进展*

- 与反铁磁情况类似,基于双带模型,DQMC模拟给出巡游铁磁相变的相图.相变指数既不是Ising类也不符合Hertz理论,因此是一类新的非费米液体.[17]

与巡游铁磁性类似的一类问题是所谓的Ising-nematic相变,其有效作用量可写成$S = S_\psi + S_\phi + S_{int}$:

$$\begin{aligned} S_\psi &= \int d\tau \sum_k \psi_k^\dagger (\partial_\tau + \varepsilon_k - \mu)\psi_k \\ S_\phi &= \int d\tau \int d^2x \left[\frac{1}{2}r\phi^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2c^2}(\nabla\phi)^2 + \frac{u}{4}\phi^4\right] \\ S_{int} &= \lambda \int d^2x \int d\tau \phi\psi^\dagger(\partial_x^2 - \partial_y^2)\psi \end{aligned} \tag{14.66}$$

这里我们主要关心二维Ising-nematic相变.通过调节r可以实现从费米液体(气体)到Ising-nematic相的量子相变.如果假设系统在$\lambda = 0$时有一个圆形费米面,那么微扰计算表明最低阶近似对序参量场ϕ的修正是

$$\Pi(q,\Omega_n) = -\lambda^2 v_0 \cos^2(2\theta_q)\left[1 - \frac{|\Omega_n|}{v_F^2 q^2 + \Omega_n^2}\right] \tag{14.67}$$

这里v_0, v_F分别是费米面上的态密度和费米速度,θ_q是q与x轴的夹角.注意到S_ϕ中的频率依赖是Ω_n^2/c^2,那么在特征频率$\Omega_b = |\lambda|\sqrt{v_0 c^3/v_F}$以下,$\Pi(q,\Omega_n)$中的Landau阻尼项$\frac{|\Omega_n|}{v_F|q|}$将主导低能物理.如果考虑序参量场对费米子$\psi$的修正,那么费米子部分将会有如下自能:

$$\Sigma(k_F,\omega_n) \sim -i(\lambda^4 \sin^4\theta_{k_F}/E_F)^{1/3}|\omega_n|^{2/3} sign(\omega_n) \tag{14.68}$$

[16] $n = \langle n_{k\uparrow}\rangle + \langle n_{k\downarrow}\rangle, m = \langle n_{k\downarrow}\rangle - \langle n_{k\uparrow}\rangle$

[17] [Xu,Sun,Schattner,Berg,Meng,Non-Fermi Liquid at $(2+1)D$ Ferromagnetic Quantum Critical Point,Phys.Rev.X **7**,031058(2017)]

其中$E_F \sim v_0 v_F^2$是费米能,θ_{k_F}是费米动量与x轴夹角.这样,我们可以定义一个能量尺度$\Omega_{NFL} = \frac{\lambda^4}{E_F}$,在这个尺度之下,上述非费米液体型自能主导低能过程,体系显示非费米液体特性,而在Ω_{NFL}之上,费米子部分仍显示费米液体行为.注意到当相互作用耦合λ比较小时,$\Omega_{NFL} < \Omega_b$,那么在这个能量区间虽然序参量场有明显的Landau阻尼,费米子依然保持费米液体行为.当能量尺度小于Ω_{NFL},非费米液体自能变得足够重要,原则上需要考虑高阶微扰过程的修正,但是在二维情况下会出现无穷多可能的过程,这导致微扰计算的失效.

- 受到Sachdev-Ye-Kitaev模型的启发,人们把Ising-nematic相变模型中的相互作用参数λ修改为无序变量,这样当自旋指标趋于无穷时就得到一组自洽方程,这些方程决定了体系在大N极限下的行为.需要指出,由于大N极限的存在,原先有限N时所有高阶微扰都被抑制. [18]

当然,如果我们考虑量子临界点附近的超导配对可能,那么超导配对的能量尺度实际上与Ω_{NFL}相当,因此原则上需要同时考虑非费米液体行为和超导配对,这对于微扰理论而言过于困难.类似于巡游反铁磁的情况,人们也用量子蒙特卡洛研究了Ising-nematic相变的低温行为,其主要发现是:[19]

1. 低温下体系是s波超导态,因此量子临界点被包裹而无法直接研究;
2. 序参量场的静态性质符合Hert-Millis-Moriya理论的形式,但是频率依赖部分且显示明显的偏离;
3. 相变点之上费米面上的费米子自能显示动量与频率近似无关的非费米液体特性,这与目前关于Ising-nematic的微扰理论明显不同.

另一方面,90年代以来关于巡游铁磁性的实验显示出矛盾性的行为,一些材料显示二级相变而另一些则有一级铁磁相变.Belitz,Kirkpatrick和 Vojta指出二维和三维顺磁-铁磁金属量子相变一般而言是一级相变(材料足够干净).其物理原因是磁化与任何金属中总是存在的电子型软模的耦合导致涨落诱导的一级相变.进一步包含磁场效应则产生三临界翼结构(tricritical wings).此外,非磁性杂质抑制三临界温度,这样在无序强度大于某个临界值时相变会变为二阶相变.这套理论目前是巡游铁磁相变比较公认的理论基础,更多细节可参考相关综述.[20]

[18] [Esterlis,Guo,Patel,Sachdev,Large-N theory of critical Fermi surfaces,Phys.Rev.B **103**,235129(2021)]

[19] 进一步的讨论可以参考综述文章[Berg,Lederer,Schattner,Trebst,Monte Carlo Studies of Quantum Critical Metals,Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**,63(2019)]

[20] [Brando,Belitz,Grosche,Kirkpatrick,Metallic quantum ferromagnets,Rev.Mod.Phys. **88**,025006(2016)]

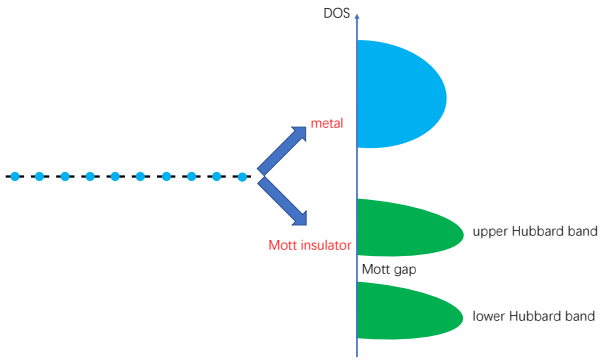


Figure 14.9: 从孤立的单轨道模型到Mott绝缘体或金属的演化.

电子系统的Mott相变:没有序参量的相变

概述

20世纪20 – 30年代,Bethe,Sommerfeld,Bloch等人基于量子力学建立了能带理论,在该理论中金属与绝缘体的差别在于前者的最高占据能带部分填充,而后者的最高占据能带完全填充.然而,30年代对于d电子能带部分填充的过渡金属氧化物(例如NiO)的实验表明这类系统是很差的导体,或者说是绝缘体而非能带理论预言的金属. 基于以上实验事实,Peierls指出电子间的强Coulomb排斥应是这类绝缘行为的起源.接下来,Mott走出了关键一步,他考虑在每个格点有单个电子轨道的晶格模型(可以用单带Hubbard模型来理解),当没有电子相互作用时,由于原子轨道间的重叠会导致一个能带的形成,当每个格点被自旋上与自旋下电子同时占据时,这个能带会被填满.但是两个电子占据同一个格点会感受到巨大的Coulomb排斥,因此Mott认为系统的能带会劈裂成两个:下能带由占据空格点的电子形成,(即下Hubbard能带)而上能带则由已被一个电子占据的格点上再占据一个电子所形成(上Hubbard能带).当每个格点平均有一个电子时,下能带会被填满,系统是绝缘体.我们一般把这类Mott所讨论的由相互作用诱导的绝缘体称为Mott绝缘体.(如图14.9)注意到Mott的原始定义并没有涉及系统是否具有磁性.进一步,若金属与Mott绝缘体之间发生相变,那么我们称这个相变为Mott相变.[21]

- Mott相变:相互作用引起的金属到绝缘态的转变.
- Hubbard基于Hubbard模型的Hubbard-I近似处理给出Mott想法的定量描

[21]除了过渡金属氧化物,4f和5f化合物也与Mott物理相关,当然严格地说f电子体系需要看成轨道选择的Mott体系.另外,人工合成的结构如转角石墨烯,超冷原子气体和受限制的离子体系也是模拟和观测Mott物理的典型系统.

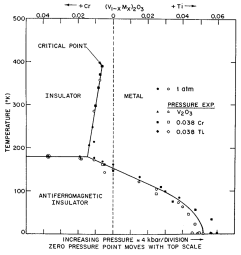


Figure 14.10: 掺杂V_2O_3的温度-压力相图.这里绝缘体指Mott绝缘体,实线是一级相变线.注意Mott绝缘体与金属之间存在一级相变线,该线的高温终点是临界终点,类似于气液相变的情况.

述,即因相互作用的引入导致单个能带劈裂为两个能带.然而Hubbard-I近似对任何相互作用强度都给出Mott绝缘体的预言,这并不正确.

- 进一步的Hubbard-III近似正确给出了金属到Mott绝缘体的相变发生在有限相互作用的情况,即相互作用强度U接近电子能带宽度W时.

与Mott提出的理论不同,Slater把这些系统中的绝缘行为归因于磁性有序,例如反铁磁长程序.物理上,Slater的观点认为系统首先出现反铁磁有序,然后反铁磁序使得电子能带发生折叠导致两支准粒子能带,当电子填满低能的准粒子能带,那么体系在$T = 0$成为绝缘体.这类绝缘体称为Slater绝缘体.与之相对,Mott绝缘体首先由于电子关联而导致顺磁性的金属转变为顺磁性的绝缘体,然后顺磁性的绝缘体通过降温等方式进一步转变为反铁磁的绝缘体.显然,Slater绝缘体与Mott绝缘体从绝缘的本质来看并不相同.

实验上,大多数Mott绝缘体在零温(低温)下具有反铁磁性有序,从Slater的解释来看这些绝缘体看起来像是一个能带绝缘体,能隙由磁有序的周期性导致的超晶格结构所产生.但是,实验结果(例如图14.10所示的V_2O_3)支持Mott绝缘体的解释,也就是绝缘性来自关联而非能带填充.

- 如果狭义地定义Mott相变,那么相变之后的绝缘态并不是由能带填充导致,这排除了反铁磁自旋密度波为代表的Slater绝缘体的情况.

下面我们主要考虑这种狭义的Mott相变.当Mott相变是连续的或者弱的一级相变,[22]可以期待当从金属态一边接近相变点时金属态中自旋,电荷以及轨道关联的涨落都会很强.这些强烈的涨落使得金属行为受到强烈影响,例如通过比热和磁化率测量发现V_2O_3有效质量得到相当大的增强.为了理解这种质量增强,Brinkmann和Rice利用Gutzwiller近似研究Hubbard模型并发现Mott相变附近金属态中电子质量确实有很大的增强,热容,磁化等物理量正确反应这种质量增强效应.事实上,他们的近似仅只用于Mott相变的金属态一边,描述的仅是相干

[22]目前的实验支持一级相变



Figure 14.11: Sir Nevill Francis Mott(1905 – 1996).Mott因磁性和无序系统的电子结构的基础性理论研究荣获1977 年诺贝尔物理学奖.

的准粒子的贡献,而非相干的贡献,例如前面提到的上下Hubbard能带,并不在理论的处理范围内.

这样,早期的Mott相变研究可以概括为:

1. Hubbard-I与Hubbard-III近似给出了Mott绝缘体和Mott相变的定性描述;
2. Gutzwiller变分波函数的近似计算给出Mott相变附近相干准粒子的行为.

显然,一个更为完整的Mott相变理论应该包含Hubbard近似与Gutzwiller近似的主要特性,即从电子谱的角度来说需要有上下Hubbard能带与准粒子能带.

从方法论的角度来看,既然我们要研究的是一类金属-绝缘体相变,那么相应的理论方法必须满足以下的要求:

1. 能够研究热力学极限的情况(严格的相变仅存在于热力学极限);
2. 能够研究零温基态(金属和绝缘体差别仅在$T = 0$严格定义);
3. 能够用于研究空间维度$d \geqslant 2$的情形($d = 1$的情况过于特殊).[23]

基于以上要求,除了已经提及的Gutzwiller近似和Hubbard近似,研究Mott相变的理论方法主要有动力学平均场理论(DMFT),辅助粒子技术,量子蒙特卡洛模拟(行列式蒙特卡洛(DQMC)或变分蒙特卡洛(VMC))和基于张量的方法(例如密度矩阵重整化群(DMRG),矩阵乘积态(MPS),张量重整化(TRG)).在这里我们主要介绍最流行且被研究者们广泛认可的动力学平均场理论.

动力学平均场

80年代末90年代初发展起来的动力学平均场理论(dynamic mean-field theory,DMFT)方法成功地把Hubbard 近似与Gutzwiller近似的核心特新结合在一

[23] $d = 1$时Hubbard模型的Bethe ansatz解表明半满时只要$U > 0$就存在Mott绝缘体,电荷自由度有激发能隙而自旋自由度无能隙,后者的性质类似于$d = 1$Heisenberg模型的顺磁性基态(一维量子自旋液体).

起,因此成为我们理解Mott相变的标准工具.(尽管其有很多缺陷)对于DMFT,其含义是:

- 动力学平均场理论:把相互作用的晶格电子问题转换为在动力学背景(即动力学的平均场)下的单杂质(Kondo/Anderson杂质模型)问题.

换句话说,原先我们关注晶格中每一个格点上的每一个电子的行为,现在通过动力学平均场近似,我们假定仅讨论一个格点上的电子问题,该电子既受到格点内的相互作用,也会感受到其他格点电子形成的有效场对它的影响,然后通过求解这个等效的杂质问题我们可以得到该格点电子的相互作用修正,也就是自能.假定每一个格点都是等价的,那么其他格点上的电子也会有一样的自能,因此它们在该自能修正后的行为也会和我们关注的这个格点行为相同,这就得到了一个自洽理论.在数学上相当于存在一些列自洽的积分方程,通过求解方程就可得到系统的行为,例如电子的态密度和谱函数.既然电子间的相互作用已经由所有电子的贡献进行平均,那么数学上来看电子的自能函数仅是频率的函数而不显示空间依赖(没有动量k的依赖关系),即自能是空间局域的,$\Sigma(k,\omega)=\Sigma(\omega)$,这样电子的Green 函数成为$G(k,\omega)=\frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\Sigma(\omega)}$.[24]

DMFT的实例:Hubbard模型

具体而言,对于Hubbard模型$\hat{H}=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+U\sum_i\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$, 如果关注于某个格点,例如第零格点,那么我们可以把其他格点作为这个格点的有效场,或者环境来看待,则有(图14.12)

$$\hat{H}=\overbrace{U\hat{n}_{0\uparrow}\hat{n}_{0\downarrow}}^{\hat{H}_0}\overbrace{-\sum_{j\neq0,\sigma}(t_{0j}\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+t_{j0}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{0\sigma})}^{\hat{H}_{0-bath}}\overbrace{-\sum_{i,j\neq0,\sigma}t_{ij}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+U\sum_{i\neq0}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}}^{\hat{H}_{bath}} \tag{14.69}$$

这里$\hat{H}_0$是第零格点的哈密顿量,$\hat{H}_{bath}$是环境哈密顿量,$\hat{H}_{0-bath}$是第零格点与环境耦合的哈密顿量.[25]为得到第零格点的动力学,我们可以积掉环境自由度,这可以通过路径积分形式获得.[26]

[24]值得注意,全息对偶/规范-引力对偶发现的非费米液体也具有类似的局域自能,这是近AdS_2黑洞视界的必然结果.

[25]回忆统计物理中正则和巨正则系综里面体系和大热源耦合,这个热源就称为bath(热浴).

[26]用传统的二次量子化并不容易实现这个操作.这里用路径积分推导动力学平均场的思路称为腔方法(cavity method).

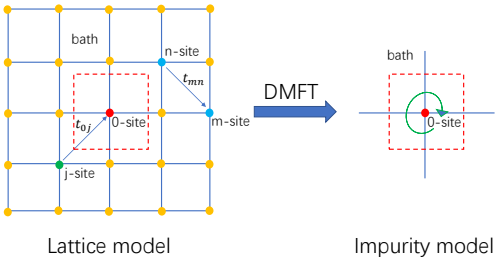


Figure 14.12: 动力学平均场理论把晶格问题简化为涨落背景(热浴)下的杂质问题.

首先,体系的配分函数可用作用量表示为

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr} e^{\beta \hat{H}} = \int D\bar{c}Dc e^{-S_0 - S_{bath} - S_{0-bath}}, \quad D\bar{c}Dc = \prod_i \prod_\sigma \prod_\tau d\bar{c}_{i\sigma}(\tau) dc_{i\sigma}(\tau)$$

$$S_0 = \int d\tau \left(\sum_\sigma \bar{c}_{0\sigma} \partial_\tau \bar{c}_{0\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} \right)$$

$$S_{bath} = \int d\tau \left(\sum_{j\neq 0,\sigma} \bar{c}_{j\sigma} \partial_\tau c_{j\sigma} - \sum_{i,j\neq 0,\sigma} t_{ij} \bar{c}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i\neq 0} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right)$$

$$S_{0-bath} = \int d\tau \left(- \sum_{j\neq 0,\sigma} (t_{0j} \bar{c}_{0\sigma} c_{j\sigma} + t_{j0} \bar{c}_{j\sigma} c_{0\sigma}) \right). \tag{14.70}$$

在通常的场论计算中,我们往往是对相互作用部分做指数展开然后逐项计算,这就是传统的微扰展开.在这里如果用同样的操作展开$e^{-\int \tau U \sum_{i\neq 0} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}$,那么我们无法得到Mott物理.[27]因此,我们改为展开$e^{-S_{0-bath}}$项,即

$$e^{-S_{0-bath}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} S_{0-bath}^n = 1 - S_{0-bath} + \frac{1}{2} S_{0-bath}^2 - \frac{1}{3!} S_{0-bath}^3 + \frac{1}{4!} S_{0-bath}^4 \cdots \tag{14.71}$$

[27]自1960年代以来还没人能用微扰方法成功获得Mott相变.

这样配分函数可以写成

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \overbrace{\int D\bar{c}_0 Dc_0 e^{-S_0}}^{=\mathcal{Z}_0}\int\prod_{j\neq 0}D\bar{c}_j Dc_j e^{-S_{bath}}e^{-S_{0-bath}}\\ &= \mathcal{Z}_0\overbrace{\int\prod_{j\neq 0}D\bar{c}_j Dc_j e^{-S_{bath}}}^{=\mathcal{Z}_{bath}}(1-S_{0-bath}+\frac{1}{2}S_{0-bath}^2+...)\\ &= \mathcal{Z}_0\mathcal{Z}_{bath}(1-\langle S_{0-bath}\rangle_{bath}+\frac{1}{2}\langle S_{0-bath}^2\rangle_{bath}+...) \qquad (14.72)\end{aligned}$$

这里定义了$\langle ...\rangle_{bath}=\frac{1}{\mathcal{Z}_{bath}}\int\prod_{j\neq 0}D\bar{c}_j Dc_j e^{-S_{bath}}(...)$. 原则上我们需要考虑关于$S_{0-bath}$无穷阶的贡献,这明显不现实.不过注意到我们是以$S_{bath}$作为参考进行展开,这相当于是做了强耦合展开,也就是以t/U作为展开参数,这样在$U\gg t$时可以忽略所有的高阶项.另一方面,如果我们重标$t_{ij}=\frac{\tilde{t}_{ij}}{\sqrt{d}}$,[28]这里$d$是系统的空间维度,那么展开的第$n$项正比于$1/d^{n/2}$,这样在$d\to\infty$也就是所谓的无穷维极限下只需要考虑$\langle S_{0-bath}\rangle_{bath},\langle S_{0-bath}^2\rangle_{bath}$这两阶.

因此有

$$\langle S_{0-bath}\rangle_{bath}=\int d\tau\left(-\sum_{j\neq 0,\sigma}(t_{0j}\bar{c}_{0\sigma}\langle c_{j\sigma}\rangle_{bath}+t_{j0}\langle\bar{c}_{j\sigma}\rangle_{bath}c_{0\sigma})\right) \qquad (14.73)$$

注意到对粒子数守恒的系统,单粒子平均必然为零,即$\langle\hat{c}_{j\sigma}\rangle_{bath}=\langle\bar{c}_{j\sigma}\rangle_{bath}=0$或者说由于我们是对奇数个费米子做Grassman数积分,其必定为零.这说明与环境的一阶耦合项为零,(实际上所有奇数次项都为零)这样我们需要计算二阶项

$$\begin{aligned}\langle S_{0-bath}^2\rangle_{bath} &= \int d\tau\int d\tau'\sum_{j\neq 0,\sigma}\sum_{m\neq 0,\sigma'}\langle(t_{0j}\bar{c}_{0\sigma}(\tau)c_{j\sigma}(\tau)+t_{j0}\bar{c}_{j\sigma}(\tau)c_{0\sigma}(\tau))\\ &\times (t_{0m}\bar{c}_{0\sigma'}(\tau')c_{m\sigma'}(\tau')+t_{m0}\bar{c}_{m\sigma'}(\tau')c_{0\sigma'}(\tau'))\rangle_{bath}\end{aligned}$$

上式平均可以写成四项,

$$\begin{aligned}&-t_{0j}t_{0m}\bar{c}_{0\sigma}(\tau)\bar{c}_{0\sigma'}(\tau')\langle c_{j\sigma}(\tau)c_{m\sigma'}(\tau')\rangle_{bath}\\ &t_{0j}t_{m0}\bar{c}_{0\sigma}(\tau)c_{0\sigma'}(\tau')\langle c_{j\sigma}(\tau)\bar{c}_{m\sigma'}(\tau')\rangle_{bath}\\ &t_{j0}t_{0m}c_{0\sigma}(\tau)\bar{c}_{0\sigma'}(\tau')\langle\bar{c}_{j\sigma}(\tau)c_{m\sigma'}(\tau')\rangle_{bath}\\ &-t_{j0}t_{m0}c_{0\sigma}(\tau)c_{0\sigma'}(\tau')\langle\bar{c}_{j\sigma}(\tau)\bar{c}_{m\sigma'}(\tau')\rangle_{bath} \qquad (14.74)\end{aligned}$$

当不考虑系统的超导配对时,$\langle c_{j\sigma}(\tau)c_{m\sigma'}(\tau')\rangle_{bath}=\langle\bar{c}_{j\sigma}(\tau)\bar{c}_{m\sigma'}(\tau')\rangle_{bath}=0$, 定义环境的Green函数为$G_{bath}^{jm,\sigma\sigma'}(\tau-\tau')=-\langle c_{j\sigma}(\tau)\bar{c}_{m\sigma'}(\tau')\rangle_{bath}$,那么

$$\begin{aligned}\langle S_{0-bath}^2\rangle_{bath} &= -\int d\tau\int d\tau'\sum_{j\neq 0,\sigma}\sum_{m\neq 0,\sigma'}(\bar{c}_{0\sigma}(\tau)t_{0j}t_{m0}G_{bath}^{jm,\sigma\sigma'}(\tau-\tau')c_{0\sigma'}(\tau')\\ &+ \bar{c}_{0\sigma'}(\tau')t_{j0}t_{0m}G_{bath}^{mj,\sigma'\sigma}(\tau'-\tau)c_{0\sigma}(\tau))\end{aligned}$$

[28]这样重标可以使得在$d\to\infty$获得行为良好的自由电子态密度

交换指标$j,m(\sigma,\sigma'$以及$\tau,\tau')$则

$$\langle S^2_{0-bath}\rangle_{bath} = -2\int d\tau\int d\tau'\sum_{\sigma\sigma'}\bar{c}_{0\sigma}(\tau)\sum_{j,m\neq 0}t_{0j}t_{m0}G^{jm,\sigma\sigma'}_{bath}(\tau-\tau')c_{0\sigma'}(\tau')$$

最后,对非磁性态,Green函数是自旋对角的,也就是$G^{jm,\sigma\sigma'}_{bath}(\tau-\tau')=\delta_{\sigma\sigma'}G^{jm,\sigma}_{bath}(\tau-\tau')$, 这样我们得到

$$\langle S^2_{0-bath}\rangle_{bath} = -2\int d\tau\int d\tau'\sum_{\sigma}\bar{c}_{0\sigma}(\tau)\sum_{j,m\neq 0}t_{0j}t_{m0}G^{jm,\sigma}_{bath}(\tau-\tau')c_{0\sigma}(\tau')$$

把这一项重新指数化就得到$(1+\frac{1}{2}\langle S^2_{0-bath}\rangle_{bath}\simeq e^{\frac{1}{2}\langle S^2_{0-bath}\rangle_{bath}})$

$$\mathcal{Z}^{eff} = \mathcal{Z}_{bath}\int D\bar{c}_0 Dc_0 e^{-S_0^{eff}} \tag{14.75}$$

而零格点的有效作用量为

$$\begin{aligned} S_0^{eff} &= \int d\tau\left(\sum_\sigma \bar{c}_{0\sigma}\partial_\tau\bar{c}_{0\sigma}+Un_{0\uparrow}n_{0\downarrow}\right)+\int d\tau\int d\tau'\sum_\sigma\bar{c}_{0\sigma}(\tau)\sum_{j,m\neq 0}t_{0j}t_{m0}G^{jm,\sigma}_{bath}(\tau-\tau')c_{0\sigma}(\tau') \\ &= \int d\tau\int d\tau'\sum_\sigma\bar{c}_{0\sigma}(\tau)\left(-\mathcal{G}_0^{-1}(\tau-\tau')\right)c_{0\sigma}(\tau')+U\int d\tau n_{0\uparrow}(\tau)n_{0\downarrow}(\tau) \end{aligned} \tag{14.76}$$

这里我们把环境对所考虑格点的影响归结为暂时未知的Green函数$\mathcal{G}_0$,它的作用相当于通常Hartree-Fock平均场近似中平均场的作用,只不过Hartree-Fock近似中平均场不随时间或频率变化而$\mathcal{G}_0$有时间/频率依赖,因此我们把$\mathcal{G}_0$看作是具有动力学的平均场,这样整个理论称为动力学平均场.$(-\mathcal{G}_0^{-1}(\tau-\tau')=\delta(\tau-\tau')\partial_\tau+\sum_{j,m\neq 0}t_{0j}t_{m0}G^{jm,\sigma}_{bath}(\tau-\tau'))$.

做傅里叶变换可得$\mathcal{G}_0(\tau-\tau')=T\sum_{\omega_n}e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\mathcal{G}_0(\omega_n)$而$\mathcal{G}_0(\omega_n)$具有如下的局域形式:

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\omega_n) = i\omega_n+\mu-\sum_{j,m\neq 0}t_{0j}t_{m0}G^{jm,\sigma}_{bath}(\omega_n). \tag{14.77}$$

这里我们重新引入了化学势μ.根据Dyson方程,若单格点问题S_0^{eff}的Green函数为$G_{00}(\omega_n)=-\langle c_{0\sigma}(\omega_n)\bar{c}_{0\sigma}(\omega_n)\rangle_{S_0^{eff}}$,$(\langle\mathcal{O}\rangle_{S_0^{eff}}=\frac{\int D\bar{c}_0Dc_0e^{-S_0^{eff}}\mathcal{O}}{\int D\bar{c}_0Dc_0e^{-S_0^{eff}}})$那么必有

$$G_{00}(\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1}(\omega_n)-\Sigma(\omega_n)}. \tag{14.78}$$

但是由于$\mathcal{G}_0(\omega_n)$并未给定,因此我们还无法解出自能函数$\Sigma(\omega_n)$和$G_{00}(\omega_n)$.

- 注意到G^{jm}_{bath}实际上是排除低零格点后的Green函数,其与考虑所有格点后的完整Green函数G_{jm}关系为$G^{jm}_{bath}=G_{jm}-\frac{G_{j0}G_{0m}}{G_{00}}$.
- 对于所谓Bethe晶格,$\sum_{j,m\neq 0}t_{0j}t_{m0}G^{jm,\sigma}_{bath}(\omega_n)=\sum_j t_{0j}t_{j0}G_{jj}(\omega_n)\equiv t^2G(\omega_n)$.这样有$\mathcal{G}_0^{-1}(\omega_n)=i\omega_n+\mu-t^2G(\omega_n)$.

不过注意到单格点Green函数$G_{00}(\omega_n)$也可以用完整体系来定义,即

$$G_{00}(\omega_n) = -\langle c_{0\sigma}(\omega_n)\bar{c}_{0\sigma}(\omega_n)\rangle_S = \frac{\int D\bar{c}Dc e^{-S} c_{0\sigma}(\omega_n)\bar{c}_{0\sigma}(\omega_n)}{\int D\bar{c}Dc e^{-S}} \tag{14.79}$$

而完整体系在实空间的Green函数是$G_{jm}(\omega_n) = -\langle c_{j\sigma}(\omega_n)\bar{c}_{m\sigma}(\omega_n)\rangle_S$.利用Dyson方程可知其傅里叶变换是(假设体系具有平移不变性,那么$G_{jm}(\omega_n) = \frac{1}{N_s}\sum_k e^{ik(R_j-R_m)}G(k,\omega_n)$)

$$G(k,\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_k - \Sigma(k,\omega_n)}$$

显然单格点计算的Green函数与完整体系的Green函数必然相等,即有

$$G_{00}(\omega_n) = G_{j=0,m=0}(\omega_n) = \frac{1}{N_s}\sum_k G(k,\omega_n) = \frac{1}{N_s}\sum_k \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_k - \Sigma(k,\omega_n)} \tag{14.80}$$

遗憾的是,方程右边出现了未知的自能函数$\Sigma(k,\omega_n)$,这样我们仍然无法求解.如果假设自能具有局域性,即$\Sigma(k,\omega_n) \simeq \Sigma(\omega_n)$,也就是自能只有频率依赖而没有动量依赖,那么上面的方程加上$G_{00}(\omega_n)$的Dyson方程就有两个方程,这使得我们能够真正求解杂质问题.

为了后面使用的方便,我们把需要的方程重写为:

$$G(k,\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_k - \Sigma(\omega_n)} \tag{14.81}$$

$$G(\omega_n) = \frac{1}{N_s}\sum_k G(k,\omega_n) = \int d\varepsilon \frac{N(\varepsilon)}{i\omega_n + \mu - \varepsilon - \Sigma(\omega_n)} \tag{14.82}$$

$$\Sigma(\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(\omega_n) - G^{-1}(\omega_n). \tag{14.83}$$

对这些结果,我们强调$G(k,\omega_n) = -\langle c_{k\sigma}(\omega_n)\bar{c}_{k\sigma}(\omega_n)\rangle$是$G_{jm}(\tau) = -\langle c_{j\sigma}(\tau)\bar{c}_{m\sigma}\rangle$的傅里叶变换.同时,$G(k,\omega_n)$的动量平均就是$G(\omega_n)$.另一方面,单格点问题$S_0^{eff}$的Green函数为$G_{00}(\omega_n)$,注意到对于平移不变的系统,每一个格点的Green函数$G_{jj}(\omega_n)$都应该相同,显然这说明$G(\omega_n) = G_{00}(\omega_n)$.最后,自能函数$\Sigma(\omega_n)$由单格点问题$S_0^{eff}$确定.

当然,现在的问题其实归结为如何从单格点问题,也就是公式14.76出发计算Green函数G_{00}.这个直接从路径积分形式来看并不容易,[29] 但是幸运的是,人们发现单格点问题所对应的哈密顿量就是一个虚构的Anderson杂质模型,而Anderson杂质模型在上世纪60 − 80年代已有广泛而可靠的研究,不管是数值计算还是解析理论都有大量现成套路可采用,[30]因此我们可以容易得到想要的

[29]但是可以采用Hirsch-Fye量子蒙特卡洛算法直接计算分立形式的作用量以获得虚时Green函数[Hirsch,Fye,Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals,Phys.Rev.Lett. **56**,2521(1986)]或者是更加现代的连续时间量子蒙特卡洛算法(continuous-time quantum Monte Carlo)[Gull et al.,Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models,Rev.Mod.Phys. **83**,349(2011)]

[30]例如精确对角化,数值重整化群,Hirsch-Fye量子蒙特卡洛,连续时间量子蒙特卡洛,Green函数运动方程,非交叉近似(non-crossing approximation,NCA),迭代微扰理论(iterated perturbation theory,IPT)等

结果.让我们假设Anderson杂质模型具有如下的哈密顿量:

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}(\Lambda_k\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{0\sigma})-\mu\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{0\sigma}+U\hat{c}^\dagger_{0\uparrow}\hat{c}_{0\uparrow}\hat{c}^\dagger_{0\uparrow}\hat{c}_{0\uparrow}. \tag{14.84}$$

这里Λ_k,V_k都模型的参数,其反映的是自由巡游电子$\hat{d}_{k\sigma}$的色散和与杂质电子$\hat{c}_0$的耦合.现在,为了证明单格点问题的哈密顿量就是上述形式,我们可以采用路径积分形式,即

$$S_A=\int d\tau\left(\sum_{k\sigma}(\bar{d}_{k\sigma}(\partial_\tau+\Lambda_k)d_{k\sigma}+V_k\bar{c}_{0\sigma}d_{k\sigma}+V_k\bar{d}_{k\sigma}c_{0\sigma})+\sum_\sigma\bar{c}_{0\sigma}(\partial_\tau-\mu)c_{0\sigma}+U\bar{c}_{0\uparrow}c_{0\uparrow}\bar{c}_{0\uparrow}c_{0\uparrow}\right). \tag{14.85}$$

然后对d电子部分做傅里叶变换可得$\sum_{\omega_n,k\sigma}((-i\omega_n+\Lambda_k)\bar{d}_{k\sigma}d_{k\sigma}+V_k(\bar{c}_{0\sigma}d_{k\sigma}+\bar{d}_{k\sigma}c_{0\sigma})$. 令$d_{k\sigma}\to\tilde{d}_{k\sigma}=d_{k\sigma}+(-i\omega_n+\Lambda_k)^{-1}V_kc_{0\sigma}$, 这样有

$$\sum_{\omega_n,k\sigma}((-i\omega_n+\Lambda_k)\tilde{\bar{d}}_{k\sigma}\tilde{d}_{k\sigma}-\sum_{\omega_n,k\sigma}\frac{V_k^2}{-i\omega_n+\Lambda_k}\bar{c}_{0\sigma}c_{0\sigma}. \tag{14.86}$$

这样积掉$\tilde{d}$可知

$$\begin{aligned}S_A&=\sum_{\sigma,\omega_n}\bar{c}_{0\sigma}(-i\omega_n-\sum_k\frac{V_k^2}{-i\omega_n+\Lambda_k}-\mu)c_{0\sigma}+U\int d\tau\bar{c}_{0\uparrow}c_{0\uparrow}\bar{c}_{0\uparrow}c_{0\uparrow}\\&=\int d\tau\int\tau'\sum_\sigma\bar{c}_{0\sigma}(\tau)(-\tilde{\mathcal{G}}_0^{-1}(\tau-\tau'))c_{0\sigma}(\tau')+U\int d\tau\bar{c}_{0\uparrow}c_{0\uparrow}\bar{c}_{0\uparrow}c_{0\uparrow}.\end{aligned}$$

我们发现只要把$\tilde{\mathcal{G}}_0$定义为$\mathcal{G}_0$就证明了单格点问题的哈密顿量就是Anderson杂质模型.当然,我们也可以由Green函数运动方程得到$U=0$时$\hat{c}_0$电子Green函数为

$$G_{00}(\omega)=\langle\langle\hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\rangle\rangle_\omega=\frac{1}{\omega+\mu-\sum_k\frac{V_k^2}{\omega-\Lambda_k}} \tag{14.87}$$

而$U>0$时的Green函数可以写成

$$G_{00}(\omega)=\frac{1}{\omega+\mu-\sum_k\frac{V_k^2}{\omega-\Lambda_k}-\Sigma(\omega)} \tag{14.88}$$

可以看到$\mathcal{G}_0^{-1}=\omega+\mu-\sum_k\frac{V_k^2}{\omega-\Lambda_k}$.

因此,DMFT理论的核心便是计算任意参数Λ_k,V_k下的虚拟Anderson杂质模型.在实际操作中,我们可以先猜测一个$\mathcal{G}_0$,这对应于一组确定的Λ_k,V_k,然后利用数值或解析的方法计算Anderson杂质模型的Green函数G_{00},[31]再根据公式14.83得到自能Σ.再把Σ代入公式14.82得到G,最后利用G和Σ以及公式14.83获得新的$\mathcal{G}_0$,重复此循环直到Green函数收敛就求解了DMFT方程.

[31]求解Anderson杂质模型的常用解析方法是二阶微扰论,非交叉近似(NCA),Green函数运动方程,隶玻色子平均场.数值方法主要是数值重整化群(NRG),连续时间蒙特卡洛和精确对角化.

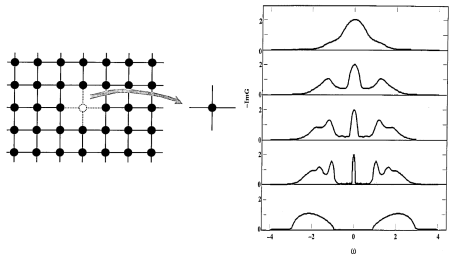


Figure 14.13: 左图表示动力学平均场理论把晶格问题转化为单格点问题.右图是动力学平均场关于单带Hubbard模型态密度计算的典型结果.随着U的逐渐增加,系统经历金属-绝缘体相变,并伴随着费米能附近态密度的抑制.

- 对于其他模型,其DMFT形式与Hubbard模型类似,都可以通过腔方法直接获得.当然,我们也可以唯象得获得所想要得DMFT形式,就是先计算出相互作用为零时得完整模型的Green函数,然后再假设自能只有频率依赖.同时,哈密顿量中只保留单格点部分,然后把这个单格点部分与Anderson杂质模型的自由巡游电子耦合,这样就得到扩展的Anderson杂质模型,通过求解这个模型获得Green函数并反过来得到自能,把这个自能当作完整模型Green函数的自能.最后假设杂质模型的Green函数与完整模型Green函数等价就得到所有需要的方程.

图14.13显示了DMFT关于单带Hubbard模型态密度($N(\omega) = -\frac{1}{\pi}\frac{1}{N_s}\sum_k \mathrm{Im}G(k,\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G_{00}(\omega)$) 计算的典型结果,即随着$U$ 的逐渐增加,系统经历金属$-$绝缘体相变,上下Hubbard能带出现并伴随着费米能附近准粒子态密度的抑制(准粒子峰变窄最后消失). [32]这种态密度的行为可以通过相应的Anderson杂质模型来理解.因为系统通过DMFT 映射为自洽环境(热库)下的Anderson杂质模型,当环境(热库)类似于自由费米气体时,Anderson磁性杂质自然在低温下被屏蔽,显示费米能附近的Kondo共振峰,这就是费米液体态时的中心准粒子峰,此时磁性杂质的自旋时完全屏蔽的,系统处于非简并的状态.当相互作用足够大,使得环境(热库)态密度在费米能附近为零时,Kondo共振不会发生,磁性杂质并未被屏蔽,因而费米能附近的态密度消失,而系统处于Mott绝缘态,每个格点的电子自旋都未被屏蔽,系统总体显示巨大的自旋简并.(低温下就有明显的$\ln 2$自旋熵)这种巨大简并可以通过超越DMFT的修正而导致的磁性有序态来消除.因此,在DMFT的图像中,Mott绝缘态是电荷自由度的绝缘态,而自旋自由度则完全自由,每个格点都有自由的局域磁矩.

[32] [Georges,Kotliar,Krauth,Rozenberg,Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions,Rev.Mod.Phys. **68**,13(1996)]这个综述可以看作是入门DMFT最合适的参考资料.

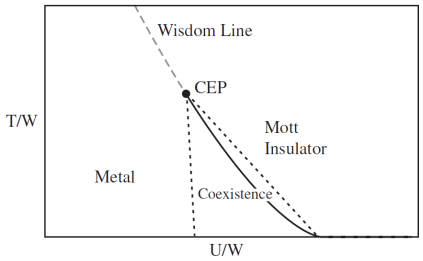


Figure 14.14: 半满Hubbard模型的动力学平均场相图.实线代表一级相变线,该线的终点CEP是临界终点.CEP以上的虚线即Widom线表示渡越线.点线代表金属态和绝缘态的稳定性边界.这个相图与V_2O_3在压力和掺杂下的相图定性上一致.摘自参考文献[3].

从态密度来看系统似乎显示连续的Mott相变,但事实上,更细致的研究表明该相变在低温下是一级相变,即如图14.14所示那样.图14.14给出了半满Hubbard模型的DMFT相图.实线代表一级相变线,该线的终点CEP是临界终点.CEP以上的虚线即Widom线表示渡越线.点线代表金属态和绝缘态的稳定性边界.因此,系统的临界行为主要是表现在临界终点CEP附近的有限区域.

从理论上来说,DMFT已被关联电子系统领域的研究者所接受,[33]至少其在无穷维(空间维度$d=\infty$)和大配位数条件下是精确的.目前,人们认为该类方法定性或者半定量地抓住了Mott相变的基本物理,在电子性质主要由频率而非动量决定的情况下是一个可靠的近似,对于一些实际材料也可以给出合理的数值估计,(图14.15[34])因而与密度泛函理论结合成为当前材料电子结构计算的最有力方法,例如美国Rutgers 大学Kotliar 组发展的大规模关联电子材料第一性原理计算程序包.

当然,DMFT既然对空间做了平均化处理,而我们知道自旋自由度的涨落在空间尺度上总是重要的,例如半满Hubard 模型在相互作用足够大时等效于反铁磁Heisenberg 模型,无论是磁有序态中的自旋波激发还是更为古怪的量子自旋液体以及其中的自旋子激发,DMFT 和它的多格点(团簇)版本都没有包含这些重要的物理.[35] 因此,DMFT 理论并不能用来研究Mott 相变相关的低能磁性质.事实上,当前并没有哪一种方法可以同时研究Mott 相变的高能电子结构和低能的磁性激发.因此,在实际研究中往往是通过DMFT 得到顺磁态的电子能带和谱信息,然后通过半唯象的方式构造低能自旋或者轨道自由度的有效模型,对这些模

[33]著名的老一辈理论家如Nozières是其支持者

[34]选自文献[Limelette et al.,Mott Transition and Transport Crossovers in the Organic Compound $\kappa-(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl$,Phys.Rev.Lett. **91**,016401(2003)]

[35]团簇版本可以参考综述论文[Maier,Jarrell,Pruschke,Hettler,Quantum cluster theories,Rev.Mod.Phys. **77**,1027(2005)]

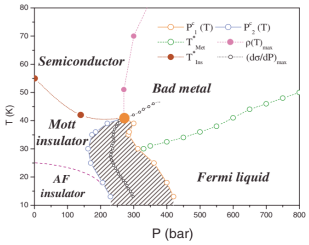


Figure 14.15: 有机Mott绝缘体材料层状电荷转移盐$\kappa-$(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Cl的压力-温度相图,注意相图与动力学平均场理论计算的定性一致性.

型采用进一步的解析或者数值方法进行研究.

- DMFT适合于研究能量较高的电子谱和能带结构,不适用于低能的磁性激发和其他集体激发.[36]

关于DMFT研究Mott相变的其他问题

一个有趣的DMFT工作研究了无穷维Bethe晶格上单带Hubbard模型的Mott相变.[37]他们的研究表明Mott相变可以看作是一类拓扑相变.通过把DMFT自能用辅助的等效SSH(Su-Schrieffer-Heeger)模型代替,人们发现Mott态对应SSH模型的拓扑态,也就是有robust 边界态的情况,而费米液体态则对应SSH的拓扑平凡态,相变则是SSH模型中畴壁的溶解.

对于Hubbard模型,人们发现其动力学平均场所得Mott态满足:[38]

$$I_2 = 2\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\int_{-\infty}^{0} d\omega \left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(k,\omega)\partial_\omega\Sigma(\omega)\right) = 2\int_{-\infty}^{0} d\omega \left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(\omega)\partial_\omega\Sigma(\omega)\right)$$
$$= \begin{cases} 1, & \text{non p-h symmetry;} \\ 0, & \text{p-h symmetry.} \end{cases} \tag{14.89}$$

这里考虑了自旋简并因子2,动力学平均场的自能仅是频率的函数以及$G(\omega)$是动量平均后的Green函数.其中$I_2 = 0$对于费米液体态和粒子-空穴对称的Mott态成立,而$I_2 = 1$对不具有粒子-空穴对称的Mott态成立.这说明I_2,也就是Luttinger积分可以看作是一种刻画非对称Mott态的拓扑的序参量.

[36]如果在Hubbard模型基础上考虑反铁磁Heisenberg交换并采用隶自旋表示,然后再用DMFT研究,那么会发现低温下体系会从费米液体金属发生一级相变而进入自旋液体态,高温下的性质与自旋液体无关而与通常Hubaard模型的DMFT符合,因此高温下在一级相变临界终点附近的临界性质是Mott物理自身的特性而与自旋液体无关.这与基于辅助粒子规范理论所预言的连续Mott相变和量子临界行为全然不同,但与目前所知的实验材料符合.[Lee,Florens,Dobrosavljevic,Fate of Spinons at the Mott Point,Phys.Rev.Lett. **117**,136601(2016)]

[37][Sen,Wong,Mitchell,The Mott transition as a topological phase transition,Phys.Rev.B **102**,081110(2020)]

[38][Logan,Galpin,Mott insulator and the doping-induced Mott transition within DMFT:exact results for the one-band Hubbard model,J.Phys.:Condens.Matter **28**,025601(2015)]

方法	Gutzwiller近似	DMFT	slave-rotor	Hubbard-I
谱结构	准粒子	准粒子+Hubbard能带	准粒子+Hubbard能带	Hubbard能带
相变	连续相变	一级相变	连续相变	???
精确性	???	无穷维极限	大N极限	原子极限
有限温度	???	$\surd$	???	$\surd$

Table 14.1: Mott相变研究中常用的几种理论方法.

辅助粒子理论*

另一方面,随着铜氧化物高温超导体的实验发现,人们认为其非寻常物理可由掺杂的Mott 绝缘体来理解.因此Mott绝缘体的研究成为凝聚态物理的热门.在这段时期,除了先前提到的动力学平均场理论(或者其团簇扩展),辅助粒子理论也是研究的重要理论方法. 人们根据问题的不同,发展了一大类辅助粒子理论(slave-particle),例如隶玻色子(slave-boson),隶费米子(slave-fermion),RK玻色子(RK-boson),隶转子(slave-rotor) 以及隶自旋(slave-spin)等.在这些方法中,通过人为地放大局域Hilbert空间,Hubbard 排斥项可以简单地对角化,而电子跃迁部分则变为辅助粒子之间的相互作用部分且为了消除非物理的自由度需要引入局域约束.这样得到的理论模型远比Hubbard模型还要复杂,所以通常的处理是用平均场近似处理辅助粒子的相互作用,得到等效的平均场哈密顿量,然后在此基础上考虑涨落效应.在平均场框架内,玻色型辅助粒子的凝聚态对应通常的金属态或者说费米液体态,而其非凝聚态则对应Mott绝缘态.凝聚恰好发生的位置就是Mott相变点.当考虑涨落修正时,模型本身出现层展的$Z_2, U(1), SU(2)$等紧致规范场,这使得我们实际处理的是极为复杂的晶格规范场理论(lattice gauge field theory).当且仅当规范场处于退禁闭(deconfined)态时,我们可以合理计算低阶微扰的修正,这时这些修正可以给出非费米液体的热力学和输运行为.但是注意到规范场禁闭问题的复杂性以及微扰计算的可靠性,很多研究者并不认为该类理论得到的结果可以直接用来解释高温超导,重费米子以及有机化合物中的非费米液体行为和超导配对机制.比较典型的看法是这种在非物理空间做的计算到底有多少结果是物理的呢?

即使我们可以认同辅助粒子理论的处理,但是其理论预言与实验观测,尤其是铜氧化物的光学和输运性质在能量尺度上明显不符合,例如实验上发现的线性电阻和$1/\omega$电导行为涉及的能量尺度从几十K一直到几千K,而基于$t-J$模型的隶玻色子理论虽然也可以得到线性电阻,但是其工作的能量尺度最多是J的量级,这很难与实验上跨越两到三个温度量级(即到达U的量级)的观测符合.此外,辅助粒子理论(主要指的是隶玻色子平均场理论)还面临如下一些困难:

- 不能合理考虑短程反铁磁关联,而这类关联对于处理Mott相变附近的非相干自旋动力学其实很重要;
- $T=0$时仅给出Gutzwiller近似的结果而忽略了非相干激发,这些非相干激发

即使在$T=0$时对Mott相变也相当重要;

- 虽然通过规范场的高斯涨落计入部分非相干激发的贡献,然而这也无法解释铜氧化物中十分小的霍尔系数;
- $T=0$Mott相变附近的发散压缩率也难以用隶粒子理论解释;
- 隶粒子理论不能解释数值计算中发现的巨大动力学临界指数$z=4$;
- 无法正确给出Mott绝缘体材料中普遍观察到的Mott相变是一级相变这个实验事实(辅助粒子往往给出连续相变).

因此,目前的看法是隶粒子理论更多的是提供物理上研究的动机并且给出一些平均场波函数,(规范场的涨落并不能带来正确的处理)这些平均场波函数可以作为变分蒙特卡洛的输入,也就是变分波函数.当然,为了更好地计入关联效应需要考虑Gutzwiller形式的投影,这些投影后的平均场波函数能够比较好得刻画$t-J$模型的基态.

转子与隶转子表示

让我们暂时搁置辅助粒子方法存在的问题,下面将以隶转子方法介绍其处理Anderson杂质模型的一般思路.隶转子方法最初由Florens和Georges提出用以近似计算Anderson 杂质模型并作为Hubbard模型动力学平均场的杂质求解器(impurity solver).[39]作为准备,先介绍量子转子的概念.

首先,回忆球坐标下三维自由粒子的定态Schödinger方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)=E\psi \tag{14.90}$$

现在,我们假设粒子在xy平面内半径为$r=1$的单位圆上运动,那么上式简化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi=E\psi \tag{14.91}$$

此时本征态是$\psi_n(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\varphi}=\langle\varphi|n\rangle$而对应的本征能量是$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2m}(n=0,\pm1,\pm2...)$.注意到$z$方向的角动量算符是$L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$,$L_z\psi_n=n\hbar\psi_n$,因此我们可以把本征方程写成$\frac{L_z^2}{2m}\psi_n=E_n\psi_n$或者是$\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle(\hat{H}=\frac{\hat{L}_z^2}{2m})$.显然,我们看到圆环上运动的粒子相当于是以角动量$L_z$转动的自由粒子,因此我们称这类模型为转子模型.同时,可以验证$[\hat{\varphi},\hat{L}_z]=i\hbar$:

[39] [Florens,Georges,Quantum impurity solvers using a slave rotor representation,Phys.Rev.B **66**,165111(2002);Florens,Georges,Slave-rotor mean-field theories of strongly correlated systems and the Mott transition in finite dimensions,Phys.Rev.B **70**,035114(2004)]

$$\begin{aligned}[\hat{\varphi},\hat{L}_z]|\Psi\rangle &= \hat{\varphi}\hat{L}_z\int d\varphi|\varphi\rangle\langle\varphi|\Psi\rangle-\hat{L}_z\hat{\varphi}\int d\varphi|\varphi\rangle\langle\varphi|\Psi\rangle\\ &= \hat{\varphi}\int d\varphi|\varphi\rangle(-i\hbar\partial_\varphi)\Psi(\varphi)-(-i\hbar\partial_\varphi)\int d\varphi|\varphi\rangle\varphi\Psi(\varphi)\\ &= \int d\varphi|\varphi\rangle\varphi(-i\hbar\partial_\varphi)\Psi(\varphi)-\int d\varphi|\varphi\rangle(-i\hbar\partial_\varphi)(\varphi\Psi(\varphi))\\ &= i\hbar\int d\varphi|\varphi\rangle\Psi(\varphi)=i\hbar|\Psi\rangle. \end{aligned}\tag{14.92}$$

因此角度变量$\hat{\varphi}$与角动量$\hat{L}_z$满足正则对易关系.进一步,利用$[\hat{\varphi},\hat{L}_z]=i\hbar$可以证明,

$$\boxed{[\hat{L}_z,e^{i\hat{\varphi}}]=\hbar e^{i\hat{\varphi}}}.\tag{14.93}$$

这样我们发现

$$\hat{L}_z e^{i\hat{\varphi}}|n\rangle=(e^{i\hat{\varphi}}\hat{L}_z+\hbar e^{i\hat{\varphi}})|n\rangle=(n+1)\hbar e^{i\hat{\varphi}}|n\rangle\tag{14.94}$$

这说明$e^{i\hat{\varphi}}|n\rangle=|n+1\rangle$,这样$e^{i\hat{\varphi}}$相当于角动量的升算符,它增加$\hbar$的角动量,类似的$e^{-i\hat{\varphi}}$是降算符,减少$\hbar$的角动量.

如果令$\hbar=1$并把$|n\rangle$解释为有n个粒子的状态,那么$e^{\pm i\hat{\varphi}}$代表增加或减少一个粒子.考虑DMFT所得到的等效Anderson杂质模型$\hat{H}=\sum_{k\sigma}(\Lambda_k\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{0\sigma})-\mu\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{0\sigma}+U\hat{c}^\dagger_{0\uparrow}\hat{c}_{0\uparrow}\hat{c}^\dagger_{0\uparrow}\hat{c}_{0\uparrow}$, 为了方便处理,我们把它改写为更对称的形式,即有

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}(\Lambda_k\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{0\sigma})+\left(\frac{U}{2}-\mu\right)\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{0\sigma}+\frac{U}{2}\left(\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{0\sigma}-1\right)^2.\tag{14.95}$$

注意到对于$\hat{c}_0$电子而言,其局域Hilbert空间是四维的,也就是四个独立的状态,即$|0\rangle,|\uparrow\rangle,|\uparrow\rangle,|\uparrow\downarrow\rangle$,分别表示没有电子,一个电子自旋向上,一个电子自旋向下以及有一对电子的情况.这样,我们可以考虑引入所谓的隶转子表示,即

$$\boxed{\hat{c}_{0\sigma}=\hat{f}_\sigma e^{-i\hat{\varphi}},\quad \hat{L}_z=\sum_\sigma\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{f}_\sigma-1=\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{0\sigma}-1}\tag{14.96}$$

这里$\hat{f}_\sigma$是标准的费米子算符,文献中称为自旋子(spinon),代表磁性体系中携带1/2自旋自由度的激发.它可以看成携带$S=1$自旋的磁振子的分数化激发.而$\hat{\varphi},\hat{L}_z$ 是转子模型中的角度和角动量算符.上式左边说明湮灭一个自旋为σ的$\hat{c}_0$ 电子等价于湮灭一个自旋为σ 的$\hat{f}$费米子且粒子总数减少一个.右边说明$\hat{f}$的数目与$\hat{c}_0$ 电子数目一致且与角动量表示的粒子数相差一个.换句话说,$\hat{c}_0$电子的

四个态与$\hat{f}$自旋子和转子态有如下对应关系:

$$
\begin{aligned}
&|0\rangle \Leftrightarrow |0\rangle_f |n=-1\rangle \\
&|\uparrow\rangle \Leftrightarrow |\uparrow\rangle_f |n=0\rangle \\
&|\downarrow\rangle \Leftrightarrow |\downarrow\rangle_f |n=0\rangle \\
&|\uparrow\downarrow\rangle \Leftrightarrow |\uparrow\downarrow\rangle_f |n=1\rangle .
\end{aligned}
$$

当然,如果我们不考虑$\hat{L}_z = \sum_\sigma \hat{f}_\sigma^\dagger \hat{f}_\sigma - 1$项(也叫做约束项),那么$f$电子与转子的复合系统的状态实际上有无穷多,因为此时转子态$|n\rangle$里面n的取值有无穷多.因此只有严格考虑约束项我们才能保证f费米子与转子的复合系统与原始$\hat{c}_0$电子的Hilbert空间一一对应,否则就会引入无穷多的非物理态.

这样,采用隶转子表示后Anderson杂质模型可写成,

$$
\hat{H} = \sum_{k\sigma} (\Lambda_k \hat{d}_{k\sigma}^\dagger \hat{d}_{k\sigma} + V_k \hat{f}_\sigma^\dagger \hat{d}_{k\sigma} e^{i\hat{\varphi}} + V_k \hat{d}_{k\sigma}^\dagger \hat{f}_\sigma e^{-i\hat{\varphi}}) + \varepsilon_0 \sum_\sigma \hat{f}_\sigma^\dagger \hat{f}_\sigma + \frac{U}{2} \hat{L}_z^2 . \quad (14.97)
$$

其中$\varepsilon_0 = \frac{U}{2} - \mu$.为了求解这个模型,我们下面将分别采用基于路径积分的非交叉近似和基于哈密顿量的平均场近似.前者适用于中高温区而后者适用于基态和低温区.

sigma模型表示与非交叉近似

为了得到体系的路径积分表示,我们首先注意到单粒子问题$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$的配分函数表示为

$$
\mathcal{Z} = \int DxDp e^{-\int d\tau (-ip\partial_\tau x + \frac{p^2}{2m} + V(x))} = \int Dx e^{-\int d\tau \frac{m}{2} (\partial_\tau x)^2 + V(x)}, \quad (14.98)
$$

而$(\hat{\varphi}, \hat{L}_z)$与$(\hat{x}, \hat{p})$有相同的对易关系,因此若选择$\{|\varphi\rangle\}, \{|n\rangle\}$作为完备系插入配分函数,那么就可以直接用$(\hat{x}, \hat{p})$的结果,这样$\hat{H} = \frac{U}{2}\hat{L}_z^2 + V(\hat{\varphi})$对应的作用量就是

$$
S = \int d\tau \left(-in\partial_\tau \varphi + \frac{U}{2} n^2 + V(\varphi) \right). \quad (14.99)
$$

再利用费米子的相干态$|d, f\rangle = e^{-\sum_{k\sigma} d_{k\sigma} \hat{d}_{k\sigma}^\dagger} e^{-\sum_\sigma d_\sigma \hat{d}_\sigma^\dagger} |0, 0\rangle$ 可以得到Anderson杂质模型的作用量,

$$
S = \int d\tau \left(\sum_{k\sigma} (\bar{d}_{k\sigma} (\partial_\tau + \Lambda_k) d_{k\sigma} + V_k \bar{f}_\sigma d_{k\sigma} e^{i\varphi} + V_k \bar{d}_{k\sigma} f_\sigma e^{-i\varphi}) + \sum_\sigma \bar{f}_\sigma (\partial_\tau + \varepsilon_0) f_\sigma - in\partial_\tau \varphi + \frac{U}{2} n^2 \right) \quad (14.100)
$$

但是,我们需要让上述作用量满足约束条件,这可以通过在配分函数的测度中加入$\delta(\hat{L}_z - \sum_\sigma \hat{f}_\sigma^\dagger \hat{f}_\sigma + 1)$实现,在路径积分中替换为(作用到相干态$\{|d, f\rangle\}$和$\{|n\rangle\}$)

$$
\delta \left(n - \sum_\sigma \bar{f}_\sigma f_\sigma + 1 \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{h}}{2\pi} e^{-i\tilde{h}(n - \sum_\sigma \bar{f}_\sigma f_\sigma + 1)}. \quad (14.101)
$$

当然,我们实际上要求约束条件在任意时刻τ都成立,因此路径积分测度中实际加入的是

$$\prod_{\tau}\delta\left(n-\sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}f_{\sigma}+1\right)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\tilde{h}}{2\pi}e^{-\int d\tau i\tilde{h}(n-\sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}f_{\sigma}+1)}. \qquad (14.102)$$

这说明通过引入因子$\tilde{h}$可以把约束项改写为作用量中的一部分,这样考虑约束项后的作用量是

$$\begin{aligned} S &= \int d\tau\sum_{k\sigma}(\bar{d}_{k\sigma}(\partial_{\tau}+\Lambda_k)d_{k\sigma}+V_k\bar{f}_{\sigma}d_{k\sigma}e^{i\varphi}+V_k\bar{d}_{k\sigma}f_{\sigma}e^{-i\varphi}) \\ &+ \sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}(\partial_{\tau}+\varepsilon_0-i\tilde{h})f_{\sigma}+i(\tilde{h}-\partial_{\tau}\varphi)n+\frac{U}{2}n^2+i\tilde{h} \qquad (14.103)\end{aligned}$$

这样积掉n有

$$\begin{aligned} S &= \int d\tau\sum_{k\sigma}(\bar{d}_{k\sigma}(\partial_{\tau}+\Lambda_k)d_{k\sigma}+V_k\bar{f}_{\sigma}d_{k\sigma}e^{i\varphi}+V_k\bar{d}_{k\sigma}f_{\sigma}e^{-i\varphi}) \\ &+ \sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}(\partial_{\tau}+\varepsilon_0-i\tilde{h})f_{\sigma}+\frac{1}{2U}(\partial_{\tau}\varphi-\tilde{h})^2+i\tilde{h} \qquad (14.104)\end{aligned}$$

做替换$i\tilde{h}=h$并积掉d费米子可得

$$\begin{aligned} S &= \int d\tau\sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}(\partial_{\tau}+\varepsilon_0-h)f_{\sigma}+\frac{1}{2U}(\partial_{\tau}\varphi+ih)^2+h \\ &+ \int d\tau\int d\tau'\sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}(\tau)e^{i\varphi(\tau)}\Delta(\tau-\tau')f_{\sigma}(\tau')e^{-i\varphi(\tau')} \qquad (14.105)\end{aligned}$$

这里$\Delta(\tau)$的傅里叶变换是$\Delta(\omega_n)=\sum_k\frac{V_k^2}{i\omega_n-\Lambda_k}$.

为了进一步处理Anderson杂质模型的作用量,让我们引入$O(2)$型的sigma场$X=e^{i\varphi}$,注意到$|X|^2=1$,因此我们需要额外计入这个约束条件,这等价于引入拉格朗日乘子场λ,

$$\begin{aligned} S &= \int d\tau\sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}(\partial_{\tau}+\varepsilon_0-h)f_{\sigma}-\frac{h^2}{2U}+h+\frac{|\partial_{\tau}X|^2}{2U}+\frac{h(X^*\partial_{\tau}X-X\partial_{\tau}X^*)}{2U} \\ &+ \lambda(|X|^2-1)+\int d\tau\int d\tau'\Delta(\tau-\tau')\sum_{\sigma}\bar{f}_{\sigma}(\tau)f_{\sigma}(\tau')X^*(\tau')X(\tau). \qquad (14.106)\end{aligned}$$

一般而言,上述模型在解析上是难以求解,因此我们必须考虑近似处理.让我们假设λ,h都是时间无关的常数,这样如果假设包含$\Delta(\tau-\tau')$的相互作用项可以用微扰论处理,那么我们可以用Feynman图形展开计算X和f_{σ}的Green函数$G_f(\tau)=-\langle f_{\sigma}(\tau)\bar{f}_{\sigma}(0)\rangle$,$G_X(\tau)=\langle X(\tau)X^*(0)\rangle$.具体而言,我们先考虑无相互作用时的Green函数$G_f^{(0)},G_X^{(0)}$,这可以对作用量的无相互作用部分做傅里叶变换实现,即

$$S_0=\sum_{\omega_n,\sigma}(-i\Omega_n+\varepsilon_0-h)\bar{f}_{\sigma}(\omega_n)f_{\sigma}(\omega_n)+\sum_{\Omega_n}\left(\frac{\Omega_n^2}{2U}|X(\Omega_n)|^2-\frac{h}{2U}2i\Omega_n|X(\Omega_n)|^2+\lambda|X(\Omega_n)|^2\right).$$

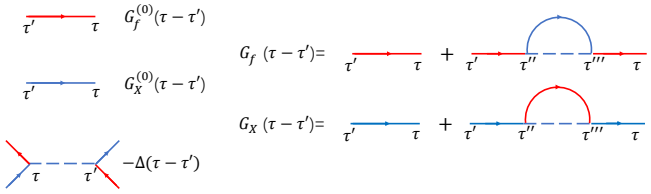


Figure 14.16: 隶自旋表示下*sigma*模型的Feynman图形规则和一阶近似下的Green函数.

因此有$G_f^{(0)}(\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_0+h}$,$G_X^{(0)}(\Omega_n)=\frac{1}{\Omega_n^2/U-2ih\Omega_n/U+\lambda}$. 让我们定义Feynman规则,如图14.16所示,左边的红线和蓝线分别代表$G_f^{(0)},G_X^{(0)}$,剩下的四条线组成的图形表示相互作用$-\Delta(\tau-\tau')$.

利用Feynman规则我们可以计算Green函数的任意阶修正,例如图14.16右边给出了Green函数的零级和一级修正.由Dyson方程可知右边图形的第二部分代表所谓的自能,例如费米子自能可以写成$\Sigma_f(\tau)=\Delta(\tau)G_X^{(0)}(\tau)$(这里多了一个负号是$X$的Green函数定义与费米子Green函数差了负号)而X的自能是$\Sigma_X(\tau)=-2\Delta(-\tau)G_f^{(0)}(\tau)$.(因子2来自对自旋的求和)[40]如果按照字面意思代入无相互作用Green 函数$G_f^{(0)},G_X^{(0)}$来计算自能,那么所得结果并不好,因此通常我们会用完整的Green函数G_f,G_X来代替自能Σ_f,Σ_X中的无相互作用Green函数,这类似于Anderson杂质模型中常用的非交叉近似(non-crossing approximation), 简称为NCA.

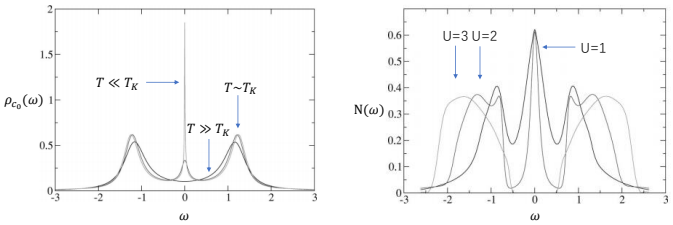
- NCA一般指的是自能的Feynman图形不包括任意的顶角修正(没有相互交叉的相互作用线)而自能图中单粒子Green函数是完全修正的Green函数,常用于Anderson杂质模型,费米子量子相变(例如自旋−费米子模型)和超导配对对称性的研究(Migdal−Eliashberg形式).

这样NCA近似下的Green函数是.[41]

$$G_f(\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n+h-\varepsilon_0-\Sigma_f(\omega_n)}$$
$$G_X(\Omega_n)=\frac{1}{\Omega_n^2/U+\lambda-2hi\Omega_n/U-\Sigma_X(\Omega_n)} \tag{14.107}$$

[40]也可以不用Feynman图形而直接展开路径积分计算Green函数,所得结果是一致的

[41]具体推导以及相关方程的解析延拓和数值求解细节可以参考原始文献[Florens,Georges,Quantum impurity solvers using a slave rotor representation,Phys.Rev.B **66**,165111(2002)]



(a) Anderson杂质 (b) Hubbard模型

Figure 14.17: (a)Anderson杂质模型隶转子积分方程的物理电子态密度;(b)基于Anderson杂质模型隶转子积分方程的DMFT计算的电子态密度.

注意ω_n, Ω_n分别是费米子和玻色子的频率.而自能在虚时下有简单的表示,

$$\begin{aligned}\Sigma_\tau(\tau) &= -2\Delta(-\tau)G_f(\tau)\\ \Sigma_f(\tau) &= \Delta(\tau)G_X(\tau).\end{aligned} \tag{14.108}$$

此外拉格朗日乘子h, λ对应的方程是

$$\langle|X|^2\rangle = 1 \Rightarrow G_X(\tau=0) = 1, \quad G_f(\tau=0^-) = \frac{1}{2} - \frac{h}{U} + \frac{\partial_\tau G_X(\tau=0^-) + \partial_\tau G_X(\tau=0^+)}{2U}. \tag{14.109}$$

上述六个方程组成了一个积分方程组,需要数值求解.当然,由于f_σ和X都是辅助粒子,物理上直接观测的是物理电子$c_{0\sigma}$的性质,注意到NCA近似下物理电子的Green函数具有简单的结构,即$G_c(\tau) = G_f(\tau)G_X(-\tau)$.

- $\varepsilon_0 = 0$同时Λ_k关于零能对称时(半满对称极限),上述积分方程的解在$V_k = 0$的原子极限下与直接计算$\hat{H}_{atom} = \varepsilon_0 \sum_\sigma \hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{0\sigma} + \frac{U}{2}\left(\sum_\sigma \hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{0\sigma} - 1\right)^2$一致但偏离半满对称极限积分方程的解就偏离$\hat{H}_{atom}$的结果,因此上述sigma模型理论的单圈近似只适用于接近对称半满的情况;

- 与通常隶玻色子的NCA不同,上述隶转子NCA理论所得的Green函数自能满足幺正性,也就是推迟自能的虚部小于等于零同时也可正确得到$U = 0$极限的精确结果.

通过求解NCA方程,物理电子的态密度$\rho_{c_0}(\omega)$会显示上下Hubbrad能带(中心是$\omega=-\mu,-\mu+U$)和Kondo共振峰($\omega=0$),[42]升温后Kondo峰会逐渐消失.(图14.17(a)[43])这与通常Anderson 杂质研究结果符合,不过低频行为并非费米液体而是非费米液体(在NCA的Green函数中只保留自能,假设自能满足幂律形式$\Sigma_f\sim\omega_n^{\alpha_f}$,那么求解方程可知$\rho_f(\omega)\sim|\omega|^{-\alpha_f},\rho_X(\omega)\sim\mathrm{sign}(\omega)|\omega|^{-\alpha_X},\alpha_f=1-\alpha_X=1/3$).如果我们利用这个理论求解DMFT理论中的等效Anderson杂质模型,也就是作为DMFT计算的杂质问题求解器,那么半满Hubbard模型的Mott相变前后的电子态密度具有期待的行为.(图14.17(b))

隶转子平均场理论:数值解

虽然我们看到隶转子表示的NCA近似可以得到Anderson杂质模型在中高温区的正确行为,但是低温下的费米液体行为并没有得到正确处理.因此,在这一部分将采用平均场方法来获得Anderson杂质模型在低温/零温下的费米液体行为.注意到隶自旋表示的Anderson杂质模型难处理的部分是杂化项$\hat{H}_V=\sum_{k\sigma}V_k(\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}e^{i\hat{\varphi}}+\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma e^{-i\hat{\varphi}})$, 我们对这一部分做平均场近似,也就是

$$\begin{aligned}\hat{H}_V &\simeq \sum_{k\sigma}V_k(\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle e^{i\hat{\varphi}}+\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\langle e^{i\hat{\varphi}}\rangle-\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle\langle e^{i\hat{\varphi}}\rangle\\ &+ \langle\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\rangle e^{-i\hat{\varphi}}+\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\langle e^{-i\hat{\varphi}}\rangle-\langle\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\rangle\langle e^{-i\hat{\varphi}}\rangle),\end{aligned}\tag{14.110}$$

这样Anderson杂质模型在隶转子平均场下可以写成

$$\begin{aligned}&\hat{H}=\hat{H}_f+\hat{H}_\varphi+E_0\\ &\hat{H}_f=\sum_{k\sigma}(\Lambda_k\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\langle e^{i\hat{\varphi}}\rangle+V_k\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\langle e^{-i\hat{\varphi}}\rangle)+(\varepsilon_0-h)\sum_\sigma\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{f}_\sigma\\ &\hat{H}_\varphi=\sum_{k\sigma}V_k\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle e^{i\hat{\varphi}}+\sum_{k\sigma}V_k\langle\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\rangle e^{-i\hat{\varphi}}+\frac{U}{2}\hat{L}_z^2+h\hat{L}_z\\ &E_0=h-\sum_{k\sigma}V_k\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle\langle e^{i\hat{\varphi}}\rangle-\sum_{k\sigma}V_k\langle\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\rangle\langle e^{-i\hat{\varphi}}\rangle.\end{aligned}\tag{14.111}$$

这里已经用拉格朗日乘子项$h(\hat{L}_z-\sum_\sigma\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{f}_\sigma+1)$计入了约束条件.

对于实数取值的V_k, $\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle=\langle\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\rangle$. 这样我们可以引入参数

$$K=\sum_{k\sigma}V_k(\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle+\langle\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma\rangle)\tag{14.112}$$

由此隶转子部分的哈密顿量可改写为

$$\boxed{\hat{H}_\varphi=\frac{U}{2}\hat{L}_z^2+h\hat{L}_z+K\cos\hat{\varphi}}\tag{14.113}$$

[42]上下Hubbrad能带主要源自G_X中的高能贡献,特别是在半满对称情况下$h=0$,若$\Omega_n\sim U\gg\Sigma_X$,那么我们可以忽略自能的影响,则有$G_X(\Omega_n)\simeq\frac{1}{\Omega_n^2/U+\lambda}$,其极点位置是$i\Omega_n=\pm\sqrt{U\lambda}$.另一方面,$G_X(\tau=0)=1$给出$T\sum_n G_X(\Omega_n)=1$,代入$G_X(\Omega_n)$的形式并取零温极限可知$\lambda=U/4$,这样极点位置就是$\pm U/2$,这就是半满对称时($\mu=U/2$)Hubbard 能带中心的位置.

[43]选自文献中的图1和图6[Florens,Georges,Quantum impurity solvers using a slave rotor representation,Phys.Rev.B **66**,165111(2002)]

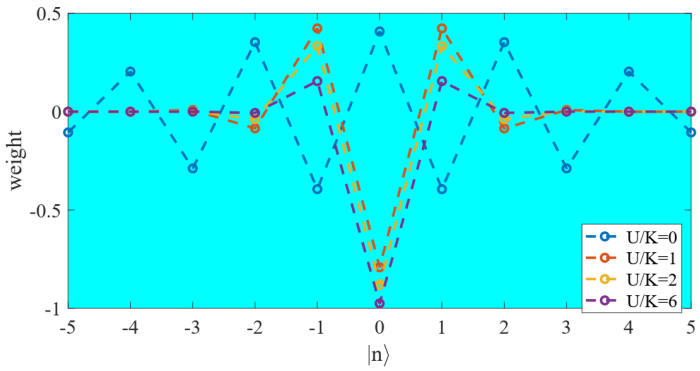


Figure 14.18: 隶转子哈密顿量$\hat{H}_\varphi = \frac{U}{2}\hat{L}_z^2 + h\hat{L}_z + K\cos\hat{\varphi}$在$h=0$时,基态在基矢$\{|n\rangle\}$上的权重.

定义有效杂化强度

$$V_k^{eff} = V_k\langle e^{i\hat{\varphi}}\rangle = V_k\langle\cos\hat{\varphi}\rangle \tag{14.114}$$

那么费米子部分可以写成

$$\hat{H}_f = \sum_{k\sigma}(\Lambda_k\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{d}_{k\sigma} + V_k^{eff}(\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma} + \hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_\sigma)). \tag{14.115}$$

让我们先考虑转子部分,其哈密顿含量可以写成

$$\hat{H}_\varphi = \sum_n (Un^2/2 + hn)|n\rangle\langle n| + \frac{K}{2}(|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|).$$

如果设$\hat{H}_\varphi$的本征态$|\Phi\rangle$可以用$\hat{L}_z$的本征态$\{|n\rangle\}$展开,即$|\Phi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$,那么有

$$\hat{H}_\varphi|\Phi\rangle = \sum_n (Un^2/2 + hn)c_n|n\rangle + \sum_n c_n\frac{K}{2}(|n+1\rangle + |n-1\rangle) = E\sum_n c_n|n\rangle$$

整理可得

$$(Un^2/2 + hn)c_n + \frac{K}{2}(c_{n+1} + c_{n-1}) = Ec_n. \tag{14.116}$$

可以看到,当$K=0$时,单个转子的本征能量为$E_n = Un^2/2+hn$,本征态为$|n\rangle$.当$K\neq 0$时,cos项混合了不同的角动量态.注意到n取值有无穷多,因此上述方程必须截断才能求解.[44]

通过数值对角化计算可以看到,(图14.18)对于$h=0$,只要$U \geqslant K$,那么本征态主要由$|n=0\rangle, |n=-1\rangle, |n=1\rangle$态贡献,对隶转子而言非物理的$|n=2\rangle, |n=-2\rangle$态也会有少量的权重($<0.09$).进一步,$U/K=2$时$|n=2\rangle, |n=-2\rangle$态的贡献

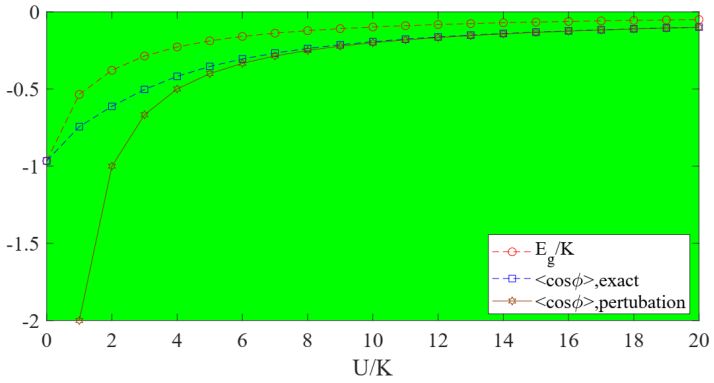


Figure 14.19: 隶转子哈密顿量$\hat{H}_\varphi$在$h=0$时,基态能量E_g,$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle$的基态平均值.可以看到微扰论计算的结果在$U/K\geqslant 8$时与精确对角化计算足够符合.

只有0.03,这说明我们通常只需要关心少数几个低能转子态就足以得到可信赖的结果.

图14.19给出了基态能量E_g和$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle$的基态平均值,可以看到两者在$U/K$很大时都会趋于饱和.

接下来,让我们讨论哈密顿量$\hat{H}_f$相关的部分.利用推迟Green函数运动方程方法,容易求得

$$\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{V_k^{eff}}{\omega-\Lambda_k}\frac{1}{\omega-\sum_k\frac{(V_k^{eff})^2}{\omega-\Lambda_k}} \tag{14.117}$$

通常我们假设$V_k=V$而传导电子$\hat{d}_k$的态密度是$N(\omega)=\frac{1}{2D}\theta(D-|\omega|)\equiv\rho_0\theta(D-|\omega|)$,这样若定义$\tilde{\Delta}=\Delta\langle\cos\hat{\varphi}\rangle^2,\Delta=\pi V^2\rho_0$,那么$\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{V^{eff}}{\omega-\Lambda_k}\frac{1}{\omega+i\tilde{\Delta}}$. 这样

$$-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\sum_{k\sigma}\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega=-\frac{2}{\pi}\mathrm{Im}\left(-i\pi V^{eff}\rho_0\frac{1}{\omega+i\tilde{\Delta}}\right)=\frac{2V^{eff}\rho_0\omega}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2} \tag{14.118}$$

因此,

$$\sum_{k\sigma}\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_F(\omega)\left(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\sum_{k\sigma}\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega\right)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega f_F(\omega)\frac{2V^{eff}\rho_0\omega}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2} \tag{14.119}$$

在零温极限下,我们有

$$\sum_{k\sigma}\langle\hat{f}_\sigma^\dagger\hat{d}_{k\sigma}\rangle=2V^{eff}\rho_0\int_{-D}^{0}d\omega\frac{\omega}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2}=V^{eff}\rho_0\ln\frac{\tilde{\Delta}^2}{D^2+\tilde{\Delta}^2}. \tag{14.120}$$

[44]注意到投影算符表示下的$\hat{H}_\varphi$可以看作是一个无限长的一维链,格点间只有最近邻跃迁$K/2$而每个格点的能量是$Un^2/2+hn$可以理解为以$n=0$为中心的简谐势和x方向均匀电场.

把这个结果代入K的表达式就得到,

$$\boxed{K = 2VV^{eff}\rho_0 \ln\frac{\tilde{\Delta}^2}{D^2+\tilde{\Delta}^2} = \frac{2\Delta}{\pi}\langle\cos\hat{\varphi}\rangle \ln\frac{\tilde{\Delta}^2}{D^2+\tilde{\Delta}^2}} \tag{14.121}$$

这样,我们就得到一些列自洽方程(公式14.113和14.121).在给定模型参数D,V,U时,其求解步骤如下:

- 首先猜测一个K的取值,然后代入$\hat{H}_\varphi$(公式14.113)并写出其哈密顿量矩阵;
- 利用数值对角化算出$\hat{H}_\varphi$的基态并由此算出$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle$的基态平均值;
- 把$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle$代入公式14.121)以得到新的$K$我.我们发现一个完整的循环,对这个循环做一些迭代计算便可得最终的结果.

对于单杂质Anderson模型,其感兴趣的物理量是物理电子的Green函数或者谱函数.物理电子的Green函数可以写成,

$$\begin{aligned} G_{c_0}(\tau) &= -\langle T_\tau \hat{c}_{0\sigma}(\tau)\hat{c}^\dagger_{0\sigma}\rangle = -\langle T_\tau \hat{f}_\sigma(\tau)\hat{f}^\dagger_\sigma e^{-i\hat{\varphi}(\tau)}e^{i\hat{\varphi}}\rangle = -\langle T_\tau \hat{f}_\sigma(\tau)\hat{f}^\dagger_\sigma\rangle\langle T_\tau e^{-i\hat{\varphi}(\tau)}e^{i\hat{\varphi}}\rangle \\ &= G_f(\tau)G_\varphi(\tau). \end{aligned} \tag{14.122}$$

上式右边第三个等号仅在平均场近似下成立.注意到$\langle e^{i\hat{\varphi}}\rangle = \langle e^{-i\hat{\varphi}}\rangle = \langle\cos\hat{\varphi}\rangle$, 因此我们期待$\langle T_\tau e^{-i\hat{\varphi}(\tau)}e^{i\hat{\varphi}}\rangle \simeq \langle\cos\hat{\varphi}\rangle^2 + f(\tau)$. 对上式左右两边分别做傅里叶变换可得

$$\begin{aligned} T\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}G_{c_0}(\omega_n) &= T\sum_{\omega'_n} e^{-i\omega'_n\tau}G_f(\omega'_n)T\sum_{\Omega_n} e^{-i\Omega_n\tau}G_\varphi(\Omega_n) \\ &= T\sum_{\omega'_n}T\sum_{\Omega_n} e^{-i(\omega'_n+\Omega_n)\tau}G_f(\omega'_n)G_\varphi(\Omega_n) \end{aligned} \tag{14.123}$$

为了保证两边始终相等,我们得到物理电子的虚频Green函数,

$$G_{c_0}(\omega_n) = T\sum_{\Omega_n} G_f(\omega_n-\Omega_n)G_\varphi(\Omega_n). \tag{14.124}$$

这个结果实际上是一类卷积的形式.进一步,引入费米子和转子的谱函数$A_f(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G_f(i\omega_n\to\omega+i0^+), A_\varphi(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G_\varphi(i\omega_n\to\omega+i0^+)$, 我们发现

$$\begin{aligned} G_{c_0}(\omega_n) &= T\sum_{\Omega_n}\int d\omega_1 \frac{A_f(\omega_1)}{i\omega_n - i\Omega_n - \omega_1}\int d\omega_2 \frac{A_\varphi(\omega_2)}{i\Omega_n-\omega_2} \\ &= -\int d\omega_1\int d\omega_2 A_f(\omega_1)A_\varphi(\omega_2)\frac{f_B(\omega_2)+f_F(-\omega_1)}{i\omega_n-\omega_1-\omega_2} \end{aligned} \tag{14.125}$$

做解析延拓$i\omega_n\to\omega+i0^+$就得到物理电子的谱函数

$$\begin{aligned} A_{c_0}(\omega) &= -\int d\omega_1\int d\omega_2 A_f(\omega_1)A_\varphi(\omega_2)(f_B(\omega_2)+f_F(-\omega_1))\delta(\omega-\omega_1-\omega_2) \\ &= -\int d\omega_1 A_f(\omega_1)A_\varphi(\omega-\omega_1)(f_B(\omega-\omega_1)+f_F(-\omega_1)) \end{aligned} \tag{14.126}$$

在零温极限下,玻色分布$f_B(x)\to -\theta(-x)$而费米分布$f_F(x)\to\theta(-x)$,上式化为

$$\begin{aligned}A_{c_0}(\omega) &= -\int d\omega_1\int d\omega_2 A_f(\omega_1)A_\varphi(\omega_2)(f_B(\omega_2)+f_F(-\omega_1))\delta(\omega-\omega_1-\omega_2)\\ &= -\int d\omega_1 A_f(\omega_1)A_\varphi(\omega-\omega_1)(\theta(\omega_1)-\theta(-\omega+\omega_1))\\ &= -\theta(\omega)\int_0^\omega d\omega_1 A_f(\omega_1)A_\varphi(\omega-\omega_1)+\theta(-\omega)\int_\omega^0 d\omega_1 A_f(\omega_1)A_\varphi(\omega-\omega_1)\end{aligned}$$

对于费米子部分,其Green函数很容易得到,

$$G_f(\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n+i\tilde{\Delta}}. \tag{14.127}$$

这样对应的谱函数是

$$A_f(\omega)=\frac{\tilde{\Delta}/\pi}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2}. \tag{14.128}$$

对于转子部分,其谱函数只能数值计算,我们可以用本征态$|\psi_n\rangle$和本征值E_n来展开Green函数,

$$\begin{aligned}G_\varphi(\tau) &= \theta(\tau)\langle e^{-i\hat{\varphi}(\tau)}e^{i\hat{\varphi}}\rangle+\theta(-\tau)\langle e^{i\hat{\varphi}}e^{-i\hat{\varphi}(\tau)}\rangle\\ &= \sum_n\theta(\tau)\langle\psi_g|e^{-i\hat{\varphi}(\tau)}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle+\sum_n\theta(-\tau)\langle\psi_g|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|e^{-i\hat{\varphi}(\tau)}|\psi_g\rangle\\ &= \sum_n\theta(\tau)e^{\tau(E_g-E_n)}|\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2+\sum_n\theta(-\tau)e^{-\tau(E_g-E_n)}|\langle\psi_n|e^{-i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\end{aligned}$$

接下来,做傅里叶变换可得

$$\begin{aligned}G_\varphi(\Omega_n) &= \sum_n|\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\int_{-\beta/2}^{\beta/2}d\tau\theta(\tau)e^{\tau(i\Omega_n+E_g-E_n)}\\ &+ \sum_n|\langle\psi_n|e^{-i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\int_{-\beta/2}^{\beta/2}d\tau\theta(-\tau)e^{\tau(i\Omega_n-E_g+E_n)}\\ &= \sum_n|\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\frac{e^{\beta(E_g-E_n)/2}-1}{i\Omega_n+E_g-E_n}+\sum_n|\langle\psi_n|e^{-i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\frac{1-e^{\beta(E_g-E_n)/2}}{i\Omega_n-E_g+E_n}\\ &= \sum_n|\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\frac{e^{\beta(E_g-E_n)/2}-1}{i\Omega_n+E_g-E_n}+\sum_n|\langle\psi_n|e^{-i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\frac{1-e^{\beta(E_g-E_n)/2}}{i\Omega_n-E_g+E_n}.\end{aligned}$$

我们发现相应的谱函数是

$$\begin{aligned}A_\varphi(\omega) &= \sum_n(e^{\beta(E_g-E_n)/2}-1)\left[|\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\delta(\omega+E_g-E_n)-|\langle\psi_n|e^{-i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\delta(\omega-E_g+E_n)\right]\\ &= \overbrace{\sum_{n\neq g}(-)|\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\delta(\omega+E_g-E_n)}^{=A_\varphi(\omega>0)}+\overbrace{\sum_{n\neq g}|\langle\psi_n|e^{-i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\delta(\omega-E_g+E_n)}^{=A_\varphi(\omega<0)}\\ &- |\langle\psi_g|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\delta(\omega)\theta(\omega)+|\langle\psi_g|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2\delta(\omega)\theta(-\omega).\end{aligned} \tag{14.129}$$

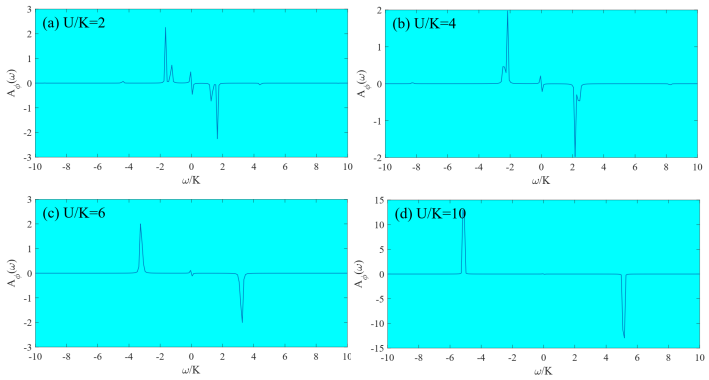


Figure 14.20: $h=0$时隶转子的谱函数$A_\phi(\omega)$,看以看到谱函数是关于$\omega=0$的奇函数.

注意到求和里面的第一项的δ函数包含因子$E_g-E_n<0$,因此这一项贡献的是$\omega>0$的谱函数,又由于权重因子是$-|\langle\psi_n|e^{i\hat{\varphi}}|\psi_g\rangle|^2$,这样$\omega>0$的谱是都是小于等于零的.与之相对,第二项说明$\omega<0$的谱函数是大于等于零. 另一方面,当$h=0$时,转子哈密顿量$\hat{H}_\varphi$在$\hat{\varphi}\to-\hat{\varphi}$,也就是$e^{i\hat{\varphi}}\to e^{-i\hat{\varphi}}$变换下是不变的,(注意到$e^{\pm i\hat{\varphi}}$解释为角动量升/降算符,因而该不变性就是粒子-空穴对称)因此谱函数中$\omega>0,\omega<0$部分权重因子绝对值完全相等,这实际上导致谱函数是以$\omega=0$为中心的奇函数.

如图14.20所示,$h=0$时隶转子的谱函数是关于$\omega=0$的奇函数且$\omega>0$部分非正,$\omega<0$部分非负.进一步,我们发现当U/K很大时,例如$U/K=10$,谱函数由$\pm U/2$附近的两峰结构决定,这自然对应于强耦合下体系的基态是$|n=0\rangle$,作用$e^{i\hat{\varphi}}$后的激发是$|n=\pm1\rangle$,其激发能恰好是$\pm U/2$.另一方面,减小U/K使得体系的基态混合入不同的分量$|n\rangle$,因此激发能也变得更多,这样谱函数就会显示更多的峰结构.

隶转子平均场理论:近似解

让我们考虑强耦合,也就是$U\gg V_k$,这样必有$U\gg K$,此时我们可以用一阶微扰论来获得本征态的近似表示.为了简化讨论,我们下面考虑半满对称的情况,此时$\varepsilon_0=h=0$,这样基态近似为

$$\begin{aligned}|\Phi_0^{(1)}\rangle &= |0\rangle+\sum_{l\neq0}\frac{\langle l|K\cos\hat{\varphi}|0\rangle}{E_0-E_l}|l\rangle=|0\rangle+\frac{K/2}{E_0-E_{l=1}}|l=1\rangle+\frac{K/2}{E_0-E_{l=-1}}|l=-1\rangle\\ &= |0\rangle-\frac{K}{U}(|l=1\rangle+|l=-1\rangle).\end{aligned}\tag{14.130}$$

这样

$$\boxed{\langle\cos\hat{\varphi}\rangle = \langle\Phi_0^{(1)}|\cos\hat{\varphi}|\Phi_0^{(1)}\rangle = \frac{-K/U}{2}(\langle 0|e^{-i\hat{\varphi}}|l=1\rangle + \langle 0|e^{i\hat{\varphi}}|l=-1\rangle + h.c.) = -\frac{2K}{U}} \tag{14.131}$$

而$\langle\sin\hat{\varphi}\rangle = 0$,因此$\langle e^{i\hat{\varphi}}\rangle = \langle e^{-i\hat{\varphi}}\rangle = \langle\cos\hat{\varphi}\rangle$.

回忆$K = \frac{2\Delta}{\pi}\langle\cos\hat{\varphi}\rangle \ln\frac{\tilde{\Delta}^2}{D^2+\tilde{\Delta}^2}$, 并代入刚刚得到的$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle = -\frac{2K}{U}$就有

$$1 = -\frac{4\Delta}{\pi U}\ln\frac{\tilde{\Delta}^2}{D^2+\tilde{\Delta}^2} \tag{14.132}$$

在$D \gg \tilde{\Delta}$时我们发现

$$\tilde{\Delta} = De^{-\frac{\pi U}{8\Delta}}. \tag{14.133}$$

这对应的是Kondo问题中的Kondo温度,即有

$$\boxed{T_K \simeq \tilde{\Delta} = De^{-\frac{\pi U}{8\Delta}}} \tag{14.134}$$

注意到这里所得的Kondo温度与通常Anderson杂质模型的常用结果$T_K \simeq De^{-\frac{\pi U}{8\Delta}}$是一致的.

对于转子部分,我们可以用U/K很大时候的$n=0$态来作为近似基态,代入$A_\varphi(\omega)$的表达式,并利用近似关系$|\psi_n\rangle \to |n\rangle$, 此时有

$$\begin{aligned} A_\varphi(\omega) &\simeq \sum_{n\neq g}\left[-|\langle n|e^{i\hat{\varphi}}|0\rangle|^2\delta(\omega+E_0-E_n) + |\langle n|e^{-i\hat{\varphi}}|0\rangle|^2\delta(\omega-E_0+E_n)\right] + |\langle 0|e^{i\hat{\varphi}}|0\rangle|^2\delta(\omega) \\ &= \langle\cos\hat{\varphi}\rangle^2\delta(\omega) - \delta(\omega-U/2) + \delta(\omega+U/2) \end{aligned} \tag{14.135}$$

综合费米子部分A_f和隶转子部分A_φ的结果,小心处理A_{c_0}中的积分可得

$$\begin{aligned} A_{c_0}(\omega) &\simeq \langle\cos\hat{\varphi}\rangle^2 A_f(\omega) + A_f(\omega-U/2)\theta(\omega-U/2) + A_f(\omega+U/2)\theta(-\omega-U/2) \\ &= \langle\cos\hat{\varphi}\rangle^2\frac{\tilde{\Delta}/\pi}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2} + \frac{\tilde{\Delta}/\pi}{(\omega-U/2)^2+\tilde{\Delta}^2}\theta(\omega-U/2) + \frac{\tilde{\Delta}/\pi}{(\omega+U/2)^2+\tilde{\Delta}^2}\theta(-\omega-U/2). \end{aligned}$$

上式第一项代表基态时Kondo共振峰的贡献,其权重为$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle^2 = \left(\frac{V^{eff}}{V}\right)^2 = \frac{\tilde{\Delta}}{\Delta}$.第二和第三项表示的是非相干背景的贡献,这里主要是$\pm U/2$两个能级.

如果我们考虑相应的零频谱函数$A_{c_0}(0)$,则有$A_{c_0}(0) = \frac{1}{\pi\Delta}$,这满足所谓的Friedel求和规则的要求.[45]这表明隶自旋平均场理论正确描述了Anderson杂质的费米液体基态.

- 注意到$\omega \to \pm U/2$时,$A_{c_0}(\omega)$在$\pm U/2$两个能级附近的权重是$\frac{1}{\pi\tilde{\Delta}}$,展宽是$\tilde{\Delta}$这实际上与Anderson杂质问题的普遍结果($\pm U/2$附近的展宽因该是$\Delta$而非$\tilde{\Delta}$)并不符合.这实际上说明平均场理论不能正确描述高能的$\pm U/2$能级附近的信息.

[45]这个求和规则可以看成费米液体理论里面的Luttinger定理在Anderson杂质问题的具体体现.

Hubbard模型的隶转子平均场理论:单格点近似

- 类似的,把处理Anderson杂质问题的隶转子平均场方法推广到Hubbard模型就可以计算平均场近似下的Mott相变问题,当然这种计算主要适用于Mott相变的金属态一边.[46]

对于Hubbard模型,对于每个格点的电子可以用隶转子表示为$\hat{c}_{i\sigma}=\hat{f}_{i\sigma}e^{-i\hat{\varphi}_i}$,同时有$\hat{L}_i^z=\sum_\sigma \hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}-1$:

$$\hat{H}=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}+\varepsilon_0\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}+\frac{U}{2}\sum_i\hat{L}_i^z. \tag{14.136}$$

对跃迁项做平均场近似可得

$$\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}\simeq\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\langle e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}\rangle+\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}-\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle\langle e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}\rangle \tag{14.137}$$

这样平均场近似下的哈密顿量是

$$\begin{aligned}
&\hat{H}=\hat{H}_f+\hat{H}_\varphi+E_0\\
&\hat{H}_f=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\langle e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}\rangle+(\varepsilon_0-h)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}\\
&\hat{H}_\varphi=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}+h\sum_i\hat{L}_i^z+\frac{U}{2}\sum_i(\hat{L}_i^z)^2\\
&E_0=\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle\langle e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}\rangle+N_sh
\end{aligned} \tag{14.138}$$

这里已经计入了拉格朗日乘子项.

定义$t_{ij}^{eff}=t_{ij}\langle e^{i(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)}\rangle$,$J_{ij}^{eff}=t_{ij}\sum_\sigma\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle$, 并考虑哈密顿量的厄密性并假设$\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle$为实数可知$t_{ij}^{eff}=t_{ij}\langle\cos(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)\rangle$,

$$\hat{H}_\varphi=-\sum_{ij}J_{ij}^{eff}\cos(\hat{\varphi}_i-\hat{\varphi}_j)+\sum_i(h\hat{L}_i^z+\frac{U}{2}(\hat{L}_i^z)^2). \tag{14.139}$$

$$\hat{H}_f=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}^{eff}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}+(\varepsilon_0-h)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}. \tag{14.140}$$

因此,我们发现隶转子平均场近似下Hubbard模型可以表示为耦合的转子模型$\hat{H}_\varphi$和自由费米子模型$\hat{H}_f$.这里的自由费米子模型实际上对应着体系自旋自由度的集体激发,通常称之为量子自旋液体,H_f可以看作是平均场近似下的自旋液体哈密顿量,t_{ij}^{eff}可以看作自旋液体中自旋子在格点间跃迁的强度,不同空间分布的t_{ij}^{eff}可以对应不同的自旋液体.

[46]具体细节可以参考[Florens,Georges,Slave-rotor mean-field theories of strongly correlated systems and the Mott transition in finite dimensions,Phys.Rev.B **70**,035114(2004)]

例如最简单的是正方晶格和三角晶格中很常见的情况,即$t_{ij}^{eff}=\chi\neq 0$(仅包含最近邻跃迁),一般称这种自旋液体为均匀共振价键态(uniform-RVB),此时我们有

$$H_f=\sum_k \chi_k \hat{f}_\sigma^\dagger \hat{f}_\sigma, \tag{14.141}$$

对正方晶格有$\chi_k=2\chi(\cos k_x+\cos k_y)$.这个自由费米子体系的基态是简单的Slater行列式所描述的费米气体态$|\Psi_{FG}\rangle=\prod_{k<k_F}\hat{f}_\uparrow^\dagger\hat{f}_\downarrow^\dagger|0\rangle$(有效费米动量$k_F$由$\chi_{k=k_F}=0$决定),当然注意到严格的自旋液体的Hilbert空间满足$\sum_\sigma \hat{f}_j^\dagger\hat{f}_{j\sigma}=1$,也就是每个格点上自旋仅有两个取值可能,这可以通过如下的Gutzwiller投影实现,即物理上允许的基态波函数是

$$|\Psi_{phy}\rangle=\overbrace{\prod_j \frac{1-e^{i\pi\hat{n}_j^f}}{2}}^{=\hat{P}}|\Psi_0\rangle. \tag{14.142}$$

这里$\hat{P}$把每个格点有零个或两个自旋子占据的态投影掉.由于$\hat{P}$作用在实空间,因此我们需要把$|\Psi_0\rangle$改写到实空间,这就导致很多不同实空间态的叠加,因此作用上$\hat{P}$后会把除了满足每个格点只有一个自旋子这个条件以外的态全部消除,这样的计算通常需要采用蒙特卡洛方法,这一般也叫做变分蒙特卡洛.[47]

进一步计算的主要问题是计算耦合的转子问题$\hat{H}_\varphi$, 这也是个复杂的多体问题,对于小尺寸体系可用精确对角化严格计算而更大的系统需要采用量子蒙特卡洛算法.如果采用某些近似例如单格点平均场或者Sigma模型近似则可得到一些解析的结果.

例如,我们考虑对$\hat{H}_\varphi$做单格点平均场近似,

$$\hat{H}_\varphi\simeq-\sum_{ij}J_{ij}^{eff}(\langle\cos\hat{\varphi}_i\rangle\cos\hat{\varphi}_j+\cos\hat{\varphi}_i\langle\cos\hat{\varphi}_j\rangle-\langle\cos\hat{\varphi}_i\rangle\langle\cos\hat{\varphi}_j\rangle)+\sum_i(h\hat{L}_i^z+\frac{U}{2}(\hat{L}_i^z)^2) \tag{14.143}$$

设体系具有平移不变性,则有$\langle\cos\hat{\varphi}_i\rangle=\langle\cos\hat{\varphi}_j\rangle\equiv\langle\cos\hat{\varphi}\rangle$. 令$K\equiv-2\sum_j J_{ij}^{eff}\langle\cos\hat{\varphi}_j\rangle$,那么$\hat{H}_\varphi$退耦和为一些列独立的转子$\hat{H}_i$的求和,(忽略常数项)

$$\hat{H}_\varphi\simeq\sum_i\hat{H}_i=\sum_i\left(\frac{U}{2}(\hat{L}_i^z)^2+h\hat{L}_i^z+K\cos\hat{\varphi}_i\right). \tag{14.144}$$

注意到$\hat{H}_i$已在先前Anderson杂质模型隶转子平均场理论中讨论过,在那里我们发现微扰计算表明当$\varepsilon_0=h=0$时$\langle\cos\hat{\varphi}_i\rangle=-\frac{2K}{U}$.

[47][Motrunich,Variational study of triangular lattice spin$-1/2$cmodel with ring exchanges and spin liquid state in κ-$(ET)_2Cu_2(CN)_3$,Phys.Rev.B **72**,045105(2005)]以三角晶格材料κ-$(ET)_2Cu_2(CN)_3$为目标利用变分蒙特卡洛研究了描述自旋液体的Gutzwiller投影波函数.

这样关于K的方程是$K=-2\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\sum_j J_{ij}^{eff}$,根据$J_{ij}^{eff}$的定义可知

$$\begin{aligned}
K &= -2\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\frac{1}{N_s}\sum_{ij\sigma}t_{ij}\langle\hat{f}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{j\sigma}\rangle=-2\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\frac{1}{N_s}\sum_{ijkk'\sigma}t_{ij}e^{-ik'R_i}e^{ikR_j}\langle\hat{f}_{k'\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{k\sigma}\rangle\\
&= -2\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\frac{1}{N_s}\sum_{\delta jkk'\sigma}t_{\delta}e^{-ik'R_j}e^{ikR_j}e^{-ik'\delta}\langle\hat{f}_{k'\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{k\sigma}\rangle\\
&= -2\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\sum_{k\delta\sigma}t_{\delta}e^{ik\delta}\langle\hat{f}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{k\sigma}\rangle=-2\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\sum_{k\sigma}(-\varepsilon_k)\langle\hat{f}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{k\sigma}\rangle\\
\Rightarrow &\quad\boxed{K=4\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\int d\varepsilon N(\varepsilon)\varepsilon f_F(\varepsilon_0-h+Z\varepsilon)}.
\end{aligned}\tag{14.145}$$

这里我们定义了准粒子权重$Z=\langle\cos\hat{\varphi}\rangle^2$,非零$Z$表征费米液体准粒子的存在.此外,由于自由费米子部分可以写成$\hat{H}_f=\sum_{k\sigma}(Z\varepsilon_k+\varepsilon_0-h)\hat{f}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{k\sigma}$,因此有$\langle\hat{f}_k^{\dagger}\hat{f}_k\rangle=f_F(Z\varepsilon_k+\varepsilon_0-h)$.另一方面对约束条件取平均有

$$\boxed{\langle\hat{L}_i^z\rangle=\sum_{\sigma}\langle\hat{f}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{i\sigma}\rangle-1=2\left(\int d\varepsilon N(\varepsilon)f_F(\varepsilon_0-h+Z\varepsilon)-1/2\right)}\tag{14.146}$$

而$\hat{c}$电子总数给出

$$n_c=\sum_{\sigma}\langle\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{i\sigma}\rangle=\sum_{\sigma}\langle\hat{f}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{i\sigma}\rangle=2\int d\varepsilon N(\varepsilon)f_F(\varepsilon_0-h+Z\varepsilon).\tag{14.147}$$

这样,上述方程中的未知参数有化学势μ,拉格朗日乘子h,($\varepsilon_0=U/2-\mu$)平均场参数K和$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle$,可以通过数值迭代和对角化$\hat{H}_i$计算.

在半满对称的特殊情况下,$\varepsilon_0-h=0$,$N(\omega)$关于$\omega=0$对称.这样在零温时若$Z>0$,那么

$$n_c=2\int d\varepsilon N(\varepsilon)\theta(-Z\varepsilon)=2\int_{-\infty}^{0}d\varepsilon N(\varepsilon).\tag{14.148}$$

因为态密度必然归一化,$\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon N(\varepsilon)=1$,因此$n_c=1$.同理,我们看到$\langle\hat{L}_i^z\rangle=0$.此时我们还剩下的零温方程就是关于$K$的方程,

$$K=4\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\overbrace{\int d\varepsilon N(\varepsilon)\varepsilon\theta(-\varepsilon)}^{\equiv\bar{\varepsilon}}=4\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\bar{\varepsilon}.\tag{14.149}$$

为了方便,我们定义了平均单粒子能量$\bar{\varepsilon}=\int_{-\infty}^{0}d\varepsilon N(\varepsilon)\varepsilon$.如果取$N(\omega)=\frac{1}{2D}\theta(D-|\omega|)$,$\bar{\varepsilon}=\frac{1}{2D}\int_{-D}^{0}d\varepsilon\varepsilon=-\frac{D}{4}$.这样,$K=-\langle\cos\hat{\varphi}\rangle D$.

结合自洽方程$K=-\langle\cos\hat{\varphi}\rangle D$并利用数值对角化求解转子哈密顿量$\hat{H}_{\varphi}$,我们发现平均场参数$K$与准粒子权重$Z$随$U/U_c$变化情况如图14.21所示,这里$U_c=2D$.可以看到当$U<U_c$时,$Z$随着$U$增加逐渐减小,最后在$U=U_c$时等于零.实际上,如果我们代入强耦合时的解$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle=-\frac{2K}{U}$并结合$K=4\langle\cos\hat{\varphi}\rangle\bar{\varepsilon}$,此时我们发现$U=-8\bar{\varepsilon}$,由于强耦合时$\langle\cos\hat{\varphi}\rangle=0$,因此我们得到的$U$实际上是准粒子$Z$恰好

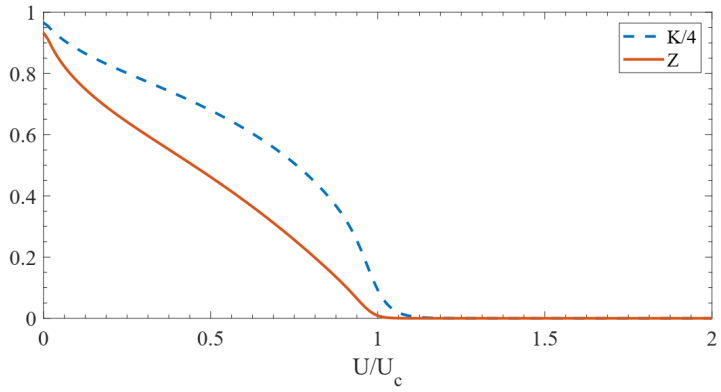


Figure 14.21: 隶转子平均场近似下对称半满Hubbard模型的准粒子权重Z.

为零的取值,也就是$U_c = -8\bar{\varepsilon}$.此外,由图 14.21可以看到$Z$随着$U/U_c$的变化可以近似用下式来表示:

$$\boxed{Z \simeq \left(1 - \frac{U}{U_c}\right), \quad U \leqslant U_c} \tag{14.150}$$

这个结果是我们理解一些Mott绝缘体材料在Mott相变点附近准粒子变化的重要基础.

由于$U > U_c$时,$Z = 0$,这说明该$U = U_c$就是体系的Mott相变点.由于Z随着$U \to U_c$连续趋于零,因此隶转子平均场给出的是连续的Mott相变.当$U < U_c$时电子Green函数可以写成准粒子部分和非相干背景,[48]

$$G_c = \frac{Z}{i\omega_n - Z\varepsilon_k} + \ldots \tag{14.151}$$

既然准粒子部分描述的是体系低能下的费米液体行为,这自然对应金属态.

另一方面,当$U > U_c$时$Z = 0$因而准粒子部分消失,在单格点近似下由于$\langle \cos\hat{\varphi} \rangle = 0$,这导致$\hat{H}_f$,这说明自旋自由度完全自由,其描述的只是每个格点上自由的局域磁矩.因而,此时唯一有贡献的就是转子所导致的非相干部分,其与单杂质Anderson模型的讨论类似,这些转子会在电子谱函数中给出上下Hubbbard能带.需要指出其宽度宽度并不是D量级,因此单格点近似还是过于粗糙了.

- 上述单格点平均场近似的计算结果与传统的Gutzwiller近似理论一致,这说明其定性抓住了低能的准粒子贡献.

[48] 根据Green函数的定义,$G_c(i,j,\tau) = -\langle T_\tau \hat{c}_i(\tau)\hat{c}_j^\dagger \rangle = -\langle T_\tau \hat{f}_i(\tau)\hat{f}_j^\dagger \rangle \langle T_\tau e^{-i\hat{\theta}_i(\tau)} e^{i\hat{\theta}_j} \rangle = G_f(i,j,\tau)G_\varphi(i,j,\tau)$,做傅里叶变换可得 $G(k,\omega_n) = \frac{1}{\beta}\sum_{\Omega_n}\frac{1}{N_s}\sum_q G_f(k-q,\omega_n - \Omega_n)G_\varphi(q,\Omega_n)$.

Hubbard模型的隶转子平均场理论:超越单格点近似

当然,单格点平均场自然没有计入转子部分不同格点间的动力学,因此其既不能描述绝缘态时Hubbard能带的正确结构,也不能描述金属态的电荷动力学,(Mott绝缘态在能隙内没有动力学)这可以通过类似单杂质Anderson模型的Sigma模型来考虑,也就是说,我们写出转子部分的作用量

$$S_\varphi = \int d\tau \left(\sum_j \frac{(\partial_\tau \varphi_j + ih)^2}{2U} - \sum_{ij} J_{ij}^{eff} e^{i(\varphi_i - \varphi_j)} \right). \tag{14.152}$$

然后对每一个格点都引入$X_j = e^{i\varphi_j}$,并计入$|X_j|^2 = 1$的约束条件有

$$S_X = \int d\tau \left(\sum_j \frac{(\partial_\tau X_j)^2}{2U} + \sum_j \frac{h(X_j^* \partial X_j - X_j \partial X_j^*)}{2U} - \sum_{ij} J_{ij}^{eff} X_j^* X_i + \sum_j \lambda_j (|X_j|^2 - 1) \right). \tag{14.153}$$

若我们考虑鞍点近似,也就是假设λ是时间和空间无关的常数(记为λ),那么上式做傅里叶变换后将会给出如下的Green函数,

$$G_X(q, \Omega_n) = \frac{1}{\Omega_n^2/U - 2hi\Omega_n/U + \omega_q + \lambda} \tag{14.154}$$

这里ω_q是$-J_{ij}^{eff}$的傅里叶变换,代表转子的色散关系.(对于最近邻跃迁时ω_q与自由电子色散ε_k的关系是$\omega_q = Q_X \varepsilon_q$,$Q_X = \sum_\sigma \langle \hat{f}_{i\sigma}^\dagger \hat{f}_{j\sigma} \rangle$)同时,费米子部分仍然是自由粒子的形式,其在动量空间是$\hat{H}_f = \sum_k (Q_f \varepsilon_k + \varepsilon_0 - h) \hat{f}_{k\sigma}^\dagger \hat{f}_{k\sigma}$,($Q_f = \langle e^{i(\theta_i - \theta_j)} \rangle = \langle X_i X_j^* \rangle$)这样费米子的Green函数可以写成,

$$G_f(k, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - Q_f \varepsilon_k - (\varepsilon_0 - h)}. \tag{14.155}$$

现在,让我们考虑半满对称的系统,此时$h = \varepsilon_0 = 0$,这样转子与费米子的Green函数简化为

$$\begin{aligned} G_X(q, \Omega_n) &= \frac{1}{\Omega_n^2/U + Q_X \varepsilon_q + \lambda} \\ G_f(k, \omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - Q_f \varepsilon_k}. \end{aligned} \tag{14.156}$$

这样,我们可以根据Q_X, Q_f的定义以及归一化条件$\langle |X_i|^2 \rangle = 1$得到三个平均场自洽方程.

例如,由于$\langle |X_i|^2 \rangle = \lim_{\tau \to 0} \langle T_\tau X_i(\tau) X_i^* \rangle = \lim_{\tau \to 0} G_X(i, i, \tau)$. 这样就有

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \to 0} G_X(i, i, \tau) &= \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{N_s} \sum_q e^{iq(R_i - R_i)} e^{-i\Omega_n \tau} G_X(q, \Omega_n) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{N_s} \sum_q G_X(q, \Omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{N_s} \sum_q \frac{1}{\Omega_n^2/U + Q_X \varepsilon_q + \lambda} \\ &= \int d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{\Omega_n^2/U + Q_X \varepsilon + \lambda}. \end{aligned}$$

因此我们发现,

$$\langle |X_i|^2 \rangle = 1 \Rightarrow \boxed{1 = \int d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{\Omega_n^2/U + Q_X \varepsilon + \lambda}} \tag{14.157}$$

注意到,

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_s} \sum_{ij\sigma} t_{ij} \langle \hat{f}_{i\sigma}^\dagger \hat{f}_{j\sigma} \rangle &= \frac{1}{N_s} \sum_{ijkk'\sigma} t_{ij} e^{-ik'R_i} e^{ikR_j} \langle \hat{f}_{k'\sigma}^\dagger \hat{f}_{k\sigma} \rangle \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_{\delta jkk'\sigma} t_\delta e^{-ik'R_j} e^{ikR_j} e^{-ik'\delta} \langle \hat{f}_{k'\sigma}^\dagger \hat{f}_{k\sigma} \rangle \\ &= \sum_{k\delta\sigma} t_\delta e^{ik\delta} \langle \hat{f}_{k\sigma}^\dagger \hat{f}_{k\sigma} \rangle = \sum_{k\sigma} (-\varepsilon_k) \langle \hat{f}_{k\sigma}^\dagger \hat{f}_{k\sigma} \rangle \\ &= -2 \int d\varepsilon N(\varepsilon) \varepsilon f_F(Q_f \varepsilon). \end{aligned} \tag{14.158}$$

对于d维超立方晶格上仅有最近邻跃迁的情况,$t_{ij} = t$,对i, j的求和变成i求和和它的最近邻$i + \delta$,最近邻的数目是$2d$.色散关系是$\varepsilon_k = -2t \sum_{i=1}^d \cos k_i$而能带半宽是$D = 2dt$,这样就有

$$\frac{1}{N_s} \sum_{ij\sigma} t_{ij} \langle \hat{f}_{i\sigma}^\dagger \hat{f}_{j\sigma} \rangle = t2d \frac{1}{N_s} \sum_{i\sigma} \langle \hat{f}_{i\sigma}^\dagger \hat{f}_{i+\delta\sigma} \rangle = t2d \sum_\sigma \langle \hat{f}_{i\sigma}^\dagger \hat{f}_{i+\delta\sigma} \rangle = DQ_X.$$

我们得到

$$\boxed{DQ_X = -2 \int d\varepsilon N(\varepsilon) \varepsilon f_F(Q_f \varepsilon)} \tag{14.159}$$

类似于费米子的操作,我们最后发现,

$$\boxed{DQ_f = -\int d\varepsilon N(\varepsilon) \varepsilon \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{\Omega_n^2/U + Q_X \varepsilon + \lambda}} \tag{14.160}$$

通过求解三个自洽方程,我们就可以得到超越单格点近似的Mott相变描述.为了得到一些解析结果,我们可以执行频率求和,即

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{\Omega_n^2/U + Q_X \varepsilon + \lambda} = \frac{U}{2\sqrt{U(Q_X \varepsilon + \lambda)}} \coth \frac{\beta}{2\sqrt{U(Q_X \varepsilon + \lambda)}}. \tag{14.161}$$

在零温极限下,我们发现

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{\Omega_n^2/U + Q_X \varepsilon + \lambda} \to \frac{U}{2\sqrt{U(Q_X \varepsilon + \lambda)}}. \tag{14.162}$$

因此自洽方程简化为

$$1 = \int d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{U}{2\sqrt{U(Q_X \varepsilon + \lambda)}}, \tag{14.163}$$

$$DQ_f = -\int d\varepsilon N(\varepsilon)\varepsilon \frac{U}{2\sqrt{U(Q_X\varepsilon+\lambda)}}, \tag{14.164}$$

$$DQ_X = -2\int d\varepsilon N(\varepsilon)\varepsilon\theta(-\varepsilon) = -2\bar{\varepsilon}. \tag{14.165}$$

注意到零温时的Q_X已经求出,即$Q_X = -2\bar{\varepsilon}/D > 0$.

转子Green函数$G_X(q,\Omega_n)$分母为零给出转子能谱是$\pm\sqrt{U(Q_X\varepsilon_q+\lambda)}$.这代表两支关于零能对称的能谱,能谱之间的直接能隙是 $2\sqrt{U(Q_X\varepsilon_q+\lambda)}$.当能隙非零时,转子部分是并不具有长程有序,因而处于无序态.我们把体系的最小能隙定义为激发能隙,也就是有

$$\Delta_g = 2\left(\sqrt{U(Q_X\varepsilon_q+\lambda)}\right)_{min}, \tag{14.166}$$

对于我们所考虑的d维超立方晶格,最小能隙位于$q=0$处,此时$\varepsilon_{q=0} = -2td = -D$,因此有$\Delta_g = 2\sqrt{U(\lambda - Q_X D)}$.我们知道转子描述的是体系的电荷自由度(例如$e^{i\theta_i} = X_i$在$i$格点增加一个电荷),因此$\Delta_g$代表的是电荷激发所需要的最小能隙,也就是通常固体物理中的电荷能隙.利用Δ_g,我们可以把剩下两个方程改写为:

$$Q_f = -\int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{\varepsilon}{D}\frac{U}{\sqrt{\Delta_g^2 - 8U\bar{\varepsilon}(1+\varepsilon/D)}}, \tag{14.167}$$

$$1 = \int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{U}{\sqrt{\Delta_g^2 - 8U\bar{\varepsilon}(1+\varepsilon/D)}}. \tag{14.168}$$

如果在上式中令$\Delta_g \to 0$,我们可以得到能隙为零时对应的临界值$U = U_c$:

$$\begin{aligned} 1 &= \int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{U_c}{\sqrt{-8U_c\bar{\varepsilon}(1+\varepsilon/D)}} = \frac{U_c}{\sqrt{-8U_c\bar{\varepsilon}}}\int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon/D}} \\ &\Rightarrow U_c = (-8\bar{\varepsilon})\left[\int d\varepsilon \frac{N(\varepsilon)}{1+\varepsilon/D}\right]^{-2}. \end{aligned} \tag{14.169}$$

回忆单格点平均场时得到的临界值$U_c^\infty = -8\bar{\varepsilon}$,这样就有

$$\frac{U_c}{U_c^\infty} = \left[\int d\varepsilon \frac{N(\varepsilon)}{1+\varepsilon/D}\right]^{-2}. \tag{14.170}$$

一般而言,上式右边小于一,因此$U_c < U_c^\infty$,这说明空间涨落会更有利于Mott态的形成.对于一维空间,由于态密度$N(\varepsilon) = (D/\pi)/\sqrt{D^2-\varepsilon^2}$在能带边界$\varepsilon = \pm D$处发散,这样$U_c^{d=1} = 0$,这与一维Hubbard模型的严格结果一致.因此一维Hubbard模型只需要一个无穷小的U就可以把体系驱动到Mott绝缘态.

为了得到能隙Δ_g在$U \to U_c$时的行为,利用$U = U_c$时的方程,我们发现,

$$\sqrt{\frac{U_c^\infty}{U_c}} - \sqrt{\frac{U_c^\infty}{U}} = \int d\varepsilon N(\varepsilon)\left[\frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon/D}} - \frac{1}{\sqrt{\Delta_g^2/(UU_c^\infty)+1+\varepsilon/D}}\right]. \tag{14.171}$$

对于不同空间维度的态密度$N(\varepsilon)$,详细的分析表明:

$$\frac{\Delta_g}{U_c} \propto \begin{cases} \frac{U}{U_c}-1, & d>3; \\ (\frac{U}{U_c}-1)^{\frac{1}{d-1}}, & d<3; \end{cases} \tag{14.172}$$

接下来,我们考虑金属态的情况.注意到$Q_x\varepsilon_q+\lambda \leqslant 0$会导致能谱的不稳定性,其恰好为零则给出玻色凝聚的条件,也就是玻色子的化学势恰好等于其色散的最低点,即有$-Q_X D+\lambda=0$.这样在玻色凝聚态我们可以分离出$q=0$和$\Omega_n=0$的部分,

$$G_X(q,\Omega_n)=Z\delta_{q=0}\delta_{\Omega_n=0}+\frac{1}{\Omega_n^2/U-2\bar{\varepsilon}(1+\varepsilon_q/D)} \tag{14.173}$$

这里$Z=\langle X^2\rangle$代表了凝聚部分的权重.由于凝聚部分的出现,$\langle|X|^2\rangle=1$的自洽方程需要计入这一部分的贡献,则有

$$1=Z+\int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{U}{\sqrt{U(-8)\bar{\varepsilon}(1+\varepsilon/D)}}. \tag{14.174}$$

注意到积分部分可以改写为$\sqrt{\frac{U}{U_c}}$,因此我们发现:

$$Z=1-\sqrt{\frac{U}{U_c}}. \tag{14.175}$$

- 转子的能隙Δ_g和准粒子权重Z在$U=U_c$同时为零.

对于Q_f的方程,计入凝聚后在零温度下修改为,

$$Q_f=Z-\sqrt{\frac{U}{U_c^\infty}}\int d\varepsilon N(\varepsilon)\frac{\varepsilon/D}{\sqrt{1+\varepsilon/D}}. \tag{14.176}$$

可以看到,当体系接近相变时,虽然$Z\to 0$但Q_f并不趋于零,这说明费米子部分仍然有非零的运动,其仍然由$\hat{H}_f=\sum_{k\sigma}Q_f\varepsilon_k\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}$描述.

结合转子Green函数G_X和费米子Green函数$G_f=1/(i\omega_n-Q_f\varepsilon_k)$,我们可以发现$U<U_c$时电子Green函数可以分为相干的准粒子部分$\frac{Z}{i\omega_n-Q_f\varepsilon_k}$和非相干$G_{incoherent}$的背景:

$$G_c=\frac{Z}{i\omega_n-Q_f\varepsilon_k}+G_{incoherent} \tag{14.177}$$

这里的非相干部分具体形式是,

$$G_{incoherent}(k,\omega_n)=\frac{1}{\beta}\sum_{\Omega_n}\frac{1}{N_s}\sum_q\frac{1}{i\omega_n-i\Omega_n-Q_f\varepsilon_{k-q}}\frac{1}{\Omega_n^2/U-2\bar{\varepsilon}(1+\varepsilon_q/D)}. \tag{14.178}$$

回忆固体物理中关于电子有效质量的定义,$(\frac{1}{m})_{\alpha\beta}=\frac{\partial^2\varepsilon_k}{\partial k_\alpha\partial k_\beta}$,那么电子色散$Q_f\varepsilon_k$相比于无相互作用电子时的$\varepsilon_k$具有增强的有效质量:

$$\frac{m^*}{m}\equiv\frac{(\frac{1}{m})_{\alpha\alpha}}{(\frac{1}{m^*})_{\alpha\alpha}}=\frac{1}{Q_f}. \tag{14.179}$$

- 因此,虽然Mott相变时$Z \to 0$,但由于Q_f有限,电子有效质量并不会发散.这个结果与低温量子振荡实验是符合的.[49]

对于非相干部分,其类似于单杂质Anderson平均场时的情况,非凝聚部分的转子与费米子卷积后给出Hubbard能带.由转子Green函数的风幕可以看到相应的色散为

$$\pm\omega_q = \pm\sqrt{UQ_X(\varepsilon_q + D)} = \pm\frac{\sqrt{UU_c^\infty}}{2}\sqrt{1+\varepsilon_q/D}, \tag{14.180}$$

这对应着玻色型的集体电荷模式.在低能区,可以在$q=0$展开色散关系ε_q,注意到超立方晶格的色散是关于动量的偶函数,因此必有$\varepsilon_q \sim q^2$,这样就得到典型的线性色散关系,

$$\omega_q \sim |q|, \tag{14.181}$$

在文献中解释为费米液体的零声模式.注意到在绝缘态,或者转子的无序态,所有的转子激发都是有能隙的,因子上述这种激发仅在金属态存在.这说明Mott相变可以看作是这些集体模式变软(能隙消失)的结果.在非相干部分中对频率求和可得

$$G_{incoherent}(k,\omega_n) = \frac{1}{N_s}\sum_q \frac{U}{2\omega_q}\left[\frac{f_F(Q_f\varepsilon_{k-q}) + f_B(\omega_q)}{i\omega_n - Q_f\varepsilon_{k-q} - \omega_q} - \frac{f_F(Q_f\varepsilon_{k-q}) + f_B(-\omega_q)}{i\omega_n - Q_f\varepsilon_{k-q} + \omega_q}\right] \tag{14.182}$$

做解析延拓$i\omega_n \to \omega + i0^+$并对$k$求和,我们就可以得到非相干部分的零温电子态密度:

$$\begin{aligned} N_{incoherent}(\omega) &= \frac{1}{N_s^2}\sum_{q,k}\frac{U}{2\omega_q}\theta(-Q_f\varepsilon_{k-q})\delta(\omega - Q_f\varepsilon_{k-q} - \omega_q) \\ &- \frac{1}{N_s^2}\sum_{q,k}\frac{U}{2\omega_q}(\theta(-Q_f\varepsilon_{k-q})-1)\delta(\omega - Q_f\varepsilon_{k-q} + \omega_q). \end{aligned} \tag{14.183}$$

最后,如果我们超出sigma模型的平均场近似,那么转子部分应该由如下两类有效理论描述:

$$S_X^{h=0} = \int d\tau \int d^dx \left(|\partial_\tau X|^2 + |\nabla X|^2 + \lambda(|X|^2 - 1)\right), \tag{14.184}$$

$$S_X^{h\neq 0} = \int d\tau \int d^dx \left(X^*(\partial - \nabla^2)X + \lambda(|X|^2 - 1)\right). \tag{14.185}$$

注意到上述作用量的差别在于时间导数的阶数.由于平均场近似下费米子部分并不出现任何的奇异性,因此Mott相变只能通过玻色子部分,也就是转子来体现.$S_X^{h=0}$ 相当于经典XY模型的量子推广,其时空导数阶数相同,具有Lotentz对称性,它的临界点对应的是相互作用诱导的Mott相变.$S_X^{h\neq 0}$可以看作是一类非相对论性的玻色子,λ的正负对应着无序态和有序态,这实际上是自由玻色子体系的Lifshitz相变普适类,它描述掺杂或者改变化学势所导致的Mott相变.

[49][Oberbauer et al., Coherent heavy charge carriers in an organic conductor near the bandwidth-controlled Mott transition,Phys.Rev.B **107**,075139(2023)]

- 平均场近似下的Mott相变可以理解为转子部分的XY相变或者自由玻色子体系的Lifshitz相变.

上面我们简要介绍了隶转子平均场下的Mott相变,如果考虑时空涨落,也就是我们希望部分恢复原始模型中f费米子与转子的耦合,这可以通过在平均场哈密顿量中添加相位因子$e^{i\hat{a}_{ij}}$实现,

$$\begin{aligned}\hat{H}_f &= -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}^{eff} e^{i\hat{a}_{ij}} \hat{f}_{i\sigma}^\dagger \hat{f}_{j\sigma} + (\varepsilon_0 - h)\sum_{i\sigma} \hat{f}_{i\sigma}^\dagger \hat{f}_{i\sigma} \\ \hat{H}_\varphi &= -\sum_{ij} J_{ij}^{eff} e^{i\hat{a}_{ij}} e^{i(\hat{\varphi}_i - \hat{\varphi}_j)} + h\sum_i \hat{L}_i^z + \frac{U}{2}\sum_i (\hat{L}_i^z)^2\end{aligned} \tag{14.186}$$

注意到a_{ij}依赖于格点位置i,j,通常认为它定义在格点之间的link上,同时如果我们考虑局域的$U(1)$相因子变换

$$\hat{f}_{j\sigma} \to e^{i\theta_j}\hat{f}_{j\sigma}, \quad e^{-i\hat{\varphi}_j} \to e^{i\theta_j} e^{-i\hat{\varphi}_j} \tag{14.187}$$

那么物理电子$\hat{c}_{j\sigma}$和原始的Hubbard模型哈密顿量都保持不变,但平均场哈密顿量将会多出因子$e^{i(-\theta_i+\theta_j)}$.显然,Hubbard模型保持不变说明物理上有意义的物理量和量子态在局域相位因子变换下保持不变,因此我们自然也希望平均场哈密顿量同样具有这个性质,这可以通过设

$$e^{i\hat{a}_{ij}} \to e^{i(\theta_i-\theta_j)} e^{i\hat{a}_{ij}} \tag{14.188}$$

实现.回忆规范场论中关于规范场的定义,满足上述性质的$\hat{a}_{ij}$就是定义在晶格上的$U(1)$规范场,不同的局域相位因子$e^{i\theta_j}$对应不同的规范变换.因此计入$\hat{a}_{ij}$ 的平均场哈密顿量自动成为规范场理论.

当然,定义在晶格上的规范场论实际上难以求解,因此人们通常假设体系可以取连续极限以忽略晶格尺度的详细信息,这等价于假设规范场处于退禁闭态.在连续极限下,系统的低能作用量可以根据对称性写出,例如我们考虑平均场的情况,也就是假设空间均与和各向同性,那么转子部分仍然由XY模型描述,而费米子部分则可用自由费米子作用量$\int d\tau d^dx \bar{f}_\sigma(\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2m_f} - \mu_f) f_\sigma$描述,至于$U(1)$规范场部分则可以用QED中最常用的最小耦合引入,即$\partial_\mu \to \partial_\mu - ia_\mu$,这样体系完整的低能作用量是

$$\begin{aligned}S_f &= \int d\tau d^dx \bar{f}_\sigma \left(\partial_\tau - ia_0 + \frac{(-i\nabla - \vec{a})^2}{2m_f} - \mu_f\right) f_\sigma, \\ S_X^{h=0} &= \int d\tau \int d^dx \left(|(\partial_\tau - ia_0)X|^2 + |(\nabla - i\vec{a})X|^2 + \lambda(|X|^2 - 1)\right), \\ S_a &= \int d\tau \int d^dx \frac{1}{2} f_{\mu\nu} f_{\mu\nu}, \quad f_{\mu\nu} = \partial_\mu a_\nu - \partial_\nu a_\mu.\end{aligned} \tag{14.189}$$

这里S_a是手动添加的规范场自身的动力学部分,形式上与标准的Maxwell电磁场的作用量一致.($S_X^{h=0}$换成$S_X^{h\neq 0}$也有类似的形式)

当转子发生玻色凝聚时,$\langle X\rangle \neq 0$,规范场自由度由于Higgs机制而获得能隙从而不参与低能动力学,此时体系实际上就是先前平均场理论描述的费米液体型的金属态.另一方面,如果转子不发生凝聚,那么转子部分会有激发能隙而与规范场退耦,体系就是平均场近似下所得的Mott绝缘态,只不过现在规范场成为体系的真实动力学自由度,因此低能下得物理由$U(1)$规范场与自旋子f的耦合体系描述$(S_f + S_a)$,这在文献中称为具有费米面的$U(1)$量子自旋液体,其是一类稳定的量子态,其性质在高温超导问题中已有广泛研究,其基本特性是自旋子f与规范场的耦合会导致规范场感受到Landau阻尼,这样规范场的动力学临界指数是$z = 3$,这会导致非费米液体形式的热容$C_V \sim T^{d/z} \sim T^{2/3}(d = 2)$.同时Landau阻尼后的规范场对于费米子的反作用将使得费米子的自能具有非费米液体的形式,例如$d = 2$时$\Sigma(\omega) \sim \omega^{2/3}$.

- 换句话说,在考虑规范场的情况下Mott相变可以描述为金属态到$U(1)$自旋液体的量子相变.

在Mott相变点,转子部分处于临界态,其与自旋子f和规范场自由度强耦合,体系性质比较复杂,目前并没有完整的认识.Senthil指出能带宽度和化学势调节的Mott相变的有限温度相图如图14.22所示,除了零温下的费米液体金属态和自旋液体态,有限温度下会有一系列的过渡区域.[50]进一步,Senthil与合作者指出Mott相变点的电导率会有e^2/h量级的跳变,[51]这是这类相变的典型特征,[52]但与实际体系中的一级Mott相变难以区分开.

- 需要指出,隶转子平均场和规范场论描述的Mott相变都是连续相变因而会有关联长度的发散这样Mott相变点附近有限温度下的物理量会有明确的标度行为;

- 用来解释Mott相变的实验时理论所预言的标度行为适用的温度区间并不清楚,(通常认为其适用的温度区间仅仅是非常接近零温的区域)因此这类辅助粒子理论更多的是提供一种物理图像而非定量的理解.

Mott相变的分类

需要强调的是,Mott相变既可以是通过调节能带宽度与相互作用相对大小导致,也可以对半满的Mott绝缘体引入载流子或者直接改变化学势而产生.前者在文献中称为能带宽度控制的金属绝缘体相变(BC-MIT,例如V_2O_3,$NdNiO_3$),后

[50][Senthil,Theory of a continuous Mott transition in two dimensions, Phys.Rev.B **78**,045109(2008)]

[51]最简单的单格点平均场近似实际上导致电导率在相变点附近逐渐减小到零而没有跳变行为,只有计入超越单格点近似的空间关联才会得到有限的f费米子能带,这样在相变点才会有有限的电导率跳变.

[52][Podolsky,Mott Transition between a Spin-Liquid Insulator and a Metal in Three Dimensions,Phys.Rev.Lett. **102**,186401(2009)]

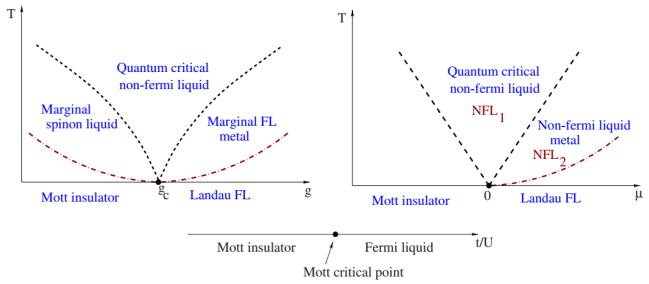


Figure 14.22: 隶转子表示下有效规范场论描述所建议的相图.左边代表半满时能带宽度调节的Mott相变,右边是化学势调节的相变.

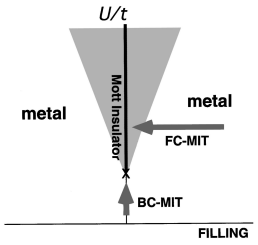


Figure 14.23: 基于Hubbard模型的金属−绝缘体相变,纵轴是U/t,横轴是电子填充n.阴影区表示受到Mott相变强烈影响的金属区,在该区域中的载流子容易受到无序和电声耦合而导致局域化.FC-MIT代表填充控制的Mott相变,BC-MIT表示能带宽度控制的Mott相变.

者称为电子填充控制的金属绝缘体相变(FC-MIT).通常相互作用强度不好调节,而电子能带宽度可通过压力调节.一般而言压力会减小原子间距而增大波函数重叠度使得电子跃迁强度增加因而能带宽度增大.因此通过压力可实现从Mott绝缘态到金属的转变.图14.10显示了掺杂V_2O_3体系的经典相图. [53]电子填充控制在实验上可通过采用不同价离子的替代实现,例如$La_{2-x}Sr_xCuO_4$的能带填充n由二价的Sr替代三价La实现($n = 1 - x$).

考虑到上述两种金属绝缘体相变实现的方式,图14.23给出了关于Hubbard模型金属绝缘体相变的一般相图. 当这些相变都是连续相变时,BC-MIT与FC-MIT的临界行为可以属于不同的相变普适类.这可以理解为对于BC-MIT 而言,接近Mott相变是电子总数不变,电子的局域化伴随着有效质量的大幅度增

[53] [Imada,Fujimori,Tokura,Metal-insulator transitions,Rev.Mod.Phys. **70**,1039(1998)]

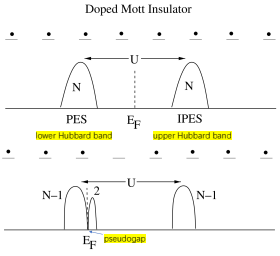


Figure 14.24: 强耦合极限下的掺杂Mott绝缘体的谱权重转移.

大,而FC-MIT则主要体现出有效载流子数目的减少.这两者还是有明显区别,因此一般而言我们并不期待它们属于同一个普适类.[54]

掺杂的Mott绝缘体*

既然实验上发现的铜氧化物材料在电子或空穴掺杂母体绝缘体(Mott绝缘体)材料后会出现各种反常行为,那么掺杂Mott绝缘体的物性研究自然成为研究的热点问题.

在文献中,关于掺杂Mott绝缘体的理论研究通常采用Hubbard模型或者$t-J$模型,尤其是后者,因为模型Hilbert 空间更小且与三带模型联系紧密(Zhang-Rice单态),因此为更多研究者所采用.然而光学实验发现电子谱权重从高能的Hubbard能带转移至费米能附近(称为电子谱权重转移),注意到由于$t-J$模型把上Hubbard带完全投影掉,因而这类额外的能谱在$t-J$模型中并不存在,这样从Hubbard模型(或更复杂的多带版本)出发反而是更为自然的出发点.

在接下来的讨论中,我们将从单带Hubbard模型出发进行讨论.让我们考虑原子极限,也就是$t/U=0$的极限.考虑半满的系统,即电子总数与格点数都为N,此时系统的基态是每个格点都有一个电子占据的状态,即

$$|\Psi\rangle=\prod_{j=1}^{N}|\sigma\rangle_j \tag{14.190}$$

显然每个格点的自旋向上或向下是任意的,因此这个基态实际上是高度简并的(简并度为2^N).对于固定的电子自旋,那么我们有N种方式移除一个电子或者添加一个电子.移除电子自然是在下Hubbard能带进行,而添加一个电子自然涉及的是能量增加U的上Hubbard能带.(如图14.24[55])

[54]一个基于辅助粒子形式的场论给出了BC-MIT在相变两边分别是费米液体和$U(1)$量子自旋液体时的普适行为.[Senthil,Theory of a continuous Mott transition in two dimensions,Phys.Rev.B **78**,045109(2008)]

[55][Phillips,Choy,Leigh,Mottness in high-temperature copper-oxide superconductors,Rep.Prog.Phys. **72**,036501(2009)]

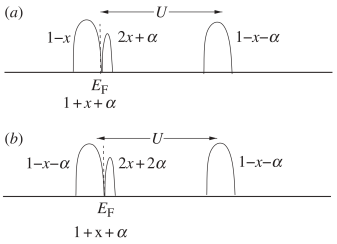


Figure 14.25: 一般情况下的掺杂Mott绝缘体的谱权重转移.

现在,考虑有一个空穴的情况,此时我们在下Hubbard带移除一个电子有$N-1$个方式,而在上hubbard带添加一个电子也有$N-1$种方式.根据状态守恒,还有两个状态,这两个状态对应在空穴处添加一个自旋上或者下的电子.从能量的角度来说,这两个状态位于在费米能附近.(如图14.24)这说明,当我们掺杂Mott绝缘体时,高能(上Hubbard带)的权重会自动转移到费米能附近,这就是电子谱权重转移.更一般的,如果我们掺杂空穴浓度为x,那么上Hubbard能带权重将会变为$1-x-\alpha$,下Hubbard带的权重为$1-x$,费米能附近谱权重转移产生的态(能隙间态)的权重为$2x+\alpha$.同时,能隙间态与下Hubbard之间会有等效的能隙打开,这可能对应实验上发现的赝能隙现象.[56]

数学上,Mott绝缘体的形成对应Green函数的零点,也就是自能函数在一定频率范围内对所有动量都发散的行为.既然自能发散,因而色散关系无法定义,这样就对应有能隙的绝缘体.关于掺杂Mott绝缘体的一个定量理论是Phillips组提出的电荷$2e$玻色子理论.[57]

关于掺杂Mott绝缘体的一个重要问题是Luttinger定理(求和规则)是否成立,也就是费米面所包围的体积与电子数密度成正比.最近的DQMC研究了Hubbard模型在高温($T/t=0.5$)时的费米面和Luttinger求和规则.[58]他们的主要结果总结在图14.26中.可以看到当电子密度$n>1.2$时,Luttinger规则近似满足,此时无相互作用时的费米面与电子谱函数最大值定出的费米面重合,这是典型的费米液体结果.同时,大掺杂时Hubbard能带消失,这称为Mott崩塌.但是,$n<1.2$时Luttinger 求和规则失效,电子主要填充在上Hubbard能带的中心以及Hubbard带边界附近的隙间态(高掺杂时成为准粒子能带),这时费米面是布里

[56] [Sakai, Motome,Imada,Evolution of Electronic Structure of Doped Mott Insulators: Reconstruction of Poles and Zeros of Green's Function,Phys.Rev.Lett. **102**,056404(2009);Phillips, Mottness collapse and T-linear resistivity in cuprate superconductors,Phil.Trans.R.Soc.A **369**,1574(2011)]

[57] 具体讨论可以参考综述[Phillips,Choy,Leigh,Mottness in high-temperature copper-oxide superconductors,Rep.Prog.Phys. **72**,036501(2009)]

[58] [Osborne,Paiva,Trivedi,Broken Luttinger theorem in the two-dimensional Fermi-Hubbard model,Phys.Rev.B**104**,235122(2021)]

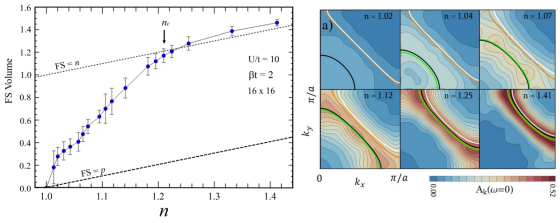


Figure 14.26: DQMC计算Hubbard模型在高温($T/t = 0.5$)时的Luttinger求和规则和费米面情况.

渊区中心附近的电子型费米面,并且掺杂的电子密度p并不等于Luttinger体积.[59]

Hubbard模型的运动方程与Mott相变

历史上,为了描述电子关联效应,Hubbard利用Green函数运动方程方法研究了Hubbard模型在顺磁态的性质.当然,由于运动方程实际上是无穷多个方程,因此为了使方程组封闭必须做截断,也就是忽略更高阶的方程,这一般称为Green函数运动方程的截断近似.这类近似已经广泛地用于除了关联电子模型系统,例如Kondo杂质模型,Anderson杂质模型,Hubbard模型以及周期Anderson模型.下面我们将采用这一方法研究Hubbard模型.[60]

我们首先写出单带Hubbard模型的明确形式:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma} c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}} c_{i\bar{\sigma}}.$$

对于这个模型,我们已经知道只有少数特殊参数的情况下有精确解.在这里我们先考虑两个可解的极限,即$U = 0$的无相互作用极限和$t_{ij} = 0$的零能带宽度极限(也称为原子极限).

$U = 0$的无相互作用极限

当相互作用$U = 0$时,系统化为无相互作用的紧束缚模型,可以通过傅里叶变换得到动量空间对角化的哈密顿量:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} = -\mu \sum_{i\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma} - t \sum_{\langle ij\rangle\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + \ldots = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) c^{\dagger}_{k\sigma} c_{k\sigma}$$

ε_k是能带色散,μ是化学势.

[59]因为掺杂导致谱权重从高能的Hubbard带转移至费米能附近,因此会出现费米面包围的体积大于掺杂电子的情况.

[60]Hubbard,Proc.R.Soc.London,Ser.A**276**,238(1963)

$t_{ij}=0$的零能带宽度极限

当$t_{ij}=0$时,能带色散$\varepsilon_k=0$,系统能带宽度为零,此时有

$$H=-\mu\sum_{i\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}+\frac{U}{2}\sum_{i\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}c_{i\bar{\sigma}}^{\dagger}c_{i\bar{\sigma}}.$$

定义单粒子推迟Green函数$G_{ij}^{\sigma}(\omega)\equiv\langle\langle c_{i\sigma}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}$, 其Green函数运动方程是

$$\omega\langle\langle c_{i\sigma}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}=\langle[c_{i\sigma},c_{j\sigma}^{\dagger}]_{+}\rangle+\langle\langle[c_{i\sigma},H]|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}.$$

利用对易关系

$$[c_{i\sigma},H]=-\mu c_{i\sigma}+Uc_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}$$

$n_{i\bar{\sigma}}=c_{i\bar{\sigma}}^{\dagger}c_{i\bar{\sigma}}$以及

$$[c_{i\sigma},c_{j\sigma}^{\dagger}]_{+}=\delta_{ij},$$

我们得到

$$\omega\langle\langle c_{i\sigma}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}=\delta_{ij}-\mu\langle\langle c_{i\sigma}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}+U\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}.$$

定义Green函数$\Gamma_{ij}^{\sigma}(\omega)=\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}$,其运动方程是

$$\omega\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}=\langle[c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}},c_{j\sigma}^{\dagger}]_{+}\rangle+\langle\langle[c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}},H]|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}.$$

既然

$$\langle[c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}},c_{j\sigma}^{\dagger}]_{+}\rangle=\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij}$$

同时

$$[c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}},H]=[c_{i\sigma},H]n_{i\bar{\sigma}}+c_{i\sigma}[n_{i\bar{\sigma}},H]=[c_{i\sigma},H]n_{i\bar{\sigma}}=(-\mu c_{i\sigma}+Uc_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}})n_{i\bar{\sigma}}=(-\mu+U)c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}},$$

我们发现

$$\omega\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}=\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij}+(-\mu+U)\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega},$$

因此有

$$\Gamma_{ij}^{\sigma}(\omega)=\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c_{j\sigma}^{\dagger}\rangle\rangle_{\omega}=\frac{\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij}}{\omega-(-\mu+U)},$$

$$\omega G_{ij}^{\sigma}(\omega)=\delta_{ij}-\mu G_{ij}^{\sigma}(\omega)+U\Gamma_{ij}^{\sigma}(\omega).$$

整理可得

$$G_{ij}^{\sigma}(\omega)=\delta_{ij}\left[\frac{1-\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle}{\omega+\mu}+\frac{\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle}{\omega+\mu-U}\right].$$

可以看到,Green函数由两部分构成,即$\omega=-\mu$和$\omega=-\mu+U$的两个能级,[61]相应的权重分别是$1-\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle$和$\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle$. 为了计算未知的粒子数$\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle=n_{\sigma}$,由推迟Green函数的谱定理可得

$$\begin{aligned}
n_{\sigma} &= \frac{1}{N_s}\sum_i\langle c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}\rangle \\
&= \frac{1}{N_s}\sum_i\int d\omega f_F(\omega)[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G_{ij}^{\sigma}(\omega+i0^{+})] \\
&= \frac{1}{N_s}\sum_i[(1-n_{\sigma})f_F(-\mu)+n_{\sigma}f_F(-\mu+U)] \\
&= (1-n_{\sigma})f_F(-\mu)+n_{\sigma}f_F(-\mu+U)
\end{aligned}$$

这说明加入相互作用确实会导致原子极限下能级的劈裂(能级间距为U),并且注意到能级的权重与占据数有关,则会体现了同一个格点内电子之间的关联效应.我们可以预期计入有限但比较小的格点间跃迁应该会使这两个能级扩展为两个能带,并且能带之间能隙依然有限.

双占子与空穴子

为了进一步讨论,注意到电子算符可以分解为两个部分:

$$c_{i\sigma}^{\dagger}=c_{i\sigma}^{\dagger}n_{i\bar{\sigma}}+c_{i\sigma}^{\dagger}(1-n_{i\bar{\sigma}}) \tag{14.191}$$

显然,$c_{i\sigma}^{\dagger}n_{i\bar{\sigma}}$的作用是在存在$\bar{\sigma}$电子的基础上再增加一个自旋为$\sigma$的电子以使得$i$格点双占据,因此我们可以称其为双占子(doublon)并用算符$d_{i\sigma}^{\dagger}=c_{i\sigma}^{\dagger}n_{i\bar{\sigma}}$表示.同理,我们定义$h_{i\sigma}^{\dagger}=c_{i\sigma}(1-n_{i\bar{\sigma}})$,其表示在不存在$\bar{\sigma}$电子的基础上再减少一个自旋为$\sigma$的电子以使得$i$格点空占据,我们称$h_{i\sigma}$为空穴子(holon).这样,我们发现电子算符可以分解为双占子和空穴子:

$$c_{i\sigma}^{\dagger}=d_{i\sigma}^{\dagger}+h_{i\sigma}. \tag{14.192}$$

这说明产生一个电子激发相当于湮灭一个空穴和生成一个双占态.容易得到如下的一些列反对易关系:

$$\begin{aligned}
&\{d_{i\sigma},d_{i\sigma'}^{\dagger}\}=\delta_{\sigma\sigma'}n_{i\bar{\sigma}} \quad \{h_{i\sigma},h_{i\sigma'}^{\dagger}\}=\delta_{\sigma\sigma'}(1-n_{i\bar{\sigma}}) \\
&\{d_{i\sigma},h_{i\sigma'}^{\dagger}\}=\{h_{i\sigma},d_{i\sigma'}\}=0
\end{aligned} \tag{14.193}$$

[61]直接用占据数$|0\rangle,|\uparrow\rangle,|\downarrow\rangle,|\uparrow\downarrow\rangle$为基矢可以看到哈密顿量矩阵是对角的且对角元分别为$0,-\mu,-\mu,-2\mu+U$.利用这些对角元并结合Green函数的谱分解可验证Green函数的正确性.

这样

$$c^\dagger_{i\sigma}c_{i\sigma} = (d^\dagger_{i\sigma} + h_{i\sigma})(d_{i\sigma} + h^\dagger_{i\sigma}) = d^\dagger_{i\sigma}d_{i\sigma} + h_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + d^\dagger_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + h_{i\sigma}d_{i\sigma} \quad (14.194)$$

前两项代表双占据(双占子)和空占据(空穴子)对电子占据数的贡献,而电子单占据则由双占子和空穴子的混合表示($d^\dagger h^\dagger + hd$).注意到$d^\dagger_{i\sigma}d_{i\sigma} = c^\dagger_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}c_{i\sigma}n_{i\bar\sigma} = n_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}$ 而$h_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} = n_{i\sigma} - n_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}$,我们可以把零能带宽度极限哈密顿量改写为

$$\begin{aligned}
H &= -\mu\sum_{i\sigma} c^\dagger_{i\sigma}c_{i\sigma} + \frac{U}{2}\sum_{i\sigma} n_{i\sigma}n_{i\bar\sigma} \\
&= -\mu\sum_{i\sigma}(d^\dagger_{i\sigma}d_{i\sigma} + h_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + d^\dagger_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + h_{i\sigma}d_{i\sigma}) + \frac{U}{2}\sum_{i\sigma} d^\dagger_{i\sigma}d_{i\sigma} \\
&= -\mu\sum_{i\sigma}(d^\dagger_{i\sigma}d_{i\sigma} + h_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + d^\dagger_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + h_{i\sigma}d_{i\sigma}) + \frac{U}{2}\sum_{i\sigma}(n_{i\sigma} - h_{i\sigma}d^\dagger_{i\sigma}) \\
&= \left(-\mu + \frac{U}{2}\right)\sum_{i\sigma}(d^\dagger_{i\sigma}d_{i\sigma} + h_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + d^\dagger_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma} + h_{i\sigma}d_{i\sigma}) + \frac{U}{4}\sum_{i\sigma}(d^\dagger_{i\sigma}d_{i\sigma} - h_{i\sigma}h^\dagger_{i\sigma}) \\
&= \sum_{i\sigma}\begin{pmatrix} d^\dagger_{i\sigma} & h_{i\sigma}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\mu + \frac{U}{2} + \frac{U}{4} & -\mu + \frac{U}{2} \\ -\mu + \frac{U}{2} & -\mu + \frac{U}{2} - \frac{U}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} d^\dagger_{i\sigma} \\ h_{i\sigma}\end{pmatrix} \qquad (14.195)
\end{aligned}$$

当$\mu = U/2$时,也就是半满对称情况,上式给出双占子和空穴子的能量是$U/4$.这可以和对称情况的Hubbard能$U(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2})$的本征值$\pm\frac{U}{4}$比较.($U/4$对应双占和空占,$-U/4$对应单占态)

$t \neq 0$的运动方程

当$t \neq 0$时,我们有

$$\begin{aligned}
[c_{i\sigma}, H] &= \sum_j t_{ij}c_{j\sigma} + Uc_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}, \\
[n_{i\bar\sigma}, H] &= \sum_j t_{ij}(c^\dagger_{i\bar\sigma}c_{j\bar\sigma} - c^\dagger_{j\bar\sigma}c_{i\bar\sigma}), \\
[c_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}, H] &= c_{i\sigma}[n_{i\bar\sigma}, H] + [c_{i\sigma}, H]n_{i\bar\sigma},
\end{aligned}$$

因此

$$[c_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}, H] = \sum_j t_{ij}(c^\dagger_{i\bar\sigma}c_{j\bar\sigma} - c^\dagger_{j\bar\sigma}c_{i\bar\sigma})c_{i\sigma} + \left(\sum_j t_{ij}c_{j\sigma} + Uc_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}\right)n_{i\bar\sigma}.$$

这样关于$\langle\langle c_{i\sigma}|c^\dagger_{j\sigma}\rangle\rangle_\omega$的运动方程是

$$\omega\langle\langle c_{i\sigma}|c^\dagger_{j\sigma}\rangle\rangle_\omega = \delta_{ij} + \sum_l t_{il}\langle\langle c_{l\sigma}|c^\dagger_{j\sigma}\rangle\rangle_\omega + U\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar\sigma}|c^\dagger_{j\sigma}\rangle\rangle_\omega \qquad (14.196)$$

而$\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$的运动方程是

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} &= \langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij}+U\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}+\sum_{l}t_{il}\langle\langle c_{l\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}\\ &+ \sum_{l}t_{il}\langle\langle(c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}}-c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}})c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}\end{aligned}$$

显然上式后两项的Green函数又会涉及更高阶的Green函数进而导致一个无穷多的方程组.

Hartree-Fock近似

如果我们做如下近似

$$\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}\simeq\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\langle\langle c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega},$$

那么可以得到

$$\omega\langle\langle c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}=\delta_{ij}+\sum_{l}t_{il}\langle\langle c_{l\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}+U\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\langle\langle c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}\qquad(14.197)$$

也就是有

$$(\omega-U\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle)\langle\langle c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}=\delta_{ij}+\sum_{l}t_{il}\langle\langle c_{l\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}\qquad(14.198)$$

假设Green函数具有平移不变性,那么有$\langle\langle c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}=\frac{1}{N_s}\sum_k e^{ik(R_i-R_j)}\langle\langle c_{k\sigma}|c^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$,$\langle\langle c_{k\sigma}|c^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$是动量空间的Green函数,同时$\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle=n_{\bar{\sigma}}$是空间均匀的粒子数.[62]因此我们发现

$$(\omega-Un_{\bar{\sigma}})\frac{1}{N_s}\sum_k e^{ik(R_i-R_j)}\langle\langle c_{k\sigma}|c^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}=\frac{1}{N_s}\sum_k e^{ik(R_i-R_j)}+\sum_l t_{il}\frac{1}{N_s}\sum_k e^{ik(R_l-R_j)}\langle\langle c_{k\sigma}|c^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$$

让我们在右边添加因子$e^{ik(R_i-R_i)}$,这样有$e^{ik(R_l-R_j)}=e^{ik(R_i-R_j)}e^{ik(R_l-R_i)}$而色散关系$\varepsilon_k=\sum_l t_{il}e^{ik(R_l-R_i)}$,[63] 那么有

$$(\omega-Un_{\bar{\sigma}})\langle\langle c_{k\sigma}|c^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}=1+(\varepsilon_k-\mu)\langle\langle c_{k\sigma}|c^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}\Rightarrow\langle\langle c_{k\sigma}|c^{\dagger}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}=\frac{1}{\omega-(\varepsilon_k-\mu)-Un_{\bar{\sigma}}}$$

[62]设平移算符$T_{\alpha=x,y,z}$分别沿着$\alpha=x,y,z$方向的平移单位距离,这样$T_\alpha|j\rangle=|j+\hat{\alpha}\rangle$,这说明平移算符把电子位于$j$格点的状态$|j\rangle$平移至$j+\hat{\alpha}$格点的状态$|j+\hat{\alpha}\rangle$.注意到电子湮灭算符$\hat{c}_j$可以表示为真空态$|vac\rangle$和$|j\rangle$之间的投影,即有$\hat{c}_j=|vac\rangle\langle j|$, 因此$T_xc_jT_x^{-1}=T_x|vac\rangle\langle j|T_x^{-1}=|vac\rangle\langle j+x|=c_{j+\hat{x}}$.同理有$T_xc_jT_y^{-1}=c_{j+\hat{y}}$,$T_xc_jT_x^{-1}=T_z|vac\rangle\langle j|T_z^{-1}=c_{j+\hat{z}}$.这样$\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle=\langle T_x^{-1}T_xc_{i\bar{\sigma}}T_x^{-1}T_xc_{i\bar{\sigma}}T_x^{-1}T_x\rangle=\langle T_x^{-1}c_{i+\hat{x},\bar{\sigma}}c_{i+\hat{x},\bar{\sigma}}T_x\rangle$.注意到热力学平均$\langle...\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}(...)$,由于求迹操作$\mathrm{Tr}(ABC)=\mathrm{Tr}(CAB)=\mathrm{Tr}(BCA)$,同时体系具有平移不变性意味着$[T_\alpha,H]=0$,因此$\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle=\langle n_{i+\hat{x},\bar{\sigma}}\rangle$.这说明具有平移不变性的体系其格点依赖的占据数确实是与格点位置无关.

[63]对于平移不变的体系有$[T_\alpha,H]=0$也就是$T_\alpha HT_\alpha^{-1}=H$,代入Hubbard模型可知$\sum_{ij\sigma}t_{ij}c^{\dagger}_{i+\hat{\alpha},\sigma}c_{j+\hat{\alpha},\sigma}+\frac{U}{2}\sum_{i\sigma}c^{\dagger}_{i+\hat{\alpha},\sigma}c_{i+\hat{\alpha},\sigma}c^{\dagger}_{i+\hat{\alpha},\bar{\sigma}}c_{i+\hat{\alpha},\bar{\sigma}}=\sum_{ij\sigma}t_{ij}c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}+\frac{U}{2}\sum_{i\sigma}c^{\dagger}_{i\sigma}c_{i\sigma}c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}}$. 这样左右两边相等可以通过在左边令$i\to i-\alpha,j\to j-\alpha$实现,则有$t_{i-\hat{\alpha},j-\hat{\alpha}}=t_{ij}$.不断作用更多的平移算符可以实现$t_{ij}=t_{i-j,0}\equiv t_{i-j}$,这说明绝对的格点位置不重要,只有相对位置重要.因此$\sum_l t_{il}e^{ik(R_l-R_i)}=\sum_l t_{i-l}e^{-ik(R_i-R_l)}=\sum_\delta t_\delta e^{-ikR_\delta}\equiv\varepsilon_k$.

此时得到的Green函数就是Hartree-Fock近似的结果.这个结果表明在平局场意义下,一个自旋为σ 的电子会感受到自旋取向相反的电子对它的大小为U的排斥作用.当然这个作用并不足以产生直接的能带劈裂.

Hubbard-I近似

让我们重新写出Green函数运动方程:[64]

$$\begin{aligned}
&\omega\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = \langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij} + U\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} + \sum_{l} t_{il}\langle\langle c_{l\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \\
+ &\sum_{l} t_{il}\langle\langle (c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}} - c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}})c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \\
= &\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij} + (U-\mu)\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} + \sum_{l\neq i} t_{il}\langle\langle c_{l\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} + \sum_{l} t_{il}\langle\langle (c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}} - c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}})c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}
\end{aligned}$$

为了截断运动方程得到封闭的形式,Hubbard采用如下近似,这也称为Hubbard-I近似[65]

$$\begin{aligned}
&\langle\langle c_{l\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \simeq \langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\langle\langle c_{l\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \\
&\langle\langle (c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}} - c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}})c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = (\langle c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}}\rangle - \langle c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}}\rangle)\langle\langle c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}
\end{aligned} \tag{14.199}$$

这里近似的主要精神是仅保留不超过两个格点的关联而忽略三个以及三个格点以上的关联,实际操作时就是把涉及多个格点的Green函数直接分解为两个格点的Green函数以及其他平均值,这强调了Hubbard相互作用的局域特性.此外哈密顿量的厄密性要求$\langle H\rangle$为实数,这样平均值$\langle c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}}\rangle, \langle c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}}\rangle$为实数,同时$\langle c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}}\rangle = (\langle c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}}\rangle)^{*}$,这样$\langle c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}}\rangle = \langle c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}}\rangle$, 显然有$\langle c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}}\rangle - \langle c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}}\rangle = 0$,那么

$$\sum_{l}(\langle c^{\dagger}_{i\bar{\sigma}}c_{l\bar{\sigma}}\rangle - \langle c^{\dagger}_{l\bar{\sigma}}c_{i\bar{\sigma}}\rangle)\langle\langle c_{i\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = 0 \tag{14.200}$$

这样有

$$\omega\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \simeq \langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij} + (U-\mu)\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} + \sum_{l\neq i} t_{il}\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\langle\langle c_{l\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$$

所以

$$(\omega+\mu-U)\langle\langle c_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = \langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\delta_{ij} + \sum_{l\neq i} t_{il}\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle\langle\langle c_{l\sigma}|c^{\dagger}_{j\sigma}\rangle\rangle_{\omega},$$

这样得到

$$\Gamma^{\sigma}_{ij}(\omega) = \frac{\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle}{\omega+\mu-U}[\delta_{ij} + \sum_{l\neq i} t_{il}G^{\sigma}_{lj}(\omega)],$$

[64]右边第三和第四项分别对应散射修正和共振变宽效应.

[65]Hubbard,Proc.R.Soc.London,Ser.A**276**,238(1963)

以及

$$\begin{aligned}\omega G^{\sigma}_{ij}(\omega) &= \delta_{ij}+\sum_{l} t_{il}G^{\sigma}_{lj}(\omega)+U\frac{\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle}{\omega+\mu-U}[\delta_{ij}+\sum_{l\neq i} t_{il}G^{\sigma}_{lj}(\omega)] \\ &= -\mu G^{\sigma}_{ij}(\omega)+\left[1+U\frac{\langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle}{\omega+\mu-U}\right](\delta_{ij}+\sum_{l\neq i} t_{il}G^{\sigma}_{lj}(\omega))\end{aligned}$$

假设体系具有平移不变性并对上式两边做傅里叶变换可得

$$\omega G^{\sigma}_{k}(\omega)=-\mu G^{\sigma}_{k}(\omega)+\left[1+\frac{Un_{\bar{\sigma}}}{\omega+\mu-U}\right](1+\varepsilon_k G^{\sigma}_{k}(\omega)) \tag{14.201}$$

即有

$$\boxed{G^{\sigma}_{k}(\omega)=\frac{1+\frac{Un_{\bar{\sigma}}}{\omega+\mu-U}}{w+\mu-\varepsilon_k(1+\frac{Un_{\bar{\sigma}}}{\omega+\mu-U})}.}$$

实际上,如果我们把$t=0$时零带宽极限下的Green函数记为$G^{\sigma}_{0}(\omega)=\frac{1-n_{\bar{\sigma}}}{\omega+\mu}+\frac{n_{\bar{\sigma}}}{\omega+\mu-U}$, 那么上面的Green函数可以表示为

$$G^{\sigma}_{k}(\omega)=\frac{1}{(G^{\sigma}_{0}(\omega))^{-1}-\varepsilon_k} \tag{14.202}$$

这个形式可以看作是最低阶强耦合展开无穷求和的结果.[66]物理上,我们可以把上式看作是自旋为σ的传导电子在一个由$\bar{\sigma}$电子形成的等效的合金媒介质(二元无序势)中的运动,合金媒介质由成分比例为$1-n_{\bar{\sigma}}$,能量为$-\mu$以及成分比例为$n_{\bar{\sigma}}$,能量为$-\mu+U$的原子组成.这个解释就是Hubbard的合金类比(alloy analogy).[67]

- 定量上,如果关注于自旋向上电子而假设向下电子没有动能部分($t=0$),那么原始的Hubbard模型简化为$H=\sum_{ij}t_{ij}c^{\dagger}_{i\uparrow}c_{j\uparrow}+U\sum_i c^{\dagger}_{i\uparrow}c_{i\uparrow}c^{\dagger}_{i\downarrow}c_{i\downarrow}$. 注意到$n_{i\downarrow}=c^{\dagger}_{i\downarrow}c_{i\downarrow}$与$H$对易因而是系统的守恒量,这样如果我们取$n_{i\downarrow}$的本征值$0,1$,($\{n_{i\downarrow=}=0,1\}$)那么自旋向上电子就等效于在一个取值为$0,1$的合金媒介质(二元无序势)中运动.最后,重新定义$c_{i\uparrow}=c_i, n_{i\downarrow}=n_i$,那么这里的模型就是著名的Falicov-Kimball模型$H=\sum_{ij}t_{ij}c^{\dagger}_{i}c_j+U\sum_i c^{\dagger}_{i}c_i n_i$,其基本性质例如Mott 相变和非费米液体行为都可通过经典蒙特卡洛严格模拟.[68]

  注意到Green函数$G^{\sigma}_{k}(\omega)$的极点位置决定准粒子能谱

$$E^{\pm}_{k\sigma}=\frac{1}{2}[\varepsilon_k+U\pm\sqrt{(\varepsilon_k-U)^2+4\varepsilon_k U n_{\bar{\sigma}}}]-\mu,$$

同时,可以把Green函数写成两个能带贡献的叠加,即

$$G^{\sigma}_{k}(\omega)=\frac{\omega+\mu-U(1-n_{\bar{\sigma}})}{(\omega-E^{+}_{k\sigma})(\omega-E^{-}_{k\sigma})}=\frac{(A^{+}_{k\sigma})^2}{\omega-E^{+}_{k\sigma}}+\frac{(A^{-}_{k\sigma})^2}{\omega-E^{-}_{k\sigma}},$$

[66]以单格点的U和μ项为无微扰项,以跃迁项t为微扰,考虑所有涉及同一格点的跃迁并对其做类似费曼图的求和.

[67]Hubbard,Proc.R.Soc.London,Ser.A**281**,401(1964).

[68]Maska,Czajka,Phys.Rev.B**74**,035109(2006).既然FK模型是Hubbard模型的极限情况,那么FK 模型的很多性质也应在Hubbard 模型中得到反映.

这里定义了相干因子

$$(A^{+}_{k\sigma})^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\varepsilon_k - U + 2Un_{\bar\sigma}}{\sqrt{(\varepsilon_k-U)^2+4\varepsilon_k U n_{\bar\sigma}}}\right)$$
$$(A^{-}_{k\sigma})^2 = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\varepsilon_k - U + 2Un_{\bar\sigma}}{\sqrt{(\varepsilon_k-U)^2+4\varepsilon_k U n_{\bar\sigma}}}\right).$$

给定总电子数$n_c = n_\uparrow + n_\downarrow$,可以求解以下的粒子数方程来定出化学势$\mu$

$$n_\sigma = \frac{1}{N_s}\sum_k [(A^{+}_{k\sigma})^2 f_F(E^{+}_{k\sigma}) + (A^{-}_{k\sigma})^2 f_F(E^{-}_{k\sigma})].$$

我们注意到两支能谱之间的直接能隙为$\Delta E = E^{+}_{k\sigma} - E^{-}_{k\sigma} = \sqrt{(\varepsilon_k-U)^2+4\varepsilon_k U n_{\bar\sigma}}$,对于半填满的顺磁情况,$n_\uparrow = n_\downarrow = 1/2$.此时直接能隙简化为$\Delta E = \sqrt{\varepsilon_k^2+U^2}$,这说明只要$U > 0$就会有有限的直接能隙.而系统在半满时是否为绝缘体则依赖于其间接能隙是否为零,也就是下能带的最大处与上能带的最低处的能量差是否为零.图14.27显示Hubbard-I 近似下的能带和态密度.可以看到,相比于无相互作用时的单个能带,计入相互作用导致两个能带的形成,即上下Hubbard能带.如果系统半填满,那么电子恰好填满下能带,因此系统整体在零温时是绝缘体,成为Mott绝缘体.

物理上,两支Hubbard能带也可以看成是双占子与空穴子的叠加,考虑如下双占子与空穴子表示的动量空间的半满对称哈密顿量出发:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k\sigma}\varepsilon_k(d^\dagger_{k\sigma}d_{k\sigma} + h_{-k\sigma}h^\dagger_{-k\sigma} + d^\dagger_{k\sigma}h^\dagger_{-k\sigma} + h_{-k\sigma}d_{k\sigma}) + U\sum_{i\sigma}(d^\dagger_{k\sigma}d_{k\sigma} - h_{-k\sigma}h^\dagger_{-k\sigma}) \\ &= \sum_{k\sigma}\begin{pmatrix} d^\dagger_{k\sigma} & h_{-k\sigma}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_k+U & \varepsilon_k \\ \varepsilon_k & \varepsilon_k - U\end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_{k\sigma} \\ h^\dagger_{-k\sigma}\end{pmatrix} \end{aligned} \tag{14.203}$$

显然,类似于BCS型超导配对哈密顿量,系统的准粒子是$d, h^\dagger$的相干叠加,其能谱可由对角化上式的2×2矩阵给出,即$\varepsilon_k \pm \sqrt{\varepsilon_k^2+U^2}$.注意到反对易关系$\{d_{i\sigma}, d^\dagger_{i\sigma'}\} = \delta_{\sigma\sigma'}n_{i\bar\sigma}, \{h_{i\sigma}, h^\dagger_{i\sigma'}\} = \delta_{\sigma\sigma'}(1-n_{i\bar\sigma})$,这样在半满时我们把$n_{i\bar\sigma}$用1/2近似,并且为了得到标准的反对易关系$\{c_\alpha, c^\dagger_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}$,可以在$d, h$定义时添加上$1/\sqrt{2}$,这样准粒子能谱成为$\frac{1}{2}(\varepsilon_k \pm \sqrt{\varepsilon_k^2+U^2})$,这与运动方程的Hubbard-I近似计算结果吻合.

- 注意到Hubbard能带是相互作用导致的多体能带,与能带绝缘体的能带不同.其最大的差异是谱权重$A^{\pm}_{k\sigma}$依赖于电子占据情况,而能带绝缘体能带与电子占据情况完全无关.换句话说,Mott 绝缘体中电子要填充能带会受到已填充电子的影响,这体现了相互作用效应.[4]
- 存在能隙$\Delta \sim U$,整个能带的宽度$W = 2D$没有改变.

但是,Hubbard-I近似有四个重要缺陷:

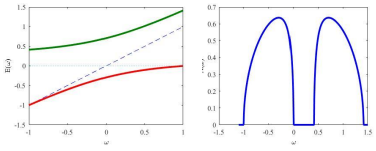


Figure 14.27: Hubbard-I近似下的能带和态密度$N(\omega)$,参数选取为$D=1, U=1$和$n_c=1.0$.

1. 无论U多小总在费米能附近打开能隙;
2. 若计算每个Hubbard子能带的粒子数,每个子带不会显示每个态包含一个电子的性质,这样Hubbard-I近似解不满足Luttinger定理;(其实是Mott物理的正确反映 [4])
3. 粒子具有无限大的寿命,(自能虚部为零)这对于任何相互作用系统都不现实;
4. Hubbard-I近似在高温下$T \sim t$是合适的近似但当温度进一步降低后就无法解释数值模拟中的四带结构,这里的原因是Hubbard-I近似只明确计入了电子自由度的关联而完全忽略了自旋关联. [69]

为了克服这些缺陷,我们需要采用更高级的近似,例如Hubbard-III近似.[70]基于合金类比,Hubbard指出电子会受到合金媒介质的(无序)散射而导致粒子具有有限寿命,此外作为合金媒介质的电子本身也有动力学,这会导致能带宽度变大,也就是能带变宽效应.Hubbard-III近似的结果:

- 半填满下Mott金属-绝缘体相变发生在$U/D=\sqrt{3}=1.732$处;
- 费米能处并没有出现Kondo类型的共振峰,因此为了给出Mott临界点的描述需要超越Hubbard-III近似.

评论:Mott临界性

最后,让我们从临界现象的观点出发来简要讨论Mott相变.介于这个问题的复杂性,我们首先来看典型的实验体系,也就是有机Mott绝缘体材料的实验结

[69] Grober,Eder,Hanke,Phys.Rev.B**62**,4336(2000);Dorneich,Zacher,Grober,Eder,Phys.Rev.B**61**,12816(2000). 采用双占子与空穴子表示并进一步考虑近邻的自旋激发($b_{i\uparrow}=\sum_{j\in NNN}(c_{i\uparrow}S_j^z+c_{i\downarrow}S_j^-)$)就可计入低能自旋涨落效应对单粒子能谱的影响,由此即可得到四带结构.如果模型仅有电荷自由度,例如Falicov-Kimball模型,那么Hubbard-I近似是强耦合时可靠的近似.

[70] Hubbard,Proc.R.Soc.London,Ser.A **281**,401(1964)

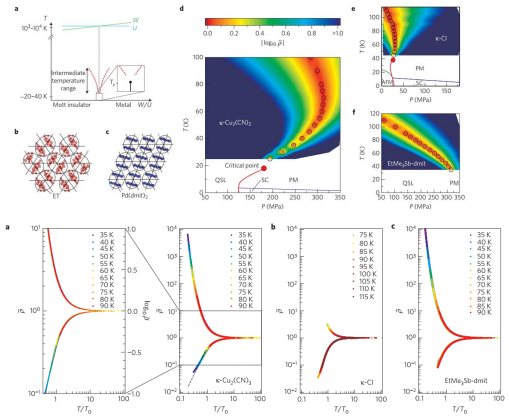


Figure 14.28: 有机Mott绝缘体材料的相图和电阻的标度行为.

果.如图14.28所示,[71]这类有机层状化合物看做是处于(各向异性)三角晶格上,其压力-温度相图表明体系低温下存在从金属性的相(金属态,超导态)到Mott绝缘相(反铁磁态,自旋液体)的一级相变,而在一级相变的临界终点以上的较大范围内存在金属到绝缘体的过度区域,这个过度区域实际上是一个临界区域,通常称为Mott临界区.Mott临界区的基本特性是它的电阻律满足相变问题中常见的标度行为.(具体形式会在下面的DMFT理论中具体说明)

- 实验上发现低温下$EtMe_3Sb$-dmit的自旋液体态有费米液体类似的热容$C_V \sim k_B N(0)T$,磁化$\chi \sim N(0)\mu_B^2$和热导$\kappa \sim C_V$.这些结果与之前隶转子平均场中的自由费米子(自旋子)哈密顿量H_f定性上一致但与考虑$U(1)$规范场涨落后的结果不一致($C_V \sim T^{2/3}$, $\kappa/T \sim T^{-2/3}$).这似乎说明由于某种原因规范场的效应被抑制只体现出自由自旋子的贡献;[72]

- 关于有机层状化合物的物理性质和理论解释可以参考综述[Powell,McKenzie,Quantum frustration in organic Mott insulators: from spin liquids to unconventional superconductors,Rep.Prog.Phys. **74**,056501(2011)];

- 原则上采用光谱技术例如ARPES可以探测自旋液体态的电子谱函数,这可以区别于能带绝缘体.[73]

[71] [Furukawa et al.,Quantum criticality of Mott transition in organic materials,Nature Physics **11**,221(2015)]

[72] 把$U(1)$规范场破缺到Z_2或Z_4可能有助于问题的解决[Barkeshli,Yao,Kivelson,Gapless spin liquids: Stability and possible experimental relevance,Phys.Rev.B **87**,140402(R)(2013)]

[73] [Tang,Fisher,Lee,Low-energy behavior of spin-liquid electron spectral functions,Phys.Rev.B **87**,045119(2013)]

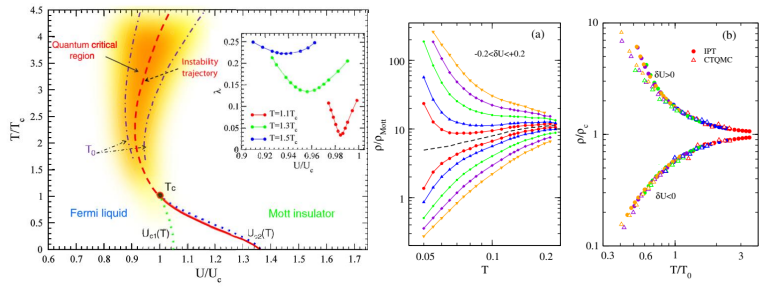


Figure 14.29: 半满Hubbard模型DMFT计算的相互作用-温度相图和电阻律的标度行为.T_c是一级相变的临界终点,$U_{c1}(T), U_{c2}(T)$是DMFT中金属和绝缘态解共存区域的分界线,T_0是特征温度.(a)显示了绝缘相到金属相电阻率的逐渐过渡行为;(b)给出了IPT和CTQMC为杂质求解器情况下电阻率在绝缘和金属态的标度行为.

动力学平均场的结果

为了理解这类临界行为或者说标度行为,人们一般从简单的玩具模型,即Hubbard模型出发.首先,一维Hubbard模型有Bethe ansatz精确解,这个精确解表明一维不存在相互作用U驱动的Mott相变,但是存在化学势或者粒子密度驱动的金属-Mott相变.这个相变的普适类是自由费米子系统的Lifshitz相变类.[3]更高维度的Hubbard模型目前没有发现严格解,但是在无穷维度极限下,动力学平均场框架可以给出Hubbard模型的精确行为.

图14.29显示了相互作用驱动的Mott相变的理论结果,这里给出的是半满Hubbard模型DMFT计算的相互作用-温度相图和电阻律的标度行为. [74]可以看到这个相图与有机Mott 绝缘体系统相图大体上的相似性.(理论中调节相互作用强度等价于实验中调节压力)DMFT理论计算发现电阻率的标度行为可以用如下公式描述:[75]

$$\rho(T,\delta U)=\rho_c(T)f\left(\frac{T}{T_0(\delta U)}\right), \tag{14.204}$$

这里电阻率ρ是温度T和相互作用U的函数,$\rho_c(T)\sim T$表示温度线性依赖的电阻率.$f(x)$是无量纲化的标度函数,通常要求$f(x\to\infty)$时为常数而$f(x\to 0)$时抵

[74][Terletska et al.,Quantum Critical Transport near the Mott Transition,Phys.Rev.Lett. **107**,026401(2011);Vucicevic et al.,Finite-temperature crossover and the quantum Widom line near the Mott transition,Phys.Rev.B **88**,075143(2013)]

[75]动力学磁化率在Mott临界区也具有标度行为,即ω/T标度.[Dasari et al.,Quantum critical local spin dynamics near the Mott metal-insulator transition in infinite dimensions,Phys.Rev.B **95**,165105(2017)]

消因子$\rho_c(T)$的温度依赖.(在这里有$f(x\to 0)\sim 1/x)\delta U=U-U^*(T)$是相对于不稳定轨迹$U^*(T)$的偏离,可以看作是距离量子临界点的偏离在有限温度的推广.$T_0(\delta U)\sim|\delta U|^{z\nu}$表示相互作用依赖的特征温度,$T\gg T_0$时体系进入Mott临界区.拟合DMFT的数据可知临界指数$z\nu\simeq 0.56-0.66$,与之相比,有机Mott绝缘体实验发现$z\nu=0.48,0.62,0.68$(分别对应$\kappa-\mathrm{Cl}$,$\kappa-\mathrm{Cu_2(CN)_3}$),因此:

- 一些典型的有机Mott绝缘体材料很符合DMFT得到的电阻标度行为且临界指数$z\nu$也很接近;
- Mott相变的原型化合物,也就是Cr掺杂的$\mathrm{V_2O_3}$的电阻也有类似DMFT的标度行为.[76]

同时这可以说明实验体系中的高温Mott临界区物理由局域量子/经典涨落所控制而非低温下的自旋液体或超导体的空间涨落.(DMFT仅计入局域涨落)

对于偏离半满的Hubbard模型,图14.30总结了主要的结果,特别是电阻率依然具有标度形式:[77]

$$\rho(T)=\rho_{MIR}[1+C\delta^{-1/z\nu}(T-K\delta)] \tag{14.205}$$

这里δ是相对于半满的掺杂浓度,ρ_{MIR}是Mott-Ioffe-Regel极限时的电阻,可理解为是电子平均自由程等于晶格间距时的电阻,通常认为是金属系统可以拥有的最大电阻.[78]($C\simeq 0.69, z\nu=1.35, K=1.97$.)

同时,图14.30(c)显示掺杂的系统可以划分为三个区域,即低温的费米液体区,中间温度的准粒子存在但电阻行为偏离T^2的区域,[79] 以及高温的临界区域(高温区也叫做坏金属区以强调其超过MIR极限).进入高温区域的温度估计为$T_{MIR}=\delta D$,而费米液体温度为$T_{FL}=0.01T_{MIR}$.

连续Mott相变

目前来看,连续Mott相变在$d>1$的关联电子系统中是否存在仍然是没有解决的重要问题,这即涉及铜氧化物高温超导体研究中流行的掺杂驱动的Mott临界性观点,也与有机化合物在压力下的金属–绝缘体相变以及多带系统(例如铁基超导体和重费米子化合物)的轨道选择Mott相变紧密相关.

---

[76] [Limelette et al.,Universality and Critical behavior at the Mott Transition,Science **302**,89(2003)]

[77] [Vucicevic et al.,Bad-Metal Behavior Reveals Mott Quantum Criticality in Doped Hubbard Models,Phys.Rev.Lett. **114**,246402(2015)]

[78] 简单金属/合金在高温时的饱和电阻率满足MIR极限,例如La,Ti,$\mathrm{Nb_3Ge}$,$\mathrm{Ti_{1-x}Al_x}$而强关联材料如铜氧化物却会出现超过这个极限的情况,(重费米子金属$\mathrm{CeAl_3}$,$\mathrm{UPt_3}$等倒是显示电阻饱和)这些超过MIR极限的金属又称为坏金属(bad metal).[Hussey,Takenaka,Takagi,Philosophical Magazine **84**,2847 (2004).]

[79] 中间温度区也称为有弹性的准粒子区(resillient quasiparticle regime).[Deng et al.,Phys.Rev.Lett. **110**,086401(2013)]

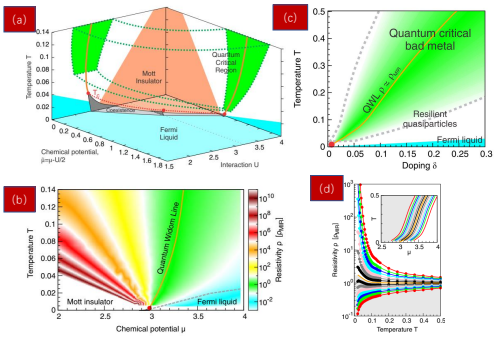


Figure 14.30: DMFT计算的Hubbard模型相图,参数选取为能带半宽$D = 1$.图(b)中$U = 4$.

因此,基于当前理论,计算以及实验研究的结果,高温区可以认为存在Mott临界性的信号,这种临界性可由DMFT合理描述,其反映的是中高能准粒子的非相干散射.但是对于低温区域,DMFT与多数Mott绝缘体材料的实验都表明存在一级Mott相变,这与预言连续Mott相变的辅助粒子平均场和规范理论不同.因此,我们有理由怀疑任何基于连续Mott相变的关联电子理论是否对应于物理真实,还是看似漂亮的非物理幻象, [80]例如从Hubbard模型出发借助于隶转子表示所得到的金属$-U(1)$自旋液体相变理论.[81]

[80][Lee,Florens,Dobrosavljevic,Fate of Spinons at the Mott Point, Phys.Rev.Lett.**117**,136601(2016)]利用动力学平均场并结合隶转子形式计算了自旋液体对Mott绝缘体的影响,他们的结果显示金属态到自旋液体Mott态的相变是一级相变.[Pustogow et al.,Rise and fall of Landau's quasiparticles while approaching the Mott transition,Nature Communications **12**,1571(2021)]通过测量光学电导认为有机Mott绝缘体材料κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu$_2$(CN)$_3$的掺杂驱动Mott相变点附近并没有自旋子的明显贡献,这可以排除有费米面自旋液体的可能性.

[81][Lee,Lee,$U(1)$ Gauge Theory of the Hubbard Model: Spin Liquid States and Possible Application to κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu$_2$(CN)$_3$,Phys.Rev.Lett. **95**,036403(2005);Senthil,Theory of a continuous Mott transition in two dimensions, Phys.Rev.B **78**,045109(2008)]

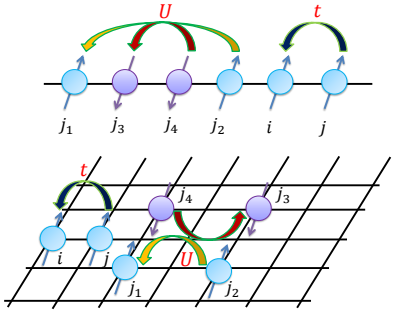


Figure 14.31: HK模型在一维和二维正方晶格时的示意图.

Mott相变的一类可解模型:Hatsugai-Kohmoto模型纵览*

在Hubbard模型的讨论中,我们看到Hubbard-I类型的近似可以得到上下Hubbard能带结构,但是准粒子能带以及相变本身并不能得到正确处理.尽管动力学平均场理论可以得到Mott相变定性的信息,但其忽略了具有重要贡献的空间关联,对Mott相变的描述只是近似的.因此,我们需要寻找一类可解的模型,这类模型具有Mott相变,且所有结果都是严格的,不需任何近似处理.下面将要讨论的Hatsugai-Kohmoto模型就是这样一个例子.

Hatsugai-Kohmoto模型*

受到Sherrington与Kirpatrick处理自旋玻璃态所采用的无限长程随机相互作用Ising模型的启发,[82]Hatsugai和Kohmoto提出一个可解的相互作用多体模型,即Hatsugai-Kohmoto模型,简称HK模型:[83]

$$\hat{H}_{HK}=-t\sum_{\langle i,j\rangle\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}-\mu\sum_{j\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+\frac{U}{N_s}\sum_{j_1,j_2,j_3,j_4}\delta_{j_1+j_3=j_2+j_4}\hat{c}^{\dagger}_{j_1\uparrow}\hat{c}_{j_2\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{j_3\downarrow}\hat{c}_{j_4\downarrow}=\hat{H}_0+\hat{H}_U \tag{14.206}$$

这里考虑一个d维超立方晶格上仅有最近邻跃迁t的情况,更一般的晶格和跃迁可推广得到.μ代表化学势,U是相互作用强度,N_s是体系总格点数,若设晶格间距为a,那么$V=N_sa^d=L^d$是超立方的体积.

- $\hat{H}_U$表示任意距离的电子都有相互作用且相互作用强度相同,(需要满足限制

[82][Sherrington,Kirkpatrick,Solvable Model of a Spin-Glass,Phys.Rev.Lett. **35**,1792(1975)]

[83][Hatsugai,Kohmoto,Exactly Sovable Model of Correlated Lattice Electron in Any Dimension,J.Phys.Soc.Jpn.**61**,2056(1992)]Baskaran提出了一个类似的模型:$H=\sum_k(\varepsilon_k-\mu)\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+J(\sum_k\hat{S}_k)^2-J\sum_k\hat{S}^2_k,\hat{S}_k=\hat{c}^{\dagger}_{k\alpha}\sigma_{\alpha\beta}\hat{c}_{k\beta}$.[Baskaran,An exactly solvable fermion model:spinons,holons and a non-Fermi liquid phase,Mod.Phys.Lett.B**5**,643(1991)]

条件$\delta_{j_1+j_3=j_2+j_4}$)因此该模型反映电子在无限长程相互作用下的行为.此外限制条件$\delta_{j_1+j_3=j_2+j_4}$说明该相互作用保持相互作用前后电子的质心位置不变.(图14.31)

为了对相互作用项有定性的理解,我们可以考虑仅有两个格点的情况,此时相互作用项可以写成

$$\hat{H}_U=\frac{U}{2}(\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}+\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}+\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}+\hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}+\hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}+\hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}). \tag{14.207}$$

显然,这里面除了同个格点的Hubbard相互作用$\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow},\hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}$ 外,$\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow},\hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}$ 可以看作不同格点间不同自旋电子的相互作用.$\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow},\hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}$则可以理解为不同格点间的自旋交换.因此,上述HK相互作用项不仅包含简单的Hubbard相互作用,还存在磁性相互作用.

利用标准傅里叶变换$\hat{c}_{j\sigma}=\frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k\hat{c}_{k\sigma}e^{ikR_j}$,相互作用项$\hat{H}_U$可以化为

$$\begin{aligned}\hat{H}_U &= \frac{U}{N_s^3}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}_{k_2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k_3\downarrow}\hat{c}_{k_4\downarrow}\sum_{j_1,j_2,j_3,j_4}\delta_{j_1+j_3=j_2+j_4}e^{-i(k_1R_{j_1}+k_3R_{j_3})}e^{i(k_2R_{j_2}+k_4R_{j_4})}\\
&= U\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}_{k_2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k_3\downarrow}\hat{c}_{k_4\downarrow}\frac{1}{N_s}\sum_{j_1}e^{i(k_4-k_1)R_{j_1}}\frac{1}{N_s}\sum_{j_3}e^{i(k_4-k_3)R_{j_3}}\frac{1}{N_s}\sum_{j_2}e^{i(-k_4+k_2)R_{j_2}}\\
&= U\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\hat{c}^\dagger_{k_1\uparrow}\hat{c}_{k_2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k_3\downarrow}\hat{c}_{k_4\downarrow}\delta_{k_4,k_1}\delta_{k_4,k_3}\delta_{k_4,k_2}\\
&= U\sum_{k_4}\hat{c}^\dagger_{k_4\uparrow}\hat{c}_{k_4\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k_4\downarrow}\hat{c}_{k_4\downarrow}=U\sum_k\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\downarrow}=U\sum_k\hat{n}_{k\uparrow}\hat{n}_{k\downarrow}\end{aligned} \tag{14.208}$$

- 在傅里叶变换后,相互作用仅对具有相同动量相反自旋取向的电子有影响.这里$\hat{n}_{k\sigma}\equiv\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$.

- 如果考虑无自旋费米子,那么$\hat{H}_U=U\sum_k\hat{n}_k^2=U\sum_k\hat{n}_k$,这相当于给出一个精确的Hartree型的修正,此时电子的能谱是ε_k+U.

这样,系统的哈密顿量成为

$$\hat{H}_{HK}=\sum_k\hat{H}_k=\sum_k[(\varepsilon_k-\mu)(\hat{n}_{k\uparrow}+\hat{n}_{k\downarrow})+U\hat{n}_{k\uparrow}\hat{n}_{k\downarrow}] \tag{14.209}$$

对于仅有最近邻跃迁的d维超立方晶格,无相互作用电子的色散是$\varepsilon_k=-2t\sum_{a=1}^d\cos k_a$.[84]

[84][Lidsky,Shiraishi,Hatsugai,Kohmoto,Simple exactly solvable models of non-Fermi-liquids,Phys.Rev.B**57**,1349(1998)]这个文献给出了上述哈密顿量的更一般形式,其类似于Landau费米液体的能量泛函.

现在,哈密顿量退耦合为各个独立动量部分$\hat{H}_k$的求和,这相当于存在一些列动量空间中的Hubbard原子,对每一个$\hat{H}_k$有四个本征态和本征能量,即

$$|0\rangle_k \qquad E_0(k)=0 \tag{14.210}$$

$$|\uparrow\rangle_k=\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}|0\rangle_k \quad E_u(k)=\varepsilon_k-\mu \tag{14.211}$$

$$|\downarrow\rangle_k=\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|0\rangle_k \quad E_n(k)=\varepsilon_k-\mu \tag{14.212}$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle_k=\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}|0\rangle_k \quad E_d(k)=2\varepsilon_k-2\mu+U \tag{14.213}$$

分别对应一个空占态,两个简并的单占态以及一个双占态.

- 这里四个本征态与Hubbard模型中单格点上四个态不同,HK模型中这四个态是动量空间的基矢,而Hubbard模型的四个基矢态是写在格点空间,即实空间,

通过每个动量k的本征态,我们可以构造系统的任意多体态,

$$|\Psi\rangle=\prod_k|\Phi\rangle_k,\quad |\Phi\rangle_k=a|0\rangle_k+b|\uparrow\rangle_k+c|\downarrow\rangle_k+d|\uparrow\downarrow\rangle_k=\sum_{\alpha=0,\uparrow,\downarrow,\uparrow\downarrow}c_\alpha|\alpha\rangle_k \tag{14.214}$$

特别地,对于系统的本征态,$|\Phi\rangle_k$只需选为四个基矢中的某一个即可.既然系统的任意本征态都可由此构造,那么HK模型是可解的.

- 本征态不依赖于具体晶格和电子填充,因此KH模型在任意空间维度都是可解的.

当然,对于系统的任意一个本征态,其对空占据,单占据以及双占据的具体情况各不相同,可以形式化的表示为

$$|\Psi\rangle=\prod_{k\in\Omega_0}|0\rangle_k\prod_{k\in\Omega_1}|\alpha=\uparrow,\downarrow\rangle_k\prod_{k\in\Omega_2}|\uparrow\downarrow\rangle_k \tag{14.215}$$

这里$\Omega_0,\Omega_1,\Omega_2$分别代表空占,单占和双占所对应的动量取值范围.显然,由于单占据是简并的,这意味着系统的本征态高度简并,特别是系统的基态存在大量简并.当然,如果我们施加无穷小的均匀外磁场,那么Zeeman耦合会破除自旋上与下的简并,这样就得到唯一的基态,此时系统是简单的铁磁基态.($|\Psi_{FM}\rangle=\prod_{k\in\Omega_0}|0\rangle_k\prod_{k\in\Omega_1}|\uparrow\rangle_k\prod_{k\in\Omega_2}|\uparrow\downarrow\rangle_k$($-z$方向磁场)或$|\Psi_{FM}\rangle=\prod_{k\in\Omega_0}|0\rangle_k\prod_{k\in\Omega_1}|\downarrow\rangle_k\prod_{k\in\Omega_2}|\uparrow\downarrow\rangle_k$($z$方向磁场))

现在,一个基本问题是在一般参数下(t,U,μ或者t,U,n,n为电子密度)体系的基态是什么样的呢?

HK模型的基态相图*

为了寻找HK模型的基态,让我们先考虑一种特殊情况,也就是所有的单占能级能量都小于任意双占据和空占据能级:

$$(E_u(k))_{max}<(E_0(k))_{min},(E_d(k))_{min} \tag{14.216}$$

在这种情况下,系统基态都由单占据态构成,即$|\Psi_g\rangle = \prod_{k\in\Omega_1}|\alpha =\uparrow,\downarrow\rangle_k$,这里$\Omega_1$是整个第一布里渊区,其数目等于总格点数.此时的总电子数目也同样是总格点数,(每个动量仅有一个电子占据)也就是说此时系统半填满.一个显然的问题是此时体系是金属还是绝缘体呢? 这可以通过体系的电子/空穴激发是否有能隙来判断,有能隙为绝缘体而无能隙则为金属.

我们考虑给基态$|\Psi_g\rangle$加入一个电子的情况,其波函数是

$$|\Psi_e^{k',\sigma'}\rangle = \hat{c}^\dagger_{k'\sigma'}|\Phi_g\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle_{k'}\prod_{k\neq k',k\in\Omega_1}|\alpha =\uparrow,\downarrow\rangle_k \tag{14.217}$$

这样相对于基态的激发能是

$$\Delta E^e_{k'\sigma'} = \langle\Psi_e^{k',\sigma'}|\hat{H}|\Psi_e^{k',\sigma'}\rangle - \langle\Phi_g|\hat{H}|\Phi_g\rangle = E_d(k') - E_u(k') = \varepsilon_{k'} - \mu + U \tag{14.218}$$

同理,基态产生空穴后的波函数为$|\Psi_h^{k',\sigma'}\rangle = \hat{c}_{k'\sigma'}|\Phi_g\rangle$,其相对于基态的能量差为$\Delta E^h_{k'\sigma'} = E_0(k') - E_u(k') = \mu - \varepsilon_{k'}$.对于绝缘体而言,我们要求任意$k'$所对应的激发能$\Delta E^h_{k'\sigma'}, \Delta E^e_{k'\sigma'}$都大于零,(即$(\Delta E^e_{k'\sigma'})_{min} > 0, (\Delta E^h_{k'\sigma'})_{min} > 0$)而金属态则意味着它们当中出现小于零的情况.

显然,$(\Delta E^e_{k'\sigma'})_{min}, (\Delta E^h_{k'\sigma'})_{min} \to 0^+$给出金属态与绝缘态转变的边界:

$$(\varepsilon_{k'})_{min} - \mu + U = 0, \quad \mu - (\varepsilon_{k'})_{max} = 0 \tag{14.219}$$

对于d维超立方晶格,我们假设$\varepsilon_k \in [-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$,$W = 4td$是无相互作用电子的能带宽度.代入最值$(\varepsilon_k)_{max} = \frac{W}{2}, (\varepsilon_k)_{min} = -\frac{W}{2}$于上述方程可得具有物理意义的解是

$$\frac{\mu}{U} = 1 - \frac{W}{2U}; \quad \frac{\mu}{U} = \frac{W}{2U} \tag{14.220}$$

则这两个等式与$W/U = 0$包围的三角形区域描述绝缘相,其他区域是金属相.(图14.32)

注意到对于当前半满填充的绝缘态,如果我们让相互作用等于零,那么体系必然成为金属,这说明体系的绝缘态是相互作用诱导的,也就是说体系的半满绝缘态是Mott绝缘体.在模型具有粒子空穴对称时,可以证明$\mu = U/2$.此时系统半满,由$\mu/U = W/(2U)$(代入$\mu = U/2$并令$U = U_c$)可得从金属态到Mott绝缘体态的临界相互作用强度是$U_c = W$, 这对应调节相互作用导致的Mott 相变.对于固定的U,通过调节μ有Mott相变,通常称为调节化学势/密度驱动的Mott相变.

配分函数与热力学*

电子占据数与准费米波矢

为了明确Mott态与金属态的差别,我们可以计算基态时电子在每个动量下的占据数,即$n_{k\sigma} = \langle\hat{n}_{k\sigma}\rangle$.然而,我们必须指出,由于体系的基态具有高度的简并,如果只是对其中某一个基态做计算,那么其结果并没有代表性,正确的做法是

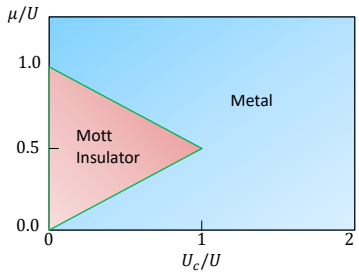


Figure 14.32: 超立方晶格上HK模型的基态相图,这里$U_c = W$,W是无相互作用电子能带宽度.

要对所有简并的计算都做计算,然后取其平均.换句话说,我们所考虑模型的基态实际上是一个混合态.

为了实现对所有简并基态的计算,我们可以先计算有限温度的情况,然后再取零温极限.既然需要有限温度的性质,注意到系统哈密顿量对角化成每个动量的子空间,那么配分函数是各个动量的乘积,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \mathrm{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \prod_k \mathcal{Z}_k = \prod_k \mathrm{Tr} e^{-\beta \hat{H}_k} = \prod_k \sum_{\alpha=0,\uparrow,\downarrow,\uparrow\downarrow} \langle \alpha|_k e^{-\beta \hat{H}_k} |\alpha\rangle_k \\ &= \prod_k (1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon_k - 2\mu + U)}) = \prod_k f_k \end{aligned} \tag{14.221}$$

这里我们定义了因子,

$$f_k = 1 + 2z_k + z_k^2 e^{-\beta U}; \quad z_k = e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}. \tag{14.222}$$

利用上述配分函数,我们计算$n_{k\sigma}$,

$$\begin{aligned} n_{k\sigma} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \mathrm{Tr} \hat{n}_{k\sigma} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{\prod_{k' \neq k} \mathcal{Z}_{k'} \mathrm{Tr} \hat{n}_{k\sigma} e^{-\beta \hat{H}_k}}{\prod_{k'} \mathcal{Z}_{k'}} = \frac{\mathrm{Tr} \hat{n}_{k\sigma} e^{-\beta \hat{H}_k}}{\mathcal{Z}_k} \\ &= \frac{e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon_k - 2\mu + U)}}{1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon_k - 2\mu + U)}} = \frac{f_k - z_k - 1}{f_k} \\ &= \frac{f_F(\varepsilon_k - \mu)}{f_F(\varepsilon_k - \mu) + 1 - f_F(\varepsilon_k - \mu + U)}. \end{aligned} \tag{14.223}$$

这里$f_F(x) = 1/(e^{x/T} + 1)$是标准的费米分布函数.我们可以看到HK模型中电子的分布与自由电子气体明显不同.进一步,让我们考虑上式的零温极限,则有

$$n_{k\sigma}^{T=0} = \frac{1}{2} \left[\theta(\mu - \varepsilon_k) + \theta(\mu - \varepsilon_k - U) \right]. \tag{14.224}$$

$\theta(x) = 1, x > 0 (\theta(x) = 0, x < 0)$.

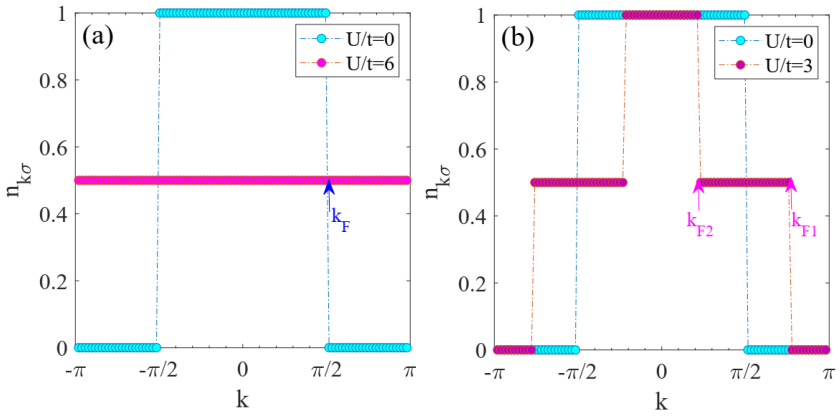


Figure 14.33: HK模型的电子基态占据数$n_{k\sigma}=\langle\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\rangle$.(a)$U>W=4t$时费米气体($U/t=0$)与Mott绝缘态($U/t=6$);(b)$U<W=4t$时费米气体($U/t=0$)与金属态($U/t=3$).

我们考虑一维时的HK模型,此时电子色散关系是$\varepsilon_k=-2t\cos k$,能带宽度为$4t$.这样有

$$n^{T=0}_{k\sigma}=\frac{1}{2}\left[\theta(\mu+2t\cos k)+\theta(\mu+2t\cos k-U)\right]. \tag{14.225}$$

给定μ,U,t就可以得到相应参数下电子占据数的具体情况.让我们考虑半满对称的特殊情况,此时$\mu=U/2$,这样有$n^{T=0}_{k\sigma}=\frac{1}{2}\left[\theta(2t\cos k+U/2)+\theta(2t\cos k-U/2)\right]$.当$U>W=4t$时,也就是体系处于Mott绝缘态,意味着每一个动量态都只是单占据,这样每个动量态的电子占据数平均而言是1/2且第一布里渊区中的所有态都有占据,这与$\theta(2t\cos k+U/2)$无贡献,$\theta(2t\cos k-U/2)$总是等于一吻合.与之相对,$U=0$半满的费米气体金属态每个动量都被两个电子占据,自然其电子占据数为1, 且仅有$k\in[-k_F,k_F],k_F=\pi/2$范围内的态被占据.(图14.33(a))

若$U<W$,那么Mott态转变为金属态,此时该金属态既有双占也有单占,占据可能由费米能(设为零能)确定,[85]在双占区,电子占据数为1而单占区为1/2,这与费米气体也明显不同,换句话说,HK模型在$U<W$时的金属态应是一类非费米液体.

从图14.33(b)可以看到,电子占据数存在两个跳变,(考虑$k>0$区域)这两个跳变分别对应$n_{k\sigma}$从1到1/2以及从1/2到0.我们可以把这两个跳变所对应的动量记作k_{F2}和k_{F1},(可以看作是准费米波矢)它们由$\varepsilon_k=\mu-U$以及$\varepsilon_k=\mu$分别给出,即

[85]单占与双占态的比例由U/W决定,具体而言Ω_2的区域由电子激发能$\Delta E^{e}_{k,\sigma}=0$定出,而$\Omega_1$由空穴激发能$\Delta E^{e}_{k,\sigma}=0$所得区域减去与$\Omega_2$重叠的区域获得.

有

$$k_{F2}=\left|\arccos\frac{U-\mu}{2t}\right|,\quad k_{F1}=\left|\arccos\frac{-\mu}{2t}\right|. \tag{14.226}$$

利用k_{F2},k_{F1},我们就可以得到体系的电子密度,

$$n=\overbrace{2k_{F2}}^{\Omega_2}\frac{2}{2\pi}+\overbrace{2(k_{F1}-k_{F2})}^{\Omega_1}\frac{2}{2\pi}\frac{1}{2}=(k_{F1}+k_{F2})\frac{2}{2\pi}. \tag{14.227}$$

这里因子$\frac{2}{2\pi}$是动量空间的单位长度下的态密度且包括自旋简并,$\frac{1}{2}$因子则是考虑到单占据区域电子占据数都是1/2.注意到这个结果与费米气体所满足的Luttinger求和规则(定理),即$n=2k_F\frac{2}{2\pi}$并不相同,这反映了体系的非费米液体特性.

- 对自由费米气体或者说费米液体,电子密度唯一决定了费米波矢k_F,其与相互作用取值无关;
- 在HK模型的金属态中,电子密度不能直接决定准费米波矢k_{F2},k_{F1}的取值.从$k_{F2}=\left|\arccos\frac{U-\mu}{2t}\right|$的具体表达式可以看到准费米波矢明确依赖相互作用的取值,也就是说准费米波矢会随着相互作用而变化,这是与Luttinger定理最大的不同点.因此,这里讨论的金属态必然是一类非费米液体态;
- 最后,我们指出上述这些结果对高维情况也成立,也就是说高维体系(例如二维正方晶格)的金属态也是一类非费米液体态,其存在两个准费米面,这两个准费米面共同决定了电子密度.(例如图14.34)

热力学性质

HK模型系统的热力学性质由其自由能确定,

$$\mathcal{F}=-T\ln\mathcal{Z}=-T\sum_k\ln f_k. \tag{14.228}$$

这样f_k可以看成每个动量下的配分函数,因此系统的能量为

$$\begin{aligned}E&=\mathcal{F}-T\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial T}=\sum_k\left(\frac{2z_k}{f_k}(\varepsilon_k-\mu)+\frac{2z_k^2e^{-\beta U}}{f_k}\left(\varepsilon_k-\mu+\frac{U}{2}\right)\right)\\&=\sum_k\left(\frac{2z_k+z_k^2e^{-\beta U}}{f_k}(\varepsilon_k-\mu)+\frac{z_k^2e^{-\beta U}}{f_k}(\varepsilon_k-\mu+U)\right).\end{aligned} \tag{14.229}$$

通过对能量求导就可以得到比热的结果.图14.35给出了一维HK模型在半满时不同相互作用强度下的热容(平均到每个格点),可以看到金属态的热容($U/t<4$)在低温下近似存在温度T的线性关系,而$U/t>4$在低温下是Mott绝缘态,其热容自然具有指数抑制的行为.

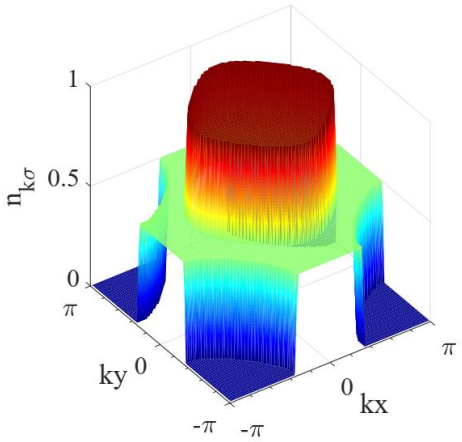


Figure 14.34: 二维正方晶格上HK模型在金属态时电子的占据数$n_{k\sigma} = \langle \hat{c}^{\dagger}_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma} \rangle$.($U/t = 2, \mu = U/2$)

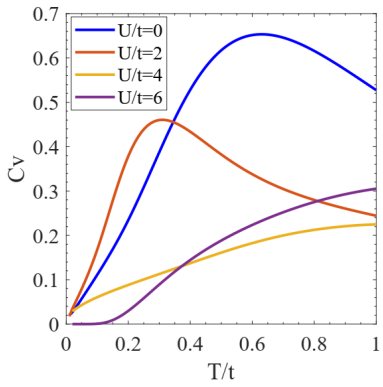


Figure 14.35: 一维HK模型在不同相互作用强度下的平均热容(平均到每个格点),这里$\mu = U/2$.

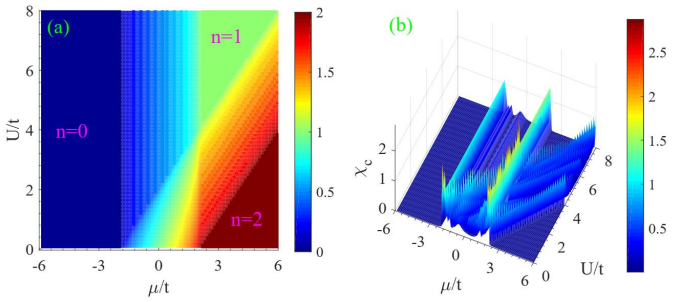


Figure 14.36: 一维HK模型基态时的(a)电子密度n;(b)电荷极化率χ_c.

在零温极限下,基态能量是两支能谱贡献的相加,即

$$E \to E_g = \sum_k \left[(\varepsilon_k - \mu)\theta(\mu - \varepsilon_k) + (\varepsilon_k - \mu + U)\theta(\mu - \varepsilon_k - U)\right). \quad (14.230)$$

系统的粒子数密度是

$$n = -\frac{1}{N_s}\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu} = \frac{2}{N_s}\sum_k \frac{z_k}{f_k}(1 + z_k e^{-\beta U}) \quad (14.231)$$

在零温极限下,

$$n = -\frac{1}{N_s}\frac{\partial E_g}{\partial \mu} = \frac{1}{N_s}\sum_k \left(\theta(\mu - \varepsilon_k) + \theta(\mu - \varepsilon_k - U)\right) \quad (14.232)$$

而零温时的电荷极化率是

$$\chi_c = \frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{1}{N_s}\sum_k \left(\delta(\mu - \varepsilon_k) + \delta(\mu - \varepsilon_k - U)\right) = N_0(\mu) + N_0(\mu - U) \quad (14.233)$$

这里$N_0(\omega)$是无相互作用时的电子态密度.这样,电荷极化率的行为实际上由晶格电子的态密度确定,其对化学势ν和相互作用U有依赖.

图14.36给出了一维HK模型基态时的电子密度n与电荷极化率χ_c随U和μ的变化.($\varepsilon_k = -2t\cos k$)可以看到电子密度$n = 0, 2$对应的是简单的能带绝缘体,而$n = 1$区域则可以划分为大$U$时的Mott绝缘态以及小$U$时的金属态.这些不同区域的边界对应着$\chi_c$的峰值,实际上就是相变线.

在超立方晶格上,$N_0(\omega)$是关于ω的对称函数且在区间$[-W/2, W/2]$内非零.在对称半满情况下,$\mu = U/2$,此时从$U = 0$逐渐增大相互作用强度U, 我们会发现当$U < W$时χ_c为有限值,代表金属态,而$U > W$ 给出$\chi_c = 0$表示Mott绝缘态.因此$U = U_c = W$是相互作用驱动的Mott相变的临界点.另一方面,让我们从半满的Mott态出发,此时$U > U_c$,然后调节化学势μ,我们发现$\mu_c = U - \frac{W}{2}$ 是化学势调控的Mott相变的临界点.

对于一维系统,直接计算可得

$$\chi_c=\frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{W^2-4\mu^2}}\theta(W-2|\mu|)+\frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{W^2-4(\mu-U)^2}}\theta(W/2-2|\mu-U|) \tag{14.234}$$

因此相互作用驱动的Mott相变有$\chi_c(U\to U_c)\sim\frac{1}{\sqrt{U_c-U}}$,$(U_c=W,\mu=U/2)$, 而化学势驱动的相变为$\chi_c(\mu\to\mu_c)\sim\frac{1}{\sqrt{\mu-\mu_c}}$,$(\mu_c=U-W/2)$.注意到奇异性实际上来自于态密度在能带边界处的行为.对于超立方晶格,其能带边界处的态密度实际上近似为自由费米子的态密度,因此有$N_0(\omega)\sim(W/2-|\omega|)^{d/2-1}$,这样系统基态能量密度的奇异部分来自于态密度和能量的积分,即$e_g\sim\int d\omega\omega N_0(\omega)\sim(W/2-|\mu|)^{d/2+1}+(W/2-|\mu-U|)^{d/2+1}$.显然这导致

$$e_g(\mu\to\mu_c)\propto(\mu-\mu_c)^{\frac{d}{2}+1},\quad e_g(U\to U_c)\propto(U_c-U)^{\frac{d}{2}+1} \tag{14.235}$$

这样临界指数$\alpha=1-d/2$.然后对e_g求化学势二阶导数可得

$$\chi_c(\mu\to\mu_c)\propto(\mu-\mu_c)^{\frac{d}{2}-1},\quad \chi_c(U\to U_c)\propto(U_c-U)^{\frac{d}{2}-1} \tag{14.236}$$

所以有$\gamma=1-d/2$.另一方面,粒子密度差$\Delta n=1-n\sim(\mu-\mu_c)^{\frac{d}{2}}$,由此可知超立方晶格上的HK模型的两类Mott 相变的普适类都是自由费米子Lifshitz相变类.[86]

最后,让我们考虑体系的(静态)自旋磁化率χ_s.为了计算χ_s,我们可以给体系计入Zeeman耦合项,即$\hat{H}_Z=-\mu_B h\sum_{j\sigma}\sigma\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}=-\mu_B h\sum_{k\sigma}\sigma\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$,这相当于把$\varepsilon_k$修改为$\varepsilon_{k\sigma}=\varepsilon_k-\mu_B h\sigma$.在这种情况下,容易得到

$$\begin{aligned} n_{k\sigma} &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{Tr}\hat{n}_{k\sigma}e^{-\beta\hat{H}}=\frac{\mathrm{Tr}\hat{n}_{k\sigma}e^{-\beta\hat{H}_k}}{\mathcal{Z}_k} \\ &= \frac{e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}+e^{-\beta(2\varepsilon_k-2\mu+U)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon_{k\uparrow}-\mu)}+e^{-\beta(\varepsilon_{k\downarrow}-\mu)}+e^{-\beta(2\varepsilon_k-2\mu+U)}}. \end{aligned} \tag{14.237}$$

这样体系的磁化是$M=\frac{1}{N_s}\sum_{k\sigma}(n_{k\uparrow}-n_{k\downarrow})\mu_B$,而零外场极限下的自旋磁化率就是

$$\chi_s=\lim_{h\to0}\frac{\partial M}{\partial h}=\lim_{h\to0}\frac{1}{N_s}\sum_{k\sigma}\left(\frac{\partial n_{k\uparrow}}{\partial h}-\frac{\partial n_{k\downarrow}}{\partial h}\right)\mu_B. \tag{14.238}$$

图14.37给出了一维半满HK模型在不同相互作用下的自旋磁化率χ_s的温度依赖.可以看到除了$U/t=0$的费米气体以外,其他无论是非费米液体金属($U/t=2,4$)还是Mott绝缘体$U/t=6$都显示明显的Curie型磁化率$\chi_s\sim1/T$,这说明体系存在大量自由的磁矩,这意味着体系在弱磁场下就会有明显的磁性不稳定性.此外,相互作用越强,体系越趋近Mott态,磁化率越大,这可以理解为随着相互作用的增大,更多的状态出现单占据,而双占据或者空占据的情况减少,这自然会导致有效电子磁矩的增加.最后在Mott态,所有k态都是单占据,这样体系的有效磁矩达到最大,在图14.37中体现为$U/t=6$相比$U/t=4$的χ_s已经差别不大.

[86][Continentino,Coutinho-Filho,Scaling close to a Mott Transition in an exactly soluble model,Solid State Commun.**90**,619(1994)]

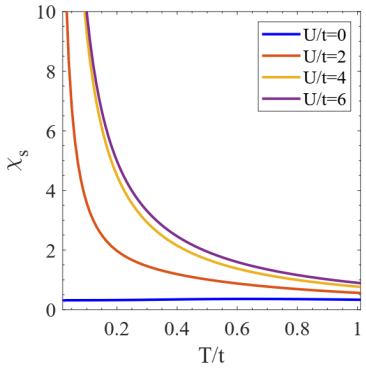


Figure 14.37: 一维HK模型在不同相互作用强度下的自旋磁化率χ_s的温度依赖,这里$\mu = U/2$.

- 体系的磁化率满足Curie定律$\chi \sim \frac{1}{T}$,其与费米液体所满足的Pauli磁化率明显不同. [87]

单粒子激发*

研究单粒子激发最直接的方式就是计算单粒子Green函数.仿照Hubbard-I近似的运动方程处理,定义单粒子Green函数$G_\sigma(k,\omega) = \langle\langle \hat{c}_{k\sigma}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega$,则其运动方程是(利用$[\hat{c}_{k\sigma}, \hat{H}] = (\varepsilon_k - \mu)\hat{c}_{k\sigma} + U\hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}$)

$$\omega\langle\langle \hat{c}_{k\sigma}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega = 1 + (\varepsilon_k - \mu)\langle\langle \hat{c}_{k\sigma}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega + U\langle\langle \hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega \tag{14.239}$$

而$\langle\langle \hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega$ 函数的运动方程是封闭的(利用$[\hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}, \hat{H}] = (\varepsilon_k - \mu + U)\hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}$)

$$\omega\langle\langle \hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega = \langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle + (\varepsilon_k - \mu + U)\langle\langle \hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega \tag{14.240}$$

因此

$$\langle\langle \hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega = \frac{\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle}{\omega - \varepsilon_k + \mu - U} \tag{14.241}$$

而

$$G_\sigma(k,\omega) = \frac{1 + \frac{U\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle}{\omega - (\varepsilon_k - \mu + U)}}{\omega - (\varepsilon_k - \mu)} = \frac{1 - \langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle}{\omega - (\varepsilon_k - \mu)} + \frac{\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle}{\omega - (\varepsilon_k - \mu + U)} \tag{14.242}$$

- 与Hubbard模型不同,采用推迟Green函数运动方程方法我们严格求解了Hatsugai-Kohmoto模型的单粒子Green函数.这种可解性来源于系统在k态对角化为很小的子系统,因此可得封闭的严格解.

[87] [Vitoriano,Bejan,Macedo,Coutinho-Filho,Magnetic response and fractional statistics in the infinite-range Hubbard model,Journal of Magnetism and Magnetic Materials **226**,221(2001)]

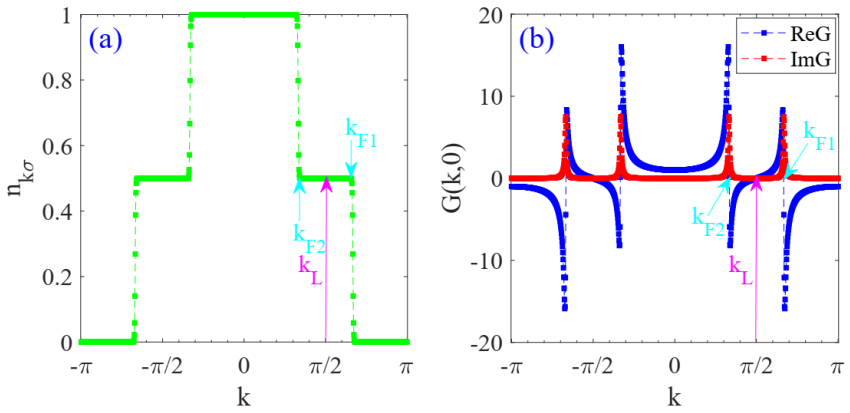


Figure 14.38: (a)一维HK模型的电子基态占据数$n_{k\sigma}$;(b)Green函数的实部与虚部.

- 利用推迟Green函数的谱定理,我们可以得到$\langle\hat{n}_{k\sigma}\rangle = (1-\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle)f_F(\varepsilon_k-\mu)+\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle f_F(\varepsilon_k-\mu+U)$.由于体系处于顺磁态,那么$n_k = \langle\hat{n}_{k\uparrow}\rangle = \langle\hat{n}_{k\downarrow}\rangle$,这样有$n_k = \frac{f_F(\varepsilon_k-\mu)}{f_F(\varepsilon_k-\mu)+1-f_F(\varepsilon_k-\mu+U)}$. 类似的有$\langle\hat{n}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle = \frac{f_F(\varepsilon_k-\mu)f_F(\varepsilon_k-\mu+U)}{f_F(\varepsilon_k-\mu)+1-f_F(\varepsilon_k-\mu+U)}$.

可以看到,系统的准粒子激发具有色散$\omega = \varepsilon_k-\mu, \varepsilon_k-\mu+U$.这实际上就是Mott态时单个电子/空穴的激发能.注意到不同支色散有占据依赖的谱权重,这是(掺杂)Mott态的基本特点.[4]当$U > W$时,两支色散之间出现能隙,形成上下Hubbard能带.若$U < W$,两支色散有重叠,系统激发无能隙.(图14.39[88])特别是半满对称情况下$\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle = \frac{1}{2}, \mu = \frac{U}{2}$,

$$G_\sigma(k,\omega) = \frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\frac{(U/2)^2}{\omega-\varepsilon_k}} = \frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\Sigma(k,\omega)}; \quad \Sigma(k,\omega) = \frac{(U/2)^2}{\omega-\varepsilon_k} \tag{14.243}$$

在无相互作用的费米面上$\varepsilon_k = 0$,零频自能$\Sigma(k_F,\omega=0)$发散,此时单粒子Green函数$G_\sigma(k_F,\omega=0) = 0$.这定义了Luttinger 面,即单粒子Green函数实部Re$G(k,0)$经过零改变符号的点的集合(面).[89]我们把Luttinger面对应的动量叫做Luttinger动量,记为k_L,也就是有Re$G(k_L,0) = 0$.

对于一维模型,半满对称时由$\varepsilon_k = -2t\cos k = 0$给出$k_L = \pi/2$,另一方面,准费米动量$k_{F1}, k_{F2}$由$\varepsilon_k = U/2, \varepsilon_k = -U/2$给出.如图14.38所示,电子占据数的跳变处由$k_{F1}, k_{F2}$定出,而Green函数的零点由$k_L$决定.

[88] [Phillips,Yeo,Huang,Exact Superconducting Instability in a Doped Mott Insulator, Nat.Phys.**16**,1175(2020)]

[89] [Dzyaloshinskii,Some consequences of the Luttinger theorem: The Luttinger surfaces in non-Fermi liquids and Mott insulators,Phys.Rev.B**68**,085113(2003)]

当体系偏离对称半满情况时,令$G_\sigma(k_L,\omega=0)=0$可得Luttinger动量k_L所满足的方程:

$$1+\frac{U\langle\hat{n}_{k_L\bar{\sigma}}\rangle}{-(\varepsilon_{k_L}-\mu+U)}=0\Rightarrow\varepsilon_{k_L}=Un_{k_L}-U+\mu. \tag{14.244}$$

代入粒子占据数n_{k_L}的具体形式则有

$$\varepsilon_{k_L}=U\frac{f_F(\varepsilon_{k_L}-\mu)}{f_F(\varepsilon_{k_L}-\mu)+1-f_F(\varepsilon_{k_L}-\mu+U)}-U+\mu. \tag{14.245}$$

- 由于零频自能发散,Fermi液体准粒子权重Z失去意义,系统处于非Fermi液体态,即系统的金属态实际上是非Fermi液体.

- 图14.39(d)中的颜色表示Luttinger记数$n_L=\frac{1}{N_s}\sum_{k,\sigma}\theta(\mathrm{Re}G(k,\omega=0))$,对半满且满足Fermi液体要求的情况,$n_L=1$.可以看到在所有参数情况下,$n_L\neq1$,即系统不满足Fermi液体的Luttinger求和规则,表明系统的金属态是非Fermi液体.

因此,金属态的准粒子并不是无相互作用绝热演化后的Fermi液体准粒子.注意到系统对每个k有四个本征态,那么系统准粒子应与其有关,这提示我们构造如下准粒子算符,即空穴子$\hat{h}$和双占子$\hat{d}$

$$\hat{c}_{k\sigma}=\hat{h}_{k\sigma}+\hat{d}_{k\sigma},\quad \hat{h}_{k\sigma}=\hat{c}_{k\sigma}(1-\hat{n}_{k\bar{\sigma}}),\quad \hat{d}_{k\sigma}=\hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}} \tag{14.246}$$

这样,利用对易关系$[\hat{c}_{k\sigma},\hat{H}]=(\varepsilon_k-\mu)\hat{c}_{k\sigma}+U\hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}$,$[\hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}},\hat{H}]=(\varepsilon_k-\mu+U)\hat{c}_{k\sigma}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}$ 可以得到空穴子和双占子的Green函数为

$$\langle\langle\hat{h}_{k\sigma}|\hat{h}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega=\frac{1-\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle}{\omega-\varepsilon_k+\mu}, \tag{14.247}$$

$$\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega=\frac{\langle\hat{n}_{k\bar{\sigma}}\rangle}{\omega-\varepsilon_k+\mu-U}. \tag{14.248}$$

注意到电子Green函数恰好是上述两者的相加,即$\langle\langle\hat{c}_{k\sigma}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega=\langle\langle\hat{h}_{k\sigma}|\hat{h}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega+\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega$, 这说明体系的准粒子激发实际上是空穴子和双占子.

- 当然,准粒子算符$\hat{h},\hat{d}$并不是标准费米子,因为其并不满足标准的反对易关系,$[\hat{d}_{k\sigma},\hat{d}^\dagger_{k'\sigma'}]_+=\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}\hat{n}_{k\bar{\sigma}}$,$[\hat{h}_{k\sigma},\hat{h}^\dagger_{k'\sigma'}]_+=\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}(1-\hat{n}_{k\bar{\sigma}})$.

- 注意$\hat{d}^\dagger_{k\uparrow}\hat{d}_{k\uparrow}=\hat{d}^\dagger_{k\downarrow}\hat{d}_{k\downarrow}$,即双占态的数目并不依赖于自旋取向.

其他性质*

- 唯象计入超导配对可以研究HK模型的超导态,其显示与通常BCS超导不同的特性;[90]

[90] [Phillips,Yeo,Huang,Exact Superconducting Instability in a Doped Mott Insulator, Nat.Phys.**16**,1175(2020);Zhu,Li,Han,Wang,Topological s-wave superconductors

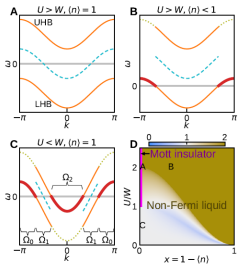


Figure 14.39: (a)(b)(c)HK模型的准粒子能带与(d)$U-x$基态相图.$U>W$ 的半满情况显示清晰的上下Hubbard带,$U<W$的半满情况Hubbard带由空占Ω_0,单占Ω_1,双占Ω_2组成.$x=1-\langle n\rangle$代表相对于电子半满的偏离,注意到仅在半满时存在Mott绝缘态.

- KH模型的热力学可以通过Haldane的不相容统计(每个单粒子态平均而言部分占据)进行理解; [91]
- 考虑动量依赖的相互作用可得到费米圆弧(Fermi arc);[92]
- HK模型的Mott相变也可以通过量子纠缠来刻画.[93]

本章小结与进一步阅读

本章小结 巡游磁性相变与Mott相变是现代凝聚态物理的核心话题.

本章关键词 反铁磁自旋密度波平均场;Mott相变;动力学平均场;辅助粒子;Hubbard-I近似;Hatsugai-Kohmoto模型

进一步阅读 冯端和金国钧合著《凝聚态物理学》(上卷)第十三章;P.Phillips的《Advanced Solid State Physics》第十六章;M.Continentino的《Quantum

driven by electron correlation,Phys.Rev.B**103**,024514(2021);Zhu,Han,Effects of electron correlation on superconductivity in the Hatsugai-Kohmoto model,Chinese Phys.B **30**,107401(2021);Zhao,Yeo,Huang,Phillips,Thermodynamics of an exactly solvable model for superconductivity in a doped Mott insulator,Phys.REV.B **105**,184509(2022)]

[91][Hatsugai,Kohmoto,Koma,Wu, Mutual-exclusion statistics in exactly solvable models in one and higher dimensions at low temperatures, Phys.Rev.B **54**,5358(1996);Vitoriano,Bejan,Macedo,Coutinho-Filho,Metal-insulator transition with infinite-range Coulomb coupling: Fractional statistics and quantum critical properties,Phys.Rev.B**61**,7941(2000)]

[92][Yang,Exactly solvable model of Fermi arcs and pseudogap,Phys.Rev.B **103**,024529(2021)]

[93]单格点,两格点熵[Yeo,Phillips,Local entropies across the Mott transition in an exactly solvable model,Phys.Rev.D **99**,094030(2019)]

Scaling in Many-Body Systems》第五章,第八到第十章;S.Sachdev的《Quantum phase transitions》第十八章

附录

激子与相变

激子是电子与空穴形成的束缚态,其概念是研究绝缘晶体和半导体的光学吸收谱是提出的.对于纯净的绝缘体或半导体,其价带与导带之间存在能隙,那么入射到样品的光子能量必须大于能隙才会导致光吸收,也就是价带电子吸收光子能量跃迁到导带,同时留下一个空穴.然而,实验的光吸收谱显示能隙中确实存在分立的能级,这类能级就是所谓的激子能级.

简单来说,电子与空穴带有相反电荷,因此两者之间存在Coulomb吸引力,求解相应的量子力学方程可以期待出现电子与空穴的束缚态,即激子.根据激子半径与晶格常数的相对大小,我们可以把激子划分为Wannier-Mott激子和Frenkel激子.前者激子半径远大于晶格常数,类似于极化子的说法,可以认为是大激子,电子与空穴束缚较弱.后者的激子半径小于或等于晶格常数,可以称为小激子,其电子空穴束缚紧密.

对于Wannier-Mott激子,我们可以忽略晶格结构而用连续模型来理解,具体而言我们认为导带的电子和价带的空穴通过Coulomb相互作用$e^2/(\epsilon|r_e - r_h|)$形成等效的氢原子.因此,若假设电子质量为$m_e$,空穴质量为$m_h$,并且都在高对称点,例如$\Gamma$点展开,那么相应的Schodinger方程就是氢原子的方程,只不过相对运动部分的质量是$\overline{M} = \frac{m_e m_h}{m_e+m_h}$, 质心运动的质量为$M = m_e + m_h$,这样套用氢原子的结果可知系统的能量为

$$E_n(k) = E_g - \frac{\overline{M}e^4}{2\hbar^2\epsilon^2}\frac{1}{n^2} + \frac{\hbar k^2}{2M} \tag{14.249}$$

这里E_g是价带顶到导带底的能量差,也就是(直接)能隙.第二项是形成激子的能量降低,第三项是激子作为整体运动时的动能.当激子动量为$\hbar k$为零时,我们看到激子能级总是在能隙中,这与光吸收实验结果是一致的.我们可以定义激子的有效半径为

$$a_{ex} = \epsilon\frac{\hbar^2}{\overline{M}e^2} = \epsilon\frac{m}{\overline{M}}a_H \tag{14.250}$$

这里$a_H = \hbar^2/(me^2)$是Bohr半径.对于Wannier-Mott激子,我们要求$a_{ex} >> a_H$,这要求$\epsilon >> 1, \overline{M} \leq m$. 这个条件对于多数的半导体和绝缘晶体都是满足的,因此Wannier-Mott激子是常见的激子.与之相反,当$\epsilon \sim 1, \overline{M} \sim m$时,我们需要考虑Frenkel激子.

对于Frenkel激子,其是空间比较局域的激发,通常由同一个原子不同能级电子形成或同一个格点不同能带的电子和空穴形成.一个简单的晶格模型可以写成如下形式:

$$\hat{H} = \sum_{ij} t^c_{ij}\hat{c}^\dagger_i\hat{c}_j + \sum_{ij} t^d_{ij}\hat{d}^\dagger_i\hat{d}_j + V\sum_j \hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j\hat{d}^\dagger_j\hat{d}_j \tag{14.251}$$

$\hat{c},\hat{d}$分别是导带和价带电子的湮灭算符.通过傅里叶变换,我们可以写出动量空间的哈密顿量,

$$\hat{H}=\hat{H}_c+\hat{H}_d+\hat{H}_{int}=\sum_k \varepsilon_k^c \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k+\sum_k \varepsilon_k^d \hat{d}_k^\dagger \hat{d}_k+\frac{V}{N_s}\sum_{kk'q}\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_k \hat{d}_{k'-q}^\dagger \hat{d}_{k'} \tag{14.252}$$

当$V=0$时,我们假设价带完全填满,导带全空,(也就是半满情况)此时系统是能带绝缘体,零温时的基态波函数可以写成

$$|\Psi_g\rangle=\sum_k \hat{d}_k^\dagger|0\rangle. \tag{14.253}$$

现在让我们考虑系统可能形成的激子态,也就是在价带湮灭一个电子(产生一个空穴)然后在导带产生一个电子,这可以表示为$\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{d}_k$. 这个复合体的总动量是$q$,并且我们并不关心复合体内部电子的动量信息,因此更有价值的量应对动量求和,也就是我们定义如下激子的产生算符:

$$\hat{B}_q^\dagger=\sum_k g(k)\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{d}_k \tag{14.254}$$

这里$g(k)$反应的是激子内部电子和空穴间的相对运动情况,类似于Wannier-Mott激子时内部运动的类氢原子波函数.接下来,利用运动方程可以计算激子在基态$|\Psi_g\rangle$上的激发能ω,即

$$\boxed{[\hat{H},\hat{B}_q^\dagger]|\Psi_g\rangle=\omega\hat{B}_q^\dagger|\Psi_g\rangle}. \tag{14.255}$$

求解该方程需要先计算对易关系,

$$[\hat{H}_c,\hat{B}_q^\dagger]=\sum_k \varepsilon_{k+q}^c g(k)\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{d}_k \tag{14.256}$$

$$[\hat{H}_d,\hat{B}_q^\dagger]=-\sum_k \varepsilon_k^d g(k)\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{d}_k \tag{14.257}$$

$$[\hat{H}_{int},\hat{B}_q^\dagger]=\frac{V}{N_s}\sum_{kk'q'} g(k)(\hat{c}_{k+q+q'}^\dagger \hat{d}_{k'-q'}^\dagger \hat{d}_{k'}\hat{d}_k-\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_{k'+q'}^\dagger \hat{c}_{k'}\hat{d}_{k+q}) \tag{14.258}$$

注意到$[\hat{H}_{int},\hat{B}_q^\dagger]$作用于基态后第二项自动为零,则有

$$\left[\sum_k(\varepsilon_{k+q}^c-\varepsilon_k^d-\omega)g(k)\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{d}_k+\sum_k g(k)\frac{V}{N_s}\sum_{k'q'}\hat{c}_{k+q+q'}^\dagger \hat{d}_{k'-q'}^\dagger \hat{d}_{k'}\hat{d}_k\right]|\Psi_g\rangle=0 \tag{14.259}$$

为了进一步处理,让我们交换上式第二项中的k,k'可得

$$\left[\sum_k(\varepsilon_{k+q}^c-\varepsilon_k^d-\omega)g(k)\hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{d}_k+\frac{V}{N_s}\sum_k\sum_{k'q'} g(k')\hat{c}_{k'+q+q'}^\dagger(\delta_{q'=0}-\hat{d}_k\hat{d}_{k-q'}^\dagger)\hat{d}_{k'}\right]|\Psi_g\rangle=0 \tag{14.260}$$

即有

$$\left[\sum_k(\varepsilon^c_{k+q}-\varepsilon^d_k+V-\omega)g(k)\hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{d}_k-\frac{V}{N_s}\sum_k\sum_{k'q'}g(k')\hat{c}^\dagger_{k'+q+q'}\hat{d}_k\hat{d}^\dagger_{k-q'}\hat{d}_{k'}\right]|\Psi_g\rangle=0 \tag{14.261}$$

在最简单的平均场近似下,我们可以用$\langle\hat{d}^\dagger_{k-q'}\hat{d}_{k'}\rangle$在自由费米气体下的平均代替$\hat{d}^\dagger_{k-q'}\hat{d}_{k'}$,此时$\langle\hat{d}^\dagger_{k-q'}\hat{d}_{k'}\rangle=\delta_{q=k-k'}\langle\hat{d}^\dagger_{k'}\hat{d}_{k'}\rangle=\delta_{q=k-k'}$, 因此

$$\sum_k\left[(\varepsilon^c_{k+q}-\varepsilon^d_k+V-\omega)g(k)-\frac{V}{N_s}\sum_{k'}g(k')\right]\hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{d}_k|\Psi_g\rangle=0 \tag{14.262}$$

这样我们可得

$$g(k)=\frac{1}{\varepsilon^c_{k+q}-\varepsilon^d_k+V-\omega}\frac{V}{N_s}\sum_{k'}g(k') \tag{14.263}$$

两边对k求和并消去$\sum_k g(k)$,我们得到最终的方程为

$$\boxed{1=\frac{1}{N_s}\sum_k\frac{V}{\varepsilon^c_{k+q}-\varepsilon^d_k+V-\omega}} \tag{14.264}$$

这个方程在给定$V,\varepsilon^c_k,\varepsilon^d_k$后可以数值求解.当然,我们可以假设导带和价带具有简单的关系,即$\varepsilon^c_k=-\varepsilon^d_k$,并且$\varepsilon^c_k$取值从$\Delta$到$W+\Delta$,($2\Delta$是导带与价带的能隙)其态密度可以用一个常数态密度$N(0)$代替,那么上述方程在$q=0$时可以简化为

$$\frac{1}{N(0)V}=\int_\Delta^{W+\Delta}d\varepsilon\frac{1}{2\varepsilon+V-\omega} \tag{14.265}$$

由此可解得

$$\frac{1}{N(0)V}=\ln\frac{2(W+\Delta)+V-\omega}{2\Delta+V-\omega} \tag{14.266}$$

当能带宽度远大于V时,上式的解处于弱耦合情况,此时分子近似为$2(W+\Delta)$,这样我们发现激子的能量为

$$\omega=2\Delta+V-2(W+\Delta)e^{-\frac{2}{N(0)V}} \tag{14.267}$$

这里第一项是产生电子-空穴激发所需克服的能隙的能量,V是相互作用贡献的Hartree 能量.第三项是电子− 空穴相互吸引导致的能量降低,也就是形成激子相对于自由电子−空穴激发的能量降低,可以称为激子的束缚能.

注意到激子的对易关系$[\hat{B}_q,\hat{B}^\dagger_{q'}]=\sum_{kk'}g^*(k)g(k')\delta_{k+q,k'+q'}\hat{d}^\dagger_k\hat{d}_{k'}$ 在基态下近似为$[\hat{B}_q,\hat{B}^\dagger_{q'}]=\delta_{q,q'}\sum_k|g(k)|^2$, 这说明激子可看成是玻色子.既然激子是玻色子,因此可以发生玻色凝聚.对于当前的模型,我们期待同格点的电子−空穴激发形成的激子出现凝聚现象,所以我们设激子凝聚序参量为$\Delta_{ex}=\langle\hat{d}^\dagger_j\hat{c}_j\rangle\neq0$,物理上这对应$j$格点产生一对电子−空穴对的束缚态.($\hat{d}^\dagger_j\hat{c}_j=\frac{1}{N_s}\sum_q e^{-iqR_j}\sum_k\hat{c}^\dagger_{k+q}\hat{d}_k=\frac{1}{N_s}\sum_q e^{-iqR_j}\hat{B}^\dagger_q$) 当这种电子−空穴束缚态,也就是

局域的Frenkel激子大量存在且产生相位相干,系统就进入了激子有序态.此时,在均匀平均场近似下可以认为Δ_{ex}与空间位置无关,那么系统的哈密顿量可写为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{ij} t^c_{ij}\hat{c}^\dagger_i\hat{c}_j + \sum_{ij} t^d_{ij}\hat{d}^\dagger_i\hat{d}_j - V\sum_j(\Delta_{ex}\hat{c}^\dagger_j\hat{d}_j + \Delta^*_{ex}\hat{d}^\dagger_j\hat{c}_j) + VN_s|\Delta_{ex}|^2 \\ &= \sum_k(\varepsilon^c_k\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k + \varepsilon^d_k\hat{d}^\dagger_k\hat{d}_k + \Delta_{ex}\hat{c}^\dagger_k\hat{d}_k + \Delta^*_{ex}\hat{d}^\dagger_k\hat{c}_k) + VN_s|\Delta_{ex}|^2 \end{aligned} \tag{14.268}$$

由此我们可得系统的两支色散为

$$E_{k\pm} = \frac{1}{2}\left[\varepsilon^c_k + \varepsilon^d_k \pm \sqrt{(\varepsilon^c_k - \varepsilon^d_k)^2 + |\Delta_{ex}|^2}\right] \tag{14.269}$$

为简单起见,我们设$\varepsilon^d_k = \varepsilon^c_k + E_g, E_g > max|\varepsilon^c_k|$, 则有

$$E_{k\pm} = \frac{1}{2}\left[2\varepsilon^c_k + E_g \pm \sqrt{E_g^2 + |\Delta_{ex}|^2}\right] \tag{14.270}$$

我们发现,由于激子凝聚,价带能量进一步下移,而导带能量升高.因此若系统仍然半满,那么系统仍然是绝缘体,只不过此时也可称为激子型绝缘体.当然,具体判断是否存在激子态需要计算系统的自由能或者基态能量,若该能量低于无形成激子时的能量,那么激子态是可以稳定存在的.从非激子态到激子态的转变可由温度导致也可是调节其他非热参数的量子相变.

- 我们这里讨论了最简单的局域激子,更一般地说,相互作用形成的激子态可以具有复杂的色散关系,例如针对近藤绝缘体SmB_6提出的磁性激子模型.[94]

HK模型的一些计算细节

系统热力学量可以直接通过自由能或者自由能的导数确定,其计算相对直接,对于一般的物理量平均

$$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\hat{\mathcal{O}}e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}} = \frac{\mathrm{Tr}\hat{\mathcal{O}}\prod_k e^{-\beta\hat{H}_k}}{\prod_k \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_k}} \tag{14.271}$$

需要更为仔细的考虑.对于静态物理量,我们主要遇到的是单粒子和双粒子关联函数,例如$\langle\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma'}\rangle$,$\langle\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma'}\hat{c}^\dagger_{m\beta}\hat{c}_{n\beta'}\rangle$, 这里我们考虑的是实空间的关联函数.注意到哈密顿量在动量空间对角化,这样我们把电子算符转换至动量空间可得

$$\langle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\prod_q e^{-\beta\hat{H}_q}}{\prod_q \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_q}} = \delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\langle\hat{n}_{k\sigma}\rangle \tag{14.272}$$

$$\langle\hat{n}_{k\sigma}\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\hat{n}_{k\sigma}e^{-\beta\hat{H}_k}\prod_{q\neq k} f_q}{f_k\prod_{q\neq k} f_q} = \frac{0 + \delta_{\sigma,\uparrow}e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)} + \delta_{\sigma,\downarrow}e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)} + e^{-\beta(2\varepsilon_k-2\mu+U)}}{f_k} = \frac{z_k}{f_k} + \frac{z_k^2 e^{-\beta U}}{f_k} \tag{14.273}$$

[94] [Knolle,Cooper,Excitons in topological Kondo insulators: Theory of thermodynamic and transport anomalies in SmB_6,Phys.Rev.Lett.**118**,096604(2017)]

这样有

$$\langle \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma'}\rangle = \frac{1}{N_s}\sum_{k,k'} e^{-ikR_i+ik'R_j}\langle \hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{c}_{k'\sigma'}\rangle = \delta_{\sigma,\sigma'}\frac{1}{N_s}\sum_{k} e^{-ik(R_i-R_j)}\langle \hat{n}_{k\sigma}\rangle. \tag{14.274}$$

对于双粒子关联函数,我们先观察一下结果:

$$\hat{c}_{k\sigma} = \hat{c}_{k\sigma}\sum_{\alpha}|\alpha\rangle_k\langle\alpha|_k = \hat{c}_{k\sigma}(|0\rangle_k\langle 0|_k + |\uparrow\rangle_k\langle\uparrow|_k + |\downarrow\rangle_k\langle\downarrow|_k + |\uparrow\downarrow\rangle_k\langle\uparrow\downarrow|_k) = |0\rangle_k\langle\sigma|_k + \sigma|-\sigma\rangle_k\langle\uparrow\downarrow|_k \tag{14.275}$$

$$\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\sum_{\alpha}|\alpha\rangle_k\langle\alpha|_k = \hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}(|0\rangle_k\langle 0|_k + |\uparrow\rangle_k\langle\uparrow|_k + |\downarrow\rangle_k\langle\downarrow|_k + |\uparrow\downarrow\rangle_k\langle\uparrow\downarrow|_k) = |\sigma\rangle_k\langle 0|_k + \sigma|\uparrow\downarrow\rangle_k\langle -\sigma|_k \tag{14.276}$$

因此,我们可以把电子算符转换为本征态的投影形式.现在,让我们考虑如下动量空间算符的计算,即

$$\langle \hat{c}^{\dagger}_{k_1\sigma}\hat{c}_{k_2\sigma'}\hat{c}^{\dagger}_{k_3\beta}\hat{c}_{k_4\beta'}\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\hat{c}^{\dagger}_{k_1\sigma}\hat{c}_{k_2\sigma'}\hat{c}^{\dagger}_{k_3\beta}\hat{c}_{k_4\beta'}e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}}. \tag{14.277}$$

为了计算分子,我们可以把电子算符用本征态的投影形式代替,这样有

$$\begin{aligned}\hat{c}^{\dagger}_{k_1\sigma}\hat{c}_{k_2\sigma'}\hat{c}^{\dagger}_{k_3\beta}\hat{c}_{k_4\beta'} &= (|\sigma\rangle_{k_1}\langle 0|_{k_1} + \sigma|\uparrow\downarrow\rangle_{k_1}\langle -\sigma|_{k_1})(|0\rangle_{k_2}\langle\sigma'|_{k_2} + \sigma'|-\sigma'\rangle_{k_2}\langle\uparrow\downarrow|_{k_2}) \\ &\times (|\beta\rangle_{k_3}\langle 0|_{k_3} + \beta|\uparrow\downarrow\rangle_{k_3}\langle -\beta|_{k_3})(|0\rangle_{k_4}\langle\beta'|_{k_4} + \beta'|-\beta'\rangle_{k_4}\langle\uparrow\downarrow|_{k_4})\end{aligned}$$

第十四章习题

习题1:六角晶格Hubbard模型

Q1:让我们考虑六角晶格上的Hubbard模型,其哈密顿量为

$$H=-t\sum_{i,\delta}(\hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{b}_{i+\delta,\sigma}+\hat{b}^{\dagger}_{i+\delta,\sigma}\hat{a}_{i,\sigma})+U\sum_{i}(\hat{a}^{\dagger}_{i\uparrow}\hat{a}_{i\uparrow}\hat{a}^{\dagger}_{i\downarrow}\hat{a}_{i\downarrow}+\hat{b}^{\dagger}_{i\uparrow}\hat{b}_{i\uparrow}\hat{b}^{\dagger}_{i\downarrow}\hat{b}_{i\downarrow})-\mu\sum_{i,\sigma}(\hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{a}_{i,\sigma}+\hat{b}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{b}_{i,\sigma}) \tag{14.278}$$

这里$\hat{a}_{i,\sigma},\hat{b}_{i,\sigma}$是$A,B$子格电子的湮灭算符.$t$代表最近邻格点间存在跃迁,$\mu$为化学势,$U$是Hubbard相互作用强度.设$U=0,\mu=0$,利用傅里叶变换证明哈密顿量可以改写为$H=-t\sum_{k\delta}(f(k)\hat{a}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{b}_{k\sigma}+f^{*}(k)\hat{b}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{a}_{k\sigma}),f(k)=e^{ik_x}+2e^{-ik_x/2}\cos(\sqrt{3}k_y/2)$.(提示:参考10.4节的讨论)

Q2:仿照正方晶格Hubbard模型的讨论,设平均场序参量$m_A=\langle\hat{a}^{\dagger}_{i\uparrow}\hat{a}_{i\uparrow}-\hat{a}^{\dagger}_{i\downarrow}\hat{a}_{i\downarrow}\rangle$,$m_B=\langle\hat{b}^{\dagger}_{i\uparrow}\hat{b}_{i\uparrow}-\hat{b}^{\dagger}_{i\downarrow}\hat{b}_{i\downarrow}\rangle$,证明Hubbard相互作用项可以改写为

$$\begin{aligned}U(\hat{a}^{\dagger}_{i\uparrow}\hat{a}_{i\uparrow}\hat{a}^{\dagger}_{i\downarrow}\hat{a}_{i\downarrow}+\hat{b}^{\dagger}_{i\uparrow}\hat{b}_{i\uparrow}\hat{b}^{\dagger}_{i\downarrow}\hat{b}_{i\downarrow}) &\simeq -U\sum_{\sigma}\sigma(m^{A}\hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{a}_{i,\sigma}+m^{B}\hat{b}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{b}_{i,\sigma})+\frac{U}{2}(m_A^2+m_B^2)\\ &+\frac{U}{2}\sum_{\sigma}(\hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{a}_{i,\sigma}+\hat{b}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{b}_{i,\sigma})\end{aligned} \tag{14.279}$$

Q3:在电子半满填充时$\mu=U/2$,此时我们假设反铁磁有序可以通过序参量$m_A=-m_B=m>0$实现,证明动量空间的哈密顿量是

$$H_{MF}=\sum_{k\sigma}\begin{pmatrix}\hat{a}^{\dagger}_{k\sigma}, & \hat{b}^{\dagger}_{k\sigma}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-Um\sigma & -tf(k)\\ -tf^{*}(k) & Um\sigma\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{a}_{k\sigma}\\ \hat{b}_{k\sigma}\end{pmatrix}+UN_sm^2. \tag{14.280}$$

这里N_s是元胞的数目.

Q4:对角化Q3中的2×2矩阵可得本征能量是$E_{k\pm}=\pm\sqrt{t^2|f(k)|^2+(Um)^2}$,这样体系的自由能是$F=-T\sum_{k\sigma}(\ln(1+e^{-E_{k+}/T})+\ln(1+e^{-E_{k-}/T}))+UN_sm^2$.试利用自由能取极值条件$\frac{\partial F}{\partial m^2}=0$证明平均场方程是($f_F(x)=1/(e^{x/T}+1)$是费米分布函数)

$$1=\frac{U}{N_s}\sum_{k}\frac{f_F(-E_{k+})-f_F(E_{k+})}{E_{k+}}. \tag{14.281}$$

Q5:考虑Q4中的平均场方程的低能极限,注意到$\frac{1}{N_s}\sum_k\to\int_{-D}^{D}dd\varepsilon N(\varepsilon),N(\varepsilon)=\frac{|\varepsilon|}{D^2},t^2|f(k)|^2\to\varepsilon^2$,试证明零温时平均场方程给出

$$1=\frac{2U}{D}\left(\sqrt{1+(Um/D)^2}-Um/D\right) \tag{14.282}$$

由此我们发现六角晶格半满时反铁磁序参量m在$U<U_c\neq0$时为零,这说明体系存在从Dirac半金属态到反铁磁绝缘态的量子相变.

习题2:电荷密度波

Q1:考虑一维相互作用费米子模型:

$$H=-t\sum_j(c_j^\dagger c_{j+1}+c_{j+1}^\dagger c_j)+V\sum_j(c_j^\dagger c_j-1/2)(c_{j+1}^\dagger c_{j+1}-1/2)$$

这里$t>0,V$分别是最近邻跃迁强度与相互作用强度,系统满足周期边界条件.利用傅里叶变换写出H在动量空间的形式并指出$V=0$时的基态是什么.

Q2:利用量子力学的微扰理论计算相互作用V对基态能量的修正.(准确至V的一次项)

Q3:若设电荷密度波态的序参量为$\Delta_j=\langle c_j^\dagger c_j\rangle-1/2$,写出平均场近似下的哈密顿量.假设$\Delta_j=(-1)^j\Delta$,试对角化动量空间的哈密顿量并求出电子的本征能量.

Q4:利用Q3中所得的本征能量写出系统的自由能,最后利用自由能对Δ求导为零的条件得到序参量Δ满足的方程.

Q5:判断有限温度时系统是否存在电荷密度波态,若不存在则写出是哪个定理要求这个有序态不存在.

Q5:利用Jordan-Wigner变换写出H用自旋表示的形式并说明$V=0$时的基态下自旋处于什么样的状态.

习题3:Anderson杂质模型

Q1:DMFT研究最核心的问题便是通过Anderson杂质模型自洽计算系统的Green函数,现在考虑如下的Anderson杂质模型:

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}(\Lambda_k\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\hat{c}_{0\sigma})-\mu\sum_\sigma\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\hat{c}_{0\sigma}+U\hat{c}_{0\uparrow}^\dagger\hat{c}_{0\uparrow}\hat{c}_{0\downarrow}^\dagger\hat{c}_{0\downarrow}. \tag{14.283}$$

试证明对易关系$[\hat{c}_{0\sigma},H]=-\mu\hat{c}_{0\sigma}+\sum_k V_k\hat{d}_{k\sigma}+U\hat{c}_{0\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}$,$[\hat{d}_{k\sigma},H]=\Lambda_k\hat{d}_{k\sigma}+V_k\hat{c}_{0\sigma}$ ($\hat{n}_{0\bar{\sigma}}=\hat{c}_{0\bar{\sigma}}^\dagger\hat{c}_{0\bar{\sigma}},\bar{\sigma}=-\sigma$).然后利用这些关系并结合推迟Green函数的运动方程方法证明$U=0$时的Green函数(提示:运动方程是$\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_\omega=\langle[\hat{A},\hat{B}]_+\rangle+\langle\langle[\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_\omega$,)

$$\langle\langle\hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{1}{\omega+\mu-\sum_k\frac{V_k^2}{\omega-\Lambda_k}}. \tag{14.284}$$

$$\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{V_k}{\omega-\Lambda_k}\langle\langle\hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega. \tag{14.285}$$

$$\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{d}_{k\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{1}{\omega-\Lambda_k}+\frac{1}{\omega-\Lambda_k}V_k^2\langle\langle\hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega\frac{1}{\omega-\Lambda_k}. \tag{14.286}$$

Q2:当$U\neq0$时试证明

$$\omega\langle\langle\hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega=1+\sum_k V_k\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{c}_{0\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega+U\langle\langle\hat{c}_{0\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}|c_{0\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega, \tag{14.287}$$

在平均场近似下$\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}|c^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle \simeq \langle\hat{n}_{0\bar{\sigma}}\rangle\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}|c^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$,此时$\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{\omega+\mu-\sum_k \frac{V_k^2}{\omega-\Lambda_k}-U\langle\hat{n}_{0\bar{\sigma}}\rangle}$.设$V_k = V$,$\sum_k \frac{1}{\omega-\Lambda_k} \to \int_{-D}^{D} d\varepsilon \frac{N(\varepsilon)}{\omega-\varepsilon+i0^+}$,($D$ 是能带半宽)考虑常数态密度$N(\varepsilon) = \frac{1}{2D} \equiv \rho_0$,试证明在$D \gg |\omega|$时有$\sum_k \frac{V_k^2}{\omega-\Lambda_k} = -i\Delta(\Delta = \pi\rho_0 V^2)$.(提示:利用$\frac{1}{x+i0^+} = \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$)

Q3:当$U \neq 0$时试证明

$$(\omega+\mu-U)\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = \langle\hat{n}_{0\bar{\sigma}}\rangle + \sum_{k'} V_{k'}\langle\langle \hat{d}_{k'\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega} + \sum_{k'} V_{k'}\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}(\hat{d}^{\dagger}_{k'\bar{\sigma}}\hat{c}_{0\bar{\sigma}} - \hat{c}^{\dagger}_{0\bar{\sigma}}\hat{d}_{k'\bar{\sigma}})|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \tag{14.288}$$

并利用平均场近似$\langle\langle \hat{d}_{k'\sigma}\hat{n}_{0\bar{\sigma}}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \simeq \langle\hat{n}_{0\bar{\sigma}}\rangle\langle\langle \hat{d}_{k'\sigma}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$,$\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}(\hat{d}^{\dagger}_{k'\bar{\sigma}}\hat{c}_{0\bar{\sigma}} - \hat{c}^{\dagger}_{0\bar{\sigma}}\hat{d}_{k'\bar{\sigma}})|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega} \simeq (\langle\hat{d}^{\dagger}_{k'\bar{\sigma}}\hat{c}_{0\bar{\sigma}}\rangle - \langle\hat{c}^{\dagger}_{0\bar{\sigma}}\hat{d}_{k'\bar{\sigma}}\rangle)\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = 0$,计算Green函数$\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$,指出其极点的类型和位置.(文献中称这一层次的近似为双极点近似,如果建立下一阶的Green函数并采取平均场近似,那么我们可以定性得到Kondo共振峰.)

Q4:对于Q2中的Green函数$\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$,设$N(\varepsilon) = |\varepsilon|/D^2$,计算 $\langle\langle \hat{c}_{0\sigma}|\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma}\rangle\rangle_{\omega}$的具体形式.这里计算的Green函数是石墨烯中磁性杂质问题研究的基本出发点.

Bibliography

[1] S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, 第十八章

[2] P. Fazekas, Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetizatism, 第四章-第十章

[3] M. A. Continentino, Quantum Scaling in Many-Body Systems, 第九章,第十章

[4] P. Phillips, Advanced Solid State Physics, 第十六章

[5] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963).

[6] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **277**, 237 (1964).

[7] 李正中, 固体理论, 第十章.

Chapter 15

晶格规范理论:从Wagner到Kitaev

规范理论与晶格规范场:生活在格点上

在讨论晶格规范理论之前,我们需要回忆什么是规范理论.以熟悉的经典电磁学为例,我们引入矢量场$\vec{A}$ 以描述物理的磁场$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. 注意到在变换$\vec{A} \to \vec{A} + \nabla\varphi(x)$下,$\vec{A}$发生改变,但是$\vec{B}$不变($\nabla \times \nabla\varphi(x) = 0$).这说明不同的矢量势$\vec{A}$ 对应同一个物理的磁场,我们把对同一个物理系统的不同非物理标记称为规范,相应的场称为规范场,电磁理论中的矢量势$\vec{A}$就是最熟悉和典型的规范场.

进一步,规范理论与系统的局域不变性紧密相连.这里,考虑最简单的量子力学问题,即一个自由粒子,其哈密顿量为$H = -\frac{\nabla^2}{2m}$满足本征方程$H\psi = E\psi$. 现在,假设空间任意位置的波函数都有相位因子变换$\psi \to \psi e^{i\alpha(x)}$,显然由于$\alpha(x)$具有任意空间依赖关系,变换后的本征方程与先前的方程形式上已经大不相同.注意到波函数的任意相位因子是非物理的,因此我们要求相位变换前后的方程形式上必须不变,这可以通过引入规范场$\vec{A}$实现,即$H = -\frac{(\nabla - iq\vec{A})^2}{2m}$,这里$q$ 解释为粒子所带规范荷,对电磁场即为电荷.当波函数做相位变换时,令$\vec{A}$做规范变换$\vec{A} \to \vec{A} + \frac{1}{q}\nabla\alpha(x)$, 那么此时的方程形式完全不变.注意到方程对任意局部的相位因子变换形式不变,这称为局域不变性,又因为这类不变性通过引入规范场来实现,因而可称为局域规范不变性.这说明物理系统的局域不变性通过引入规范理论得以实现.

- 规范不变性不是物理的对称性,其仅表示多对一标记物理态具有冗余性这一事实.

在上述的两个例子中,规范场定义在连续空间当中,换句话是空间中每一个点都定义了规范场.若是考虑一个晶格系统,并且把规范场定义在晶格(链接)上,那么相应的理论就称为晶格规范理论,此时的规范场叫做晶格规范场.

- 定义在晶格上的规范理论称为晶格规范理论.

例如,考虑紧密束缚模型$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j$ 并且粒子算符有相位因子变换$\hat{c}_j \to \hat{c}_j e^{i\theta_j}$,这样哈密顿量变为$\hat{H} \to \hat{H} = \sum_{ij} t_{ij}e^{-i(\theta_i-\theta_j)}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j$. 为使哈密顿量保持不变,仿照连续空间的情况可引入晶格规范场a_{ij}且满足规范变换$a_{ij} \to a_{ij} + (\theta_i - \theta_j)$,这样满足局域规范不变的哈密顿量便是$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij}e^{ia_{ij}}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j$.($a_{ij}$ 理解为定义在i,j格点间的链接上)

历史上,晶格规范理论主要用来理解量子色动力学中的夸克禁闭问题,但在凝聚态物理研究中,其重要性确越来越高,特别适用于研究和拓扑有序相关的问题,例如:

- 量子自旋液体的有效理论描述;
- 分数量子霍尔效应以及分数Chern和分数拓扑绝缘体;
- 高温超导的规范理论描述;
- 拓扑量子计算,这是目前大家最为关心的话题之一.

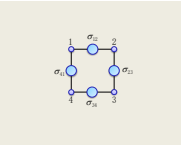


Figure 15.1: 一个plaquettes上的经典Ising规范理论模型,每个Ising自旋$\sigma_{ij}=\pm 1$定义在格点之间链接上.

玩具模型

我们首先考虑一个玩具模型,该模型定义在一个正方形(plaquettes)上,共有四个Ising 自旋,与经典Ising 模型不同,自旋定义在格点之间的链接(link)上,即

$$H_4=-J\sigma_{1,2}\sigma_{2,3}\sigma_{3,4}\sigma_{4,1},\quad J>0 \tag{15.1}$$

这里$\sigma_{i,j}$表示i与j格点间的链接上的Ising自旋,取值为± 1.

可以发现,H_4具有如下的局域Z_2规范不变性/对称性:

$$G(i):\quad \sigma_{i,j}\to-\sigma_{i,j},\quad \sigma_{j,i}\to-\sigma_{j,i} \tag{15.2}$$

直观来看,相当于以某一个格点i为中心,所有从i出发的最近邻链接上的自旋都取反号,此时哈密顿量H_4是不变的.在当前的模型中,如果我们考虑$G(1)$,那么有$\sigma_{1,2}\to-\sigma_{1,2},\sigma_{4,1}\to-\sigma_{4,1}$

$$H_4\to H_4'=-J(-1)\sigma_{1,2}\sigma_{2,3}\sigma_{3,4}(-1)\sigma_{4,1}=-J\sigma_{1,2}\sigma_{2,3}\sigma_{3,4}\sigma_{4,1}=H_4 \tag{15.3}$$

由于每一个自旋取值仅有± 1,那么体系总的自旋位形是$2^4=16$,我们可以发现体系的能量实际上是高度简并的,有八种自旋位形的能量是$-J$而另外八个位形能量是$+J$.8个基态能量位形是

$$\begin{aligned}
&\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_1=(+,+,+,+)\\
&\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_2=(+,+,-,-)\\
&\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_3=(+,-,+,-)\\
&\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_4=(+,-,-,+)\\
&\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_5=(-,+,+,-)\\
&\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_6=(-,+,-,+)\\
&\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_7=(-,-,+,+)\\
&\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_8=(-,-,-,-)
\end{aligned}$$

8个激发态位形是

$$\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_9=(+,+,+,-)$$
$$\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_{10}=(+,+,-,+)$$
$$\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_{11}=(+,-,+,+)$$
$$\sigma_{1,2}=+1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_{12}=(+,-,-,-)$$
$$\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_{13}=(-,+,+,+)$$
$$\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=+1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_{14}=(-,+,-,-)$$
$$\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=+1,\sigma_{4,1}=-1;\quad M_{15}=(-,-,+,-)$$
$$\sigma_{1,2}=-1,\sigma_{2,3}=-1,\sigma_{3,4}=-1,\sigma_{4,1}=+1;\quad M_{16}=(-,-,-,+)$$

此外,可以看到体系总规范变换的数目(有些变换是等价的)也是$2^4=C_4^0+C_4^1+C_4^2+C_4^3+C_4^4=16$:

$$C_4^0:\quad 1 \tag{15.4}$$

也就是什么都不干的不变/恒等操作.

$$C_4^1:\quad G(1),\ \ G(2),\ \ G(3),\ \ G(4) \tag{15.5}$$

这一类是只在一个格点上做规范变换的四种情况,例如对于规范变换$G(1)$,我们发现自旋位形可以彼此联系

$$G(1):M_1\rightleftharpoons M_5,M_2\rightleftharpoons M_6,M_3\rightleftharpoons M_7,M_4\rightleftharpoons M_8,M_9\rightleftharpoons M_{13},M_{10}\rightleftharpoons M_{14},M_{11}\rightleftharpoons M_{15},M_{12}\rightleftharpoons M_{16}$$

通常把通过规范变换可以彼此联系的位形的集合叫做规范等价类.由于规范操作并不是物理上的操作,因而同一规范等价类的位形物理上完全一样,换句话说在$G(1)$ 变换下,位形M_1与M_5对应同样的物理状态.在具体考虑问题时,可以不用计数所有的位形,而只需要挑出代表性的位形就可以,这里代表性的位形就从不同的规范等价类当中任意挑选.

进一步考虑$G(3)$有($G(2)$效果已经由$G(1)$的规范等价类完全包含)

$$G(3):M_1\rightleftharpoons M_3,M_2\rightleftharpoons M_4,M_9\rightleftharpoons M_{12},M_{10}\rightleftharpoons M_{11} \tag{15.6}$$

最后考虑$G(4)$

$$G(4):M_1\rightleftharpoons M_2,M_9\rightleftharpoons M_{10} \tag{15.7}$$

换句话说,我们得到重要的结论,即在规范变换下,简并的能级之间是规范等价的,共同属于一个大的规范等价类. 在当前的玩具模型中,只有两类不同的规范等价类,即能量为$-J$位形和$+J$的位形各自对应的等价类.

$$
\begin{aligned}
C_4^2 \quad & : G(1)G(2) = G(3)G(4) \;\; \sigma_2 \to -\sigma_2, \sigma_4 \to \sigma_4 \\
& G(1)G(3) = G(2)G(4) \;\; \sigma_1 \to -\sigma_1, \sigma_2 \to -\sigma_2, \sigma_3 \to -\sigma_3, \sigma_4 \to -\sigma_4 \\
& G(1)G(4) = G(2)G(3) \;\; \sigma_1 \to -\sigma_1, \sigma_3 \to -\sigma_3
\end{aligned} \tag{15.8}
$$

显然这三个操作与先前的四个操作是不等价的.

$$
C_4^3 : G(1)G(2)G(3) = G(4), \;\; G(2)G(3)G(4) = G(1), \;\; G(3)G(4)G(1) = G(2), \;\; G(4)G(1)G(2) = G(3)
$$

这四个操作并没给出新的操作,因而是重复的. 最后是C_4^4即$G(1)G(2)G(3)G(4) = 1$是不变操作,与前面重复.这样我们发现体系不等价的规范变换有八个,即

$$
1, G(1), G(2), G(3), G(4), G(1)G(2), G(1)G(3), G(1)G(4). \tag{15.9}
$$

换句话说,对于任意一个位形,我们作用上这八个规范变换后就可以得到相应的规范等价类,比如我们知道M_1,那么作用后可以得到剩下的7个规范等价位形$M_2, M_3, M_4, M_5, M_6, M_7, M_8$.这表明规范等价类的数目等于总位形的数目除以不等价规范操作的数目($2^4/8 = 2$).

在有了这些准备以后,对于H_4,我们可以只用M_1和M_9来作为位形的代表(它们是不同等价类的代表位形),这样体系的配分函数在排除规范等价态的情况下是

$$
\mathcal{Z}_p = e^{+\beta J} + e^{-\beta J} \tag{15.10}
$$

而如果考虑规范等价态则是乘以等价态的数目/简并度8

$$
\mathcal{Z} = 8(e^{+\beta J} + e^{-\beta J}) = 16\cosh(\beta J). \tag{15.11}
$$

自由能是

$$
\mathcal{F} = -T\ln\mathcal{Z} = -T\ln 16 - T\ln\cosh(\beta J). \tag{15.12}
$$

热力学熵是

$$
\mathcal{S} = -\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial T} = \ln 16 + \ln\cosh(\beta J) - \frac{J}{T}\tanh(\beta J). \tag{15.13}
$$

内能是

$$
\mathcal{U} = \mathcal{F} + T\mathcal{S} = -J\tanh(\beta J). \tag{15.14}
$$

当系统温度为零时,我们发现系统的熵是

$$
\mathcal{S}(T=0) = \left(\ln 16 + \ln e^{\beta J} - \ln 2 - \frac{J}{T}\right)_{T=0} = \ln 8 \tag{15.15}
$$

这说明零温基态时系统八重简并,这与先前发现的8个简并基态完全一致.

最后,考察(局域/Landau)序参量$\langle\sigma_{i,i+1}\rangle$的情况,

$$\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_h = \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{\{\sigma\}}\sigma_{i,i+1}e^{-\beta H_4+\beta h\sum_i\sigma_{i,i+1}}, \sigma_{4,5}=\sigma_{4,1} \tag{15.16}$$

通过做一个规范变换,我们总可以使得自旋$\sigma_{i,i+1}$反号,而哈密顿量H_4不变,但是磁场部分会改变,即$h\sum_i\sigma_{i,i+1}\to h\sum_i\sigma_{i,i+1}-2h(\sigma_{i,i+1}+\sigma_{i-1,i})$,这实际上是以$i$格点为中心的规范变换.考虑这些因素后,则有

$$\begin{aligned}\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_h &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{\{\sigma\}}(-\sigma_{i,i+1})e^{-\beta H_4+\beta h\sum_i\sigma_{i,i+1}-2\beta h(\sigma_{i,i+1}+\sigma_{i-1,i})}\\ &= -\langle\sigma_{i,i+1}e^{-2\beta h(\sigma_{i,i+1}+\sigma_{i-1,i})}\rangle_h.\end{aligned} \tag{15.17}$$

然后,考虑$\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_h$与$\langle-\sigma_{i,i+1}\rangle_h$之差的绝对值并进行估计,

$$\begin{aligned}|\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_h-\langle-\sigma_{i,i+1}\rangle_h| &= |\langle\sigma_{i,i+1}(e^{-2\beta h(\sigma_{i,i+1}+\sigma_{i-1,i})}-1)\rangle_h|\\ &\leqslant |\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_h|\times|e^{4\beta h}-1|\end{aligned} \tag{15.18}$$

既然我们主要考察的是自发对称破缺,那么在上式中需要取$h\to 0$的极限,此时有

$$2|\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_{h\to0}|\leqslant|\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_{h\to0}|\times 4|\beta h| = |\langle\sigma_{i,i+1}\rangle_{h\to0}|\cdot 0 = 0. \tag{15.19}$$

因此,

$$\langle\sigma_{i,i+1}\rangle = \langle\sigma_{i,i+1}\rangle_{h\to0}=0. \tag{15.20}$$

可以明显地看到序参量平均值为零,注意到这是体系具有局域规范不变性和所平均的变量并不是规范不变量的原因. 更一般地有以下重要的定理:[1]

- Elitzur定理:局域规范对称性不会自发破缺.这表明类似Landau序参量的非规范不变量平均值自动为零,只有规范不变量才会有非零的期望值.

在当前问题中,规范不变量是四自旋乘积,由此构成的哈密顿量当然也规范不变.

[1] [Elitzur,Impossibility of spontaneously breaking local symmetries,Phys.Rev.D **12**,3978(1975)]

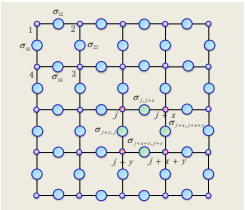


Figure 15.2: 二维经典Ising规范理论模型.

Z_2晶格规范理论I:经典模型初探

1971年,受到经典二维XY模型的启发,Wegner为了描述不会有自发磁化但却存在非平凡相图的系统,创造性地设计了Ising/Z_2晶格规范理论.[1] 考虑一个d 维超立方体,与玩具模型中的情况完全一样,我们在超立方体的每个小正方形上定义链接上的自旋,

$$\boxed{H_{Z_2} = -J\sum_{i,a,b}\sigma_{i,i+a}\sigma_{i+a,i+a+b}\sigma_{i+a+b,i+b}\sigma_{i+b,i}} \tag{15.21}$$

对于二维模型有

$$H_{Z_2}^{d=2} = -J\sum_{i}\sigma_{i,i+\hat{x}}\sigma_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}\sigma_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}\sigma_{i+\hat{y},i} \tag{15.22}$$

即对二维正方晶格的每一个小正方形中的四自旋乘积都求和.对于更为重要的三维模型,其显式是

$$\begin{aligned} H_{Z_2}^{d=3} &= -J\sum_{i}[\sigma_{i,i+\hat{x}}\sigma_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}\sigma_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}\sigma_{i+\hat{y},i} && (15.23)\\ &+ \sigma_{i,i+\hat{x}}\sigma_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{z}}\sigma_{i+\hat{x}+\hat{z},i+\hat{z}}\sigma_{i+\hat{z},i} && (15.24)\\ &+ \sigma_{i,i+\hat{y}}\sigma_{i+\hat{y},i+\hat{y}+\hat{z}}\sigma_{i+\hat{y}+\hat{z},i+\hat{z}}\sigma_{i+\hat{z},i}] && (15.25)\end{aligned}$$

第一行表示从i格点出发,经过$i+\hat{x}, i+\hat{x}+\hat{y}, i+\hat{y}$最后返回$i$格点所形成的$XY$平面内小正方形上的四自旋相互作用,同理,第二第三行表示XZ 平面和YZ平面内的四自旋求和. 对于当前的模型,其Z_2规范变换$G(i)$使得与i格点相连的最近邻链接上的自旋取反号,对三维模型共有6个自旋改变(对d维超立方则有$2d$个自旋变号)

$$G(i): \quad \sigma_{i,i\pm\hat{x}} \to -\sigma_{i,i\pm\hat{x}}, \sigma_{i,i\pm\hat{y}} \to -\sigma_{i,i\pm\hat{y}}, \sigma_{i,i\pm\hat{z}} \to -\sigma_{i,i\pm\hat{z}} \tag{15.26}$$

显然,由于哈密顿量是四自旋乘积形式,故在规范变换下保持不变.

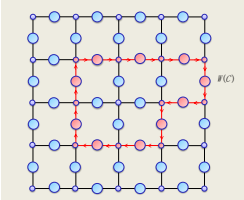


Figure 15.3: 经典Ising规范理论中的Wilson loop变量$W(\mathcal{C})$.

既然局域序参量自动为零,那么若要表征体系的不同状态就需要非局域序参量,Wegner建议用自旋构成的封闭回路作为一类非局域序参量,也叫Wilson loop:

$$\boxed{W(\mathcal{C})=\prod_{i,j\in\mathcal{C}}\sigma_{i,j}} \tag{15.27}$$

$\mathcal{C}$代表一个封闭的回路,上述乘积就是对这个回路上所有自旋的乘积.在玩具模型中,回路就是小正方形本身,四个自旋的乘积就是非局域序参量,其平均值不为零.

Wilson loop的物理意义

上述定义的Z_2规范理论的Wilson loop形式虽然简单,但物理意义不是很明确.因此我们转而考虑最熟悉的规范场,也就是电磁场的Wilson loop.注意到电磁场规范变换是$A_\mu\to A_\mu+\partial_\mu\theta$,因此规范不变的Wilson loop可以定义为

$$\boxed{W(\mathcal{C})\equiv e^{i\oint dx^\mu A_\mu}} \tag{15.28}$$

回忆有源时电磁场的路径积分,

$$\lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\int_0^T dt\int d^3xJ^\mu A_\mu}\rangle=\lim_{T\to\infty}\frac{\int DAe^{i\int_0^T dt\int d^3x(\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-J^\mu A_\mu)}}{\int DAe^{i\int_0^T dt\int d^3x\frac{-1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}}=\lim_{T\to\infty}e^{-i\Delta ET}$$

ΔE是有源时基态能量的变化.现在,假设$3+1$维时空中有两个电荷相反的单位电荷分别位于$(0,0,0)$和$R,0,0$处,那么有$J^\mu=\eta^{\mu,0}(\delta^{(3)}(\vec{x})-\delta^3(\vec{x}-(R,0,0)))$.这样有

$$\langle e^{-i\int_0^T dt\int d^3x\eta^{\mu,0}(\delta^{(3)}(x)-\delta^3(x-(R,0,0)))A_\mu(x^\mu)}\rangle=\lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\int_0^T dtA_0(x^\mu=(t,0,0,0))}e^{-i\int_T^0 dtA_0(x^\mu=(t,R,0,0))}\rangle \tag{15.29}$$

这可以看成A_0分别在空间$(0,0,0)$处沿着时间轴从0积分到T,在空间$(R,0,0)$处沿着时间轴从T积分到0.另一方面,我们可以让时间固定为T的A_x沿着x轴从0积分到R(即$\int_0^R dxA_x(T,x,0,0)$)而时间固定为0的A_x沿着x轴从R积分到0(即$\int_R^0 dxA_x(0,x,0,0)$).注

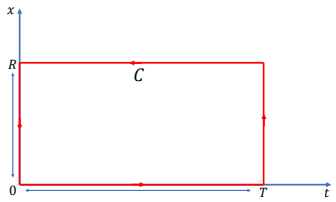


Figure 15.4: Wilson loop的回路,这里选长宽为T, R的矩形回路$\mathcal{C}$.

意到$T\infty$时我们通常规定周期边界条件,也就是$A_\mu(\infty, x, y, z) = A_\mu(0, x, y, z)$(这在虚时路径积分中是玻色型场论求迹后的必然结果),因此

$$e^{-i\int_0^R dx A_x(T,x,0,0) - i\int_R^0 dx A_x(0,x,0,0)} = 1 \tag{15.30}$$

这样我们可以把这两个积分插入到$\lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\int_0^T dt\int d^3x J^\mu A_\mu}\rangle$以构成一个完整的回路$\mathcal{C}$,(图15.4)即

$$\lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\int_0^T dt\int d^3x J^\mu A_\mu}\rangle = \lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\oint_C dx^\mu A_\mu}\rangle = \lim_{T\to\infty} e^{-i\Delta E T}$$

可以看到,对于时间上足够长($T\to\infty$)的矩形回路,(回路周长为$2(R+T)$)计算Wilson loop的基态期望值等价于计算距离为R的两个单位异号试探电荷存在时规范场基态能量的移动,即有

$$\lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\oint_C dx^\mu A_\mu}\rangle = \lim_{T\to\infty} e^{-i\Delta E T}$$

显然,试探电荷存在时基态能量的移动ΔE可理解为(静止的)试探电荷之间的势能,即$\Delta E \sim V(R)$.因此

$$\boxed{\langle W(\mathcal{C})\rangle = \lim_{T\to\infty}\langle e^{-i\oint_C dx^\mu A_\mu}\rangle \sim \lim_{T\to\infty} e^{-iV(R)T}} \tag{15.31}$$

- 纯规范场(没有物质场)基态下Wilson loop的期望值告诉我们两个试探电荷之间的互作用势能.

一些细节

如果我们考虑在正方晶格上具有周期边界条件的系统的规范等价类的数目,也就是物理上不同状态的数目是

$$\frac{2^{2N_s}}{2^{N_s}/2} \tag{15.32}$$

这里N_s是格点总数,$2N_s$表示总的自旋个数,2因子来自于自旋定义在链接上而非格点,故数目是两倍.分母中的2^{N_s}代表总的规范变换的数目,2 是Z_2规范群的元素数目,当然也是规范变换取值的数目.

面积律

我们首先考虑高温的情况,此时$\beta J = J/T << 1$,这样仿照XY模型的处理,可以采用高温展开的方法近似估计相应的物理量在高温时的定性行为.

利用恒等式(在不引起混乱的情况下我们省略自旋的下标)

$$e^{\beta J\sigma\sigma\sigma\sigma} = \cosh(\beta J)+\sigma\sigma\sigma\sigma\sinh(\beta J) = (1+\sigma\sigma\sigma\sigma\tanh(\beta J))\cosh(\beta J) \quad (15.33)$$

$$\begin{aligned}\langle W(\mathcal{C})\rangle &= \frac{1}{Z}\sum_{\{\sigma\}}\prod_{\mathcal{C}}\sigma e^{\beta J\sum(\sigma\sigma\sigma\sigma)} = \frac{1}{Z}\sum_{\{\sigma\}}\prod_{\mathcal{C}}\sigma\prod_{plaquet}(1+\sigma\sigma\sigma\sigma\tanh(\beta J))\cosh(\beta J)\\ &= \frac{\sum_{\{\sigma\}}\prod_{\mathcal{C}}\sigma\prod_{plaquet}(1+\sigma\sigma\sigma\sigma\tanh(\beta J))}{\sum_{\{\sigma\}}\prod_{plaquet}(1+\sigma\sigma\sigma\sigma\tanh(\beta J))}\end{aligned} \quad (15.34)$$

在高温极限下,$\beta J << 1$那么$\tanh(\beta J)$小量,分子分母中的主导项是其低幂次项.对于分母有

$$\sum_{\{\sigma\}}\prod_{plaquet}(1+\sigma\sigma\sigma\sigma\tanh(\beta J)) \sim 1+(\tanh(\beta J))^{2d}+... \quad (15.35)$$

这里的第二项是恰好包含一个plaquet的最小单元,这是以一个plaquet为面的超立方体,其共有$2d$个表面,由于$\sum_{\sigma=\pm1}\sigma = 0, \sum_{\sigma=\pm}1 = 2$, 我们得到相应的贡献是$(\tanh(\beta J))^{2d}$.对于分子,同样的分析可以看到最低阶的贡献是回路所包含的最小面积A_c,那么有

$$\sum_{\{\sigma\}}\prod_{\mathcal{C}}\sigma\prod_{plaquet}(1+\sigma\sigma\sigma\sigma\tanh(\beta J)) \sim (\tanh(\beta J))^{A_c}+... \quad (15.36)$$

这样在高温极限下,Wilson loop变量的统计平均值估计为

$$\langle W(\mathcal{C})\rangle \sim \frac{(\tanh(\beta J))^{A_c}}{1+(\tanh(\beta J))^{2d}} \sim (\tanh(\beta J))^{A_c} = e^{-A_c\ln\frac{1}{\tanh(\beta J)}} \sim e^{-A_c} \quad (15.37)$$

- 换句话说,在高温时体系的非局域序参量(Wilson loop关联函数)具有指数型的按面积衰减形式,这就是所谓的晶格规范理论中Wilson loop 关联函数的面积律(area law).

周长律

接下来,我们考虑低温的情况,既然只有规范不等价的位形才是不等价的物理态,那么我们可以只考虑一些代表性的位形,其中的每个都是不同规范等价类的,这样就不用考虑复杂的简并问题. 例如,我们可以假定基态是自旋全部向上的状态,那么在此背景下的单自旋翻转位形共有dN个,N为总格点数目,其导致的能量改变是$4(d-1)J$,但是其中只有在Wilson loop变量回路上的(P_c个,P_c 为回路的周长)才直接影响回路的取值. 这样我们发现

$$\langle W(\mathcal{C})\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}[1+(dN-2P_c)e^{-4(d-1)J}+...] \quad (15.38)$$

如果我们考虑n个自旋彼此完全独立的翻转事件,那么相应的贡献是

$$\frac{1}{n!}(dN-2P_c)^n e^{-4n(d-1)J} \tag{15.39}$$

这样分子可以指数化为

$$e^{(dN-2P_c)e^{-4(d-1)J}} \tag{15.40}$$

而对于分母,类似的分析可得

$$\mathcal{Z}=1+dNe^{-4(d-1)J}+\frac{1}{2}(dN)^2e^{-4n(d-1)J}+...\approx e^{dNe^{-4(d-1)}} \tag{15.41}$$

这样,我们发现低温下Wilson loop的平均值是

$$\langle W(\mathcal{C})\rangle \approx \frac{e^{(dN-2P_c)e^{-4(d-1)J}}}{e^{dNe^{-4(d-1)}}}=e^{-2P_ce^{-4(d-1)}}\sim e^{-P_c} \tag{15.42}$$

- 这表明低温时Z_2规范理论的Wilson loop关联是其回路周长的指数衰减形式,这就是著名的周长律(perimeter law).

二维Z_2规范理论只会有面积律,这说明它们只有一种相.这个结果可以通过固定某一个方向x或y 上的自旋取值来理解.(即所谓的时间规范固定方案)例如固定所有y方向上的自旋取值为一,那么系统就退耦合为一系列彼此无关的一维Ising模型,对于Ising模型,我们知道其只有无序的顺磁态,那么相应的规范模型也应该只有一个态.显然这个态只能是满足面积律的态.

一般把高温满足面积律的相叫做规范场的禁闭态(confined),而低温下满足周长律的称为退禁闭态(deconfined).这所以有如此叫法,主要原因在于Wilson loop期望值的对应给体系加入两个试探(规范)电荷时两个电荷间的相互作用势,即$\langle W(C)\rangle \sim e^{-iV(R)T}$.($R,T$分别是矩阵回路的长和宽,回路的面积是$RT$而周长是$2(R+T)$)当然这是量子规范场的结果,对于经典规范场只需要做Wick转动(也就是扔掉i因子)并把T也当作空间长度来看待.这样面积律表明$e^{-A}=e^{-RT}\sim e^{-V(R)T}$,因此试探电荷之间的势能是$V(R)\sim R$,这明显是线性增长的势能,这说明两个电荷不能自由运动而只能被束缚在一起.这种线性势通常认为是量子色动力学中夸克发生禁闭的直接原因.因此我们称具有线性势或者有面积律的规范场的相为禁闭相.与之相对,周长律表明$e^{-P_c}\sim e^{-T}\sim e^{-V(R)T}$,因此势能$V(R)$与$R$无关,这样电荷可以自由运动不受限制,这类似于夸克能够自由运动的情况,称为退禁闭相.

注意到三维Ising规范理论高低温相明显不同,这表明体系在有限温度存在相变,这就是规范场的禁闭-退禁闭相变.蒙特卡洛模拟表明三维Z_2晶格规范理论模型显示连续的禁闭-退禁闭相变,而对于四维Z_2晶格规范理论模型,相应的相变是不连续的一级相变,其突出特点是plaquett上四自旋的平均值在相变点出现显著的跳变行为.

- Wilson loop变量可以看作是higher-form symmetry理论中的广义Landau序参量,面积律对应着(1-form对称性意义下的)非对称破缺态而周长律意味着对称破缺态.需要说明,我们通常说的对称性指的是0-form对称,这可以理解为点粒子或其对应的局域算符$\mathcal{O}(x)$的性质,例如$\lim_{|x-y|\to\infty}\langle\mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y)\rangle \sim e^{-|x-y|}$说明0-form对称性保持而$\lim_{|x-y|\to\infty}\langle\mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y)\rangle \sim \langle\mathcal{O}(x)\rangle\langle\mathcal{O}(y)\rangle \neq 0$ 意味着0-form对称性破缺.至于1-form或更高阶的对称其实可以理解为string或者膜这样的空间扩展对象的性质,比如这里提到的Wilson loop可以看作闭合的string,其对应1-form对称.数学上,点粒子对应的0-form对称性具有守恒流方程$\partial_\mu J^\mu = 0$而1-form对称性依赖于两指标流$J^{\mu\nu}$的守恒流方程$\partial_\mu J^{\mu\nu} = 0$.[2]

- 量子电动力学中光子的无质量特性现在可以理解为1-form对称性下的对称破缺态的Goldstone模式.

物质场

在实际系统中,纯粹的规范场论并不让人感兴趣,并且也过于简化,一个更有意思的情况是考虑物质场与规范场的耦合.我们假定最简单的Ising型物质场,其用定义在各个格点上的自旋$s_i = \pm 1$表示,那么相应的哈密顿量是

$$H_{Z_2} = -J\sum_{i,a,b}\sigma_{i,i+a}\sigma_{i+a,i+a+b}\sigma_{i+a+b,i+b}\sigma_{i+b,i} - t\sum_{i,a}s_i\sigma_{i,i+a}s_{i+a} \tag{15.43}$$

此时,为了保证体系的规范不变性,Z_2规范变换$G(i)$除了改变规范场$\sigma_{i,j}$的符号,还会改变i 格点物质场的符号:

$$G(i): \quad \sigma_{i,j}\to -\sigma_{i,j}, \sigma_{j,i}\to -\sigma_{j,i}, s_i \to -s_i \tag{15.44}$$

对于这个模型,我们先分析一些有用的极限.当$t = 0$时,二维以上的系统在$J/T >> 1$显示退禁闭态,而在高温时显示禁闭态.在$J/t = \infty$的极限,规范场位形被冻结,此时可以令所有规范场自旋为+1,这样得到的就是一个经典Ising 模型,在高维时存在从Ising 铁磁态到顺磁态的相变.需要注意,到体系进入Ising 铁磁态时,物质场的序参量$\langle s_i\rangle \neq 0$,这样局域的$Z_2$规范对称性实际上被破缺了.回忆超导态中电磁场由于Cooper对凝聚而获得质量的行为,显然这里是由于物质场凝聚而破坏规范不变性,这就是Higgs机制的体现.

- 物质场与规范场耦合一般会有三类相,即禁闭相,Higgs相以及退禁闭的自由电荷相.

- 在禁闭态,物质场与规范场都有强烈的涨落,没有自由的电荷.

[2]更多内容可以参考[McGreevy,Generalized Symmetries in Condensed Matter,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **14**,57(2023)]

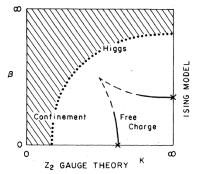


Figure 15.5: Ising规范场与Ising型物质场耦合模型的理论相图.引自文献[10]

- 而在自由电荷相,规范场只有弱的涨落,可以诱导物质场之间的相互作用,这个相类似于常见的量子电动力学的情况.
- 最后,在Higgs相,物质场发生凝聚,使得规范场获得能隙,低能物理主要是物质场相对于其凝聚部分的涨落贡献.

进一步,如果假定物质场耦合t是小量,那么可以通过高温展开得到有效的规范场形式,即

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}}\sum_{\{s\}} e^{J\beta\sum\sigma\sigma\sigma\sigma+t\beta\sum s\sigma s} = \sum_{\{\sigma\}}\sum_{\{s\}} e^{J\beta\sum\sigma\sigma\sigma\sigma}\prod\cosh(t\beta)(1+s\sigma s\tanh(t\beta)) \\
&\sim \sum_{\{\sigma\}} e^{J\beta\sum\sigma\sigma\sigma\sigma}\sum_{\{s\}}(1+s^2s^2s^2s^2\sigma\sigma\sigma\sigma(\tanh(t\beta))^4+...) \\
&\sim \sum_{\{\sigma\}} e^{J\beta\sum\sigma\sigma\sigma\sigma}e^{\sigma\sigma\sigma\sigma(\tanh(t\beta))^4} \\
&\sim \sum_{\{\sigma\}} e^{(J\beta+\tanh^4(t\beta))\sum\sigma\sigma\sigma\sigma} \qquad (15.45)
\end{aligned}$$

这相当于规范场获得了耦合常数的重整/修正:

$$J\beta \to J\beta + \tanh^4(t\beta) \qquad (15.46)$$

也就是说当物质场耦合比较小时,其对规范场而言是使得等效的J/T变大,这在物理上导致禁闭-退禁闭相变发生的温度变高,也就是说会扩大退禁闭相的区域.也就是说,与物质场的耦合增加了退禁闭的可能,使得我们更有机会观察到作为低能准粒子而出现的物质场粒子以及传递相互作用的规范场粒子.当然在一般参数条件下,只有通过数值蒙特卡洛模拟才可以得到关于相图的确切信息,但这里分析的定性物理,当然相变除外,应该在一般情况下也是适用的.事实上,我们最熟悉的电磁规范场就是处于退禁闭态,这样我们才在实验中观察到单独的带电粒子以及光子本身.而对于量子色动力学描述的夸克与胶子,实验上至今没有看到单个夸克的痕迹,所以一般认为夸克处于规范场的禁闭态,即所谓的夸克禁闭.

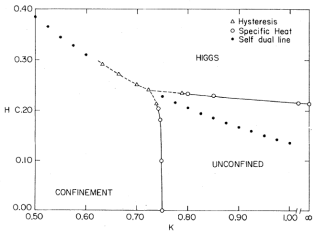


Figure 15.6: 蒙特卡洛模拟三维Ising规范场与Ising型物质场耦合模型的相图.引自文献[6]

在纯规范理论中,我们可以用Wilson loop来区分禁闭态和退禁闭态,但是在有物质场存在的情况下,Wilson loop 实际上失效,这是因为当有物质场存在时,我们假定$J, t << T$, 那么通过高温展开会发现

$$\langle W(\mathcal{C})\rangle \sim (\tanh(\beta J))^{A_c} + (\tanh(\beta t))^{P_c} + ... \sim e^{-A_c \ln \frac{1}{\tanh(\beta J)}} + e^{-P_c \ln \frac{1}{\tanh(\beta t)}}$$

在这里,面积律来自于纯规范场的贡献,而周长律来自于Ising规范场与Ising型物质场的耦合.对于大的回路,周长律是主导的贡献,而在高温下,我们知道规范场一定处于禁闭态,但是此时Wilson loop却由于物质场的耦合而显示周长律,因此Wilson loop并不能直观地区分禁闭态与退禁闭态.基于以上这些定性或者半定量的讨论,Fradkin和Shenker给出了Z_2规范理论的一般相图(图15.5).($K \sim J, \beta \sim t$)注意这个相图是针对$d \geq 3$的情况,对于更低维的模型,系统只会有禁闭态.该相图实际上构成了我们对于晶格规范场与物质场耦合的一般认识.当把规范场换成$U(1), SU(2)$ 等更高对称性的场,把物质场对称性也提高之后,所得到的相图定性上与这个相图一致.

另一方面,Z_2晶格规范理论可以通过经典蒙特卡洛模拟计算其相图和各类物理量.图15.6显示了蒙特卡洛模拟得到的三维Ising规范场与Ising型物质场耦合模型的相图.[3]图中的K等价于当前模型的$J\beta$,而H则代替$t\beta$.实线代表二级相变,虚线表示一级相变.数值模拟中通过平均每个plaquett中J项的平均值以及和平均每个link上t项的平均值随J, t的变化来定出三个相.可以看到,禁闭–退禁闭相变以及Higgs相与(退禁闭的)自由电荷相之间的相变都是二阶的,而禁闭相与Higgs相之间的在K较大时存在一级相变,而更小的K时则是连续的过渡.

[3]相变线附近的精细结构可参考更近的研究[Somoza,Serna,Nahum,Self-Dual Criticality in Three-Dimensional Z_2 Gauge Theory with Matter,Phys.Rev.X **11**,041008(2021)]

Z_2晶格规范理论II:玩转量子模型

为简单起见,我们仅考虑正方晶格上定义的量子Z_2晶格规范理论,其对应的量子哈密顿量如下:

$$\boxed{\hat{H}_{Z_2}=-J\sum_i\hat{\sigma}^z_{i,i+\hat{x}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{y},i}-h\sum_i(\hat{\sigma}^x_{i,i+\hat{x}}+\hat{\sigma}^x_{i,i+\hat{y}})} \tag{15.47}$$

注意$\hat{\sigma}^{x/z}_{i,j}=\hat{\sigma}^{x/z}_{j,i}$.为了便于书写和讨论,模型可简记为

$$\boxed{\hat{H}_{Z_2}=-J\sum\hat{\sigma}^z\hat{\sigma}^z\hat{\sigma}^z\hat{\sigma}^z-h\sum\hat{\sigma}^x} \tag{15.48}$$

在量子情况下,Z_2规范变换具有如下算符形式

$$\hat{G}(i)=\hat{\sigma}^x_{i,i+\hat{x}}\hat{\sigma}^x_{i,i-\hat{x}}\hat{\sigma}^x_{i,i+\hat{y}}\hat{\sigma}^x_{i,i-\hat{y}}=\prod_{j=i\pm\hat{x},\hat{y}}\hat{\sigma}^x_{i,j} \tag{15.49}$$

显然有$\hat{G}^{-1}(i)=\hat{G}(i)$并且

$$(\hat{G}(i))^2=(\hat{\sigma}^x_{i,i+\hat{x}})^2(\hat{\sigma}^x_{i,i-\hat{x}})^2(\hat{\sigma}^x_{i,i+\hat{y}})^2(\hat{\sigma}^x_{i,i-\hat{y}})^2=1 \tag{15.50}$$

也就是说规范变换算符$\hat{G}(i)$的本征值是±1.

$$\hat{G}(i)\sigma^z_{i,j}\hat{G}^{-1}(i)=-\sigma^z_{i,j} \tag{15.51}$$

$$\hat{G}(i)\sigma^x_{i,j}\hat{G}^{-1}(i)=\sigma^x_{i,j} \tag{15.52}$$

这样哈密顿量在任意的Z_2规范变换下是不变的,即$[\hat{G}(i),\hat{H}_{Z_2}]=0$,这样体系的波函数具有高度的简并,当然这些波函数实际上是属于同一个规范等价类的,物理上被看做是相同的物理态.此外,$\hat{G}(i)|\Psi\rangle=q_j|\Psi\rangle(q_j=\pm1)$.对于任意局域量,例如$\hat{\sigma}^z_{i,j}$,其期望值由于规范不变性而自动为零,即

$$\langle\Psi|\hat{\sigma}^z_{i,j}|\Psi\rangle=\langle\Psi|\hat{G}^{-1}(i)\hat{G}(i)\hat{\sigma}^z_{i,j}\hat{G}^{-1}(i)\hat{G}(i)|\Psi\rangle=\langle\Psi|q_j(-\hat{\sigma}^z_{i,j})q_j|\Psi\rangle=-\langle\Psi|\hat{\sigma}^z_{i,j}|\Psi\rangle\Rightarrow\langle\Psi|\hat{\sigma}^z_{i,j}|\Psi\rangle=0. \tag{15.53}$$

毫无疑问,量子模型相比于经典模型更难研究,但是回忆量子Ising模型的量子-经典对应,我们可以立即得到量子Z_2规范理论的经典对应:

$$\begin{aligned}H^{cl}_{Z_2}&=-\frac{J}{M}\sum_l\sum_i\sigma_{i,i+\hat{x}}(l)\sigma_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}(l)\sigma_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}(l)\sigma_{i+\hat{y},i}(l)\\&-\frac{J_\tau}{M}\sum_l\sum_i[\sigma_{i,i+\hat{x}}(l)\sigma_{i,i+\hat{x}}(l+1)+\sigma_{i,i+\hat{y}}(l)\sigma_{i,i+\hat{y}}(l+1)]\end{aligned}$$

进一步,为了得到更对称的形式,我们对第二项的每一个两自旋乘积补充上两个不同时间链接上的静态自旋(所谓的时间规范),

$$\begin{aligned} H^{cl}_{Z_2} &= -\frac{J}{M}\sum_l\sum_i \sigma_{i,i+\hat{x}}(l)\sigma_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}(l)\sigma_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}(l)\sigma_{i+\hat{y},i}(l) \\ &- \frac{J_\tau}{M}\sum_l\sum_i[\sigma_{i,i+\hat{x}}(l)\sigma_{i,i+\hat{x}}(l+1)\sigma_i(l,l+1)\sigma_{i+\hat{x}}(l,l+1) \\ &+ \sigma_{i+\hat{y},i}(l)\sigma_{i+\hat{y},i}(l+1)\sigma_i(l,l+1)\sigma_{i+\hat{y}}(l,l+1)] \\ &\Rightarrow H^{cl}_{Z_2} = -\frac{J}{M}\sum\sigma\sigma\sigma\sigma - \frac{J_\tau}{M}\sum\sigma\sigma\sigma\sigma \end{aligned} \tag{15.54}$$

也就是说二维量子Z_2规范理论等价于三维各向异性的经典Z_2规范理论模型,空间方向的小正方形的耦合是J/M而时间方向的两个小正方形内的耦合是J_τ/M.这样我们可以用经典模型的结果来理解量子模型的性质.

对于零温系统,$J >> h$时四自旋项主导,体系基态是所有四自旋乘积为1的状态,体系的基态可能具有简并(排除规范等价的态以后).体系的低能激发是某一个plaquet变为-1 的状态,一般称此为Z_2涡旋,或者vison激发.当$J << h$ 时,基态是所有自旋倒向x 正方向的状态,此时基态必定是非简并的.显然这两类基态之间不会连续变化,必然存在一个量子相变.根据对应的经典模型的一般性质,我们可以期待这个相变实际上对应着零温下的规范场禁闭-退禁闭量子相变.此外,对于量子模型也可以定义相应的Wilson loop 变量:

$$\hat{W}(\mathcal{C}) = \prod_{i,j\in\mathcal{C}}\hat{\sigma}^z_{i,j} \tag{15.55}$$

对偶变换

定义新的变量即定义对偶变换:

$$\hat{\mu}^x_i \equiv \hat{\sigma}^z_{i,i+\hat{x}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{y},i} \tag{15.56}$$

$$\hat{\mu}^z_i\hat{\mu}^z_j \equiv \hat{\sigma}^x_{i,j} \tag{15.57}$$

这样,在形式上量子Z_2规范理论哈密顿量可改写为等效的量子Ising模型,

$$\hat{H}_{Ising} = -J\sum_i\hat{\mu}^x_i - h\sum_i(\hat{\mu}^z_i\hat{\mu}^z_{i+\hat{x}} + \hat{\mu}^z_i\hat{\mu}^z_{i+\hat{y}}) \tag{15.58}$$

当然,对于规范理论而言,其规范变换本身是必须严格考虑的,在上述的对偶变换下有

$$\hat{G}(i) = \hat{\mu}^z_{i+\hat{x}}\hat{\mu}^z_{i-\hat{x}}\hat{\mu}^z_{i+\hat{y}}\hat{\mu}^z_{i-\hat{y}} \tag{15.59}$$

由于系统的本征态$|\Psi\rangle$可由$\hat{G}(i)$的本征值分类,对于本征值为$+1$ 的态,相当于有约束条件

$$\hat{G}(i) = \hat{\mu}^z_{i+\hat{x}}\hat{\mu}^z_{i-\hat{x}}\hat{\mu}^z_{i+\hat{y}}\hat{\mu}^z_{i-\hat{y}} = 1 \tag{15.60}$$

对本征值为-1的态有$\hat{\mu}^z_{i+\hat{x}}\hat{\mu}^z_{i-\hat{x}}\hat{\mu}^z_{i+\hat{y}}\hat{\mu}^z_{i-\hat{y}}=-1$。

为了明确起见,我们考虑一个小正方形上的四自旋玩具模型,即

$$\hat{H}=-J\hat{\sigma}^z_{1,2}\hat{\sigma}^z_{2,3}\hat{\sigma}^z_{3,4}\hat{\sigma}^z_{4,1}-h(\hat{\sigma}^x_{1,2}+\hat{\sigma}^x_{2,3}+\hat{\sigma}^x_{3,4}+\hat{\sigma}^x_{4,1}) \tag{15.61}$$

在对偶变换下有

$$\hat{H}=-J\hat{\mu}^x_1-h(\hat{\sigma}^z_1\hat{\sigma}^z_2+\hat{\sigma}^z_2\hat{\sigma}^z_3+\hat{\sigma}^z_3\hat{\sigma}^z_4+\hat{\sigma}^z_4\hat{\sigma}^z_1) \tag{15.62}$$

对于这个四格点模型,四个基本规范变换算符是$\hat{G}(1),\hat{G}(2),\hat{G}(3),\hat{G}(4)$,其对偶后的形式是

$$\hat{G}(1)=\hat{G}(3)=\hat{\mu}^z_2\hat{\mu}^z_4,\quad \hat{G}(2)=\hat{G}(4)=\hat{\mu}^z_1\hat{\mu}^z_3 \tag{15.63}$$

注意到$\hat{G}(1),\hat{G}(2)$的本征值组合共有四种,那么有

$$\begin{aligned}
&\hat{G}(1)=\hat{G}(2)=1:\quad \hat{\mu}^z_2\hat{\mu}^z_4=1,\hat{\mu}^z_1\hat{\mu}^z_3=1\Rightarrow\hat{\mu}^z_2=\hat{\mu}^z_4,\hat{\mu}^z_1=\hat{\mu}^z_3\\
&\hat{G}(1)=-\hat{G}(2)=1:\quad \hat{\mu}^z_2\hat{\mu}^z_4=1,\hat{\mu}^z_1\hat{\mu}^z_3=-1\Rightarrow\hat{\mu}^z_2=\hat{\mu}^z_4,\hat{\mu}^z_1=-\hat{\mu}^z_3\\
&\hat{G}(1)=-\hat{G}(2)=-1:\quad \hat{\mu}^z_2\hat{\mu}^z_4=-1,\hat{\mu}^z_1\hat{\mu}^z_3=1\Rightarrow\hat{\mu}^z_2=-\hat{\mu}^z_4,\hat{\mu}^z_1=\hat{\mu}^z_3\\
&\hat{G}(1)=\hat{G}(2)=-1:\quad \hat{\mu}^z_2\hat{\mu}^z_4=-1,\hat{\mu}^z_1\hat{\mu}^z_3=-1\Rightarrow\hat{\mu}^z_2=-\hat{\mu}^z_4,\hat{\mu}^z_1=-\hat{\mu}^z_3
\end{aligned}$$

对应这四种情况,哈密顿量分别是

$$\hat{H}=-J\hat{\mu}^x_1-4h\hat{\sigma}^z_1\hat{\sigma}^z_2 \tag{15.64}$$

$$\hat{H}=-J\hat{\mu}^x_1 \tag{15.65}$$

$$\hat{H}=-J\hat{\mu}^x_1 \tag{15.66}$$

$$\hat{H}=-J\hat{\mu}^x_1+4h\hat{\sigma}^z_1\hat{\sigma}^z_2 \tag{15.67}$$

事实上,直接的对角化发现$\hat{G}(1)=\hat{G}(2)=\pm1$对应的哈密顿量所得的基态能与原始的规范理论模型一致,而对偶后不考虑任何约束的Ising模型并不能得到符合的基态能.这似乎表明规范场与非规范模型的对偶并不如想象的那么简单.

让我们看一下变换后的物理内容,注意到$\hat{\mu}^x_i$的本征值为±1,J主导的基态取值为$+1$,而高能的激发是-1.在原始理论中对应的是四自旋乘积部分,特别是$\hat{\mu}^x_i=-1$对应的是一个位于i格点所在小正方形的Z_2涡旋激发,也就是$\hat{\mu}^x_i$代表涡旋的势能.$\hat{\mu}^z_i$ 与$\hat{\mu}^x_i$不对易,说明其与涡旋的势能是竞争关系,因而可以解释为涡旋的动能.当h项主导时,$\langle\hat{\mu}^z_i\rangle\neq0$,这表明涡旋出现凝聚,对应到原始的规范理论则是涡旋的凝聚驱动系统进入禁闭态.

- 进一步考虑规范场与物质场耦合,那么其基态相图与先前Fradkin-Shenker的相图是类似的.需要指出,Higgs态与禁闭态虽然看起来可以连续演化,但有理论指出前者可以看作是一类对称性保护的拓扑态(SPT),这样体系存在边界时,边界处在Higgs态到禁闭态转变时存在相变.[4]

[4][Verresen et al.,Higgs Condensates are Symmetry-Protected Topological Phases:I. Discrete Symmetries,arXiv:2211.01376]

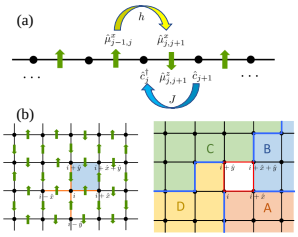


Figure 15.7: (a)一维下可解的费米子-规范场耦合模型;(b)二维可解模型.

可解的费米子与Z_2规范场耦合模型*

考虑定义在一维链link上的Z_2规范场$\hat{\mu}^x, \hat{\mu}^z$,以及无自旋费米子$\hat{c}$(图15.7(a))[7]

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{c}_j^\dagger \hat{\mu}^z_{j,j+1}\hat{c}_{j+1} + \text{H.c.} - \mu\sum_j \hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j - h\sum_j \hat{\mu}^x_{j-1,j}\hat{\mu}^x_{j,j+1} \tag{15.68}$$

由于费米子的出现,Z_2规范变换算符$\hat{G}(j)$是

$$\hat{G}(j) = \hat{\mu}^x_{j-1,j}\hat{\mu}^x_{j,j+1}(-1)^{\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j} = \hat{\mu}^x_{j-1,j}\hat{\mu}^x_{j,j+1}(1-2\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j) \tag{15.69}$$

那么有

$$\begin{aligned}
\hat{G}(j)\hat{\mu}^z_{j,j+1}\hat{G}^{-1}(j) &= -\hat{\mu}^z_{j,j+1}\\
\hat{G}(j)\hat{\mu}^z_{j-1,j}\hat{G}^{-1}(j) &= -\hat{\mu}^z_{j-1,j}\\
\hat{G}(j)\hat{c}_j^\dagger\hat{G}^{-1}(j) &= -\hat{c}_j^\dagger\\
\hat{G}(j)\hat{c}_j\hat{G}^{-1}(j) &= -\hat{c}_j
\end{aligned} \tag{15.70}$$

当费米子不存在时,系统只有$\hat{\mu}^x$部分,(以$\hat{\mu}^x = \pm 1$为基矢)此时基态是铁磁态($h > 0$)或者反铁磁态($h < 0$).这两类态都是二重简并,并且破坏了系统整体的Z_2不变性,当然它们并不破坏Z_2规范对称性,因为$\hat{G}(j) = \hat{\mu}^x_{j-1,j}\hat{\mu}^x_{j,j+1}$总是守恒量,不会受到态的影响.对于规范理论而言,我们可以认为这些铁磁或反铁磁态对应的是规范场的禁闭态.这是因为如果定义Wilson loop类型的规范不变量$W_C = \langle\prod_j \hat{\mu}^z_{j,j+1}\rangle$,($C$表示链接所有格点),那么显然在上述基态下必有$W_C = 0$,这解释为禁闭态的信号.

在基态之上的低能激发是畴壁,例如$|\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle$,其相对于基态的能量增加是$2h$.另一方面,当存在费米子时,费米子部分$\hat{\mu}^z$的作用是产生自旋翻转进而导致一对正反畴壁的产生.畴壁产生多了以后就会使得磁性基态转变为顺磁态.特别是在$h/J = 0$的极限下,可以取规范使得$\hat{\mu}^z = 1$,这样费米子$\hat{c}_j$可以在体系中自由传播,这对应于规范理论中的退禁闭态($W_c = 1$).因此,我们猜测体系可以存在

从顺磁态到磁性态四维相变,这对应退禁闭-禁闭相变.当然,为了得到精确的结果,我们需要进一步的处理.

注意到与量子Ising模型的对偶模型的相似性,我们作对偶变换

$$\begin{aligned}\hat{\mu}^x_{j,j+1} &= \prod_{k\leq j}\hat{\tau}^z_k \\ \hat{\mu}^z_{j,j+1} &= \hat{\tau}^x_j\hat{\tau}^x_{j+1}\end{aligned} \tag{15.71}$$

则有

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{\tau}^x_j\hat{\tau}^x_{j+1}\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_{j+1} + \text{H.c.} - \mu\sum_j \hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j - h\sum_j\hat{\tau}^z_j \tag{15.72}$$

同时,Z_2规范变换算符$\hat{G}(j) = \hat{\tau}^z_j(-1)^{\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j}$.由于$\hat{G}(j)$的本征值$q_j = \pm 1$,因此我们发现

$$\hat{\tau}^z_j(-1)^{\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j} = q_j \Rightarrow \hat{\tau}^z_j = q_j(-1)^{\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j} = q_j(1-2\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j) \tag{15.73}$$

这样我们可以把$\hat{\tau}^z_j$用费米子完全代替,

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{\tau}^x_j\hat{\tau}^x_{j+1}\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_{j+1} + \text{H.c.} - \mu\sum_j \hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j - h\sum_j q_j(1-2\hat{c}^\dagger_j\hat{c}_j) \tag{15.74}$$

最后,可以引入新的费米子$\hat{f}_j = \hat{\tau}^x_j\hat{c}_j$,那么所得的哈密顿量是

$$\hat{H} = -J\sum_j \hat{f}^\dagger_j\hat{f}_{j+1} + \text{H.c.} - \mu\sum_j \hat{f}^\dagger_j\hat{f}_j - h\sum_j q_j(1-2\hat{f}^\dagger_j\hat{f}_j) \tag{15.75}$$

这样原始的规范场与费米子耦合问题就转化为了在固定q_j背景下的自由费米子问题,显然此时模型可解.对于标准规范理论,一般选取$q_j = 1$即我们只选择Gauss定律$\hat{G}(j) = 1$的部分.相反,如果不选定q_j, 那么称以上模型为无限制的规范理论模型.那么一个重要的问题是有限制的规范理论与无限制的规范理论有何差别或者两者如何联系.文献[18]考虑了一个类似的模型,

$$\hat{H} = -\sum_j \hat{c}^\dagger_j\hat{\mu}^z_{j,j+1}\hat{c}_{j+1} + \text{H.c.} - h\sum_j\hat{\mu}^x_{j,j+1}. \tag{15.76}$$

这个模型与我们之前所考虑模型的差异之处在于磁场部分仅有$\hat{\mu}^x_{j,j+1}$而非$\hat{\mu}^x_{j-1,j}\hat{\mu}^x_{j,j+1}$.利用worldline蒙特卡洛模拟算法,文献[18]计算了不同温度,(图15.8)体系尺寸和磁场h下的$\{q_j\}$分布.在高温下,有很多不同的构型都有较大的权重,而随着温度降低,少数构型逐渐主导.最后,在接近零温时,只有$q_j = (-1)^j$或$(-1)^{j+1}$有贡献.因此,我们发现在低温下,模型会自动选择能量最优的规范电荷分支,也就是会自发地产生约束.因此低温下的费米子规范场耦合模型等价于有限制的规范模型,只不过这个限制是自发产生,与直接手动选择的规范限制并不相同.(例如手动选择$q_j = 1$明显与自发选择的$q_j = (-1)^j$不同)

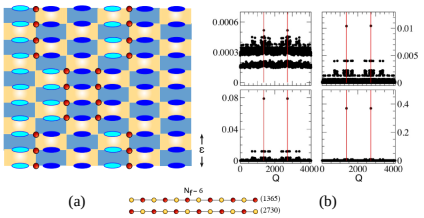


Figure 15.8: (a)worldline蒙特卡洛模拟的构型示例,红色圆代表存在费米子,暗色和亮色的椭圆表示$\hat{\mu}_{j,j+1} = +1(-1)$;(b)12格点体系的规范电荷分支($Q = \sum_{j=0}^{L-1}(1+q_j)2^{j-1}$)或者说构型$\{q_j\}$的概率分布情况,低温下只有少数构型主导.$h = 0.05$时主导的是(1365), (2730) 两个交错型的构型.

与蒙特卡洛模拟不同,在取$q_j = 1$的情况下,DMRG计算表明该模型在$h \neq 0$总是处于禁闭态,此时费米子关联$\langle \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_j \rangle$总是短程,而低能下的激发是复合型的玻色子激发,即$\hat{b}_{j,j+1}^\dagger = \hat{c}_j^\dagger \hat{\mu}_{j,j+1}^z \hat{c}_{j+1}^\dagger$,这类激发可以用Luttinger液体来描述. [5]

此外,文献[19]研究了一个修改的Falicov-Kimball 模型,该模型可以写成无规范约束的费米子与规范场耦合模型,高温时的性质可用无规范约束下的平均场理解,低温时规范约束自发产生,系统性质类似Hubbard模型.

- 因此,文献[18, 19]的例子表明至少对于Z_2规范理论而言,低温时有限制与无限制规范理论模型性质是相似的,但在高温时,无限制模型的规范约束不起主要作用,这样两类模型性质将有很大不同.

- 对于一般具有规范约束的模型,可以预期高温时规范约束其重要作用,因此各类辅助粒子平均场理论(RPA修正)在高温时不严肃考虑规范约束的计算结果其正确性值得怀疑.

我们考虑无限制的规范模型情况,限制的情况可作为特例考虑.在无限制规范模型的框架下,注意到以上模型等价于著名的Falicov-Kimball模型.对于FK模型,$\mu = 0$ 对应系统半填满,此时系统基态有$q_j = (-1)^j$或$(-1)^{j+1}$.那么费米子获得交错型的质量项,因此系统处于绝缘体.物理上是系统自发产生费米子的Mott态(费米子交错排列的电荷密度波,破缺子格对称),该Mott态由规范场诱导的相互作用导致.这可以看做是原始模型当中的禁闭态,因为此时系统激发都是有能隙的,费米子之间的关联函数显示指数衰减.

[5] [Borla,Verresen,Grusdt,Moroz,Confined Phases of One-Dimensional Spinless Fermions Coupled to Z_2 Gauge Theory, Phys.Rev.Lett. **124**,120503(2020)]

在场论中,这类自发质量产生对应手征对称破缺.在连续极限下,系统可由如下哈密顿描述:

$$\hat{H}=-iv_F\int dx(\psi_R^\dagger\partial_x\psi_R-\psi_L^\dagger\partial_x\psi_L)+2h\int dx(-1)^x(e^{-ik_Fx}\psi_R^\dagger+e^{ik_Fx}\psi_L^\dagger)(e^{ik_Fx}\psi_R+e^{-ik_Fx}\psi_L) \tag{15.77}$$

这里ψ_L,ψ_R是左和右费米子,即手征费米子.在半满时,$e^{ik_Fx}=(-1)^x$,那么$2h$ 项给出左右费米子耦合的质量项

$$2h\int dx(\psi_R^\dagger\psi_L+\psi_L^\dagger\psi_R) \tag{15.78}$$

该质量项的出现混合了左右费米子导致左右费米子各自不守恒,即破坏了手征对称性.对于晶格模型,可以用手征磁化率$\chi=\frac{1}{L}\langle(\sum_j(-1)^{j+\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j})^2\rangle$来探测.

- $\mu=0,h\neq0$时体系的基态总是处于禁闭态,这种禁闭态理解为手征对称性破缺.

对一般的填充密度,(改变μ)若h较小,q_j显示一些列填充依赖的规则分布(条纹态).[6]特别是当费米子数很少时,基态构型为$q_j=1$, 系统显示能带绝缘体与金属相.在金属相,有效化学势$|\mu_f=\mu+2h|<2|J|$,此时$\hat{\tau}^z$所对应的横场项是小量,Ising耦合部分导致系统发生(反)铁磁相变,进入有序态因而c 费米子此时也是处于金属态.而在绝缘相,$\hat{\tau}^x$涨落很强,此时c费米子也会感受到相应的涨落,并不会显示简单的金属行为,其更像是无序势场中运动的电子,会发生Anderson局域化.当h较大时,构型q_j显示相分离,也就是$q_{j=1}$和$q_j=-1$的区域彼此分开,体现为实空间的强烈不均匀性.

- 限制规范理论模型对应无限制模型中$q_j=1$的情况,此时系统显示金属到绝缘体的相变,对应于规范理论中的退禁闭-禁闭相变.
- 当把q_j看成是静态的无序场时,($q_j=\pm1$)以上模型可用来描述一类无序自由的多体局域化态(many-body localization, MBL).[8]
- 添加自旋自由度时系统对偶变换后对应Hubbard模型和具有三体相互作用的FK模型.[7]

上述讨论推广至二维模型的情况(图15.7(b)),[7]这里以正方晶格为例.费米子之间的有最近邻跃迁,规范场部分是以格点为中心的星型四自旋乘积,即格点四个相连连接上的自旋相乘:

$$\hat{H}=-J\sum_{\langle j,k\rangle}\hat{c}_j^\dagger\hat{\mu}_{j,k}^z\hat{c}_k+\text{H.c.}-\mu\sum_j\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j-h\sum_j\hat{\mu}_{j,j+x}^x\hat{\mu}_{j,j-x}^x\hat{\mu}_{j,j+y}^x\hat{\mu}_{j,j-y}^x \tag{15.79}$$

对纯规范场部分,假设$h>0$,那么体系的激发是四自旋乘积从+1变为−1,注意到规范变换算符

$$\hat{G}(j)=\hat{\mu}_{j,j+x}^x\hat{\mu}_{j,j-x}^x\hat{\mu}_{j,j+y}^x\hat{\mu}_{j,j-y}^x(-1)^{\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j} \tag{15.80}$$

[6]这些条纹态似乎对应于规范场禁闭态

若取$\hat{G}(j)=1$,那么自旋激发同时导致费米子数的改变,因此该激发也可称为j 格点处的(规范)电荷激发.仿照一维情况的处理,四自旋乘积项可以看成电荷的势能,则有

$$\hat{\tau}_j^z=\hat{\mu}_{j,j+x}^x\hat{\mu}_{j,j-x}^x\hat{\mu}_{j,j+y}^x\hat{\mu}_{j,j-y}^x. \tag{15.81}$$

在j处产生一个电荷,可用以下string型算符表示:

$$\hat{\tau}_j^x=\prod_{n=0}\hat{\mu}_{j-ny,j-(n+1)y}^z. \tag{15.82}$$

这个string算符把从负无穷远处到j附近沿y轴方向的所有自旋相乘.除了j格点下方的$\hat{\mu}_{j,j-y}$以外,其他自旋总是改变电荷势能部分四自旋乘积两次,因此仅在j处产生激发.同理我们也可以沿x方向定义string 算符$\hat{\tau}_j^x=\prod_{n=0}\hat{\mu}_{j-nx,j-(n+1)x}^z$.

对于$\hat{\mu}_{j,k}^z$,若k是$j+y,j-y$那么y方向上相邻的string乘积可表示为:

$$\hat{\tau}_j^x\hat{\tau}_{j+y}^x=\left(\prod_{n=0}\hat{\mu}_{j-ny,j-(n+1)y}^z\right)^2\hat{\mu}_{j,j+y}^x=\hat{\mu}_{j,j+y}^x \tag{15.83}$$

而当$k=j+x$时,$\hat{\tau}_j^x,\hat{\tau}_{j+x}^x$对应的string算符没有相同的自旋,无法直接抵消.注意到每一个plaquett上的四自旋乘积是系统的守恒量

$$P_j=\hat{\mu}_{j,j+x}^z\hat{\mu}_{j+x,j+x+y}^z\hat{\mu}_{j+x+y,j+y}^z\hat{\mu}_{j+y,j}^z=\pm1 \tag{15.84}$$

那么我们得到

$$\hat{\mu}_{j+y,j}^z\hat{\mu}_{j+x,j+x+y}^z=P_j\hat{\mu}_{j,j+x}^z\hat{\mu}_{j+x+y,j+y}^z \tag{15.85}$$

也就是把string上的自旋用两个string之间的x方向的自旋乘积代替.当把$\hat{\tau}_j^x$与$\hat{\tau}_{j+x}^x$相乘时,所有string上的自旋换成x 方向自旋乘积,除了$\mu_{j,j+x}^z$以及无穷远处那个自旋外,其他自旋都出现两次而贡献为1,设无穷远自旋取值为1,则有

$$\hat{\tau}_j^x\hat{\tau}_{j+x}^x=P_{j-y}P_{j-2y}...\mu_{j,j+x}^z=\left(\prod_{n=1}P_{j-ny}\right)\mu_{j,j+x}^z=B_{j,j+x}\mu_{j,j+x}^z. \tag{15.86}$$

综合上述结果,我们得到系统的对偶描述:

$$\hat{H}=-J\sum_{\langle j,k\rangle}B_{j,k}\hat{c}_j^\dagger\hat{\tau}_j^x\hat{\tau}_k^x\hat{c}_k+\text{H.c.}-\mu\sum_j\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j-h\sum_j\hat{\tau}_j^z \tag{15.87}$$

这里$B_{j,j\pm y}=1$,$B_{j,j\pm x}$由plaquett乘积给定.$B_{j,k}$可看作静态势或者规范场.令$\hat{f}_j=\hat{c}_j\hat{\tau}_j^x$并考虑规范约束的本征值$q_j$有

$$\hat{H}=-J\sum_{\langle j,k\rangle}B_{j,k}\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_k+\text{H.c.}-\mu\sum_j\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j-h\sum_jq_j(1-2\hat{f}_j^\dagger\hat{f}_j) \tag{15.88}$$

对确定的$B_{j,k},q_j$上述模型描述自由费米子,因而严格可解.

- 二维模型对偶变换包含非平凡规范因子$B_{j,k}$,因此解的性质相当复杂.



Figure 15.9: 二维限制规范模型在不同粒子填充ν下的通量分布(a)$\nu = 1/4$;(b)$\nu = 1/3$;(c)$\nu = 2/5$.黑色方块代表$P_j = -1$(π通量)而白色方块$P_j = 1$(0通量).

- 关于解的初步分析可参考文献[7].其中半满对称情况下(取$q_j = 1$也就是考虑受限规范理论的情况)基态$B_{j,k}$满足π通量条件,也就是每一个$P_j = -1$.这样y 方向跃迁不受影响,而x方向跃迁系数正负交错,系统能带发生折叠进入Dirac半金属态.

如果偏离半满对称,情况比较复杂.考虑共度填充的情况,即粒子密度为$\nu = p/q$,p, q为互质的正整数,并且假设通量为$U(1)$通量,也就是对每一个plaquette有$P_j = e^{i\Phi_j}$那么最低能量的通量构型必然是通过每个plaquette的通量是均匀的,且等于$2\pi\nu$.对当前Z_2通量的情况,($\nu = p/q$)每个元胞包含q个格点以及$2p$个plaquette(q为奇数).(q为偶数时则有$q/2$个格点和p个plaquette)

图15.9给出了二维限制规范模型在不同粒子填充ν下的通量分布.例如$\nu = 1/4$时一个元胞有2个格点和1个plaqutte,这相当于2×2的体系,$\nu = 1/3$则对应3×3体系,$\nu = 2/5$则对应5×5.

- 需要指出,虽然相互作用的规范场模型已经化为了固定背景下的自由费米子问题,但是由于两者之间变换的非局域特性,自由费米子问题的结果翻译回原始模型并不容易,这方面仍然需要更为仔细的研究,比如说一般填充时自由费米子体系的条纹态在原始体系中具体对应着什么.

另一方面,采用DMRG方法,[7]TUM的理论组研究了二维Z_2规范场与费米子的耦合问题,(图15.10(a))

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle j,k \rangle} \hat{c}_j^\dagger \hat{\sigma}_{j,k}^z \hat{c}_k + \text{H.c.} - \mu \sum_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j - J \sum_j \hat{\sigma}_{j,j+x}^x \hat{\sigma}_{j+x,j+x+y}^x \hat{\sigma}_{j+x+y,j+y}^x \hat{\sigma}_{j+y,j}^x - h \sum_{j,\delta=x,y} \hat{\sigma}_{j,j+\delta}^x. \tag{15.89}$$

这里模型的h项由于仅有单个自旋,因此并不能转化为自由费米子的形式,此外由于费米子没有自旋,这样行列式量子蒙特卡洛方法也没法用来求解. 在他们的研究探究中取定$\hat{G}(j) = \hat{\sigma}_{j,j+x}^x \hat{\sigma}_{j,j-x}^x \hat{\sigma}_{j,j+y}^x \hat{\sigma}_{j,j-y}^x (-1)^{\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j} = 1$. 让我们考虑一些

[7][Borla,Jeevanesan,Pollmann,Moroz,Quantum phases of two-dimensional Z_2 gauge theory coupled to single-component fermion matter,Phys.Rev.B **105**,075132(2022)]

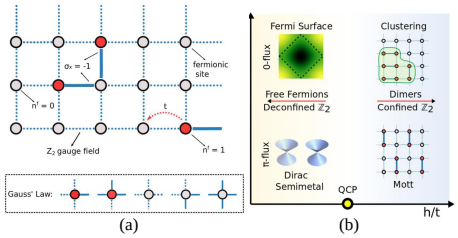


Figure 15.10: (a)二维规范-费米子耦合模型,(b)在半满时的基态相图.

极限情况.(1)在$\mu = -\infty$的极限下,费米子具有无穷大的势能,因此基态时就不会有费米子,因此$\hat{G}(j) = \hat{\sigma}^x_{j,j+x}\hat{\sigma}^x_{j,j-x}\hat{\sigma}^x_{j,j+y}\hat{\sigma}^x_{j,j-y} = 1$. 这时体系由纯粹的$Z_2$规范场描述,一般叫做偶规范理论.根据之前对偶理论的描述,这个模型对偶于二维量子Ising模型,这样Ising模型的磁有序态对应规范场的退禁闭态而顺磁态对应禁闭态,Ising模型的相变对应规范场的退禁闭-禁闭连续相变.

(2)在$\mu = +\infty$的极限下,基态时每个格点都有一个费米子,因此$\hat{\sigma}^x_{j,j+x}\hat{\sigma}^x_{j,j-x}\hat{\sigma}^x_{j,j+y}\hat{\sigma}^x_{j,j-y} = -1$.这时体系叫做奇规范理论.根据之前对偶理论的描述,此时对偶于完全阻挫的二维量子Ising模型.与偶规范理论不同,此时退禁闭态具有D_8非阿贝尔二面体(群)对称性,禁闭态自发破缺平移不变性而形成晶体,两者间的相变由XY^*共形场论描述.

(3)$h = 0$极限下,这个模型转化为先前二维可解模型的情况,也就是静态规范场背景下的自由费米子问题.当$\mu = 0, J = 0$时,每个plaquette有一个π通量,这样自由费米子能谱在$(k_x, k_y) = (\pm\pi/2, \pi/2)$处显示两个Dirac cone.对于规范场而言,其激发是有能隙.这样体系在J很小的时候可以理解为退禁闭的Dirac费米子体系.当$J >> t$时,毫无疑问,基态时四自旋乘积部分为1,这说明体系进入0通量态.在0通量时,如果用之前模型的记号,那么有$P_j = 1$,这样费米子部分就是退禁闭的自由费米气体$\hat{H} = \sum_k(-2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu)\hat{f}^\dagger_k\hat{f}_k$,具有明确的费米面.这个0通量态与$\pi$通量态之间可以具有相变或者是一些中间态,这些中间态一般会破坏平移不变性.但在热力学极限下,中间态可能会消失因而$0, \pi$通量态之间会有相变.

(4)$h \to \infty$极限,电场部分$\hat{\sigma}^x_{j,j+\delta}$基本上固定为1.此时费米子不会运动,(运动会导致$\hat{\sigma}^x_{j,j+\delta}$发生变化),低能下只存在两个费米子的复合体,例如$\hat{c}^\dagger_j\hat{\sigma}^x_{j,j+\delta}\hat{c}_{j+\delta}$.这类复合体可以看作是硬核玻色子,其有效模型是Rokhsar-Kivelson模型.

结合上述极限情况的分析以及DMRG的计算,Z_2规范场与费米耦合模型的定性相图是图15.10(b),具体计算的结果则是图15.11.

- Z_2规范场与有自旋费米子在正方晶格的情况已被量子蒙特卡洛详细研究.[8]

[8] [Gazit,Randeria,Vishwanath,Emergent Dirac fermions and broken symmetries in confined and deconfined phases of Z_2 gauge theories,Nat.Phys. **13**,484(2017);Assaad,Grover,Simple

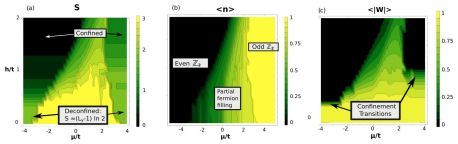


Figure 15.11: (a)纠缠熵S,(b)粒子数密度,(c)Wilson loop的基态期望值.$J/t = 1, \infty \times 4$体系.

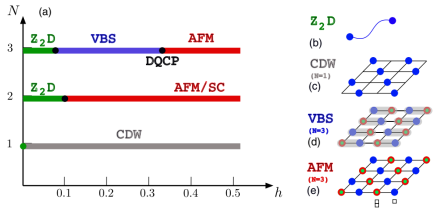


Figure 15.12: (a)不同费米子分量$N = 1, 2, 3$时的相图,(b)Z_2D代表退禁闭且具有Dirac费米子的半金属态,(c)CDW代表电荷密度波态,(d)VBS代表价键固体,(e)AFM代表反铁磁绝缘态.

例如,在Assaad和Grover的研究中,他们考虑了如下具有N个费米子分量的模型,

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{Z}_{ij} \left(\sum_{\alpha=1}^{N} \hat{c}^{\dagger}_{i\alpha} \hat{c}_{j\alpha} + \text{H.c.} \right) - Nh \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{X}_{ij}. \tag{15.90}$$

这里$\hat{Z}_{ij}, \hat{X}_{ij}$是定义在link上的$Z_2$规范场.注意到这个模型并没有明确考虑plaquette上或者规范算符中的四自旋乘积项.通过把费米子改写为两个Majorana费米子,即$\hat{c}_{j\alpha} = (\gamma_{j\alpha,1} + i\gamma_{j\alpha,2})/2$,上述模型具有$O(2N)$对称性,因此可以用Majoana费米子表示的行列式蒙特卡洛方法进行严格计算,其相图为图15.12(a).这里$N = 1$所对应的CDW态基本上可以用之前可解模型所对应的$q_j = (-1)^j, (-1)^{j+1}$规范电荷分布来理解,其是禁闭类型的绝缘态,所有激发都具有能隙.$N > 1$时Z_2D对应的是退禁闭的Dirac半金属,AFM是反铁磁绝缘态,VBS是价键固体态.在VBS和AFM之间的相变点是退禁闭的量子临界点,其具体性质仍需要进一步研究.

对于强耦合与弱耦合极限,我们实际上可以有更多的理解.例如,在$h >> 1$的强耦合极限下,我们可以把h项作为主项而费米子部分作为微扰项,这样可以进行微扰计算.由于自旋算符不便于计算,常用的方式是把它转换成硬核玻色子,也就

Fermionic Model of Deconfined Phases and Phase Transitions,Phys.Rev.X **6**, 041049(2016)]

是定义$\hat{X}=2\hat{b}^{\dagger}\hat{b}-1,\hat{Z}=\hat{b}^{\dagger}+\hat{b}$,同时还需要满足硬核玻色子的约束条件,也就是同一个态不能占据超过一个玻色子$(\hat{b}^{\dagger})^2=0$.当然,在$h>>1$时,玻色子的占据都是比较少的,这样我们可以近似忽略约束项,因而规范场与费米子的耦合问题成为等效的电子-声子相互作用模型:

$$\hat{H}_{HB}=\sum_{\langle i,j\rangle}(\hat{b}_{ij}^{\dagger}+\hat{b}_{ij})\left(\sum_{\alpha=1}^{N}\hat{c}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{c}_{j\alpha}+\text{H.c.}\right)-Nh\sum_{\langle i,j\rangle}(2\hat{b}_{ij}^{\dagger}\hat{b}_{ij}-1). \tag{15.91}$$

在路径积分表示下,我们可以积掉玻色子来得到仅包含费米子的作用量,即有

$$S=-\frac{1}{2Nh}\sum_{\langle ij\rangle}\int_0^{\beta}d\tau d\tau'\hat{k}_{\langle i,j\rangle}(\tau)D(\tau-\tau')\hat{k}_{\langle i,j\rangle}(\tau') \tag{15.92}$$

这里$\hat{k}_{\langle i,j\rangle}=\sum_{\alpha=1}^{N}(c_{i\alpha}^{\dagger}c_{j\alpha}+\text{H.c.})$代表费米子的跃迁项.$D(\tau)=h\frac{e^{-2(\beta-|\tau|)h}+e^{-2|\tau|h}}{1-e^{-2\beta h}}$是玻色子的虚时Green函数,在$h\to\infty$极限下有$D(\tau)\to\delta(\tau)$,这说明强耦合极限下费米子部分的哈密顿量简化为

$$\hat{H}_{\infty}=-\frac{1}{2Nh}\sum_{\langle ij\rangle}(\hat{k}_{\langle i,j\rangle})^2 \tag{15.93}$$

在强耦合极限下,Ising自旋沿着x方向极化,此时费米子跃迁基本上是被禁止的,因为这意味着自旋的翻转.尽管如此,虚过程仍然可以发生,Ising自旋所诱导的等效超交换过程给出$1/(2Nh)$尺度的费米子交换哈密顿量.当$N=\infty$时,根据Affleck和Marston的研究,$\hat{H}_{\infty}$的基态是价键固体态. [9]当$N=1$时,则有

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\infty} &= -\frac{1}{2h}\sum_{\langle ij\rangle}(\hat{c}_i^{\dagger}\hat{c}_j+\hat{c}_j^{\dagger}\hat{c}_i)^2=\frac{1}{h}\sum_{\langle ij\rangle}(\hat{n}_i\hat{n}_j-\hat{n}_j/2-\hat{n}_j/2)\\ &= \frac{1}{h}\sum_{\langle ij\rangle}\left(\hat{n}_i-\frac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_j-\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{4h}\sum_{\langle ij\rangle}1.\end{aligned} \tag{15.94}$$

把费米子数算符$\hat{n}_i$用自旋算符$\hat{\sigma}_i^z+1/2$表示(Jordan-Wigner变换)可知体系变成反铁磁Ising模型$\frac{1}{h}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_j^z$,在正方晶格上基态是Ising反铁磁态,即有$\langle\hat{\sigma}_j^z\rangle=(-i)^{j_x+j_y}$.翻译回费米子则说明体系在$N=1$基态是CDW态$(\langle\hat{n}_j\rangle=(-i)^{j_x+j_y}+\frac{1}{2})$.此外$N=2$时$\hat{H}_{\infty}$可以用自旋和赝自旋改写为$\hat{H}_{\infty}=\frac{1}{h}\sum_{\langle ij\rangle}(\hat{S}_i\hat{S}_j+\hat{\eta}_i\hat{\eta}_j)$,这样自旋算符部分描述反铁磁耦合而赝自旋实际上表示超导和CDW.

在$h=0$的极限,体系的模型简化为$\hat{H}_0=\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{Z}_{ij}\left(\sum_{\alpha=1}^{N}\hat{c}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{c}_{j\alpha}+\text{H.c.}\right)$.此时,体系的$Z_2$规范不变性意味着本征态的能量仅依赖于每个plaquette上的规范通量$\hat{F}_i=\hat{Z}_{i,i+x}\hat{Z}_{i+x,i+x+y}\hat{Z}_{i+x+y,i+y}\hat{Z}_{i+y,i}$.而Lieb定理说明对正方晶格而言其最小能量的构型是所有$\hat{F}_i=-1$(π通量).因此规范场与费米子的耦合会产生等效的磁场项,即$|J|\sum_i\hat{F}_i$.

[9][Affleck,Marston,Large-n Limit of the Heisenberg-Hubbard Model:Implications for High-Tc Superconductors,Phys.Rev.B **37**,3774(1988)]

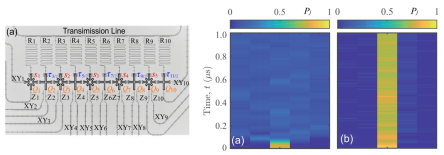


Figure 15.13: (左图)具有10个量子比特的超导量子线路体系,奇数和偶数比特分别实现s,τ自旋.(右图)s自旋在不同参数下的时空分布,(a)对应退局域化而(b)对应局域化.

对于$L_x \times L_y$的体系(周期边界),对应π通量的Ising场构型总计有$2^{L_x L_y}$个,这表明$h = 0$的基态具有巨大的简并度.当然,对于任意$h > 0$的情况,一些不破坏哈密顿量对称性的项会在微扰过程中自动出现,例如$\hat{H}_Q = \sum_{ij} K_{ij}\hat{Q}_i\hat{Q}_j$.这里$\hat{Q}_i = \hat{X}_{i,i+x}\hat{X}_{i,i-x}\hat{X}_{i,i+y}\hat{X}_{i,i-y}(-1)^{\hat{n}_i} = \pm 1$是规范变换算符,也是体系的守恒量.既然, $\hat{Q}_i = \pm 1$基本上可以当作经典Ising变量,那么其在有限温度下就可以有相变,也就是存在$\langle \hat{Q}_i \rangle = 0$到非零的有限温度相变.

Z_2规范场理论的实验实现

由于Z_2规范理论模型的相互作用耦合远比通常的凝聚态模型复杂,因此一般的凝聚态物质体系很难直接实现这些规范场论模型.目前比较有希望的方式是通过冷原子或者超导量子比特类型的可控人工合成系统来实现.[10]

在冷原子的方案中,考虑Rb-87原子超精细基态的两个Zeeman能级$|c\rangle \equiv |F = 1, m_F = -1\rangle, |f\rangle \equiv |F = 1, m_F = 1\rangle$.然后把这两个能级的原子看作粒子$c$和$f$.这样$Z_2$规范理论中的物质场粒子就由$c$表示,而规范场$\hat{\mu}^z_{j,j+1}$由相邻格点$f$粒子的粒子数只差表示,即有$\hat{\mu}^z_{j,j+1} = \hat{f}^\dagger_{j+1}\hat{f}_{j+1} - \hat{f}^\dagger_j\hat{f}_j$.至于规范场的电场部分$\hat{\mu}^x_{j,j+1}$可以通过$f$粒子的跃迁实现,即$\hat{\mu}^x_{j,j+1} = \hat{f}^\dagger_j\hat{f}_{j+1} + \hat{f}^\dagger_{j+1}\hat{f}_j$.当然,要让$f$粒子精确表示Ising类型的规范场要求$f$粒子在每个格点都只有一个.在Bloch组的实验中,他们利用Floquet方法实现了两格点Z_2规范理论模型.

在超导量子比特实验中,中科院物理所的研究组主要采用10个量子比特的体系构造如下自旋模型:

$$\hat{H} = \sum_j (g_j\hat{\sigma}^+_j\hat{\sigma}^-_{j+1} + \lambda_j\hat{\sigma}^+_j\hat{\sigma}^-_{j+2} + \text{H.c.}) + \sum_j \left(\frac{V_j}{2}\hat{\sigma}^z_j + h_{x,j}\hat{\sigma}^x_j\right) \tag{15.95}$$

[10][Schweizer et al.,Floquet approach to Z_2 lattice gauge theories with ultracold atoms in optical lattices, Nat.Phys. **15**,1168(2019);Wang et al.,Observation of emergent Z_2 gauge invariance in a superconducting circuit, Phys.Rev.Research **4**,L022060(2022)]

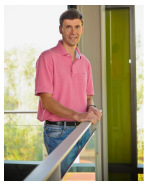



Figure 15.14: Xiao-Gang Wen(文小刚)和Alexei Kitaev都是著名的理论物理学家,因对拓扑序理论的贡献荣获2017年度美国物理学会Oliver Buckley 奖.两人分别于2018以及2015年荣获理论和数学物理领域的最高荣誉Dirac奖.

然后这个模型在合适的参数选取下等价于

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{eff} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 \\
\hat{H}_1 &= \sum_{l=1}^{4} \tilde{g}_{s,l}(\hat{s}_l^+ \hat{\tau}_{l+1/2}^z \hat{s}_{l+1}^- + \text{H.c.}) + \sum_{l=1}^{5} h_x \hat{\tau}_{l+1/2}^x \\
\hat{H}_2 &= -\sum_{l=1}^{4} \tilde{g}_{\tau,l} \hat{\tau}_{l-1/2}^+ \hat{s}_l^- \hat{\tau}_{l+1/2}^- \\
\hat{H}_3 &= \sum_{l=1}^{4} (\lambda_{2l-1} \hat{s}_l^+ \hat{s}_{l+1}^- + \lambda_{2l} \hat{\tau}_{l+1/2}^+ \hat{\tau}_{l+3/2}^- + \text{H.c.}) + \sum_{l=1}^{5} h_z \hat{\tau}_{l+1/2}^z
\end{aligned} \tag{15.96}$$

可以看到$\hat{H}_1$是Z_2规范场模型,其规范算符是$\hat{\tau}_{l+1/2}^x \hat{s}_l^z \hat{\tau}_{l+1/2}^x$,而$\hat{H}_2, \hat{H}_3$表面上破坏规范对称性.虽然如此,体系仍然具有$Z_2$规范场不变性,此时新的规范算符是$\hat{\tilde{\tau}}_{l+1/2}^x \hat{s}_l^z \hat{\tilde{\tau}}_{l+1/2}^x (\hat{\tilde{\tau}}_{l+1/2}^x = \sin(\beta)\hat{\tau^z} + \cos(\beta)\hat{\tau^x}, \beta = \arctan(h_z/h_x))$. 通过观察$s$自旋的空间分布随时间的变化可以知道体系可以处于扩展态或者局域化态,前者对应规范场的退禁闭而后者则是禁闭态.(图15.13)

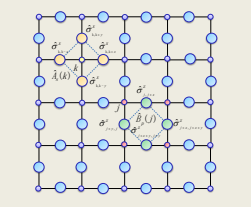


Figure 15.15: Kitaev的toric-code模型,$\hat{A}_s(k)$和$\hat{B}_p(j)$分别是格点为中心的星和plaquette.

Kitaev的toric-code模型:从玩具到现实

一个量子Z_2规范理论模型的推广(更像是简化因为其精确可解性)是Kitaev的toric-code模型.[11]这个模型目前是量子计算和凝聚态物质,特别是拓扑物态研究最重要的模型之一.这里的code是量子计算中编码的意思,而toric是torus(环面,或者说轮胎面)的形容词,它在这里指的是当把该模型放在torus上时可做量子编码.[12]这个模型相当于在标准形式中把磁场项$-h\hat{\sigma}^x$去掉而把规范变换部分放入哈密顿量中,即有

$$\hat{H}_{tc} = -J\sum_i \hat{\sigma}^z_{i,i+\hat{x}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{y},i} - w\sum_i \hat{G}(i) \tag{15.97}$$

一般引入新的记号$\hat{B}_p(i) = \hat{\sigma}^z_{i,i+\hat{x}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x},i+\hat{x}+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{x}+\hat{y},i+\hat{y}}\hat{\sigma}^z_{i+\hat{y},i}$, $\hat{A}_s(i) = \hat{G}(i)$,$J = J_m$和$J_e = w$,那么相应的模型是(如图15.15)

$$\boxed{\hat{H}_{tc} = -J_e\sum_i \hat{A}_s(i) - J_m\sum_i \hat{B}_p(i)} \tag{15.98}$$

这就是标准的toric-code模型.[13]这里$\hat{B}_p(i)$代表格点i 对应的plaquett(小正方形)上规范不变的z方向自旋乘积,适用于各种晶格和维度.为了与文献中记号一致,我们重新写出$\hat{B}_p(i)$

$$\hat{B}_p(i) = \prod_{j\in plaquett} \hat{\sigma}^z_{i,j} \tag{15.99}$$

$\hat{A}_s(i)$是以i格点(顶点)为中心出发的所有最近邻x方向自旋的乘积(形成一个star),

$$\hat{A}_s(i) = \prod_{j\in star} \hat{\sigma}^x_{i,j} \tag{15.100}$$

[11][Annals of Physics **303**,2(2003)]

[12]Kitaev设计该模型的原始目的是为了做量子计算

[13]在六角晶格上也可以定义toric-code模型,只不过$\hat{B}_p$替换为一个六角形上的六自旋乘积,而$\hat{A}_s$则是格点附近最近邻三自旋的乘积.

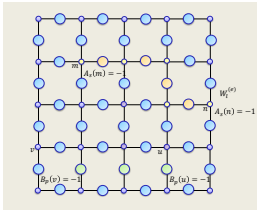


Figure 15.16: Toric-code模型的准粒子:涡旋和电荷激发.

注意到所有的$\hat{A}_s(i), \hat{B}_p(j)$都对易,且由$\hat{A}_s^2(i) = 1, \hat{B}_p^2(j) = 1$可知两者的本征值都是$\pm 1$.这说明体系的任意本征态可以用$\hat{A}_s, \hat{B}_p$的本征值表征.换句话说,给定本征值的具体取值就给出现了相应的本征态$|\Psi\{\hat{A}_s = \pm 1, \hat{B}_p = \pm 1\}\rangle$.所以我们说体系实际上是精确可解的.现在,一个基本问题是体系的基态是什么样的,或者说$\hat{A}_s, \hat{B}_p$取何值时体系是基态.我们通常选择$J_e, J_m > 0$,这样基态对应能量最低的态,显然当所$\hat{A}_s(i)$,$\hat{B}_p(i)$都取值为+1时体系能量最低,这就是系统的基态$|\Psi_0\rangle = |\Psi\{\hat{A}_s = \hat{B}_p = 1\}\rangle$.

基态上的低能激发

既然我们找到了体系的基态,那么下面的问题便是基态之上的激发是什么,这对于我们理解体系的低能物理至关重要.

相对于基态的激发(这里是精确的,因为是本征态)可通过把某一个或一些$\hat{A}_s(i), \hat{B}_p(i)$取值变为$-1$而得到.比如$\hat{B}_p(i) = -1$表明在$i$格点所在plaquett存在一个$Z_2$涡旋,[14] $\hat{A}_s(i) = -1$则说明在i格点有一个Z_2电荷.

那么我们如何产生这些激发呢？首先,在有限温度时,单个涡旋或者电荷激发能自发出现.(数学上,这是因为热平衡时的配分函数涉及对所有本征态的求,单涡旋和电荷也是本征态因而有贡献.)

另一方面,我们可以用动力学的方式产生涡旋或电荷激发.一般我们采用路径依赖的一些列自旋算符乘积,也就是string算符作用基态来产生电荷或涡旋激发.对于电荷激发,我们定义

$$\hat{W}_l^{(e)} = \prod_{i,j \in l} \hat{\sigma}_{i,j}^z \tag{15.101}$$

l代表联系两个待考虑格点例如m和n间的路径.物理上$\hat{W}_l^{(e)}$算符在路径l对应的string的两个端点m, n产生各产生一个电荷激发.(图15.16中黄色自旋)这可以通过如下计算得以说明.首先string算符$\hat{W}_l^{(e)}$显然与所有$\hat{B}_p(i)$对易,也与除

[14] 采用$\hat{\sigma}^z$的本征态$|s\rangle = |\pm\rangle$作为基矢,这样我们可以方便地定义每一个plaquett的通量(flux)为$w_p(i) = \prod_{j \in plaquett} s_{ij}$.如果$w_p(i) = -1$那么我们说第$i$个plaquett有一个$Z_2$涡旋,也叫做vison.(据说是由MIT的T.Senthil 通过vortex和Ising两个词得到的新单词,意思可理解为Ising规范理论中涡旋激发对应的粒子)

了$\hat{A}_s(m)$和$\hat{A}_s(n)$外的所有$\hat{A}_s(i)$对易.对于$\hat{A}_s(m)$和$\hat{A}_s(n)$有:

$$\hat{W}_l^{(e)}\hat{A}_s(m/n) = -\hat{A}_s(m/n)\hat{W}_l^{(e)} \tag{15.102}$$

也就是说$\hat{W}_l^{(e)}$与两个端点的$\hat{A}_s$反对易.然后,让我们把$\hat{W}_l^{(e)}$作用到基态$|\Psi_0\rangle$之上,这样导致的(双)电荷激发态是

$$|\Psi_{m,n}^{(e)}\rangle = \hat{W}_l^{(e)}|\Psi_0\rangle. \tag{15.103}$$

现在我们计算这个态上任意$\hat{A}_s(j)$的期望值:

$$\langle\Psi_{m,n}^{(e)}|\hat{A}_s(j)|\Psi_{m,n}^{(e)}\rangle = \langle\Psi_0|\hat{W}_l^{(e)}\hat{A}_s(j)\hat{W}_l^{(e)}|\Psi_0\rangle \tag{15.104}$$

如果$j \neq m,n$也就是$\hat{A}_s$不涉及string的两个端点m,n那么$\hat{W}_l^{(e)}\hat{A}_s(j)\hat{W}_l^{(e)} = (\hat{W}_l^{(e)})^2\hat{A}_s(j) = \hat{A}_s(j)$.我们知道基态时所有$\hat{A}_s$的取值都是1,因此当$j \neq m,n$时有$\langle\Psi_{m,n}^{(e)}|\hat{A}_s(j)|\Psi_{m,n}^{(e)}\rangle = 1$.另一方面,$j = m,n$时$\hat{A}_s(j)$与$\hat{W}_l^{(e)}$反对易,这样就多出一个负号.这说明$j = m,n$处$\hat{A}_s$的取值为$-1$.因此状态$|\Psi_{m,n}^{(e)}\rangle$确实描述双电荷激发而$\hat{W}_l^{(e)}$的物理意义是在基态上产生两个电荷激发.

类似地,可以定义产生涡旋的string算符,即(图15.16中绿色自旋)

$$\hat{W}_l^{(m)} = \prod_{i,j\in l}\hat{\sigma}_{i,j}^x \tag{15.105}$$

这里$\hat{W}_l^{(m)}$在string的两端分别产生一个涡旋激发.

当然,如果我们考虑的系统有边界,例如图15.16所展示的开边界下的正方晶格,那么以边界处的自旋为一个端点的string算符只在另一端产生涡旋或电荷激发.也就是说,对于有边界体系,我们能够用$\hat{W}_l^{(m)/(e)}$只产生单个涡旋或电荷激发.这个就类似于Dirac磁单极理论中的Dirac弦,弦的两段是磁单极,当我们让Dirac弦从无穷远处延伸至某个空间位置时,我们在该空间位置附近只会看到单个磁单极.

对于周期边界系统,每一个自旋都属于两个plaquett,也就是$\hat{B}_p$,那么所有$\hat{B}_p$的乘积必定满足$\prod_i \hat{B}_p(i) = 1$.同理也有$\prod_i \hat{A}_s(i) = 1$.这说明周期边界下toric-code模型的电荷或者涡旋必成对出现.

基态简并度与拓扑序

一个简单的问题是系统的基态简并度.我们知道toric-code是一个Z_2规范场模型,从自旋$\hat{\sigma}$的角度来说系统的基态简并非常巨大,但是很多简并态实际上是规范等价的,因此我们认为规范不等价的基态才对基态简并度有物理意义上的贡献.对于图15.16所示开边界的正方晶格,规范不等价的基态是唯一的,因此我们说该系统没有基态简并.注意在拓扑学的意义上,开边界的(无穷大)正方晶格可以等价于一个球面.(回忆复变函数论中的复平面与复数球面的对应)

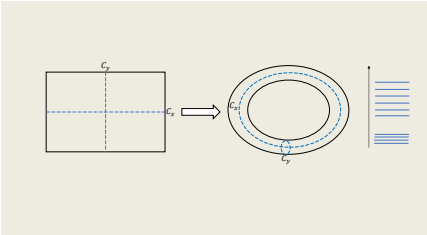


Figure 15.17: 轮胎面与周期边界正方晶格的等价性.

另一方面,x与y方向都取周期边界条件的正方晶格等价于一个定义在轮胎面上的系统.对于这个体系,其基态简并是4.我们可以利用string算符$\hat{W}_l^{(m)}$ 构造这四个基态:

$$|\Psi_0\rangle, \quad \hat{W}_{\mathcal{C}_x}^{(m)}|\Psi_0\rangle, \quad \hat{W}_{\mathcal{C}_y}^{(m)}|\Psi_0\rangle, \quad \hat{W}_{\mathcal{C}_x}^{(m)}\hat{W}_{\mathcal{C}_y}^{(m)}|\Psi_0\rangle \tag{15.106}$$

这里$\mathcal{C}_x, \mathcal{C}_y$分别是$x, y$方向的闭合回路.由于$\hat{W}_{\mathcal{C}_x}^{(m)}, \hat{W}_{\mathcal{C}_y}^{(m)}$与所有$\hat{A}_s, \hat{B}_p$都对易,这四个态下所有$\hat{A}_s, \hat{B}_p$的平均值都是1.这说明我们构造出的四个态确实都是基态.另一方面,由于$\mathcal{C}_x, \mathcal{C}_y$是规范不变的,因此其效果并不能用规范变换消除,因此这四个态在物理上又是不等价的.因此,我们说轮胎面上的toric-code具有四重基态简并.[15]

- 一般来说,像toric-code这类模型其基态简并度依赖于模型所定义的空间/流形的拓扑结构,(球面上基态唯一,圆柱面上简并度为2,轮胎面上简并度为4而球面,圆柱面和轮胎面在拓扑学意义上是不等价的.)这种基态简并度依赖于模型所在流形拓扑结构的性质称为拓扑序(topological order).[16]

注意到这类基态简并不依赖系统的物理对称性(例如时间反演,晶格平移和旋转等)而是系统多体波函数的本质特征,因此称为拓扑简并.换句话说,拓扑简并定义了拓扑序.历史上拓扑序由文小刚和牛谦对手性自旋液体研究的启发而引入,而最典型的拓扑有序态则是广泛研究的分数量子Hall态.[17]

[15]类似的,圆柱面上我们可以沿着圆柱面的周长方向(用柱坐标(ρ, φ, z)表示就是指极角φ的方向)构造一个$\hat{W}_{\mathcal{C}}^{(m)}$,这样物理上不等价的基态就是$|\Psi_0\rangle$和$\hat{W}_{\mathcal{C}}^{(m)}|\Psi_0\rangle$,因此toric-code在圆柱面上的基态简并度是2.

[16]关于量子Z_2晶格规范理论的拓扑序讨论可参考Senthil和Fisher的工作.其基本要点是把系统放在拓扑非平凡的轮胎面(torus)或者圆柱面上,此时体系的基态简并度依赖于磁通量数.在禁闭态,磁通量或者涡旋数目几乎是任意的,这样基态是唯一的.而在退禁闭态,磁通量有明确定义,这样对于圆柱面磁通量为零和为一两个态是简并的,即简并度为2,而在轮胎面上,我们既可以通过轮胎中心加磁通量还可以再轮胎的内部沿中心轴方向加,这样总共有四种可能,即简并度为4.[Phys.Rev.B.**63**,134521(2001)]

[17]从微观角度来说,拓扑序来源自系统自身的量子纠缠特性,也就是长程量子纠缠.长程量子纠缠区别于所谓短程量子纠缠,不能通过有限局域幺正变换从无纠缠态得到(热力学极限下).

进一步,Oshikawa和Senthil证明拓扑序和系统分数化粒子的特性是相互联系的.[Phys.Rev.Lett.**96**,060601(2006)]具体而言,假定系统基态与激发态之间有能隙,并且具有带电为$p/q(p,q$ 为互质的正整数)的准粒子激发.然后简单起见把系统定义在轮胎面上,然后我们可以做两类操作,第一类操作是通过轮胎面中心绝热穿过单位磁通$\Phi_0=\frac{h}{e}=2\pi$, 我们把这个操作记为$\mathcal{F}_x$,另一个操作是在轮胎面的空间某一点产生一对准粒子-准空穴对,然后绝热移动准粒子,让其绕轮胎面一圈,最后回到原点并与准空穴湮灭,这个操作记为$\mathcal{T}_x$.(这里的绝热操作都是使得体系处于基态.)[18]

然后,如果先移动准粒子然后再插入磁通,那么其操作是$\mathcal{F}_x\mathcal{T}_x$,如果我们先插入单位磁通,再移动准粒子,$(\mathcal{T}_x\mathcal{F}_x)$那么准粒子在湮灭之前围绕单位磁通量一圈实际上感受到了一个相因子,(回忆AB 效应)即$e^{i2\pi p/q}$,显然这两种不同的操作顺序暗示如下的关系:

$$\mathcal{F}_x\mathcal{T}_x=e^{i2\pi p/q}\mathcal{T}_x\mathcal{F}_x \tag{15.107}$$

既然单位磁通插入并不影响系统,也就是说$\mathcal{F}_x$可以与系统哈密顿量对易,其基态波函数满足

$$\mathcal{F}_x|f_x\rangle=f_x|f_x\rangle \tag{15.108}$$

那么有

$$\mathcal{F}_x(\mathcal{T}_x|f_x\rangle)=e^{i2\pi p/q}\mathcal{T}_x\mathcal{F}_x|f_x\rangle=e^{i2\pi p/q}f_x(\mathcal{T}_x|f_x\rangle) \tag{15.109}$$

这说明$\mathcal{T}_x|f_x\rangle$也是$\mathcal{F}_x$的本征态,并且本征值是$e^{i2\pi p/q}f_x$,既然这个本征值与$|f_x\rangle$态的本征值f_x 并不相同,那么说明$\mathcal{T}_x|f_x\rangle$态与 $|f_x\rangle$态正交.并且系统一直处于绝热演化下,因此初始时系统处于基态,那么幺正演化后的态$|f_x\rangle$与$\mathcal{T}_x|f_x\rangle$都是基态.进一步,如果我们用$\mathcal{T}_x$多次作用于$|f_x\rangle$,我们发现一些列简并的基态:

$$|f_x\rangle,\ \ e^{i2\pi p/q}|f_x\rangle,\ \ e^{i2\pi 2p/q}|f_x\rangle,...,\ \ e^{i2\pi(q-1)p/q}|f_x\rangle \tag{15.110}$$

这分别对应不作用,以及作用一次,两次,以及$q-1$次$\mathcal{T}_x$的效果.注意到作用q次$\mathcal{T}_x$,我们发现

$$\mathcal{T}_x^q|f_x\rangle=e^{i2\pi qp/q}|f_x\rangle=e^{i2\pi p}|f_x\rangle=|f_x\rangle \tag{15.111}$$

也就是这个态与没作用$\mathcal{T}_x$是一样的,也就是当前情况下的简并基态数目为q个.对于更一般的空间几何,如果亏格数为g,那么系统的基态简并度为q^g.(例如Laughlin态中的分数电荷激发)实际上这是系统的最小简并,如果系统准粒子是费米子或者玻色子,那么简并度是q^{2g}.(例如Z_2量子自旋液体)

[18]这里的讨论参考《Understanding Quantum Phase Transitions》 书中Oshikawa所撰写章节的108 – 110页.

基态波函数

一个有意思的问题是基态波函数的具体形式,这对于我们详细理解基态的结构和计算基态的各类物理量自然重要.对于开边界的情况,toric-code模型的基态$|\Psi_0\rangle$可以写成一个投影波函数的形式:

$$|\Psi_0\rangle = \prod_p \frac{1+\hat{B}_p}{\sqrt{2}}|0\rangle \tag{15.112}$$

这里的连乘需要计入所有plaquett的$\hat{B}_p$而$|0\rangle = \prod_j |\rightarrow\rangle_j$是所有自旋都取$\hat{\sigma}^x = 1$的乘积态.注意到投影算符 $\prod_p \frac{1+\hat{B}_p}{\sqrt{2}}$在任意$\hat{B}_p = -1$时为零,这说明投影算符实际上把所有具有涡旋激发的态都排除掉而只保留没有涡旋的态,这自然与我们对基态的预期相符合.显然,任意$\hat{B}_{p'}$作用到$|\Psi_0\rangle$上有

$$\hat{B}_{p'}|\Psi_0\rangle = \overbrace{\hat{B}_{p'}\frac{1+\hat{B}_{p'}}{\sqrt{2}}}^{=\frac{1+\hat{B}_{p'}}{\sqrt{2}}} \prod_{p\neq p'} \frac{1+\hat{B}_p}{\sqrt{2}}|0\rangle = |\Psi_0\rangle \tag{15.113}$$

而利用$\hat{A}_s$与$\hat{B}_p$对易可得

$$\hat{A}_s|\Psi_0\rangle = \prod_p \frac{1+\hat{B}_p}{\sqrt{2}} \overbrace{\hat{A}_s|0\rangle}^{=|0\rangle} = |\Psi_0\rangle \tag{15.114}$$

上述计算说明$|\Psi_0\rangle$态的$\hat{A}_s, \hat{B}_p$取值都为1,因此投影构造得到的$|\Psi_0\rangle$确实是系统的基态.

当然,我们也可以用更为直观,也就是几何化的方法来理解基态波函数$|\Psi_0\rangle$.具体而言,我们知道基态相当于是对$\hat{\sigma}^x = 1$的态$|0\rangle$作用上不同数量的$\hat{B}_p$后所得状态的叠加.在$\hat{\sigma}^x$的基矢下,如果把自旋向左($\hat{\sigma}^x = -1$)的链接记为一条实线,(图15.18)那么$|0\rangle$态就是没有任何实线的状态.接下来,我们对$|0\rangle$作用上任意一个$\hat{B}_p$,此时在一个plaquett上产生四个$\hat{\sigma}^x = -1$,也就是四条实线形成一个封闭圈(loop).然后我们对$|0\rangle$作用上任意两个$\hat{B}_p$,其效果是得到两个独立的圈或者说一个大的圈(大的圈可以看作是两个线圈的合并).不断作用上$\hat{B}_p$,我们就能得到越来越多或者越来越大的圈,当然最后作用上所有$\hat{B}_p$的效果是得到整个系统大小的圈.因此,我们发现系统的具体实际上可以看成各种可能的闭合圈的构型的叠加,也就是(图15.18)

$$|\Psi_0\rangle = |no-loop\rangle + |1-loop\rangle + |2-loop\rangle + |3-loop\rangle + ... = \sum_{all} |loop\rangle \tag{15.115}$$

注意到每一种具体的圈构型状态的叠加系数都相同,也就是系统基态是圈构型的等权重叠加.[19]例如考虑只包含一个plaquett上的四个自旋的系统,那么基态

[19]用文小刚的说法就是系统的基态就像是面条汤,由各种封闭的面条圈构成.

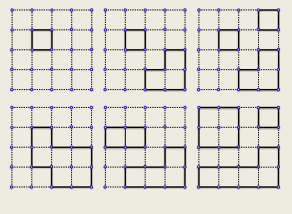


Figure 15.18: Toric-code模型基态的圈图像.自旋$\sigma^x = -1$对应粗黑实线,基态时所有粗黑实线组成各种闭合的圈.

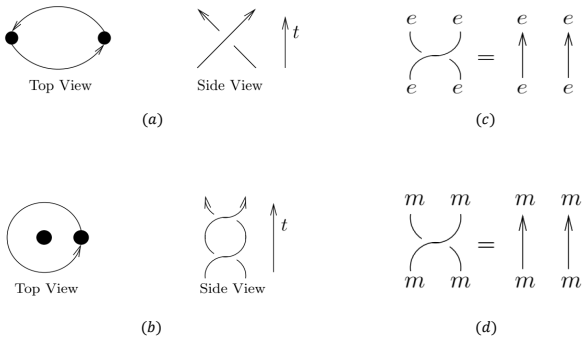


Figure 15.19: (a)粒子交换;(b)粒子绕圈;(c)电荷交换;(d)涡旋交换.

波函数是$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{\hat{B}_p}{\sqrt{2}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\rangle + |\square\rangle$. 这里$|\rangle$代表没有圈而$|\square\rangle$有一个圈.进一步,考虑有两个plaquett也就是由7个自旋构成的体系,其基态波函数是

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1+\hat{B}_p^1}{\sqrt{2}}\frac{1+\hat{B}_p^2}{\sqrt{2}}|0\rangle = \frac{1}{2}\left(|0\rangle + \hat{B}_p^1|0\rangle + \hat{B}_p^2|0\rangle + \hat{B}_p^1\hat{B}_p^2|0\rangle\right) \qquad (15.116)$$

这里$\hat{B}_p^1|0\rangle, \hat{B}_p^2|0\rangle, \hat{B}_p^1\hat{B}_p^2|0\rangle$ 分别表示有一个小圈和大圈的情况.

电荷与涡旋的统计性质

最后,我们看一下电荷与涡旋的统计性质,也就是它们之间交换产生的额外相位是什么.首先,两个粒子交换能用图15.19(a)表示.(a)图左边是粒子交换在空间上的体现而右图则是在时空上的体现.(b)图表示一个粒子绕另一个粒子一圈.对于电荷(涡旋)自身而言,所有$\hat{W}_l^{(e)}(\hat{W}_l^{(m)})$都是对易的,也就是说两个电荷交换产生相位是平凡的0mod(2π),同理涡旋也如此.(图15.19(c)和(d)中用e表示电荷激发而m表示涡旋激发)这样这些粒子对同类粒子而言都是玻色子,但是如果我

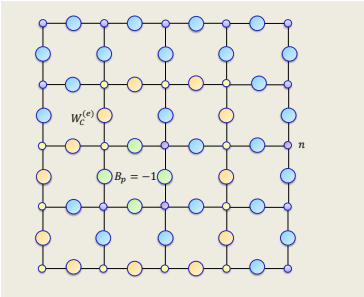


Figure 15.20: Toric-code模型的半子激发:涡旋与电荷的交换统计.

们考虑一个电荷和一个涡旋间的交换就会发现不同.显然,交换电荷与涡旋相当于涡旋不动,然后电荷绕涡旋旋转半圈,我们把交换前的波函数记为$|\xi\rangle$,其包含一个涡旋.电荷绕涡旋旋转一周等价于用一条闭合的string($\hat{W}_{\mathcal{C}}^{(e)}$)包围涡旋所在区域,这样电荷绕涡旋旋转一周的波函数是(图15.20橙色自旋代表电荷激发绕涡旋转一圈的闭合路径)

$$\hat{W}_{\mathcal{C}}^{(e)}|\xi\rangle = \prod_{i\in\mathcal{C}} \hat{B}_p(i)|\xi\rangle = -|\xi\rangle \tag{15.117}$$

上式的最后的-1来自于包围涡旋的回路$\mathcal{C}$所包含的$\hat{B}_p(i)$有且只有一个在涡旋所在位置,其值必为-1.用图形表示是图 15.21(a),这里负号体现了e,m绕一圈后的相位变化.(数学上,$\hat{W}_{\mathcal{C}}^{(e)}$等于闭合回路$\mathcal{C}$ 所包围区域所有$\hat{B}_p$的乘积,这样$\hat{W}_{\mathcal{C}}^{(e)}$作用于$|\xi\rangle$时涡旋所在处的$\hat{B}_p$给出$-1$)这样,我们发现交换电荷与涡旋波函数相位的改变是$\pi/2$,相比较于通常的费米与玻色统计,这里交换相位对应的粒子一般称其满足半子统计(semion statistics)以强调交换产生$\pi/2$ 的相位.更一般地,我们把交换产生相位不等于$0,\pi$的粒子统称为任意子(anyon),这里的半子就是一种任意子.在某些特殊情况下,粒子交换产生的相位是一个矩阵而非一个数,那么此时该种粒子叫做非阿贝尔(non-Abelian)任意子.在toric-code模型中我们发现体系只有阿贝尔任意子(交换相位是个普通的数),为了给非阿贝尔任意子构造一个可解模型,Kitaev 进一步提出了一个自旋各向异性耦合并定义在六角晶格上的自旋交换模型,现在一般叫做'Kitaev honeycomb model',这是下一节讨论的主题.

- toric-code中的涡旋与电荷各自是玻色子,而它们相互之间是半子.

此外,利用图15.21的图形表示,我们容易得到电荷与涡旋的复合体之间交换是费米子,这个复合的费米子记为ϵ.这样我们发现toric-code的激发即有玻色型的e,m也有费米子型的ϵ.那么一个问题是toric-code中到底有多少种粒子呢? 一个数学化的定义是每一类粒子对应一种超选择分支(superselection sector).举例来说,设有a和b两个粒子,如果a能够通过有限区域内算符的作用而变成b,那么我们说a,b是同一类粒子,记作$a\sim b$.

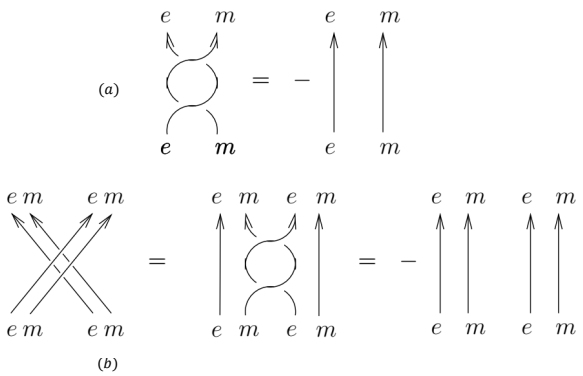


Figure 15.21: (a)电荷与涡旋绕圈;(b)电荷涡旋复合体的交换.

在toric-code模型中,当有两个电荷e存在时,我们以这两个电荷为端点构造一个弦算符$\hat{W}_l^{(m)}$,把这个算符作用到有这两个电荷的状态就可以消灭它们而得到基态(真空).或者说我们可以设想链接两个电荷间的string慢慢变短,也就是两个电荷逐渐靠近,最后使得两个电荷湮灭而回到基态.因此我们说两个电荷的状态等价于没有电荷的真空,用下式表示:

$$e \times e = 1 \tag{15.118}$$

这种关系也称为聚合规则(fusion rule).类似于$e \times e = 1$的分析,$m \times m = 1$是明显的.此外两个费米子逐渐靠近等价于电荷与电荷,涡旋与涡旋彼此接近,这样它们靠近后会彼此湮灭使得体系返回基态,因此有$\epsilon \times \epsilon = 1$.既然一个电荷与涡旋接近时会形成费米子,那么有$e \times m = \epsilon$.

总的来说,在toric-code模型中,我们有四个超选择分支,即1,e,m,ϵ,后面三个分支对应系统的三种粒子.它们总计有如下的聚合规则:

$$\begin{aligned} &e \times e = 1, \quad m \times m = 1, \quad \epsilon \times \epsilon = 1 \\ &e \times m = \epsilon, \quad e \times \epsilon = m, \quad m \times \epsilon = e. \end{aligned} \tag{15.119}$$

数学上,上述聚合规则实际上对应着所谓的算符乘积展开,也就是两个算符接近时可以用其他算符的线性叠加表示($\hat{\phi}_a(x)\hat{\phi}_b(y) = \sum_c C_{abc}(x,y,z)\hat{\phi}_c(z)$,$x \sim y \sim z$).如果$\hat{\phi}_a$分别对应于一类粒子,那么算符乘积展开说明两个粒子接近时的行为可以等价得用其他粒子描述.

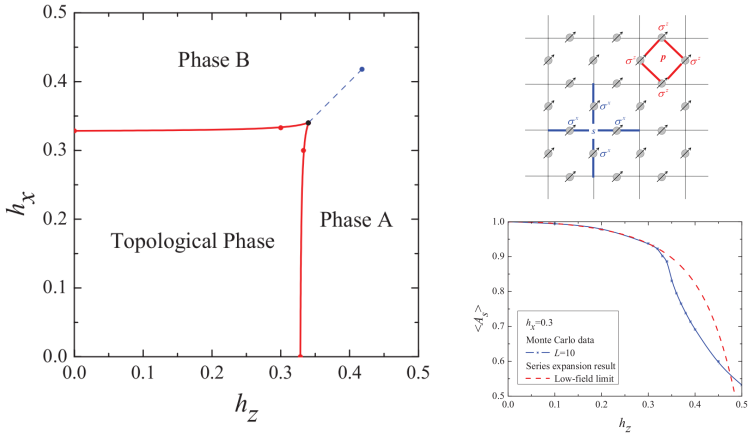


Figure 15.22: Toric-code模型在磁场下的相图.[15]

磁场下的Toric-code模型*

Toric-code模型是精确可解的,这得益于哈密顿量中的每一项都互相对易.如果我们额外考虑磁场的效应,那么可解性就被破坏,相应的模型是:

$$\hat{H}_{tc} = -J_e \sum_i \hat{A}_s(i) - J_m \sum_i \hat{B}_p(i) - h_x \sum_{ij} \hat{\sigma}^x_{ij} - h_z \sum_{ij} \hat{\sigma}^z_{ij}. \tag{15.120}$$

对于这个模型,h_x倾向于产生涡旋激发而h_z则会产生电荷激发.注意到h_z项只包含单个$\hat{\sigma}$而与$\hat{A}_s$不对易,因此有限的h_z破坏原先模型的规范不变性.由于规范不变性的破坏,有限h_x, h_z时$\hat{\sigma}^x_{ij}, \hat{\sigma}^z_{ij}$的基态平均值都不再是零.可以预期$h_x, h_z$足够大时系统的自旋就沿着$x$或$z$方向被极化,此时系统将是平凡的状态.这样我们预期系统将发生相变.

通过蒙特卡洛模拟,级数展开和精确对角化计算,[13, 14, 15]人们发现系统的基态相图是图15.22.可以看到磁场小的时候系统仍然是拓扑态(其物理定性而言由纯toric-code基态近似描述),当磁场很大时是平凡的自旋极化态(图中的Phase A和B).从拓扑态到平凡态之间经历二级相变,而两个平凡态之间是一级相变.

注意到这个相图和Ising规范理论相图(图15.6)的相似性.我们知道h_z很大的A相中有大量电荷出现,用之前规范场的语言来说就是系统处于Higgs相而h_x很大的B相有很多涡旋出现,可称之为禁闭态.

量子纠缠与拓扑纠缠熵:量子革命?

让我们暂时偏离本章讨论的主线内容.在传统的多体物理或者凝聚态物理理论研究中,物质态通常以对称性和相关的序参量加以表征.当系统的状态(波函数)在参数空间具有非平庸结构时,我们也会采用各类拓扑不变量来描写系统状态.但是,如果系统并不具有明显的序参量和拓扑不变量,(或者两者皆不足以区分不同的物质态)那么就需要一类新的刻画系统状态的手段,量子纠缠就是一类重要的工具.

假设我们研究一个量子多体系统,并把它在空间上划分为两个子系统,即A以及B,那么系统的任意一个状态可以写为

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^{d_A}\sum_{j=1}^{d_B} c_{ij}|\psi_i^A\rangle \otimes |\psi_j^B\rangle \equiv \sum_{i,j} c_{ij}|\psi_i^A\rangle|\psi_j^B\rangle \tag{15.121}$$

这里$|\psi_i^A\rangle, |\psi_j^B\rangle$分别是子系统$A, B$的基矢态,通常要求其满足正交归一性.$d_A, d_B$是相应的Hilbert空间维度或者基矢个数.

这样,描述系统状态的密度矩阵是

$$\hat{\rho}_{AB} = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| \tag{15.122}$$

与熟悉的热平衡密度矩阵$\hat{\rho} = \frac{1}{\mathcal{Z}}e^{-\beta\hat{H}} = \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_n e^{-\beta E_n}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$相比,我们称$|\psi_{AB}\rangle$是纯态,$\hat{\rho}_{AB}$是纯态密度矩阵而$\hat{\rho}$描述混合态(热态).

当我们仅对子系统A或B感兴趣时,可以通过对$\hat{\rho}_{AB}$求迹得到描述子系统的约化密度矩阵,例如

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B\hat{\rho}_{AB}, \quad \hat{\rho}_B = \mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_{AB}. \tag{15.123}$$

对于$\hat{\rho}_A$,我们有

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A &= \sum_k \langle\psi_k^B|\hat{\rho}_{AB}|\psi_k^B\rangle = \sum_k \langle\psi_k^B|\left(\sum_{i,j} c_{ij}|\psi_i^A\rangle|\psi_j^B\rangle\right)\left(\sum_{m,n} c_{mn}^*\langle\psi_m^A|\langle\psi_n^B|\right)|\psi_k^B\rangle \\ &= \sum_{ijm} c_{ij}c_{mj}^*|\psi_i^A\rangle\langle\psi_m^A| = \sum_{im}\rho_{im}^A|\psi_i^A\rangle\langle\psi_m^A|,\end{aligned} \tag{15.124}$$

这样我们发现约化密度矩阵$\hat{\rho}_A$的对角矩阵元是$\rho_{ii}^A = \sum_j c_{ij}c_{ij}^* = \sum_j |c_{ij}|^2$而非对角元是$\rho_{im}^A = \sum_j c_{ij}c_{mj}^*$.对角化矩阵$\hat{\rho}_A$就可以得到$d_A$个密度矩阵的本征值. 同理可得子系统$B$的约化密度矩阵$\rho_B$.当然,$\hat{\rho}_A$用其本征态$\{\varphi_j^B\}$也可以表示为

$$\hat{\rho}_B = \sum_{j=1}^{d_B} c_j|\varphi_j^B\rangle\langle\varphi_j^B| \tag{15.125}$$

这里$c_j = \rho_{jj}^A$为约化密度矩阵的本征值,满足$c_j \geqslant 0, \sum_j c_j = 1$,并且其物理意义是系统取某个本征态$|\varphi_j^A\rangle$的概率.

另一方面,通过Schmidt分解可以把$|\psi_{AB}\rangle$改写为以下形式

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{j=1}^{n_s} \sqrt{\lambda_j}|\varphi_j^A\rangle|\varphi_j^B\rangle, \tag{15.126}$$

这里$n_s = \min(d_A, d_B)$,λ_j是Schmidt数,满足$\lambda_j > 0, \sum_j \lambda_j = 1$.$\{\varphi_j^A\}$是子系统$A$的本征态.因此,$A$的约化密度矩阵容易求得是

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B\hat{\rho}_{AB} = \sum_k \langle\varphi_k^B| \left(\sum_{j=1}^{n_s} \sqrt{\lambda_j}|\varphi_j^A\rangle|\varphi_j^B\rangle\right) \left(\sum_{i=1}^{n_s} \sqrt{\lambda_i}\langle\varphi_i^A|\langle\varphi_i^B|\right) |\varphi_k^B\rangle = \sum_{j=1}^{n_s} \lambda_j|\varphi_j^A\rangle\langle\varphi_j^A\rangle. \tag{15.127}$$

可以发现,λ_j实际上代表约化密度矩阵非零本征值,其数目表示非零元素的数目.

通常,A, B子系统之间的量子纠缠熵定义为约化密度矩阵的von Neumann熵,即

$$\boxed{S_{EE} = S_A = -\mathrm{Tr}_A(\hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A) = -\sum_{j=1}^{n_s} \lambda_j \ln \lambda_j.} \tag{15.128}$$

可以证明子系统B的von Neumann熵满足$S_B = S_A$,即纠缠熵对两个子系统是完全相同的,在物理上表明纠缠熵是子系统之间相互作用的产物.

可以看到,当且仅当$n_s = 1$,即$|\psi_{AB}\rangle = |\varphi^A\rangle|\varphi^B\rangle$时,纠缠熵$S_{EE} = 0$.而当$n_s > 1$时,$S_{EE} > 0$.

- $n_s = 1$时对应的$|\psi_{AB}\rangle = |\varphi^A\rangle|\varphi^B\rangle$称为直积态,即由一些列态的直积构成.
- $n_s > 1$对应的态$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{j=1}^{n_s} \sqrt{\lambda_j}|\varphi_j^A\rangle|\varphi_j^B\rangle$ 称为纠缠态.
- 直积态的纠缠熵为零,纠缠态具有非零的纠缠熵.
- 这里仅考虑双切分(bipartity)下的纠缠熵和纠缠态,多重切分下的情况也是类似的.

为明确起见,考虑两个自旋$S = 1/2$构成的系统,以每个自旋z方向取向为基可得系统的四个本征态,$|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$,$|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$,$|1,0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$,$|0,0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$. 可以看到,$|1,1\rangle, |1,-1\rangle$是直积态,而$|1,0\rangle, |0,0\rangle$是纠缠态.对于后两者,我们发现$A$自旋的约化密度矩阵是

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}(|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |\uparrow\rangle\langle\uparrow|) \tag{15.129}$$

这样两自旋之间的纠缠熵是

$$S_{EE} = -\mathrm{Tr}\hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A = -\left(\frac{1}{2}\ln\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\ln\frac{1}{2}\right) = \ln 2. \tag{15.130}$$

$S_{EE} = \ln 2$说明两自旋纠缠态的纠缠熵贡献是$\ln 2$,其意义是代表两个纠缠的量子态.

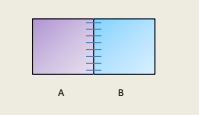


Figure 15.23: 纠缠熵的面积律起源于子系统之间的边界大小切割了同等数量的局域纠缠对,因而纠缠熵正比于相应的面积.

另一类常用的纠缠熵是Renyi纠缠熵,其定义为

$$\boxed{S_{EE}^{\alpha}=\frac{1}{1-\alpha}\ln[\mathrm{Tr}\hat{\rho}_A^{\alpha}],\qquad \alpha=2,3,4...} \tag{15.131}$$

其中α称为Renyi指标,当其取值为2时对应$S_{EE}^2=-\ln[\mathrm{Tr}\hat{\rho}_A^2]=-\ln\sum_{j=1}^{n_s}\lambda_j^2$.

纠缠熵的面积律

在上一节,我们定义了二分系统的量子纠缠熵,那么对于一个一般性的量子多体系统,其纠缠熵具有什么样的特性呢?

- 一个有能隙的局域量子多体系统的纠缠熵满足面积律,即$S_{EE}\sim L^{d-1}$,L是二分边界的尺度.[20]

这就是所谓的纠缠熵的面积律.注意到面积律要求系统具有能隙并且哈密顿量具有局域性,也就是说系统不能有长程相互作用. 定性而言,对于一个有能隙的局域系统,其不同部分之间的纠缠都是短程的,在最简单的近似下可以认为只有邻近的部分之间才有纠缠.相邻格点间的纠缠类似于两自旋系统的纠缠形式,称为纠缠对.当我们把系统划分为A,B 两个部分时,A,B子系统之间的纠缠主要由边界附近的纠缠决定.纠缠的大小正比于边界切割过多少纠缠对,因而纠缠熵正比于相应边界的面积.

- 当系统能隙消失或者具有长程相互作用时,子系统边界所切割的纠缠对数目并不确定,其依赖于纠缠对在空间的距离,因此面积律在这种情况下失效.

作为满足面积律的例子,我们考虑描述一维自旋$S=1$系统的Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki(AKLT)模型,

$$H_{AKLT}=\sum_j\left(\vec{S}_j\cdot\vec{S}_{j+1}+\frac{1}{3}(\vec{S}_j\cdot\vec{S}_{j+1})^2\right). \tag{15.132}$$

[20]关于纠缠熵面积律的讨论可以参考综述论文[Eisert,Cramer,Plenio,Colloquium: Area laws for the entanglement entropy,Rev.Mod.Phys. **82**,277(2010)]

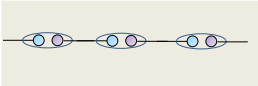


Figure 15.24: 自旋$S=1$的AKLT模型的价键型基态示意图.

其基态可由图15.24所示的价键图像加以理解,即把每一个格点的$S=1$自旋分解为两个$S=1/2$自旋,然后我们把相邻格点的$S=1/2$自旋配对为自旋单重态(纠缠对),这样就构成了系统的基态,称为AKLT 态. 在基态下,我们把系统切分为A,B两部分,由于切分处仅涉及一个自旋单重态,那么系统此时的纠缠熵应该正比于这个纠缠对的纠缠熵,即$S_{EE}\sim ln2$.注意到一维系统切分时的边界实际上退化为一个点,那么面积律就变成常数依赖,这与$S_{EE}\sim ln2$是相符合的,也就是说AKLT态满足纠缠熵的面积律.

- AKLT态推广到$S=2$的正方晶格系统给出$S_{EE}\sim L\ln 2$ 的面积律结果.

作为这一部分的小结,我们列出遵循面积律的一些典型系统:

1. d维的谐振子系统;
2. 自由或相互作用玻色子系统的基态;[21]
3. 非临界的自旋系统(可以有其他常数修正).

耦合谐振子与自由无质量玻色场的纠缠熵

这里,我们基于Srednicki的原始论文简要介绍耦合谐振子体系和自由无质量玻色场的纠缠熵计算.[22]首先考虑两个耦合的一维谐振子,为简单起见假设质量都为1,体系哈密顿量是

$$H=\frac{p_1^2+k_0x_1^2}{2}+\frac{p_2^2+k_0x_2^2}{2}+\frac{k_1(x_1-x_2)^2}{2} \tag{15.133}$$

可以看到两个谐振子的振动频率都是$\sqrt{k_0}$,它们通过k_1耦合.引入质心坐标和相对坐标$x_\pm=\frac{1}{2}(x_1\pm x_2)$,体系退耦合为两个独立运动的谐振子,

$$H=\frac{p_+^2+k_0x_+^2}{2}+\frac{p_-^2+(k_0+2k_1)x_-^2}{2}\equiv\frac{p_+^2+\omega_+^2x_+^2}{2}+\frac{p_-^2+\omega_-^2x_-^2}{2}. \tag{15.134}$$

[21] 自由玻色场和Dirac场纠缠熵的计算可参考综述文章[Casini,Huerta,Entanglement entropy in free quantum field theory,J.Phys.A:Math.Theor. **42**,504007(2009)]

[22] [Srednicki,Entropy and Area,Phys.Rev.Lett. **71**,666(1993)]

因此,系统的本征态是这两个独立谐振子波函数的乘积.既然我们最为关心的是基态的纠缠熵,那么明确的基态波函数是必须的,

$$\Psi_0(x_1,x_2)=\Psi_0(x_+,x_-)=\psi_0(x_+)\psi_0(x_-)=\pi^{-1/2}(\omega_+\omega_-)^{1/4}e^{-\frac{\omega_+x_+^2+\omega_-x_-^2}{2}} \tag{15.135}$$

这里$\psi_0(x)=\pi^{-1/4}\omega^{1/4}e^{-\omega x^2/2}$是单位质量谐振子的基态波函数.这样,耦合谐振子体系的基态密度矩阵为$\hat{\rho}=|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$,其在坐标表象下的矩阵元是

$$\rho(x_1,x_2;x_1',x_2')=\langle x_1,x_2|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|x_1',x_2'\rangle=\Psi_0(x_1,x_2)\Psi_0^*(x_1',x_2'). \tag{15.136}$$

现在,假设要得到第二个粒子的约化密度矩阵,那么我们需要积掉第一个粒子的自由度,也就是在$\rho(x_1,x_2;x_1',x_2')$中取$x_1'=x_1$并对x_1积分,

$$\rho(x_2;x_2')=\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\Psi_0(x_1,x_2)\Psi_0^*(x_1,x_2')=\pi^{-1/2}(\gamma-\beta)^{1/2}e^{-\gamma\frac{x_2^2+x_2'^2}{2}+\beta x_2x_2'} \tag{15.137}$$

$\beta=\frac{(\omega_+-\omega_-)^2}{4(\omega_++\omega_-)},\gamma-\beta=\frac{2\omega_+\omega_-}{\omega_++\omega_-}$. 因而$\rho(x_2;x_2')$就是第二个粒子在坐标空间的约化密度矩阵(元).进一步,我们需要$\rho(x_2;x_2')$的本征值以求得纠缠熵$S_{EE}=-\sum_n\lambda_n\ln\lambda_n$,如果把$x_2,x_2'$分别看作是约化密度矩阵的行和列指标,那么矩阵本征值方程$A_{ij}f_j=\lambda f_i$等价于下面的积分方程:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx'\rho(x;x')f_n(x')=\lambda_nf_n(x) \tag{15.138}$$

这里λ_n是第n个本征值,$f_n(x)$是对应的本征函数.可以验证,如下的本征值和本征函数满足上述方程,

$$\begin{aligned}&\lambda_n=(1-\xi)\xi^n,\quad n=0,1,2...\\&f_n(x)=H_n(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha\frac{x^2}{2}}\end{aligned} \tag{15.139}$$

$\alpha=(\gamma^2-\beta^2)^{1/2}=(\omega_+\omega_-)^{1/2},\xi=\frac{\beta}{\gamma+\alpha}$.事实上,如果我们设$\lambda_n=\frac{e^{-E_n/T}}{\sum_n e^{-E_n/T}}$,也就是约化密度矩阵等价于一个热力学平衡态的密度矩阵,那么我们发现对应的体系是一个以α为频率,$T=\alpha/\ln(1/\xi)$为温度的谐振子($E_n=\alpha(n+1/2)$).这样纠缠熵是$S_{EE}=-\sum_n(1-\xi)\xi^n\ln(1-\xi)\xi^n=-\ln(1-\xi)-\frac{\xi\ln\xi}{1-\xi}$.

- 在耦合谐振子的基态观察其中一个谐振子,那么这个谐振子相当于处在等效的热平衡态.[23]

接下来,考虑N个耦合的一维谐振子$H=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N p_i^2+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^N x_iK_{ij}x_j$,类似两个耦合谐振子的情况,其基态为

$$\Psi_0(x_1...x_N)=\pi^{-N/4}(\det\sqrt{K})e^{-\frac{1}{2}x\cdot K\cdot x} \tag{15.140}$$

[23]这可以看作是Srednicki提出的本征态热化假设(eigenstate thermalization hypothesis,ETH)的简单例子,目前ETH是量子统计力学研究的重要课题之一.[Srednicki,Phys.Rev.E **50**,888(1994)]

积掉前n个粒子自由度可得$n+1$到N个粒子的约化密度矩阵:

$$\rho(x_{n+1}...x_N;x'_{n+1}...x'_N)=\int_{-\infty}^{\infty}\Pi_{j=1}^{n}dx_j\Psi_0(x_1...x_n,x_{n+1}...x_N)\Psi_0^*(x_1...x_n,x'_{n+1}...x'_N) \tag{15.141}$$

类似于两谐振子,上述约化密度矩阵可化为

$$\rho(z_{n+1}...z_N;z'_{n+1}...z'_N)\sim\prod_{j=n+1}^{n}e^{-\frac{z_j^2+z_j'^2}{2}+\beta'_jz_jz'_j} \tag{15.142}$$

这里z_j是正交变换后的坐标.注意到上述形式与两个耦合谐振子的相似性,因此体系的纠缠熵是$N-n$个独立贡献的叠加,即$S_{EE}=-\sum_{j=n+1}^{N}(\ln(1-\xi_j)+\frac{\xi_j\ln\xi_j}{1-\xi_j})$.

最后,让我们考虑三维自由无质量玻色场(标量场),其哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2}\int d^3x\left(\Pi^2(x)+(\nabla\varphi(x))^2\right) \tag{15.143}$$

然后选用球坐标并用球谐函数展开玻色场$\varphi(x)$和它的正则动量$\Pi(x)$,其展开系数为

$$\begin{aligned}\varphi_{lm}(r)&=r\int d\Omega Z_{lm}(\theta,\phi)\varphi(x)\\ \Pi_{lm}(r)&=r\int d\Omega Z_{lm}(\theta,\phi)\Pi(x)\end{aligned} \tag{15.144}$$

这里$Z_{lm}(\theta,\phi)$是实球谐函数,

$$\begin{aligned}Z_{l0}(\theta,\phi)&=Y_{l0}(\theta,\phi)\\ Z_{lm}(\theta,\phi)&=\sqrt{2}\mathrm{Re}Y_{lm}(\theta,\phi)\quad m>0\\ Z_{lm}(\theta,\phi)&=\sqrt{2}\mathrm{Im}Y_{lm}(\theta,\phi)\quad m<0\end{aligned} \tag{15.145}$$

这样展开系数满足对易关系$[\varphi_{lm}(r),\Pi_{l'm'}(r')]=i\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta(r-r')$,这样哈密顿量可写成

$$H=\sum_{lm}H_{lm}=\sum_{lm}\frac{1}{2}\int_0^{\infty}dr\left(\Pi_{lm}^2(r)+r^2\left(\frac{\partial}{\partial r}\frac{\varphi_{lm}(r)}{r}\right)^2+\frac{l(l+1)}{r^2}\varphi_{lm}^2(r)\right). \tag{15.146}$$

当然,定义在连续空间的量子场在单位体积内自然有无穷多自由度,因此如果直接计算上述体系的纠缠熵必然会出现发散行为.为了避免计算过程中明显出现发散,让我们假定体系定义在球形的晶格上,晶格间距为a而半径为$L=(N+1)a$且要求$\varphi_{lm}(r),\Pi_{lm}(r)$在$r\geqslant L$时为零.这样,上述哈密顿量转化为离散形式,$(\varphi_{lm}(r),\Pi_{lm}(r)\to\frac{\varphi_{lm,j}}{\sqrt{a}},\frac{\Pi_{lm,j}}{\sqrt{a}})$

$$H_{lm}=\frac{1}{2a}\sum_{j=1}^{N}\left(\Pi_{lm,j}^2+(j+1/2)^2\left(\frac{\varphi_{lm,j}}{j}-\frac{\varphi_{lm,j+1}}{j+1}\right)^2+\frac{l(l+1)}{j^2}\varphi_{lm,j}^2\right). \tag{15.147}$$

这样$[\varphi_{lm,j},\Pi_{l'm',j'}]=i\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{jj'}$.可以看到$H_{lm}$相当于$N$个耦合的谐振子,因此体系的基态是每个$H_{lm}$基态的乘积.假设我们积掉前$n$个谐振子,那么$H_{lm}$基态的纠缠熵记为$S_{EE}^{lm}(n,N)$,系统的总纠缠熵就是对所有$l,m$求和,

$$S_{EE}(n,N)=\sum_{lm}S_{EE}^{lm}(n,N). \tag{15.148}$$

当然注意到H_{lm}实际上不依赖m的取值(体系具有旋转对称性),因此$S_{EE}^{lm}(n,N)=S_{EE}^{l}(n,N)$,这样对$m$的求和就是$2l+1$(从$m=-l$求到$m=l$),即 $S_{EE}(n,N)=\sum_l(2l+1)S_{EE}^{l}(n,N)$.当$l\gg N$时,

$$\begin{aligned}&S_{EE}^{l}(n,N)=\xi_l(n)(1-\xi_l(n))\\&\xi_l(n)=\frac{n(n+1)(2n+1)^2}{64l^2(l+1)^2}+\mathcal{O}(l^{-6})\end{aligned} \tag{15.149}$$

若定义$R=(n+1/2)a$,那么数值求和上式的结果可拟合为

$$S_{EE}=0.30\frac{1}{a^2}R^2,\qquad n\leq N/2 \tag{15.150}$$

注意到半径为R的球体其表面积为$\mathcal{A}=4\pi R^2$,因此三维自由无质量玻色场的纠缠熵确实满足面积律$S_{EE}\sim\mathcal{A}$.[24]

- 我们看到,在一个半径为L的球体内积掉半径为R的小球体区域的(自由无质量玻色场)自由度后,所获得的纠缠熵正比于大小球体区域的接触面积$\mathcal{A}$,反比于紫外截断尺度a的平方.

超越面积律

并不是所有的量子多体系统都满足面积律,例如

1. 处于临界点的系统;
2. 拓扑有序态(拓扑纠缠熵);
3. 有费米面的费米子系统(对数修正).[25]

对于临界点时的系统,比较典型的是一维共形场理论所描述的情况.假设系统大小为L,所考虑的子系统大小为l,那么对此子系统的纠缠熵是 [26]

$$\boxed{S_{EE}=\frac{c}{3}\ln\left(\frac{L}{\pi a}\sin\frac{\pi l}{L}\right)+...} \tag{15.151}$$

[24]类似的,二维自由无质量玻色场的纠缠熵也满足面积律$S_{EE}\sim R/a$.

[25]$S_{EE}\sim L^{d-1}\ln L$[Wolf,Violation of the Entropic Area Law for Fermions,Phys.Rev.Lett. **96**,010404(2006);Gioev,Klich,Entanglement Entropy of Fermions in Any Dimension and the Widom Conjecture,Phys.Rev.Lett. **96**,100503(2006)]

[26][Holzhey,Larsen,Wilczek,Geometric and renormalized entropy in conformal field theory,Nucl.Phys.B **424**,443(1994);Calabrese,Cardy,Entanglement entropy and quantum field theory,J.Stat.Mech.P06002(2004)]

这里c是中心荷,a是晶格尺度.对复费米子有$c=1$,Majorana费米子有$c=\frac{1}{2}$.当$l \ll L$时,$S_{EE} \simeq \frac{c}{3}\ln\frac{l}{a} \sim \ln l$,也就是纠缠熵正比于子系统尺寸的对数,偏离面积律的形式.

- 符合以上结果的最典型的例子是处于临界点的一维量子Ising模型.[27]
- 与一维共形场论不同,高维共形场论的纠缠熵不显示对数修正而满足面积律.[28]

对于有能隙的拓扑有序态,(例如分数量子Hall态,toric-code模型基态)Kitaev,Preskill和Levin,Wen指出其纠缠熵还包含一个普适项,即拓扑纠缠熵($\gamma_{topo}>0$),[29]

$$\boxed{S_{EE}=\alpha L^{d-1}-\gamma_{topo}.} \tag{15.152}$$

这里α是非普适常数.注意到拓扑纠缠熵对于总纠缠熵是一个负贡献,这是由于拓扑态是高度有序的,因此降低熵的大小.轮胎面上退禁闭Z_2规范场其拓扑纠缠熵是$\ln 2$,同样流形上的Laughlin-$1/m$态具有$\gamma_{topo}=\ln\sqrt{m}$,最后Moore-Read态是$\gamma_{topo}=\ln(2\sqrt{2})$.

- 对称破缺态也会有非零的拓扑纠缠熵,例如一维横场Ising模型的磁有序态.

有费米面的费米子系统,例如d维空间的自由费米气体,假设我们把体系划分为A,B两个子系统,子系统A是尺度为L^d的超立方体,超立方体的边界记为$\partial\Omega$,其法向单位矢量是$\vec{n}_x$.另一方面,自由费米气体的费米面记为$\partial\Gamma$,其法向单位矢量为$\vec{n}_p$,那么体系的纠缠熵是 [30]

$$S_{EE}\sim\frac{L^{d-1}\ln L}{(2\pi)^{d-1}}\frac{1}{12}\int_{\partial\Omega}dS_x\int_{\partial\Gamma}dS_p|\vec{n}_x\cdot\vec{n}_p| \tag{15.153}$$

物理上,上述结果可以理解为费米面上的每个点都等价于一个一维手性费米子,这些费米子本身的纠缠熵是正比于费米子部分的尺度,这里用L估计,因此它们贡献$\ln L$, 同时,体系一般而言纠缠熵也具有面积律形式L^{d-1},因此总的纠缠熵便是$L^{d-1}\ln L$.[31]

---

[27] [Vidal,Latorre,Rico,Kitaev,Entanglement in Quantum Critical Phenomena,Phys.Rev.Lett.**90**,227902(2003);Peschel,Calculation of reduced density matrices from correlation functions,J.Phys.A **36**,L205(2003);Roy,Saleur,Entanglement Entropy in the Ising Model with Topological Defects,Phys.Rev.Lett.**128**,090603(2022)]

[28] 例如全息对偶计算的共形场论纠缠熵[Nishioka,Ryu,Takayanagi,Holographic entanglement entropy: an overview,J.Phys.A:Math.Theor. **42**,504008(2009)]

[29] [Kitaev,Preskill,Topological Entanglement Entropy,Phys.Rev.Lett.**96**,110404(2006);Levin,Wen,Detecting Topological Order in a Ground State Wave Function,Phys.Rev.Lett.**96**,110405(2006)]

[30] [Gioev,Klich,Entanglement Entropy of Fermions in Any Dimension and the Widom Conjecture,Phys.Rev.Lett. **96**,100503(2006)]

[31] 更详细的物理分析可以参考[Swingle,Entanglement Entropy and the Fermi Surface,Phys.Rev.Lett. **105**,050502(2010)]

- 关于晶格费米子的严格计算也证实了费米面存在时对面积律的对数修正.[32]

对于晶格费米子模型$\hat{H}=\sum_{ij}t_{ij}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j$,其单粒子密度矩阵定义为$\langle\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j\rangle$.相应的单粒子约化密度矩阵为$C_{ij}=\langle\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j\rangle(i,j=1,2...L,\in A)$,这样利用矩阵$C$和单位矩阵$I$可得对角矩阵$Q$:

$$\left(C-\frac{I}{2}\right)^2=PQP \tag{15.154}$$

这里

$$Q=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}\tanh^2\frac{\varepsilon_1}{2} & 0 & ... & 0\\ 0 & \tanh^2\frac{\varepsilon_2}{2} & ... & 0\\ 0 & 0 & ... & 0\\ 0 & 0 & ... & \tanh^2\frac{\varepsilon_L}{2}\end{pmatrix} \tag{15.155}$$

这样纠缠熵就是

$$S_{EE}=\sum_{l=1}^{L}\left(\ln(1+e^{-\varepsilon_l})+\frac{\varepsilon_l}{\varepsilon_l+1}\right). \tag{15.156}$$

动量空间的纠缠*

一般情况下,人们讨论的纠缠总是指实空间的纠缠,也就是说把体系在实空间分成若干份,然后考虑不同空间位置体系自由度之间的纠缠关系.但是,原则上我们可以在任意参数空间定义纠缠,例如动量空间或者能量空间.在这一小节,我们考虑动量空间的纠缠.

在前面的讨论中,我们知道即使是无相互作用的自由费米子系统在实空间中费米子之间也有纠缠.这当然源自费米子的单粒子波函数在实空间是扩展的,这样空间切分为不同区域时自然会出现不同区域自由度的纠缠.现在,让我们考虑自由费米子系统的基态波函数$|\Psi_0\rangle=\prod_{|k|<k_F}\hat{c}_k^\dagger|0\rangle$,现在不同动量的费米子彼此退耦,因此如果我们在动量空间中选择一个闭合的区域为A,那么A所包含的自由度与剩下区域(记为B)的自由度之间没有任何耦合,这样积掉B的自由度后A仍然时纯态,因此其纠缠熵必为零.

- (具有平移不变的)自由费米气体在动量空间的纠缠熵为零.

当然,如果费米子之间存在相互作用,那么一般而言会导致不同动量态的散射,这样A,B区域间不同动量费米子的纠缠熵非零.假设我们考虑动量为k的费米子在动量空间的约化密度矩阵,由于k态的Hilbert空间是二维的,也就是$|0\rangle$(k态没有费米子)和$|1\rangle$(k态有费米子),因此其约化密度矩阵为

$$\hat{\rho}_A(k)=\alpha_k|0\rangle\langle 0|+\beta_k|1\rangle\langle 1| \tag{15.157}$$

[32]具体可用参考文献[Li et al.,Scaling behavior of entanglement in two- and three-dimensional free-fermion systems,Phys.Rev.B **74**,073103(2006)]

同时我们知道约化密度矩阵本征值都是非零的实数且和为1,因此$\alpha_k+\beta_k=1$.另一方面,我们可以把费米子的基态占据数表示为

$$\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\rangle=\mathrm{Tr}[\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\hat{\rho}_A(k)]=\beta_k \tag{15.158}$$

这样密度矩阵本征值β_k可以用费米子数的期望值$n_k=\langle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k\rangle$表示,而$\alpha_k=1-n_k$.这样我们发现

$$\hat{\rho}_A(k)=(1-n_k)|0\rangle\langle 0|+n_k|1\rangle\langle 1| \tag{15.159}$$

我们发现k态费米子的纠缠熵是$S_{EE}(k)=-n_k\ln n_k-(1-n_k)\ln(1-n_k)$.像这样仅考虑一个模式的纠缠熵称为单模纠缠熵,它反映的是这个模式与体系其他所有自由度的纠缠.对于费米液体,我们知道其费米子占据数在费米动量k_F处的越变为Z_{k_F}(准粒子权重),这样$k\to k_F$时$n_k=\frac{1\pm Z_{k_F}}{2}$(+对应$k<k_F$,−对应$k>k_F$).如果我们考虑二阶Renyi纠缠熵$S_{EE}^2(k)=-\ln\mathrm{Tr}\rho_A^2(k)$,那么有

$$S_{EE}^2(k\to k_F)=\ln\frac{2}{1+Z_{k_F}^2} \tag{15.160}$$

这样我们可以预期如果区域A是费米面附近的小薄层(宽度为δk),那么它的二阶Renyi纠缠熵可近似为单模纠缠熵乘以薄层内的状态总数,[33](图15.25)也就是

$$S_{EE}^2(A_{\delta k})\simeq\sum_{k\in\delta k}S_{EE}^2(k\to k_F)=\frac{V}{(2\pi)^3}\cdot V(A_{\delta k})\cdot\ln\frac{2}{1+Z_{k_F}^2} \tag{15.161}$$

这里$\frac{V}{(2\pi)^3}$是动量空间的态密度,$V(A_{\delta_k})$是薄层在动量空间占据的体积.注意到明显的体积依赖,因此有:

- 费米液体的动量空间纠缠熵正比于所考虑区域在动量空间的体积.

类似的,如果考虑BCS超导态$|\Psi_{BCS}\rangle=\prod_k(\mu_k+\nu_k\hat{c}_{k\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger)|0\rangle$, 注意到只有Cooper对内部的电子才有关联,因此直接对其他动量和自旋模式求迹后得到的动量k自旋↑电子的约化密度矩阵为$\hat{\rho}_{k\uparrow}=|\mu_k|^2|0\rangle\langle 0|+|\nu_k|^2|1\rangle\langle 1|$.这样在费米面附近的二阶Renyi纠缠熵是$\ln 2$,($|\mu_{k=k_F}|^2=|\mu_{k=k_F}|^2=1/2$)这说明一个Cooper对确实是一对纠缠态.

除此之外,人们也研究了其他系统的动量空间纠缠熵:

- 一维自旋链;[34]
- 无序电子体系;[35]

[33]这个结果可以用路径积分形式来证明,具体细节可参考文献[Flynn et al.,Momentum space entanglement of interacting fermions,arXiv:2203.08154]

[34][Lundgren et al.,Momentum-Space Entanglement Spectrum of Bosons and Fermions with Interactions,Phys.Rev.Lett. **113**,256404(2014)]

[35][Mondragon-Shem et al.,Characterizing Disordered Fermion Systems Using the Momentum-Space Entanglement Spectrum,Phys.Rev.Lett. **110**,046806(2013)]

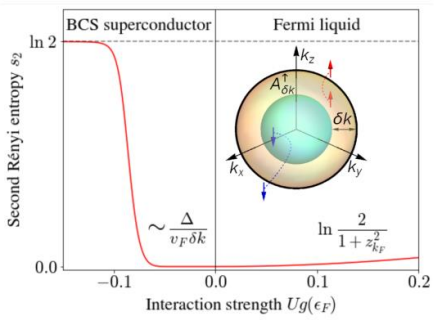


Figure 15.25: BCS超导态和费米液体态的二阶Renyi纠缠熵(单位体积).

- 一维和二维Hubbard模型;[36]
- 量子场系统.[37]

全息对偶与全息纠缠熵*

所谓的全息纠缠熵,指的是用全息对偶方法计算出来的纠缠熵.[38]在这里,全息对偶主要是指反德西特/共形场论对应(anti-de Sitter/conformal field theory correspondence,简称AdS/CFT),即$d+2$维的反德西特空间的量子引力(AdS_{d+2})等价于$d+1$维时空的共形场论(CFT_{d+1}).需要说明,由于AdS/CFT还未被证明,人们有时也把它叫做Maldacena猜想,[39]这是因为这一对偶最早由阿根廷裔理论家Juan Maldacena提出.[40]

更一般的,全息对偶或者说全息原理声明高维引力系统对偶于引力系统边界上的场论系统.这类对偶的重要特点是两类表面上不同的理论(时空维度都不同)是强弱对偶的,也就是说弱耦合的引力系统等价于强耦合的场论系统,(反之亦然)这样我们就可以通过研究弱耦合引力(计算修改的Einstein引力理论的方程)来得到一般解析方法难以研究的强耦合量子场论系统的零温和有限温度以及

[36][Ehlers et al.,Entanglement structure of the Hubbard model in momentum space,Phys.Rev.B **92**,235116 (2015)]

[37]对于量子场可以建立约化密度矩阵与Wilson有效作用量的直接联系,并且弱相互作用体系可用微扰论计算动量空间纠缠熵[Balasubramanian et al.,Momentum-space entanglement and renormalization in quantum field theory,Phys.Rev.D **86**,045014(2012);Hsu et al.,Momentum-space entanglement for interacting fermions at finite density,JHEP **11**,121(2013)]

[38]关于全息纠缠熵可以参考综述文章[Nishioka,Ryu,Takayanagi,Holographic entanglement entropy: an overview,J.Phys.A:Math.Theor. **42**,504008(2009)]

[39]研究得最清楚的是四维时空$\mathcal{N}=4$超对称$SU(N_c)$Yang-Millis规范理论与$\mathrm{AdS}_5 \times S^5$时空type II-B弦论的对偶

[40][Maldacena,The Large N limit of superconformal field theories and supergravity,Adv.Theor.Math.Phys. **2**,231(1998)]

非平衡性质.当然,研究有限温度量子场论体系需要我们考虑AdS时空的黑洞,因为黑洞有温度(源自Hawking辐射).

提到黑洞,我们知道它有热力学熵,并且熵正比于黑洞视界的面积,也就是熵与体系的面积成正比.注意到一般热力学体系的熵正比于它的体积,因此如果带有黑洞的引力系统能够等价于通常的场论系统,那么两者的时空维度自然是引力比场论高一维,这就解释了全息原理中对偶两边时空维度的差异.

受到Maldacena工作的启发,Witten,Gubser,Klebanov和Polyakov明确指出了AdS/CFT的对应关系:[41]

- CFT的配分函数与AdS时空引力体系的配分函数相等,即$\mathcal{Z}_{CFT}=\mathcal{Z}_{AdS}$.

同时,CFT的关联函数可通过对AdS中由物质场(非引力场)所激发的扰动求导数而获得.一般来说,AdS时空的引力需要用弦论进行完整处理以考虑对经典引力的量子修正.尽管如此,在CFT的强耦合极限,引力这边的量子修正是可忽略的,因此我们可以用超引力描述AdS时空.

- AdS/CFT对应原则上可用于任何具有渐进AdS时空的体系,例如包含黑洞的情况.[42]

Einstein−Hilbert作用量与AdS度规

对于很多实际情况,仅仅采用广义相对论也足以描述AdS时空的引力,相应的场方程可由Einstein−Hilbert作用量得到

$$S_{EH}=\frac{1}{16\pi G_N^{(d+2)}}\int d^{d+2}x\sqrt{-g}(\mathcal{R}-2\Lambda)+S_{matter} \tag{15.162}$$

这里$G_N^{(d+2)}$是$d+2$维时空的牛顿引力常数,$\sqrt{-g}$是度规的行列式($g=\det(g_{\mu\nu})$)取负号后的平方根.$\mathcal{R}$是Ricci标量而Λ称为宇宙学常数,代表某种真空能量密度.S_{matter}是物质(场)的贡献.数学上,R由黎曼张量$R^{\alpha}_{\mu\nu\rho}$构造,

$$\begin{aligned}\mathcal{R}&=g^{\mu\nu}R_{\mu\nu}\\ R_{\mu\nu}&=R^{\alpha}_{\mu\alpha\nu}\\ R^{\alpha}_{\mu\nu\rho}&=\partial_\nu\Gamma^{\alpha}_{\mu\rho}-\partial_\rho\Gamma^{\alpha}_{\mu\nu}+\Gamma^{\alpha}_{\sigma\nu}\Gamma^{\sigma}_{\mu\rho}-\Gamma^{\alpha}_{\sigma\rho}\Gamma^{\sigma}_{\mu\nu}\end{aligned} \tag{15.163}$$

这里$\Gamma^{\alpha}_{\mu\nu}$称为Christoffel符号,其与度规直接相关:

$$\Gamma^{\alpha}_{\mu\nu}=\frac{1}{2}g^{\alpha\beta}(\partial_\nu g_{\beta\mu}+\partial_\mu g_{\beta\nu}-\partial_\beta g_{\mu\nu}). \tag{15.164}$$

[41] [Witten,Anti De Sitter Space and Holography,Adv.Theor.Math.Phys. **2**,253(1998);Gubser,Klebanov,Polyakov,Gauge Theory Correlators from Non-Critical String Theory,Phys.Lett.B **428**,105(1998)]

[42] 例如,在黑洞附近,体系不具有AdS时空的度规,但远离黑洞后体系又会显示AdS 度规,这就是渐进AdS时空.

由最小作用量原理可得

$$0=\delta S_{EH}=\frac{1}{16\pi G_N^{(d+2)}}\int d^{d+2}x\left((\mathcal{R}-2\Lambda)\delta\sqrt{-g}+\sqrt{-g}\delta\mathcal{R}\right)+\delta S_{matter}$$

而$\delta\sqrt{-g}=-\frac{1}{2}\sqrt{-g}g_{\mu\nu}\delta g^{\mu\nu}$,$\delta\mathcal{R}=R_{\mu\nu}\delta g^{\mu\nu}+g^{\mu\nu}\delta R_{\mu\nu}$.若定义物质场的能动张量为$T_{\mu\nu}=-\frac{2}{\sqrt{-g}}\frac{\delta S_{matter}}{\delta g^{\mu\nu}}$,那么有(扔掉$\delta R_{\mu\nu}$相关的边界项)

$$0=\left[\frac{1}{16\pi G_N^{(d+2)}}\left(-\frac{\mathcal{R}-2\Lambda}{2}g_{\mu\nu}+R_{\mu\nu}\right)-\frac{1}{2}T_{\mu\nu}\right]\sqrt{-g}\delta g^{\mu\nu}$$

整理可得场方程

$$\boxed{R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}\mathcal{R}+\Lambda g_{\mu\nu}=8\pi G_N^{(d+2)}T_{\mu\nu}} \tag{15.165}$$

不存在物质场时,方程简化为$R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}\mathcal{R}+\Lambda g_{\mu\nu}=0$.可以验证,下列AdS$_{d+2}$度规是方程在$T_{\mu\nu}=0$时的解 [43]

$$\boxed{ds^2=R^2\frac{dz^2-dx_0^2+\sum_{i=1}^d dx_i^2}{z^2}} \tag{15.166}$$

此时$\Lambda=-\frac{d(d+1)}{2R^2}$.这里$R$是AdS时空的半径,$(x_0,x_i)$是共形场论所在平直时空的坐标,$z$是AdS时空的额外坐标,其物理意义相当于CFT在重整化群意义下的特征长度尺度.当然,CFT所在空间比AdS时空低一维,也就是在AdS时空的边界($z=0$处).注意到$z=0$时度规是奇异的,因此我们需要引入截断,也就是在计算过程中假定CFT系统位于$z=a$处,然后在计算的最后取$a\to 0$的极限.(a这个截断在CFT中相当于是紫外截断,类似晶格间距)

AdS/CFT字典

此时,AdS时空的配分函数$\mathcal{Z}_{AdS}$由Einstein−Hilbert作用量支配($\mathcal{Z}_{AdS}\simeq e^{-S_{EH}}$).如果我们需要计算CFT这边算符$\hat{\mathcal{O}}$的关联函数,那么就需要在CFT这边加入与$\hat{\mathcal{O}}$耦合的源项$\int d^dx\hat{\mathcal{O}}(x)\hat{J}(x)$.设CFT系统的哈密顿量为$\hat{H}_{CFT}$,那么体系的配分函数用路径积分形式可以写成

$$\mathcal{Z}_{CFT}[J]=\mathrm{Tr}e^{-\beta(\hat{H}_{CFT}-\int d^dx\hat{\mathcal{O}}(x)\hat{J}(x))}=\int\mathcal{D}\phi_{CFT}e^{-S_{CFT}+\int d^{d+1}x\mathcal{O}(x)J(x)}$$

若引入无源的配分函数$\mathcal{Z}_{CFT}[0]=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_{CFT}}=\int\mathcal{D}\phi_{CFT}e^{-S_{CFT}}$, 那么就可以定义

$$\langle e^{\int d^{d+1}x\mathcal{O}(x)J(x)}\rangle_{CFT}=\frac{\mathcal{Z}_{CFT}[J]}{\mathcal{Z}_{CFT}[0]} \tag{15.167}$$

这样

$$\langle\mathcal{O}(x)\rangle_{CFT}=\lim_{J\to 0}\frac{\partial\ln\mathcal{Z}_{CFT}[J]}{\partial J(x)} \tag{15.168}$$

[43]验证过程请参看附录

$$\langle \mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y)\rangle_{CFT} - \langle \mathcal{O}(x)\rangle_{CFT}\langle \mathcal{O}(y)\rangle_{CFT} = \lim_{J\to 0}\frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}_{CFT}[J]}{\partial J(x)\partial J(y)}. \quad (15.169)$$

因此,我们看到计算关联函数实际上需要计算$\mathcal{Z}_{CFT}[J] \equiv \langle e^{\int d^{d+1}x\mathcal{O}(x)J(x)}\rangle$.那么在AdS/CFT中我们如何计算这个量呢？Witten,Gubser,Klebanov和Polyakov指出,源$J(x)$在引力这边解释为AdS时空中运动的物质场ϕ,当其接近AdS边界,也就是$z = 0$处时,其取值应与边界(CFT所在的平直时空)值匹配,即$\phi(z \to 0, x) = J(x) \equiv \phi_0(x)$,这样假设CFT与AdS两边配分函数依然相等,那么有

$$\boxed{\langle e^{\int d^{d+1}x\mathcal{O}\phi_0}\rangle = e^{-S_{EH}[\phi]}|_{\phi(z\to 0)=\phi_0}} \quad (15.170)$$

因此CFT中含源配分函数的计算简化为引力时空中经典作用量$S_{EH}[\phi]$的计算,而后者通常只需要求解引力和物质场耦合的微分方程即可实现.这样,从原则上复杂的量子场论计算约化为解微分方程.特别简单的情况是当物质场相对于引力比较弱时,我们可以在求解物质场方程时采用引力方程所得的度规而不考虑物质对引力的反作用,这一般称为探测极限(probe limit).

在AdS/CFT中,我们常说高维引力时空的(物质)场ϕ与低维场论中的算符$\hat{\mathcal{O}}$对应.由于ϕ可以认为是整个五维时空的场而$\hat{\mathcal{O}}$仅处于五维时空边界,因此我们也说AdS/CFT也是一种体-边对偶(对应).例如引力这边的度规对应场论中的能动张量,引力理论的$U(1)$规范场对应场论的流密度.当然,Witten,Gubser,Klebanov和Polyakov的工作给出了更完整的对应,也就是所谓AdS/CFT字典或全息字典:

- 引力中的场对应场论中的局域算符;
- 引力中场的自旋对应场论中局域算符的自旋;
- 引力中场的质量对应场论中的局域算符的标度维度Δ;
- 引力中的度规对应场论中的能动张量$T^{\mu\nu}$;
- 引力中的规范场A_μ对应场论中的守恒流J^μ;
- 引力中的黑洞对应处于温度T退禁闭态的场论;[44]
- 引力中的带电黑洞对应具有化学势的场论;
- 引力中的局域对称性对应场论中的整体对称性.

AdS/CFT的一个例子:标量算符的关联函数与标量场

现在,让我们考虑AdS/CFT的一个具体例子.假设我们想要计算场论中的标量算符关联函数$\langle \mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y)\rangle$,[45]那么我们可以引入源场$J(x)$与$\mathcal{O}(x)$耦合.既然$\mathcal{O}$是标量算符,那么$J$也是标量.根据AdS/CFT字典,$J$在引力边的对应应该是标量

[44]如果要得到禁闭态的场论,可以用被称为AdS孤子解的度规.
[45]标量算符指的是其坐标变换性质是标量

场,我们把它记为ϕ.在最简单的情况下,我们设ϕ的作用量是有质量的自由标量场,即

$$S_{matter}=-\frac{1}{2}\int d^{d+2}x\sqrt{-g}(g^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi+m^2\phi^2) \tag{15.171}$$

这样通过对S_{matter}变分可得,

$$\begin{aligned}\delta S_{matter} &= -\frac{1}{2}\int d^{d+2}x\sqrt{-g}2(g^{\mu\nu}\partial_\mu\delta\phi\partial_\nu\phi+m^2\phi\delta\phi)\\ &= -\frac{1}{2}\int d^{d+2}x2(\overbrace{\partial_\mu(\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\partial_\nu\phi\delta\phi)}^{boudary}-\partial_\mu(\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\partial_\nu\phi)\delta\phi+\sqrt{-g}m^2\phi\delta\phi)\end{aligned}$$

扔掉边界项并令$\delta S=0$可得ϕ的运动方程:

$$\frac{1}{\sqrt{-g}}\partial_\mu(\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\partial_\nu\phi)-m^2\phi=0 \tag{15.172}$$

在AdS时空中,度规$g_{\mu\nu}$是对角的,因此上述方程化为(考虑度规$ds^2=R^2\frac{dz^2-dx_0^2+\sum_{i=1}^d dx_i^2}{z^2}$)

$$z^d\partial_z(z^{-d}g^{zz}\partial_z\phi)+z^d\partial_0(z^{-d}g^{00}\partial_0\phi)+z^d\sum_{i=1}^d\partial_i(z^{-d}g^{ii}\partial_i\phi)-m^2\phi=0$$

即有

$$z^d\partial_z(z^{-d+2}\partial_z\phi)-z^2(\partial_0^2-\sum_{i=1}^d\partial_i^2)\phi-m^2R^2\phi=0$$

注意到AdS时空中对于固定的z,$x_0,\vec{x}$方向具有平移不变性,因此可设$\phi(z,x_0,\vec{x})=\int d\omega d^d\vec{k}f_k(z)e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega x_0)}$,这样有

$$z^d\partial_z(z^{-d+2}\partial_z f_k(z))-(k^2z^2+m^2R^2)f_k(z)=0. \tag{15.173}$$

这里$k^2=\vec{k}^2-\omega^2$.为了分析$f_k(z)$的性质,在$z\to 0$也就是AdS边界附近,设$f_k(z)\sim z^\Delta$,代入上式可得

$$\Delta(\Delta-d-1)z^\Delta+(\omega^2-\vec{k}^2)z^{\Delta+2}-m^2R^2z^\Delta=0. \tag{15.174}$$

既然$z\to 0$那么$z^{\Delta+2}$是小量可以忽略,因此有

$$\Delta(\Delta-d-1)=m^2R^2\Rightarrow\Delta_\pm=\frac{d+1}{2}\pm\sqrt{\frac{(d+1)^2}{4}+m^2R^2} \tag{15.175}$$

注意到$\Delta_+>0$,因此$z\to 0$附近的解由$f_k(z)\sim z^{\Delta_+}$给出.当然,关于$f(z)$的方程是(虚宗量)贝塞尔方程,其解为$f_k(z)=Az^{(d+1)/2}K_\nu(kz)+Bz^{(d+1)/2}I_\nu(kz)$.$K_\nu,I_\nu$分别为虚宗量汉克尔函数和虚宗量贝塞尔函数,$\nu=\Delta_+-(d+1)/2$.注意到在$z\to\infty$时$I_\nu(kz)\sim\frac{1}{\sqrt{kz}}e^{kz}$发散,因此我们只选取$K_\nu$.由于$z\to 0$时$K_\nu\sim z^{-\nu}$,那么我们在$z\to 0$附近的解可以写成

$$f_k(z)\sim z^{(d+1)/2-\nu}=z^{d+1-\Delta_+}. \tag{15.176}$$

可以看到$z=0$时$f_k(z)$是发散的,因此我们可以取无限接近$z=0$的点$z=a$时的值$f_k(a)$来归一化f_k,也就是定义

$$f_k(z)=\frac{z^{(d+1)/2}K_\nu(kz)}{a^{(d+1)/2}K_\nu(ka)}. \tag{15.177}$$

这样我们就求得了标量场ϕ的一般解.回忆我们要求ϕ在边界附近的值应该趋近于源场$J=\phi_0$,这样满足这个边界条件的解可以写成

$$\phi(z,x_0,\vec{x})=\int d\omega d^d\vec{k}f_k(z)e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega x_0)}\phi_0(k) \tag{15.178}$$

其中$\phi_0(k)$由$\phi(z=a,x_0,\vec{x})=\int d\omega d^d\vec{k}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega x_0)}\phi_0(k)$定出.

为了计算关联函数$\langle\mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y)\rangle$,或者说它的傅里叶变换$\langle\mathcal{O}\mathcal{O}\rangle_k$根据AdS/CFT字典,我们只需计算$\ln e^{iS_{matter}}=iS_{matter}$(注意到我们使用的$S_{matter}$是实时形式)然后对$\phi_0$求变分即可,

$$\langle\mathcal{O}\mathcal{O}\rangle_k\sim\frac{\delta^2S_{matter}}{\delta\phi_0(-k)\delta\phi_0(k)}. \tag{15.179}$$

把ϕ的解代入S_{matter}发现只有表面项$S_{boudary}=-\frac{1}{2}\int d^{d+2}x\partial_\mu(\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\phi\partial_\nu\phi)$起作用,

$$S_{matter}=S_{boudary}=-\frac{1}{2}\int d^d\vec{x}dx_0(\sqrt{-g}g^{zz}\phi\partial_z\phi)|_{z=a}^{z=\infty}\sim\int d^{d+1}k\phi_0(k)\Upsilon(k)\phi_0(-k) \tag{15.180}$$

$\Upsilon(k)=(\sqrt{-g}g^{zz}f_k(z)\partial_zf_{-k}(z))|_{z=a}^{z=\infty}\sim k^{2\nu}=k^{2\Delta_+-d-1}$.[46]因此我们发现

$$\langle\mathcal{O}\mathcal{O}\rangle_k\sim\Upsilon(k)\sim\frac{1}{k^{2\Delta_+-d-1}} \tag{15.181}$$

而实空间关联函数是

$$\langle\mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y)\rangle=\int d^{k+1}ke^{ik(x-y)}\langle\mathcal{O}\mathcal{O}\rangle_k\sim\frac{1}{(x-y)^{2\Delta_+}} \tag{15.182}$$

回忆在场论这边若$x\to\lambda x$时$\mathcal{O}(x)\to\mathcal{O}(\lambda x)=\lambda^\Delta\mathcal{O}(x)$,那么$\Delta$是$\mathcal{O}$的标度维度而$x\to\lambda x$称为标度变换.进一步场论体系满足平移和旋转不变性,[47]那么必有$\langle\mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y)\rangle\sim\frac{1}{(x-y)^{2\Delta}}$,这样我们发现AdS/CFT所计算的$\Delta_+$就是标量算符的标度维度$\Delta$.因此对于确定的维度$d$,我们验证了AdS/CFT字典的正确性,即引力中场的质量m决定了场论中局域算符(场)的标度维度Δ.

- AdS/CFT中其他关联函数的计算与上述讨论基本一致,需要改变的是引力这边场的选取.例如如果我们要计算电导率,根据线性响应理论,需要考虑流流关联函数$\langle J_\mu J_\nu\rangle$.注意到流$J_\mu$与电磁场$A^\mu$耦合,因此$A^\mu$是源场,这样引力这边与$A^\mu$对应的是Maxwell电磁场.如果我们要计算费米子关联函数$\langle\psi\bar{\psi}\rangle$,那么就需要引入相耦合的Grassman型源场$\bar{\eta},\eta$,它们在引力理论中的对应是Dirac费米场.

[46]利用$x\to0$时$K_\nu(x)\sim x^{-\nu}\Gamma(\nu)+x^\nu\Gamma(-\nu)$

[47]标度,平移,旋转都是共形场论必然满足的对称性

AdS/CMT

关于AdS/CFT的具体计算相对而言比较复杂,其关键点在于数值求解引力背景下的一系列偏微分(常微分)方程组,这是一个比较技术化的问题,因此我们这里不再涉及.对于AdS/CFT应用感兴趣的读者可以参考一些较为友好的专著,例如

- Pires,AdS/CFT Correspondence in Condensed Matter(Morgan and Claypool Publishers,2014);
- Natsuume,AdS/CFT Duality User Guide(Springer2015);[48]
- Zaanen,Sun,Liu,Schalm,Holographic Duality in Condensed Matter Physics(Cambridge University Press2015).

最后,我们用图15.26结束这一部分的介绍.[49]这反映了一些研究者所倡议的凝聚态物理研究新范式,即用弦论来研究复杂的凝聚态物质,这也称为AdS/CMT.[50]这里面比较重要的话题有全息超导,全息非费米液体等.前者实际上相当于凝聚态物理中Ginzburg-Landau超导唯象理论的推广,而非超导BCS理论这类微观理论的全息实现.对于后者,首先体系存在费米面,然后费米面附近的Green函数可以写成$G(k,\omega)=(\omega-\varepsilon_k-\Sigma(\omega))^{-1}$,自能$\Sigma(\omega)\sim\omega^{2\nu}$仅依赖于频率而没有动量依赖.注意到这个自能形式与动力学平均场结果十分相似,但两者的物理起源全然不同.对于动力学平均场,其自能的非动量依赖性或者说局域性来自于它本身把晶格问题用单个格点代替,这样空间关联自然被抹去而导致相互作用的修正仅仅体现在时间方向,因而作为相互作用体现的自能就只有频率依赖了.对于全息非费米液体而言,由于Ads时空可以解释为边界场论不同能量尺度的对应,例如Ads时空的边界附近对应的是场论的高能部分而Ads时空的内部对应场论的低能或者红外物理.既然在黑洞视界附近可以把度规改写为Ads_2度规,这说明场论的低能物理由Ads_2度规(时间加上Ads坐标)控制,这样对应到场论这边的只有时间分量,因此场论一边的自能就之哟频率依赖.

目前来看,主流的凝聚态理论研究者响应这一倡议的并不多,因此在取得一些阶段性的成果例如全息超导,全息非费米液体后发展的并不快,这个领域可能需要更大的突破才能称为凝聚态领域真正意义上的新范式.

[48]学习AdS/CFT中肯定会阅读的user guide

[49]图引用自[Merali,String theory finds a bench mate,Nature **478**,302(2011)]

[50][McGreevy,Holographic duality with a view toward many-body physics,arXiv:0909.0518;Hartnoll,Lectures on holographic methods for condensed matter physics,arXiv:0903.3246;Sachdev,What Can Gauge-Gravity Duality Teach Us About Condensed Matter Physics?,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **3**,5(2012)]

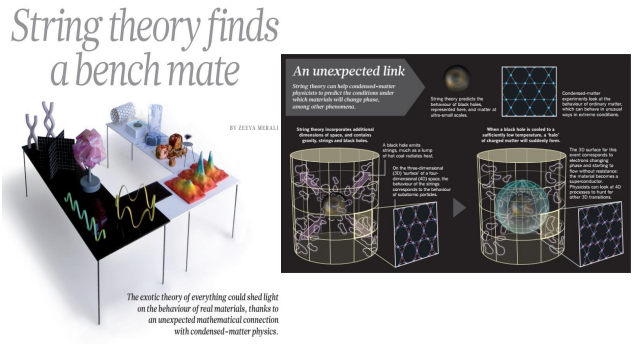


Figure 15.26: 一些研究者所倡议的凝聚态物理研究新范式,即用弦论来研究复杂的凝聚态物质,这也称为AdS/CMT.

量子场论中纠缠熵的计算

在介绍全息纠缠熵的计算之前,我们先回顾量子场论中纠缠熵的计算.首先,注意到$S_{EE}=S_A=-\mathrm{Tr}_A(\hat{\rho}_A\ln\hat{\rho}_A)$出现约化密度矩阵的对数形式,这通常很难用(量子场论常用的)路径积分表示,因此,人们喜欢用replica技巧,也就是人为假设有n个全同的系统,每一个系统都有相同的密度矩阵$\hat{\rho}_A$,这样有

$$S_A=-\lim_{n\to 1}\frac{\partial}{\partial n}\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n=-\lim_{n\to 1}\frac{\partial}{\partial n}\ln\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n \tag{15.183}$$

因此我们的主要任务是计算$\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n$.为了简单起见,让我们考虑$1+1$维空间(欧氏空间,也就是做了Wick转动$t=-it_E$后的空间)的标量场$\phi(t_E,x)$,类似于单粒子波函数的路径积分表示,如果我们假设$t_E=0$时刻场的构型是$\phi(t_E=0,x)=\phi_0(x)$(等价于说单粒子坐标在$t_E=0$是$x(t_E=0)=x$),那么体系的基态波函数是

$$\Psi(\phi_0)=\langle\phi_0|\Psi\rangle=\int_{t_E=-\infty}^{\phi(t_E=0)=\phi_0(x)}\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)} \tag{15.184}$$

$|\phi_0\rangle$类似于ϕ的相干态(但不是相干态)而$S(\phi)=\int_{-\infty}^{0}dt_E\int dx\mathcal{L}(\phi)$.这里我们假设$t_E=-\infty$时的波函数是平凡的常数因子而被忽略.这样,由基态波函数构造的密度矩阵的矩阵元是(推广单粒子密度矩阵矩阵元的路径积分表示)

$$\rho(\phi_+,\phi_-)=\langle\phi_+|\Psi\rangle\langle\Psi|\phi_-\rangle=\int_{t_E=-\infty}^{t_E=\infty}\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}\prod_x\delta(\phi(0^+,x)=\phi_+(x))\cdot\delta(\phi(0^-,x)=\phi_-(x))$$

注意$S(\phi)=\int_{-\infty}^{\infty}dt_E\int dx\mathcal{L}(\phi)$包含从$-\infty$到$\infty$的所有时间.[51]

[51]注意到平衡态密度算符有$\hat{\rho}=\frac{1}{Z}e^{-\beta\hat{H}}=\frac{1}{Z}\sum_m e^{-\beta E_m}|m\rangle\langle m|$.因此当$\beta\to\infty$时有$\hat{\rho}_{\beta\to\infty}=|0\rangle\langle 0|$,这说明零温极限的平衡态密度矩阵与基态密度矩阵相同.而平衡态密度矩阵可以用虚时路径积分直接表示,因此有$\rho_{\beta\to\infty}(\phi_+,\phi_-)=\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{Z}\langle\phi_+|e^{-\beta\hat{H}}|\phi_-\rangle=\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{Z}\int\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}\delta(\phi(\beta,x)=\phi_+(x))\delta(\phi(0,x)=\phi_-(x))$,$S(\phi)=\int_0^\beta d\tau\int dx\mathcal{L}(\phi)$.与配

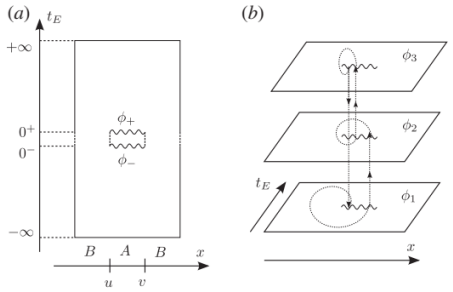


Figure 15.27: (a)约化密度矩阵的路径积分表示.(b)n叶黎曼面.(这里取$n=3$)

现在,让我们规定体系在空间上分为两个区域,即A和B,其中$x\in[\mu,\nu]$是A区域,剩下的就是B区域.然后考虑积掉B之后A的约化密度矩阵$\hat{\rho}_A$.注意到$\rho(\phi_+,\phi_-)$是整个系统的密度矩阵,它已经把除了$\phi(0^-,x)=\phi_-(x),\phi(0^+,x)=\phi_+(x)$的所有自由度积掉,因此我们只需要在$\phi(0^\pm,x)$中积掉$x\in B$的部分即可,也就是约化密度矩阵与$\rho(\phi_+,\phi_-)$形式一致,只不过$\delta$函数现在只涉及$x\in A$的部分,

$$\rho_A(\phi_+,\phi_-)=\int_{t_E=-\infty}^{t_E=\infty}\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}\prod_{x\in A}\delta(\phi(0^+,x)=\phi_+(x))\cdot\delta(\phi(0^-,x)=\phi_-(x)).$$

对于$\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n$,可以插入$\phi$的一系列正交归一态$\{|\phi_{+j}\rangle\},\{|\phi_{-j}\rangle\}(j=1...n)$

$$\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n=\mathrm{Tr}_A\prod_{j=1}^n\int d\phi_{+j}d\phi_{-j}|\phi_{+j}\rangle\langle\phi_{+j}|\hat{\rho}_A|\phi_{-j}\rangle\langle\phi_{-j}|=\mathrm{Tr}_A\prod_{j=1}^n\int d\phi_{+j}d\phi_{-j}|\phi_{+j}\rangle\langle\phi_{-j}|\rho_A(\phi_{+j},\phi_{-j}) \tag{15.185}$$

注意到不同$|\phi_{\pm j}\rangle$的正交归一性,要使上式非零显然有$\phi_{-j}=\phi_{+,j+1}$,而Tr_A操作要求$\phi_{-n}=\phi_{+1}$,这样

$$\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n=\int\prod_{j=1}^n d\phi_{+j}\rho_A(\phi_{+1},\phi_{+2})\rho_A(\phi_{+2},\phi_{+3})...\rho_A(\phi_{+n},\phi_{+1}) \tag{15.186}$$

这样,上述形式表明$\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n$仍然具有$\int\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}$的形式,只不过$t_E=0$相当于是复变函数论中多值函数的$n$ 阶支点,因此每一个ϕ_{+j}实际上处于黎曼面的第j个黎曼叶上.在第一个黎曼叶上我们有ϕ_{+1},然后从$t_E=0^+$接近0^-后会进入第二黎曼叶,此时我们有ϕ_{+2},这样$\phi_+(t_E,x)$成为$w=t_E+ix$的多值函数.因此,我们可以把$\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n$写成如下紧凑的形式,

$$\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n=\frac{1}{(\mathcal{Z}_1)^n}\int_{(t_E,x)\in\mathcal{R}_n}\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}\equiv\frac{Z_n}{(Z_1)^n} \tag{15.187}$$

分函数的路径积分相比,主要差别是边界条件从周期边界$\phi(\beta,x)=\phi(0,x)$变成$\phi(\beta,x)=\phi_+(x),\phi(0,x)=\phi_-(x)$.这样基态密度矩阵相关的计算都可以转化为更容易处理的平衡态密度矩阵,这对于解析计算和例如量子蒙特卡洛类型的数值方法都是很有用的技巧.

这里$\mathcal{R}_n$是有n个黎曼叶的黎曼面,$\mathcal{Z}_1=\int\phi_+\rho(\phi_+,\phi_+)$是为了归一化而引入.

作为上述形式的应用实例,让我们考虑二维共形场论.注意到纠缠熵计算时体系配分函数$\mathcal{Z}_n$处在n叶黎曼面上,利用坐标的共形变换$w\to z=\left(\frac{w-\mu}{w-\nu}\right)^{1/n}$就把配分函数变到通常复平面上.注意到黎曼面上的能动张量$T(w)$与通常复平面的能动张量$T(z)$满足如下关系,

$$T(w)=\left(\frac{dz}{dw}\right)^2T(z)+\frac{c}{12}\{z,w\} \tag{15.188}$$

这里$\{z,w\}=(z'''z'-3z''^2/2)/z'^2$是$z$对$w$求导的Schwartzian导数.由于总可以让复平面上的能动张量基态平均值为零$\langle T(z)\rangle_{\mathcal{C}}=0$,那么黎曼面上的能动张量平均值由Schwartzian导数完全确定,直接计算可得

$$\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}=\frac{c(1-1/n^2)}{24}\frac{(\nu-\mu)^2}{(w-\mu)^2(w-\nu)^2}. \tag{15.189}$$

同时注意到共形维度为$h=\bar{h}=\frac{c(1-1/n^2)}{24}$初级场$\Phi$在复平面上的关联函数是

$$\langle\Phi(\mu)\Phi(\nu)\rangle_{\mathcal{C}}=\frac{1}{(\nu-\mu)^{2h}(\bar{\nu}-\bar{\mu})^{2\bar{h}}} \tag{15.190}$$

而由共形Ward恒等式可知

$$\langle T(w)\Phi(\mu)\Phi(\nu)\rangle_{\mathcal{C}}=\frac{h(\nu-\mu)^2}{(w-\mu)^2(w-\nu)^2(\nu-\mu)^{2h}(\bar{\nu}-\bar{\mu})^{2\bar{h}}}, \tag{15.191}$$

这样我们发现$\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}$可用复平面上初级场和能动张量的关联函数直接表示,

$$\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}=\frac{\langle T(w)\Phi(\mu)\Phi(\nu)\rangle_{\mathcal{C}}}{\langle\Phi(\mu)\Phi(\nu)\rangle_{\mathcal{C}}}. \tag{15.192}$$

既然纠缠熵$S_A=-\lim_{n\to1}\frac{\partial}{\partial n}\ln\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A^n=-\lim_{n\to1}\frac{\partial}{\partial n}\ln\frac{\mathcal{Z}_n}{(\mathcal{Z}_1)^n}$,那么纠缠熵的变换必然导致配分函数的变化,也就是

$$\delta S_A=-\lim_{n\to1}\frac{\partial}{\partial n}(\delta\ln\mathcal{Z}_n-n\delta\ln\mathcal{Z}_1). \tag{15.193}$$

如果我们假设上述变化来自于坐标的(共形)变换$x^\mu\to x'^\mu=(1-2\alpha)x^\mu$,那么配分函数对数的变化可以用能动张量的期望值表示,[52]因此

$$\delta\ln\mathcal{Z}_n=-\frac{1}{2\pi}\int d^2r\langle T_\mu^\nu\rangle_{\mathcal{R}_n}\overbrace{\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu}}^{-2\alpha\delta_\nu^\mu}=\frac{\alpha}{\pi}\int d^2r\langle T_\mu^\mu\rangle_{\mathcal{R}_n} \tag{15.194}$$

同时

$$\delta\ln\mathcal{Z}_1=\frac{\alpha}{\pi}\int d^2r\langle T_\mu^\mu\rangle_{\mathcal{C}}. \tag{15.195}$$

[52]由$Z=\int\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}$可得$\delta\ln\mathcal{Z}=\mathcal{Z}^{-1}\int\mathcal{D}\phi e^{-S(\phi)}(-\delta S(\phi))$.坐标变换导致的$\delta S=\frac{1}{2\pi}\int d^2rT_\mu^\nu\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu}$,这样$\delta\ln\mathcal{Z}=-\frac{1}{2\pi}\int d^2r\langle T_\mu^\nu\rangle\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu}$.

注意到$\int d^2r\langle T^\mu_\mu\rangle_{\mathcal{R}_n}=-i\oint w\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}dw+c.c$,(c.c.表示复共轭部分)那么有

$$\delta S_A=-\lim_{n\to 1}\frac{\partial}{\partial n}\left(\frac{-i\alpha}{\pi}\oint w\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}dw-n\frac{-i\alpha}{\pi}\oint w\langle T(w)\rangle_{\mathcal{C}}dw+c.c.\right). \tag{15.196}$$

由于$\langle T(w)\rangle_{\mathcal{C}}=0$而$\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}=\frac{c(1-1/n^2)}{24}\frac{(\nu-\mu)^2}{(w-\mu)^2(w-\nu)^2}$,为简化形式可设$\mu=0,\nu>>1$,这样$\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}=\frac{c(1-1/n^2)}{24w^2}$,因此

$$\oint w\langle T(w)\rangle_{\mathcal{R}_n}dw=\oint dw\frac{c(1-1/n^2)}{24w}=\frac{(2\pi in)c(1-1/n^2)}{24}=\frac{(\pi i)c(n-1/n)}{12} \tag{15.197}$$

注意到在n叶黎曼面$\mathcal{R}_n$上的积分实际上分解每个黎曼叶上绕着原点$w=0$的积分,既然每个$1/w$函数的回路积分贡献$2\pi i$,n叶的总贡献为$2\pi in$,也就是把每个黎曼叶的贡献加在一起.这样我们发现,

$$\begin{aligned}\delta S_A &= -\lim_{n\to 1}\frac{\partial}{\partial n}\left(\alpha\frac{c(n-1/n)}{12}+c.c.\right)\\ &= -\alpha(c+\bar{c})\lim_{n\to 1}\frac{\partial}{\partial n}\frac{(n-1/n)}{12}\\ &= -\alpha\frac{c+\bar{c}}{6}\end{aligned} \tag{15.198}$$

对于幺正理论(哈密顿量是厄密的),那么$c=\bar{c}$.同时假设$\alpha=-\delta\ln\epsilon$,那么有

$$\frac{\delta S_A}{\delta\ln\epsilon}\simeq\frac{\partial S_A}{\partial\ln\epsilon}=\frac{c}{3}\Rightarrow S_A=\frac{c}{3}\ln\frac{l_A}{a} \tag{15.199}$$

这里a,l_A是对ϵ积分引入的截断,分别代表晶格间距和A区域的长度,注意到这个结果与先前介绍的一维CFT理论所得纠缠熵的一致性.

全息纠缠熵的计算

现在,让我们介绍如何利用AdS_{d+2}时空的引力计算CFT_{d+1}系统的纠缠熵.类似于量子场论中纠缠熵的计算,我们在CFT_{d+1}中定义区域A和B,A与B的边界记为∂A,然后为了避免发散,CFT位于AdS_{d+2}时空的$z=0$处.在对偶的引力这边,也就是AdS_{d+2}时空,我们考虑以∂A为边界的曲面γ_A,当然,γ_A的选取有无穷多种,Ryu和Takayanagi建议选取具有最小面积的γ_A,也就是说我们仅考虑最小面积的曲面,记该最小面积为$Area(\gamma_A)$,那么CFT_{d+1}所对应的纠缠熵用如下公式表示(文献中称为Ryu-Takayanagi公式或RT公式):[53]

$$\boxed{S_A=\frac{Area(\gamma_A)}{4G_N^{(d+2)}}} \tag{15.200}$$

[53]相关的原始论文是[Ryu,Takayanagi,Holographic Derivation of Entanglement Entropy from AdS/CFT,Phys.Rev.Lett. **96**,181602(2006)]

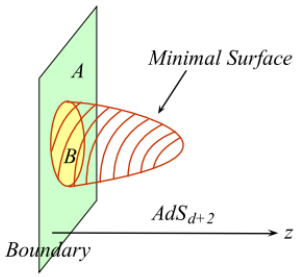


Figure 15.28: 利用AdS/CFT计算全息纠缠熵.

这里$G_N^{(d+2)}$是指$d+2$维AdS引力中的牛顿引力常数.注意到RT公式非常类似于黑洞热力学中黑洞熵的Bekenstein-Hawking公式:

$$\boxed{S_{BH}=\frac{Area(\Sigma)}{4G_N}} \tag{15.201}$$

G_N是牛顿引力常数,$Area(\Sigma)$是黑洞视界Σ的面积.BH公式说明黑洞熵满足面积律.事实上,RT公式可以认为是BH公式的推广,这是因为在有视界存在的情况下(例如AdS Schwarzschild黑洞解),最小曲面倾向于包裹住视界.

现在,让我们用全息方法计算$1+1$维CFT的纠缠熵.假设区域A的大小为l_A,区域A的边界在AdS_3时空中的坐标为$(z=a,x=-\frac{l_A}{2})$和$(z=a,x_0=t,x=\frac{l_A}{2})$.这样以$(z=a,x=\pm\frac{l_A}{2}))$为端点的最小曲线(最小曲面在1维空间退化为最小曲线)就是链接这个两个端点的测地线,(我们固定时间t不变),这条测地线上点的坐标用$(z,x)=(\sin s,\cos s),(\epsilon\leqslant s\leqslant\pi-\epsilon,\epsilon=\frac{2a}{l_A})$参数化,这样$\gamma_A$的(固有)长度是$(d\gamma_A=\sqrt{g_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu}=\sqrt{g_{\mu\nu}\frac{dx^\mu}{ds}\frac{dx^\nu}{ds}}ds=\sqrt{g_{zz}\frac{dz}{ds}\frac{dz}{ds}+g_{xx}\frac{dx}{ds}\frac{dx}{ds}}ds)$

$$Length(\gamma_A)=\int_\epsilon^{\pi-\epsilon}ds\sqrt{\frac{R^2}{z^2}}=2R\int_\epsilon^{\pi/2}\frac{ds}{\sin s}=-2R\ln\frac{\epsilon}{2}=2R\ln\frac{l_A}{a} \tag{15.202}$$

注意到与AdS_3时空对应的CFT的中心荷是$c=\frac{3R}{2G_N^{(3)}}$,代入RT公式可得

$$S_A=\frac{Length(\gamma_A)}{4G_N^{(3)}}=\frac{2R\ln\frac{l_A}{a}}{4G_N^{(3)}}=\frac{c}{3}\ln\frac{l_A}{a} \tag{15.203}$$

显然这与CFT直接计算一致,因此RT公式说明AdS/CFT对应确实(至少在一定程度上)抓住了引力与场论系统的普适性质.

量子纠缠对多体物理的应用

这里,我们简要列举量子纠缠对多体物理的应用.

- 区分量子物态,例如用纠缠熵的面积律区别有能隙态和无能隙态,用拓扑纠缠熵区分不同类的拓扑有序态;
- 用纠缠谱详细刻画拓扑有序态的低能结构;[54]
- 激励和重新理解数值计算工具,例如矩阵乘积态和密度矩阵重整化群算法.

toric-code模型与拓扑纠缠熵*

让我们回到toric-code模型的讨论.在先前的讨论中,我们知道toric-code基态的简并度依赖于系统所在空间的拓扑结构.在这里,我们将以toric-code为例,follow Levin 和Wen的思路讨论拓扑序的纠缠特性[Phys.Rev.Lett.**96**,110405(2006)]他们指出拓扑序是波函数的特性而非哈密顿量的.因此利用量子纠缠解码出波函数的特性实际上比直接求解哈密顿量更为实用.[55]

考虑定义在六角晶格上的toric-code模型,[56]

$$\hat{H} = -J_e \sum_s \hat{A}_s - J_m \sum_p \hat{B}_p \quad J_e, J_m > 0 \tag{15.204}$$

这里$\hat{A}_s$代表某个格点附近的三个$\hat{\sigma}^x$自旋的乘积,$\hat{B}_p$代表某个六角形plaquett上六个$\hat{\sigma}^z$自旋的乘积.显然,与正方晶格上的torc-code一样,基态时所有$\hat{A}_s, \hat{B}_p = 1$而包含非局域关联信息的任意闭合路径的Wilson圈算符期望值$\langle \hat{W}_{\mathcal{C}}^{(m)} \rangle = 1$.同时,基态用圈图像可以表示为各种可能的圈构型的等权重叠加,[57]那么非局域的闭合Wilson圈如果与圈相交则一定相交偶数次.(排除偶然恰好相切的情况,如图15.29(a)所示)

既然纠缠熵刻画了量子态的纠缠程度,那么我们将计算toric-code基态的纠缠熵.如图15.29(b)所示,我们把系统划分为A, B两部分,然后考虑图中四种不同A的划分,即A_1, A_2, A_3, A_4.这四种划分对应的纠缠熵分别是S_1, S_2, S_3, S_4.根据几何关系,我们看到$A_1 - A_2$的区域与$A_3 - A_4$区域相同的,如果系统只存在短程纠缠,也就是只有相邻自旋间有纠缠,(可以理解为自旋间的关联长度只有一两个晶格间距的大小,这等价于说系统是有能隙的.($\Delta \sim \xi^{-1}$))那么对于足够大的系统,S_1, S_2, S_3, S_4满足面积律,也就是说纠缠熵由边界长度决定.由图15.29(b)可知A_1 区域的边界长度是$2R + 2L + 2(R - 2r) + 2l$(为明确起见设蓝色区域的宽为L而A_1所包围白色区域的宽是l).同理我们发现A_2区域的边界长度是$R + 2r + (R - 2r) + 2((L - l)/2 + l)$, 这样我们有

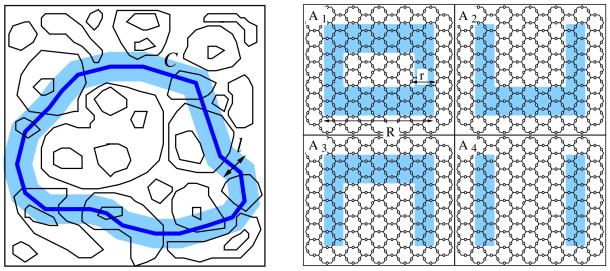
$$S_1 = \alpha(2R+2L+2(R-2r)+2l)\ln 2 \quad S_2 = \alpha(R+2r+(R-2r)+2((L-l)/2+l))\ln 2 \tag{15.205}$$

[54][Li,Haldane,Entanglement Spectrum as a Generalization of Entanglement Entropy: Identification of Topological Order in Non-Abelian Fractional Quantum Hall Effect States,Phys.Rev.Lett. **101**,010504(2008)]

[55]回忆我们对超导和分数霍尔效应的理解更多基于波函数而非其对应的哈密顿量.

[56]正方晶格也是类似的处理

[57]有时也称为弦图像



(a) (b)

Figure 15.29: (a)toric-code基态时非局域的闭合Wilson圈与各种自旋构型形成的圈相交偶数次.(b)计算纠缠熵所考虑的四种空间划分,A_1, A_2, A_3, A_4,蓝色区域为纠缠熵计算涉及的A区域.

这里α是未知的常数.类似的我们有

$$S_3 = \alpha(R+2r+(R-2r)+2((L-l)/2+l))\ln 2 \quad S_4 = \alpha(4L+4r)\ln 2 \tag{15.206}$$

这样

$$(S_1 - S_2) - (S_3 - S_4) = 0. \tag{15.207}$$

这对通常的有能隙系统总是成立.但是注意到toric-code基态有$\langle \hat{W}_{\mathcal{C}}^{(m)} \rangle = 1$.这说明系统除了通常的短程纠缠还存在长程关联或者长程纠缠.这样我们猜测上式并不为零,

$$\boxed{(S_1 - S_2) - (S_3 - S_4) = -\ln(D^2)}. \tag{15.208}$$

这里$\ln(D^2) = \gamma_{topo}$代表系统的拓扑纠缠熵(topological entanglement entropy,TEE)而D称为拓扑有序态的总量子维度.对于具有N个群元素的Z_N 规范理论,我们有$D = N$,这样Z_2规范理论就有$\gamma_{topo} = \ln 2^2 = 2\ln 2$.

现在,让我们计算系统的拓扑纠缠熵.考虑如图15.30所示的区域,蓝色区域R是计算纠缠熵所考虑的区域. 为了使边界更为对称,我们把边界上的自旋人为的分成两个(最后再让它们相同以恢复原始的模型),记为i_m和j_m.其中i_m表示边界内的自旋而j_m表示边界外的自旋.[58]这样系统的基态波函数可以用这些边界自旋表征,即[59]

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_m\}\{j_m\}} c_{i_1,i_2,\ldots,i_m,\ldots;j_1,j_2,\ldots,j_m,\ldots} |\Psi^{in}_{i_1,i_2,\ldots,i_m,\ldots}\rangle |\Psi^{out}_{j_1,j_2,\ldots,j_m,\ldots}\rangle \tag{15.209}$$

这里$|\Psi^{in}\rangle$代表R内部地波函数而$|\Psi^{out}\rangle$代表R外部的波函数.如果我们把区域R的边界∂R理解为闭合Wilson圈算符的路径,由于我们知道toric-code基态

[58]把自旋分为两个的目的是这样能够使得边界线恰好通过两个自旋的中间而避免边界选取的混乱.

[59]原则上波函数还有其他非边界自旋的依赖,这里为简单起见就不写出了.

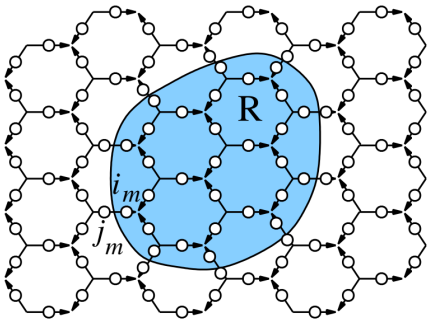


Figure 15.30: 蓝色区域R是计算纠缠熵所考虑的区域.

时闭合Wilson圈与各种自旋构型形成的圈相交偶数次,而这说明边界处粗实线的数目或者说$\hat{\sigma}^x = -1$的个数必然是偶数.我们把i_m处自旋$\hat{\sigma}^x = -1$记为$q_m = 1$而$\hat{\sigma}^x = 1$记为$q_m = 0$.这样基态时有$\sum_m q_m = even$也就是所有q_m的和为偶数.同时由于i_m和j_m自旋在物理上实际上是同一个,我们取$\hat{\sigma}^x_{i_m} = \hat{\sigma}^x_{j_m}$.这样系统的基态波函数可以等价地表示为

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sum_m q_m = even} c_{q_1,q_2...,q_m,...} |\Psi^{in}_{q_1,q_2,...,q_m,...}\rangle |\Psi^{out}_{q_1,q_2,...,q_m,...}\rangle \tag{15.210}$$

假设边界上有n个自旋,那么由于$\sum_m q_m = even$的限制,对基态有贡献的边界自旋构型数目是$2^n/2 = 2^{n-1}$,也就说有一半的自旋构型对波函数有贡献.注意到基态时所有自旋构型的权重相同,[60]这说明2^{n-1}个非零系数c取值相同,即$c = \frac{1}{\sqrt{2^{n-1}}} = \frac{1}{2^{n-2}}$.(这样取值使得基态波函数$|\Psi\rangle$归一化)一般而言,我们可以设$|\Psi^{in}\rangle$和$|\Psi^{out}\rangle$是正交归一的,这样$R$的约化密度矩阵是:

$$\hat{\rho}_R = \sum_{j=1}^{2^{n-1}} \left(\frac{1}{2^{n-2}}\right)^2 |\Psi^{in}_j\rangle\langle\Psi^{in}_j| \tag{15.211}$$

而纠缠熵很容易得到

$$S_R = -\mathrm{Tr}\hat{\rho}_R \ln \hat{\rho}_R = -\sum_{j=1}^{2^{n-1}} \frac{1}{2^{n-1}} \ln \frac{1}{2^{n-1}} = \frac{2^{n-1}}{2^{n-1}} \ln(2^{n-1}) = (n-1)\ln 2 \tag{15.212}$$

这样我们得到了单连通区域R的纠缠熵.与面积律$(n \ln 2)$相比,这里的纠缠熵减少了$\ln 2$,这个$-\ln 2$源于基态时闭合Wilson圈与自旋构成的圈相交偶数次这个限制.[61]由于通常的自旋模型没有这个限制,因此它们基态如果有能隙(即只有短程

[60] 回忆之前关于toric-code基态波函数形式的讨论

[61] 当然系数c对每一项都相等(也就是基态波函数是各项的等权重叠加)也同样重要否则我们一般得不到$-\ln 2$的结果.

关联)那么纠缠熵是满足面积律的$n\ln 2$. 因此,我们说toric-code模型的基态具有非零的拓扑纠缠熵.

当然,上述讨论只适用于没有洞的单连通区域.对于多连通区域,我们有$S=(n-j)\ln 2$,这里j是不连通的边界曲线的数目.[62]例如 图15.29(a)中A_1和A_4是多连通区域,其不连通的边界曲线的数目是2,因此它们的纠缠熵都具有$S_1=(n_1-2)\ln 2, S_4=(n_4-2)\ln 2$的形式.与之相反,$A_2, A_3$区域是单连通的,这样它们的纠缠熵是$S_2=(n_2-1)\ln 2, S_3=(n_3-1)\ln 2$.这样,我们发现考虑系统具有拓扑纠缠熵的特性后有

$$(S_1-S_2)-(S_3-S_4)=(n_1-_2-n_3+n_4-2+1+1-2)\ln 2=(n_1-_2-n_3+n_4)\ln 2-2\ln 2. \tag{15.213}$$

注意到$(n_1-_2-n_3+n_4)\ln 2$是不考虑体系拓扑序而仅由面积律的结果,由先前讨论可知其为零.这样剩下的部分$-2\ln 2=-\ln 2^2$就是拓扑序的贡献.既然toric-code也是一类Z_2规范场模型($D=2$),根据公式15.208,我们有$(S_1-S_2)-(S_3-S_4)=-\ln(2^2)$,这与当前直接计算相同.

- 拓扑有序系统或者说拓扑有序态的纠缠熵除了面积律外还具有拓扑纠缠熵,这个对面积律的负修正反映了系统的拓扑序.

最后,我们计算两个简单的例子.考虑图15.31中的四格点和七格点toric-code模型.对于左边的图,我们计算由1, 2自旋组成的A区域的纠缠熵而右边的图则考虑1, 2, 3自旋组成的区域.

这样,图15.31左边的基态波函数是

$$|\Psi\rangle=\frac{1+\hat{B}}{\sqrt{2}}|0000\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0000\rangle+|1111\rangle) \tag{15.214}$$

那么系统的密度矩阵是

$$\hat{\rho}=|\Psi\rangle\langle\Psi|=\frac{1}{2}(|0000\rangle\langle 0000|+|0000\rangle\langle 1111|+|1111\rangle\langle 0000|+|1111\rangle\langle 1111|) \tag{15.215}$$

对3, 4自旋自由度求迹得A系统的约化密度矩阵:

$$\hat{\rho}_A=\mathrm{Tr}_B=\frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00|+|11\rangle\langle 11|) \tag{15.216}$$

这样纠缠熵就是$S=\ln 2$.从物理上来看,A, B区域的边界线(图中的蓝色虚线)恰好穿过了两对纠缠对(1, 4和2, 3)那么由先前的讨论可知纠缠熵是$(2-1)\ln 2$,这

[62]仿照单连通区域的讨论,我们容易理解这个结果.如果有j个不连通的边界曲线,那么基态时每一条曲线都与所考虑区域的圈相交偶数次,这样每条边界曲线都有一个约束$\sum_m q_m=even$,j条边界就有j个约束.如果系统边界总计有n个自旋,那么基态波函数系数的总数目必然是2^n.由于我们还有l个约束,每个约束都会要求一半的系数为零,这样波函数中非零系数的总数是$2^n/2^l=2^{n-l}$.既然每个系数都相等,那么相应的纠缠熵必定是$S=-2^{n-l}\frac{1}{2^{n-l}}\ln\frac{1}{2^{n-l}}=(n-l)\ln 2$.

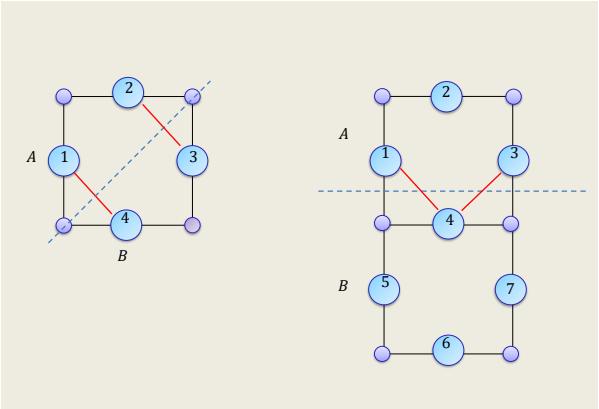


Figure 15.31: 蓝色区域R是计算纠缠熵所考虑的区域.

里$-\ln 2$是拓扑序的贡献.这与我们的直接计算吻合.进一步,右图中的基态波函数是

$$|\Psi\rangle=\frac{1+\hat{B}_{1234}}{\sqrt{2}}\frac{1+\hat{B}_{4567}}{\sqrt{2}}|000,0000\rangle=\frac{1}{2}(|000,0000\rangle+|111,1000\rangle+|000,1111\rangle+|111,0111\rangle) \tag{15.217}$$

密度矩阵是

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{4}(|000,0000\rangle\langle 000,000|+|000,0000\rangle\langle 111,100|+|000,0000\rangle\langle 000,1111|+|000,0000\rangle\langle 111,0111|\\ &+ |111,1000\rangle\langle 000,0000|+|111,1000\rangle\langle 111,1000|+|111,1000\rangle\langle 000,1111|+|111,1000\rangle\langle 111,0111|\\ &+ |000,1111\rangle\langle 000,0000|+|000,1111\rangle\langle 111,1000|+|000,1111\rangle\langle 000,1111|+|000,1111\rangle\langle 111,0111|\\ &+ |111,0111\rangle\langle 000,0000|+|111,0111\rangle\langle 111,1000|+|111,0111\rangle\langle 000,1111|+|111,0111\rangle\langle 111,0111|)\end{aligned}$$

这样我们直接对$4,5,6,7$自旋自由度求迹得A系统的约化密度矩阵:

$$\hat{\rho}_A=\mathrm{Tr}_B=\frac{1}{2}(|000\rangle\langle 000|+|111\rangle\langle 111|) \tag{15.218}$$

我们发现纠缠熵是$S=\ln 2$.

toric-code模型的物理实现*

利用超导量子线路(superconducting quantum circuit),Google量子AI组报告了包含31个自旋的toric-code模型的物理实现.[63]

[63][Satzinger et al.,Realizing topologically ordered states on a quantum processor,Science **374**,1237(2021)]

图15.32显示了31个自旋toric-code模型(开放边界条件)基态时每个$\hat{A}_s, \hat{B}_p$的测量值.蓝色区域的取值是$\hat{A}_s$ 的平均值而紫色则是$\hat{B}_p$的平均值.

理论上,这31个自旋toric-code模型的基态$|\Psi_0\rangle$可用12个plaquett的$\hat{B}_p$作用于自旋都取$\hat{\sigma}^x = 1$的乘积态$|0\rangle = \prod_{j=1}^{31} |\rightarrow\rangle_j$而获得:

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{j=1}^{12}(1 + \hat{B}_p(j))|0\rangle \tag{15.219}$$

注意$|\Psi_0\rangle$实际上是$2^{12} = 4096$项的相干叠加,因此是一个复杂的叠加态/纠缠态.显然,直接计算发现$\hat{A}_s, \hat{B}_p$在上述基态的平均值都是1,而实验测量有七个值小于0.9,因此Google的实验还不能很好地模拟理想的toric-code基态.

进一步,如图15.32右上所示,Google组测量了不同形状子系统的纠缠熵.对于有能隙的量子多体系统,其基态的纠缠熵满足面积律,也就是说如果把一个系统分成两个部分,那么纠缠熵正比于两个系统之间的接触面积,对二维系统就是正比于接触边界的长度.对于toric-code模型,其基态具有拓扑序,那么纠缠熵还有额外的一项,即拓扑纠缠熵.理论上预期toric-code模型的纠缠熵是简单的$-\ln 2$.把实验测量值与理论值比较发现表征toric-code基态拓扑性质的拓扑纠缠熵确实接近理论预期的$-\ln 2$.

如图15.32右下所示,通过翻转自旋所组成的弦(用$\hat{W}_l^{(e)}, \hat{W}_l^{(m)}$),实验上能够实现涡旋$m$和电荷激发$e$.测量准粒子$e, m$之间交换所产生的额外相位,Google组证明$e$和$e$交换的相位是0($m$也一样),而$e, m$之间交换的相位是$\pi/2$,(实际实现时可以固定$m$而让$e$ 绕着m转一圈,这样产生的相位是π,再除以2就是e, m之间交换的相位$\pi/2$)这与理论预期一致.因此e, m之间确实具有半子统计.(交换相位是$\pi/2$)

在Google组论文的最后,他们认为具有非阿贝尔任意子的弦网(string-nets)模型[12]也可以用实现toric-code模型的方法实现.[64]

[64]同一期的论文[Semeghini et al.,Probing topological spin liquids on a programmable quantum simulator,Science **374**,1242(2021)]报道了Harvard大学Lukin组在219个Rydberg原子组成的量子模拟器中实现了Kagome晶格上的dimer模型.这说明一些能够被量子模拟器实现的量子自旋液体态将会很快得到正确理解,或者说人们对量子自旋液体的研究将进入新的时代!

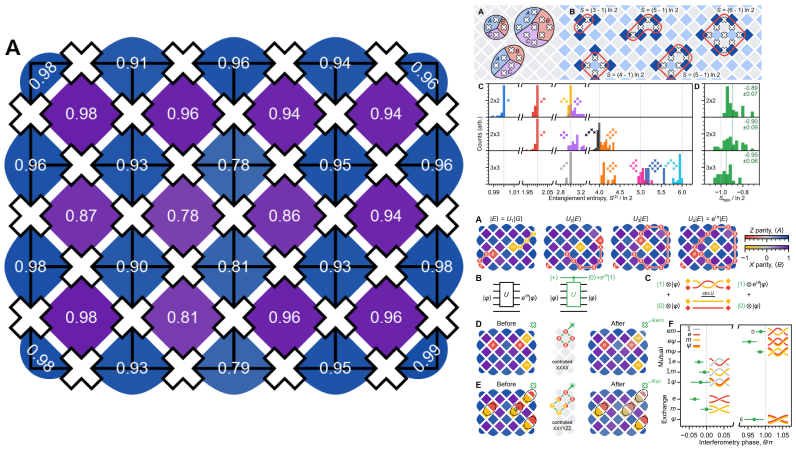


Figure 15.32: Toric-code模型的超导量子线路实现.左边是基态时$\hat{A}_s, \hat{B}_p$的测量值.右边显示了拓扑纠缠熵与准粒子的交换统计性质.

Kitaev honeycomb模型与量子自旋液体:你要的它全都有

Kitaev量子自旋液体

量子自旋液体(QSL)是一类古怪的量子物态,在这类物态中自旋涨落在零温时也十分强烈,因此系统的基态不显示磁性有序并且基态是非平凡的(例如具有长程的量子纠缠).一类简单的量子自旋液体是所谓的Kitaev量子自旋液体,[65]它在最近几年得到理论与实验上的广泛关注并具有以下特点:[66]

- 与实验的高度相关性,Na_2IrO_3,[67]Li_2IrO_3[68]和$\alpha-RuCl_3$[69]是实现Kitaev honeycomb 类型模型的候选材料; [70]

[65][Kitaev,Anyons in an exactly solved model and beyond,Annals of Physics **321**,2(2006)]

[66][Hermanns,Kimchi,Knolle,Physics of the Kitaev model: fractionalization,dynamical correlations,and material connections,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **9**:17−33 (2018)]

[67][Singh,Gegenwart,Antiferromagnetic Mott insulating state in single crystals of the honeycomb lattice material,Na_2IrO_3,Phys.Rev.B **82**,064412(2010);Choi et al.,Spin Waves and Revised Crystal Structure of Honeycomb Iridate Na_2IrO_3,Phys.Rev.Lett. **108**,127204(2012)]

[68][Singh et al.,Relevance of the Heisenberg-Kitaev Model for the Honeycomb Lattice Iridates A_2IrO_3,Phys.Rev.Lett. **108**,127203(202)]

[69][Plumb et al.,$\alpha-RuCl_3$:A spin-orbit assisted Mott insulator on a honeycomb lattice,Phys.Rev.B **90**,041112(R)(2014);Sears et al.,Magnetic order in α-$RuCl_3$:A honeycomb-lattice quantum magnet with strong spin-orbit coupling,Phys.Rev.B **91**,144420(2015)]

[70]虽然与实验更为契合的模型需要非Kitaev型相互作用,例如Heisenberg相互作用,这样的模型一般称为Kitaev-Heisenberg模型$\hat{H} = \sum_{\langle i,j\rangle}(J\hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j - J_K\hat{S}_i^\alpha\hat{S}_j^\alpha)$以及所谓的$\Gamma$项.[Kitaev-Heisenberg Model on a Honeycomb Lattice: Possible Exotic Phases in Iridium Oxides A_2IrO_3,Chaloupka,Jackeli,Khaliullin,Phys.Rev.Lett. **105**,027204(2010);Rau,Lee,Kee,Generic

方法	适用对象	有无约束条件	有限温度计算
Majorana费米子	$S \geqslant 1/2$自旋	有	困难
Jordan-Wigner变换	$S = 1/2$自旋	无	容易

Table 15.1: 处理Kitaev honeycomb模型的两类方法比较.

- 模型具有精确可解性,也就是可以化为仅包含二次型的自由Majorana费米子模型;

- 有很多有意思的有能隙和无能隙的量子自旋液体.

原始的Kitaev量子自旋液体来自于Kitaev honeycomb模型的精确求解,该模型是一个具有强各向异性相互作用的纯自旋模型,其提出的而主要动机是寻找能用于拓扑量子计算的非阿贝尔任意子.在Khaliullin和Jackeli之前,这个模型一直被认为是过于理想化的模型.他们两人认识到Kitaev 型的各向异性相互作用可能在具有强自旋–轨道耦合的过渡金属化合物中成为主导的相互作用类型,比如某些铱Ir(iridate)基化合物.[71]大多数已经合成的材料在足够低温下都显示磁性有序,这说明这些材料中尽管Kitaev 相互作用很强,但是它们并不足以稳定量子自旋液体.因此人们尝试通过压力,磁场以及化学掺杂的方式把系统驱动到Kitaev量子自旋液体态.如果材料足够接近量子自旋液体态,我们可以期待量子自旋液体的痕迹或者来自于分数化的特性.这些特征信号可能会出现在低温行为由磁性序决定的中间能量区或者在这些绝缘材料中掺入巡游电荷载流子的情况下.

下面我们将介绍六角晶格上Kitaev模型的求解,这通常可以用两类方法计算:

- 部分子构建(parton construction),也就是把自旋用四种Majorana费米子表示;(考虑激发态和热力学时需要计入投影算符但可以容易推广至$S = 1, S = 3/2$等高自旋情况)

- Jordan-Wigner变换.(仅适合于$S = 1/2$,很难推广至高自旋体系但不需要考虑投影算符因而计算热力学和输运都较为容易)

此外,一些修改的Kitaev模型也可以利用上述方法严格求解[72].

Spin Model for the Honeycomb Iridates beyond the Kitaev Limit,Phys.Rev.Lett. **112**,077204(2014);Kim,Shankar,Catuneanu,Kee,Kitaev magnetism in honeycomb,$RuCl_3$ with intermediate spin-orbit coupling,Phys.Rev.B**91**,241110(R)(2015)]

[71] [Jackeli,Khaliullin,Mott Insulators in the Strong Spin-Orbit Coupling Limit: From Heisenberg to a Quantum Compass and Kitaev Models,Phys.Rev.Lett. **102**,017205 (2009)]

[72] [Yao,Kivelson,Exact Chiral Spin Liquid with Non-Abelian Anyons,Phys.Rev.Lett. **99**,247203(2007);Mandal,Surendran,Exactly solvable Kitaev model in three dimensions,Phys.Rev.B **79**,024426(2009)]

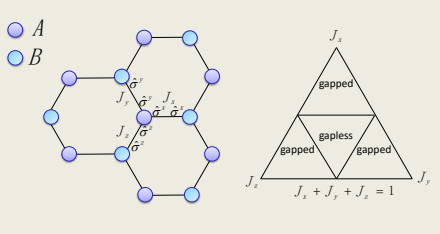


Figure 15.33: Kitaev的honeycomb模型定义在六角晶格上,自旋耦合高度各向异性,其相图由有能隙的自旋液体和无能隙的自旋液体构成.当某一个方向耦合占主导时系统基态是有能隙自旋液体而自旋耦合接近各向同性时是无能隙自旋液体.

Kitaev honeycomb模型的求解

让先采用部分子的方法进行求解.首先,我们考虑定义在六角晶格(honeycomb lattice)上的各向异性的最近邻耦合$S=\frac{1}{2}$量子自旋模型:(如图15.33)

$$\boxed{H_{KH}=-J_x\sum_{x-links}\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_k^x-J_y\sum_{y-links}\hat{\sigma}_j^y\hat{\sigma}_k^y-J_z\sum_{z-links}\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_k^z} \tag{15.220}$$

可以发现,每个六角形(plaquett)上的六自旋算符乘积是

$$\hat{W}_p=-\hat{\sigma}_1^x\hat{\sigma}_2^z\hat{\sigma}_3^y\hat{\sigma}_4^x\hat{\sigma}_5^z\hat{\sigma}_6^y \tag{15.221}$$

其重要性质是与哈密顿量对易$[\hat{W}_p,\hat{H}_{KH}]=0$且$\hat{W}_p^2=1$.这样每个本征态都能用$\hat{W}_p=\pm1$标记,即$|\Psi\rangle=|\{W_p=\pm1\}\rangle$.事实上,$\hat{W}_p=-1$代表所谓的$Z_2$涡旋激发,可以看成体系低能下的一类原激发,其具体性质在后面会具体讨论.

注意到六角晶格是一个双子格系统,因此我们可以把系统分成子格A和B,如果以某一个A格点为参考点,那么最近邻是三个子格B的格点.设相应的晶格长度为$a=1$, 那么以A子格格点出发到B子格格点的三个最近邻矢量是$\delta_x=(1,0),\ \delta_y=(-\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}),\ \delta_z=(-\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2})$. 这样模型更明确的形式是

$$H_{KH}=-J_x\sum_j\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_{j+\delta_x}^x-J_y\sum_j\hat{\sigma}_j^y\hat{\sigma}_{j+\delta_y}^y-J_z\sum_j\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_{j+\delta_z}^z \tag{15.222}$$

这里j对所有A子格求和.

Majorana费米子

若一个费米子算符$\hat{\eta}=\hat{\eta}^\dagger$,我们称之为Majorana费米子算符.其反对易关系是$\{\hat{\eta},\hat{\eta}\}=2$或直接写成$\hat{\eta}^2=1$. 注意到任意的复(Dirac)费米子算符$\hat{d}$都能够写

成两个Majorana费米子:

$$\hat{d} = \frac{1}{2}(\hat{\eta}_1 + i\hat{\eta}_2) \tag{15.223}$$

而$\hat{d}^\dagger = (\hat{\eta}_1 - i\hat{\eta}_2)/2$.这里$\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2$是两种不同的Majorana费米子. 这样有

$$\hat{H} = \varepsilon(\hat{d}^\dagger\hat{d} - 1/2) = \frac{\varepsilon}{4}(\hat{\eta}_1 - i\hat{\eta}_2)(\hat{\eta}_1 + i\hat{\eta}_2) - \frac{\varepsilon}{2} = \frac{\varepsilon}{4}(\hat{\eta}_1^2 + \hat{\eta}_2^2 + i(\hat{\eta}_1\hat{\eta}_2 - \hat{\eta}_2\hat{\eta}_1) - 2) \tag{15.224}$$

利用$\hat{\eta}_1^2 = \hat{\eta}_2^2 = 1$可得

$$\hat{H} = \frac{i\varepsilon}{4}(\hat{\eta}_1\hat{\eta}_2 - \hat{\eta}_2\hat{\eta}_1) = \frac{i}{4}\begin{pmatrix} \hat{\eta}_1 & \hat{\eta}_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ -\varepsilon & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\eta}_1 \\ \hat{\eta}_2 \end{pmatrix} = \frac{i}{4}\sum_{m,n=1}^{2} A_{mn}\hat{\eta}_m\hat{\eta}_n \tag{15.225}$$

注意到矩阵A_{mn}是实反对称矩阵.(也叫做斜对称矩阵(skew-symmetric metrix),满足$A = -A^T$)更一般地,N个复费米子能用$2N$个Majorana费米子表示,哈密顿量写成:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N}\varepsilon_j(\hat{d}_j^\dagger\hat{d}_j - 1/2) = \frac{i}{2}\sum_{j=1}^{N}\varepsilon_j\hat{\eta}_{2j-1}\hat{\eta}_{2j} = \frac{i}{4}\sum_{m,n=1}^{2N} A_{m,n}\hat{\eta}_m\hat{\eta}_n \tag{15.226}$$

这里$\hat{d}_j = (\hat{\eta}_{2j-1} - i\hat{\eta}_{2j})/2$.换句话说,$A$矩阵是$2N \times 2N$矩阵,其有$2N$个本征值,但真正独立的只有$N$个.因此,当我们需要计算自由Majorana费米子体系的本征值时实际上需要把Majorana费米子拼装成普通的费米子,此时就可以得到正确的本征值.

自旋的Majorana费米子表示

接下来,为了求解该模型,我们引入四类Majorana费米子$\hat{a}^x, \hat{a}^y, \hat{a}^z, \hat{c}$:

$$\hat{\sigma}_j^x = i\hat{a}_j^x\hat{c}_j \tag{15.227}$$

$$\hat{\sigma}_j^y = i\hat{a}_j^y\hat{c}_j \tag{15.228}$$

$$\hat{\sigma}_j^z = i\hat{a}_j^z\hat{c}_j. \tag{15.229}$$

它们满足如下反对易关系:

$$\{\hat{a}_j^\alpha, \hat{a}_k^\beta\} = 2\delta_{jk}\delta_{\alpha\beta}, \quad \{\hat{c}_j, \hat{c}_k\} = 2\delta_{jk}, \quad \{\hat{a}_j^\alpha, \hat{c}_k\} = 0 \tag{15.230}$$

现在,对于一个$S = 1/2$量子自旋,其自由度为二,但是这里有四个Majorana费米子,每两个Majorana费米子可构成一个正常费米子,这样四个Majorana费米子的自由度是四.也就是说,为了得到自旋的正确表示,我们需要把Majorana费米子态投影到物理的态空间,此时的投影算符是

$$\hat{P} = \prod_j\left(\frac{1 + \hat{D}_j}{2}\right), \quad \hat{D}_j = \hat{a}_j^x\hat{a}_j^y\hat{a}_j^z\hat{c}_j \tag{15.231}$$

由于$\hat{D}_j^2=1$因此$\hat{D}_j=\pm1$.由于$\hat{D}_j=-1$时$\hat{P}=0$,因此满足$\hat{D}_j=-1$的态自然不会有贡献而$\hat{D}_j=1$的态被保留.那么$\hat{D}_j=1$ 在物理上是否正确的呢？我们知道自旋算符满足对易关系$[\hat{\sigma}_j^x,\hat{\sigma}_j^y]=2i\hat{\sigma}^z$,代入Majorana费米子表示可得

$$\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_j^y=\hat{a}_j^x\hat{a}_j^y\hat{c}_j\hat{c}_j=\hat{a}_j^x\hat{a}_j^y \tag{15.232}$$

显然,如果在上式右边插入$\hat{D}_j=1$就得到

$$\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_j^y=\hat{a}_j^x\hat{a}_j^y\overbrace{\hat{a}_j^x\hat{a}_j^y\hat{a}_j^z\hat{c}_j}^{=\hat{D}_j}=-\hat{a}_j^z\hat{c}_j=i\hat{\sigma}_j^z \tag{15.233}$$

这样我们自然会得到正确的对易关系$[\hat{\sigma}_j^x,\hat{\sigma}_j^y]=2i\hat{\sigma}^z$,这说明$\hat{D}_j=1$是正确的选择.这样任意用$\hat{a}^x,\hat{a}^y,\hat{a}^z,\hat{c}$表示的波函数$|\Psi\{\hat{a}^x,\hat{a}^y,\hat{a}^z,\hat{c}\}\rangle$可以用$\hat{P}$投影到物理上合理的波函数:

$$|\Psi_{phy}\rangle=\hat{P}|\Psi\{\hat{a}^x,\hat{a}^y,\hat{a}^z,\hat{c}\}\rangle. \tag{15.234}$$

利用自旋算符的Majorana费米子表示可以得到三个方向耦合的费米子表示:

$$\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_k^x=\hat{a}_j^x\hat{a}_k^x\hat{c}_j\hat{c}_k \tag{15.235}$$

$$\hat{\sigma}_j^y\hat{\sigma}_k^y=\hat{a}_j^y\hat{a}_k^y\hat{c}_j\hat{c}_k \tag{15.236}$$

$$\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_k^z=\hat{a}_j^z\hat{a}_k^z\hat{c}_j\hat{c}_k \tag{15.237}$$

这样,体系的哈密顿量是

$$\hat{H}=-\sum_{j\in A}\left(J_x\hat{a}_j^x\hat{a}_{j+\delta_x}^x\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta_x}+J_y\hat{a}_j^y\hat{a}_{j+\delta_y}^y\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta_y}+J_z\hat{a}_j^z\hat{a}_{j+\delta_z}^z\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta_z}\right). \tag{15.238}$$

让我们定义如下算符,

$$\hat{u}_{j,j+\delta_\alpha}^\alpha=i\hat{a}_j^\alpha\hat{a}_{j+\delta_\alpha}^\alpha \tag{15.239}$$

有时候也简写为$\hat{u}_{ij}^\alpha=i\hat{a}_i^\alpha\hat{a}_j^\alpha$,显然$\hat{u}_{ji}^\alpha=-\hat{u}_{ij}^\alpha$.这样哈密顿量可以写成

$$\hat{H}=i\sum_{j\in A}\left(J_x\hat{u}_{j,j+\delta_x}^x\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta_x}+J_y\hat{u}_{j,j+\delta_y}^y\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta_y}+J_z\hat{u}_{j,j+\delta_z}^z\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta_z}\right). \tag{15.240}$$

可以看到$\hat{u}_{j,j+\delta_\alpha}^\alpha$彼此对易,并且也与$\hat{H}$对易.这样,在系统的任意本征态下,我们可以用$\hat{u}_{j,j+\delta_\alpha}^\alpha$的本征值$u_{j,j+\delta_\alpha}^\alpha=\pm1$代替算符本身,[73] 这样体系的哈密顿量就是一个自由Majorana费米子模型:

$$\hat{H}=\frac{i}{2}\sum_{j\in A,\delta}A_{j,j+\delta}\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta},\quad A_{j,j+\delta}=\begin{cases}2J_xu_{j,j+\delta_x}^x, & \delta=\delta_x;\\ 2J_yu_{j,j+\delta_y}^y, & \delta=\delta_y;\\ 2J_zu_{j,j+\delta_z}^z, & \delta=\delta_z.\end{cases} \tag{15.241}$$

类似于自由Majorana费米子,我们定义了跃迁矩阵$\hat{A}_{j,j+\delta}$.

[73]注意到$(\hat{u}_{j,j+\delta_\alpha}^\alpha)^2=-\hat{a}_j^\alpha\hat{a}_{j+\alpha}^\alpha\hat{a}_j^\alpha\hat{a}_{j+\alpha}^\alpha=(\hat{a}_j^\alpha)^2(\hat{a}_{j+\alpha}^\alpha)^2=1$

- $\hat{u}^{\alpha}_{j,j+\delta_\alpha}$是定义在格点之间的键上的算符,注意到它的取值为±1,那么它可以看成是一类定义在link上的Ising场的算符,如果我们定义局域的Z_2规范变换使得$c_j \to -c_j$,如果$\hat{u}^{\alpha}_{j,j+\delta_\alpha}$满足$\hat{u}^{\alpha}_{j,j+\delta_\alpha} \to -\hat{u}^{\alpha}_{j,j+\delta_\alpha}$, 那么整个哈密顿量$Z_2$规范不变,而$\hat{u}^{\alpha}_{j,j+\delta_\alpha}$就是$Z_2$/Ising规范场.换句话说我们得到的变换后的模型实际上是一个Z_2晶格规范理论模型,只不过在该模型中规范场本身没有动能项,可以得到所有本征值,因而在规范场自身的本征态下来看,规范场是静态的.

- 在这个意义上,也就是把原始的相互作用的量子自旋模型通过Majorana费米子表示转化为静态(背景)规范场下的自由Majorana费米子系统,我们说该模型精确可解.

注意,在这个自由Majorana费米子模型中,三个方向的跃迁是不相等的.为了处理方便,我们对称化哈密顿量,也就是把B子格到A子格的耦合也考虑上,这样要求求和对A 和B子格求,然后再除以因子2.

$$\hat{H} = \frac{i}{4}\sum_{\langle j,k\rangle} A_{j,k}\hat{c}_j\hat{c}_k = \frac{i}{4}\left[\sum_{j\in A,\delta} A_{j,j+\delta}\hat{c}_j\hat{c}_{j+\delta} + \sum_{j\in B,\delta} A_{j,j-\delta}\hat{c}_j\hat{c}_{j-\delta}\right] \tag{15.242}$$

注意到B到A子格的跃迁其方向矢量恰好与A到B的相反,因此有$\hat{c}_j\hat{c}_{j-\delta}$的形式.

现在的问题是link上的Z_2规范场到底如何选取？对于一般的本征态,规范场构型并不容易寻找,但是对于基态,根据所谓的Lieb定理,当前定义在六角晶格上的系统,其基态u^{α}_{jk} 可以选为

$$u^{\alpha}_{jk} = \begin{cases} +1, & \text{j=even sublattice;} \\ -1, & \text{others.} \end{cases} \tag{15.243}$$

也就是说如果我们假定A子格是偶数子格,那么以为A为中心到三个最近邻B子格格点的$u^{x}_{jk}, u^{y}_{jk}, u^{z}_{jk}$都取为+1,相反,$B$为中心到三个最近邻$A$子格格点的$u^{x}_{jk}, u^{y}_{jk}, u^{z}_{jk}$取为−1.

这样我们发现(注意在对B子格为中心进行求和时移动了格点指标$j \to j+\delta$)

$$\hat{H} = \frac{i}{4}\sum_{j}\left[2J_x(\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_x} - \hat{c}_{Bj+\delta_x}\hat{c}_{Aj}) + 2J_y(\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_y} - \hat{c}_{Bj+\delta_y}\hat{c}_{Aj}) + 2J_z(\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_z} - \hat{c}_{Bj+\delta_z}\hat{c}_{Aj})\right] \tag{15.244}$$

如果我们并不要求对称形式,那么上述哈密顿量也可以写成

$$\hat{H} = i\sum_{j\in A}(J_x\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_x} + J_y\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_y} + J_z\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_z}) = \sum_{j\in A,\alpha=x,y,z} iJ_\alpha\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_\alpha}. \tag{15.245}$$

自由Majorana费米子模型的对角化

接下来做傅里叶变换,

$$\hat{c}_j = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_k e^{ikR_j}\hat{c}_k$$
$$\hat{c}_k = \frac{1}{\sqrt{N_s}}\sum_{j=1}^{N_s} e^{-ikR_j}\hat{c}_j \tag{15.246}$$

这里N_s对应的是我们考虑体系元胞的数目,(格点总数自然是$2N_s$)而对k的求和是六角晶格的第一布里渊区.这样傅里叶变换后的费米子算符满足反对易关系

$$[\hat{c}_{Ak},\hat{c}_{A-k'}]_+ = \frac{1}{N_s}\sum_{j,j'} e^{-ikR_j}e^{ik'R_{j'}}[c_{Aj},c_{Aj'}]_+ = \frac{1}{N_s}\sum_{j,j'} e^{-ikR_j}e^{ik'R_{j'}}2\delta_{j,j'} = 2\delta_{k,k'} \tag{15.247}$$

这说明$\hat{c}_{A-k}$相当于是$\hat{c}_{Ak}$对应的费米子产生算符,即有$\hat{c}_{A-k}\equiv\hat{c}^\dagger_{Ak}$,同理有$\hat{c}_{B-k}\equiv\hat{c}^\dagger_{Bk}$.

对于x方向的跃迁有

$$\begin{aligned}
\sum_j \hat{c}_{Aj}\hat{c}_{Bj+\delta_x} &= \frac{1}{N_s}\sum_j\sum_k\sum_{k'} e^{ik'R_j}e^{ik(R_j+\delta_x)}\hat{c}_{Ak'}\hat{c}_{Bk} = \sum_k\sum_{k'}\delta_{k+k'=0}e^{ik\delta_x}\hat{c}_{Ak'}\hat{c}_{Bk}\\
&= \sum_k e^{ik\delta_x}\hat{c}_{A-k}\hat{c}_{Bk} = \frac{1}{2}\sum_k(e^{ik\delta_x}\hat{c}_{A-k}\hat{c}_{Bk} + e^{-ik\delta_x}\hat{c}_{Ak}\hat{c}_{B-k})\\
&= \frac{1}{2}\sum_k(e^{ik\delta_x}\hat{c}_{A-k}\hat{c}_{Bk} - e^{-ik\delta_x}\hat{c}_{B-k}\hat{c}_{Ak})\\
&= {\sum_k}'\begin{pmatrix}\hat{c}_{A-k} & \hat{c}_{B-k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & e^{ik\delta_x}\\ -e^{-ik\delta_x} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{Ak}\\ \hat{c}_{Bk}\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{15.248}$$

这里$\sum'$说明我们只对半个布里渊区求和(因为$\hat{c}_k$与$\hat{c}_{-k}$不完全独立,独立自由度只有一半的k).同理可得其他两个方向跃迁对应的傅里叶变换结果.综合三个方向跃迁可得系统在动量空间的哈密顿是

$$\hat{H} = \frac{i}{4}{\sum_k}'(\hat{c}_{A-k},\hat{c}_{B-k})\begin{pmatrix}0 & 4f(k)\\ -4f^*(k) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{Ak}\\ \hat{c}_{Bk}\end{pmatrix} \tag{15.249}$$

这里

$$f(k) = J_x e^{ik\delta_x} + J_y e^{ik\delta_y} + J_z e^{ik\delta_z} = J_x e^{-ik_x} + J_y e^{i\frac{k_x}{2}}e^{-i\frac{\sqrt{3}k_x}{2}} + J_z e^{i\frac{k_x}{2}}e^{i\frac{\sqrt{3}k_x}{2}} \tag{15.250}$$

而$f(-k)=f^*(k)$.这样

$$\hat{H} = {\sum_k}'(\hat{c}_{A-k},\hat{c}_{B-k})\begin{pmatrix}0 & if(k)\\ -if^*(k) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{Ak}\\ \hat{c}_{Bk}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sum_k(\hat{c}^\dagger_{Ak},\hat{c}^\dagger_{Bk})\begin{pmatrix}0 & if(k)\\ -if^*(k) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{Ak}\\ \hat{c}_{Bk}\end{pmatrix} \tag{15.251}$$

现在,让我们设$f(k)=|f(k)|e^{i\theta_k}$并定义如下的Bogoliubov变换:

$$\begin{pmatrix}\hat{d}_{k+}\\ \hat{d}_{k-}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mu_k & \nu_k\\ -\nu_k^* & \mu_k^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{Ak}\\ \hat{c}_{Bk}\end{pmatrix} \tag{15.252}$$

这里$\mu_k=\frac{1}{\sqrt{2}},\nu_k=\frac{i}{\sqrt{2}}e^{i\theta_k}$.这样哈密顿量可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}\sum_k(\hat{d}_{k+}^\dagger,\hat{d}_{k+}^\dagger)\begin{pmatrix}\mu_k & \nu_k\\ -\nu_k^* & \mu_k^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & if(k)\\ -if^*(k) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu_k & \nu_k\\ -\nu_k^* & \mu_k^*\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}\hat{d}_{k+}\\ \hat{d}_{k-}\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\sum_k(\hat{d}_{k+}^\dagger,\hat{d}_{k+}^\dagger)\begin{pmatrix}|f(k)| & 0\\ 0 & -|f(k)|\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{d}_{k+}\\ \hat{d}_{k-}\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\sum_k|f(k)|(\hat{d}_{k+}^\dagger\hat{d}_{k+}-\hat{d}_{k-}^\dagger\hat{d}_{k-}).\end{aligned} \tag{15.253}$$

注意到(利用$\theta_k=-\theta_{-k}$)

$$ie^{-i\theta_k}\hat{d}_{k-}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}_{A-k}+ie^{i\theta_{-k}}\hat{c}_{B-k})=d_{-k+}^\dagger \tag{15.254}$$

也就是$\hat{d}_{k-}^\dagger\hat{d}_{k-}=\hat{d}_{-k+}\hat{d}_{-k+}^\dagger$,这样我们发现

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_k|f(k)|(2\hat{d}_{k+}^\dagger\hat{d}_{k+}-1)=\sum_k|f(k)|\hat{d}_{k+}^\dagger\hat{d}_{k+}-\frac{1}{2}\sum_k|f(k)| \tag{15.255}$$

体系的能谱是

$$E_k=|f(k)|=\left|J_xe^{-ik_x}+J_ye^{i\frac{k_x}{2}}e^{-i\frac{\sqrt{3}k_x}{2}}+J_ze^{i\frac{k_x}{2}}e^{i\frac{\sqrt{3}k_x}{2}}\right| \tag{15.256}$$

其具体形式是

$$E_k=\sqrt{J_x^2+J_y^2+J_z^2+2J_xJ_y\cos\left(\frac{3}{2}k_x-\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)+2J_xJ_z\cos\left(\frac{3}{2}k_x+\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)+2J_yJ_z\cos(\sqrt{3}k_y)} \tag{15.257}$$

- 除了这里采用的隶粒子处理,Kitaev honeycomb模型也可通过Jordan-Wigner 变换求解.[74](如图15.36)利用Jordan-Wigner变换求解可免去约束对求解激发态和热力学性质的困难.

- 当把Kitaev honeycomb投影至一维时可得一些有趣的自旋链模型,(图15.36(c),(d))这些模型显示无能隙和有能隙自旋液体并可成为与巡游自由度耦合的出发点.[75]

[74][Feng,Zhang,Xiang,Topological Characterization of Quantum Phase Transitions in a Spin−1/2 Model,Phys.Rev.Lett. **98**,087204(2007)]

[75][Le Hur,Soret,Yang,Majorana spin liquids,topology,and superconductivity in ladders,Phys.Rev.B **96**,205109(2017)]

Kitaev honeycomb模型的物理性质

首先我们分析系统的能谱E_k,可以看到当自旋各向异性耦合J_x, J_y, J_z其中某一个占主导地位时,例如$|J_x| \gg |J_y|, |J_z|$ 时,

$$E_k \simeq |J_x|\sqrt{1+2\frac{J_y}{J_x}\cos\left(\frac{3}{2}k_x-\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)+2\frac{J_z}{J_x}\cos\left(\frac{3}{2}k_x+\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)} \sim |J_x|+\mathcal{O}(1) \tag{15.258}$$

这说明此时系统的费米子激发都是有能隙的.

当自旋耦合接近各向同性时$J_x = J_y = J_z = J$,有

$$E_k = |J|\sqrt{1+4\left(\cos\frac{3}{2}k_x+\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}, \tag{15.259}$$

注意到这个色散关系与石墨烯中电子的色散(公式10.145)相同,两者的差别在于后者是通常的费米子因而也包含负能量部分$-E_k$.根据石墨烯的结果我们知道E_k在布里渊区的六个顶点(也就是K或K'点,如图10.4.1)能隙为零,这说明系统的激发是无能隙的.如果在这些节点展开能谱就会发现相应的低能有效哈密顿实际上描述无质量的Majorana费米子,(石墨烯时是无质量的Dirac费米子)因此可以说各向同性极限下的Kitaev honeycomb模型的低能物理由无质量Majorana费米子描述.对于二维的无质量Majorana 费米子,其色散与Dirac 费米子一致(差别在于只有正能部分),态密度是能量的线性函数,这会导致温度平方依赖的热容和磁化率的温度线性行为.

- 通过这个能谱,我们发现体系在强各向异性时(某一个方向的耦合主导)处于有能隙的自旋液体态,(通过接下来的分析发现此时系统的激发是类似于toric-code 模型当中的阿贝尔任意子).而当三方向耦合强度差不多时,系统处于无能隙的自旋液体态.

准粒子激发

除了Majorana费米子,类似toric-code,系统还可以有涡旋激发,也就是六自旋乘积算符$\hat{W}_p = -1$.当然,从哈密顿量来看,似乎更为直接的激发是格点之间link上的变量$\hat{u}^\alpha_{jk} = i\hat{a}^\alpha_j\hat{a}^\alpha_{k=j+\delta_\alpha}$从+1变为−1.但是,需要指出$\hat{u}^\alpha_{jk}$是$Z_2$ 规范场其取值实际上依赖于所选择的规范条件,或者说它不是规范不变量而已并不适合作为物理上合适的低能激发.而对于六自旋算符$\hat{W}_p = -\hat{\sigma}^x_1\hat{\sigma}^z_2\hat{\sigma}^y_3\hat{\sigma}^x_4\hat{\sigma}^z_5\hat{\sigma}^y_6$(如图15.34)其完全用物理自旋表示,自然是规范不变量,用Majorana费米子可以表示为,

$$\hat{W}_p = \hat{a}^x_1\hat{c}_1\hat{a}^z_2\hat{c}_2\hat{a}^y_3\hat{c}_3\hat{a}^x_4\hat{c}_4\hat{a}^z_5\hat{c}_5\hat{a}^y_6\hat{c}_6 \tag{15.260}$$

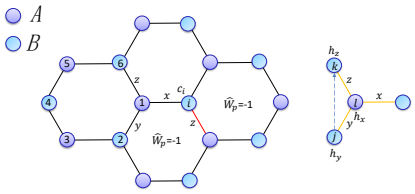


Figure 15.34: (左图)六自旋乘积$\hat{W}_p$,改变u^{α}_{jk}产生的涡旋;(右图)磁场诱导的次近邻格点间的耦合.

利用$\hat{D}_j = \hat{a}^x_j\hat{a}^y_j\hat{a}^z_j\hat{c}_j = 1$可以把上式中所有$\hat{a}^{\alpha}\hat{c}$表示为$\hat{a}^{\beta}\hat{a}^{\gamma}$的形式,例如$\hat{a}^x_1\hat{c}_1 = \hat{a}^z_1\hat{a}^y_1$.我们发现,

$$\begin{aligned}\hat{W}_p &= (\hat{a}^z_1\hat{a}^y_1)(\hat{a}^y_2\hat{a}^x_2)(-\hat{a}^z_3\hat{a}^x_3)(\hat{a}^z_4\hat{a}^y_4)(\hat{a}^y_5\hat{a}^x_5)(-\hat{a}^z_6\hat{a}^x_6)\\ &= \hat{a}^z_1(\hat{a}^y_1\hat{a}^y_2)(\hat{a}^x_2\hat{a}^x_3)(\hat{a}^z_3\hat{a}^z_4)(\hat{a}^y_4\hat{a}^y_5)(\hat{a}^x_5\hat{a}^x_6)(\hat{a}^z_6)\\ &= -\hat{u}^y_{12}\hat{u}^x_{23}\hat{u}^z_{34}\hat{u}^y_{45}\hat{u}^x_{56}\hat{u}^z_{61} \qquad (15.261)\end{aligned}$$

这说明$\hat{W}_p$可以表示为六角形六个link上Z_2规范场的乘积.若$1,3,5$代表A子格,那么$2,4,6$代表B子格,这样基态时 $\hat{W}_p = (-1)(+1)^3(-1)^3 = 1$.如果一个link上的$Z_2$规范场从1变为$-1$而其他规范场依然处于1,那么以这个link为边的两个相邻六角形所对应的$\hat{W}_p$取值将会从1变为-1,也就是说Z_2规范场的激发会产生两个涡旋激发.(图15.34在i和$i+\delta_z$格点间的link上规范场从1变为-1导致了附近两个涡旋的产生,用$\hat{W}_p = -1$表示)这类激发在Kitaev 模型中总是存在能隙$\sim 0.26J$(对于$J_x = J_y = J_z = J$)

当然,更为明确的理解涡旋的方式是把Kitaev模型与前面讨论过的toric-code模型相联系.假设$J_x = J_y = 0, J_z > 0$,那么系统退耦和成一些列独立的两自旋系统(图15.35中灰色阴影)

$$H = -J_z \sum_{z-links} \hat{\sigma}^z_j\hat{\sigma}^z_k \qquad (15.262)$$

两自旋的基态是$|\uparrow\uparrow\rangle$或$|\downarrow\downarrow\rangle$,因此整个系统的基态高度简并.当考虑$J_x, J_y << J_z$时,利用四阶微扰论可以得到如下有效哈密顿量:

$$\hat{H} = const. - \frac{J^2_x J^2_y}{16J^2_z}\sum_p \hat{Q}_p \qquad \hat{Q}_p = \hat{\sigma}^y_{p1}\hat{\sigma}^x_{p2}\hat{\sigma}^y_{p3}\hat{\sigma}^x_{p4} \qquad (15.263)$$

这里$\hat{\sigma}^z_p$自旋所作用的两个能级由原先两自旋系统的基态$|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$定义:

$$|\Uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\Downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \qquad (15.264)$$

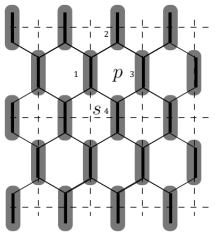


Figure 15.35: Kitaev的honeycomb模型的各向异性极限对应toric-code模型.

这样我们就把六角晶格的自旋模型变成了正方晶格自旋模型.进一步通过旋转自旋就得到了toric-code模型.

此外,如果我们考虑体系任意本征态$|\Psi\rangle$的自旋关联函数:[76]

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t)=\langle\Psi|\hat{\sigma}_i^{\alpha}(t)\hat{\sigma}_j^{\beta}|\Psi\rangle=\begin{cases} g_{\langle i,j\rangle_\alpha}(t)\delta^{\alpha\beta}, & i,j\in\text{NNH};\\ 0, & \text{others.}\end{cases} \tag{15.265}$$

这说明只有最近邻自旋之间才有关联且只存在于相应的方向,($\langle i,j\rangle_\alpha$代表$i,j$是最近邻且$j=i+\delta_\alpha$,通常选择$i$代表$A$子格而$j$ 代表B子格)也就是说在x-link 方向$\hat{\sigma}_i^x(t)\hat{\sigma}_{i+\delta_x}^x$的期望值非零其他方向自旋关联为零,对$y,z-$link有类似的结果.因此Kiatev 模型中自旋关联是极端短程的,这与体系自旋液体态的本质相符合.为了理解这个结果,我们可以定义所谓的link费米子(复费米子而非Majorana费米子),也就是定义

$$\hat{f}_{\langle i,j\rangle_\alpha}=\frac{1}{2}(\hat{a}_i^{\alpha}+i\hat{a}_j^{\alpha}) \tag{15.266}$$

这样,link上的Z_2规范场$\hat{u}_{\langle ij\rangle_\alpha}=i\hat{a}_i^{\alpha}\hat{a}_j^{\alpha}$可以表示为

$$\hat{u}_{\langle ij\rangle_\alpha}=2\hat{f}_{\langle i,j\rangle_\alpha}^{\dagger}\hat{f}_{\langle i,j\rangle_\alpha}-1. \tag{15.267}$$

这说明规范场都取为+1的基态对应着所有link上都存在一个费米子的情况.这样链接i,j格点的link所在格点的自旋可以表示为

$$\hat{\sigma}_i^{\alpha}=i\hat{a}_i^{\alpha}\hat{c}_i=i(\hat{f}_{\langle i,j\rangle_\alpha}+\hat{f}_{\langle i,j\rangle_\alpha}^{\dagger})\hat{c}_i,\quad \hat{\sigma}_j^{\alpha}=i\hat{a}_j^{\alpha}\hat{c}_j=(\hat{f}_{\langle i,j\rangle_\alpha}-\hat{f}_{\langle i,j\rangle_\alpha}^{\dagger})\hat{c}_j. \tag{15.268}$$

这样我们发现任意格点的自旋算符$\hat{\sigma}_i^{\alpha}$不仅产生Majorana费米子$\hat{c}_i$还会改变与i相连的$\alpha-$link上的规范场取值.假如对基态作用,那么就会在i格点激发$\hat{c}$类型的Majorana费米子并在附近产生两个涡旋激发.

因此,用link费米子表示的自旋关联函数是

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t)=i\langle\Psi|(\hat{f}_{\langle i,l\rangle_\alpha}(t)+\hat{f}_{\langle i,l\rangle_\alpha}^{\dagger}(t))\hat{c}_i(t)(\hat{f}_{\langle j,k\rangle_\alpha}-\hat{f}_{\langle j,k\rangle_\beta}^{\dagger})\hat{c}_j|\Psi\rangle. \tag{15.269}$$

[76]详细讨论可以参考[Baskaran,Mandal,Shankar,Exact Results for Spin Dynamics and Fractionalization in the Kitaev Model,Phys.Rev.Lett. **98**,247201(2007)]

注意到任意的基态可以分解为规范场构型$|u\rangle$以及规范场构型下的Majorana费米子的本征态$|c(u)\rangle$,即$|\Psi\rangle=|u\rangle|c(u)\rangle$.这样自旋关联函数中$(\hat{f}_{\langle j,k\rangle_\beta}-\hat{f}^\dagger_{\langle j,k\rangle_\beta})\hat{c}_j$作用于波函数表示在$|c(u)\rangle$中的$j$格点产生Majorana费米子,然后再改变$j,k$格点所在的$\beta-$link上的规范场取值,此时波函数$|u\rangle$变为$|u,-u_{\langle j,k\rangle_\beta}\rangle$.另一方面,$(\hat{f}_{\langle i,l\rangle_\alpha}(t)+\hat{f}^\dagger_{\langle i,l\rangle_\alpha}(t))\hat{c}_i(t)$作用于波函数相当于在$t$时刻改变规范场$(\langle u|\to\langle u,-u_{\langle i,l\rangle_\alpha}|)$并在$i$格点产生Majorana费米子.显然为了让自旋关联函数非零,我们必然要求$\langle u,-u_{\langle i,l\rangle_\alpha}|u,-u_{\langle j,k\rangle_\beta}\rangle$非零,这只能通过$u_{\langle i,l\rangle_\alpha}=u_{\langle j,k\rangle_\beta}$实现,注意到我们设$i,j$分别属于不同子格,那么意味着$j=i+\delta_\alpha,\alpha=\beta$.换句话说只有相邻格点自旋才有关联,即$S^{\alpha\beta}_{ij}(t)\propto\delta_{j=i+\delta_\alpha}\delta^{\alpha\beta}$.

对于静态关联,例如基态时的最近邻关联函数$\langle\Psi_g|\hat{\sigma}^z_i\hat{\sigma}^z_j|\Psi_g\rangle=S^{zz}_{\langle i,j\rangle_z}$有

$$S^{zz}_{\langle i,j\rangle_z}=\frac{\sqrt{3}}{16\pi^2}\int dk_1dk_2\cos\theta(k_1,k_2),\tag{15.270}$$

这里$\cos\theta(k_1,k_2)=\frac{\varepsilon_k}{E_k}$,$\varepsilon_k=2(J_x\cos k_1+J_y\cos k_2+J_z)$,$\Delta_k=2(J_x\sin k_1+J_y\sin k_2)$,$E_k=\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta_k^2}$.$k_1=\vec{k}\cdot\vec{n}_1,k_2=\vec{k}\cdot vecn_2$,$\vec{n}_{1,2}=\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_y\pm\frac{1}{2}\vec{e}_x$.在各向同性点$J_x=J_y=J_z=J$,$S^{zz}_{\langle i,j\rangle_z}=0.52$.

- 动力学自旋关联函数的傅里叶变换$\sum_\alpha S^{\alpha\alpha}(\vec{q},\omega)$可以通过中子散射直接测量,其理论结果由上述形式通过数值计算获得.[77]

- 如果考虑体系的纠缠熵,注意到体系的本征态总是分解为Z_2规范场与Majorana费米子,那么相应的纠缠熵自然是两个体系的相加,即$S=S_u+S_c$.S_u是Z_2规范场的贡献,其满足纠缠的面积律并有$-\ln 2$的拓扑纠缠熵,S_c由Majorana费米子贡献,也满足面积律. [78]

Kitaev模型的Jordan-Wigner变换求解与热力学

如图15.36(a)和(b)所示,我们可以把六角晶格等价变换至砖墙晶格,此时我们把砖墙晶格的每一行用l标记,每一列用j标记,这样每一个格点的自旋就用$\hat{\sigma}_{il}$标记.(我们规定A子格满足$j+l$为偶数而B子格满足$j+l$为奇数)这样H_{KN}可以改写为

$$H_{KN}=-\sum_{j+l=even}(J_x\hat{\sigma}^x_{il}\hat{\sigma}^x_{i+1,l}+J_y\hat{\sigma}^y_{il}\hat{\sigma}^y_{i-1,l}+J_z\hat{\sigma}^z_{il}\hat{\sigma}^z_{i,l+1}).\tag{15.271}$$

对于这个自旋模型,注意砖墙晶格的每一行可以看成XY自旋链,这样整个模型就是很多自旋链通过$\hat{\sigma}^z\hat{\sigma}^z$耦合而成.如果采用Jordan-Wigner变换,那么链内的耦

[77][Knolle,Kovrizhin,Chalker,Moessner,Dynamics of a Two-Dimensional Quantum Spin Liquid:Signatures of Emergent Majorana Fermions and Fluxes,Phys.Rev.Lett. **112**,207203(2014)]

[78][Yao,Qi,Entanglement Entropy and Entanglement Spectrum of the Kitaev Model,Phys.Rev.Lett. **105**,080501(2010)]

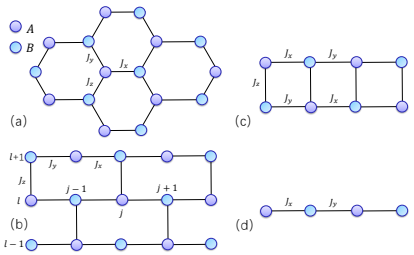


Figure 15.36: 定义在六角晶格上的Kitaev honeycomb模型(a)可以变形为砖墙晶格(b),同时砖墙晶格可以进一步简化为自旋阶梯(c)和自旋链(d).

合自然是费米子的二次型而链间是简单的费米子相互作用,具体而言我们有(回忆3.3.1节的讨论):

$$\begin{aligned}
\hat{S}^{+}_{jl} &= \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^{x}_{jl} + i\hat{\sigma}^{y}_{jl}) = \hat{f}^{\dagger}_{jl} e^{i\phi_{jl}}, \quad \phi_{jl} = \pi \sum_{1\leqslant j'<j,l} \hat{f}^{\dagger}_{j'l}\hat{f}_{j'l} + \pi \sum_{i,1\leqslant l'<l} \hat{f}^{\dagger}_{il'}\hat{f}_{il'} \\
\hat{S}^{-}_{jl} &= \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^{x}_{jl} - i\hat{\sigma}^{y}_{jl}) = \hat{f}_{jl} e^{i\phi_{jl}} \\
\hat{\sigma}^{z}_{jl} &= 2\hat{f}^{\dagger}_{jl}\hat{f}^{\dagger}_{jl} - 1,
\end{aligned} \tag{15.272}$$

注意Jordan-Wigner弦的相位ϕ_{jl}即依赖于同一个自旋链费米子的数目(第一项)也依赖于其他自旋链的贡献(第二项).因此,

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}^{x}_{jl}\hat{\sigma}^{x}_{j+1,l} &= (\hat{f}^{\dagger}_{jl} + \hat{f}_{jl}) e^{i\pi \hat{f}^{\dagger}_{jl}\hat{f}_{jl}} (\hat{f}^{\dagger}_{j+1,l} + \hat{f}_{j+1,l}) = (\hat{f}^{\dagger}_{jl} - \hat{f}_{jl})(\hat{f}^{\dagger}_{j+1,l} + \hat{f}_{j+1,l}) \\
\hat{\sigma}^{y}_{jl}\hat{\sigma}^{y}_{j-1,l} &= \frac{\hat{f}^{\dagger}_{jl} - \hat{f}_{jl}}{i} e^{i\pi \hat{f}^{\dagger}_{j-1,l}\hat{f}_{j-1,l}} \frac{\hat{f}^{\dagger}_{j-1,l} - \hat{f}_{j-1,l}}{i} = (\hat{f}^{\dagger}_{jl} - \hat{f}_{jl})(\hat{f}^{\dagger}_{j-1,l} + \hat{f}_{j-1,l}) \\
\hat{\sigma}^{z}_{jl}\hat{\sigma}^{z}_{j,l+1} &= (2\hat{f}^{\dagger}_{jl}\hat{f}_{jl} - 1)(2\hat{f}^{\dagger}_{j,l+1}\hat{f}_{j,l+1} - 1).
\end{aligned} \tag{15.273}$$

由上述关系我们发现哈密顿量可写成

$$\begin{aligned}
H_{KN} &= -\sum_{j+l=even} (J_x(\hat{f}^{\dagger}_{jl} - \hat{f}_{jl})(\hat{f}^{\dagger}_{j+1,l} + \hat{f}_{j+1,l}) + J_y(\hat{f}^{\dagger}_{jl} - \hat{f}_{jl})(\hat{f}^{\dagger}_{j-1,l} + \hat{f}_{j-1,l}) \\
&+ J_z(2\hat{f}^{\dagger}_{jl}\hat{f}_{jl} - 1)(2\hat{f}^{\dagger}_{j,l+1}\hat{f}_{j,l+1} - 1)).
\end{aligned} \tag{15.274}$$

为了把上述哈密顿里化为自由费米子形式,让我们设$\hat{f}_{jl} = \frac{\hat{b}_{jl} + i\hat{c}_{jl}}{2}$($j+l$为偶)或$\hat{f}_{jl} = \frac{\hat{c}_{jl} - i\hat{b}_{jl}}{2}$($j+l$为奇),这里$\hat{c}_{jl}, \hat{b}_{jl}$都是Majorana费米子,那么有

$$\begin{aligned}
H_{KN} &= -\sum_{j+l=even} (J_x(-i\hat{c}_{jl})(\hat{c}_{j+1,l}) + J_y(-i\hat{c}_{jl})(\hat{c}_{j-1,l}) + J_z(i\hat{b}_{jl}\hat{c}_{jl})(i\hat{b}_{j,l+1}\hat{c}_{j,l+1})) \\
&= \sum_{j+l=even} (iJ_x\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j+1,l} + iJ_y\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j-1,l} + iJ_z\hat{u}_{jl}\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j,l+1}) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{j+l=even} (iJ_x\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j+1,l} + iJ_y\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j-1,l} + iJ_z\hat{u}_{jl}\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j,l+1} + h.c.)
\end{aligned} \tag{15.275}$$

$\hat{u}_{jl}=i\hat{b}_{jl}\hat{b}_{j,l+1}$对哈密顿量对易且取值为$\pm1$.显然,我们发现$\hat{b}$费米子实际上就是先前用到的$\hat{a}^z$费米子,而$\hat{u}$ 就是$\hat{u}^z$.由于基态时候$\hat{u}_{jl}$可取为1,那么定义如下傅里叶变换($j+l$为偶,N_s为总格点数),

$$\begin{aligned}\hat{c}_{jl}&=\frac{1}{\sqrt{N_s/2}}\sum_k e^{ikR_{jl}}\hat{c}_{Ak}\\ \hat{c}_{j\pm1,l}&=\frac{1}{\sqrt{N_s/2}}\sum_k e^{ikR_{j\pm1,l}}\hat{c}_{Bk}\end{aligned}\tag{15.276}$$

则有

$$\begin{aligned}H_{KN}&=\sum_{j+l=even}\frac{1}{N_s}\sum_{k,k'}(iJ_xe^{i(kR_{jl}+k'R_{j+1,l})}+iJ_ye^{i(kR_{jl}+k'R_{j-1,l})}\\&+iJ_ze^{i(kR_{jl}+k'R_{j,l+1})})\hat{c}_{Ak}\hat{c}_{Bk'}+h.c.\end{aligned}$$

现在,我们可以把$\sum_{j+l=even}$还原为六角晶格模型,这实际上意味着如果$R_{jl}=R_r$是A子格的格点,那么$R_{j+1,l},R_{j-1,l},R_{j,l+1}$分别是原始Kitaev模型中$x,y,z$方向的跃迁对应的位置矢量$R_r+\delta_x,R_r+\delta_y,R_r+\delta_z$,因此有($\sum_r=N_s/2$)

$$\begin{aligned}H_{KN}&=\sum_{r,\delta}\frac{1}{N_s}\sum_{k,k'}(iJ_xe^{i(k+k')R_r}e^{ik'\delta_x}+iJ_ye^{i(k+k')R_r}e^{ik'\delta_y}+iJ_ze^{i(k+k')R_r}e^{ik'\delta_z})\hat{c}_{Ak}\hat{c}_{Bk'}+h.c.\\&=\frac{i}{2}\sum_k(J_xe^{-ik\delta_x}+J_ye^{-ik\delta_y}+J_ze^{-ik\delta_z})\hat{c}_{Ak}\hat{c}_{B,-k}+h.c.\end{aligned}\tag{15.277}$$

注意到这个动量空间哈密顿量与之间采用Majorana费米子表示所得完全一致,这说明Jordan-Wigner变换确实可以得到Kitaev honeycomb模型的正确物理性质.

如果我们想要研究Kitaev模型的有限温度性质,那么就需要体系的配分函数,[79]

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}=\sum_{\{u_{ij}=\pm1\}}\mathrm{Tr}_ce^{-\beta\hat{H}(u)}\tag{15.278}$$

这里我们先用$\hat{u}_{ij}$的本征态把所有规范场变为静态,即$u_{ij}=\pm1$,然后在静态规范场的背景下再对自由Majorana费米子哈密顿量$\hat{H}(u)$求迹.这里的哈密顿量$\hat{H}(u)$是

$$\begin{aligned}\hat{H}(u)&=\frac{1}{2}\sum_{j+l=even}(iJ_x\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j+1,l}+iJ_y\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j-1,l}+iJ_zu_{jl}\hat{c}_{jl}\hat{c}_{j,l+1}+h.c.)\\&=\frac{i}{4}\sum_{i,j}\hat{c}_iA_{ij}(u)\hat{c}_j,\end{aligned}\tag{15.279}$$

$$A_{ij}=2J_x(\delta_{i,j=i+\delta_x}-\delta_{i,j=i-\delta_x})+2J_y(\delta_{i,j=i+\delta_y}-\delta_{i,j=i-\delta_y})+2J_z(\delta_{i,j=i+\delta_z}-\delta_{i,j=i-\delta_z}).\tag{15.280}$$

[79]Nasu,Knolle,Kovrizhin,Motome,Moessner,Fermionic response from fractionalization in an insulating two-dimensional magnet,Nat.Phys. **12**,912(2016)

这里我们已经通过引入实反对称矩阵$A_{ij}(u)$把哈密顿量写成紧凑的形式.利用线性变换$\hat{c}_j=\sum_\lambda(X_{j\lambda}\hat{d}_\lambda+X^*_{j\lambda}\hat{d}^\dagger_\lambda)$就可以把$\hat{H}(u)$转化为

$$\hat{H}(u)=\sum_\lambda\varepsilon_\lambda(u)(\hat{d}^\dagger_\lambda\hat{d}_\lambda-\frac{1}{2}) \tag{15.281}$$

这里$\varepsilon_\lambda>0$是A_{ij}矩阵的正本征值.当然,对于格点数较多的体系,对u_{ij}的求和需要通过蒙特卡洛进行,其他可观测量例如比热,磁化和Raman 响应就可以利用蒙特卡洛方法计算得到.事实上,对于各向同性的情况($J_x=J_y=J_z$),体系存在两个特征温度$T_L<T_H$.当$T>T_H$时,体系基本上是经典的磁无序态,磁化满足居里定律.在$T_L\lesssim T\lesssim T_H$的中间温度区,最近邻的磁性关联逐渐饱和,同时热无序分布的规范场或者说涡旋使得Majorana费米子的态密度类似于金属的情况,这样Majorana费米子导致温度线性依赖的热容.最后,在$T<T_L$时涡旋接近基态构型,体系性质类似于基态. [80]

破缺时间反演对称

虽然早期理论预言Ir基和Ru基Kitaev材料可以直接实现Kitaev自旋液体,然而实验工作表明这些系统的基态都是磁有序态而非自旋液体.但是,我们知道加上外磁场可以抑制磁有序态的形成,这可能会把体系驱动到Kitaev自旋液体态.因此,让我们考虑体系存在磁场的情况.

现在,考虑给系统施加一个外磁场$\vec{h}$,这样系统的自旋就获得了Zeeman能而同时破坏了原先的时间反演对称性:

$$\hat{H}_{Zeeman}=-\sum_j\vec{h}\cdot\hat{\vec{\sigma}}_j=-\sum_j(h_x\hat{\sigma}^x_j+h_y\hat{\sigma}^y_j+h_z\hat{\sigma}^z_j)=-i\sum_j(h_x\hat{a}^x_j+h_y\hat{a}^y_j+h_z\hat{a}^z_j)\hat{c}_j. \tag{15.282}$$

可以看到,Zeeman项的出现使得体系($\hat{H}=\hat{H}_K+\hat{H}_{Zeeman}$)无法精确求解,但如果磁场$\vec{h}$足够小,那么我们可以把上述哈密顿量$\hat{H}_{Zeeman}$ 当作微扰然后考虑它在原始模型$\hat{H}_K$的基态子空间(涡旋为零)的有效哈密顿量$\hat{H}_{eff}$,这可以用如下三阶微扰论的形式实现:

$$\hat{H}_{eff}=\hat{P}\left(\hat{H}_{Zeeman}+\hat{H}_{Zeeman}\frac{1}{E_0-\hat{H}}\hat{H}_{Zeeman}+\hat{H}_{Zeeman}\frac{1}{E_0-\hat{H}}\hat{H}_{Zeeman}\frac{1}{E_0-\hat{H}}\hat{H}_{Zeeman}\right)\hat{P} \tag{15.283}$$

这里$\hat{P}=|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$是投影到$\vec{h}=0$时基态子空间的投影算符,$E_0$是$\hat{H}_K$的基态能.注意到$\hat{H}_K$的基态不存在任何涡旋激发,而$\hat{H}_{Zeeman}$中的任意分量$h_\alpha\sigma^\alpha_j$作用基态会在$j$格点附近产生两个涡旋激发,因此$\hat{H}_{eff}$的第一项自动为零,这是因为作用一次$\hat{H}_{Zeeman}$并不能让体系回到没有涡旋的状态.类似的,第二项一般而言也为

[80]关于热容,Majorana费米子态密度和光电导的蒙特卡洛计算和详细讨论可以参考[Nasu,Udagawa,Motome,Thermal fractionalization of quantum spins in a Kitaev model: Temperature-linear specific heat and coherent transport of Majorana fermions,Phys.Rev.B **92**,115122(2015)]

零,除非对同一个格点作用两次,即$\frac{h_\alpha^2}{-J}\sum_j(\sigma_j^\alpha)^2=\frac{h_\alpha^2}{-J}N_s$,这显然是一个常数,并不影响动力学.($E_0-\hat{H}$作用于有涡旋的状态等价于相对于基态的能量变化,其量级为$-J$(考虑各向同性情况))这样最低阶非零贡献来自第三项.由于每次作用自旋会产生两个涡旋,因此要让这一项非零实际上要求基态作用上的三个自旋乘积$\hat{\sigma}_j^\alpha\hat{\sigma}_l^\beta\hat{\sigma}_k^\gamma$中的自旋必须彼此相邻,这样才能使得三自旋乘积作用基态后不产生任何的涡旋激发.(如图15.34)这样磁场存在时相当于给原始的Kitaev 哈密顿量加上如下的修正:

$$\hat{H}_{eff}\sim-\frac{h_xh_yh_z}{J^2}\sum_{jlk}\hat{\sigma}_j^y\hat{\sigma}_l^x\hat{\sigma}_k^z+... \tag{15.284}$$

这里j,l,k是彼此相邻的格点,也就是说j,k彼此都是次近邻.只有这样才能使体系保持无涡旋的状态.这样我们发现磁场实际上诱导出了次近邻的耦合.用Majorana费米子表示自旋有

$$\hat{\sigma}_j^y\hat{\sigma}_l^x\hat{\sigma}_k^z=-i\hat{a}_j^y\hat{c}_j\hat{a}_l^x\hat{c}_l\hat{a}_k^z\hat{c}_k \tag{15.285}$$

为了把上式转化为容易计算的形式,注意到$\hat{D}_l=\hat{a}_l^x\hat{a}_l^y\hat{a}_l^z\hat{c}_l=1$,那么

$$\begin{aligned}-i\hat{a}_j^y\hat{c}_j\hat{a}_l^x\hat{c}_l\hat{a}_k^z\hat{c}_k &= -i\hat{a}_j^y\hat{c}_j(\hat{a}_l^z\hat{a}_l^y)\hat{a}_k^z\hat{c}_k\\ &= -i\hat{a}_j^y\hat{a}_l^y\hat{a}_l^z\hat{a}_k^z\hat{c}_j\hat{c}_k\\ &= i\hat{u}_{jl}^y\hat{u}_{lk}^z\hat{c}_j\hat{c}_k.\end{aligned} \tag{15.286}$$

上述讨论表明三自旋乘积$\hat{\sigma}_j^y\hat{\sigma}_l^x\hat{\sigma}_k^z$可以化成$i\hat{u}_{jl}^y\hat{u}_{lk}^z\hat{c}_j\hat{c}_k$.在基态下,若$l$是$A$子格的格点,那么$\hat{u}_{jl}^y=-1,\hat{u}_{lk}^z=+1$,因此我们得到一个等效的$B$子格之间的次近邻跃迁$i\hat{c}_j\hat{c}_k$($A$子格也有类似的形式).此时体系的哈密顿量$\hat{H}=\hat{H}_K+\hat{H}_{eff}$,(设次近邻耦合为$\kappa\sim\frac{h_xh_yh_z}{J^2}$)

$$\hat{H}=\frac{i}{2}\sum_{j,\alpha=x,y,z}\left[J(\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{B,j+\delta_\alpha}-\hat{c}_{Bj}\hat{c}_{A,j-\delta_\alpha})+\kappa(\hat{c}_{Aj}\hat{c}_{A,j\pm\delta'_\alpha}-\hat{c}_{Bj}\hat{c}_{B,j\pm\delta'_\alpha})\right]$$

这里$\pm\delta'_x,\pm\delta'_y,\pm\delta'_z$是$A$格点的六个次近邻矢量.注意到这个次近邻跃迁类似于Haldane模型的次近邻跃迁,那么Majorana费米子的哈密顿量与Haldane模型一致,因此Majorana费米子$\hat{c}$会获得一个质量,同时我们如果计算系统的拓扑不变量,也就是Chern数会发现其非零.这时我们称Kiataev模型实现了非阿贝尔Ising拓扑序.根据bulk-boundary对应关系,非零的Chern 数说明系统具有Chiral 边界态.注意到这里bulk 是Majorana费米子,那么边界态也是Majorana费米子,只不过其是一维单向传播的Majorana费米子,相应的哈密顿量可以写成

$$\hat{H}_{Chiral}=\sum_{k>0}v_Fk\hat{c}_{-k}\hat{c}_k. \tag{15.287}$$

进一步,我们知道整数量子Hall效应中系统具有霍尔电导$\sigma_{xy}=\frac{e^2}{h}\nu$.($\nu$是边界态的数目或者说bulk计算所得的Chern数)一般而言,热Hall电导[81]与Hall电导

[81]热Hall效应可以看作是Hall效应在热输运的类比,其又叫做Righi-Leduc效应.此时热流$J_Q^\alpha=-\kappa_{\alpha\beta}\partial_\beta T$定义了热导率$\kappa_{\alpha\beta}$与温度梯度$\partial_\beta T$.

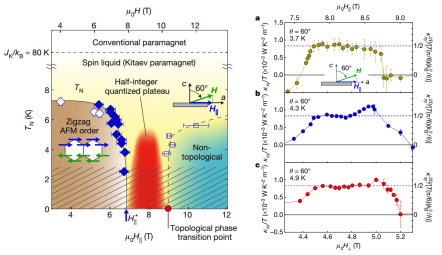


Figure 15.37: $\alpha-RuCl_3$中观测到的半量子热霍尔电导.

关系是$\kappa_{xy}/T=\frac{\pi^2k_B^2}{3e^2}\sigma_{xy}$,(也就是设Wiedemann-Franz定律成立)这样有

$$\kappa_{xy}/T=\frac{\pi^2k_B^2}{3e^2}\frac{e^2}{h}\nu=\frac{\pi k_B^2}{6\hbar}\nu. \tag{15.288}$$

事实上,对于一般的无相互作用费米子系统,热Hall电导率可以用如下公式计算:[82]

$$\kappa_{xy}=-\frac{1}{e^2T}\int d\varepsilon(\varepsilon-\mu)^2\frac{\partial f_F(\varepsilon,\mu,T)}{\partial\varepsilon}\sigma_{xy}(\varepsilon) \tag{15.289}$$

这里$f_F(\varepsilon,\mu,T)=1/(e^{(\varepsilon-\mu)/(k_BT)}+1)$是费米分布函数.$\sigma_{xy}(\varepsilon)=-1/\hbar\sum_{k\sigma,\xi_{n,k}<\varepsilon}\Omega_{n,k,\sigma}$是反常Hall系数,$\Omega_{n,k,\sigma}=-2\mathrm{Im}\langle\partial_{k_x}u_{nk\sigma}|\partial_{k_y}u_{nk\sigma}\rangle$表示能带指标为$n$,自旋为$\sigma$电子的Berry曲率.在低温极限下,

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon}f_F(\varepsilon,\mu,T)\simeq-\delta(\varepsilon-\mu)-\frac{(\pi k_BT)^2}{6}\frac{d^2}{d\varepsilon^2}\delta(\varepsilon-\mu) \tag{15.290}$$

这样有

$$\begin{aligned}\kappa_{xy}&=\frac{1}{e^2T}\int d\varepsilon(\varepsilon-\mu)^2\sigma_{xy}(\varepsilon)\left(\delta(\varepsilon-\mu)+\frac{(\pi k_BT)^2}{6}\frac{d^2}{d\varepsilon^2}\delta(\varepsilon-\mu)\right)\\&=\frac{1}{e^2T}\int d\varepsilon(\varepsilon-\mu)^2\sigma_{xy}(\varepsilon)\frac{(\pi k_BT)^2}{6}\frac{2\delta(\varepsilon-\mu)}{(\varepsilon-\mu)^2}\\&=\frac{(\pi k_B)^2T}{3e^2}\sigma_{xy}(\mu)\end{aligned} \tag{15.291}$$

这里已经利用了公式$\delta''(x)=2\delta(x)/x^2$.这样我们就得到Hall热导与电导之间的关系满足Wiedemann-Franz定律.上述形式不仅可以用在电子体系也可以用于用辅助费米子表示的自旋系统,这样就可以计算自旋液体的热Hall响应.[83]

既然当前讨论的Majorana费米子没有电荷自由度,那么就没有电荷相关的霍尔电导但可以有热霍尔电导.由于Majorana 费米子的自由度是通常费米子的

[82][Qin,Niu,Shi,Energy Magnetization and the Thermal Hall Effect,Phys.Rev.Lett. **107**,236601(2011)]

[83][Gao,Chen,Topological thermal Hall effect for topological excitations in spin liquid: Emergent Lorentz force on the spinons,SciPost Phys. Core **2**,004(2020)]

一般,那么它们有如下半量子化热霍尔电导:[84]($\nu=1$)

$$\kappa_{xy}/T=\frac{1}{2}\frac{\pi k_B^2}{6\hbar}. \tag{15.292}$$

实验上,2018年,京都大学Matsuda组通过调节磁场在$\alpha-RuCl_3$中观测到了半量子热霍尔电导.[85](图15.37)这说明当磁场在$8T$ 附近时体系可能是时间反演对称破缺后的Kiatev自旋液体区,具有手性Majorana费米子边界态.

- 需要指出,磁场下的反铁磁耦合的Kitaev模型随磁场增大会经历从非阿贝尔Ising拓扑序到有自旋子费米面自旋液体的相变,而磁场过大时会进入完全极化态.[86]

本章小结与进一步阅读

本章小结 晶格规范场论描写强耦合规范理论;Kitaev的两类可解模型是研究拓扑态的重要模型.

本章关键词 晶格规范理论;Wilson loop;toric-code模型;拓扑序;拓扑纠缠熵;Kitaev's honeycomb模型

进一步阅读 文小刚等合著的《Quantum Information Meets Quantum Matter》第六章;E.Fradkin的《Field Theories of Condensed Matter Physics》第九章和第十七章;文小刚的《Quantum Field Theory of Many-Body Systems》第六章

[84]具体的计算可以采用传统的辅助费米子平均场形式并结合热Hall电导的公式进行[Burnell,Nayak,SU(2) slave fermion solution of the Kitaev honeycomb lattice model,Phys.Rev.B **84**,125125(2011);Teng et al.,Unquantized thermal Hall effect in quantum spin liquids with spinon Fermi surfaces,Phys.Rev.Research **2**,033283(2020)]

[85][Kasahara et al.,Majorana quantization and half-integer thermal quantum Hall effect in a Kitaev spin liquid,Nature **559**,227(2018)]

[86][Zhu,Kimchi,Sheng,Fu,Robust non-Abelian spin liquid and a possible intermediate phase in the antiferromagnetic Kitaev model with magnetic field,Phys.Rev.B **97**,241110(R)(2018);Gohlke,Moessner,Pollmann,Dynamical and topological properties of the Kitaev model in a [111] magnetic field,Phys.Rev.B **98**,014418(2018);Nasu,Kato,Kamiya,Motome,Successive Majorana topological transitions driven by a magnetic field in the Kitaev model,Phys.Rev.B **98**,060416(R)(2018)]

附录

全息对偶的补充知识

这一部分我们主要参考那个著名的AdS/CFT使用手册,即Natsuume所著的《AdS/CFT Duality User Guide》.

$\mathbf{AdS}_{d+2}$度规

让我们验证AdS_{d+2}度规

$$g_{zz}=\frac{R^2}{z^z},g_{00}=-\frac{R^2}{z^z},g_{ii}=\frac{R^2}{z^z} \tag{15.293}$$

是$R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}R+\Lambda g_{\mu\nu}=0$的解.首先,我们寻找非零的Christoffel符号$\Gamma^{\alpha}_{\mu\nu}$:

$$\Gamma^{\alpha}_{\mu\nu}=\frac{1}{2}g^{\alpha\beta}(\partial_\nu g_{\beta\mu}+\partial_\mu g_{\beta\nu}-\partial_\beta g_{\mu\nu}). \tag{15.294}$$

那么$\alpha=z$时有

$$\Gamma^{z}_{\mu\nu}=\frac{1}{2}g^{zz}(\partial_\nu g_{z\mu}+\partial_\mu g_{z\nu}-\partial_z g_{\mu\nu}) \tag{15.295}$$

由于度规是对角的且仅为z的函数,因此非零项为

$$\Gamma^{z}_{zz}=\frac{1}{2}g^{zz}\partial_z g_{zz},\quad \Gamma^{z}_{00}=-\frac{1}{2}g^{zz}\partial_z g_{00},\quad \Gamma^{z}_{ii}=-\frac{1}{2}g^{zz}\partial_z g_{ii} \tag{15.296}$$

对于$\alpha=0$有

$$\Gamma^{0}_{\mu\nu}=\frac{1}{2}g^{00}(\partial_\nu g_{0\mu}+\partial_\mu g_{0\nu}) \tag{15.297}$$

非零项为

$$\Gamma^{0}_{0z}=\Gamma^{0}_{z0}=\frac{1}{2}g^{00}\partial_z g_{00} \tag{15.298}$$

类似的,$\alpha=i$时的非零项为

$$\Gamma^{i}_{iz}=\Gamma^{i}_{zi}=\frac{1}{2}g^{ii}\partial_z g_{ii}. \tag{15.299}$$

因此,我们发现非零的Christoffel符号仅有$\Gamma^{z}_{zz}=\Gamma^{z}_{00}=\Gamma^{0}_{0z}=\Gamma^{i}_{iz}=-\frac{1}{z},\Gamma^{z}_{ii}=\frac{1}{z}$,.

进一步,我们计算黎曼张量$R^{\alpha}_{\mu\alpha\rho}$,

$$R^{\alpha}_{\mu\alpha\rho}=\partial_\alpha\Gamma^{\alpha}_{\mu\rho}-\partial_\rho\Gamma^{\alpha}_{\mu\alpha}+\Gamma^{\alpha}_{\sigma\alpha}\Gamma^{\sigma}_{\mu\rho}-\Gamma^{\alpha}_{\sigma\rho}\Gamma^{\sigma}_{\mu\alpha} \tag{15.300}$$

对于$\alpha=z$有

$$R^{z}_{\mu z\rho}=\partial_z\Gamma^{z}_{\mu\rho}-\partial_\rho\Gamma^{z}_{\mu z}+\Gamma^{z}_{\sigma z}\Gamma^{\sigma}_{\mu\rho}-\Gamma^{z}_{\sigma\rho}\Gamma^{\sigma}_{\mu z} \tag{15.301}$$

$$\begin{aligned}
&\mu=z,\rho=z: \quad \partial_z\Gamma^{z}_{zz}-\partial_z\Gamma^{z}_{zz}+\Gamma^{z}_{\sigma z}\Gamma^{\sigma}_{zz}-\Gamma^{z}_{\sigma z}\Gamma^{\sigma}_{zz}=0;\\
&\mu=z,\rho=0: \quad \partial_z\Gamma^{z}_{z0}-\partial_0\Gamma^{z}_{zz}+\Gamma^{z}_{\sigma z}\Gamma^{\sigma}_{z0}-\Gamma^{z}_{\sigma 0}\Gamma^{\sigma}_{zz}=0;\\
&\mu=z,\rho=i: \quad \partial_z\Gamma^{z}_{zi}-\partial_i\Gamma^{z}_{zz}+\Gamma^{z}_{\sigma z}\Gamma^{\sigma}_{zi}-\Gamma^{z}_{\sigma i}\Gamma^{\sigma}_{zz}=0;
\end{aligned} \tag{15.302}$$

$$\begin{aligned}
\mu=0,\rho=z: &\quad \partial_z\Gamma^z_{0z}-\partial_z\Gamma^z_{0z}+\Gamma^z_{\sigma z}\Gamma^\sigma_{0z}-\Gamma^z_{\sigma z}\Gamma^\sigma_{0z}=0\\
\mu=0,\rho=0: &\quad \partial_z\Gamma^z_{00}-\partial_0\Gamma^z_{0z}+\Gamma^z_{\sigma z}\Gamma^\sigma_{00}-\Gamma^z_{\sigma 0}\Gamma^\sigma_{0z}\neq 0\\
\mu=0,\rho=i: &\quad \partial_z\Gamma^z_{0i}-\partial_i\Gamma^z_{0z}+\Gamma^z_{\sigma z}\Gamma^\sigma_{0i}-\Gamma^z_{\sigma i}\Gamma^\sigma_{0z}=0
\end{aligned}\tag{15.303}$$

因此$R^z_{0z0}=\partial_z\Gamma^z_{00}+\Gamma^z_{zz}\Gamma^z_{00}-\Gamma^z_{00}\Gamma^0_{0z}$ 非零.同理,$R^z_{izi}=\partial_z\Gamma^z_{ii}+\Gamma^z_{zz}\Gamma^z_{ii}-\Gamma^z_{ii}\Gamma^i_{iz}$也非零.

对于$\alpha=0$和$\alpha=i,j$,我们发现非零项为

$$\begin{aligned}
R^0_{z0z}&=-\partial_z\Gamma^0_{z0}+\Gamma^0_{z0}\Gamma^z_{zz}-\Gamma^0_{0z}\Gamma^0_{z0}\\
R^0_{i0i}&=\Gamma^0_{z0}\Gamma^z_{ii}\\
R^i_{ziz}&=-\partial_z\Gamma^i_{zi}+\Gamma^i_{zi}\Gamma^z_{zz}-\Gamma^i_{iz}\Gamma^i_{zi}\\
R^i_{0i0}&=\Gamma^i_{zi}\Gamma^z_{00}\\
R^j_{iji}&=\Gamma^j_{zj}\Gamma^z_{ii}-\Gamma^j_{zi}\Gamma^z_{ij}
\end{aligned}\tag{15.304}$$

代入非零的Christoffel符号可得

$$R^z_{0z0}=R^i_{0i0}=\frac{1}{z^2},\quad R^z_{izi}=R^0_{z0z}=R^i_{ziz}=R^0_{i0i}=-\frac{1}{z^2}.\tag{15.305}$$

因此

$$R_{zz}=R^0_{z0z}+\sum_{i=1}^d R^i_{ziz}=-\frac{d+1}{z^2},\quad R_{00}=R^z_{0z0}+\sum_{i=1}^d R^i_{0i0}=\frac{d+1}{z^2},\quad R_{ii}=R^z_{izi}+R^0_{i0i}+\sum_{j=1}^d R^j_{iji}=-\frac{d+}{z^2}\tag{15.306}$$

而Ricci标量是

$$\mathcal{R}=g^{\mu\nu}R_{\mu\nu}=g^{zz}R_{zz}+g^{00}R_{00}+\sum_{i=1}^d g^{ii}R_{ii}=-\frac{(d+1)(d+2)}{R^2}\tag{15.307}$$

只要我们选取$\Lambda=-\frac{d(d+1)}{2R^2}$,那么场方程$R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}R+\Lambda g_{\mu\nu}=0$就得到满足.

当然,度规$ds^2=\frac{R^2}{z^2}(dz^2-dx_0^2+\sum_{i=1}^d dx_i^2)$并非唯一采用的AdS度规,如果我们令$r=R^2/z$,那么度规成为

$$ds^2=\frac{R^2}{r^2}dr^2+\frac{r^2}{R^2}(-dx_0^2+\sum_{i=1}^d dx_i^2)\tag{15.308}$$

此时AdS时空的边界位于$r=\infty$,文献中称为Poincaré坐标下的AdS度规.

黑洞热力学

四维时空中,Einstein场方程$R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}R=0$最著名的解就是球对称的Schwarzschild黑洞解:

$$ds^2=-(1-\frac{2G_N^{(4)}M}{r})dt^2+\frac{dr^2}{1-\frac{2G_N^{(4)}M}{r}}+r^2d\Omega_2^2\tag{15.309}$$

这里$G_N^{(4)}$是四维时空的牛顿引力常数,M是黑洞质量,r是距离黑洞中心的距离,$d\Omega_2^2 = d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2$单位球面的线元.$r_0 = 2G_N^{(4)}M/c^2$是黑洞的视界半径.这样黑洞视界的面积是

$$A = 4\pi r_0^2 = \frac{16\pi(G_N^{(4)})^2M^2}{c^4} \tag{15.310}$$

同时,视界面上的引力加速度称为表面引力κ,我们知道牛顿引力中加速度为$a = \frac{G_N^{(4)}M}{r^2}$,那么视界面上的表面引力为

$$\kappa = a(r = r_0) = \frac{c^4}{4G_N^{(4)}M} \tag{15.311}$$

这样视界面积的变化dA与质量的变化由κ联系,即

$$dA = \frac{16\pi(G_N^{(4)})^2 2M}{c^4}dM = \frac{8\pi}{\kappa}G_N^{(4)}dM \Rightarrow \boxed{G_N^{(4)}dM = \frac{\kappa}{8\pi}dA} \tag{15.312}$$

这称为黑洞热力学第一定律.注意到这个结果与热力学第一定律$dE = TdS$的相似性.当然,在经典物理中,黑洞不存在温度的概念,因此黑洞第一定律与热力学第一定律并不相同.但是,Hawking的研究表明,如果考虑量子效应,黑洞会像黑体一样具有黑体辐射,这称作Hawking辐射,其辐射温度为

$$k_BT = \frac{\hbar\kappa}{2\pi c} \tag{15.313}$$

对于四维时空的Schwarzschild黑洞有$k_BT = \frac{\hbar c^3}{8\pi G_N^{(4)}M}$.由于存在$\hbar$,Hawking温度显然具有量子起源.

利用Hawking温度,我们可以把黑洞第一定律改写为

$$d(Mc^2) = \frac{\kappa c^2}{8\pi G_N^{(4)}}dA = T\frac{k_Bc^3}{4G_N^{(4)}\hbar}dA \tag{15.314}$$

注意上式左边为能量的微分,那么对比$dE = TdS$可知黑洞的熵为

$$\boxed{S = \frac{k_Bc^3}{4G_N^{(4)}\hbar}A = \frac{1}{4}\frac{A}{l_{pl}^2}k_B} \tag{15.315}$$

$l_{pl} = \sqrt{G_N^{(4)}\hbar/c^3} \simeq 10^{-35}m$是普朗克长度.显然,我们发现$S \sim A$也就说黑洞的熵正比于它的视界面积,通常上述结果也称为Bekenstein-Hawking熵.既然熵反映了微观状态数或者自由度的数目,因此黑洞熵可以解释为若在普朗克面积l_{pl}^2上有一个自由度,那么黑洞总自由度数目等于视界面积与普朗克面积的比值.此外,通常热力学系统的熵正比于系统的体积,因此,一个四维时空的黑洞本不能对应于四维时空的正常热力学(统计)系统但注意到一个五维系统的面积是四维系统的体积,那么一个五维黑洞可以对应四维统计系统.这样,我们得到AdS/CFT对偶的第一个证据:

- 黑洞熵暗示黑洞可以用空间维度比引力理论低一维的通常统计系统描述.

当然,AdS/CFT声明相关的统计系统其实是规范理论,这也称为全息原理.全息原理是AdS/CFT的第一个证据,在后面我们会看到,大N_c规范理论会给出第二个证据.

实际上,Hawking温度由Hawking通过考虑经典黑洞背景下的量子化的物质场来获得.物理上的一种理解是让我们对黑洞度规$ds^2 = -f(r)dt^2 + \frac{dr^2}{f(r)} + ...$做Wick转动$t = -it_E$,这样得到

$$ds_E^2 = +f(r)dt_E^2 + \frac{dr^2}{f(r)} + ... \tag{15.316}$$

然后在视界$r = r_0$处展开$f(r) = f(r_0) + (r - r_0)f'(r_0) + ... \simeq (r - r_0)f'(r_0)$,因此

$$ds_E^2 = (r - r_0)f'(r_0)dt_E^2 + \frac{dr^2}{(r - r_0)f'(r_0)} + ... = d\rho^2 + \rho^2 d(\frac{f'(r_0)}{2}t_E)^2 + ... \tag{15.317}$$

$\rho = 2\sqrt{(r - r_0)/f'(r_0)}$.这样如果$\frac{f'(r_0)}{2}t_E$类似于平面极坐标系中的角度变量,那么$\frac{f'(r_0)}{2}t_E$具有周期$2\pi$,注意到$\frac{f'(r_0)}{2}t_E$最小为0而最大为恰好取$2\pi$,那么$t_E$的最大值为$\frac{2\pi}{f'(r_0)/2}$.同时我们知道有限温度场论中$t_E$在一个周期内的最大值为$\beta = \frac{1}{k_B T}$,那么有$\frac{1}{T} = \frac{2\pi}{f'(r_0)/2}$,也就是$T = \frac{f'(r_0)}{4\pi} = \frac{\kappa}{2\pi}$.

从微观角度来说,如果我们假设引力的量子理论可用如下路径积分表示,

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}g e^{iS[g]} \tag{15.318}$$

$S[g]$是引力的作用量,路径积分对所有可能的度规$g_{\mu\nu}$进行.然后在Wick转动下有

$$\mathcal{Z}_E = \int \mathcal{D}g e^{-S_E[g]} \tag{15.319}$$

此时Z_E相当于引力体系的配分函数.当然,目前没有任何人可以严格计算上述路径积分,因此更为实际的处理方式是假设路径积分由作用量的极值点(经典引力)决定,这也叫做半经典近似,这样有$\mathcal{Z}_E \simeq e^{-\underline{S}_E[g]}$,这里$\underline{S}_E[g]$表示用经典引力代入后的作用量.这样体系的自由能便是$F = -T\ln\mathcal{Z}_E \simeq T\underline{S}_E[g]$.对Schwarzschild黑洞直接计算可得$F = \frac{r_0}{4G_N^{(4)}} = \frac{1}{16\pi G_N^{(4)} T}$,引力体系的熵和能量分别是

$$\begin{aligned} S &= -\partial_T F = \frac{1}{16\pi G_N^{(4)} T^2} = \frac{A}{4G_N^{(4)}} \\ E &= F + TS = \frac{1}{8\pi G_N^{(4)} T} = M \end{aligned} \tag{15.320}$$

显然,这里的结果符合之前的黑洞热力学第一定律.此外,黑洞热力学的另外几条定律分别是:

- 第零定律:对于稳定的黑洞解,其表面引力为常数;

- 第二定律:黑洞视界面积不减少$dA \geqslant 0$;
- 第三定律:黑洞熵在温度接近零时趋于零.

在结束这一部分之前,我们注意到上述关于黑洞熵的讨论和计算并不让人完全满意,其原因主要有两个:

- 引力系统的路径积分$\mathcal{Z}_E = \int \mathcal{D}g e^{-S_E[g]}$本身并没有良好定义并且我们只能做粗糙的半经典近似的计算.
- 计算本身没有告诉我们黑洞熵对应于什么样的(微观)自由度.

但是,AdS/CFT能够给半经典结果一个有趣的解释.AdS/CFT认为半经典计算的配分函数实际上是一个规范理论的配分函数,规范理论和引力理论是等价的.这种等价性表明我们可以用引力理论来了解规范理论或者用规范理论了解引力理论.既然AdS/CFT声明了两者间的等价性,那么引力和规范理论就很难说谁更基本.如果认为规范理论是更基本的,那么我们可以认为黑洞熵源于规范理论的熵,也就是说黑洞熵代表了对应的规范理论的微观自由度.这说明黑洞熵就是通常意义上的统计(热力学)熵.不过,AdS/CFT中的黑洞处于AdS时空,因此,对于我们所处时空的黑洞,例如Schwarzschild黑洞,我们并不清楚上述解释是否成立.

大N_c规范理论

在量子色动力学也就是QCD中,由于耦合常数在低能下的快速增加,微扰理论作用比较有限,目前人们仍然难以非微扰地求解QCD.为了理解非微扰区的QCD,'t Hooft提出了所谓的大N_c规范理论.

我们知道QCD中夸克携带三类不同的色自由度并用$SU(3)$非阿贝尔规范理论描述.现在,假设色自由度数目为N_c,那么传递相互作用的规范场规可以用$N_c \times N_c$的$U(N_c)$矩阵描述,也就是$A_\mu = A_\mu^a T^a$(T^a为$U(N_c)$矩阵).同时规范场的耦合系数记为g_{YM},因此规范理论的参数主要有g_{YM}和N_c.

为了理论处理的方便性,'t Hooft构造了新的耦合系数

$$\boxed{\lambda \equiv g_{YM}^2 N_c} \tag{15.321}$$

在文献中叫做't Hooft耦合.然后,我们取大N_c极限,也就是令$N_c \to \infty$但保持λ固定不变(这显然要求$g_{YM} \sim \frac{1}{\sqrt{N_c}}$).这种大$N_c$极限并不平凡,因为耦合系数$\lambda$不趋于零因而体系不会成为自由理论.通常称$\lambda \gg 1$为强耦合极限.

在凝聚态物理或者统计物理中,大N极限也是常用的技术手段,例如$O(N)$矢量模型以及Kondo杂质模型.这里的大N_c规范理论在精神上与与通常的大N理论一致,但是也有重要的差别.矢量模型在大N极限下转化为可解的自由理论(平均场理论)而规范理论在大N_c极限下仍然难以求解.这是因为规范理论在大N_c极限下实际上约化为经典的引力理论,而引力理论远比矢量模型中的自由理论复杂并且更难以处理.

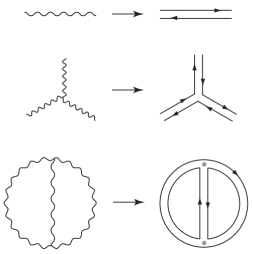


Figure 15.38: (非阿贝尔)规范场的传播子用带箭头的双线表示.

在场论中,我们习惯用Feynman图来表示物质或规范场的传播子,通常用一条线表示.为了明确保留色自由度的信息,更方便的做法是引入双线表示,也就是传播子用具有相反箭头的两条线来表示(图15.38).这样,画Feynman图时我们需要保证箭头方向守恒.当涉及色自由度指标时,规范场就像夸克-反夸克对一样,一条线表示矩阵$[A_\mu]^i_j$的行而另一条表示列.

利用't hooft耦合,(非阿贝尔)规范场的拉式量可以写成

$$\mathcal{L}=\frac{1}{g_{YM}^2}\{\partial A\partial A+A^2\partial A+A^4\}=\frac{N_c}{\lambda}\{...\} \tag{15.322}$$

这样,我们可以得到一些Feynman规则,

- 每一个(规范场)传播子有因子λ/N_c(传播子正比于$\frac{1}{g_{YM}^2}\{\partial A\partial A$ 的逆)
- 每一个(规范场)相互作用顶角有因子N_c/λ
- 每一个(规范场)圈有因子N_c(因为需要对所有N_c种色自由度求和)

现在,设传播子的个数为E,顶角数目为V,圈的数目为F,那么根据上述Feynman规则可得

$$\left(\frac{N_c}{\lambda}\right)^V\left(\frac{\lambda}{N_c}\right)^E N_c^F=\lambda^{E-V}N_c^{V-E+F} \tag{15.323}$$

对于图15.39(a),我们发现$(V,E,F)=(2,3,3)$,这样

$$\left(\frac{N_c}{\lambda}\right)^2\left(\frac{\lambda}{N_c}\right)^3 N_c^3=\lambda N_c^2 \tag{15.324}$$

对于图15.39(b),我们发现$(V,E,F)=(4,6,4)$,这样

$$\left(\frac{N_c}{\lambda}\right)^4\left(\frac{\lambda}{N_c}\right)^6 N_c^4=\lambda^2 N_c^2 \tag{15.325}$$

因此我们认为其他类似图形的贡献可以写成简单的求和形式,即

$$(1+\lambda+\lambda^2+...)N_c^2=f_0(\lambda)N_c^2. \tag{15.326}$$

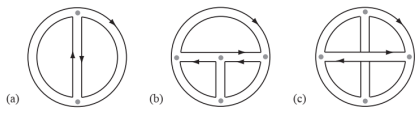


Figure 15.39: 对配分函数有贡献的平面图$(a)(b)$与非平面图(c)

但是,对于图15.39(c),我们发现$(V,E,F)=(4,6,2)$,这样所得的结果并不正比于N_c^2,

$$\left(\frac{N_c}{\lambda}\right)^4\left(\frac{\lambda}{N_c}\right)^6 N_c^2=\lambda^2. \tag{15.327}$$

从图形的角度来看,我们通常把可以在一个平面里面画出来的(双线表示)Feynman图称为平面图,例如图15.39(a)和(b),而像图15.39(c)这种无法在平面内画出的称为非平面图.如果包含非平面图,那么定性而言我们可以把所有图形的贡献写成如下形式:

$$f_0(\lambda)N_c^2+f_1(\lambda)N_c^0+f_2(\lambda)\frac{1}{N_c^2}+... \tag{15.328}$$

显然,在大N_c极限下,第一项,也就是平面图部分是主导的.

从上面的讨论可以看到,一个图在大N_c极限是否主导取决于这个图是否可以画在一个平面或者球面上.这说明Feynman图形与图形拓扑的直接联系.实际上, 图15.39(c)这样的非平面图可以画在一个轮胎面上.用拓扑学的语言来说,球面的亏格数为0,轮胎面为1,更复杂的二维曲面有跟多的亏格数,也就是有更多的洞.如果我们把传播子理解为多面体的边,顶角理解为多面体的顶点,那么传播子数目E就是多面体边的数目,圈的数目F是多面体面的数目,这样$f_0(\lambda)N_c^2+f_1(\lambda)N_c^0+f_2(\lambda)\frac{1}{N_c^2}+...$种关于$N_c$的展开幂次就是多面体的欧拉示性数$\chi$,它是一个拓扑不变量:

$$\chi=V-E+F \tag{15.329}$$

比如说球面有$\chi=2$而轮胎面是$\chi=0$,这与N_c的展开式直接对应.注意到欧拉示性数χ与亏格数h的联系$\chi=2-2h$,因此,对配分函数有贡献的图形的求和可以等价的写成对所有不同二维曲面(亏格)的求和:

$$\boxed{\ln \mathcal{Z}_{gauge}=\sum_{h=0}^{\infty}N_c^{2-2h}f_h(\lambda)} \tag{15.330}$$

这样,我们得到AdS/CFT的第二个证据,

- 大N_c规范理论的配分函数由所有不同拓扑的二维曲面求和定出.

当然,我们注意到大Nc极限下虽然只需要对平面图求和,但平面图有无穷多,因此在场论框架下计算所有平面图并不现实.好消息是,弦理论的微扰展开也同样由二维曲面的拓扑求和给出.这个巧合导致人们猜测规范理论和弦论是等价的,也就是它们的配分函数相等:

$$\mathcal{Z}_{gauge} = \mathcal{Z}_{string} \tag{15.331}$$

特别重要的是,二维封闭曲面的求和对应了引力的微扰展开.例如球面(平面图)对应经典引力,轮胎面对应引力的单圈量子修正.

从弦论到AdS/CFT

在弦论中,人们处理的基本对象是极端微小的弦,这些弦按照(场论中的)统计性质可以分为玻色型和费米型,而根据弦满足的边界条件又可以分为开弦和闭弦.

弦的基本长度称为弦长度,记为l_s,量级为$10^{-34}m$,因此弦是非常小的物理对象.弦除了可以在时空中整体运动外,它本身也有振动模式,我们一般把这些振动模式解释为粒子,但是只有最低能量的振动才对应于粒子物理标准模型中的费米子和规范粒子或者广义相对论中的引力的量子,即引力子.特别是引力子实际上是闭弦的最低能量振动模式.因此我们也说闭弦描述了引力(子).与之相对,开弦能够描述类似光子的规范粒子,并且开弦的末端可以连接到所谓的D膜上.

- 既然开弦代表规范理论,闭弦代表引力,那么弦论肯定包含规范理论和引力.这就是弦论成为统一四种力的基本理论的原因.

如果我们考虑N_c个排列在一起的D膜,那么开弦末端在D膜上链接的方式就有很多种,这样我们就能获得$SU(N_c)$规范场类型的自由度.当然,D膜本身也有空间上的维度,用p表示,$p=0$时表示类点的D膜,$p=1$表示类弦的,$p=2$表示类膜的,因此,D膜也叫做Dp膜.这些Dp膜描述了$p+1$维时空的规范理论.既然我们最关心的是四维时空的规范理论,那么最常用的就是$D3$膜.

我们知道(点)粒子在时空中的运动用世界线表示,而比粒子多一维的弦自然需要用(2维的)世界面来描述其运动.(数学上用$X^\mu(\tau,\sigma)$,τ,σ分别表示固有时和弦上点的位置)当然,对于自由运动的弦,我们不指望其可以描述场论中粒子的相互作用,因此我们需要考虑弦的相互作用.为了描述弦的相互作用,对于闭弦,引入弦耦合常数g_s,(开弦耦合常数$\tilde{g}_s=(g_s)^{1/2}$)这样弦的配分函数自然可以用g_s的幂次表示,事实上是$\frac{1}{g_s^\chi}$(χ是欧拉示性数),这说明弦与't hooft双线表示下的规范场类似,其配分函数都是关于二维曲面拓扑的展开.

一个重要的极限是所谓的弱耦合极限,也就是$g_s \ll 1$,此时,弦论退化为所谓的超引力理论,(一种具有超对称特性的引力理论)其作用量具有如下的典型形式:

$$S = \frac{1}{16\pi G_N^{(10)}} \int d^{10}x\sqrt{-g}\mathcal{R} + ... \tag{15.332}$$

可以看到这个作用量描述了一个10维时空的引力理论,$G_N^{(10)}$是10维时空的牛顿引力常数.当然,既然是超引力,作用量本身还包括与引力有超对称关系的费米子部分,也就是引力微子的贡献.(这里未明确给出)此外,注意到开弦退化后上述作用量也包含规范场,规范场耦合系数是g_{YM}.

那么引力常数$G_N^{(10)}$和规范场耦合常数g_{YM}与弦论的基本参数l_s, g_s有什么关系呢？为了得到$G_N^{(10)}$与g_s的关系,让我们把度规分解为平直时空度规$\eta_{\mu\nu}$和对平直时空度规的涨落部分$h_{\mu\nu}$,即$g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}$.这样超引力作用量可以展开成$h$和$h$导数的幂次形式:

$$S = \frac{1}{16\pi G_N^{(10)}} \int d^{10}x \{\partial h \partial h + h\partial h \partial h + h^2 \partial h \partial h + ...\} \tag{15.333}$$

如果把h解释为引力子,那么发射一个引力子的振幅正比于$\sqrt{G_N^{(10)}}$.同时,闭弦的相互作用也能表述引力子的发射,其振幅正比于g_s,因此我们有$G_N^{(10)} \sim g_s$.类似的,与Dp膜耦合的开弦退化的规范场作用量可以写成,

$$S = \frac{1}{g_{YM}^2} \int d^{p+1}x \{\partial A \partial A + A^2 \partial A + A^4\} \tag{15.334}$$

因此规范场粒子发射的振幅正比于g_{YM}.既然开弦发射规范粒子的振幅正比于$\tilde{g}_s = g_s^{1/2}$,因此$g_{YM}^2 \sim g_s$.

同时,根据量纲分析,$G_N^{(10)}$的量纲是长度L的8次幂,即$\dim[G_N^{(10)}] = \dim[L]^8$.而弦论中基本的长度尺度是$l_s$,因此我们有$G_N^{(10)} \sim g_s^2 l_s^8$.同理有$g_{YM}^2 \sim g_s l_s^{p-3}$.因此,我们发现引力常数和规范耦合常数与弦参数的关系如下:

$$\boxed{G_N^{(10)} \simeq g_s^2 l_s^8, \quad g_{YM}^2 \simeq g_s l_s^{p-3}} \tag{15.335}$$

如果我们进一步考虑弦论对于超引力的修正,那么最低阶项正比于$l_s^2 \mathcal{R}^2$,也就是

$$S = \frac{1}{16\pi G_N^{(10)}} \int d^{10}x \sqrt{-g}(\mathcal{R} + l_s^2 \mathcal{R}^2) + ... \tag{15.336}$$

修正项实际上源自我们积掉弦论中质量为$1/l_s$量级的有质量激发.注意到$l_s^2 \mathcal{R} \ll 1$时我们可以忽略弦论的修正.

现在,让我们比较弦论和规范理论的配分函数.对于规范理论我们有($\chi = 2 - 2h$)

$$\ln \mathcal{Z}_{gauge} = \sum_{h=0}^{\infty} N_c^{\chi} f_h(\lambda) \tag{15.337}$$

而弦论的配分函数可以写成

$$\ln \mathcal{Z}_{string} = \sum_{h=0}^{\infty} \left(\frac{1}{g_s}\right)^{\chi} \tilde{f}_h(l_s) \tag{15.338}$$

既然两者有相同的结构,我们猜测它们可能是相等的,也就是有

$$\mathcal{Z}_{gauge} = \mathcal{Z}_{string} \tag{15.339}$$

这样,比较$\ln \mathcal{Z}_{gauge}$和$\ln \mathcal{Z}_{gauge}$的对应部分,我们发现$N_c \sim g_s$或者说

$$\boxed{N_c^s \sim \frac{1}{g_s^s} \sim G_N^{(10)}} \tag{15.340}$$

而$\lambda \sim l_s$.

因此,我们看到大N_c规范理论的分析把我们引导到弦论(量子引力).但是,我们知道弦论工作的维度远高于通常四维场论的维度,例如玻色弦生活在26维时空而包含费米子的超弦则需要10个时空维度.因此,我们不可能用四维时空的弦论对应四维时空的规范理论.所以,目前为止的讨论表明,虽然大N_c规范理论可用弦论表示,但是弦论并不能合理的定义在四维时空.

为了实现弦论与规范理论更直接的对应,注意到弦论是一种引力理论,因此弦论的时空不仅可以是平直的,也可以是弯曲的,这样我们就能用弯曲空间的弦论来描述对应的大N_c规范理论.在这里,弯曲时空的维度可以大于四维,最典型的情况是五维时空,其中第五维是弯曲的而其他四维是平直的.[87]回忆黑洞熵的面积依赖,那么五维时空与四维时空的对应也是自然的.这样,我们可以说:

- 大N_c规范理论可以用五维弯曲时空表示.

此时,五维时空的度规是

$$ds_5^2 = \Omega^2(w)(-dt^2 + \sum_{i=1}^{3} dx_i^2) + dw^2 \tag{15.341}$$

这里(t, x_1, x_2, x_3)是大N_c规范理论的时空坐标而(t, x_1, x_2, x_3, w)是五维(引力)时空的坐标.

如果没有更多的信息,那么大N_c规范理论与弯曲时空的关系就无法明确给出.首先,我们还不清楚哪种规范理论可以用弯曲时空表示.也就是说我们不知道规范理论更像QCD还是像别的.其次,我们也不知道哪类弯曲时空可以用规范场表示,也就是度规中的因子$\Omega(w)$还不知道.为了解决这些问题,我们需要施加一些限制条件,这里主要是标度不变性.

首先,我们来看标度不变的经典规范理论.当一个理论没有固有尺度或者维度参数时,那么体系的物理在标度变换$x^\mu \to ax^\mu$下应该是不变的.这种标度不变性实际上是四维纯规范理论的重要特征.让我们考虑Maxwell电磁理论,它的作用量是$S = -\frac{1}{4e^2}\int d^4x F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$.在标度变换下,如果$A_\mu \to \frac{1}{a}A_\mu$,那么作用量是不变的,我们称Maxwell电磁理论具有经典意义上的标度不变性.当然,如果场$\Phi \to a^{-\Delta}\Phi$,那么Δ称为场的标度维度.显然,A_μ的标度维度是$\delta = 1$.

虽然四维时空的Maxwell理论是标度不变的,对于一般的规范理论,由于存在相互作用,系统的参数会受到修正,这会导致标度不变性的破坏.例如,对

[87]注意到超引力是10维的,那么除了这里的五个维度外,其他五个维度去哪里了呢?答案是它们被紧化也就是被卷到很小的曲面上,例如一个五维的球面上.

于$SU(N_c)$的Yang-Mills规范理论,单圈程度上的量子修正导致如下的β函数:

$$\beta(g_{YM}) = \mu\frac{dg_{YM}}{d\mu} = -\frac{11}{48\pi^2}g_{YM}^3 N_c \tag{15.342}$$

这里μ是重整化的尺度,也就是你在什么能量尺度观察体系.显然,随着重整化尺度μ的变化,耦合常数g_{YM}也会变化,这样标度不变性就难以实现了.

但是,有一类规范理论在量子层次上仍能保持标度不变性.最典型的例子就是$\mathcal{N}=4$的超对称Yang-Mills规范理论(SYM).$\mathcal{N}=4$意味着体系有四类超电荷,也就是有四种不同的超对称(操作),对于四维规范理论,这是最大可能的超对称.$\mathcal{N}=4$ SYM包括规范场A_μ,六个标量场ϕ_i以及四个Wely费米子λ_I:

$$S = \frac{1}{g_{YM}^2}\mathrm{Tr}\left[-\frac{1}{2}F_{\mu\nu}^2 - (D_\mu\phi_i)^2 - i\bar{\lambda}_I\gamma^\mu D_\mu\lambda_I + \mathcal{O}(\phi^4) + \mathcal{O}(\lambda\lambda\phi)\right] \tag{15.343}$$

在经典层次上,注意到规范场与标量场的标度维度是1而费米子是3/2,因此上述作用量具有标度不变性.在量子层次上,$\mathcal{N}=4$ SYM也具有标度不变性,特别是如果我们计算它在单圈修正下的β函数会发现:

$$\beta(g_{YM}) = \mu\frac{dg_{YM}}{d\mu} = -\frac{g_{YM}^3}{48\pi^2}N_c(11 - 2n_f - \frac{1}{2}n_s) \tag{15.344}$$

这里n_f, n_s分别是Wely费米子和标量场的数目.显然,注意到$\mathcal{N}=4$ SYM中$n_f = 4, n_s = 6$,因此$\beta(g_{YM}) = 0$,这样耦合系数没有量子修正因而经典层次上的标度不变性在考虑量子修正后仍然成立.

在讨论完规范理论的标度不变性后,让我们四维标度不变性对五维时空度规$ds_5^2 = \Omega^2(w)(-dt^2 + \sum_{i=1}^3 dx_i^2) + dw^2$的限制.在四维时空坐标的标度变换$x^\mu \to ax^\mu$下,如果$\Omega(w)$按照下列方式变化,那么度规是不变的:

$$\Omega^2(w) \to a^{-2}\Omega^2(w). \tag{15.345}$$

当然,注意到保持度规不变还要求dw^2不变,这只能说明标度变换下w仅有平移操作可以实现dw^2不变,也就是

$$w \to w + R\ln a \tag{15.346}$$

这里R是长度参数.这样,满足$w \to w + R\ln a$和$\Omega^2(w) \to a^{-2}\Omega^2(w)$要求的$\Omega(w)$只能是$\Omega(w) = e^{-w/R}$,因此五维时空的度规具有形式:

$$ds_5^2 = e^{-2w/R}(-dt^2 + \sum_{i=1}^3 dx_i^2) + dw^2 = \left(\frac{r}{R}\right)^2(-dt^2 + \sum_{i=1}^3 dx_i^2) + R^2\frac{dr^2}{r^2} \tag{15.347}$$

这里$r = Re^{-w/R}$.这里的度规就是五维AdS时空的度规,R称为AdS半径.这个时空对应于前面讨论的大N_c规范理论.当然,$\mathcal{N}=4$ SYM和五维AdS时空的对称性比当前讨论的要更大,这类对称性就是共形对称性(空间维度大于1时共形对称性由平移,旋转,标度和特殊共形变换构成),其具体细节在这里并不重要.

这样,考虑到标度不变性或者说共形对称性的限制,我们知道具有共形不变性的四维规范场论对应于五维AdS时空的弦论,也就是

$$\boxed{\mathcal{Z}_{CFT}=\mathcal{Z}_{AdS_5}} \tag{15.348}$$

这个结果称为GKPW关系.进一步,规范场论的参数N_c,λ与AdS时空参数R,l_s的关系是:

$$\boxed{N_c^2=\frac{\pi}{2}\frac{R^3}{G_N^{(5)}},\quad \lambda=\left(\frac{R}{l_s}\right)^4} \tag{15.349}$$

上述这些关系通常称为AdS/CFT字典,也就是规范场论和弦论互相翻译的规则.在大N_c极限和强耦合极限下($\lambda\gg 1$),$l_s\ll R$,由先前讨论可知,在弦论这边我们只需要考虑最低阶的贡献,也就是经典(超)引力,设引力的配分函数由作用量$\underline{S}_E$主导,这样有

$$\boxed{\mathcal{Z}_{CFT(N_c\gg\lambda\gg 1)}=e^{-\underline{S}_E}} \tag{15.350}$$

这个结果是AdS/CFT中最重要的公式,也是用这个理论计算各种物理量的基本出发点.

AdS/CFT的平衡态热力学

所谓AdS/CFT平衡态热力学,通常是指我们通过计算引力这边的配分函数来得到规范理论的配分函数或者自由能,然后通过它们再得到系统的熵,能量,比热或者压力.为了在引力这边,也就是AdS时空引入温度,最直接的方案就是考虑AdS时空的黑洞解,最简单的就是Schwarzschild-AdS黑洞.它在五维时空中的度规是

$$ds_5^2=\frac{dr^2}{\left(\frac{r}{R}\right)^2h(r)}-\left(\frac{r}{R}\right)^2h(r)dt^2+\left(\frac{r}{R}\right)^2(dx^2+dy^2+dz^2) \tag{15.351}$$

这里$h(r)=1-\left(\frac{r_0}{r}\right)^4$.显然,可以看到黑洞视界位于$h(r)=0$也就是$r=r_0$处.[88]根据之前关于黑洞热力学的讨论,我们知道如果黑洞度规是 $ds^2=-f(r)dt^2+\frac{dr^2}{f(r)}+...$,那么黑洞温度$T=\frac{f'(r_0)}{4\pi}$.因此,对于Schwarzschild-AdS黑洞,其温度为($f(r)=\left(\frac{r}{R}\right)^2h(r)$)

$$T=\frac{f'(r_0)}{4\pi}=\frac{1}{4\pi}\lim_{r\to r_0}\frac{d}{dr}(r/R)^2(1-(r_0/r)^4)=\frac{r_0}{\pi R^2}\propto r_0 \tag{15.352}$$

因此,我们发现Schwarzschild-AdS黑洞的温度正比于r_0,当$r_0\to 0$,也就是黑洞越来越小而趋于消失时,对偶的规范理论的温度也趋于零.

[88]一个有趣的事实是Schwarzschild-AdS黑洞解满足标度变换,也就是说如果令$x^\mu\to ax^\mu, r\to a^{-1}r, r_0\to a^{-1}r_0$,那么黑洞度规保持不变.这自然可以理解为对偶的规范场论在有限温度下也是标度不变的.

接下来,让我们计算黑洞熵.根据黑洞熵的BH公式,我们只需要得到黑洞的表面积(视界面积)A就可以直接获得黑洞熵.注意到系统在x,y,z方向原则上是无限大的,因此熵必然发散.为了避免直接的发散,让我们假设x,y,z方向的尺度为L_x,L_y,L_z.同时注意到空间部分的度规为$\left(\frac{r}{R}\right)^2(dx^2+dy^2+dz^2)$,因此五维AdS时空表面的面元是$dV_3=\frac{r}{R}dx\cdot\frac{r}{R}dy\cdot\frac{r}{R}dz$,而注意到黑洞视界位于$r=r_0$,因此黑洞的表面积是

$$A=\lim_{r\to r_0}\int\int\int dV_3=\left(\frac{r_0}{R}\right)^3L_xL_yL_z. \tag{15.353}$$

这样代入BH公式并考虑到需要采用五维时空的引力常数$G_N^{(5)}$,那么Schwarzschild-AdS黑洞熵是

$$S=\frac{A}{4G_N^{(5)}}=\frac{\left(\frac{r_0}{R}\right)^3L_xL_yL_z}{4G_N^{(5)}} \tag{15.354}$$

这样单位体积的熵,也就是熵密度为

$$s=\frac{S}{L_xL_yL_z}=\frac{\left(\frac{r_0}{R}\right)^3}{4G_N^{(5)}}. \tag{15.355}$$

利用$T=r_0/(\pi R^2)$以及AdS/CFT字典中$N_c^2=\frac{\pi}{2}\frac{R^3}{G_N^{(5)}}$,我们发现熵密度可以写成:

$$s_{BH}=\frac{\pi^2}{2}N_c^2T^3 \tag{15.356}$$

根据AdS/CFT对偶,我们可以把这个结果解释为强耦合的大N_c规范场论在有限温度下的熵密度.进一步,利用热力学第一定律$d\varepsilon=Tds$,那么能量密度是

$$\varepsilon=\frac{3}{8}\pi^2N_c^2T^4 \tag{15.357}$$

再利用欧拉关系$\varepsilon=Ts-P$可得压强为$P=\frac{1}{8}\pi^2N_c^2T^4=\frac{\varepsilon}{3}$.

- 需要指出,我们也可以直接计算AdS引力的配分函数来得到自由能密度,熵密度等热力学量.其要点是把AdS黑洞解代入AdS时空作用量,然后计算发现作用量是发散的,因此需要引入Gibbons-Hawking表面项和抵消项,这样有限的作用量是$\underline{S}_E=-\frac{\beta L_xL_yL_z}{16G_N^{(5)}}\frac{r_0^4}{R^5}$.代入$F=-T\ln\mathcal{Z}=-T\ln e^{-\underline{S}_E}$就得到自由能.

- 我们可以把AdS/CFT计算的熵密度与规范场论的结果进行比较.由于规范场论这边实际计算熵是十分困难的,因此我们考虑退耦和极限,也就是假定所有场都不考虑相互作用,若以四维时空$\mathcal{N}=4$ SYM为例,那么规范场(一种规范场,两类极化模式)和标量场(六个)加起来的玻色型自由度有$(2+6)\times(N_c^2-1)$.($SU(N_c)$规范理论的场都是矩阵形式,共有N_c^2-1个独立的矩阵,每个矩阵的系数相当于场的内部自由度,因此有N_c^2-1因子)由于超对称,费米子自由度数目与玻色子相同,但是每类费米子熵是玻色子

的7/8. 注意到每个(自由)玻色子自由度的熵密度是$s = \frac{2\pi^2 T^3}{45}$,这样体系的熵为$s_{free} = \frac{2\pi^2 T^3}{45}(8 + 8 \times 7/8)(N_c^2 - 1) = \frac{2\pi^2 (N_c^2-1)}{3} T^3$. 在大$N_c$极限下,$s_{BH} = \frac{3}{4} s_{free}$.这说明强耦合极限和退耦合(无相互作用)极限的熵量级上一致但取值不同,因此这暗示体系的性质在这两个极限下并不绝热联系在一起.

紧致的$U(1)$量子规范理论

Polyakov在1977年提出了电磁场的量子化晶格版本,即$U(1)$晶格规范理论.让我们考虑一个d维超立方晶格,并且在晶格链接(link)上定义场变量,即一对正则共轭量:

$$\hat{A}_{ij} = -\hat{A}_{ji}, \quad \hat{E}_{ij} = -\hat{E}_{ji} \tag{15.358}$$

其中$\hat{A}_{ij}$代表i,j格点间链接上的矢量势,而$\hat{E}_{ij}$表示电场.既然这两者是一对共轭变量,那么根据量子力学的一般要求,它们满足如下正则对易关系:

$$[\hat{A}_{ij}, \hat{E}_{ij}] = i \tag{15.359}$$

也就是同一个链接上的矢量势和电场具有交换的对称性,而不同链接上的则完全对易. 一个简单的量子哈密顿量如下:

$$\hat{H} = -K \sum_p \cos(\nabla \times \hat{A})_p + K' \sum_i (\nabla \cdot \hat{E})_i^2 + \frac{U}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{E}_{ij}^2 \tag{15.360}$$

这里我们引入了晶格版本的矢量场旋度,其表示对一个plaquette上所有矢量势的求和

$$(\nabla \times \hat{A})_p = \sum_{i \in p} \hat{A}_{i,i+1} \tag{15.361}$$

对于简单的二维正方晶格,就是对每个小正方形中四个链接上的矢量势求和.注意到矢量势的旋度就是磁场,那么我们有$\hat{B}_p = (\nabla \times \hat{A})_p$, 也就是每一个plaquette上可以定义一个磁场$\hat{B}_p$.

同时,晶格版本的矢量场散度是指从某一个固定格点i出发到最近邻格点的所有电场的和:

$$(\nabla \cdot \hat{E})_i = \sum_{j=nn} \hat{E}_{ij} \tag{15.362}$$

对于二维晶格的例子,则有

$$(\nabla \cdot \hat{E})_i = \hat{E}_{i,i+x} + \hat{E}_{i,i-x} + \hat{E}_{i,i+y} + \hat{E}_{i,i-y} = \hat{E}_{i,i+x} - \hat{E}_{i-x,i} + \hat{E}_{i,i+y} - \hat{E}_{i-y,i} \tag{15.363}$$

如果我们要求系统的波函数是关于$\hat{A}_{ij}$的2π周期函数:

$$\Psi(A_{ij} + 2\pi, ...) = \Psi(A_{ij}, ...) \tag{15.364}$$

那么从对易关系可以知道$e^{i\theta\hat{E}_{ij}}$是一个幺正变换算符,其作用是把矢量势$\hat{A}_{ij}$ 移动θ:

$$e^{i\theta\hat{E}_{ij}}\hat{A}_{ij}e^{-i\theta\hat{E}_{ij}} = \hat{A}_{ij} + \theta \tag{15.365}$$

既然幺正算符移动矢量势,那么先前2π周期的要求相当于是幺正算符作用于矢量势时取的角度$\theta = 2\pi$,这个幺正操作作用波函数应该不变,即有

$$e^{i2\pi\hat{E}_{ij}}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \tag{15.366}$$

这就说明$\hat{E}_{ij}$的本征值应是整数,而同时矢量势$\hat{A}_{ij}$的本征值范围可以限制在$[0, 2\pi)$ 的区域中,这就是紧致的涵义.

当然,矢量势$\hat{A}_{ij}$在规范变换$\hat{U} = e^{i\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{E}_{ij}(\chi_i - \chi_j)}$下具有$U(1)$规范对称性:

$$\hat{A}_{ij} \to \hat{A}_{ij} + \chi_i - \chi_j \tag{15.367}$$

同时,注意到$(\nabla\cdot\hat{E})_i$与哈密顿量对易,而我们并未在模型中包含任何电荷自由度,也就是体系电荷守恒,也就是说$\hat{H}$的本征态可以选取为电荷数的本征态,即有

$$(\nabla\cdot\hat{E})_i|\Psi\rangle = q_i|\Psi\rangle \tag{15.368}$$

这里q_i代表i格点上的电荷数.对于真空态,选取所有格点的电荷都为零$q_i = 0$.

接下来考虑$\hat{E}^2$项为零的极限,此时$(\nabla\cdot\hat{E})_i$与$\hat{B}_p$都与哈密顿量对易,这样基态时有所有格点电荷为零,同时所有plqaquett 的磁场也为零.

如果相比于真空态,磁场有一个小的涨落(由$\hat{E}^2$诱导),那么可以展开cos 项可得

$$\hat{H} = \frac{K}{2}\sum_p \hat{B}_p^2 + K'\sum_i q_i^2 + \frac{U}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{E}_{ij}^2 \tag{15.369}$$

显然这个形式很像通常电磁场能量,在连续极限下有

$$\hat{H} \simeq \int d^dx\left[\frac{\varepsilon}{2}\hat{\vec{E}}^2 + \frac{1}{2\mu}\hat{\vec{B}}^2\right] \tag{15.370}$$

此时光子具有无能隙的线性色散关系,光速为$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}$. 显然,这这里电荷之间具有经典的$1/r$库伦势$\frac{q_1q_2}{r_{12}}$, 所以也称为库伦相.当然,体系也存在有能隙的磁荷,这种磁荷在B_p比较大时存在,一般也称为磁单极(magnetic monopole)或直接称为单极.

Polyakov证明在二维紧致$U(1)$规范理论中磁单极总是存在,这导致系统进入禁闭态,电荷之间能量随距离线性变化.而在三维情况下,在K/U大于临界值时可以出现退禁闭态,也就是库伦相,此时电荷和规范场都作为可观测粒子存在.

- 这里讨论的紧致$U(1)$规范理论可能作为量子自旋冰(quantum spin ice), 例如$Dy_2Ti_2O_7$,$Ho_2Ti_2O_7$的低能有效理论描述.

第十五章习题

习题1:经典规范场

Q1:解释什么是Elitzur定理.经典规范场的面积律和周长律又是什么意思.

Q2:考虑定义在三角形上包含三个Ising自旋的晶格规范理论模型,其哈密顿量是$H=-J\sigma_{12}\sigma_{23}\sigma_{31}(J>0)$.试找出系统所有状态并指明其基态时自旋的构型.

Q3:判断Q2中的模型是否具有整体Z_2对称性和Z_2规范对称性.

习题2:Kitaev自旋链

Q1:通常的Kitaev模型定义在二维六角晶格上,现考虑其一维投影,即Kitaev自旋链模型(图15.36(d))

$$H=-\sum_{j=odd}\left(J_x\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_{j+1}^x+J_y\hat{\sigma}_{j+1}^y\hat{\sigma}_{j+2}^y\right)$$

利用Jordan-Wigner变换证明其费米子表示为

$$H_K=-\sum_{j=odd}\left[J_x\left(\hat{f}_j^\dagger-\hat{f}_j\right)\left(\hat{f}_{j+1}^\dagger+\hat{f}_{j+1}\right)-J_y\left(\hat{f}_{j+1}^\dagger+\hat{f}_{j+1}\right)\left(\hat{f}_{j+2}^\dagger-\hat{f}_{j+2}\right)\right].$$

Q2:证明上述费米子模型的激发谱为$E_k=\sqrt{J_x^2+J_y^2+2J_xJ_y\cos(2ka)}$,并指出$J_x,J_y$满足何种条件是激发谱是无能隙的.

Q3:计算$J_x=J_y$时Kitaev模型的低温热容.

习题3:Z_2规范对称性

Q1:考虑定义在一维链link上的Z_2规范场$\hat{\mu}^x,\hat{\mu}^z$和无自旋费米子$\hat{c}$

$$\hat{H}=-J\sum_j\hat{c}_j^\dagger\hat{\mu}_{j,j+1}^z\hat{c}_{j+1}+\text{H.c.}-\mu\sum_j\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j-h\sum_j\hat{\mu}_{j,j+1}^x \tag{15.371}$$

试证明上述模型满足Z_2规范对称性.

Q2:当$h=0$时,设$\hat{\mu}_{j,j+1}^z=\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_{j+1}^x$,这样定义$\hat{f}_j=\hat{c}_j\hat{\sigma}_j^x$,证明$[\hat{f}_j,\hat{f}_{j'}^\dagger]_+=\delta_{j,j'},[\hat{f}_j,\hat{f}_{j'}]_+=[\hat{f}_j^\dagger,\hat{f}_{j'}^\dagger]_+=0$.

Q3:在Q2的情况下指出$|\mu|>2J$和$|\mu|<2J$时,$(J>0)$用$\hat{f}$费米子表示的基态处于什么状态,原始费米子$\hat{c}$又处于什么基态.

Bibliography

[1] F. J. Wegner, Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions without Local Order Parameters, J. Math. Phys. **12**, 2259 (1971).

[2] J. B. Kogut, An introduction to lattice gauge theory and spin systems, Rev. Mod. Phys. **51**, 659 (1979).

[3] R. Melko, Quantum Many-Body Physics, http://pirsa.org/C15078.

[4] N. Nagaosa, Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics, 第三章.

[5] E. Fradkin and S. H. Shenker, Phase diagrams of lattice gauge theories with Higgs fields, Phys. Rev. D **19**, 3682 (1979).

[6] G. A. Jongeward, J. D. Stack and C. Jayaprakash, Monte Carlo calculations on Z_2 gauge-Higgs theories, Phys. Rev. D **21**, 3360 (1980).

[7] C. Prosko, S.-P. Lee and J. Maciejko, Simple Z_2 lattice gauge theories at finite fermion density, Phys. Rev. B **96**, 205104 (2017).

[8] A. Smith, J. Knolle, D. L. Kovrizhin and R. Moessner, Disorder-Free Localization, Phys. Rev. Lett. **118**, 266601 (2017).

[9] B. Zeng, X. Chen, D.-L. Zhou and X.-G. Wen, Quantum information Meets Quantum Matter

[10] E. Fradkin, Field Theories of Condensed Matter Physics, 第十七章

[11] N. Laflorencie, Physics Reports **646**, 1-59 (2016).

[12] M. A. Levin and X.-G. Wen, String-net condensation: A physical mechanism for topological phases, Phys. Rev. B **71**, 045110 (2005).

[13] J. Vidal, S. Dusuel, and K. P. Schmidt, Low-energy effective theory of the toric code model in a parallel magnetic field, Phys. Rev. B **79**, 033109 (2009).

[14] I. S. Tupitsyn, A. Kitaev, N. V. Prokofev, and P. C. E. Stamp, Topological multicritical point in the phase diagram of the toric code model and three-dimensional lattice gauge Higgs model, Phys. Rev. B **82**, 085114 (2010).

[15] F. Wu, Y. Deng, and N. Prokofev, Phase diagram of the toric code model in a parallel magnetic field, Phys. Rev. B **85**, 195104 (2012).

[16] X.-Y. Feng, G.-M. Zhang and T. Xiang, Topological Characterization of Quantum Phase Transitions in a Spin-1/2 Model, Phys. Rev. Lett. **98**, 087204 (2007).

[17] K. Le Hur, A. Soret and F. Yang, Majorana spin liquids, topology, and superconductivity in ladders, Phys. Rev. B **96**, 205109 (2017).

[18] J. Frank, E. Huffman and S. Chandrasekharan, Emergence of Gauss' law in a Z_2 lattice gauge theory in $1+1$ dimensions, Physics Letters B **806**, 135484 (2020).

[19] M. Hohenadler and F. F. Assaad, Fractionalized Metal in a Falicov-Kimball Model, Phys. Rev. Lett. **121**, 086601 (2018).

Chapter 16

隶粒子与规范理论:劈裂电子不可避免

隶粒子的引入:只能避开电子

在粒子物理的标准模型当中,中子质子等组成原子核的各类强子由更小的基本单元,即带分数电荷的六种夸克构成.夸克的概念由Gell-Mann提出,(1969年诺贝尔物理学奖)而实际上类似观念即所谓的部分子(parton)模型早就由Feynman提出并用以研究高能散射问题.自从夸克概念提出以来,人们还没有在实验上发现单独存在的自由夸克,这就是所谓的夸克禁闭现象,意指夸克总是被限制在强子中,我们观测不到单个夸克,因而也探测不到单个夸克携带的分数电荷.

在凝聚态物理研究当中,我们早已知晓处理的对象是大量的电子以及原子实,并不涉及高能物理中那些基本粒子.对于相互作用比较弱的系统,把体系的基本组元理解为是重整化了的电子(准粒子)是我们的基本出发点,这也反映在费米液体理论当中.然而实验发现分数量子霍尔系统,铜氧化物以及重费米子材料的很多性质都明显偏离金属或者说费米液体的一般行为(幂律或对数发散的热熔和磁化率,准线性的电阻,反常的霍尔系数),这提醒人们考虑电子的强关联效应,也就说我们面对的是电子相互作用完全不能当做微扰处理,而一般的Hartree-Fock-Bogoliubov平均场以及围绕该平均场态的RPA近似也无法正常工作的情况.

为了处理电子强关联问题,一种流行并且实用的方式是把电子拆解(分数化)为一些虚拟粒子,然后假定系统的基本物理,特别是强关联效应由这些相互作用不太强的虚拟粒子描述,这就是强关联电子系统研究中著名的隶粒子(slave-particle)或者说部分子方法.常见的隶粒子方法如下:

- 隶玻色子(slave-boson)[1, 2, 3]:t-J 模型,大U极限Hubbard 模型,Anderson模型和周期Anderson模型;
- Schwinger费米子,Schwinger玻色子[4]:用于处理量子自旋模型,例如Heisenberg模型和Kondo 晶格模型;
- KR玻色子[5, 6],隶转子(slave-rotor)[7],隶自旋(slave-spin)[8]:有限UHubbard模型,Anderson模型和周期Anderson模型;
- Jordan-Wigner变换/磁通钉扎[9]:一维量子XY,Ising和Heisenberg模型,二维量子霍尔系统.

以上这些隶粒子方法的命名主要依据改写后粒子的统计属性,例如隶玻色子指的是把电子改写为一个玻色子和一个费米子的组合体;隶转子则说明电子由转子和费米子构成.当我们把原始的哈密顿量用新粒子改写后,通常哈密顿量会变得更为复杂,其最明显表现是Hilbert空间由于隶粒子的引入而被放大,同时哈密顿量显示局域规范不变性.这些定义在晶格上具有局域规范对称的哈密顿量实际上对应的就是晶格规范理论模型.我们根据规范对称性的类型可以把这些理论称为Z_2, Z_N, $U(1)$和$SU(2)$隶粒子理论.

由于隶粒子模型的复杂性,通常解析处理只能采取平均场和基于平均场的连续极限规范场论形式.对于典型的隶玻色子,其平均场近似称为隶玻色子平均场理论(slave-boson mean-field theory),同理也会看到隶转子和隶自旋平均场近似.以平均场态为基本参考考虑相位自由度的涨落一般导致紧致的量子晶格规范理论模型.对于晶格规范理论,有意义的情况是规范场处于退禁闭态,此时隶粒子之间可以相对自由地运动,显示一些准粒子的特性,例如在量子自旋液体研究中最常见的Dirac费米子和自旋子费米海.相反,如果规范场处于禁闭态,那么隶粒子之间就会存在线性势使得任何准粒子激发都被抑制,此时隶粒子方法相比于原始的电子描述并没有任何优势.先前已经知道Z_2纯量子晶格规范理论在$2+1$维及以上可以存在退禁闭态,而纯粹的$U(1)$ 量子晶格规范理论只有在大于等于$3+1$维时才有退禁闭现象(我们生活世界的QED就是退禁闭的).对于与物质场耦合的晶格规范场论,一般而言物质场的存在总会增加退禁闭的可能性,同时也会导致Higgs相产生.但是模型的复杂性导致相关的退禁闭问题并没有明确的结论.目前人们相信$2+1$维QED在大N(N表示费米子分量数)极限下也可能存在退禁闭态,[10]而$2+1$维费米海与$U(1)$规范场耦合问题也可能有退禁闭发生.

在下面的讨论中,我们将以Z_2隶自旋理论为例,详细分析相关的隶粒子平均场近似以及超越平均场的规范理论形式.

Z_2 slave-spin表示:再多一次劈裂电子

Z_2 slave-spin表示的基本形式

为简单起见,考虑单带Hubbard模型:

$$\hat{H} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + U\sum_{i}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} - \mu\sum_{i\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma} \tag{16.1}$$

注意到每一个格点总计有四个态,即

$$|0\rangle \tag{16.2}$$

$$|\uparrow\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{\uparrow}|0\rangle \tag{16.3}$$

$$|\downarrow\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{\downarrow}|0\rangle \tag{16.4}$$

$$|d\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{\downarrow}|0\rangle \tag{16.5}$$

那么可以尝试性地做如下分解,即把电子算符$\hat{c}_{\sigma}$拆分为标准的费米子算符$\hat{f}_{\sigma}$ 与辅助的赝/隶Ising自旋算符$\hat{\tau}^{x}$:

$$\hat{c}_{\sigma} = \hat{\tau}^{x}\hat{f}_{\sigma} \tag{16.6}$$

这样,我们发现

$$[\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma'}]_{+} = [\hat{f}_{i\sigma}, \hat{f}_{j\sigma'}]_{+}\hat{\tau}^{x}_{i}\hat{\tau}^{x}_{j} = 0 \tag{16.7}$$

$$[\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}, \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma'}]_{+} = [\hat{f}^{\dagger}_{i\sigma}, \hat{f}^{\dagger}_{j\sigma'}]_{+}\hat{\tau}^{x}_{i}\hat{\tau}^{x}_{j} = 0 \tag{16.8}$$

$$[\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma'}]_{+} = [\hat{f}_{i\sigma}, \hat{f}^{\dagger}_{j\sigma'}]_{+}\hat{\tau}^{x}_{i}\hat{\tau}^{x}_{j} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\hat{\tau}^{x}_{i}\hat{\tau}^{x}_{j} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}, \quad (\hat{\tau}^{x}_{j})^{2} = 1 \tag{16.9}$$

也就是说电子算符的反对易关系可以完全由辅助费米子与隶自旋表示.

同时,既然我们已经用新的费米子和隶自旋改写了电子算符,那么对应的Hilbert空间由费米子与Ising自旋的直积态构成(这里选取$\hat{\tau}^{z}$的本征态$\hat{\tau}^{z}|\uparrow/\downarrow\rangle = \pm|\uparrow/\downarrow\rangle$ 作为基矢):

$$|0\rangle = |0\rangle_{f}|\uparrow\rangle \tag{16.10}$$

$$|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_{f}|\downarrow\rangle = \hat{f}^{\dagger}_{\uparrow}|0\rangle_{f}|\downarrow\rangle \tag{16.11}$$

$$|\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle_{f}|\downarrow\rangle = \hat{f}^{\dagger}_{\downarrow}|0\rangle_{f}|\downarrow\rangle \tag{16.12}$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle_{f}|\uparrow\rangle = \hat{f}^{\dagger}_{\uparrow}\hat{f}^{\dagger}_{\downarrow}|0\rangle_{f}|\uparrow\rangle \tag{16.13}$$

这样,当电子或者辅助费米子双占据$|d\rangle$或者空占据$|0\rangle$时,$\hat{\tau}^{z} = +1$,单占据时,则有$\hat{\tau}^{z} = -1$,也就是Ising自旋的取值确定了费米子占据的奇偶性.

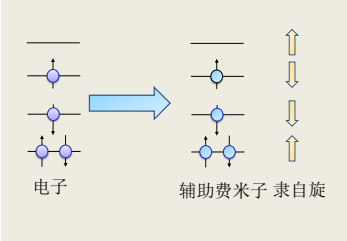


Figure 16.1: 物理电子的Z_2隶自旋表示,相当于把电子拆分为一个辅助费米子和一个隶自旋.

但是,注意到除了以上四个物理态以外,还有四个非物理态存在

$$|0\rangle_f|\downarrow\rangle \tag{16.14}$$

$$|\uparrow\rangle_f|\uparrow\rangle \tag{16.15}$$

$$|\downarrow\rangle_f|\uparrow\rangle \tag{16.16}$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle_f|\downarrow\rangle \tag{16.17}$$

注意到这几个非物理态实际上表明Ising自旋感受到错误的占据态奇偶性.显然,一个正确的物理理论或者说正确的算符表示应该保持物理空间(Hilbert空间)的不变性,因此,我们需要额外的限制条件,或者说约束条件来把系统限制到正确的物理空间中,排除非物理态的贡献.对于当前的问题,注意到Ising自旋的取向上下对应占据数的奇偶,那么我们有

$$\frac{\hat{\tau}^z+1}{2}=(\hat{n}^f-1)^2,\quad \hat{n}^f=\hat{f}_\uparrow^\dagger\hat{f}_\uparrow+\hat{f}_\downarrow^\dagger\hat{f}_\downarrow \tag{16.18}$$

自然,对于多格点的晶格系统,对每一个格点,我们有

$$\frac{\hat{\tau}_i^z+1}{2}=(\hat{n}_i^f-1)^2,\quad \hat{n}_i^f=\hat{f}_{i\uparrow}^\dagger\hat{f}_{i\uparrow}+\hat{f}_{i\downarrow}^\dagger\hat{f}_{i\downarrow} \tag{16.19}$$

显然,只要系统满足以上的约束条件,那么每个格点8个可能态中的四个非物理态就被自动排除掉,剩下的就是四个物理态.

这样,我们得到slave-spin即隶自旋表示的两个基本关系:

- $\hat{c}_{i\sigma}=\hat{\tau}_i^x\hat{f}_{i\sigma}$
- $\frac{\hat{\tau}_i^z+1}{2}=(\hat{n}_i^f-1)^2$

把这两个关系代入Hubbard模型可得

$$\hat{H} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma} + U\sum_i\left(\frac{\hat{\tau}_i^z}{4} - \frac{1}{4} + \frac{\hat{n}_i^f}{2}\right) - \mu\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}$$

$$\boxed{\hat{H}_{slave-spin} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma} + U\sum_i\frac{\hat{\tau}_i^z - 1}{4} + \left(-\mu + \frac{U}{2}\right)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}}$$

其中第二项由如下得到:

$$(\hat{n}^f - 1)^2 = 2\hat{n}_\uparrow^f\hat{n}_\downarrow^f + 1 - \hat{n}^f \Rightarrow \boxed{\hat{n}_\uparrow^f\hat{n}_\downarrow^f = \frac{(\hat{n}^f - 1)^2 - 1 + \hat{n}^f}{2} = \frac{\frac{\hat{\tau}^z+1}{2} - 1 + \hat{n}^f}{2}} \tag{16.20}$$

而对于化学势项,我们有$\hat{c}_{i\sigma}^\dagger\hat{c}_{i\sigma} = (\hat{\tau}_i^x)^2\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma} = \hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}$. 既然以上的变换都是精确的,这说明原始的电子Hubbard模型等价于slave-spin表示下的模型$\hat{H}_{slave-spin}$,当然对于第二个哈密顿量我们还需要补充上约束条件 $\frac{\hat{\tau}_i^z+1}{2} = (\hat{n}_i^f - 1)^2$.

原则上,在满足约束条件的情况下求解slave-spin哈密顿量就可以得到Hubbard模型的所有性质,然而简单的观察可以发现,$\hat{H}_{slave-spin}$本身就是一个相互作用的多体模型,不同格点费米子跃迁依赖于格点间Ising 自旋的耦合强弱,并且还需要满足非线性的约束条件,这样看来slave-spin变换后的模型更为复杂.

- 我们注意到如果不考虑约束项,$\hat{H}_{slave-spin}$一般不存在费米子的负符号问题,可用行列式量子蒙特卡洛进行数值求解.[1]

对于系统的平衡态热力学性质,体系的配分函数是

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}} = \mathrm{Tr}[\hat{P}_I e^{-\beta\hat{H}_{slave-spin}}] \tag{16.21}$$

在这里$\hat{P}_I$代表到物理态的投影,其可由如下方式构造.首先注意到约束条件可以写为

$$\hat{Q}_i = \frac{\hat{\tau}_i^z + 1}{2} - (\hat{n}_i^f - 1)^2 = 0 \tag{16.22}$$

如果我们观察$\hat{Q}_i$的本征值,则除了0以外还有+1与−1.现在,只有本征值为零的情况才对应物理上的要求,这样我们可以有

$$\hat{P}_I^i = 1 - \hat{Q}_i^2, \quad \hat{P}_I = \prod_i\hat{P}_I^i = \prod_i(1 - \hat{Q}_i^2) \tag{16.23}$$

这样我们得到

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}[\hat{P}_I e^{-\beta\hat{H}_{slave-spin}}] = \mathrm{Tr}\left[\prod_i(1 - \hat{Q}_i^2)e^{-\beta\hat{H}_{slave-spin}}\right] \tag{16.24}$$

- 投影算符$\hat{P}_I$还可以写为$\hat{P}_I = \prod_i\hat{P}_I^i = \prod_i(\frac{1}{2} + \frac{\hat{\tau}_i^z\hat{\Omega}_i}{2}), \hat{\Omega}_i = 2(\hat{n}_i^f - 1)^2 - 1$。

[1]时间反演对称保证自旋向上与向下费米子贡献的行列式的乘积(权重)是正定的.

- 显然投影算符$\hat{P}_I$很难处理,在实际的计算中,特别是在接下来的平均场退耦处理中,我们将用平均约束代替严格的约束条件.

但是,作为一种slave-particle方法,其最主要的物理动机其实是把多体关联的主要部分归到把电子分数化,即把电子算符写为一些辅助粒子操作,我们认为剩下的相互作用是比较弱的,可以用平均场加微扰论的框架进行处理.这实际上相当于给体系找一些不同于裸电子的新的准粒子,然后像Landau处理Fermi液体那样研究弱相互作用下的准粒子系统,期望通过微扰定义良好的准粒子态得到系统的低能的普适热力学和粒子输运性质.对于当前的问题,假定slave-spin哈密顿量可以用近似的平均场方法处理,得到的基本物理应该至少定性与原始的Hubbard模型相似.

平均场退耦

$$\hat{H}_{slave-spin} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma} + U\sum_i \frac{\hat{\tau}_i^z - 1}{4} + \left(-\mu + \frac{U}{2}\right)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}$$

对于哈密顿量$\hat{H}_{slave-spin}$,做如下的平均场近似,即

$$\boxed{\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma} \simeq \langle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\rangle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma} + \hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle - \langle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\rangle\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle} \tag{16.25}$$

这样我们发现哈密顿量退耦合为两部分,即辅助费米子部分$\hat{H}_f$和Ising自旋部分$\hat{H}_{Ising}$

$$\hat{H}_f = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}\langle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\rangle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma} + \left(-\mu + \frac{U}{2}\right)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma} \tag{16.26}$$

$$\hat{H}_{Ising} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x + \frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^z \tag{16.27}$$

$$E_0 = -\frac{U}{4}N_s + \sum_{ij,\sigma} t_{ij}\langle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\rangle\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle \tag{16.28}$$

这里的E_0表示常数能量以及平均场参数导致的系统总能量的移动.为了简化表达,令

$$\langle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\rangle = I_{ij} \tag{16.29}$$

$$\sum_\sigma\langle\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}\rangle = \chi_{ij} \tag{16.30}$$

这样我们得到

$$\hat{H}_f = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} I_{ij} \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} + \left(-\mu + \frac{U}{2}\right) \sum_{i\sigma} \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{i\sigma} \tag{16.31}$$

$$\hat{H}_{Ising} = -\sum_{ij} t_{ij} \chi_{ij} \hat{\tau}^x_i \hat{\tau}^x_j + \frac{U}{4} \sum_i \hat{\tau}^z_i \tag{16.32}$$

$$E_0 = -\frac{U}{4} N_s + \sum_{ij} t_{ij} I_{ij} \chi_{ij} \tag{16.33}$$

注意到我们并未考虑约束项的效果,为了近似计入其贡献我们可以给体系加上一系列拉格朗日乘子项,即

$$\sum_i \lambda_i \left(\frac{\hat{\tau}^z_i + 1}{2} - (\hat{n}^f_i - 1)^2 \right) \tag{16.34}$$

对于一个均匀的体系,通常可设$\lambda_i = \lambda$即与空间位置无关,这样体系的平均场哈密顿量是

$$\hat{H}_f = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} I_{ij} \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} + \left(-\mu + \frac{U}{2}\right) \sum_{i\sigma} \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{i\sigma} - \lambda \sum_i (\hat{n}^f_i - 1)^2$$

$$\hat{H}_{Ising} = -\sum_{ij} t_{ij} \chi_{ij} \hat{\tau}^x_i \hat{\tau}^x_j + \left(\frac{U}{4} + \lambda\right) \sum_i \hat{\tau}^z_i \tag{16.35}$$

$$E_0 = \left(-\frac{U}{4} + \frac{\lambda}{2}\right) N_s + \sum_{ij} t_{ij} I_{ij} \chi_{ij} \tag{16.36}$$

- 注意到$\hat{H}_f$仍然是一个相互作用模型,这样并未得到好的形式.但对于半满粒子空穴对称系统,例如只有最近邻跃迁的正方,六角以及立方晶格,能谱关于零的对称性说明$-\mu + U/2 = 0$ 并且拉格朗日乘子λ也为零.在下面的所有讨论都假定这种情况,于是简化的体系哈密顿量具有如下形式:

$$\hat{H}_f = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} I_{ij} \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} \tag{16.37}$$

$$\hat{H}_{Ising} = -\sum_{ij} t_{ij} \chi_{ij} \hat{\tau}^x_i \hat{\tau}^x_j + \frac{U}{4} \sum_i \hat{\tau}^z_i \tag{16.38}$$

$$E_0 = -\frac{U}{4} N_s + \sum_{ij} t_{ij} I_{ij} \chi_{ij} \tag{16.39}$$

显然$\hat{H}_f$ 在给定的平均场Ising自旋关联I_{ij}以及电子跃迁t_{ij}下完全是一个自由费米子问题,求解相当直接.如果具有平移不变性,那么可利用傅里叶变换转换至动量空间得到对角化的形式和能带色散关系,若不具有平移不变性,那么可以直接在实空间对角化单粒子哈密顿量,得到所有单粒子本征值和本征态.

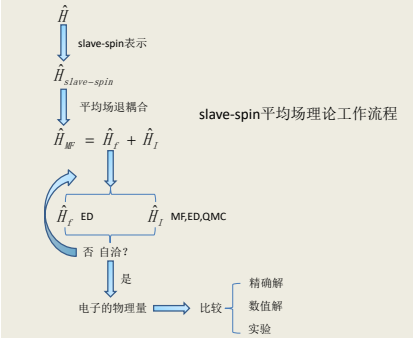


Figure 16.2: Slave−spin平均场理论的工作流程图,其核心是自洽求解辅助费米子哈密顿$\hat{H}_f$

和隶自旋哈密顿量$\hat{H}_I$.

对于$\hat{H}_{Ising}$,费米子的平均场参数χ_{ij} 给定后相当于是一个量子横场Ising模型,横场的强度是$U/4$,而Ising耦合的强度是格点依赖的$\tilde{t}_{ij} \equiv t_{ij}\chi_{ij}$.一般而言,$\hat{H}_{Ising}$在格点很少时(完全对角化$N_s \leq 16$,利用所有对称性并关注基态$N_s \leq 40$)可以通过精确对角化得到所有的本征值与本征态,而当系统比较大时,如果等效的Ising耦合$\tilde{t}_{ij}$是实数,那么仿照之前铁磁型量子Ising 模型的处理,我们可把这里的量子Ising模型映射到一个Boltzman权重正定的等效经典Ising模型,然后采用蒙特卡洛方法直接模拟系统的平衡态性质.当然,在最粗糙的近似下,也可用单格点或者团簇平均场的办法来近似处理$\hat{H}_f$,这在远离临界点时应是定性正确的.

单格点平均场近似

现在,采用最简单的单格点平均场近似,即

$$\hat{\tau}_i^x \hat{\tau}_j^x \simeq \langle \hat{\tau}_i^x \rangle \hat{\tau}_j^x + \hat{\tau}_i^x \langle \hat{\tau}_j^x \rangle - \langle \hat{\tau}_i^x \rangle \langle \hat{\tau}_j^x \rangle \tag{16.40}$$

如果我们定义磁性序参量$m_i \equiv \langle \hat{\tau}_i^x \rangle$,那么单格点近似下的模型是

$$\hat{H}_{Ising} \simeq -\sum_{ij} t_{ij}\chi_{ij}(m_j\hat{\tau}_i^x + m_i\hat{\tau}_j^x - m_i m_j) + \frac{U}{4}\sum_i \hat{\tau}_i^z \tag{16.41}$$

进一步,我们如果假定平均场序参量m_i依然具有体系的平移不变性,那么这说明 $m_i = m$,即序参量是均匀的,那么我们发现

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{Ising} &\simeq -\sum_{ij} t_{ij}\chi_{ij}(m\hat{\tau}_i^x + m\hat{\tau}_j^x - m^2) + \frac{U}{4}\sum_i \hat{\tau}_i^z & (16.42)\\
&= -\sum_{ij}(t_{ij}\chi_{ij} + t_{ji}\chi_{ji})m\hat{\tau}_i^x + \frac{U}{4}\sum_i \hat{\tau}_i^z + m^2\sum_{ij} t_{ij}\chi_{ij} & (16.43)\\
&= \sum_i \left[-mJ\hat{\tau}_i^x + \frac{U}{4}\hat{\tau}_i^z\right] + \frac{m^2 J}{2}N_s, \quad J \equiv \sum_j (t_{ij}\chi_{ij} + t_{ji}\chi_{ji})
\end{aligned}$$

也就是量子Ising模型转化为等效的单量子自旋问题,显然对角化2×2矩阵

$$H_{site}=\begin{pmatrix}\frac{U}{4} & -mJ\\ mJ & -\frac{U}{4}\end{pmatrix} \tag{16.44}$$

得其本征值为

$$\pm E=\pm\sqrt{\left(\frac{U}{4}\right)^2+(mJ)^2} \tag{16.45}$$

这样我们得到单格点的配分函数是

$$\mathcal{Z}=e^{\beta E}+e^{-\beta E}=2\cosh(\beta E) \tag{16.46}$$

那么相应的自由能是

$$\mathcal{F}=-T\ln[2\cosh(\beta E)]+\frac{m^2J}{2} \tag{16.47}$$

这样自由能对序参量求极值可得

$$\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial m}=0\Rightarrow mJ=\frac{mJ^2}{E}\tanh(\beta E)=0\Rightarrow 1=\frac{J}{E}\tanh(\beta E) \tag{16.48}$$

当体系在零温时,我们有$\beta=\infty,\tanh(\beta E)=1$,那么以上平均场方程简化为

$$1=\frac{J}{\sqrt{(U/4)^2+(mJ)^2}}\Rightarrow m^2=1-\left(\frac{U}{4J}\right)^2 \tag{16.49}$$

显然,当$U>4J$时,序参量$m=0$,而当$U<4J$ 时,我们总会得到有限的m.这样临界的U的取值是

$$U_c=4J=4\sum_j(t_{ij}\chi_{ij}+t_{ji}\chi_{ji}) \tag{16.50}$$

对于一个空间反演不变的系统,显然$t_{ij}=t_{ji},\chi_{ij}=\chi_{ji}$,我们得到

$$U_c=8\sum_j t_{ij}\chi_{ij} \tag{16.51}$$

由于$\chi_{ij}=\sum_\sigma\langle\hat{f}^\dagger_{i\sigma}\hat{f}_{j\sigma}\rangle$, 对于一个非磁性的基态,我们可得

$$U_c=16\sum_j t_{ij}\langle\hat{f}^\dagger_{i\sigma}\hat{f}_{j\sigma}\rangle \tag{16.52}$$

注意到这里的物理意义,即是一个无自旋自由费米子系统$\hat{H}_0=-\sum_{ij}t_{ij}\hat{f}^\dagger_i\hat{f}_j$ 的能带平均能量$\bar{\varepsilon}$ 的绝对值的16倍.

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon} &= -\sum_j t_{ij}\langle\hat{f}^\dagger_{i\sigma}\hat{f}_{j\sigma}\rangle=-\frac{1}{N_s}\sum_{ij}t_{ij}\langle\hat{f}^\dagger_{i\sigma}\hat{f}_{j\sigma}\rangle=-\frac{1}{N_s}\sum_{ij}t_{ij}\frac{1}{N_s}\sum_{kk'}e^{-ikR_i}e^{ik'R_j}\langle\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k'\sigma}\rangle\\ &= -\frac{1}{N_s}\sum_{i,\delta}t_\delta\frac{1}{N_s}\sum_{kk'}e^{-ikR_i}e^{ik'(R_i+\delta)}\langle\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k'\sigma}\rangle \qquad (16.53)\\ &= \frac{1}{N_s}\sum_k\left(-\sum_\delta t_\delta e^{ik\delta}\right)\langle\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}\rangle=\frac{1}{N_s}\sum_k\varepsilon_k f_F(\varepsilon_k) \qquad (16.54)\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon)f_F(\varepsilon) \qquad (16.55)\end{aligned}$$

这样得到临界值$U_c = 16|\bar{\varepsilon}|$,这是一个温度依赖的量,温度效应来自于费米分布函数$f_F(\varepsilon)$.在零温时,则有$U_c = 16|\int_{-\infty}^{0} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon)|$,即是态密度$N(\varepsilon)$平均的能量.

- 注意到实际上费米分布函数不仅包括色散ε_k,还包含Ising 隶自旋的贡献I_{ij},所以原则上U_c的求解应该与m求解同时进行.也就是说需要用$f_F(m^2\varepsilon_k)$ 而不是没有重整过的$f_F(\varepsilon_k)$.

$T = 0$ 的临界相互作用强度U_c

如果假定自由费米子态密度是简单的常数态密度,能带半宽为D,那么有

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{2D}\theta(D - |\varepsilon|) \tag{16.56}$$

此时临界Hubbard相互作用是

$$U_c = 16\left|\int_{-D}^{0} d\varepsilon \frac{\varepsilon}{2D}\theta(D - |\varepsilon|)\right| = 16\frac{D^2}{4D} = 4D \tag{16.57}$$

另一种常用的模型态密度是半圆形态密度

$$N(\varepsilon) = \frac{2}{D^2\pi}\sqrt{D^2 - \varepsilon^2}\theta(D - |\varepsilon|) \tag{16.58}$$

利用这个态密度,我们得到半满体系的临界相互作用是

$$U_c = 16\left|\int_{-D}^{0} d\varepsilon \frac{2\varepsilon}{D^2\pi}\sqrt{D^2 - \varepsilon^2}\right| = 16\frac{2D}{3\pi} = 3.395D \tag{16.59}$$

零温解的物理性质

把$U_c = 4J$ 代入序参量m的平均场方程,可得

$$m^2 = 1 - \left(\frac{U}{U_c}\right)^2 \tag{16.60}$$

也就是说在小的相互作用情况下,量子Ising模型处于有序态,序参量m非零,而当相互作用大于U_c 时,量子Ising模型进入无序态/顺磁态,序参量为零.

同时我们注意到在单格点近似下有

$$I_{ij} = \langle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\rangle \simeq \langle\hat{\tau}_i^x\rangle\langle\hat{\tau}_j^x\rangle = m^2 \tag{16.61}$$

$$\tag{16.62}$$

这样辅助费米子部分的哈密顿量可写为

$$\hat{H}_f = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}m^2\hat{f}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{j\sigma} = \sum_{k\sigma}(m^2\varepsilon_k)\hat{f}_{k\sigma}^{\dagger}\hat{f}_{k\sigma} \tag{16.63}$$

可以看到隶自旋与费米子的相互作用相当于重整化辅助费米子的跃迁能$\varepsilon_k \to m^2\varepsilon_k$,重整化的因子是$g_t = m^2$. 显然,在量子Ising模型的有序态,辅助费米子仍然

有色散,当不断增加相互作用时,重整化因子减小,能带不断变窄,最后在大U下变为一个无色散的平直能带.

对于物理的电子,我们可以定义相应的单粒子Green函数

$$G^c_{ij,\sigma}(\tau)=-\langle T_\tau \hat{c}_{i\sigma}(\tau)\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\rangle=-\langle T_\tau \hat{f}_{i\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{\tau}^x_i(\tau)\hat{\tau}^x_j\rangle \tag{16.64}$$

这里的时间依赖算符$\hat{\mathcal{O}}(\tau)$是虚时Heisenberg绘景下的算符,满足

$$\hat{\mathcal{O}}(\tau)=e^{\tau\hat{H}}\hat{\mathcal{O}}e^{-\tau\hat{H}} \tag{16.65}$$

而T_τ是编时算符,就是按照时间的先后顺序排列相应的算符,时间晚的在前,时间早的在后.对于玻色子型算符,没有符号问题,而对于费米子算符,还需要注意交换导致的负号.在当前的平均场退耦近似下,隶自旋与辅助费米子部分在动力学上是退耦的,那么有

$$G^c_{ij,\sigma}(\tau)\simeq-\langle T_\tau \hat{f}_{i\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\rangle\langle T_\tau \hat{\tau}^x_i(\tau)\hat{\tau}^x_j\rangle \tag{16.66}$$

结合量子Ising模型部分的单格点近似,则有

$$G^c_{ij,\sigma}(\tau)\simeq-\langle T_\tau \hat{f}_{i\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\rangle\langle T_\tau \hat{\tau}^x_i(\tau)\hat{\tau}^x_j\rangle\simeq-\langle T_\tau \hat{f}_{i\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\rangle(m^2)=m^2G^f_{ij,\sigma}(\tau) \tag{16.67}$$

这里的$G^f_{ij,\sigma}(\tau)$是辅助费米子的Green 函数.注意到辅助费米子哈密顿量$\hat{H}_f=\sum_{k\sigma}(m^2\varepsilon_k)\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}$ 是一个自由费米子哈密顿量且具有平移不变性(在动量空间对角化)那么相应的Green函数必然可以是相对位置的函数,则有

$$G^f_{ij,\sigma}(\tau)=\frac{1}{V}\sum_k e^{ik(R_i-R_j)}G^f_\sigma(k,\tau) \tag{16.68}$$

$$G^f_\sigma(k,\tau)=-\langle T_\tau \hat{f}_{k\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\rangle=-\theta(\tau)\langle \hat{f}_{k\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\rangle+\theta(-\tau)\langle \hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}(\tau)\rangle \tag{16.69}$$

对于$\hat{f}_{k\sigma}(\tau)$,可以利用虚时Heisenberg运动方程

$$\frac{\partial\hat{\mathcal{O}}(t)}{\partial t}=\frac{1}{i}[\hat{\mathcal{O}},\hat{H}]\Rightarrow-\frac{\partial\hat{\mathcal{O}}(\tau)}{\partial\tau}=[\hat{\mathcal{O}},\hat{H}],\quad t=-i\tau \tag{16.70}$$

$$-\frac{\partial\hat{f}_{k\sigma}(\tau)}{\partial\tau}=[\hat{f}_{k\sigma},\hat{H}]=g_t\varepsilon_k\hat{f}_{k\sigma}\Rightarrow\hat{f}_{k\sigma}(\tau)=\hat{f}_{k\sigma}e^{-g_t\varepsilon_k\tau} \tag{16.71}$$

这样,我们得到

$$G^f_\sigma(k,\tau)=-\theta(\tau)\langle \hat{f}_{k\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\rangle+\theta(-\tau)\langle \hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}(\tau)\rangle \tag{16.72}$$

通常,虚时间的取值是$\tau\in[0,\beta]$,则上式化简为

$$G^f_\sigma(k,\tau)=-\theta(\tau)e^{-g_t\varepsilon_k\tau}\langle \hat{f}_{k\sigma}\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\rangle=-\theta(\tau)e^{-g_t\varepsilon_k\tau}(1-f_F(g_t\varepsilon_k)) \tag{16.73}$$

那么频率-动量空间的Green函数是

$$G^f_\sigma(k,\omega_n)=-\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}e^{-g_t\varepsilon_k\tau}(1-f_F(g_t\varepsilon_k))=-(1-f_F(g_t\varepsilon_k))\frac{e^{(i\omega_n-g_t\varepsilon_k)\beta}-1}{i\omega_n-g_t\varepsilon_k}=\frac{1}{i\omega_n-g_t\varepsilon_k} \tag{16.74}$$

傅里叶变换后的电子Green函数是

$$G^c_\sigma(k,\omega_n)=m^2G^f_\sigma(k,\omega_n)=\frac{m^2}{i\omega_n-g_t\varepsilon_k}=\frac{Z}{i\omega_n-g_t\varepsilon_k} \tag{16.75}$$

- 原则上我们需要对$G^c_{ij,\sigma}(\tau)\simeq-\langle T_\tau\hat{f}_{i\sigma}(\tau)\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\rangle\langle T_\tau\hat{\tau}^x_i(\tau)\hat{\tau}^x_j\rangle=G^f_{ij,\sigma}(\tau)G^I_{ij}(\tau)$作傅里叶变换得到

$$\frac{T}{V}\sum_{k,\omega_n}e^{ik(R_i-R_j)}e^{-i\omega_n\tau}G^c_\sigma(k,\omega_n)=\frac{T}{V}\sum_{k',\omega'_n}e^{ik'(R_i-R_j)}e^{-i\omega'_n\tau}G^f_\sigma(k',\omega'_n)\frac{T}{V}\sum_{q,\Omega_n}e^{iq(R_i-R_j)}e^{-i\Omega_n\tau}G^I_\sigma(q,\Omega_n) \tag{16.76}$$

- 两边比较系数可得$k'+q=k,\omega'_n+\Omega=\omega_n$, 即有

$$G^c_\sigma(k,\omega_n)=\frac{T}{V}\sum_{q,\Omega_n}G^f_\sigma(k-q,\omega_n-\Omega_n)G^I_\sigma(q,\Omega_n) \tag{16.77}$$

- 在单格点近似下,我们有$G^I_{ij}(\tau)=m^2$以及其傅里叶变换$G_{q,\Omega_n}=\frac{V}{T}m^2\delta_q\delta_{\Omega_n}$, 代入$G^c_\sigma(k,\omega_n)$的一般表达式得到 $G^c_\sigma(k,\omega_n)=m^2G^f_\sigma(k,\omega_n)$。

此时,我们发现相比于无相互作用的电子Green函数$G^c_\sigma(k,\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k}$, 计入相互作用后的Green 函数不仅能带色散有了重整化,整体也有重整化,即波函数重整化因子Z,也称准粒子权重.根据定义,波函数重整化因子是

$$Z_\omega\equiv\frac{1}{1-\frac{\partial\mathrm{Re}\Sigma(k,\omega)}{\partial\omega}|_{k=k_F,\omega=E_F}} \tag{16.78}$$

这里$\mathrm{Re}\Sigma(k,\omega)$是自能函数的实部.而自能函数则是包含所有相互作用对(实频)单粒子Green函数的修正$G=\frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\Sigma(k,\omega)}$. 对于一个动量无关的自能,$Z_\omega=Z$. 对于一般的费米液体,其基本特性是$Z>0$,也就是说体系总是近似于自由费米子气体,或者可以理解为相互作用费米系统中总是有费米气体的权重,系统的基本物理可以定性用自由费米气体来理解.

通常可以由Green函数得到相应的谱函数,例如

$$A^c_\sigma(k,\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^c_\sigma(k,i\omega_n\to\omega+i0^+) \tag{16.79}$$

对于自由电子,我们知道$G^c_\sigma(k,i\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k}$, 这样自由电子谱函数是

$$A^c_\sigma(k,\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{1}{\omega-\varepsilon_k+i0^+}=\delta(\omega-\varepsilon_k) \tag{16.80}$$

也就是一个δ函数.对相互作用电子系统,我们有$\Sigma(k,\omega)=\mathrm{Re}\Sigma(k,\omega)+i\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)$则

$$A^c_\sigma(k,\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\mathrm{Re}\Sigma(k,\omega)-i\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)}=\frac{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)}{(\omega-\varepsilon_k-\mathrm{Re}\Sigma(k,\omega))^2+(\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega))^2} \tag{16.81}$$

对于费米液体,理论研究发现

$$G(k,\omega)=\frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\mathrm{Re}\Sigma(k,\omega)-i\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)} \tag{16.82}$$

的分母实部为零决定准粒子的能量E_k

$$E_k-\varepsilon_k-\mathrm{Re}\Sigma(k,E_k)=0 \tag{16.83}$$

而准粒子能量为零可得系统的费米面

$$\varepsilon_{k_F}+\mathrm{Re}\Sigma(k_F,0)=0 \tag{16.84}$$

进一步,在准粒子能量E_k以及费米波矢k_F展开自能的实部:

$$\begin{aligned}&\mathrm{Re}\Sigma(k,\omega)=\mathrm{Re}\Sigma(k_F,E_k)+(k-k_F)\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial k}|_{k_F,E_k}+(\omega-E_k)\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial\omega}|_{k_F,E_k}\\&+\mathcal{O}((k-k_F)^2)+\mathcal{O}((\omega-E_k)^2)+\mathcal{O}((k-k_F)(\omega-E_k))\end{aligned} \tag{16.85}$$

把展开式代入Green函数可得

$$G(k,\omega)=\frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\mathrm{Re}\Sigma(k_F,E_k)-(k-k_F)\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial k}|_{k_F,E_k}-(\omega-E_k)\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial\omega}|_{k_F,E_k}-i\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)} \tag{16.86}$$

令$\omega=\omega-E_k+E_k$

$$\begin{aligned}G(k,\omega)&=\frac{1}{(\omega-E_k)(1-\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial\omega}|_{k_F,E_k})+E_k-\varepsilon_k-\mathrm{Re}\Sigma(k_F,E_k)-(k-k_F)\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial k}|_{k_F,E_k}-i\mathrm{Im}\Sigma(k\\&=\frac{1}{(\omega-E_k)(1-\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial\omega}|_{k_F,E_k})-(k-k_F)\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial k}|_{k_F,E_k}-i\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)}\end{aligned} \tag{16}$$

然后在费米面展开准粒子能量$E_k\simeq E_F+v_F(k-k_F)=v_F(k-k_F)$ 并利用波函数重整化因子Z_ω的定义,我们发现

$$G(k,\omega)=\frac{Z_\omega}{(\omega-v_F(k-k_F))-Z_\omega(k-k_F)\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial k}|_{k_F,E_F}-iZ_\omega\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)}$$

再定义有效费米速度$v_F^*=v_F+Z_\omega\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial k}|_{k_F,E_F}\equiv Z_kv_F,\ Z_k=1+\frac{Z_\omega}{v_F}\frac{\partial\Sigma(k,\omega)}{\partial k}|_{k_F,E_F}$ 这样有

$$G(k,\omega)=\frac{Z_\omega}{\omega-Z_kv_F(k-k_F)-iZ_\omega\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)} \tag{16.88}$$

对于费米液体,自能虚部在费米面附近具有平方关系$Z_\omega\mathrm{Im}\Sigma(k,\omega)\propto-(\omega^2+(k-k_F)^2)$. 也就是说,在低能下,费米液体的Green函数基本上是一个重整化的自由费米气体,当然还有一个非相干的背景贡献:

$$G(k,\omega)\simeq\frac{Z_\omega}{\omega-Z_kv_F(k-k_F)+i\Gamma}+background \tag{16.89}$$

在当前的单格点近似下有

$$G_\sigma^c(k,\omega) \simeq \frac{Z}{\omega - g_t\varepsilon_k}, \quad Z = g_t = m^2 \tag{16.90}$$

当量子Ising模型处于有序态时,准粒子权重$Z > 0$,物理电子处于费米液体态;而当量子Ising模型进入顺磁态时,$Z = 0$,此时电子系统不是费米液体.由于单格点近似的粗糙性,此时电子Green函数为零,我们需要更为精确的方法来描述$Z = 0$时的电子系统.

有限温度

当体系温度$T > 0$ 时需要考虑$1 = \frac{J}{E}\tanh(\beta E)$与$J = 4|\bar{\varepsilon}|$,具体而言就是以下两个方程:

$$1 = \frac{J}{\sqrt{(U/4)^2 + (mJ)^2}} \tanh(\beta\sqrt{(U/4)^2 + (mJ)^2}) \tag{16.91}$$

$$J = \frac{1}{N_s}\sum_k \varepsilon_k f_F(m^2\varepsilon_k) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon) f_F(m^2\varepsilon) \tag{16.92}$$

通过数值计算这两个自洽方程我们可以得到序参量m随温度以及相互作用强度U的变换关系,从而可以定出费米液体区域的范围,即$m \neq 0$的区域.其中的相边界由$m \to 0, T = T_c$得到,即有

$$J(m \to 0, T = T_c) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon)\frac{1}{e^{\frac{0}{T_c}} + 1} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^*}{2} \tag{16.93}$$

$$\varepsilon^* = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon) \tag{16.94}$$

$$1 = \frac{2\varepsilon^*}{U}\tanh\frac{U/4}{T_c} \tag{16.95}$$

现在,考虑系统的热力学性质,对于量子Ising模型部分,Ising自旋激发总是有能隙的,这样起主导作用的是辅助费米子部分,

$$\hat{H}_f = \sum_{k\sigma}(g_t\varepsilon_k)\hat{f}_{k\sigma}^\dagger \hat{f}_{k\sigma}, \quad g_t = m^2 \tag{16.96}$$

其有限温度能量密度是

$$e(T) = \frac{1}{N_s}\sum_k (g_t\varepsilon_k) f_F(g_t\varepsilon_k) = g_t\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon) f_F(g_t\varepsilon) \tag{16.97}$$

相应的热容是

$$C_v(T) = \frac{\partial e(T)}{\partial T} = \frac{\partial g_t}{\partial T}\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon) f_F(g_t\varepsilon) + g_t\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon)\frac{\partial f_F(g_t\varepsilon)}{\partial T} \tag{16.98}$$

对比于自由粒子时的热熔

$$C_v^{(0)}(T)=\int_{-\infty}^{+\infty}d\varepsilon\varepsilon N(\varepsilon)\frac{\partial f_F(\varepsilon)}{\partial T}\simeq N(0)\int_{-\infty}^{+\infty}d\varepsilon\varepsilon\frac{\partial f_F(\varepsilon)}{\partial T}=N(0)T\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{x^2e^x}{e^x+1}$$

在低温下,序参量温度变化很弱,我们有

$$C_v(T)\simeq\frac{g_t}{g_t^2}TN(0)\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{x^2e^x}{e^x+1}=\frac{1}{g_t}C_v^{(0)}(T)=\frac{1}{Z}C_v^{(0)}(T)\Rightarrow\frac{C_v(T)}{C_v^{(0)}(T)}=\frac{1}{g_t}$$

也就是说体系的比热系数和有效质量都反比于重整化因子$g_t=m^2$,既然在大U时$m=0$,这说明体系的有效质量会随着相互作用的增强而不断增大,最终导致有效质量的发散.对于一个动量为k有效质量为m的自由粒子, 其能量为$k^2/(2m)$,有效质量的发散导致粒子完全跑不动,或者说局域化.而粒子一旦局域化,其金属行为便会消失,体系显示绝缘体的行为,对于电子体系而言,这就是Mott 局域化行为.

- 半满系统增大U使得体系从金属性的费米液体态转变为Mott绝缘态,这之间发生了Mott局域化现象.

超越单格点近似

在单格点近似中,我们看到当$m=0$时,$I_{ij}=0$,这直接导致辅助自旋部分能带变平,失去任何的能带色散.对于物理电子,这导致更加严重的问题,即电子的Green函数为零.显然这些缺陷来自于对量子Ising模型过于粗糙的处理.

我们已经知道可以通过精确对角化和量子蒙特卡洛计算量子Ising模型部分.撇开具体的计算不谈,一般而言对于只有最近邻的模型,即

$$\hat{H}_{Ising}=-J\sum_{<ij>}\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x+h\sum_i\hat{\tau}_i^z \tag{16.99}$$

可以发现量子Ising模型确实存在有序态与无序态,对于$J>0$即铁磁耦合的情况,零温时在$J>>h$是Ising 铁磁态$\langle\tau^x\rangle\neq0$, 逐渐增大$h$可使体系进入顺磁态$\langle\tau^x\rangle=0$,此外中间会有一个量子临界点.对于这里的模型

$$\hat{H}_{Ising}=-\sum_{ij}t_{ij}\chi_{ij}\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x+\frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^z \tag{16.100}$$

只要体系依然均匀,那么基本物理应与纯量子Ising模型相同.需要注意的是不论是有序的铁磁态还是无序的顺磁态,最近邻耦合的平均值$I_{ij}=\langle\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\rangle$ 都非零,也就是说辅助费米子总是有色散而不会出现色散为零的情况.

为了进一步处理,可以转动自旋方向$\hat{\sigma}^z\to\hat{\sigma}^x$, $\hat{\sigma}^x\to-\hat{\sigma}^z$, 这样有

$$\hat{H}_{Ising}=-\sum_{ij}t_{ij}\chi_{ij}\hat{\tau}_i^z\hat{\tau}_j^z+\frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^x \tag{16.101}$$

再利用先前讨论的量子Ising模型到经典Ising模型的映射,可得相应的经典模型哈密顿量

$$H_{Ising}=-\frac{1}{M}\sum_{l}\sum_{ij}t_{ij}\chi_{ij}\sigma_i(l)\sigma_j(l)-\frac{J_\tau}{M}\sum_{l}\sum_{i}\sigma_i(l)\sigma_i(l+1),\quad J_\tau=\frac{\ln\coth(-\frac{U\Delta\tau}{4})}{2\Delta\tau}$$

如果我们关心低能物理,那么类似于反铁磁Heisenberg模型的自旋相干态表示到非线性sigma模型的连续化处理,对上述模型可以得到如下的ϕ^4型有效作用量:

$$S=\int d\tau d^dx[(\partial_\tau\phi)^2+a(\nabla\phi)^2+r\phi^2+u\phi^4],\quad \phi(x,\tau)\sim\sigma_i(l) \tag{16.102}$$

对于这个模型,$r<<0$时有$\langle\phi\rangle\neq 0$对应铁磁有序态,我们令$\langle\phi\rangle=\phi_0\sim m$并且设$\phi=\phi_0+\delta\phi$并代入上述作用量.忽略高阶项并利用平均场关系化简可得

$$\langle\phi(q,\Omega_n)\phi(-q,-\Omega_n)\rangle\sim\frac{V}{T}\phi_0^2\delta_q\delta_{\Omega_n}+\frac{1}{\Omega_n^2+k^2+(r+6u\phi_0^2)} \tag{16.103}$$

这说明有序态时关联函数的主要部分是凝聚的序参量部分,而非凝聚的部分则是有能隙$\tilde{r}=r+6u\phi_0^2$激发.

而当$r>>0$时有$\langle\phi\rangle=0$并且其关联函数是

$$\langle\phi(q,\Omega_n)\phi(-q,-\Omega_n)\rangle\sim\frac{1}{\Omega_n^2+k^2+r} \tag{16.104}$$

在这里,体系激发完全具有能隙.最后当$r\sim 0$时代表系统处于临界点附近,那么关联函数具有如下的幂律形式

$$\langle\phi(q,\Omega_n)\phi(-q,-\Omega_n)\rangle\sim\frac{1}{(\Omega_n^2+k^2)^{\frac{2-\eta}{2}}} \tag{16.105}$$

此时,体系的激发恰好无能隙,代表临界模式激发,而$\eta\sim 0.04$是临界指数,这里是三维Ising谱适类的反常维度.同时,对于序参量,也有$\phi_0\sim(r-r_c)^\beta,\beta=0.33$.而Ising 自旋在临界区域贡献的自由能则满足标度形式$F\sim T^{\frac{d+z}{z}},z=1$,显然相比辅助费米子而言是次一级,因此系统的临界区域热容仍然是简单的线性热容.

利用先前得到的一般公式

$$G_\sigma^c(k,\omega_n)=\frac{T}{V}\sum_{q,\Omega_n}G_\sigma^f(k-q,\omega_n-\Omega_n)G_\sigma^I(q,\Omega_n) \tag{16.106}$$

以及辅助费米子部分的结果

$$G_\sigma^f(k,\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-g_t\varepsilon_k} \tag{16.107}$$

注意这里的$g_t\neq m^2$且总是非零.

首先考虑Ising自旋处于有序态情况,有

$$G_\sigma^c(k,\omega_n)=\frac{m^2}{i\omega_n-g_t\varepsilon_k}+\frac{T}{V}\sum_{q,\Omega_n}\frac{1}{i\omega_n-i\Omega_n-g_t\varepsilon_{k-q}}\frac{1}{\Omega_n^2+k^2+(r+6u\phi_0^2)} \tag{16.108}$$

与费米液体的Green函数相比较,注意到第一项就是相干部分,m^2是准粒子权重,而第二项代表非相干的背景部分.显然当体系进入无序态时,第一项为零,则只有非相干的背景贡献.可以看到背景项中的费米子无能隙但是Ising部分有能隙,这样导致非相干部分有能隙.既然在无序态只有非相干部分的贡献,那么此时电子激发需要有限能隙,这就是Mott 绝缘体的基本特点,即单粒子激发具有有限能隙,显示绝缘体特性.一般在文献中,这些有能隙激发对应上下Hubbard子带,而相干准粒子部分对应准粒子的Kondo 共振峰.

正交金属态*

对于这里采用的Z_2 slave-spin表示,实际上体系的电荷输运等行为由辅助费米子主导,故而电导等输运量依然会显示金属性的行为,称之为正交金属态(orthogonal metal).[15]

- 正交金属:具有一般金属的热力学与输运行为,但基态波函数与金属态正交(单粒子激发具有有限能隙)的一类非费米液体金属.

而对于一般理解的Mott绝缘体,不仅单粒子激发有能隙,电荷激发也有能隙,原因在于slave-spin形式中电荷和自旋都由辅助费米子携带($\hat{c}_\sigma \to e^{i\theta}\hat{c}_\sigma, \hat{f}_\sigma \to e^{i\theta}\hat{f}_\sigma, \hat{\tau}^x \to \hat{\tau}^x$)Ising 自旋并没有电荷或者自旋自由度.既然辅助费米子在当前讨论中总是处于金属态,那么整个系统就具有金属类似的热力学和输运行为.而一般的slave-boson 或者slave-rotor形式中电荷由玻色子携带,一旦玻色子进入无序态,那么整个体系的电荷输运就自动出现能隙而实现绝缘态.

最后,如果Ising自旋处于临界点,那么电子Green函数将会表现出非费米液体行为,即有

$$G_\sigma^c(k,\omega_n) = \frac{T}{V}\sum_{q,\Omega_n} \frac{1}{i\omega_n - i\Omega_n - g_t\varepsilon_{k-q}} \frac{1}{(\Omega_n^2+k^2)^{\frac{2-\eta}{2}}} \tag{16.109}$$

对应的电子谱函数具有如下的形式

$$A_\sigma^c(k,\omega) \sim \omega^{d-2+\eta} F\left(\frac{\omega}{k_\perp}\right) \tag{16.110}$$

显然其具有典型的非费米液体行为,$k_\perp$是与费米面的垂直距离.[2]

- 这里关于临界指数和临界行为的结果并不是谱适,因为一些相互作用扰动会明显改变临界行为,例如会把动力学由$z=1$改变为Landau阻尼型的$z=3$.

[2]这里谱函数的形式称为临界费米面的谱函数.其核心思想是假设体系在相互作用或掺杂的影响下从费米液体金属转变至Mott绝缘体,若相变是连续的,那么费米液体准粒子在相变点附近逐渐消失而费米面依然存在,这样电子的谱函数满足标度形式,即$A_\sigma^c(k,\omega,T,g) \sim \omega^{-\alpha/z} F\left(\frac{\omega}{k_\perp^z}, \frac{\omega}{T}, \frac{k_\perp}{(g-g_c)^\nu}\right)$. 对比费米液体的谱函数$\frac{Z\Gamma}{(\omega - v_F k_\perp)^2+\Gamma^2}$可得$Z \sim (g-g_c)^{\nu(z-\alpha)}, v_F \sim (g-g_c)^{\nu(z-1)}, \Gamma \sim (g-g_c)^{-z\nu}\omega^2$.[Senthil,Critical Fermi surfaces and non-Fermi liquid metals,Phys.Rev.B**78**,035103(2008)]

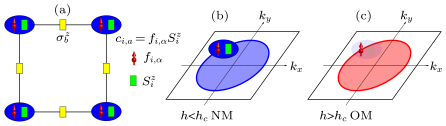


Figure 16.3: (a)在晶格格点上有正交费米场$f_{i\alpha}$与伊辛物质场S_i^Z,格点之间是Z_2规范场,蓝色的椭圆代表着由正交费米场与伊辛物质场组合而成的'复合费米子'.(b)正常金属相的示意图,复合费米子$c_{i\alpha}$有一可观测的费米面.(c)正交金属相的示意图,正交费米场$f_{i\alpha}$有一隐藏费米面,此费米面不能被通常的实验手段直接观测到.[17]

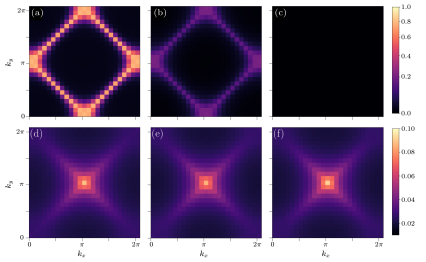


Figure 16.4: 从费米液体到正交金属的费米面与磁学响应.图(a),(b)和(c):复合费米子的费米面谱权重$A(k,\omega) \sim G(k,\beta/2)$,模型参数为$L=24, T=0.1, g=2.5$.图(a)$h=0.4(h<h_c)$,处于正常金属相;图(b)$h=2(h\sim h_c)$,此时为临界区域;图(c)$h=4(h>h_c)$,处于正交金属相.图(d),(e)和(f): 正交费米子$f_{i\alpha}$的自旋磁化率$\chi(q,\omega)$,模型参数与上半部分的图一一对应.不论是费米液体还是正交金属相,近似钻石型费米面导致自旋磁化率在$q=(\pi,\pi)$附近都有4个小峰,即使在$h>h_c$时,正交费米子仍处于金属态,有隐藏费米面.[17]

- 最近的量子蒙特卡洛模拟在扩展Falicov-Kimball模型的高温区发现了正交金属的迹象,[16]这说明该类非费米液体态在简单模型中可以存在,至于与实际材料是否相关则仍然是需要进一步研究的话题.

此外,一个费米子与规范场耦合模型发现正交金属可能是系统在强耦合时的基态,[17]体系存在从费米液体到正交金属的量子相变.(图16.3)

图16.4显示了费米液体态与正交金属态的费米面,可以看到弱耦合时费米液体具有明锐的费米面结构,而强耦合时的正交金属则不存在费米面.费米液体与正交金属的自旋磁化率近似相同,都显示波矢为(π,π) 的反铁磁自旋涨落.这些数值计算结果与正交金属态的理论预期完全符合,更大的系统尺寸可以探测从费米液体到正交金属的量子临界行为.

下面是《返朴》上关于文献[17]工作的非专业性介绍并附以文小刚老师的

评论.[18]

邋遢身,金属心:幸福的家庭都是相似的,不幸的家庭各有各的不幸.作家通过文学作品刻画人类社会的光怪陆离,科学家通过研究探索物质世界的丰富现象.这不,很多年前学界中传言金属家族中其实还有一位人们从未谋面的邋遢表叔,即'正交金属'.他离经叛道,践行着和正常金属完全不同的生活方式:有些邋遢甚至油腻,连电子这样本性都给败掉了,不务正业地没有费米面,却玩弄起物质场和拓扑序规范场耦合这些歪门邪道的路数.但是,在他油腻的外表下,却藏着岁月抹不掉的金属的初心:他的电学,磁性响应等性质依然保留了金属的特征.不过您还别说,这么一个传说中油腻表叔还真让我们找到了,果不其然,在他邋遢的外表下面的确也有着不平凡的人生.

超越费米液体理论的量子金属物态是凝聚态物理学研究中的主要问题之一.尽管实验上在重费米子材料和高温超导材料中,人们早已观察到没有准粒子和具有奇异输运行为的非费米液体和量子临界金属态,但是对于这些量子物质形态的理解仍然没有完整和严格的理论框架.究其原因,缺乏非微扰的解析工具与可以严格计算的数值模型一直是领域进展的主要障碍.在本文中,研究人员基于前人提出的'正交金属'的理论构造,设计出了一个可以进行严格量子蒙特卡洛计算的微观晶格模型,该模型实现了费米子物质场和Z_2规范场耦合这样的物理图像.通过调节系统中量子涨落的强度,蒙特卡洛模拟成功展示了从普通金属到具有拓扑序和没有准粒子与费米面的'正交金属'的连续相变.这项研究为探索非费米液体提供了新的范例,尤其是打通了物质场与规范场耦合模型的思路,为接下来的研究指出方向.

让油腻的表叔现身:研究人员在二维正方晶格上构造了如图16.3(a)所示的正交金属的模型.在格点处生活着正交费米场与伊辛物质场,在格点之间存在着Z_2 规范场,规范场分别与伊辛物质场和正交费米场通过最小耦合的方式联系起来.伊辛物质场和Z_2规范场的量子涨落是整个系统相互作用的来源.将正交费米场与伊辛物质场组合可以得到真实的费米子,称为'复合费米子',与实际的费米子如电子有相同的量子数,而正交费米子由于不具有规范不变性,不能通过常规的观测费米面的实验手段,如角分辨光电子能谱测量到.

通过调节伊辛物质场的横场参数,研究人员可以在这个晶格模型上实现正常的费米液体相与所谓的'正交金属'相,图16.3(b),(c)所示是它们的示意图,研究它们之间的相变是如何发生的.图16.4所示为对应的复合费米子的费米面谱权重(a),(b),(c)与正交费米子的自旋磁化率数据(d),(e),(f).当横场大于临界横场时模型处于'正交金属'相,从数值模拟得到的复合费米子的谱权重为零,如图16.4(c)所示,此时系统没有实际的费米面.

但通过测量我们看到正交金属态的电荷密度随化学势仍然连续变化,说明这是一个电荷可以自由流动的金属.此外,通过测量自旋散射的结构因子可以间接推断正交费米子之间的低能自旋涨落与金属费米面上的涨落非常类似,如图16.4(d),(e),(f)所示.这些现象都说明正交费米子仍然处于金属状态,有一个隐

藏的费米面.'隐藏'意味着此费米面不能通过通常的实验手段如角分辨光电子能谱观测得到,这种特殊的金属,即正交金属,是非费米液体理论的一种模型实现.而当横场小于临界横场时,我们可以得到正常的费米液体,复合费米子显示出一个通常的费米面.费米液体金属相和正交金属相之间的相变为Higgs连续相变.

后记:文小刚解读.在一个材料中,当电子被束缚在每个原子上的时候,这个材料会变成绝缘体,而它的有效自由度,是电子自旋的各种指向和反转.如果电子自旋之间相互作用,喜欢相邻电子的自旋反平行,那么在三角格子和Kagome格子上,电子自旋将会很痛苦.因为电子自旋将无法满足,每一对近邻自旋都是反平行的幸福态.这种材料被称之为自旋阻错材料.因为电子自旋不知如何指向,只好疯掉,形成一个指向无序的自旋液体.这些自旋液体有高度的量子纠缠,常常是带有拓扑序的新的量子物态.这样,拓扑序的特有现象,量子数的分数化也会在自旋液体中出现.

一般来说自旋系统中的激发对应于一个电子自旋的反转.因为电子带自旋1/2,所以一个自旋反转,$1/2 \to -1/2$,对应于自旋为1的玻色子.可是在带有拓扑序的自旋液体中,这个自旋为1的玻色子会'分裂'成两个自旋为1/2的费米子.这就是拓扑序和量子纠缠所变的魔术.这个新的分数化粒子被称之为自旋子.这些自旋子有时有能隙,有时没有能隙,其对应于各种各样的有不同量子序的自旋液体.当自旋子没有能隙的时候,这些有费米统计的自旋子会形成一个费米面,和金属中电子所形成费米面一模一样.这样的自旋液体材料,其物理性质会和金属非常相像,如比热,磁化率,热传导等等.但自旋子不带电,所以这种很像金属的自旋液体,其实是个绝缘体,不能导电.

如果电子的数目比格点数目少,那么有些格点就没有电子占据.没有电子占据的格点相当于空穴,它是没有自旋电荷为1的玻色子.这也是一种分数化的新粒子,被称之为空穴子.在这种新的量子材料中,一个电子被'劈裂'成一个自旋子和空穴子,这也是拓扑序和量子纠缠所变的魔术.如果空穴子形成一个玻色凝聚态,那么上面讲的带费米面的自旋液体,将变成一个标准的有电子费米面的金属.如果两个空穴子先形成空穴对,然后空穴对再形成一个玻色凝聚态,那么上面讲的带费米面的自旋液体,将变成一个没有电子费米面的金属.

这个金属的油腻表叔和金属非常相像,如比热,磁化率,热传导等性质都很像金属,甚至连导电性质都和金属一样.唯一不同的就是电子没有费米面.这一物理性质只能通过将电子移进/移出的探测手段才能检测得到(如遂穿电导实验,角分辨光电子能谱实验等等).这是一个全新的金属态.以前我们所知的金属态,全部是由电子的费米面来描写的,我们甚至想象不出来不同的金属态会长什么样.拓扑序长程纠缠,及其所导致的演生规范场,使我们可以设计出这个没有电子费米面的新金属态,并通过数值计算验证这个设计的正确性.我们期待将来在实验中找到这种带有新金属态的材料.

超越平均场退耦

在先前的讨论中,我们基于平均场近似退耦合后的哈密顿量:

$$\hat{H}_f = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} I_{ij} \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} \tag{16.111}$$

$$\hat{H}_{Ising} = -\sum_{ij} t_{ij} \chi_{ij} \hat{\tau}^x_i \hat{\tau}^x_j + \frac{U}{4} \sum_i \hat{\tau}^z_i \tag{16.112}$$

但是如果要进一步讨论平均场之上的涨落效应,那么我们需要重新考虑原始的slave-spin模型:

$$\hat{H}_{slave-spin} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} \hat{\tau}^x_i \hat{\tau}^x_j \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} + U \sum_i \frac{\hat{\tau}^z_i - 1}{4} \tag{16.113}$$

先旋转Ising自旋方向$\hat{\sigma}^x \to -\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^z \to \hat{\sigma}^x$:

$$\hat{H}_{slave-spin} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} \hat{\tau}^z_i \hat{\tau}^z_j \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} + \frac{U}{4} \sum_i \hat{\tau}^x_i - \frac{U}{4} N_s \tag{16.114}$$

对于体系动力学,我们可以忽略常数项的贡献并把哈密顿量写为两部分$\hat{H}_{slave-spin} = \hat{H}_t + \hat{H}_U$:

$$\hat{H}_t = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} \hat{\tau}^z_i \hat{\tau}^z_j \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} \tag{16.115}$$

$$\hat{H}_U = \frac{U}{4} \sum_i \hat{\tau}^x_i \tag{16.116}$$

配分函数的相干态路径积分形式

在这一节,我们讨论相干态路径积分形式,出发点是

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= C_\tau^{N_s M} \sum_{\{s\}} e^{\Delta\tau J_\tau \sum_i \sum_{l=1}^M s_i(l) s_i(l+1)} \prod_\sigma \mathrm{Tr} \left[\prod_{l=1}^M e^{\Delta\tau \sum_{ij,\sigma} t_{ij} s_i(l) s_j(l) \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma}} \right] \\ &= C_\tau^{N_s M} \sum_{\{s\}} e^{\Delta\tau J_\tau \sum_i \sum_{l=1}^M s_i(l) s_i(l+1)} \prod_\sigma \mathrm{Tr} \left[\prod_{l=1}^M e^{-\Delta\tau \hat{h}_\sigma(l)} \right] \end{aligned} \tag{16.117}$$

在每一个$e^{-\Delta\tau \hat{h}_\sigma(l)}$后面插入费米子相干态并求迹可得

$$\mathrm{Tr} \left[\prod_{l=1}^M e^{-\Delta\tau \hat{h}_\sigma(l)} \right] = \prod_{l=1}^M e^{-\sum_i \bar{\eta}_{i\sigma}(l+1)(\eta_{i\sigma}(l+1) - \eta_{i\sigma}(l)) - \Delta\tau h_\sigma(\hat{f}^\dagger_{i\sigma} \to \bar{\eta}_{i\sigma}(l+1), \hat{f}_{j\sigma} \to \eta_{j\sigma}(l))}$$

注意此时还有反周期边界条件$\eta_{i\sigma(M+1)} = -\eta_{i\sigma(1)}$.这样我们发现体系的作用量是

$$S = -\Delta\tau J_\tau \sum_{i,l} s_i(l) s_i(l+1) + \sum_{i,l,\sigma} \bar{\eta}_{i\sigma}(l+1)(\eta_{i\sigma}(l+1) - \eta_{i\sigma}(l)) + \Delta\tau(-\sum_{ij,l,\sigma} t_{ij} s_i(l) s_j(l) \bar{\eta}_{i\sigma}(l+1) \eta_{j\sigma}(l)) \tag{16.118}$$

为了进一步理论分析,取连续时间极限,即有

$$s_i(l)s_i(l+1) = s_i(l)s_i(l+1) - s_i(l)^2 + 1 \simeq +\Delta\tau s_i(\tau)\partial_\tau s_i(\tau) + \frac{(\Delta\tau)^2}{2}s_i(\tau)\partial_\tau^2 s_i(\tau) + 1$$
$$= +\frac{(\Delta\tau)^2}{2}s_i(\tau)\partial_\tau^2 s_i(\tau) + 1 \tag{16.119}$$

$$\eta_{i\sigma}(l+1) - \eta_{i\sigma}(l) \simeq \Delta\tau\partial_\tau\eta_{i\sigma}(\tau) \tag{16.120}$$

$$\bar{\eta}_{i\sigma}(l+1)(\eta_{i\sigma}(l+1) - \eta_{i\sigma}(l)) \simeq \Delta\tau\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\partial_\tau\eta_{i\sigma}(\tau) \tag{16.121}$$

$$\bar{\eta}_{i\sigma}(l+1)\eta_{j\sigma}(l) \simeq \bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\eta_{j\sigma}(\tau) \tag{16.122}$$

$$\sum_l \Delta\tau \simeq \int d\tau \tag{16.123}$$

这样我们发现

$$\boxed{S = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{J_\tau(\Delta\tau)^2}{2}\sum_i (\partial_\tau s_i(\tau))^2 + \sum_{i,\sigma}\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\partial_\tau\eta_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij,\sigma} t_{ij}s_i(\tau)s_j(\tau)\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\eta_{j\sigma}(\tau)\right]} \tag{16.124}$$

此时的配分函数具有如下形式

$$\mathcal{Z} = \int Ds\delta(s^2-1)D\bar{\eta}D\eta e^{-S} \tag{16.125}$$

平均场近似

在路径积分形式中,我们也可做平均场近似,即

$$s_i(\tau)s_j(\tau)\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\eta_{j\sigma}(\tau) \simeq I_{ij}\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\eta_{j\sigma}(\tau) + \chi_{ij}s_i(\tau)s_j(\tau) - I_{ij}\chi_{ij} \tag{16.126}$$

这样得到平均场近似下的作用量

$$S = \int_0^\beta d\tau[\frac{J_\tau(\Delta\tau)^2}{2}\sum_i (\partial_\tau s_i(\tau))^2 + \sum_{i,\sigma}\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\partial_\tau\eta_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij,\sigma} t_{ij}I_{ij}\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\eta_{j\sigma}(\tau)$$
$$-\sum_{ij} t_{ij}\chi_{ij}s_i(\tau)s_j(\tau) + \sum_{ij} t_{ij}I_{ij}\chi_{ij}] \tag{16.127}$$

这里I_{ij} 和χ_{ij}是平均场序参量,可由自由能极值定出.

Z_2 规范结构

注意到在精确的作用量中,如果我们做局域规范变换

$$s_i(l) \to -s_i(l), \quad \eta_{i\sigma}(l) \to -\eta_{i\sigma}(l) \tag{16.128}$$

那么作用量保持不变,于是我们说体系拥有局域Z_2规范对称性.

但是在平均场作用量中,显然我们已经没有相应的局域Z_2规范对称性,为了考虑这种对称性的效应,我们令

$$I_{ij} \to I_{ij}\varrho_{ij}(l), \quad \chi_{ij} \to \chi_{ij}\varrho_{ij}(l) \tag{16.129}$$

这里$\varrho_{ij}(l)$是定义在i,j格点间的经典Ising 规范场,满足$\varrho_{ij}(l)^2 = 1$,那么相应的作用量是

$$\begin{aligned} S &= \int_0^\beta d\tau[\frac{J_\tau(\Delta\tau)^2}{2}\sum_i (\partial_\tau s_i(\tau))^2 + \sum_{i,\sigma}\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\partial_\tau\eta_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij,\sigma} t_{ij}I_{ij}\varrho_{ij}(l)\bar{\eta}_{i\sigma}(\tau)\eta_{j\sigma}(\tau) \\ &\quad - \sum_{ij} t_{ij}\chi_{ij}\varrho_{ij}(l)s_i(\tau)s_j(\tau) + \sum_{ij} t_{ij}I_{ij}\chi_{ij}] \end{aligned} \tag{16.130}$$

当然,我们也可以直接考虑哈密顿量形式:

$$\hat{H} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij}I_{ij}\hat{\varrho}^z_{ij}\hat{f}^\dagger_{i\sigma}\hat{f}_{j\sigma} - \sum_{ij} t_{ij}\chi_{ij}\hat{\varrho}^z_{ij}\hat{\tau}^x_i\hat{\tau}^x_j + \frac{U}{4}\sum_i \hat{\tau}^z_i \tag{16.131}$$

$$-h\sum_{ij}\hat{\varrho}^x_{ij} - G\sum_{plaquett}\hat{\varrho}^z\hat{\varrho}^z\hat{\varrho}^z\hat{\varrho}^z \tag{16.132}$$

在此形式下,规范变换定义为$\hat{G}_i = (-1)^{\frac{\hat{\tau}^z_i - 1}{2} + \hat{n}^f_i}\prod_j \hat{\varrho}^x_{ij}$. 显然,如果辅助Ising场处于有序态,那么规范对称性会被破缺,此时体系就是费米液体态.而当辅助Ising 场处于无序态时,体系依然具有Z_2结构,特别是如果辅助Ising 自旋和辅助费米子都处于有能隙态,那么我们可以积掉这些自由度而得到纯规范场部分.此时我们面对的就是一个真正的Z_2规范理论,相应的结果都是熟知的.

重费米子:电子能有多重？*

Kondo晶格与Doniach相图*

所谓重电子系统,意指该系统中的载流子如电子具有非常大的有效质量,通常来说这类体系通过量子振荡或者热容测量所得到的有效质量是一般的简单金属(例如金银)的几百到几千倍.[3]实际观测到重电子行为的材料一般是未满壳层的$4f$或者$5f$ 电子起主导作用的稀土化合物,例如包含Ce,Yb,Sm,Pu,U元素的一系列多元化合物.[4]在这些材料中,除了起主导作用的f 电子轨道,s 或者d 电子轨道也参与能带结构的形成,因而对这类体系而言,要正确理解其电子结构至少需要两类电子轨道,即局域的f 电子轨道与巡游的s 或d电子轨道.理论上研究重费米子体系的出发点往往采用Doniach在70年代建议的Kondo晶格模型,[5]

$$H=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}+J\sum_i \vec{S}^c_i\cdot\vec{S}^f_i$$

巡游的传导电子由费米子算符$c_{k\sigma}$表示,其能谱色散是ε_k,而f电子的磁性自由度,即所谓局域磁矩则由自旋算符$\vec{S}^f_i$描述.(在Kondo极限,f电子能级远离费米能,电荷自由度被冻结,因而f电子仅贡献磁性自由度)在每个格点,传导电子的自旋密度$\vec{S}^c_i=\sum_{\alpha\beta}c^\dagger_{i\alpha}\frac{\vec{\sigma}_{\alpha\beta}}{2}c_{i\beta}$与局域自旋通过近藤耦合$J$而发生相互作用.

- 这里我们忽略了多个电子能带,自旋–轨道耦合,晶体场等效应的直接影响而把能带电子的效应等效为单个传导电子能带,稀土离子中f电子的角动量多重态在自旋轨道耦合和晶体场劈裂后等效为每一个格点上$S=1/2$局域自旋,这实际上说明Kondo晶格更像是一个描述重费米子物理的唯象模型;
- 实际材料所固有的无序效应并没有计入;
- 外加磁场所导致的Zeeman耦合和轨道贡献也没有明确写出.

Doniach根据量纲分析指出,Kondo晶格模型包含两类不同的物理效应,即Kondo屏蔽效应和由传导电子诱导的Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida(RKKY)磁性交换相互作用.注意到Kondo晶格模型可以看作是Kondo杂质模型的晶格推广,特别是强耦合极限下($J\gg t$)每一个格点会形成传导电子和局域自旋的单重态,因此我们认为体系可以出现单个Kondo杂质问题中的Kondo屏蔽效应.由于实际体系中J通常并不大,因此其对应的特征能量尺度是弱耦合下的单杂质Kondo温度$T_K=\rho^{-1}e^{-\frac{1}{J\rho}}$.此时局域自旋和传导电子形成局域单重态,然后这些单重态相位相干后使体系进入费米液体态并具有很大的有效质量.

另一方面,局域自旋之间可以通过传导电子的传播而产生等效的长程磁性相互作用,也就是RKKY相互作用.[6]RKKY 相互作用一般会使体系的自旋呈现磁

[3][Coleman,Heavy Fermions: electrons at the edge of magnetism,arXiv:cond-mat/0612006]
[4]Ce的单质的$\alpha-\gamma$相变也是重费米子研究的老问题
[5]事实上这个模型出现在更早的60年代,那时叫做$s-d$交换模型
[6]可以通过二阶微扰论消掉传导电子自由度来获得,因此其能量尺度正比于J^2

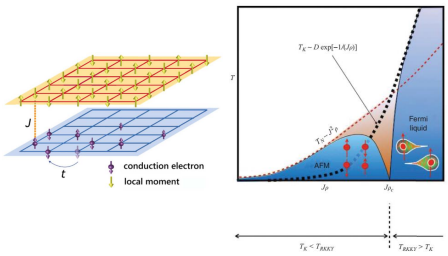


Figure 16.5: (左图)Kondo晶格模型的示意图;(右图)著名的Doniach相图描述了当体系的无维度耦合$J\rho$逐渐增大时,RKKY相互作用(T_N)诱导的反铁磁(AFM) 性与集体近藤屏蔽(T_K)导致的重费米液体(FL)之间的竞争.

性有序排列,其具体的磁结构依赖于传导电子的浓度和能带结构.通常而言,接近半满的能带倾向于使体系形成反铁磁长程有序而电子浓度很低的能带则会有铁磁性的倾向.对于接近半满的能带,反铁磁的特征温度可以估计为$T_N = J^2\rho$.显然,当近藤耦合J很小时,反铁磁的能量/温度尺度更大,体系的基态倾向于形成反铁磁有序态.而当J较大时,Kondo屏蔽效应会更显著,体系因而进入重费米液体态.进一步,如果认为反铁磁有序态和重费米液体态之间通过发生相变而相联系,那么我们就需要假定体系在零温时存在一个量子相变/临界点.以上就是著名的Doniach相图的基本内容,(图16.5)[7]需要说明的是,Doniach 相图的建立仅仅是通过比较两个不同的能量尺度而得到的,实际的重费米子系统显然会包含更多微妙的未被考虑的细节,因而也会有更为复杂的相图和相变,特别是各类非传统的超导配对不稳定性,量子临界态,拓扑Kondo绝缘体等:

- 重费米子金属态,例如$CeAl_3$,$CeCu_6$;
- 重费米子超导体,例如UPt_3,UBe_{13},$CeCu_2Si_2$,$CeCoIn_5$;
- 重费米子量子临界体系,例如$CeCu_{6-x}Au_x$,$YbRh_2Si_2$,$\beta-YbAlB_4$;
- 拓扑Kondo绝缘体,例如SmB_6,YbB_{12}.

考虑到这些新奇体系,特别是以$YbRh_2Si_2$为代表的量子临界材料,人们认识到Doniach相图并不完整,一个更加一般性的相图如图16.6所示. [8] 在这个相图中,除了Doniach相图中Kondo温度T_K与反铁磁交换尺度$J_H \sim T_N$所控制的反铁磁-Kondo顺磁态转变,由于存在所谓的阻挫参数Q,反铁磁态还可以转变为自旋液体($K = 0$)和自旋液体金属($K > 0$).这里阻挫参数可以理解为晶格的几何阻

[7][Doniach,The Kondo lattice and Weak Antiferromagnetism,Physica B and C **91**,231(1977)]

[8]选自综述论文[Coleman,Nevidomskyy,Frustration and the Kondo effect in heavy fermion materials,Journal of Low Temperature Physics **161**,182(2010)]

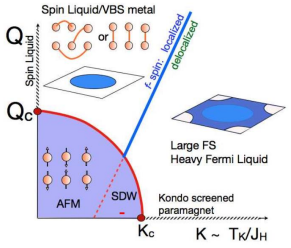


Figure 16.6: Kondo晶格在Doniach轴T_K/J_H和量子阻挫轴$Q=1/S$上的相图.反铁磁相边界由$K=K_c$到$Q=Q_c$的曲线决定.在大Q,小 K时,体系存在自旋液体金属态,仅有小费米面,f电子是局域的.在大K时存在有大费米面的重费米液体,f电子是退局域化的.既然费米面体积是守恒的,从小费米面到大费米面并不能连续演化,因此自旋液体金属和重费米液体之间肯定存在零温量子相变.

挫[9]或者是相互作用导致的阻挫[10].注意到反铁磁态实际上可以分为局域反铁磁态和反铁磁自旋密度波态,前者的f电子局域化而后者的f电子是巡游的参与费米面的形成.至于自旋液体金属指的是f电子磁矩形成的自旋液体与传导电子所形成的金属的共存态,两者在低能下退耦,费米面仅包含传导电子,是所谓的小费米面.大K下的重费米液体由传导电子和f 电子共同构成,两者都参与费米面的形成,显示大费米面.一般来说,重费米液体到反铁磁自旋密度波态是连续相变而重费米液体到局域反铁磁态会经历一级相变.至于重费米液体态到自旋液体金属的相变在平均场近似下是连续相变.

- 需要说明,由于J_H的存在,系统在重费米液体态–自旋液体金属相变发生之前实际上会经历一些列费米面拓扑的变化,这就是所谓的费米面的Lifshitz相变.[11]这类相变的出现自然使得系统的相图变得更为复杂,因而简单的重费米液体态–自旋液体金属连续相变可能并不足以描述实际的相变行为.

当然,不管是Doniach相图还是考虑阻挫轴的相图,基本上是基于量纲分析和物理直觉的argument,其正确性需要详细模型计算的支持.客观来说,关于Kondo晶格模型的理论研究文献已有很多,但真正可靠的结果也只存在于一维模型和半满的二维模型.前者通过精确对角化和DMRG得到数值上严格的求解,[12]而后者由费米子量子蒙特卡洛直接模拟.[13]

[9]例如烧绿石结构的$Pr_2Ir_2O_7$和Shastry－Sutherland晶格结构的Yb_2Pt_2Pb

[10]例如反铁磁模型中常见的J_1-J_2耦合以及He−3双层体系中的环交换相互作用

[11][Zhang,Su,Yu,Lifshitz transitions in a heavy Fermi liquid driven by short-range antiferromagnetic correlations in the two-dimensional Kondo lattice model,Phys.Rev.B **83**,033102(2011)]

[12]例如综述论文[Tsunetsugu,Sigrist,Ueda,The ground-state phase diagram of the one-dimensional Kondo lattice model,Rev.Mod.Phys. **69**,809(1997)]

[13][Assaad,Quantum Monte Carlo Simulations of the Half-Filled Two-Dimensional Kon-

- 需要指出,除了半满正方晶格,一些特殊设计的二维Kondo晶格体系也可以在半满时用量子蒙特卡洛研究,例如六角晶格上的Dirac费米子与Kagome晶格上的局域自旋的耦合模型(传导电子与Balents-Fisher-Girvin模型耦合)或者与一维Heisenberg自旋链的耦合模型,这两类体系都可以实现分数化的费米液体相. [14]

如图16.7(a)(注意这个相图主要是90年代的结果)所示,解析和数值研究表明一维Kondo晶格的基态主要包括三部分,即半满$n_c = 1$的Kondo(自旋液体)绝缘体,偏离半满后强耦合下的铁磁金属和弱耦合下的顺磁性金属.这里的Kondo自旋液体可以理解为每一个格点的Kondo单重态组合成整体的自旋液体态(单重态),这样体系的自旋,电荷和粒子激发都存在能隙,因此是(具有电子关联的)绝缘体.而铁磁金属态实际上是一般的强关联体系在磁性相互作用过强时的普遍选择.[15]最后,顺磁性金属态可以认为是自旋和电荷都不存在能隙的Luttinger液体,其费米速度由于Kondo耦合而减少很多,这样等价于体系的有效质量有很大增强,因此有时也叫做重Luttinger液体.[16]

- 后面的工作发现一维Kondo晶格基态相图的顺磁性金属区实际上还包括少量的铁磁区域和电荷密度波区域;[17]

对于一般情况的二维或三维系统,我们只能采用近似方法,例如

- 大N费米子平均场近似[18]
- 动力学平均场近似[19]
- 动力学团簇近似[20]

do Lattice Model,Phys.Rev.Lett. **83**,796(1999);Capponi,Assaad,Spin and charge dynamics of the ferromagnetic and antiferromagnetic two-dimensional half-filled Kondo lattice model,Phys.Rev.B **63**,155114(2001)]这里发现反铁磁相到顺磁相(Kondo自旋液体态)的量子相变点是$J/t \simeq 1.45$

[14][Hofmann,Assaad,Grover,Fractionalized Fermi liquid in a frustrated Kondo lattice model,Phys.Rev.B **100**,035118(2019); Danu,Vojta,Assaad,Grover,Kondo Breakdown in a Spin$-1/2$ Chain of Adatoms on a Dirac Semimetal,Phys.Rev.Lett. **125**,206602(2020)]

[15]特别是对磁性绝缘体的单空穴掺杂必然导致体系的铁磁化,即Nagaoka铁磁性.

[16]重Luttinger液体有大费米面的信号且与大N费米子平均场的预言部分一致,具体的细节可以参考文献[Khait et al.,Doped Kondo chain, a heavy Luttinger liquid,PNAS **115**,5140(2018)]

[17][Huang,Sheng,Ting,Charge density wave in a doped Kondo chain,Phys.Rev.B **99**,195109(2019)]

[18][Lacroix,Cyrot,Phase diagram of the Kondo lattice,Phys.Rev.B **20**,1969(1979);Bernhard,Lacroix,Coexistence of magnetic order and Kondo effect in the Kondo-Heisenberg model,Phys.Rev.B **92**,094401(2015)]

[19][Bodensiek et al.,Unconventional Superconductivity from Local Spin Fluctuations in the Kondo Lattice,Phys.Rev.Lett. **110**,146406(2013);Hoshino,Kuramoto,Itinerant Versus Localized Heavy-Electron Magnetism,Phys.Rev.Lett. **111**,026401(2013)]

[20][Martin,Assaad,Evolution of the Fermi Surface across a Magnetic Order-Disorder Transition in the Two-Dimensional Kondo Lattice Model: A Dynamical Cluster Approach,Phys.Rev.Lett. **101**,066404(2008)]

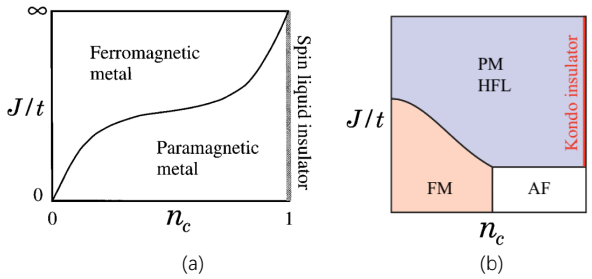


Figure 16.7: (a)一维Kondo晶格的基态相图;(b)平均场近似下Kondo晶格的基态相图.n_c为传导电子密度,J/t是相互作用与跃迁强度的比值.

- 变分蒙特卡洛[21]
- 变分团簇近似[22]

图16.7(b)给出了Lacroix和Cyrot采用平均场近似所得的基态相图,这个相图表明强耦合时($J/t \gg 1$)体系是顺磁性的重费米液体或Kondo绝缘体(仅在半满时存在$n_c = 1$).相互作用减小后体系会进入铁磁态(n_c小)或反铁磁态(n_c接近半满).需要指出,这个相图中的铁磁和反铁磁态与Kondo态不存在共存,这是早前计算的局限性.30多年后Lacroix与合作者Bernhard重新考虑了Kondo晶格在平均场下的相图,他们的结果如图16.8(a),此时铁磁态可以与Kondo态共存(FMK,SSKI)而反铁磁态与Kondo态没有共存区.如果考虑f电子自旋最近邻之间的反铁磁Heisenberg交换($J_H \sum_{\langle i,j\rangle} \vec{S}_i^f \cdot \vec{S}_j^f$),那么Doniach相图修正为16.8(b),此时有反铁磁态与Kondo态的共存区.

图16.9分别给出了变分蒙特卡洛与动力学平均场理论计算二维正方晶格时的磁性相图.[23] 虽然定量上两个相图并不一致,但是定性上两者都得到了三个相,即强Kondo耦合时的顺磁性Kondo态,弱耦合时具有小费米面的反铁磁态以及出现在中间耦合和半满附近的具有大费米面的反铁磁态.此外,顺磁性的Kondo态与小费米面反铁磁态之间是一级相变而与大费米面反铁磁态之间是二级相变.这

[21][Watanabe,Ogata,Fermi-Surface Reconstruction without Breakdown of Kondo Screening at the Quantum Critical Point,Phys.Rev.Lett. **99**,136401(2007);Asadzadeh,Becca,Fabrizio,Variational Monte Carlo approach to the two-dimensional Kondo lattice model,Phys.Rev.B **87**,205144(2013)]

[22][Lenz,Gezzi,Manmana,Variational cluster approach to superconductivity and magnetism in the Kondo lattice model,Phys.Rev.B **96**,155119(2017)]

[23][Peters,Kawakami,Large and small Fermi-surface spin density waves in the Kondo lattice model,Phys.Rev.B **92**,075103(2015);Watanabe,Ogata,Fermi-Surface Reconstruction without Breakdown of Kondo Screening at the Quantum Critical Point,Phys.Rev.Lett. **99**,136401(2007)]

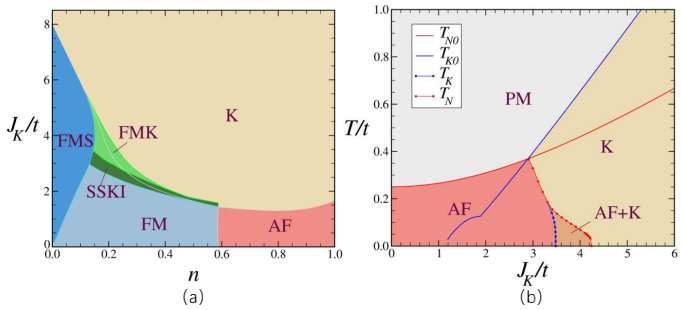


Figure 16.8: (a)Kondo晶格模型在正方晶格下的平均场相图;(b)考虑最近邻反铁磁Heisenberg交换后所修正的Doniach相图.n为传导电子密度,J_K/t是Kondo相互作用与跃迁强度的比值.

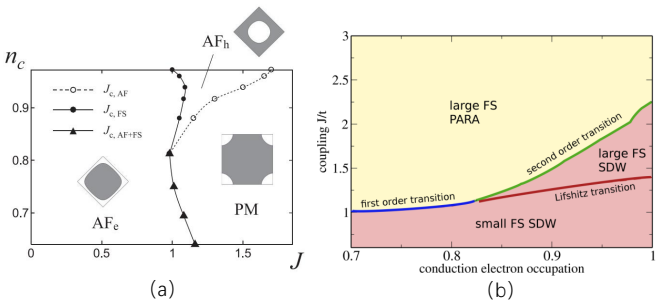


Figure 16.9: 二维正方晶格Kondo晶格模型的磁性相图.(a)变分蒙特卡洛的典型相图;(b)动力学平均场的相图.

模型	Kondo necklace	Kondo晶格	周期Anderson模型
自由度	自旋	自旋+电荷	自旋+电荷
基态相图	√	???	???
已明确的有序态	反铁磁	反铁磁,铁磁	反铁磁

Table 16.1: 重费米子体系中常用的几个模型.

个结果与图16.6所示的相图比较接近,这说明Kondo晶格的磁性相图确实与理论预期定性相符.

Kondo necklace模型与键算符平均场理论*

在这一部分,我们将研究Kondo晶格模型的一个简化版本,即所谓的Kondo necklace(近藤项链)模型.人们假设这个模型可以定性理解半满Kondo晶格的磁性激发,其定义为

$$H_{KN} = t\sum_{\langle ij\rangle}(\tau_i^x\tau_j^x + \tau_i^y\tau_j^y) + J\sum_i \vec{S}_i\cdot\vec{\tau}_i \tag{16.133}$$

这里$\vec{S}_i$表示局域自旋,$\vec{\tau}_i = (\tau_i^x, \tau_i^y, \tau_i^z)$代表传导电子的自旋自由度,$\langle i,j\rangle$表示超立方晶格上只考虑最近邻耦合,耦合系数为$t$,局域自旋和传导电子自旋自由度之间的Kondo耦合常数为J.

定性而言,当$J \gg t$时每个格点倾向于形成局域自旋和传导电子自旋的局域自旋单重态$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\Downarrow\rangle - |\downarrow,\Uparrow\rangle)$,($\uparrow,\downarrow$表示传导电子自旋的上下而$\Uparrow,\Downarrow$代表局域自旋的上下)此时基态波函数近似每个格点单重态的直积,即有

$$|\Psi_K\rangle = \prod_j \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\Downarrow\rangle_j - |\downarrow,\Uparrow\rangle_j). \tag{16.134}$$

另一方面,$J \ll t$时体系就是一个量子XY模型,在一维空间可通过Jordan-Winger变换转化为自由费米子,这是简单的顺磁态(自旋液体).高维空间的量子XY模型是磁有序态,因此我们期待一维Kondo necklace模型始终处于顺磁态而高维时则显示磁有序到Kondo顺磁态的量子相变.

进一步,人们采用了不同的解析和数值方法研究了H_{KN}的零温和有限温度性质:

- 变分波函数和变分蒙特卡洛;[24]
- 自旋波近似,[25]键算符平均场;[26]

[24][Doniach,The Kondo lattice and Weak Antiferromagnetism,Physica B and C **91**,231(1977);Motome et al.,Partial Kondo Screening in Frustrated Kondo Lattice Systems,Phys.Rev.Lett. **105**,036403(2010)]

[25][Mahmoudian,Langari,Phase diagram of the one-dimensional anisotropic Kondo-necklace model,Phys.Rev.B **77**, 024420(2008)]

[26][Zhang,Gu,Yu,Kondo spin liquid and magnetically long-range ordered states in the Kondo

- 实空间重整化群,[27],密度矩阵重整化群.[28];
- 量子蒙特卡洛,[29] 精确对角化.[30]

在解析方法中比较可靠的是键算符平均场,而数值方法中的量子蒙特卡洛和密度矩阵重整化群是研究高维体系和一维体系最合适的技术.因此,在下面的内容中我们将主要讨论键算符平均场.

一维Kondo necklace模型的变分波函数

在进入键算符平均场理论讨论之前,让我们依照Doniach原文的思路考虑一维Kondo necklace模型的变分解,这实际上是Doniach相图真正的起源.首先,我们写出一维时的哈密顿量,

$$H_{KN} = t\sum_i(\tau_i^x\tau_{i+1}^x + \tau_i^y\tau_{i+1}^y) + J\sum_i \vec{S}_i\cdot\vec{\tau}_i. \tag{16.135}$$

这里τ, S都是自旋1/2的Paui矩阵.注意到每一个格点的Hilbert空间是四维的,也就是有四个基矢态(三个三重态$|t^0\rangle, |t^1\rangle, |t^{-1}\rangle$ 和一个单重态$|s\rangle$):

$$\begin{aligned}
|s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\Downarrow\rangle - |\downarrow,\Uparrow\rangle)\\
|t_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\Downarrow\rangle + |\downarrow,\Uparrow\rangle)\\
|t_1\rangle &= |\uparrow,\Uparrow\rangle\\
|t_{-1}\rangle &= |\downarrow,\Downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{16.136}$$

这样一个格点上的任意波函数可以写成这四个态的叠加,即有

$$|\varphi\rangle = a|s\rangle + b|t_{-1}\rangle + c|t_0\rangle + d|t_1\rangle. \tag{16.137}$$

necklace model,Phys.Rev.B **62**,69(2000);Reyes,Continentino,Thermodynamic quantum critical behavior of the Kondo necklace model,Phys.Rev.B **76**,075114(2007)]

[27] [Jullien,Fields,Doniach,Zero-temperature real-space renormalization-group method for a Kondo-lattice model Hamiltonian,Phys.Rev.B **16**,4889(1977);Rappoport,Continentino,Phase diagram of the Kondo necklace: a mean-field renormalization group approach,arXiv:cond-mat/0106419]

[28] [Mendoza-Arenas,Franco,Silva-Valencia,Gap formation and phase transition of the anisotropic Kondo necklace model: Density matrix renormalization group analysis,Phy.Rev.B **81**,035103(2010)]

[29] [Scalettar,Scalapino,Sugar,Monte Carlo Simulation of the Kondo necklace,Phys.Rev.B **31**,7316(1985);Brenig,Finite-temperature properties of the two-dimensional SU(2) Kondo necklace,Phys.Rev.B **73**,104450(2006)]

[30] [Yamamoto,Ide,Ishii,Phase diagram and critical properties of the frustrated Kondo necklace model in a magnetic field,Phys.Rev.B **66**,104408(2002);Zereca,Schmidtb,Thalmeier,Finite temperature properties of Kondo lattice-type model with exact diagonalization,Physica B **378 - 380**,702(2006)]

现在,让我们考虑体系可能存在反铁磁有序(当然一维时这并不容易出现),此时反铁磁有序的存在意味着体系的双子格特性,这样奇数格点可以定义为A子格而偶数格点是B子格,两者的波函数可以写成

$$|\varphi_A\rangle = a|s\rangle + b|t_{-1}\rangle + c|t_0\rangle + d|t_1\rangle \tag{16.138}$$

$$|\varphi_B\rangle = -a|s\rangle - d|t_{-1}\rangle + c|t_0\rangle - b|t_1\rangle \tag{16.139}$$

这里a,b,c,d可以看作是变分参数,有基态能量取极值决定.这样整个体系的变分波函数就是

$$|\Psi_{AK}\rangle = \prod_i |\varphi_A\rangle_i|\varphi_B\rangle_{i+1}. \tag{16.140}$$

当然,对于反铁磁耦合$J>0$,我们期待$c=0$而$d=-b$.这样$|\Psi_{AK}\rangle$简化为

$$|\Psi_{AK}\rangle = \prod_i |\varphi_A\rangle_i|\varphi_B\rangle_{i+1} = \prod_i \left(a|s\rangle_i + b(|t_{-1}\rangle_i - |t_1\rangle_i)\right)\left(-a|s\rangle_{i+1} + b(|t_{-1}\rangle_{i+1} - |t_1\rangle_{i+1})\right). \tag{16.141}$$

这样我们发现基态能量$E_g = \langle\Psi_{AK}|H_{KN}|\Psi_{AK}\rangle$,

$$\begin{aligned} E_g &= t\sum_j \langle\Psi_{AK}|(\tau_j^x\tau_{j+1}^x + \tau_j^y\tau_{j+1}^y)|\Psi_{AK}\rangle + J\sum_j \langle\Psi_{AK}|\vec{S}_j\cdot\vec{\tau}_j|\Psi_{AK}\rangle \\ &= t\sum_j \langle\varphi_A|_j\langle\varphi_B|_{j+1}(\tau_j^x\tau_{j+1}^x + \tau_j^y\tau_{j+1}^y)|\varphi_A\rangle_j|\varphi_B\rangle_{j+1} \\ &+ J\sum_{j=odd}(\langle\varphi_A|_j\vec{S}_j\cdot\vec{\tau}_j|\varphi_A\rangle_j + \langle\varphi_B|_{j+1}\vec{S}_{j+1}\cdot\vec{\tau}_{j+1}|\varphi_B\rangle_{j+1}). \end{aligned} \tag{16.142}$$

这里

$$\begin{aligned} \langle\varphi_A|_j\vec{S}_j\cdot\vec{\tau}_j|\varphi_A\rangle_j &= \langle\varphi_A|_j\vec{S}_j\cdot\vec{\tau}_j(a|s\rangle_j + b|t_{-1}\rangle_j - b|t_1\rangle_j) \\ &= \langle\varphi_A|_j(-3a|s\rangle_j + b|t_{-1}\rangle_j - b|t_1\rangle_j) = -3a^2 + 2b^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle\varphi_A|_j\langle\varphi_B|_{j+1}\tau_j^x\tau_{j+1}^x|\varphi_A\rangle_j|\varphi_B\rangle_{j+1} &= \langle\varphi_A|_j\tau_j^x|\varphi_A\rangle_j\langle\varphi_B|_{j+1}\tau_{j+1}^x|\varphi_B\rangle_{j+1} \\ &= \langle\varphi_A|_j\left(a\frac{1}{\sqrt{2}}(|t_{-1}\rangle_j - |t_1\rangle_j) + \sqrt{2}b|s\rangle_j\right) \\ &\times \langle\varphi_B|_{j+1}\left(-a\frac{1}{\sqrt{2}}(|t_{-1}\rangle_{j+1} - |t_1\rangle_{j+1}) + \sqrt{2}b|s\rangle_{j+1}\right) \\ &= (\sqrt{2}ab + \sqrt{2}ab)(-\sqrt{2}ab - \sqrt{2}ab) = -8a^2b^2 \end{aligned}$$

类似有$\langle\varphi_A|_j\langle\varphi_B|_{j+1}\tau_j^y\tau_{j+1}^y|\varphi_A\rangle_j|\varphi_B\rangle_{j+1} = -8a^2b^2$. 因此有

$$\frac{E_g}{N_s} = J(-3a^2 + 2b^2) - 8ta^2b^2 \tag{16.143}$$

同时波函数的归一化表明$a^2+2b^2=1$,把这个结果代入上式并且令$\frac{\partial E_g}{\partial a^2}=0$可得关于$a^2$的方程是

$$-J - t + 2ta^2 = 0 \Rightarrow a^2 = \frac{J+t}{2t} = \frac{1}{2} + \frac{J}{2t}. \tag{16.144}$$

而$b^2 = 1/4 - \frac{J}{4t}$.同时我们可以计算A子格的磁化(这里采用x方向的磁化)

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{AK}|S_A^x|\Psi_{AK}\rangle &= \langle\varphi_A|S_A^x|\varphi_A\rangle = \langle\varphi_A|S_A^x\left(a|s\rangle + b(|t^{-1}\rangle - |t^1\rangle)\right)\\ &= \langle\varphi_A|\left(a\frac{1}{\sqrt{2}}(|t_1\rangle - |t_{-1}\rangle) - \sqrt{2}b|s\rangle\right)\\ &= -2\sqrt{2}ab = \sqrt{1-\frac{J^2}{t^2}} \end{aligned} \tag{16.145}$$

这说明当$J/t < 1$时反铁磁态存在,其序参量非零.注意到反铁磁态时自旋单重态仍然很大权重$> 1/2$,因此这类反铁磁实际上是Kondo态与反铁磁的共存态.当$J/t = 1$时磁化为零,这样系统就进入顺磁态.此时$b^2 = 0$,因而体系的波函数自动成为Kondo态$|\Psi_K\rangle$,这说明调节J/t能使得体系基态从反铁磁有序态转变为顺磁性的Kondo态.基于这个结果,Doniach建议了Kondo晶格体系的相图,即Doniach相图.当然,需要指出,后面的解析和数值研究表明一维Kondo necklace模型实际上不存在反铁磁有序态,没有量子相变,只有Kondo类似的顺磁态.与之相对,二维和三维模型确实存在反铁磁到顺磁的相变,且相变是连续的二级相变.

Kondo necklace模型的键算符平均场

在上面的变分计算中,我们看到体系波函数可以看作是每个格点的局域单重态和三重态叠加后各种可能态的混和,这自然说明局域基矢的重要性.现在,我们假设引入一些玻色子,这些玻色子作用于真空态将会产生相应的单重态或三重态,也就是

$$\begin{aligned}|s\rangle &= s^\dagger|0\rangle\\ |t_0\rangle &= t_z|0\rangle\\ |t_1\rangle &= s_1|0\rangle\\ |t_{-1}\rangle &= s_{-1}|0\rangle\end{aligned} \tag{16.146}$$

这里玻色子算符s, t_z, t_1, t_{-1}是相应态的产生算符.当然更方便的形式是把t_1, t_{-1}组合为t_x, t_y,

$$\begin{aligned}|t_x\rangle = t_x|0\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(t_1|0\rangle - t_{-1}|0\rangle) = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|t_1\rangle - |t_{-1}\rangle)\\ |t_y\rangle = t_y|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(t_1|0\rangle + t_{-1}|0\rangle) = \frac{i}{\sqrt{2}}(|t_1\rangle + |t_{-1}\rangle)\end{aligned} \tag{16.147}$$

我们要求这些玻色子满足标准的对易关系,也就是$[s, s^\dagger] = 1, [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}, [s, t_\alpha^\dagger] = 0$.此外局域Hilbert空间的完备性关系$|s\rangle\langle s| + |t_0\rangle\langle t_0| + |t_1\rangle\langle t_1| + |t_{-1}\rangle\langle t_{-1}| = 1$可以表示为玻色子算符的约束条件,

$$s^\dagger s + \sum_{\alpha=x,y,z} t_\alpha^\dagger t_\alpha = 1. \tag{16.148}$$

当然,我们还需要知道自旋算符如何用玻色子进行表示.为了明确起见,考虑τ_x作用于基矢$|s\rangle, |t_x\rangle, |t_y\rangle, |t_z\rangle$:

$$\begin{aligned}
\tau_x|s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\tau_x|\uparrow,\Downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\tau_x|\downarrow,\Uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow,\Downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow,\Uparrow\rangle = |t_x\rangle \\
\tau_x|t_x\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\tau_x|\uparrow,\Uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\tau_x|\downarrow,\Downarrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow,\Uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow,\Downarrow\rangle = |s\rangle \\
\tau_x|t_y\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}\tau_x|\uparrow,\Uparrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\tau_x|\downarrow,\Downarrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}|\downarrow,\Uparrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|\uparrow,\Downarrow\rangle = i|t_z\rangle \\
\tau_x|t_z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\tau_x|\uparrow,\Downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\tau_x|\downarrow,\Uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow,\Downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow,\Uparrow\rangle = -i|t_y\rangle.
\end{aligned}$$

这说明τ_x可以用基矢的投影算符表示为

$$\begin{aligned}
\tau_x &= |s\rangle\langle t_x| + |t_x\rangle\langle s| + i|t_z\rangle\langle t_y| - i|t_y\rangle\langle t_z| \\
&= s^\dagger t_x + t_x^\dagger s + it_z^\dagger t_y - it_y^\dagger t_z.
\end{aligned} \tag{16.149}$$

类似的,我们也可以得到其他自旋算符的玻色子表示.这样,局域空间的自旋算符可以分别用玻色子算符表示为(为了与文献中一致,我们添加了1/2因子,这实际上是$S=1/2$自旋算符和Pauli算符之间的差别)

$$\begin{aligned}
\tau_\alpha &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma) \\
S_\alpha &= -\frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma)
\end{aligned} \tag{16.150}$$

可以验证$\vec{S}\cdot\vec{\tau} = -\frac{3}{4}s^\dagger s + \frac{1}{4}\sum_\alpha t_\alpha^\dagger t_\alpha$.

- 上述这种把局域单重态与三重态空间用玻色子表示的方式称为键算符(bond-operator)表示,最早由Sachdev和Bhatt提出用于处理自旋阶梯等阻挫磁性系统,其后也推广至掺杂的反铁磁体.[31]

- 键算符的实质就是以局域空间自旋之间形成的键(单重态和三重态)作为基本对象,把它们作为新的玻色型的动力学变量.通常我们选择最主导相互作用所对应的键来构造键算符形式.

现在,我们把上述结果推广到每一个格点,此时玻色子获得格点指标,它们依

[31] [Sachdev,Bhatt,Bond-operator representation of quantum spins:Mean-field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets,Phys.Rev.B **41**,9323(1990);Park,Sachdev,Bond-operator theory of doped antiferromagnets: From Mott insulators with bond-centered charge order to superconductors with nodal fermions,Phys.Rev.B **64**,184510(2001)]

然满足标准的对易关系.代入哈密顿量H_{KN}可得

$$\begin{aligned} H_{KN} &= \frac{t}{4}\sum_{\langle ij\rangle}((s_i^\dagger t_{i,x}+t_{i,x}^\dagger s_i - i\epsilon_{x\beta\gamma}t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma})\times(s_j^\dagger t_{j,x}+t_{j,x}^\dagger s_j - i\epsilon_{x\beta\gamma}t_{j,\beta}^\dagger t_{j,\gamma}) \\ &+ (s_i^\dagger t_{i,y}+t_{i,y}^\dagger s_i - i\epsilon_{y\beta\gamma}t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma})\times(s_j^\dagger t_{j,y}+t_{j,y}^\dagger s_j - i\epsilon_{y\beta\gamma}t_{j,\beta}^\dagger t_{j,\gamma})) \\ &+ J\sum_i\left(-\frac{3}{4}s_i^\dagger s_i+\frac{1}{4}\sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}\right). \end{aligned} \tag{16.151}$$

注意到这个哈密顿量仍是复杂的多体问题,因此进一步的近似是必要的.回忆之前变分计算时我们发现无论顺磁态还是反铁磁态都存在Kondo(局域)单重态的权重,因此我们的近似处理必须反映这一点,既然玻色子可以发生凝聚,那么最简单计入Kondo单重态的方式就是假设s玻色子凝集,此时可以近似有

$$\langle s_i^\dagger\rangle = \langle s_i\rangle = s \tag{16.152}$$

这样上述哈密顿量可以划分为无相互作用部分和有多个(3或者4)t玻色子的相互作用部分,研究表明体系主要物理由无相互作用部分描述,其哈密顿量是

$$\begin{aligned} &H_{MF} = H_0 + H_1 \\ &H_0 = J\sum_i\left(-\frac{3}{4}s^2+\frac{1}{4}\sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}\right) \\ &H_1 = \frac{t}{4}s^2\sum_{\langle ij\rangle}((t_{i,x}+t_{i,x}^\dagger)(t_{j,x}+t_{j,x}^\dagger)+(t_{i,y}+t_{i,y}^\dagger)(t_{j,y}+t_{j,y}^\dagger)) \end{aligned} \tag{16.153}$$

当然,我们还需要计入了拉格朗日乘子项$\mu\sum_j(s^2+\sum_{\alpha=x,y,z}t_{j,\alpha}^\dagger t_{j,\alpha}-1)$.现在,做傅里叶变换可得

$$\begin{aligned} H_0 &= J\sum_i\left(-\frac{3}{4}s^2+\frac{1}{4}\sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}\right) \\ &= N_s\left(\left(-\frac{3J}{4}+\mu\right)s^2-\mu\right)+\frac{1}{4}J\sum_{k,\alpha=x,y,z}t_{k\alpha}^\dagger t_{k\alpha} \end{aligned} \tag{16.154}$$

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{t}{4}s^2\sum_{\langle ij\rangle,\alpha=x,y}(t_{i,\alpha}t_{j,\alpha}+t_{i,\alpha}^\dagger t_{j,\alpha}+t_{j,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}+t_{i,\alpha}^\dagger t_{j,\alpha}^\dagger) \\ &= \frac{t}{4N_s}s^2\sum_{\langle ij\rangle,k,k',\alpha=x,y}(e^{ikR_i}e^{ik'R_j}t_{k\alpha}t_{k'\alpha}+e^{-ikR_i}e^{ik'R_j}t_{k\alpha}^\dagger t_{k'\alpha}+h.c.) \\ &= \frac{t}{4}s^2\sum_{k,k',\delta,\alpha=x,y}(\delta_{k,-k'}e^{ik'\delta}t_{k\alpha}t_{k'\alpha}+\delta_{k,k'}e^{ik'\delta}t_{k\alpha}^\dagger t_{k'\alpha}+h.c.) \\ &= \frac{t}{4}s^2\sum_{k,\delta,\alpha=x,y}(e^{-ik\delta}t_{k\alpha}t_{-k\alpha}+e^{ik\delta}t_{k\alpha}^\dagger t_{k\alpha}+e^{-ik\delta}t_{k\alpha}^\dagger t_{k\alpha}+e^{ik\delta}t_{k\alpha}^\dagger t_{-k\alpha}^\dagger) \end{aligned}$$

对于d维超立方晶格,我们有

$$\frac{t}{4}s^2\sum_{k,\delta,\alpha=x,y}(e^{ik\delta}+e^{-ik\delta})t^\dagger_{k\alpha}t_{k\alpha}=\frac{t}{2}s^2\sum_{k,\alpha=x,y}\left(\sum_{a=1}^{d}\cos k_a\right)t^\dagger_{k\alpha}t_{k\alpha}, \quad (16.155)$$

$$\begin{aligned}&\frac{t}{4}s^2\sum_{k,\delta,\alpha=x,y}(e^{-ik\delta}t_{k\alpha}t_{-k\alpha}+e^{ik\delta}t^\dagger_{k\alpha}t^\dagger_{-k\alpha})\\ =\;&\frac{t}{4}s^2\sum_{k,\delta,\alpha=x,y}\left(\frac{e^{-ik\delta}+e^{ik\delta}}{2}t_{k\alpha}t_{-k\alpha}+\frac{e^{ik\delta}+e^{-ik\delta}}{2}t^\dagger_{k\alpha}t^\dagger_{-k\alpha}\right)\\ =\;&\frac{t}{4}s^2\sum_{k,\delta,\alpha=x,y}\left(\left(\sum_{a=1}^{d}\cos k_a\right)t_{k\alpha}t_{-k\alpha}+\left(\sum_{a=1}^{d}\cos k_a\right)t^\dagger_{k\alpha}t^\dagger_{-k\alpha}\right).\end{aligned}$$

让我们定义$\lambda_k=\sum_{a=1}^{d}\cos k_a$,$\Delta_k=\frac{t}{4}s^2\lambda_k$,$\Lambda_k=\left(\frac{J}{4}+\mu\right)+\frac{t}{2}s^2\lambda_k$, 这样哈密顿量成为

$$\begin{aligned}&H_{MF}=\tilde{H}_0+\tilde{H}_1\\ &\tilde{H}_0=N_s\left(\left(-\frac{3J}{4}+\mu\right)s^2-\mu\right)+\left(\frac{J}{4}+\mu\right)\sum_k t^\dagger_{kz}t_{kz}\\ &\tilde{H}_1=\sum_{k,\alpha=x,y}(\Lambda_k t^\dagger_{k\alpha}t_{k\alpha}+\Delta_k(t_{k\alpha}t_{-k\alpha}+t^\dagger_{k\alpha}t^\dagger_{-k\alpha})).\end{aligned} \quad (16.156)$$

注意到上述哈密顿量类似于玻色子超流模型中的情况,因此我们可以采用玻色子的Bogoliubov变换来对角化.这相当于引入新的玻色子$\tilde{t}_k=\mu_k t_{k\alpha}+\nu_k t^\dagger_{-k\alpha}$,$(\alpha=x,y)$其中变换系数满足

$$\begin{aligned}&\mu_k^2+\nu_k^2=\cosh 2\theta_k=\frac{\Lambda_k}{\sqrt{\Lambda_k^2-4\Delta_k^2}}\\ &2\mu_k\nu_k=\sinh 2\theta_k=\frac{-2\Delta_k}{\sqrt{\Lambda_k^2-4\Delta_k^2}}.\end{aligned} \quad (16.157)$$

这样对角化的哈密顿量是

$$H_{MF}=\omega_0\sum_k t^\dagger_{kz}t_{kz}+\sum_{k,\alpha=x,y}\omega_k\tilde{t}^\dagger_{k\alpha}\tilde{t}_{k\alpha}+E_g. \quad (16.158)$$

这里$\omega_0=J/4+\mu$,$\omega_k=\sqrt{\Lambda_k^2-4\Delta_k^2}$.基态能量 $E_g=N_s((-3J/4+\mu)s^2-\mu)+\sum_k(\omega_k-\Lambda_k)$.这样让$E_g$对$s,\mu$分别求导为零可得如下的平均场方程:

$$\begin{aligned}&\frac{1}{N_s}\sum_k\frac{\Lambda_k}{\sqrt{\Lambda_k^2-4\Delta_k^2}}=2-s^2\\ &\frac{t}{N_s}\sum_k\lambda_k\frac{\sqrt{\Lambda_k-2\Delta_k}}{\sqrt{\Lambda_k+2\Delta_k}}=2J(3/4-\mu/J).\end{aligned} \quad (16.159)$$

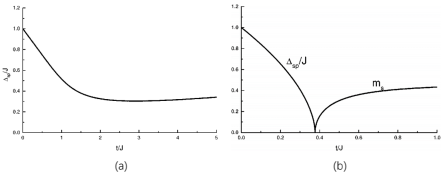


Figure 16.10: (a)一维Kondo necklace模型在键算符平均场下自旋能隙Δ_{sp}/t随t/J的变化;(b)三维Kondo necklace模型在键算符平均场下自旋能隙Δ_{sp}/t以及有序磁矩随t/J的变化.

给定参数J,t,我们就可以数值求解上述方程以得到激发谱ω_k的明确形式.当然,如果定义参数$\tilde{d}=\frac{t}{J}\frac{s^2}{\mu/J+1/4}$,那么这个参数满足方程,

$$\tilde{d}=\frac{2t}{J}\left[1-\frac{2}{N_s}\sum_k\frac{1}{\sqrt{1+\tilde{d}\lambda_k}}\right]. \tag{16.160}$$

通过参数$\tilde{d}$,激发谱ω_k的最小值也就是所谓的自旋激发能隙可以表示为$\Delta_{sp}=J(1/4+\mu/J)\sqrt{1-Z\tilde{d}/2}$(也就是$k=Q=(\pi,\pi...\pi)$,$Z=2d$是超立方晶格最近邻格点的数目(配位数)).

图16.10(a)显示了一维Kondo necklace模型在键算符平均场下自旋能隙Δ_{sp}/t随t/J的变化.[32]可以看到对于任意有限的t/J, 自旋能隙Δ_{sp} 总是非零,这说明体系总是处于Kondo(自旋液体)态.这个结果与量子蒙特卡洛,DMRG等结果一致,表明键算符平均场近似的合理性.

对于高维模型,自旋能隙实际上在有限的t/J消失,这说明顺磁性的Kondo自旋液体不稳定,体系可能进入反铁磁态.为了计入反铁磁态,我们可以假设t_{kx}也发生玻色凝聚,这样我们把它拆分为凝聚部分和涨落部分,即$t_{kx}=\sqrt{N_s}\tilde{t}\delta_{k,Q}+\eta_{kx}$,这相当于假定$x$方向取值的反铁磁态.

$$H_{MF}=\omega_0\sum_k t_{kz}^\dagger t_{kz}+\sum_k\omega_k(\tilde{t}_{ky}^\dagger\tilde{t}_{ky}+\tilde{\eta}_{kx}^\dagger\tilde{\eta}_{kx})+E_g'. \tag{16.161}$$

而$E_g'=N_s[-3/4Js^2+\mu s^2-\mu+(J/4+\mu-Zts^2/2)\tilde{t}^2]+\sum_k(\omega_k-\Lambda_k)$.对于非零的$\tilde{t}$,基态能量$E_g'$对于$\tilde{t}^2$求导数为零可得$J/4+\mu-Zts^2/2=0$,这样自旋激发谱$\omega_k$将不会有能隙,这自然与体系存在反铁磁有序的Goldstone模式(即自旋波激发$\tilde{t}_{ky},\tilde{\eta}_{kx}$)直接联系.此外,$E_g'$对$s,\mu$求导为零可得(代入$J/4+\mu-Zts^2/2=0$可知$\tilde{t}^2$系数为零)

$$s^2=1+\frac{J}{Zt}-\frac{1}{2N_s}\sum_k\sqrt{1+2\lambda_k/Z}, \tag{16.162}$$

[32]引子文献[Zhang,Gu,Yu,Kondo spin liquid and magnetically long-range ordered states in the Kondo necklace model,Phys.Rev.B **62**,69(2000)]

$$\tilde{t}^2 = 1 - \frac{J}{Zt} - \frac{1}{2N_s}\sum_k \frac{1}{\sqrt{1+2\lambda_k/Z}}. \tag{16.163}$$

对于反铁磁态,物理上可观测的序参量是磁矩$m_s = \langle \tau_{ix} \rangle = s\tilde{t}$,这样代入$s, \tilde{t}$的方程可得二维正方晶格和三维简单立方晶格的磁矩为:

$$\begin{aligned} m_s &= \sqrt{\left(0.35712 - \frac{J}{4t}\right)\left(0.52095 + \frac{J}{4t}\right)}, \quad d = 2 \\ m_s &= \sqrt{\left(0.44234 - \frac{J}{6t}\right)\left(0.51263 + \frac{J}{6t}\right)}, \quad d = 3. \end{aligned} \tag{16.164}$$

图16.10(b)显示了三维Kondo necklace模型在键算符平均场下自旋能隙Δ_{sp}/t以及有序磁矩随t/J的变化.可以看到能隙为零与有序磁矩为零处恰好重合,这说明体系的从顺磁性的Kondo自旋液体到反铁磁态的相变是连续相变.

- 注意到反铁磁与Kondo态中自旋单重态序参量$s \neq 0$,这说明反铁磁态实际上是反铁磁与Kondo的共存态而非纯粹的反铁磁;
- Kondo necklace的涨落修正可以通过Green函数方法进行分析;[33]
- 扩展的键算符平均场方法也可以用来研究Kondo晶格模型;[34]
- 类似于键算符,还有一类称为键费米子的形式,其已被用于处理Kondo晶格的很多问题.[35]

最后,我们指出,如果写出平均场哈密顿所对应的自由能就可以研究有限温度的量子临界行为,并可以通过量子标度进行分析.当$d \geqslant 3$时,有限温度下存在反铁磁有序态,二维时反铁磁长程序仅在零温存在.$d > 2$时反铁磁Néel温度$T_N \propto |g|^{\psi}$,($\psi = 1/(d-1)$,$g = 0$是量子相变点位置)在顺磁态这边,自旋能隙$\Delta \propto \sqrt{|g|}(d \geqslant 3)$,这说明动力学临界指数$z = 1$.这样在量子临界区($\Delta \ll T \ll J$),比热系数$\gamma \propto T^{d-1}$ 而在低温Kondo自旋液体态($T \ll \Delta$)则有$\gamma \propto e^{-\Delta/T}$.这些结果可以总结为图 16.11.[36]

[33][Rezania,Langari,Thalmeier,Green's function approach to quantum criticality in the anisotropic Kondo necklace model,Phys.Rev.B **77**,094438(2008)]

[34][Jurecka,Brenig,Bond-operator mean-field theory of the half-filled Kondo lattice model,Phys.Rev.B **64**,092406(2001);Feldbacher,Jurecka,Assaad,Brenig,Single-hole dynamics in the half-filled two-dimensional Kondo-Hubbard model,Phys.Rev.B **66**,045103(2002)]其基本精神仍然是考虑局域空间,也就是一个传导电子格点与局域自旋组成的8维空间,然后把基矢用玻色子和费米子表示,最后把传导电子和局域自旋用新定义的玻色子和费米子代替.

[35][Eder,Stoica,Sawatzky,Single-particle excitations of the Kondo lattice,Phys.Rev.B **55**,R6109(1997);Eder,Rogojanu,Sawatzky,Many-body band structure and Fermi surface of the Kondo lattice,Phys.Rev.B **58**,7599(1998);Eder,Grube,Wróbel,Antiferromagnetic phases of the Kondo lattice,Phys.Rev.B **93**,165111(2016);Eder,Quasiparticle band structure and spin excitation spectrum of the Kondo lattice,Phys.Rev.B **99**,085134(2019);Keβler,Eder,Magnetic phases of the triangular Kondo lattice,Phys.Rev.B **102**,235125(2020)]

[36][Reyes,Continentino,Thermodynamic quantum critical behavior of the Kondo necklace model,Phys.Rev.B **76**,075114(2007)]

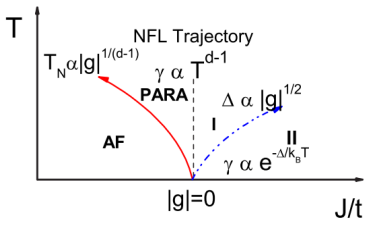


Figure 16.11: 基于键算符平均场理论的Kondo necklace模型在有限温度的一般性相图.

拓扑近藤绝缘体*

以SmB_6,YbB_{12}为代表的拓扑近藤绝缘体(topological Kondo insulator)是重费米子研究近些年来的研究热点之一,我们将简要介绍这一话题相关的一些观念和玩具模型.

近藤绝缘体

近藤绝缘体是一类十分简单的重费米子材料,在这类体系中高度重整化的f电子能带与传导电子发生杂化形成准粒子能带,能带之间存在杂化诱导的能隙(大约为meV量级).当准粒子能带完全填满时,体系成为为绝缘体.由于体系的重整化主要来自Kondo效应,因此我们称这类绝缘体为Kondo绝缘体.表观上来看,虽然这些材料是强关联电子体系,然而它们的低能激发和基态可以绝热对应于无相互作用的能带绝缘体.

为了定性理解Kondo绝缘体的成因,我们考虑如下周期Anderson模型:

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+E_f\sum_{k\sigma}\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}+V\sum_{k\sigma}(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}+\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma})+U\sum_i\hat{f}^\dagger_{i\uparrow}\hat{f}_{i\uparrow}\hat{f}^\dagger_{i\downarrow}\hat{f}_{i\downarrow}. \tag{16.165}$$

这里$\hat{c}_{k\sigma}$,$\hat{f}_{k\sigma}$分别代表传导电子和f电子.ε_k是传导电子的色散关系,E_f是f电子的能级位置,一般是相对于传导电子费米能而言的.V是传导电子和f电子之间的杂化强度,U是描述同一格点f电子存在双重占据时的Coulomb能.

当然,严格处理Hubbard相互作用(U项)是十分困难的问题,但是如果我们只需要了解Kondo绝缘体的形成,那么可以采用基于隶玻色子的平均场近似.为了简化讨论,我们设$U=\infty$,此时玻色子平均场近似主要是说我们可以把f电子算符$\hat{f}_{i\sigma}$写成辅助费米子$\hat{d}_{i\sigma}$与玻色子$\hat{b}_i$的乘积,即$\hat{f}_{i\sigma}=\hat{d}_{i\sigma}\hat{b}^\dagger_i$.然后把玻色子用常数$r$代替,即$\hat{b}^\dagger_i,\hat{b}_i\approx r$,通常可以选择相位使得$r$为实数.这样,我们可以把哈密顿量用辅助费米子表示并扔掉Hubbard相互作用,

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\tilde{E}_f\sum_{k\sigma}\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+\tilde{V}\sum_{k\sigma}(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_{k\sigma}+\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma})+N_s\lambda(r^2-1). \tag{16.166}$$

这里我们定义了重整化参数$\tilde{V}=Vr$,$\tilde{E}_f=E_f+\lambda$并且考虑了拉格朗日约束项$\lambda\sum_i(\sum_\sigma \hat{d}^\dagger_{i\sigma}\hat{d}_{i\sigma}+r^2-1)$.

利用推迟Green函数运动方程可以很容易的得到传导电子与辅助费米子的Green函数,

$$G_{cc}(k,\omega)\equiv\langle\langle\hat{c}_{k\sigma}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega=\frac{1}{\omega-\varepsilon_k-\frac{\tilde{V}^2}{\omega-\tilde{E}_f}}, \tag{16.167}$$

$$G_{dd}(k,\omega)\equiv\langle\langle\hat{d}_{k\sigma}|\hat{d}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega=\frac{1}{\omega-\tilde{E}_f-\frac{\tilde{V}^2}{\omega-\varepsilon_k}}. \tag{16.168}$$

此外,待定参数r和λ可以通过基态能$E_g=\langle\hat{H}\rangle$对$r,\lambda$求一阶导数为零决定,即$\frac{\partial E_g}{\partial r}=\frac{\partial E_g}{\partial\lambda}=0$.

由Green函数的极点(分母为零)可以得到体系准粒子的色散关系为$E_{k\pm}=\frac{1}{2}(\varepsilon_k+\tilde{E}_f\pm\sqrt{(\varepsilon_k-\tilde{E}_f)^2+4\tilde{V}^2})$. 两个能带之间的直接能隙是$\Delta_{ind}=\tilde{V}$,而间接能隙为$\Delta_d=\min E_{k+}-\max E_{k-}>0$.因此,如果电子占据下能带$E_{k-}$而上能带$E_{k+}$未占据,那么体系就成为绝缘体,此时电子填充密度为2(考虑自旋简并).由此,我们发现只要$\tilde{V}\neq0(r\neq0)$,那么填充下能带就导致体系的绝缘化,这个绝缘体就是Kondo 绝缘体.当然,$U=0$时体系也存在上下两个能带,只不过参数没有重整化,占据下能带也导致绝缘体.因此,我们可以预计从$U=0$逐渐增加U可能会使得体系从无相互作用的绝缘体演变为强关联下的Kondo绝缘体.

动量依赖的杂化

注意到f电子材料中稀土离子具有很强的自旋-轨道耦合,因此f轨道电子的轨道角动量L与自旋角动量S合成为总角动量J,我们在具体建模时需要严肃考虑这些总角动量态,例如用周期Anderson模型描述时f电子部分需要修改为

$$\hat{H}_f=E_f\sum_{iM}\hat{f}^\dagger_{iM}\hat{f}_{iM}+U\sum_{i,M\neq M'}\hat{f}^\dagger_{iM}\hat{f}_{iM}\hat{f}^\dagger_{iM'}\hat{f}_{iM'} \tag{16.169}$$

这里我们仅考虑确定的总角动量J下不同的总角动量分量M,例如Ce^{3+}离子有一个f电子,其自旋为$S=1/2$,而轨道角动量为$L=3$,因此根据Hund规则,离子基态为$J=L-S=5/2$的六重简并态($M=\pm5/2,\pm3/2,\pm1/2$).

接下来,我们需要考虑f电子与传导电子的杂化哈密顿量.为了简化讨论,我们先说明稀土离子与传导电子的耦合.注意到传导电子通常用具有明确动量$\vec{k}$和自旋σ的平面波态$|\vec{k},\sigma\rangle$表示,然后可以构造具有确定轨道角动量的态$|k,l,m,\sigma\rangle$:

$$|k,l,m,\sigma\rangle=\int\frac{d\Omega}{4\pi}|\vec{k},\sigma\rangle Y_{lm}(\hat{k}) \tag{16.170}$$

k是动量的绝对值,l是轨道角动量,m轨道角动量的z轴投影,Y_{lm}是球谐函数.这里通过对角度部分的积分得到确定角动量l,m的状态.由于f电子体系有强自旋轨

道耦合,我们需要通过Clebsch – Gordan(CG)系数得到具有确定总角动量J和总角动量分量M的态,

$$|k,J,M\rangle=\sum_{\sigma=\pm1/2}|k,l,M-\sigma,\sigma\rangle(l,M-\sigma,\sigma|J,M) \tag{16.171}$$

这里$(l,m,\sigma|J,M)$是联系总角动量态$|J,M\rangle$和$|l,m,\sigma\rangle$态的CG系数,其具体形式是

$$(l,M-\sigma,\sigma|J,M)=\sqrt{\frac{1}{2}+\frac{2M\sigma}{2l+1}},\quad J=l+1/2 \tag{16.172}$$

$$(l,M-\sigma,\sigma|J,M)=\mathrm{sign}(\sigma)\sqrt{\frac{1}{2}-\frac{2M\sigma}{2l+1}},\quad J=l-1/2 \tag{16.173}$$

由此我们发现

$$\begin{aligned}\hat{c}^{\dagger}_{kM} &= |k,J,M\rangle\langle 0|=\sum_{\sigma=\pm1/2}|k,l,M-\sigma,\sigma\rangle\langle 0|(l,M-\sigma,\sigma|J,M)\\ &= \sum_{\sigma=\pm1/2}\int\frac{d\Omega}{4\pi}|\vec{k},\sigma\rangle\langle 0|Y_{l,M-\sigma}(\hat{k})(l,M-\sigma,\sigma|J,M)\\ &= \sum_{\sigma=\pm1/2}\int\frac{d\Omega}{4\pi}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}Y_{l,M-\sigma}(\hat{k})(l,M-\sigma,\sigma|J,M)\\ &= \sum_{\sigma=\pm1/2}\int\frac{d\Omega}{4\pi}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k}).\end{aligned} \tag{16.174}$$

这个关系把传导电子算符$\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}$和具有确定总角动量$J=l\pm1/2$和分量$M$的电子算符$\hat{c}^{\dagger}_{kM}$通过系数$\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k})$联系在一起.

让我们考虑一个简单的例子.在某些四方晶体环境中,Ce^{3+}离子的低能基态是$|J=5/2,M=\pm3/2\rangle$的双重态.这个态与传导电子的杂化可以用如下哈密顿量描述,

$$H_{mv}=V\sum_{M=\pm3/2}\int\frac{k^2dk}{2\pi^2}[\hat{c}^{\dagger}_{kM}\hat{f}_M+\hat{f}^{\dagger}_M\hat{c}_{kM}]. \tag{16.175}$$

这里假定传导电子与离子的f电子杂化时保持总角动量分量M不变,V是杂化强度.然后我们把$\hat{c}^{\dagger}_{kM}$用$\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}$表示,

$$\hat{c}^{\dagger}_{kM}=\sum_{\sigma=\pm1/2}\int\frac{d\Omega}{4\pi}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k}). \tag{16.176}$$

注意到$J=5/2=3-1/2$,那么$\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k})$中包含的CG系数是$(3,M-\sigma,\sigma|5/2,M)=$

$\mathrm{sign}(\sigma)\sqrt{\frac{1}{2}-\frac{2M\sigma}{7}}$,而球谐函数是$Y_{3,M-\sigma}(\hat{k})$.$(M=\pm 3/2,\sigma=\pm 1/2)$那么就有

$$\begin{aligned} H_{mv} &= V\sum_{M=\pm 3/2}\sum_{\sigma=\pm 1/2}\int\frac{k^2dk}{2\pi^2}\int\frac{d\Omega}{4\pi}[\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k})\hat{f}_M+h.c.] \\ &= V\sum_{M}\sum_{\sigma}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}[\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k})\hat{f}_M+h.c.] \\ &= V\sum_{k\sigma,M}[\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k})\hat{f}_M+\hat{f}^{\dagger}_M\mathcal{Y}^{*}_{\sigma,M}(\hat{k})\hat{c}_{k\sigma}]. \end{aligned} \tag{16.177}$$

这样我们可以把$\mathcal{Y}_{\sigma,M}$看作是以σ,M为指标的矩阵,其具体形式依赖于CG系数的取值和相应的球谐函数$Y_{l,M-\sigma}$.

现在,让我们回到晶格问题,此时我们假设传导电子与f电子的杂化仍然保持总角动量不变,即具有$\hat{c}^{\dagger}_{kM}\hat{f}_{kM}$的形式.然后再把传导电子用平面波基矢下的算符$c_{k\sigma}$表示,推广单个离子问题的结果立即得到

$$H_{cf}=V\sum_{k\sigma,M}(\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\mathcal{Y}_{\sigma,M}(\hat{k})\hat{f}_{kM}+h.c.)=\sum_{k\sigma,M}(V_{k,\sigma,M}\hat{c}^{\dagger}_{k\sigma}\hat{f}_{kM}+h.c.). \tag{16.178}$$

对于Ce^{3+}离子的基态$|J=5/2,M=\pm 3/2\rangle$,我们可以写出$V_{k,\sigma,M}$的具体形式,

$$V_{k,\sigma,M}=\begin{pmatrix} V_{k,\frac{1}{2},\frac{3}{2}} & V_{k,\frac{1}{2},-\frac{3}{2}} \\ V_{k,-\frac{1}{2},\frac{3}{2}} & V_{k,-\frac{1}{2},\frac{3}{2}} \end{pmatrix}=V\begin{pmatrix} Y_{3,1}(\hat{k})\sqrt{\frac{4}{14}} & Y_{3,-2}(\hat{k})\sqrt{\frac{10}{14}} \\ -Y_{3,2}(\hat{k})\sqrt{\frac{10}{14}} & -Y_{3,-1}(\hat{k})\sqrt{\frac{4}{14}} \end{pmatrix}. \tag{16.179}$$

进一步,利用正交归一球函数$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$的定义$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\theta)e^{im\varphi}$,则有

$$Y_{3,1}(\hat{k})=\sqrt{\frac{7}{48\pi}}P_3^1(\theta)e^{i\varphi}=\sqrt{\frac{7}{48\pi}}(6\sin\theta-\frac{15}{2}\sin^3\theta)e^{i\varphi}, \tag{16.180}$$

$$Y_{3,2}(\hat{k})=\sqrt{\frac{7}{480\pi}}P_3^2(\theta)e^{i2\varphi}=\sqrt{\frac{7}{480\pi}}(15\sin^2\theta\cos\theta)e^{i2\varphi}. \tag{16.181}$$

接下来利用$\hat{k}_x=k_x/k=\sin\theta\cos\varphi,\hat{k}_y=k_y/k=\sin\theta\sin\varphi,\hat{k}_z=k_z/k=\cos\theta$,可以把球谐函数重写为

$$Y_{3,1}(\hat{k})=\sqrt{\frac{7}{48\pi}}\left(6(\hat{k}_x+i\hat{k}_y)-\frac{15}{2}(1-\hat{k}_z^2)(\hat{k}_x+i\hat{k}_y)\right), \tag{16.182}$$

$$Y_{3,2}(\hat{k})=\sqrt{\frac{7}{480\pi}}15(\hat{k}_x+i\hat{k}_y)^2\hat{k}_z. \tag{16.183}$$

同理可得

$$Y_{3,-1}(\hat{k})=\sqrt{\frac{7}{48\pi}}\left(6(\hat{k}_x-i\hat{k}_y)-\frac{15}{2}(1-\hat{k}_z^2)(\hat{k}_x-i\hat{k}_y)\right), \tag{16.184}$$

$$Y_{3,-2}(\hat{k})=\sqrt{\frac{7}{480\pi}}15(\hat{k}_x-i\hat{k}_y)^2\hat{k}_z. \tag{16.185}$$

如果我们引入Pauli矩阵$\sigma^{x,y,z}$和单位矩阵$I_{2\times 2}$,那么$V_{k,\sigma,M}$矩阵可以写成$d_0(k)+d_x(k)\sigma^x+d_y(k)\sigma^y+d_z\sigma^z=d_0(k)+\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma}$.(所有$d(k)$都是动量的奇函数)由此,我们发现传导带电子与$f$电子的动量空间杂化原则上具有非平凡的动量依赖关系.

结合f电子哈密顿量和杂化哈密顿量可得体系的总哈密顿量为

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+E_f\sum_{kM}\hat{f}^\dagger_{kM}\hat{f}_{kM}+\sum_{k\sigma,M}(V_{k,\sigma,M}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{kM}+h.c.)+U\sum_{i,M\neq M'}\hat{f}^\dagger_{iM}\hat{f}_{iM}\hat{f}^\dagger_{iM'}\hat{f}_{iM'}. \tag{16.186}$$

拓扑近藤绝缘体的模型哈密顿量

对于具有时间反演对称的体系,我们知道能级存在Kramers简并,这说明我们可以假设总角动量分量M只有两个取值,即$M=+,-$.杂化矩阵可以写成$V_k=V\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma}$,($V_{k,\sigma,M}=V\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma}_{\sigma,M}$)那么体系的哈密顿量为

$$\hat{H}=\sum_k\begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger_k & \hat{f}^\dagger_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_k I_{2\times 2} & V\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma}\\ V(\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma})^\dagger & E_f I_{2\times 2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_k\\ \hat{f}_k\end{pmatrix}+U\sum_{i,M\neq M'}\hat{f}^\dagger_{iM}\hat{f}_{iM}\hat{f}^\dagger_{iM'}\hat{f}_{iM'}. \tag{16.187}$$

这里为了紧凑而把哈密顿量写成了矩阵形式,把矢量与矩阵相乘后可得具体形式,例如$\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_k I_{2\times 2}\hat{c}_k=\varepsilon_k\sum_{\sigma\sigma'}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}(I_{2\times 2})_{\sigma\sigma'}\hat{c}_{k\sigma'}=\varepsilon_k\sum_\sigma\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$. 而$\hat{c}^\dagger_k\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma}\hat{f}_k=\sum_{\sigma,M}\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma}_{\sigma,M}\hat{f}_{kM}$.

当$U=\infty$时,仿照之前周期Anderson模型中Kondo绝缘体的处理,E_f,V分别重整化为$\tilde{E}_f,\tilde{V}$,那么重整化的哈密顿量是(忽略常数项)

$$\hat{H}=\sum_k\begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger_k & \hat{f}^\dagger_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_k I_{2\times 2} & \tilde{V}\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma}\\ \tilde{V}(\vec{d}(k)\cdot\vec{\sigma})^\dagger & \tilde{E}_f I_{2\times 2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_k\\ \hat{f}_k\end{pmatrix} \tag{16.188}$$

这里的2×2矩阵就是Bloch哈密顿量,记为$\hat{H}(k)$,其本征值也就是体系准粒子的色散关系是$E_{k\pm}=\frac{1}{2}(\varepsilon_k+\tilde{E}_f\pm\sqrt{(\varepsilon_k-\tilde{E}_f)^2+V^2\vec{d}^2(k)})$. 当电子完全占据下能带$E_{k-}$而未占据$E_{k-}$时就成为Kondo绝缘体.

另一方面,我们知道时间反演操作下$\hat{c}_{k\uparrow}\to\hat{c}_{-k\downarrow},\hat{c}_{k\downarrow}\to-\hat{c}_{-k\uparrow}$而 $\hat{f}_{k+}\to\hat{f}_{-k-},\hat{f}_{k-}\to-\hat{f}_{-k+}$.这样$(\hat{c}_k,\hat{f}_k)^T$在时间反演下变为

$$\begin{pmatrix}\hat{c}_{k\uparrow}\\ \hat{c}_{k\downarrow}\\ \hat{f}_{k+}\\ \hat{f}_{k-}\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}\hat{c}_{-k\downarrow}\\ -\hat{c}_{-k\uparrow}\\ \hat{f}_{-k-}\\ -\hat{f}_{-k+}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}i\sigma^y & 0\\ 0 & i\sigma^y\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{-k}\\ \hat{f}_{-k}\end{pmatrix} \tag{16.189}$$

那么作用于Bloch哈密顿量$\hat{H}(k)$的时间反演操作可以写成

$$\Theta=\begin{pmatrix}i\sigma^y & 0\\ 0 & i\sigma^y\end{pmatrix}=I_{2\times 2}\otimes(i\sigma^y). \tag{16.190}$$

类似的,我们可以定义空间反演操作,注意到Ce^3离子为代表的$4f$电子其轨道角动量$l=3$,而空间反演操作$\hat{\pi}$作用于该角动量态Y_{lm}结果为$(-1)^l Y_{lm}$,这说明当$l=3$时波函数会多出一个负号,因此在空间反演下有$\hat{f}_{k\pm}\to-\hat{f}_{-k\pm}$而传导电子不具有明确的轨道角动量,因此有$\hat{c}_{k\sigma}\to\hat{c}_{-k\sigma}$,这样作用于Bloch哈密顿量的空间反演操作可以写成

$$\hat{\pi}=\begin{pmatrix} I_{2\times2} & 0 \\ 0 & -I_{2\times2}\end{pmatrix}=\tau^z\otimes I_{2\times2}. \tag{16.191}$$

注意到在先前的Ce^{3+}离子的例子中,我们知道$\vec{d}(k)$是关于k的奇函数,也就是$\vec{d}(-k)=\vec{d}(k)$.这样在时间反演不变点$\vec{\Gamma}_i$ 处这些矢量$\vec{d}$都为零($\vec{\Gamma}_i=-\vec{\Gamma}_i+\vec{G}$,$\vec{G}$为倒格矢)这样,在时间反演不变点处的Bloch哈密顿量就有十分简单的形式,即

$$\hat{H}(k)=(\varepsilon_{\vec{\Gamma}_i}+\tilde{E}_f)\frac{I_{4\times4}}{2}+(\varepsilon_{\vec{\Gamma}_i}-\tilde{E}_f)\frac{\hat{\pi}}{2}. \tag{16.192}$$

$\hat{H}(k)$在$\vec{\Gamma}_i$仅有两个本征值$E_\pm=\frac{1}{2}(\varepsilon_{\vec{\Gamma}_i}+\tilde{E}_f\pm|\varepsilon_{\vec{\Gamma}_i}-\tilde{E}_f|)$. 当我们假设电子完全填满能量较小的本征值$E_-$所对应的本征态$|\psi_-\rangle$时,由于空间反演$\hat{\pi}$与$\hat{H}(k)$对易,我们容易求得$\hat{\pi}|\psi_-\rangle=\delta_i|\psi_-\rangle=-\mathrm{sign}(\varepsilon_{\vec{\Gamma}_i}-\tilde{E}_f)|\psi_-\rangle$. 这里$\delta_i=-\mathrm{sign}(\varepsilon_{\vec{\Gamma}_i}-\tilde{E}_f)$是在占据态在$\Gamma_i$处的宇称.

根据之前章节关于拓扑绝缘体的讨论(Fu-Kane公式),所有时间反演不变点处宇称的乘积定义了所谓的Z_2拓扑不变量ν,

$$(-1)^\nu=\prod_i\delta_i. \tag{16.193}$$

当$\nu=1$时为拓扑绝缘体而$\nu=0$对应平凡绝缘体,同时考虑到体系又是Kondo绝缘体,那么把两类名称结合在一起就有所谓的拓扑近藤绝缘体. 如果考虑简单立方晶格,那么有$\varepsilon_k=-2t(\cos k_x+\cos k_y+\cos k_z)$,记$E_f=\varepsilon_f$就可以得到文献中的结果,即图16.12.[37]这里强拓扑绝缘体由$\nu=1$(图中为$I_{STI}=(-1)^{\nu=1}=-1$) 表征而所谓弱拓扑绝缘体有$\nu=0$ 但其垂直于坐标轴的平面内宇称乘积的Z_2 拓扑指标至少一个是1(图中为$I^{x,y,z}_{WTI}=(-1)^1=-1$).

- 关于拓扑近藤绝缘体的进一步讨论可以参考综述文章[38]或者Coleman书《Introduction to Many-body Physics》最后一章;
- 文献中$\vec{d}(k)$矢量通常选为$(\sin k_x,\sin k_y,\sin k_z)$以便于理论或数值计算.

上述这种简单形式的杂化可以源于传导电子与$|J=\frac{1}{2},M=\pm1/2\rangle$态离子的耦

[37] [Dzero,Sun,Galitski,Coleman, Topological Kondo Insulators, Phys. Rev. Lett. **104**,106408(2010)]

[38] [Dzero,Xia,Galitski,Coleman,Topological Kondo Insulators,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **7**,11(2016)]

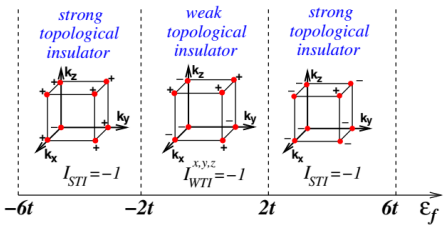


Figure 16.12: 强弱拓扑绝缘体在高对称性点的拓扑指标随重整化f电子能级位置ε_f的变化.

合.容易算得

$$\mathcal{Y}_{\sigma,M}=\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,0} & \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,-1}\\ -\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1} & -\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,0}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\begin{pmatrix}\hat{k}_z & \hat{k}_x-i\hat{k}_y\\ \hat{k}_x+i\hat{k}_y & -\hat{k}_z\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\hat{\vec{k}}\cdot\vec{\sigma} \tag{16.194}$$

然后把$\hat{\vec{k}}\cdot\vec{\sigma}$周期化就有$\sin k_x\sigma^x+\sin k_y\sigma^y+\sin k_z\sigma^z$.

一维拓扑近藤绝缘体

如果我们讨论一维拓扑近藤绝缘体,那么杂化矩阵可以选为$V\sin k\sigma^x$,由于具有$\sin k\sim k$的依赖,因此也叫做p波杂化.其哈密顿量简化为

$$\hat{H}=\sum_k\hat{\psi}_k^\dagger\begin{pmatrix}\varepsilon_k^c\hat{I} & iV\sigma^x\sin k\\ -iV\sigma^x\sin k & (\varepsilon_k^f+E_f)\hat{I}\end{pmatrix}\hat{\psi}_k+U\sum_i\hat{f}_{i\uparrow}^\dagger\hat{f}_{i\uparrow}\hat{f}_{i\downarrow}^\dagger\hat{f}_{i\downarrow}. \tag{16.195}$$

这里我们把f电子的总角动量态$M=\pm$重新标记为σ,传导电子色散记为$\varepsilon_k^c=2t_c\cos k$,同时也引入了$f$电子的色散关系$\varepsilon_k^f=-2t_f\cos k$.$\hat{\psi}_k=(\hat{c}_{k\uparrow},\hat{c}_{k\downarrow},\hat{f}_{k\uparrow},\hat{f}_{k\downarrow})^T$.哈密顿量的无相互作用部分$\hat{H}_0$所对应的Bloch哈密顿量是

$$\mathcal{H}(k)=\begin{pmatrix}\varepsilon_k^c\hat{I} & iV\sigma^x\sin k\\ -iV\sigma^x\sin k & (\varepsilon_k^f+E_f)\hat{I}\end{pmatrix} \tag{16.196}$$

对角化这个哈密顿量可以看到体系具有两支简并的能谱,即

$$E_{k\pm}=\frac{1}{2}[\varepsilon_k^c+\varepsilon_k^f+E_f\pm\sqrt{(\varepsilon_k^c-\varepsilon_k^f-E_f)^2+4V^2\sin^2 k}] \tag{16.197}$$

如果下能带E_{k-}被占据而上能带E_{k+}未被占据,那么体系就是一个绝缘体.注意到$\hat{H}_0$同时具有时间反演和空间反演不变性,($\mathcal{H}(\vec{k})^T=\hat{\Theta}\mathcal{H}(-\vec{k})\hat{\Theta}^{-1}$ and $\mathcal{H}(\vec{k})=\hat{\pi}\mathcal{H}(-\vec{k})\hat{\pi}^{-1}$)那么根据Fu-Kane公式,我们只需要求得一维体系在时间反演不变点(Γ点和M点)的宇称本征值δ_Γ,δ_M就可以计算Z_2指标ν:

$$(-1)^\nu=\delta_\Gamma\delta_M. \tag{16.198}$$

注意到时间反演不变点的哈密顿量是

$$\mathcal{H}(k)=(\varepsilon_k^c+\varepsilon_k^f+\tilde{E}_f)\frac{I_{4\times4}}{2}+(\varepsilon_k-\varepsilon_k^f-\tilde{E}_f)\frac{\hat{\pi}}{2}. \tag{16.199}$$

那么$\delta_\Gamma=\mathrm{sign}(\varepsilon_{k=0}-\varepsilon^f_{k=0}-\tilde{E}_f)=\mathrm{sign}(t_c+t_f-E_f)$,$\delta_\Gamma=\mathrm{sign}(\varepsilon_{k=\pi}-\varepsilon^f_{k=\pi}-\tilde{E}_f)=\mathrm{sign}(-t_c-t_f-E_f)$ 当$E_f=0$时就有$(-1)^\nu=-\mathrm{sign}^2(2t_c+2t_f)=-1$,可知体系总是具有$\nu=1$,这样$U=E_f=0$时的一维$p$波周期Anderson模型的基态是通常的$Z_2$拓扑绝缘体.

现在,让我们把哈密顿量的无相互作用部分写成明确的形式是

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_k\begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow} & \hat{c}^\dagger_{k\downarrow} & \hat{f}^\dagger_{k\uparrow} & \hat{f}^\dagger_{k\downarrow}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_k^c & 0 & 0 & iV\sin k\\ 0 & \varepsilon_k^c & iV\sin k & 0\\ 0 & -iV\sin k & \varepsilon_k^f+E_f & 0\\ -iV\sin k & 0 & 0 & \varepsilon_k^f+E_f\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}_{k\uparrow}\\ \hat{c}_{k\downarrow}\\ \hat{f}_{k\uparrow}\\ \hat{f}_{k\downarrow}\end{pmatrix}\\ &= \sum_{k\sigma}[\varepsilon_k^c\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+(\varepsilon_k^f+E_f)\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}]+\sum_k iV\sin k(\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{f}_{k\uparrow}+\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{f}_{k\downarrow}-\hat{f}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}_{k\uparrow}-\hat{f}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow})\end{aligned}$$

如果重新定义f电子的自旋$\sigma\to-\sigma$,那么杂化部分就具有简单的形式$\sum_{k\sigma}iV\sin k(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma}-\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma})$. 我们指出实现这类Bloch哈密顿量的一维晶格模型如下(一维p波周期Anderson模型,如图16.13),[39]

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{j\sigma}\Big[t_c\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j+1\sigma}-t_f\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{f}_{j+1\sigma}+h.c.\Big]+\frac{V}{2}\sum_{j\sigma}\Big[(\hat{c}^\dagger_{j+1\sigma}-\hat{c}^\dagger_{j-1\sigma})f_{j\sigma}+\hat{f}^\dagger_{j\sigma}(\hat{c}_{j+1\sigma}-\hat{c}_{j-1\sigma})\Big]\\ &+ E_f\sum_{j\sigma}\hat{f}_{j\sigma}\hat{f}_{j\sigma}+U\sum_j\hat{f}_{j\uparrow}\hat{f}_{j\uparrow}\hat{f}_{j\downarrow}\hat{f}_{j\downarrow}.\end{aligned} \tag{16.200}$$

我们考虑开边界的情况,此时($U=0$)

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{j=1,\sigma}^{L-1}[t_c\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j+1\sigma}-t_f\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{f}_{j+1\sigma}+\mathrm{H.c.}]+\frac{V}{2}\sum_{j=2,\sigma}^{L-1}[(\hat{c}^\dagger_{j+1\sigma}-\hat{c}^\dagger_{j-1\sigma})\hat{f}_{j\sigma}+\hat{f}^\dagger_{j\sigma}(\hat{c}_{j+1\sigma}-\hat{c}_{j-1\sigma})]\\ &+ \frac{V}{2}\sum_\sigma[\hat{c}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{1\sigma}+\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{c}_{2\sigma}+\hat{c}^\dagger_{L-1,\sigma}\hat{f}_{L\sigma}+\hat{f}^\dagger_{L\sigma}\hat{c}_{L-1,\sigma}]\end{aligned}$$

为了明确得到边界态,令$t_c=t_f=t$,

$$\hat{H}_0(t)=(t+\frac{V}{2})\sum_{j=1,\sigma}^{L-1}[\hat{b}^\dagger_{j+1\sigma}\hat{a}_{j\sigma}+\hat{a}^\dagger_{j\sigma}\hat{b}_{j+1\sigma}]+(t-\frac{V}{2})\sum_{j=2,\sigma}^{L}[\hat{b}^\dagger_{j-1\sigma}\hat{a}_{j\sigma}+\hat{a}^\dagger_{j\sigma}\hat{b}_{j-1\sigma}].$$

这里定义了新的费米子$\hat{a}_{j\sigma}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{f}_{j\sigma}-\hat{c}_{j\sigma})$和$\hat{b}_{j\sigma}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{f}_{j\sigma}+\hat{c}_{j\sigma})$.当$t=V/2$时,

$$\hat{H}_0(t=V/2)=2t\sum_{j=2,\sigma}^{L}[\hat{b}^\dagger_{j-1\sigma}\hat{a}_{j\sigma}+\hat{a}^\dagger_{j\sigma}\hat{b}_{j-1\sigma}],$$

[39][Zhong,Liu,Luo, Topological phase in 1D topological Kondo insulator: Z_2 topological insulator, Haldane-like phase and Kondo breakdown, Eur.Phys.J.B **90**,147(2017);Zhong et al.,Finite temperature physics of 1D topological Kondo insulator:Stable Haldane phase, emergent energy scale and beyond,Front.Phys. **14**,23602(2019)]

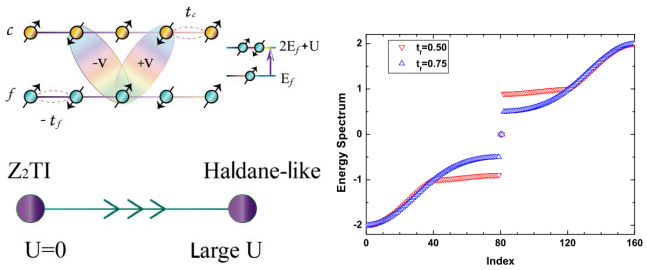


Figure 16.13: 一维p波周期Anderson模型的示意图以及$U=0$时的零模态.

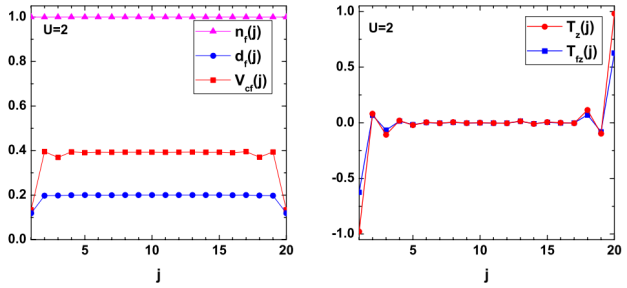


Figure 16.14: 一维p波周期Anderson模型的空间依赖的磁化T_z.

我们发现由$a^\dagger_{1\sigma}, b^\dagger_{L\sigma}$产生的费米子零模与哈密顿量$H_0(t=V/2)$退耦,这些零模分别是$|\Psi_{edge}\rangle \sim \hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle$, $\hat{a}^\dagger_{1\uparrow}\hat{b}^\dagger_{L\downarrow}|0\rangle$,$\hat{a}^\dagger_{1\downarrow}\hat{b}^\dagger_{L\uparrow}|0\rangle$ 和 $\hat{b}^\dagger_{L\uparrow}\hat{b}^\dagger_{L\downarrow}|0\rangle$.它们会导致体系的无相互作用基态具有四重简并.在一般情况下($t_c \neq t_f \neq V/2$), 只有体系的体能隙不封闭,那么零模态是稳定的.这些结果与体系体态为Z_2拓扑绝缘态是相符的.

一维p波周期Anderson模型在半满对称时($E_f=-U/2$)可以利用量子蒙特卡洛进行严格计算.对于零温基态,我们可以采用投影蒙特卡洛来计算,其基本点是可观测量$\mathcal{O}$的基态期望值可以写成

$$\langle\mathcal{O}\rangle = \frac{\langle\Psi_g|\mathcal{O}|\Psi_g\rangle}{\langle\Psi_g|\Psi_g\rangle} = \lim_{\beta\to\infty}\frac{\langle\Psi_T|e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}\mathcal{O}e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}|\Psi_T\rangle}{\langle\Psi_T|e^{-\beta\hat{H}}|\Psi_T\rangle}$$

这里$|\Psi_g\rangle$是基态波函数,其通过尝试波函数$|\Psi_T\rangle$的虚时投影来获得.

图16.14显示了空间依赖的f电子双占据数$d_f(j)=\langle\hat{n}^f_\uparrow\hat{n}^f_\downarrow\rangle$, 等效$c-f$杂化强度$V_{cf}(j)=-\frac{1}{2}\sum_\sigma\langle\hat{f}^\dagger_{j\sigma}(\hat{c}_{j+1\sigma}-\hat{c}_{j-1\sigma})\rangle$以及磁化$T_z=\langle\hat{S}^f_z(j)\rangle+\langle\hat{S}^c_z(j)\rangle$.可以看到边界附近的磁化接近单个$S=1/2$自旋的磁矩,这说明开边界时我们的一维链

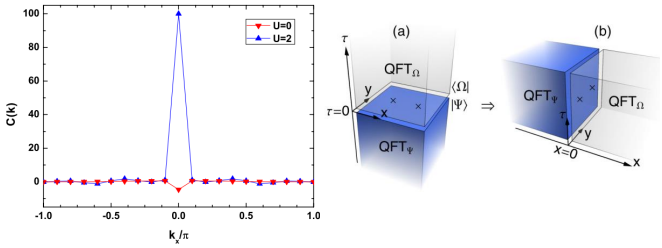


Figure 16.15: 一维p波周期Anderson模型奇异关联子$C(k)$,其提供表征$U=0$时Z_2拓扑绝缘态的一类非能带论手段.(a)$|\Psi\rangle, |\Omega\rangle$是体系无限长时间演化后的态,奇异关联子可以看作 $\tau=0$时的关联函数.(b)在Lorentz转动后,原先以$\tau=0$分界的两个态会变成以$x=0$为分界的态,这样奇异关联子解释为空间界面上的关联函数.

边界处有近自由的$S=1/2$自旋,因此我们说$U>0$时体系的自旋自由度可以用著名的Haldane态来描述.同时,既然存在自由自旋,那么边界附近的Kondo屏蔽实际上是破坏的,这是体系出现边界Kondo崩塌效应的重要特征. [40]

对于边界出现的自由$S=1/2$自旋,我们可以用如下方式来理解.首先,注意到$t_c=t_f=V/2$时开边界下的无相互作用基态可以用先前得到的四个零模态叠加来获得,既然它们的贡献是相等的,那么平均而言边界处的磁化自动为零,我们就看不到非零的边界磁化.但是,当我们开启相互作用后,同一格点的双占据必然被抑制,因此$a^\dagger_{1\uparrow}a^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle$和 $b^\dagger_{L\uparrow}b^\dagger_{L\downarrow}|0\rangle$的贡献就会很小,而剩下的$a^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{L\downarrow}|0\rangle$和$a^\dagger_{1\downarrow}b^\dagger_{L\uparrow}|0\rangle$态自然给出边界磁化.显然它们是简并的并且与蒙特卡洛模拟相符合.所以,我们会说无相互作用的四重简并基态在相互作用下会约简为两重简并,这是拓扑绝缘态在相互作用下的一般特性,也就是相互作用会导致拓扑分类的简化.

- 相互作用(例如Hubbard相互作用)会导致拓扑分类的简化.

最后,我们还采用奇异关联子(strange correlator)来表征体系的拓扑态.一般来说,奇异关联子能够探测相互作用体系中具有短程纠缠的拓扑态,例如$S=1$Heisenberg反铁磁体中的Haldane态,$1D, 2D$的AKLT态,量子自旋霍尔态以及玻色型的对称保护拓扑态.[41]采用奇异关联子的优势是我们不需要像纠缠熵或

[40] [Erten,Ghaemi,Coleman, Kondo Breakdown and Quantum Oscillations in SmB_6, Phys.Rev.Lett. **116**,046403(2016)]

[41] [You,Bi,Rasmussen,Slagle,Xu,Wave Function and Strange Correlator of Short-Range Entangled States,Phys.Rev.Lett. **112**,247202(2014); Wierschem and Sengupta,Strange correlations in spin-1 Heisenberg antiferromagnets,Phys.Rev.B **90**,115157(2014);Wu et al.,Quantum Monte Carlo study of strange correlator in interacting topological insulators,Phys.Rev.B

纠缠谱那样把体系切分为两个部分,这样来自开边界的有限尺寸效应就会得到消除.假设我们需要探测拓扑非平凡的短程纠缠态$|\Psi\rangle$,那么可以考虑一个拓扑平凡的直积态Ω,然后构造局域算符$\phi(r)$的如下关联函数:

$$C(r,r')=\frac{\langle\Omega|\phi(r)\phi(r')|\Psi\rangle}{\langle\Omega|\Psi\rangle} \tag{16.201}$$

关联函数$C(r,r')$称为算符ϕ的奇异关联子.尤亦庄等的结论是如果$|\Psi\rangle$是一维或二维体系的非平凡短程纠缠态,那么在$|r-r'|\to\infty$时$C(r,r')$会趋于非零常数或者以幂律方式趋于零.换句话说,$C(r,r')$的长程序或准长程序意味着$|\Psi\rangle$拓扑非平凡.

对于奇异关联子有一个定性的物理图像.$|\Psi\rangle$可以看作一般初始态在非平凡短程纠缠哈密顿从时间$\tau=-\infty$到0时刻演化的结果.$\langle\Omega|$是在平凡哈密顿控制下从∞演化到0时刻的态.这样,奇异关联子可以看作是时间轴上在$\tau=0$处(的畴壁,也就是$\tau=0$是拓扑平凡态和非平凡态的分界线)的关联函数.(图16.15(a))如果假设体系具有近似的Lorentz不变性,那么做时空旋转后$C(r,r')$就会成为非平凡和平凡短程纠缠态之间的空间分界面上的关联函数. (图16.15(b))在一维和二维空间,拓扑平凡和非平凡态之间的空间界面应该具有长程序或者幂律关联,这种关联也会反映到奇异关联子上.

Lepori等人最近的工作表明,$\phi(r)$需要选为能够反映拓扑非平凡态的边界态的局域算符,比如一维Kitaev超导模型在开边界下具有Majorana费米子零模,这样ϕ选为Majorana费米子$\gamma=c+c^\dagger$(无自旋费米子的叠加),二维或三维BHZ模型开边界下具有Dirac费米子,那么ϕ可选择模型的费米子算符. [42]除此之外,他们还建议用$C(r,r')$构造如下量

$$\bar{S}(L)=\frac{1}{L^d}\sum_{r,r'}|C(r,r')|. \tag{16.202}$$

当$|C(r,r')|\sim\frac{1}{|r-r'|^{2\alpha}}$时,

$$\bar{S}(L\gg1)\sim\begin{cases}L^{d-2\alpha}, & \alpha<d/2;\\ \ln L, & \alpha=d/2;\\ cons., & \alpha>d/2.\end{cases} \tag{16.203}$$

这里$L^{d-2\alpha}$意味着随着体系增大$\bar{S}(L)$不断增加,对应于$|\Psi\rangle$为拓扑非平凡态的情况,而$cons.$意味着体系变大后$\bar{S}(L)$会很快饱和,这说明$|\Psi\rangle$是与$|\Omega\rangle$一样的拓扑平凡态.

92,165123(2015); He et al.,Bona fide interaction-driven topological phase transition in correlated symmetry-protected topological states,Phys.Rev.B **93**,115150(2016).]

[42][Lepori,Burrello,Trombettoni,Paganelli,Strange correlators for topological quantum systems from bulk-boundary correspondence,arXiv:2209.04283]

最后,回到一维p波周期Anderson模型.在我们的计算中用体系的基态$|\Psi_0\rangle$和非拓扑的态$|\Omega\rangle$来构造如下奇异关联子:

$$C(k)=\frac{1}{L^2}\sum_{j,l}e^{i(j-l)k}C_{jl}=\frac{1}{L^2}\sum_{j,l}e^{i(j-l)k}\frac{\langle\Omega|\hat{c}_{j\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{l\sigma}|\Psi\rangle}{\langle\Omega|\Psi\rangle}.$$

从图16.15可以看到$U=0$的无相互作用情况以及$U=2$的相互作用情况都会在$k=0$处显示发散类型的行为,这意味着这两种情况下的态都是拓扑非平凡的,并且值得注意的是,相互作用情况,也就是Haldane态比无相互作用的拓扑绝缘态具有更大的纠缠.

这些结果得到了后续其他研究组密度矩阵重整化群和量子蒙特卡洛模拟数值计算的支持和验证.[43]

- 可以说,我们对基于p波周期Anderson模型的一维拓扑近藤绝缘体已经有了比较全面的认识,目前更大的挑战是如果精确抽出二维和三维拓扑近藤绝缘体模型的基本性质.对于这个问题的研究应有助于理解拓扑近藤绝缘体SmB_6和YbB_{12}中观察到的反常量子振荡现象.[44]

本章小结与进一步阅读

本章小结 Z_2隶自旋方法是典型的隶粒子理论;隶粒子理论适于描述强耦合电子系统.

本章关键词 Z_2隶自旋;正交金属;Doniach相图;Kondo晶格模型;Kondo necklace模型;拓扑近藤绝缘体

进一步阅读 Kaul撰写的《Metals Get an Awkward Cousin》;P.Coleman的《Introduction to many-body physics》第十六到十八章

[43][Lisandrini,Lobos,Dobry,Gazza,Topological Kondo insulators in one dimension: Continuous Haldane-type ground-state evolution from the strongly interacting to the noninteracting limit,Phys.Rev.B **96**,075124(2017);Hagymási,Hubig,Schollwöck,Interaction quench and thermalization in a one-dimensional topological Kondo insulator,Phys.Rev.B **99**,075145(2019);Luo,Ferrero,Yao,Wu,Inexorable edge Kondo breakdown in topological Kondo insulators,Phys.Rev.B **104**,L161119(2021)]

[44][Tan et al.,Unconventional Fermi surface in an insulating state,Science **349**,287(2015);Xiang et al.,Quantum oscillations of electrical resistivity in an insulator,Science **362**,65(2018)]

附录

Anderson杂质模型的slave-spin平均场理论

- 描述金属中磁性杂质的基本模型,即Anderson杂质模型定义如下:

$$\boxed{\hat{H}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k\sigma}V_k(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{d}_\sigma+\hat{d}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma})+E_d\sum_\sigma\hat{d}^\dagger_\sigma\hat{d}_\sigma+U\hat{d}^\dagger_\uparrow\hat{d}_\uparrow\hat{d}^\dagger_\downarrow\hat{d}_\downarrow} \tag{16.204}$$

ε_k是金属传导电子的色散,E_d,U是杂质电子的能级和局域库伦能,V_k是杂质电子与传导电子的杂化耦合.利用Z_2隶自旋表示可知Anderson杂质模型的等价哈密顿量是

$$\hat{H}_*=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k\sigma}V_k\hat{\tau}^x(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma})+\left(E_d+\frac{U}{2}\right)\sum_\sigma\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{f}_\sigma+\frac{U}{4}(\hat{\tau}^z-1) \tag{16.205}$$

一个重要的情况是当Anderson杂质模型具有粒子空穴对称性时(ε_k关于零能对称,$E_d+U/2=0$), 约束项贡献为零,或者更确切的说有[11, 12, 13]

$$\boxed{\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}]=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_*}]} \tag{16.206}$$

这个结论可以简单证明如下:首先根据Z_2表示以及投影可得精确的配分函数恒等式

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}(U)}]=\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_*(U)}\hat{P}]\equiv\mathcal{Z}(U,\hat{P})$$

在这里我们选用$\hat{P}=\frac{1}{2}+\frac{\hat{\tau}^z\hat{\Omega}}{2}$. 如果有$\mathcal{Z}(-U,\hat{P})=\mathcal{Z}(U,\hat{P})$,并且注意到

$$\hat{\tau}^x\hat{\tau}^z\hat{\tau}^x\Rightarrow\hat{\tau}^x\hat{P}\hat{\tau}^x=1-\hat{P}$$

同时有

$$\begin{aligned}\hat{\tau}^xe^{-\beta\hat{H}_*(U)}\hat{\tau}^x&=\lim_{M\to\infty,\Delta\tau\to0}\hat{\tau}^x(e^{-\Delta\tau\hat{H}_*(U)})^M\hat{\tau}^x\\&=\lim_{M\to\infty,\Delta\tau\to0}\hat{\tau}^x(e^{-\Delta\tau\hat{H}_*(U)}\hat{\tau}^xe^{-\Delta\tau\hat{H}_*(U)}\hat{\tau}^x\hat{\tau}^xe^{-\Delta\tau\hat{H}_*(U)}...\hat{\tau}^xe^{-\Delta\tau\hat{H}_*(U)})\hat{\tau}^x\end{aligned}$$

对于虚时上每一段无穷小演化

$$\hat{\tau}^xe^{-\Delta\tau\hat{H}_*(U)}\hat{\tau}^x=\hat{\tau}^x(1-\Delta\tau\hat{H}_*(U))\hat{\tau}^x=1-\Delta\tau\hat{\tau}^x\hat{H}_*(U)\hat{\tau}^x=1-\Delta\tau\hat{H}_*(-U)=e^{-\Delta\tau\hat{H}_*(-U)}$$

这说明$\hat{\tau}^xe^{-\beta\hat{H}_*(U)}\hat{\tau}^x=e^{-\beta\hat{H}_*(-U)}$. 进一步我们得到

$$\mathcal{Z}(-U,\hat{P})=\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_*(-U)}\hat{P}]=\mathrm{Tr}[(\hat{\tau}^xe^{-\beta\hat{H}_*(-U)}\hat{\tau}^x)\hat{\tau}^x\hat{P}\hat{\tau}^x]=\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_*(U)}(1-\hat{P})]=\mathcal{Z}(U,1-\hat{P})$$

这样得到一个重要的等式,即$Z(U,\hat{P})=\mathcal{Z}(-U,\hat{P})=\mathcal{Z}(U,1-\hat{P})$. 最后,可以发现

$$\mathcal{Z}(U,\hat{P})=\frac{1}{2}\left(2\mathcal{Z}(U,\hat{P})\right)=\frac{1}{2}\left(\mathcal{Z}(U,\hat{P})+\mathcal{Z}(U,1-\hat{P})\right)=\frac{1}{2}\mathcal{Z}(U,1)=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_*}].$$

利用完全类似的方式,可得具有粒子空穴对称的多杂质格点或者Hubbard模型具有以下关系

$$\mathcal{Z}(U,\hat{P})=\frac{1}{2}\left(2\mathcal{Z}(U,\hat{P})\right)=\frac{1}{2}\left(\mathcal{Z}(U,\hat{P})+\mathcal{Z}(U,\prod_i(1-\hat{P}_i))\right)\neq\frac{1}{2}\mathcal{Z}(U,1) \tag{16.207}$$

这里$\hat{P}=\prod_i\hat{P}_i$,显然此时合并等式右边的配分函数并不能完全约掉投影算符的效果.例如对于两格点Hubbard问题或者双杂质Anderson模型,需要两个投影算符$\hat{P}_1,\hat{P}_2$,合并配分函数得到

$$\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}_*}\left(\hat{P}_1\hat{P}_2+(1-\hat{P}_1)(1-\hat{P}_2)\right)\right]=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}_*}\left(2\hat{P}_1\hat{P}_2-\hat{P}_1-\hat{P}_2+1\right)\right] \tag{16.208}$$

这样配分函数依然需要考虑约束/投影算符的效果,并且调整$\mathcal{Z}(U,\hat{P})$与$\mathcal{Z}(U,\prod_i(1-\hat{P}_i))$混合的比例也无法消除投影算符,故而多杂质和Hubbard模型的约束在粒子空穴对称情况下也必须考虑.

Anderson杂质模型的平均场理论

在先前的讨论中已知半满对称Anderson杂质模型的Z_2 隶自旋表示形式可不用考虑约束项,

$$\hat{H}_*=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k\sigma}V_k\hat{\tau}^x(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma})+\frac{U}{4}(\hat{\tau}^z-1) \tag{16.209}$$

在平均场近似下,杂化项近似为

$$\hat{\tau}^x(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma})\simeq\hat{\tau}^x\langle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma}\rangle+\langle\hat{\tau}^x\rangle(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma})-\langle\hat{\tau}^x\rangle\langle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma}\rangle \tag{16.210}$$

这样哈密顿量退耦合为两部分

$$\hat{H}_*\simeq\hat{H}_f+\hat{H}_I-\sum_{k\sigma}V_k\langle\hat{\tau}^x\rangle\langle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma}\rangle-\frac{U}{4} \tag{16.211}$$

$$\hat{H}_f=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}+\sum_{k\sigma}\tilde{V}_k(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma}) \tag{16.212}$$

$$\hat{H}_I=V_{cf}\hat{\tau}^x+\frac{U}{4}\hat{\tau}^z \tag{16.213}$$

$\tilde{V}_k=V_k\langle\hat{\tau}^x\rangle$, $V_{cf}=\sum_{k\sigma}V_k\langle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma}\rangle$. 这样求解单自旋问题$\hat{H}_I$可得本征能量为$\lambda_\pm=\pm\sqrt{V_{cf}^2+(U/4)^2}$,对应的本征函数是$\begin{pmatrix}a_\pm\\b_\pm\end{pmatrix}$, $a_\pm=\sqrt{\frac{1}{1+\left(\frac{\lambda_\pm-U/4}{V_{cf}}\right)^2}}$, $b_\pm=\frac{\lambda_\pm-U/4}{V_{cf}}\sqrt{\frac{1}{1+\left(\frac{\lambda_\pm-U/4}{V_{cf}}\right)^2}}$. 在$T=0$时有

$$\langle\tau^x\rangle=\begin{pmatrix}a_-&b_-\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_-\\b_-\end{pmatrix}=2a_-b_-=\frac{\lambda_--U/4}{V_{cf}}\frac{2}{1+\left(\frac{\lambda_--U/4}{V_{cf}}\right)^2} \tag{16.214}$$

同理可得

$$\langle\tau^z\rangle=\begin{pmatrix} a_- & b_-\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_-\\b_-\end{pmatrix}=a_-^2-b_-^2=\frac{1-\left(\frac{\lambda_--U/4}{V_{cf}}\right)^2}{1+\left(\frac{\lambda_--U/4}{V_{cf}}\right)^2} \tag{16.215}$$

对于$\hat{H}_f$利用Green函数运动方程可得

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle\hat{f}_\sigma|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega&=1+\sum_k\tilde{V}_k\langle\langle\hat{c}_{k\sigma}|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega\\(\omega-\varepsilon_k)\langle\langle\hat{c}_{k\sigma}|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega&=\tilde{V}_k\langle\langle\hat{f}_\sigma|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega\end{aligned} \tag{16.216}$$

这样有

$$G^R_{f\sigma}(\omega)\equiv\langle\langle\hat{f}_\sigma|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{1}{\omega-\sum_k\frac{\tilde{V}_k^2}{\omega-\varepsilon_k}} \tag{16.217}$$

以及

$$G^R_{cf\sigma}(\omega)\equiv\langle\langle\hat{c}_{k\sigma}|\hat{f}_\sigma^\dagger\rangle\rangle_\omega=\frac{\tilde{V}_k}{\omega-\varepsilon_k}\frac{1}{\omega-\sum_k\frac{\tilde{V}_k^2}{\omega-\varepsilon_k}} \tag{16.218}$$

为了明确计算上述Green函数中对动量的求和,假设$V_k=V$,并且把对k求和换为对能量的积分:

$$\sum_k\frac{\tilde{V}_k^2}{\omega+i0^+-\varepsilon_k}=\tilde{V}^2\int d\varepsilon\rho(\varepsilon)\frac{1}{\omega+i0^+-\varepsilon}\simeq\tilde{V}^2\rho\int d\varepsilon\left[\frac{1}{\omega-\varepsilon}-i\pi\delta(\omega-\varepsilon)\right] \tag{16.219}$$

这里已假定可用费米面处的常数态密度ρ代替能量依赖的态密度$\rho(\varepsilon)$.进一步有

$$\tilde{V}^2\rho\int d\varepsilon\left[\frac{1}{\omega-\varepsilon}-i\pi\delta(\omega-\varepsilon)\right]=-\tilde{V}^2\rho\ln\frac{\Lambda-\omega}{-\Lambda-\omega}-i\pi\rho\tilde{V}^2 \tag{16.220}$$

Λ是能量积分的截断,当$\Lambda>>\omega$时对数部分为零,定义$\Delta=\pi\rho V^2$有

$$\sum_k\frac{\tilde{V}_k^2}{\omega+i0^+-\varepsilon_k}\simeq-i\tilde{\Delta},\quad\tilde{\Delta}=\pi\rho\tilde{V}^2=\langle\hat{\tau}^x\rangle^2\Delta \tag{16.221}$$

这样得到辅助费米子的推迟Green函数

$$G^R_{f\sigma}(\omega)=\frac{1}{\omega+i\tilde{\Delta}} \tag{16.222}$$

对应的态密度是

$$A_{f\sigma}(\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R_{f\sigma}(\omega)=\frac{\tilde{\Delta}/\pi}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2} \tag{16.223}$$

同时,注意到$V_{cf}=\sum_{k\sigma}V_k\langle\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_\sigma+\hat{f}^\dagger_\sigma\hat{c}_{k\sigma}\rangle$ 可表示为

$$\begin{aligned}V_{cf}&=2\sum_{k\sigma}V_k\int d\omega f_F(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R_{cf\sigma}(\omega)\right]=2V\rho\sum_\sigma\int d\varepsilon\int d\omega f_F(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\tilde{V}}{\omega+i0^+-\varepsilon}\frac{1}{\omega+i\tilde{\Delta}}\right.\\&=4\frac{V}{\tilde{V}}\int d\omega f_F(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{-i\tilde{\Delta}}{\omega+i\tilde{\Delta}}\right]=4\frac{V}{\tilde{V}}\int d\omega f_F(\omega)\omega\frac{\tilde{\Delta}/\pi}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2}\end{aligned} \tag{16.22}$$

当$T=0$时,有

$$V_{cf}=4\frac{V}{\tilde{V}}\int_{-\Lambda}^{0}d\omega\omega\frac{\tilde{\Delta}/\pi}{\omega^2+\tilde{\Delta}^2}=2\frac{V}{\tilde{V}}\frac{\tilde{\Delta}}{\pi}\ln\frac{\tilde{\Delta}^2}{\Lambda^2+\tilde{\Delta}^2} \tag{16.225}$$

两格点Hubbard模型在slave-spin平均场近似下的基态性质

回忆两格点Hubbard模型的形式是$\hat{H}_{two-site}=-t\sum_\sigma(\hat{c}^\dagger_{1\sigma}\hat{c}_{2\sigma}+\hat{c}^\dagger_{2\sigma}\hat{c}_{1\sigma})+U(\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow}+\hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow})$, 在slave-spin表示下有

$$\hat{H}=-t\sum_\sigma\hat{\tau}^x_1\hat{\tau}^x_2(\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{2\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{1\sigma})+U\left(\frac{\hat{\tau}^z_1-1}{4}+\frac{\hat{\tau}^z_2-1}{4}\right)+\frac{U}{2}\sum_\sigma(\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{1\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{2\sigma})$$

然后做平均场退耦合可得

$$\begin{aligned}
\hat{H}_f&=-t\langle\hat{\tau}^x_1\hat{\tau}^x_2\rangle\sum_\sigma(\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{2\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{1\sigma})+\frac{U}{2}\sum_\sigma(\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{1\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{2\sigma})\\
\hat{H}_{Ising}&=-t\sum_\sigma\langle\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{2\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{1\sigma}\rangle\hat{\tau}^x_1\hat{\tau}^x_2+\frac{U}{4}(\hat{\tau}^z_1+\hat{\tau}^z_2)\\
E_0&=-2\frac{U}{4}+t\langle\hat{\tau}^x_1\hat{\tau}^x_2\rangle\sum_\sigma\langle\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{2\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{1\sigma}\rangle
\end{aligned}$$

令$\langle\hat{\tau}^x_1\hat{\tau}^x_2\rangle=I_{12}$, $\sum_\sigma\langle\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{2\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{1\sigma}\rangle=\chi_{12}$，这样得到

$$\begin{aligned}
\hat{H}_f&=-tI_{12}\sum_\sigma(\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{2\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{1\sigma})+\frac{U}{2}\sum_\sigma(\hat{f}^\dagger_{1\sigma}\hat{f}_{1\sigma}+\hat{f}^\dagger_{2\sigma}\hat{f}_{2\sigma})\\
\hat{H}_{Ising}&=-t\chi_{12}\hat{\tau}^x_1\hat{\tau}^x_2+\frac{U}{4}(\hat{\tau}^z_1+\hat{\tau}^z_2)\\
E_0&=-2\frac{U}{4}+tI_{12}\chi_{12}
\end{aligned}$$

半满情况下,费米子基态能量是两个自旋相反费米子占据低能级的贡献,其数值为$-2|tI_{12}|$,同时基态的$\chi_{12}=\pm2$(正负需要和tI_{12}匹配). 在具体求解时可以采用迭代的办法,先给定初始猜测的χ_{12}和I_{12},然后通过定义不断计算新的χ_{12}和I_{12},在足够多的迭代次数后可以得到自洽的解.(迭代次数大于10次就可以)

当slave-spin平均场与精确解比较时,可以发现两者的结果在数值精度内完全符合,这说明半满时平均场处理是可靠的近似.此外,由于辅助费米子键序χ_{12}与相互作用无关,因此平均场下的电子键序$\chi_c=\chi_{12}I_{12}$ 的相互作用依赖完全取决于slave-spin部分,正是这个原因导致平均场解与精确解一致.

- slave-spin平均场可精确地描述半满两格点Hubbard模型的基态性质.
- 当格点数大于2时,辅助费米子的键序将出现相互作用U的依赖,这样平均场解会偏离(数值)精确解.
- 更详细的讨论参见Ref. [14].

Z_2隶自旋表示配分函数的行列式形式与量子蒙特卡洛模拟

对于无符号问题的费米子Z_2隶自旋理论,原则上可以采用行列式量子蒙特卡洛(DQMC)算法进行直接模拟.[19]DQMC模拟的核心是把系统的配分函数写成给定构型下的费米子行列式的构型求和.物理量的计算则可转化为费米子Green函数的计算.

首先,我们把配分函数成如下M等份的形式:

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_{slave-spin}}=\mathrm{Tr}\left[e^{-\Delta\tau\hat{H}_{slave-spin}}e^{-\Delta\tau\hat{H}_{slave-spin}}...e^{-\Delta\tau\hat{H}_{slave-spin}}\right]=\mathrm{Tr}\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{H}_{slave-spin}}$$

利用路径积分处理方式,我们得到每一个虚时间段的演化因子

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\tau\hat{H}_{slave-spin}} &= e^{-\Delta\tau\hat{H}_t}e^{-\Delta\tau\hat{H}_U}+\mathcal{O}((\Delta\tau)^2)[\hat{H}_t,\hat{H}_U]\simeq e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{\tau}_i^z\hat{\tau}_j^z\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^x}\\
&= \sum_{s,s'}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{\tau}_i^z\hat{\tau}_j^z\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}|s'\rangle\langle s'|e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^x}|s\rangle\langle s|\\
&= \sum_{s,s'}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i's_j'\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}\langle s'|e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^x}|s\rangle|s'\rangle\langle s|\\
&= \sum_{s,s'}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i's_j'\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}\langle s'|e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^x}|s\rangle|s'\rangle\langle s|
\end{aligned}$$

其中

$$\langle s'|e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}\sum_i\hat{\tau}_i^x}|s\rangle=\prod_i\langle s'|e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}\hat{\tau}_i^x}|s\rangle=\prod_i C_\tau e^{\Delta\tau J_\tau s_i s_i'}=C_\tau^{N_s}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i s_i s_i'} \tag{16.226}$$

$$C_\tau=e^{\frac{1}{2}\ln\frac{\sinh(-2\frac{U}{4}\Delta\tau)}{2}},\quad \Delta\tau J_\tau=\frac{1}{2}\ln\coth\left(-\frac{U}{4}\Delta\tau\right) \tag{16.227}$$

这样我们发现

$$e^{-\Delta\tau\hat{H}_{slave-spin}}=C_\tau^{N_s}\sum_{s,s'}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i's_j'\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i s_i s_i'}|s'\rangle\langle s|$$

那么体系的配分函数可以改写为

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= C_\tau^{N_sM}\mathrm{Tr}\prod_{l=1}^{M}\sum_{\{s(l)\},\{s'(l)\}}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i'(l)s_j'(l)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i s_i(l)s_i'(l)}|s'(l)\rangle\langle s(l)|\\
&= C_\tau^{N_sM}\sum_{\{s\},\{s'\}}\mathrm{Tr}\prod_{l=1}^{M}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i'(l)s_j'(l)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}\prod_{l=1}^{M}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i s_i(l)s_i'(l)}|s'(M)\rangle\langle s(M)|s'(M-1)\rangle...\\
&\times\ |s'(l+1)\rangle\langle s(l+1)|s'(l)\rangle\langle s(l)|s'(l-1)\rangle...\langle s(2)|s'(1)\rangle\langle s(1)|\\
&= C_\tau^{N_sM}\sum_{\{s\},\{s'(M)\}}\mathrm{Tr}\prod_{l=1}^{M-1}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i(l+1)s_j(l+1)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i'(M)s_j'(M)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}\\
&\times\ \prod_{l=1}^{M-1}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i s_i(l)s_i(l+1)}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i s_i(M)s_i'(M)}|s'(M)\rangle\langle s(1)|
\end{aligned} \tag{16.228}$$

若定义$s_i'(M)=s_i(M+1)$,那么有

$$\mathcal{Z} = C_\tau^{N_s M}\sum_{\{s\}}\mathrm{Tr}\prod_{l=1}^{M}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i(l+1)s_j(l+1)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}\prod_{l=1}^{M}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i s_i(l)s_i(l+1)}\mathrm{Tr}|s(M+1)\rangle\langle s(1)| \tag{16.229}$$

显然,对自旋态的取迹操作导致经典位形$s_i(M+1)=s_i(1)$,即等效的经典自旋满足时间方向上的周期边界条件.因此

$$\mathcal{Z}=C_\tau^{N_s M}\sum_{\{s\}}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i\sum_{l=1}^{M}s_i(l)s_i(l+1)}\prod_\sigma\mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M}e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i(l)s_j(l)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}\right]$$

我们令

$$e^{\Delta\tau\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i(l)s_j(l)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}}=e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)} \tag{16.230}$$

$$\hat{h}_\sigma(l)=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}s_i(l)s_j(l)\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma} \tag{16.231}$$

这里$\hat{h}_\sigma(l)$相当于时间为$\tau=(l-1)\Delta\tau$时的单粒子哈密顿量,可以证明下面的重要关系

$$\boxed{\mathrm{Tr}\left[\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]=\mathrm{Det}[\hat{I}+\hat{B}_M^\sigma\hat{B}_{M-1}^\sigma...\hat{B}_l^\sigma...\hat{B}_1^\sigma]\equiv\mathrm{Det}\hat{A}_\sigma} \tag{16.232}$$

这里$\hat{I}$是$N_s\times N_s$的单位矩阵,而$\hat{B}_\sigma(l)$是$e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}$在以格点为单粒子态基矢下的$N_s\times N_s$矩阵,例如对仅有最近邻跃迁的由四个格点组成的一维链(周期边界条件)有

$$\hat{h}_\sigma(l)=\begin{pmatrix}0 & -ts_1(l)s_2(l) & 0 & -ts_1(l)s_4(l)\\ -ts_2(l)s_1(l) & 0 & -ts_2(l)s_3(l) & 0\\ 0 & -ts_3(l)s_2(l) & 0 & -ts_3(l)s_4(l)\\ -ts_4(l)s_1(l) & 0 & -ts_4(l)s_3(l) & 0\end{pmatrix} \tag{16.233}$$

此时$\hat{B}_\sigma(l)$就是上式再取指数后的矩阵.

这样我们发现如下的简化结果:

$$\mathcal{Z}=C_\tau^{N_s M}\sum_{\{s\}}e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i\sum_{l=1}^{M}s_i(l)s_i(l+1)}\prod_\sigma\mathrm{Det}\hat{A}_\sigma \tag{16.234}$$

一般我们忽略常数系数C_τ,并定义等效Boltzman权重因子

$$\rho(s)\equiv e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i\sum_{l=1}^{M}s_i(l)s_i(l+1)}\prod_\sigma\mathrm{Det}\hat{A}_\sigma=w(s)\rho_\uparrow(s)\rho_\downarrow(s),\quad w(s)=e^{\Delta\tau J_\tau\sum_i\sum_{l=1}^{M}s_i(l)s_i(l+1)}\geq 0$$

$$\rho(s)=w(s)(\rho_\uparrow(s))^2=w(s)(\rho_\downarrow(s))^2\geq 0 \tag{16.235}$$

(注意$\hat{h}_\uparrow(l)=\hat{h}_\downarrow(l)$导致$\hat{B}_\uparrow(l)=\hat{B}_\downarrow(l)$并导致$\hat{A}_\uparrow=\hat{A}_\downarrow$)那么配分函数最终形式是所有可能的经典自旋位形导致的Boltzman权重的叠加:

$$\mathcal{Z}=\sum_{\{s\}}\rho(s) \tag{16.236}$$

注意到Boltzman权重的正定性,那么我们便可利用$\rho(s)$进行无费米子负符号问题的行列式量子蒙特卡洛模拟.

对于一个物理量的平均值

$$\begin{aligned}\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{\{s\}}w(s)\mathrm{Tr}\left[\hat{\mathcal{O}}\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]=\frac{\sum_{\{s\}}w(s)\mathrm{Tr}\left[\hat{\mathcal{O}}\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]}{\sum_{\{s\}}w(s)\mathrm{Tr}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]}\\ &= \frac{\sum_{\{s\}}w(s)\mathrm{Tr}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]\frac{\mathrm{Tr}\hat{\mathcal{O}}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]}{\mathrm{Tr}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]}}{\sum_{\{s\}}w(s)\mathrm{Tr}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]} \qquad (16.237)\\ &= \sum_s\tilde{\rho}(s)\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle_s\simeq\frac{1}{\Omega_s}\sum_{\{s\}}\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle_s \qquad (16.238)\end{aligned}$$

这里定义了每个确定位形下的物理量平均值$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle_s$

$$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle_s=\frac{\mathrm{Tr}\hat{\mathcal{O}}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]}{\mathrm{Tr}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]} \tag{16.239}$$

以及等效的归一化Boltzman权重$\tilde{\rho}(s)$.最后的结果是在重要抽样的情况下得到的,即统计平均等于简单的抽样次数的代数平均.为了不断更新自旋位形来实现平均值计算,通常采用热库算法,即

$$\begin{aligned}R=\frac{\tilde{\rho}(s')}{\tilde{\rho}(s)}=\frac{\rho(s')}{\rho(s)}=\frac{w(s')}{w(s)}\frac{\mathrm{Tr}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]}{\mathrm{Tr}\left[\prod_\sigma\prod_{l=1}^{M}e^{-\Delta\tau\hat{h}_\sigma(l)}\right]}\\ =\frac{w(s')}{w(s)}\prod_\sigma\frac{\mathrm{Det}\hat{A}_\sigma(s')}{\mathrm{Det}\hat{A}_\sigma(s)}=\frac{w(s')}{w(s)}R_\uparrow R_\downarrow,\quad R_\sigma=\frac{\mathrm{Det}\hat{A}_\sigma(s')}{\mathrm{Det}\hat{A}_\sigma(s)} \qquad (16.240)\\ R'=\frac{R}{R+1} \qquad (16.241)\end{aligned}$$

这样在更新前我们产生一个$[0,1]$区间内的随机数a,并把a与R'比较,若$a>R'$ 则不执行更新,而如果出现$a\le R'$就执行自旋位形的更新.

在实际计算时,我们采用单自旋更新,即一次只对空间位置为r,时间为l的自旋进行更新的尝试,此时有 $\hat{B}_l^\sigma(s')=\hat{B}_l^\sigma(s)\hat{\Delta}_l^\sigma(r)$, 这里的矩阵$\hat{\Delta}_l^\sigma(r)$表示更新后与更新前的差异.

$$\begin{aligned}R_\sigma=\frac{\mathrm{Det}[\hat{I}+\hat{B}_M^\sigma\hat{B}_{M-1}^\sigma...\hat{B}_l^\sigma\hat{\Delta}_l^\sigma(r)...\hat{B}_1^\sigma]}{\mathrm{Det}[\hat{I}+\hat{B}_M^\sigma\hat{B}_{M-1}^\sigma...\hat{B}_1^\sigma]}=\frac{\mathrm{Det}[\hat{I}+\hat{B}_{l-1}^\sigma...\hat{B}_1^\sigma\hat{B}_M^\sigma\hat{B}_{M-1}^\sigma...\hat{B}_l^\sigma\hat{\Delta}_l^\sigma(r)]}{\mathrm{Det}[\hat{I}+\hat{B}_{l-1}^\sigma...\hat{B}_1^\sigma\hat{B}_M^\sigma\hat{B}_{M-1}^\sigma...\hat{B}_l^\sigma]}\\ =\frac{\mathrm{Det}[\hat{I}+\hat{A}^\sigma(l)\hat{\Delta}_l^\sigma(r)]}{\mathrm{Det}[\hat{I}+\hat{A}^\sigma(l)]} \qquad (16.242)\end{aligned}$$

可以发现辅助费米子的单粒子等时Green函数是

$$\langle \hat{f}_{i\sigma}(l)\hat{f}^{\dagger}_{j\sigma}(l)\rangle_s = ([\hat{I}+\hat{A}^{\sigma}(l)]^{-1})_{ij} \equiv (\hat{g}^{\sigma}(l))_{ij} = g^{\sigma}_{ij}(l) \tag{16.243}$$

利用这个定义我们可以简化R_σ

$$R_\sigma = \mathrm{Det}[(\hat{I}+\hat{A}^{\sigma}(l)\hat{\Delta}^{\sigma}_{l}(r))\hat{g}^{\sigma}(l)] = \mathrm{Det}[\hat{I}+(\hat{I}-\hat{g}^{\sigma}(l))(\hat{\Delta}^{\sigma}_{l}(r)-\hat{I})] \tag{16.244}$$

简单起见,考虑系统只存在最近邻跃迁的情况并且定义在一维链上,也就是原始的模型是一维最近邻Hubbard模型,此时有

$$\hat{h}_{\sigma}(l) = -t\sum_{j=1}^{N_s} s_j(l)s_{j+1}(l)(\hat{f}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{f}_{j+1\sigma}+\hat{f}^{\dagger}_{j+1\sigma}\hat{f}_{j\sigma}) \tag{16.245}$$

以辅助费米子的格点为基矢,则非零的矩阵元是

$$h_{j,j+1} = h_{j+1,j} = -ts_j s_{j+1}, (j=1...N_s-1);\quad h_{N_s,1} = h_{1,N_s} = -ts_1 s_{N_s}; \tag{16.246}$$

那么$\hat{\Delta}^{\sigma}_{l}(r)-\hat{I}=\hat{\Gamma}^{\sigma}_{l}(r)$ 中非零元是$\Gamma_{r,r-1}=\Gamma_{r-1,r}=e^{-\Delta\tau 2ts_{r-1}s_r}, \Gamma_{r,r+1}=\Gamma_{r+1,r}=e^{-\Delta\tau 2ts_r s_{r+1}}$ 而

$$R_\sigma = (1-g_{r-1,r}\Gamma_{r,r-1})(1-g_{r,r-1}\Gamma_{r-1,r}-g_{r,r+1}\Gamma_{r+1,r})(1-g_{r+1,r}\Gamma_{r,r+1}) \tag{16.247}$$

此时可得到Ising场位形对统计权重的贡献

$$\frac{w(s')}{w(s)} = e^{-2\Delta\tau J_\tau s_r(l)(s_r(l+1)+s_r(l-1))} \tag{16.248}$$

$$R = R^2_\sigma e^{-2\Delta\tau J_\tau s_r(l)(s_r(l+1)+s_r(l-1))} \tag{16.249}$$

这样得到更新后的Green函数

$$g^{\sigma}(l)' = [\hat{I}+(\hat{I}-\hat{g}^{\sigma}(l))\hat{\Gamma}^{\sigma}_{l}(r)]^{-1}\hat{g}^{\sigma}(l) \tag{16.250}$$

最后物理电子的等时Green函数是

$$\langle \hat{c}_{i\sigma}(l)\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}(l)\rangle_s = \langle \hat{\tau}^z_i(l)\hat{\tau}^z_j(l)\rangle_s \langle \hat{f}_{i\sigma}(l)\hat{f}^{\dagger}_{j\sigma}(l)\rangle_s = s_i(l)s_j(l)g^{\sigma}_{ij}(l). \tag{16.251}$$

Z_2隶自旋理论的晶格规范场论形式

在先前的讨论中,我们利用Z_2隶自旋理论的路径积分表示经过平均场近似以及考虑平均场之上的涨落得到了晶格规范场论的形式,这似乎说明规范场来自于我们所采用的平均场加涨落的处理,看起来是近似的结果.但是,我们将证明,一般的Z_2隶粒子表示可以通过合适的对偶变换,精确地写成相应的Z_2晶格规范场论形式.

不失一般性,考虑Hubbard模型的Z_2隶粒子形式,即

$$\hat{H}_{slave-spin}=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}+U\sum_i\frac{\hat{\tau}_i^z-1}{4}+\left(-\mu+\frac{U}{2}\right)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}$$

而约束条件是

$$\frac{\hat{\tau}_i^z+1}{2}=(\hat{f}_{i\uparrow}^\dagger\hat{f}_{i\uparrow}+\hat{f}_{i\downarrow}^\dagger\hat{f}_{i\downarrow}-1)^2 \tag{16.252}$$

在量子Ising模型的讨论中,我们已经知道,通过引入畴壁算符可以把模型对偶为定义在link上的一个一维Z_2规范理论模型,受此启发,我们也可以对上述模型作类似的处理,为简单起见,考虑一维的情况.如果把$\hat{\tau}_i^x,\hat{\tau}_i^z$看作Ising模型中的自旋,那么显然可以定义如下的对偶变换,

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_{i,j}^z&=\hat{\tau}_i^x\hat{\tau}_j^x\\ \hat{\mu}_{j,j+1}^x&=\prod_{k\le j}\hat{\tau}_k^z\end{aligned} \tag{16.253}$$

代入模型可以发现

$$\hat{H}_{slave-spin}=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{\mu}_{i,j}^z\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}+U\sum_i\frac{\hat{\mu}_{i,i-1}^x\hat{\mu}_{i,i+1}^x-1}{4}+\left(-\mu+\frac{U}{2}\right)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}$$

同时相应的约束条件可以写为

$$\frac{\hat{\mu}_{i,i-1}^x\hat{\mu}_{i,i+1}^x+1}{2}=(\hat{f}_{i\uparrow}^\dagger\hat{f}_{i\uparrow}+\hat{f}_{i\downarrow}^\dagger\hat{f}_{i\downarrow}-1)^2=(\hat{n}_i^f-1)^2 \tag{16.254}$$

实际上,可以把约束条件写成更为有用的形式,

$$\hat{G}(i)=(-1)^{\hat{n}_i^f}\hat{\mu}_{i,i-1}^x\hat{\mu}_{i,i+1}^x=1 \tag{16.255}$$

显然,我们发现$\hat{G}(i)$就是Z_2规范变换算符,在这个变换下,$\hat{\mu}_{i,j}^z\to-\hat{\mu}_{i,j}^z,\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\to-\hat{f}_{i\sigma}^\dagger$, 而哈密顿量本身保持不变,这说明,上述哈密顿量就是一个Z_2晶格规范场论模型.只不过在通常的晶格规范理论中$\hat{G}(i)$取值是±1,而这里只能取$+1$,因此我们也可以说Z_2隶粒子理论得到的晶格规范场模型限制在所有$\hat{G}(i)=1$的规范部分.

原则上,如果我们可以严格求得哈密顿量的所有本征态,那么再对这些本征态验证$\hat{G}(i)=1$是否成立,那么不成立的态就可以被抛弃,而剩下的就是所有物理态.进一步,如果考虑二维正方晶格上的模型,我们可以有

$$\hat{\tau}_i^z=\hat{\mu}_{i,i+x}^x\hat{\mu}_{i,i-x}^x\hat{\mu}_{i,i+y}^x\hat{\mu}_{i,i-y}^x \tag{16.256}$$

这样得到对偶后的模型依然具有前面讨论的形式,当然此时的约束条件或者规范变换操作应修改为$\hat{G}(i)=(-1)^{\hat{n}_i^f}\hat{\mu}_{i,i+x}^x\hat{\mu}_{i,i-x}^x\hat{\mu}_{i,i+y}^x\hat{\mu}_{i,i-y}^x=1$. 相应的模型也修改为

$$\hat{H}_{slave-spin}=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{\mu}_{i,j}^z\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{j\sigma}+U\sum_i\frac{\hat{\mu}_{i,i+x}^x\hat{\mu}_{i,i-x}^x\hat{\mu}_{i,i+y}^x\hat{\mu}_{i,i-y}^x-1}{4}+\left(-\mu+\frac{U}{2}\right)\sum_{i\sigma}\hat{f}_{i\sigma}^\dagger\hat{f}_{i\sigma}$$

我们注意到,这里的四自旋相乘项实际上就是toric-code模型中的$\hat{A}_s(i)$,这样我们也可以把约束简写为

$$\hat{G}(i) = (-1)^{\hat{n}_i^f} \hat{A}_s(i) = 1 \tag{16.257}$$

考虑$U \to \infty$的极限,此时$\hat{A}_s(i) = -1$,那么$\hat{n}_i^f = 1$,也就是说每个格点上的费米子数都是一,用Z_2规范理论的语言来说就是每个格点上有一个Z_2电荷.相对于$\hat{A}_s(i) = -1$这个基态的激发是$\hat{A}_s(i) = +1$的拓扑激发,以及从单占据到空占或双占据的费米子激发,规范场处于退禁闭态.当U是有限值时,动能项导致费米子在不同格点间的跃迁并且如果微扰地积掉费米子可以诱导规范不变的四自旋相互作用,

$$J \sum_i \hat{\mu}^z_{i,i+x} \hat{\mu}^z_{i+x,i+x+y} \hat{\mu}^z_{i+x+y,i+y} \hat{\mu}^z_{i+y,i}, \qquad J \sim \frac{t^4}{U^3} \tag{16.258}$$

此时,Z_2规范场部分就是toric-code模型,

$$\hat{H}_{Z_2} = J \sum_i \hat{\mu}^z_{i,i+x} \hat{\mu}^z_{i+x,i+x+y} \hat{\mu}^z_{i+x+y,i+y} \hat{\mu}^z_{i+y,i} + \frac{U}{4} \sum_i \hat{\mu}^x_{i,i-1} \hat{\mu}^x_{i,i+1} = \frac{U}{4} \sum_i \hat{A}_s(i) + J \sum_i \hat{B}_p(i)$$

另一方面,如果我们考虑规范场诱导的费米子之间相互作用,那么有

$$\frac{t^2}{-U/2} \sum_\sigma \hat{f}^\dagger_{i\sigma} \hat{f}_{j\sigma} \sum_{\sigma'} \hat{f}^\dagger_{j\sigma'} \hat{f}_{i\sigma'} = \frac{2t^2}{-U} \left(-2\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - \frac{1}{2} \hat{n}_i \hat{n}_j + \hat{n}_i^f \right) = \frac{4t^2}{U} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{t^2}{U} \hat{n}_i \hat{n}_j - \frac{2t^2}{U} \hat{n}_i^f \tag{16.259}$$

在单占据极限下,诱导的相互作用就是熟悉的反铁磁Heisenberg相互作用.我们知道半满Hubbard模型在强耦合极限下($U/t \gg 1$)等效于反铁磁Heisenberg模型,因此这里基于规范场形式的讨论与熟知的结论完全符合.

第十六章习题

习题1:Z_2表示

Q1:写出单带Hubbard模型的Z_2隶自旋表示形式并给出约束项的形式.

Q2:考虑周期Anderson模型$\hat{H}_{PAM} = \sum_{ij,\sigma} t_{ij}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + E_f\sum_{j\sigma}\hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{f}_{j\sigma} + V\sum_{j\sigma}(\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{f}_{j\sigma} + \hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}) + U\sum_j \hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\uparrow}\hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\downarrow}$. 试用$Z_2$隶自旋表示改写$\hat{f}$费米子算符以得到$Z_2$隶自旋表示的周期Anderson模型.

Q3:当$U=0$时,把Q2中周期Anderson模型变换至动量空间,($\hat{c}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}}e^{ikR_j}\hat{c}_{k\sigma}$,$\hat{f}_j$有类似表达而$\sum_{ij,\sigma} t_{ij}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} = \sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$) 试利用推迟Green函数的运动方程计算推迟Green函数$\langle\langle\hat{c}_{k\sigma}|\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega$以及$\langle\langle\hat{f}_{k\sigma}|\hat{f}^\dagger_{k\sigma}\rangle\rangle_\omega$.

习题2:单格点模型的动力学

Q1:计算单格点量子Ising模型$\hat{H}_{site} = h_x\hat{\sigma}^x + h_m\hat{\sigma}^z$的本征值和本征态.

Q2:计算Q1中模型的动力学自旋关联函数$\chi^{xx}(\omega) = \langle\langle\hat{\sigma}^x|\hat{\sigma}^x\rangle\rangle_\omega$.(提示:利用推迟Green函数的运动方程)

习题3:Kondo晶格模型的平均场理论

Q1:自旋$S=1/2$算符可用两个费米子表示为$\hat{S}^+ = \hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\downarrow, S^- = \hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\uparrow, S^z = \frac{1}{2}(\hat{f}^\dagger_\uparrow\hat{f}_\uparrow - \hat{f}^\dagger_\downarrow\hat{f}_\downarrow)$, 且满足约束条件$\sum_\sigma \hat{f}^\dagger_\sigma\hat{f}_\sigma = 1$.试用该费米子表示改写各向异性Kondo晶格模型$\hat{H}_{KL} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \frac{J_\perp}{2}\sum_j(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}S^-_j + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}S^+_j) + \frac{J_\parallel}{2}\sum_{j\sigma}\sigma\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}S^z_j$,证明相应的哈密顿量是

$$\hat{H}_{KL} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \frac{J_\perp}{2}\sum_j(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\downarrow}) + \frac{J_\parallel}{4}\sum_j(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow})(\hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\uparrow} - \hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\downarrow}). \tag{16.260}$$

Q2:把横向耦合部分改写为

$$\frac{J_\perp}{2}\sum_j(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow}\hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\downarrow}) = -\frac{J_\perp}{4}\sum_j\left((\hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\uparrow})^2 + (\hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\downarrow})^2\right), \tag{16.261}$$

设Kondo杂化序参量$V = -\langle\hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\rangle - \langle\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\downarrow}\rangle = -\langle\hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\rangle - \langle\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\uparrow}\rangle$, 反铁磁序参量$m_c = -\frac{1}{2}(\langle\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow}\rangle - \langle\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\rangle)e^{-iQ\cdot R_j}$,$m_f = \frac{1}{2}(\langle\hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\uparrow}\rangle - \langle\hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\downarrow}\rangle)e^{-iQ\cdot R_j}$,$Q$是反铁磁特征波矢,在超立方晶格是$Q=(\pi,\pi...\pi)(e^{i2Q\cdot R_j}=1)$.利用这些序参量证

明平均场近似下的哈密顿量是

$$\hat{H}_{MF} = \hat{H}_c + \hat{H}_\perp + \hat{H}_\parallel$$
$$\hat{H}_c = \sum_{ij\sigma} t_{ij}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}$$
$$\hat{H}_\perp = \frac{J_\perp}{2}V\sum_{j\sigma}(\hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{f}_{j\sigma} + \hat{f}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{j\sigma}) + \frac{J_\perp}{2}N_sV^2$$
$$\hat{H}_\parallel = \frac{J_\parallel}{2}\sum_j\Big((-m_c)e^{iQ\cdot R_j}(\hat{f}^\dagger_{j\uparrow}\hat{f}_{j\uparrow} - \hat{f}^\dagger_{j\downarrow}\hat{f}_{j\downarrow}) + m_f e^{iQ\cdot R_j}(\hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow})\Big) + N_sJ_\parallel m_c m_f.$$

Q3:利用傅里叶变换证明体系的哈密顿是(提示:$\sum_{ij\sigma}t_{ij}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} = \sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}$)

$$\begin{aligned}\hat{H}_{MF} &= \sum_{k\sigma}\varepsilon_k\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma} + \frac{J_\perp}{2}V\sum_{k\sigma}(\hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{f}_{k\sigma} + \hat{f}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma})\\ &+ \frac{J_\parallel}{2}\sum_{k\sigma}\Big(-m_c\sigma\hat{f}^\dagger_{k+Q\sigma}\hat{f}_{k\sigma} + m_f\sigma\hat{c}^\dagger_{k+Q\sigma}\hat{c}_{k\sigma}\Big) + N_s(J_\parallel m_c m_f + \frac{J_\perp}{2}V^2).\end{aligned}$$

把动量求和限制在磁布里渊区或约化布里渊区并引入旋量$\Psi^\dagger_{k\sigma} = (c^\dagger_{k\sigma}, c^\dagger_{k+Q}, f^\dagger_{k\sigma}, f^\dagger_{k+Q\sigma})$,试着证明哈密顿量可以改写为

$$\hat{H}_{MF} = \sum_{k\sigma}{}' \Psi^\dagger_{k\sigma}H_{k\sigma}\Psi_{k\sigma} + N_s(J_\parallel m_c m_f + \frac{J_\perp}{2}V^2).$$

$$H_{k\sigma} = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & \frac{m_f J_\parallel}{2}\sigma & \frac{VJ_\perp}{2} & 0\\ \frac{m_f J_\parallel}{2}\sigma & \varepsilon_{k+Q} & 0 & \frac{VJ_\perp}{2}\\ \frac{VJ_\perp}{2} & 0 & 0 & -\frac{m_c J_\parallel}{2}\\ 0 & \frac{VJ_\perp}{2} & -\frac{m_c J_\parallel}{2} & 0\end{pmatrix}. \tag{16.262}$$

这里$\sum'_k$指对约化布里渊区求和.

Q4:当$\varepsilon_{k+Q} = -\varepsilon_k$也就是能带满足嵌套条件时,证明Q3中$4\times 4$矩阵$H_{k\sigma}$的本征值为

$$E_{\pm\pm}(k) = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\varepsilon_k^2 + J_\parallel^2(m_c^2+m_f^2)/4 + J_\perp^2V^2/2 \pm E'(k)}$$
$$E'(k) = \sqrt{(\varepsilon_k^2 + J_\parallel^2(m_c^2+m_f^2)/4 + J_\perp^2V^2/2)^2 - (J_\parallel^2 m_c m_f + J_\perp^2V^2)/4 - J_\parallel^2 m_c^2\varepsilon_k}.$$

这样体系的基态能量是$E_g = 2\sum'_k(E_{--}(k) + E_{-+}(k)) + N_s(J_\parallel m_c m_f + \frac{J_\perp}{2}V^2)$

Q5:在Q4中的E_g令$m_c = m_f = 0$并利用$\frac{\partial E_g}{\partial V} = 0$推导关于$V$的平均场方程.在Q4中的$E_g$令$V = 0$并利用$\frac{\partial E_g}{\partial m_c} = \frac{\partial E_g}{\partial m_f} = 0$推导关于$m_c$和$m_f$的平均场方程.通过求解这些方程并代入基态能量$E_g$,并令$J_\perp = J_\parallel = J$可知体系随着$J$的增加会出现从反铁磁态到顺磁性的Kondo绝缘体的相变.当然,如果假设所有序参量都非零,那么体系实际上还存在反铁磁与Kondo的共存态,这已得到平均场计算和量子蒙特卡洛的证实.[45]

[45][Zhang,Yu,Kondo singlet state coexisting with antiferromagnetic long-range order:A pos-

sible ground state for Kondo insulators,Phys.Rev.B **62**,76(2000);Assaad,Quantum Monte Carlo Simulations of the Half-Filled Two-Dimensional Kondo Lattice Model,Phys.Rev.Lett. **83**,796(1999)]

Bibliography

[1] S. E. Barnes, New method for the Anderson model, J. Phys. F: Metal Phys. **6**, 1375 (1976).

[2] P. Coleman, New approach to the mixed-valence problem, Phys. Rev. B **29**, 3035 (1984).

[3] N. Read and D. M. Newns, A new functional integral formalism for the degenerate Anderson model, J. Phys. C: Solid State Phys., **16**, L1055-L1060 (1983).

[4] D. P. Arovas and A. Auerbach, Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models, Phys. Rev. B **38**, 316 (1988).

[5] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, New Functional Integral Approach to Strongly Correlated Fermi Systems: The Gutzwiller Approximation as a Saddle Point, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).

[6] D. Riegler, M. Klett, T. Neupert, R. Thomale, and P. Wölfle, Slave-boson analysis of the two-dimensional Hubbard model, Phys. Rev. B **101**, 235137 (2020).

[7] S. Florens and A. Georges, Slave-rotor mean-field theories of strongly correlated systems and the Mott transition in finite dimensions, Phys. Rev. B **70**, 035114 (2004).

[8] A. Ruegg, S. D. Huber, and M. Sigrist, Z_2-slave-spin theory for strongly correlated fermions, Phys. Rev. B **81**, 155118 (2010).

[9] S. C. Zhang, The Chern-Simons-Landau-Ginzburg theory of the fractional quantum Hall effect, International Journal of Modern Physics B, **6**, 25-58 (1992).

[10] M. Hermele, T. Senthil, M. P. A. Fisher, P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, Stability of $U(1)$ spin liquids in two dimensions, Phys. Rev. B **70**, 214437 (2004).

[11] P. P. Baruselli and M. Fabrizio, Sub-Ohmic two-level system representation of the Kondo effect, Phys. Rev. B **85**, 073106 (2012).

[12] M. Schiro and M. Fabrizio, Quantum quenches in the Hubbard model: Time-dependent mean-field theory and the role of quantum fluctuations, Phys. Rev. B **83**, 165105 (2011).

[13] R. Zitko and M. Fabrizio, Z_2 gauge theory description of the Mott transition in infinite dimensions, Phys. Rev. B **91**, 245130 (2015).

[14] W.-W.Yang, H.-G. Luo and Y. Zhong, Benchmarking the simplest slave-particle theory with Hubbard dimer, Chin. Phys. B **28**, 07103 (2019).

[15] R. Nandkishore, M. A. Metlitski, and T. Senthil, Orthogonal metals: The simplest non-Fermi liquids, Phys. Rev. B **86**, 045128 (2012).

[16] M. Hohenadler and F. F. Assaad, Fractionalized Metal in a Falicov-Kimball Model, Phys. Rev. Lett. **121**, 086601 (2018).

[17] C. Chen, X. Y. Xu, Y. Qi and Z.-Y. Meng, Metal to Orthogonal Metal Transition, CHIN.PHYS.LETT. **37**, 047103 (2020).

[18] 陈闯,许霄琰,戚扬,孟子杨, 金属的油腻表叔:一个没有电子费米面的新金属态, 返朴(2020).

[19] R. R. dos Santos, Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for Fermionic Systems, Brazilian Journal of Physics **33**, 36 (2003).

Chapter 17

分数量子霍尔效应:Laughlin联姻Chern-Simons

分数量子霍尔效应与规范理论:携带分数电荷?

在先前的讨论中,我们已经知道二维电子气在低温强磁场下显示出整数量子Hall效应,其物理可用均匀磁场下的单电子图像理解.当我们施加更大的磁场时,(保持电子数不变)被占据的Landau能级数目不断减小,最终仅有最低Landau能级被占据.在更大的磁场下,最低Landau能级只有部分占据,一旦填充数$\nu < 1/2$,费米能会低于渗流阈值,此时费米能附近的态都是局域化的,系统进入绝缘态,σ_{xx}和σ_{xy}都为零.在量子Hall效应研究的早期,由于样品无序比较强,人们总是观测到这个绝缘特性.

随着GaAs量子阱掺杂调控技术的进步,无序效应明显减弱,那么电子之间的相互作用效应便容易体现出来.尽管人们并不清楚相互作用效应的真正效果,人们普遍相信如果 填充因子足够小并且无序足够弱,那么电子会冻结到所谓的Wigner晶体态.[1]因此,当1982年崔琦,Störmer和Gossard在$\nu = 1/3$发现量子化的Hall平台时($\sigma_{xx} = 0, \sigma_{xy} = \frac{1}{3}\frac{e^2}{h}$,如图 17.1),[2]人们受到了很大的冲击.因为这个发现,崔琦,Störmer以及理论家Laughlin共同获得了1998年诺贝尔物理学奖.

当电导平台出现时,崔琦对其合作者开玩笑说'这是夸克!'当然,我们知道由于能量尺度的原因他观测到的效应并不真的涉及粒子物理中的夸克,但是与发现夸克同样让人惊讶的是电子凝聚到一种包含带有分数电荷($q^* = \pm e/3$)准粒子的新物质态,这类新奇物态后来被叫做分数量子Hall态.接下来的研究发现了更多量子化平台,例如$\nu = 2/3, 2/5, 3/5, 4/5, 3/7, 4/7, 5/7$,每一个电导量子化平台都对应于不同的物态,我们没法用标准的Landau相变理论表征和区分这些新物态,着方面的研究导致了拓扑序这个概念的诞生.此外,由于$\Sigma_{xx} = 0$,因此Hall电流是无耗散的,而这意味着体系的基态和激发态之间存在能隙.显然,分数量子Hall态的各种奇怪的物理应该源自电子间的相互作用.

- 需要指出磁场下的二维电子气除了存在不可压缩的分数量子Hall态,还存在一些对称破缺态,例如Wigner晶体,条纹态,泡沫晶体.[3]

在通常的研究中,我们一般先忽略无序的影响而把注意力放到电子之间的关联效应上,这也是分数量子Hall效应研究历史中人们实际采用的方式.客观的说,分数量子Hall态研究中所发展的新奇想法和拓扑性质不仅影响着凝聚态物理也甚至包括高能物理.

下面我们将介绍两部分内容:

---

[1] Wigner晶体可以理解为通常原子形成的固体的电子类似物,也就是电子形成周期性结构.类似于通常的固体,Wigner晶体也会有无能隙的声子激发,它会受到无序势的钉扎,这样这个体系其实是绝缘体.

[2] [Tsui,Störmer,Gossard,Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit, Phys.Rev.Lett. **48**,1559(1982)]

[3] [Papić, Balram, Fractional quantum Hall effect in semiconductor systems, arXiv:2205.03421]

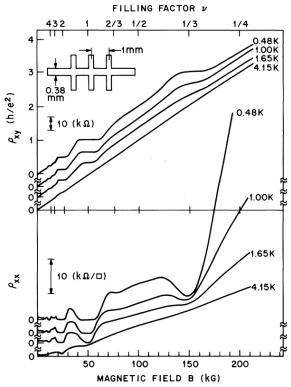


Figure 17.1: GaAs-GaAlAs样品中的分数量子霍尔效应.注意$\rho_{xy} = 3\frac{h}{e^2}$处出现的平台,这对应$\sigma_{xy} = \frac{1}{3}\frac{e^2}{h}$.

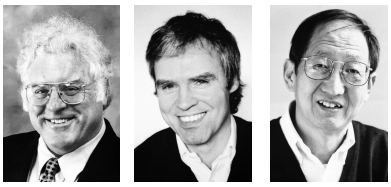


Figure 17.2: Robert B. Laughlin(1950−), Horst L. Störmer(1949−)和Daniel C. Tsui(1939−).他们三人因发现具有分数电荷激发的新量子流体(即分数量子Hall态)而荣获1998年诺贝尔物理学奖.Laughlin是理论工作,后两人是实验工作.

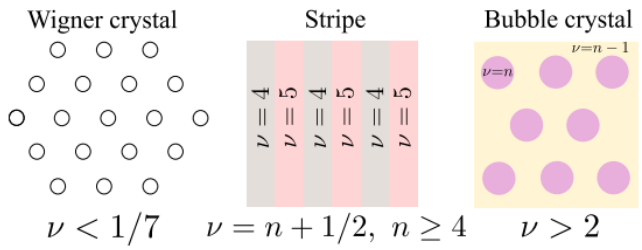


Figure 17.3: 磁场下的二维电子气的对称破缺态,例如Wigner晶体(Wigner crystal),条纹态(Stripe),泡沫晶体(Bubble crystal).

(1)通过微观的多体波函数,例如Laughlin波函数理解分数量子Hall效应和它的准粒子激发,

(2)介绍分数量子Hall效应的一个半唯象理论,即由张首晟等人建立的基于规范场论的Chern-Simons-Landau-Ginzburg理论.

此外,我们还简要讨论了与半满填充态相关的Dirac费米子对偶理论.需要指出,数值精确对角化方法是定量研究分数Hall效应的重要方法,[4]而近些年由Haldane提出的几何解释则从唯象角度进一步阐述了分数Hall态的奇特物理,其表明基于Chern-Simons项的拓扑场论不足以描述长波极限下的磁旋子激发(磁旋子可以解释为基态的四极矩密度波形变,也即是分数量子Hall体系中自旋为2 的引力子)[5]

- 数值精确对角化方法可以采用开源包,例如DiagHam(https://www.nick-ux.org/diagham).

[4][Haldane, Many-Particle Translational Symmetries of Two-Dimensional Electrons at Rational Landau-Level Filling, Phys.Rev.Lett. **55**,2095(1985);Morf, Transition from Quantum Hall to Compressible States in the Second Landau Level: New Light on the $\nu = 5/2$ Enigma, Phys.Rev.Lett. **80**,1505(1998)]

[5][Haldane, Geometrical description of the fractional quantum Hall effect, Phys.Rev.Lett. **107**,116801(2011)]

分数量子霍尔效应的Laughlin波函数:它终于来了

分数量子Hall效应是典型的强关联电子体系,一般认为描述其基本物理的(一次量子化)哈密顿量是

$$H=\sum_j \frac{1}{2m_b}\left[\vec{p}_j+\vec{A}(\vec{r}_j)\right]^2+\sum_j U(\vec{r}_j)+g\mu_B\vec{B}\cdot\vec{S}+\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\sum_j\sum_{j<k}\frac{1}{|\vec{r}_j-\vec{r}_k|} \quad (17.1)$$

$\vec{p}_j=-i\hbar\nabla_j$是第$j$个电子的动量(算符),$\vec{A}(\vec{r}_j)$是位于$\vec{r}_j$处电子感受到的矢量势,$U(\vec{r}_j)$是单电子势能,$g\mu_B\vec{B}\cdot\vec{S}$是磁场和自旋耦合的Zeeman能,而上式最后一项是电子之间的Coulomb能.

为了实际处理上述哈密顿量,我们需要对其进行简化.虽然无序,约束势和晶格效应可以变得重要,但是我们这里忽略它们的效应,这等价于设单电子势$U=0$.既然大多数分数量子Hall效应实验采用的是GaAs-AlGaAs异质结构,那么电子的质量可以取成$m_b=0.067m_e$(m_e是真空中电子质量),介电常数$\epsilon=12.6\epsilon_0$,朗德g因子$g=-0.44$,这样Zeeman劈裂能量$E_Z=g\mu_B B\approx 0.3B[T]K$,磁场$B[T]$是以特斯拉$T$作为单位.

研究多电子体系哈密顿量最直接的方式就是采用精确对角化方法对角化哈密顿量.在这种方法中,我们首先需要对角化合适的单电子部分来得到适合的单电子态并以此来构造对角化的基矢.在分数量子Hall效应中,最明显的选择是磁场下单个电子运动的部分,而这一部分已经在第十章完整讨论过,其给出如下特征能量尺度: 1)磁长度$l_c=\sqrt{\frac{\hbar}{eB}}\approx\frac{25}{\sqrt{B[T]}}nm$;2)回旋共振能量,也就是Landau能级间距$\hbar\omega_c=\hbar\frac{eB}{m_b}\approx 20B[T]K\sim B$;(3)Coulomb能$V_C=\frac{e^2}{4\pi\epsilon l_c}\approx 50\sqrt{B[T]}K\sim\sqrt{B}$.因此,在强磁场极限下$V_C\ll\hbar\omega_c$,也就是说强磁场下,既然Landau能级的间距远大于电子之间Coulomb能,那么我们可以忽略不同Landau能级间的混合而把单粒子Hilbert空间截断到部分占据的单独Landau能级,换句话说我们可以只关注单个Landau能级.此时体系的哈密顿量可以写成,

$$H=P\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\sum_j\sum_{j<k}\frac{1}{|\vec{r}_j-\vec{r}_k|}\right)P \quad (17.2)$$

P是把所有的态投影到单独Landau能级的投影算符.由于绝大多数观测到的量子Hall态满足$\nu<2$,因此我们只需要处理最低Landau能级,这个投影算符记为P_{LLL}.当不考虑相互作用时,未被完全填充的Landau能级会有很大的简并度而计入相互作用后会消除这些简并并在某些电子填充数选择出某些高度关联的不可压缩基态.我们知道同一个Landau能级不同单粒子态的动能是完全相同的,那么相互作用就没办法用微扰进行处理.

为了研究相互作用的效果,我们需要更进一步的理解最低Landau能级的单电子波函数,这是下一节的主要内容.需要说明,这一部分的讨论主要参考了Girvin和杨昆的书《Modern Condensed Matter Physics》第16章.

对称规范与非对易几何

作为讨论分数量子Hall效应多体波函数的准备工作,让我们采用对称规范$\vec{A}=\frac{1}{2}(By\hat{e}_x-Bx\hat{e}_y)=\frac{1}{2}(By,-Bx)$[6]重新讨论Landau量子化问题.此时系统的(单电子)哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{(\hat{p}_x+eA_x)^2+(\hat{p}_y+eA_y)^2}{2m}=\frac{\hat{\Pi}_x^2+\hat{\Pi}_y^2}{2m} \tag{17.3}$$

这里广义(机械)动量$\hat{\Pi}_x,\hat{\Pi}_y$的对易关系是[7]

$$[\hat{\Pi}_x,\hat{\Pi}_y]=\left[\hat{p}_x+\frac{eB}{2}\hat{y},\hat{p}_y-\frac{eB}{2}\hat{x}\right]=-\frac{eB}{2}[\hat{p}_x,\hat{x}]+\frac{eB}{2}[\hat{y},\hat{p}_y]=i\hbar eB=i\frac{\hbar^2}{l_c^2}. \tag{17.4}$$

这里$l_c=\sqrt{\hbar/(eB)}$是磁长度表示电子回旋共振轨道(经典意义下就是圆周轨道)的典型半径.注意到不存在磁场时的广义动量简化为正则动量$\hat{p}_x,\hat{p}_y$,其显然是互相对易的.因此磁场的存在对系统性质有极端的改变.当然,$[\hat{\Pi}_x,\hat{\Pi}_x]=[\hat{\Pi}_y,\hat{\Pi}_y]=0$.现在,让我们定义电子运动的滑移(guiding centre)中心坐标为$(\hat{X},\hat{Y})$,其可看作是电子在磁场作用下经典圆周运动的圆周中心,

$$\hat{X}=\hat{x}+\frac{\hat{\Pi}_y}{eB}=\frac{\hat{x}}{2}+\frac{\hat{p}_y}{eB},\quad \hat{Y}=\hat{y}-\frac{\hat{\Pi}_x}{eB}=\frac{\hat{y}}{2}-\frac{\hat{p}_x}{eB} \tag{17.5}$$

显然,$\hat{X},\hat{Y}$是不对易的,

$$[\hat{X},\hat{Y}]=\left[\frac{\hat{x}}{2}+\frac{\hat{p}_y}{eB},\frac{\hat{y}}{2}-\frac{\hat{p}_x}{eB}\right]=-\frac{1}{2eB}[\hat{x},\hat{p}_x]+\frac{1}{2eB}[\hat{p}_y,\hat{y}]=-i\frac{\hbar}{eB}=-il_c^2. \tag{17.6}$$

而$[\hat{X},\hat{X}]=[\hat{Y},\hat{Y}]=0$.这样,我们发现滑移中心坐标的$\hat{X}$与$\hat{Y}$坐标彼此不对易,这种空间坐标的非对易性实际上就是数学上的非对易几何,它表明任意量子态下滑移中心坐标的标准差($\Delta X\equiv\sqrt{\langle X\rangle^2-\langle X\rangle}$)满足不确定关系$\Delta X\Delta Y\geq l_c^2/2$.[8]

注意到$\hat{\Pi}_x,\hat{\Pi}_y,\hat{X},\hat{Y}$的对易关系$[\hat{X},\hat{\Pi}_x]=[\hat{X},\hat{\Pi}_y]=[\hat{Y},\hat{\Pi}_x]=[\hat{Y},\hat{\Pi}_y]=0$,我们可以定义玻色子算符$\hat{a},\hat{b}$:

$$\hat{a}=\frac{l_c}{\sqrt{2}\hbar}(\hat{\Pi}_x+i\hat{\Pi}_y),\quad \hat{b}=\frac{1}{\sqrt{2}l_c}(\hat{X}-i\hat{Y}) \tag{17.7}$$

那么有$[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1,[\hat{b},\hat{b}^\dagger]=1$,而不同的玻色子之间对易.同时系统哈密顿量可写成简单的形式,

$$\hat{H}=\frac{\hbar\omega_c}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger)=\hbar\omega_c\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right) \tag{17.8}$$

[6]这对应$\nabla\times\vec{A}=-B\hat{e}_z$,也就是磁场方向是$z$轴负方向.与Landau规范不同,对称规范保证相对原点的旋转对称性,因此角动量是守恒量.

[7]引入广义动量的优点是它是一个规范不变量

[8]量子霍尔效应中的应用可以参考Ezawa书29和30章.人们希望利用非对易几何把时空进行量子化而得到量子引力,但这样的尝试目前并未成功.

这与一维谐振子的哈密顿量完全相同,因此系统的本征态可记为$|n\rangle$,对应第nLandau能级,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \tag{17.9}$$

本征能量为$(n+1/2)\hbar\omega_c$.这样对于最低Landau能级($n=0$),其是体系的基态,那么必有$\hat{a}|0\rangle = 0$.

另一方面,$\hat{b}^\dagger$与哈密顿量对易,因此$|n\rangle$也是$\hat{b}^\dagger\hat{b}$的本征态,这样我们把系统本征态写成

$$|n,m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}}(\hat{a}^\dagger)^n(\hat{b}^\dagger)^m|0\rangle \tag{17.10}$$

那么m是什么的指标呢?为回答这个问题,我们可以把z方向的角动量算符$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$用产生湮灭算符表示.利用

$$\hat{x} = \hat{X} - \frac{\hat{\Pi}_y}{eB}, \quad \hat{y} = \hat{Y} + \frac{\hat{\Pi}_x}{eB}, \quad \hat{p}_x = \frac{\hat{\Pi}_x - eB\hat{Y}}{2}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hat{\Pi}_y + eB\hat{X}}{2} \tag{17.11}$$

我们发现

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= \left(\hat{X} - \frac{\hat{\Pi}_y}{eB}\right)\frac{\hat{\Pi}_y + eB\hat{X}}{2} - \left(\hat{Y} + \frac{\hat{\Pi}_x}{eB}\right)\frac{\hat{\Pi}_x - eB\hat{Y}}{2} \\
&= eB\frac{\hat{X}^2}{2} - \frac{\hat{\Pi}_y^2}{2eB} + \frac{\hat{X}\hat{\Pi}_y - \hat{\Pi}_y\hat{X}}{2} + eB\frac{\hat{Y}^2}{2} - \frac{\hat{\Pi}_x^2}{2eB} - \frac{\hat{Y}\hat{\Pi}_x - \hat{\Pi}_x\hat{Y}}{2} \\
&= eB\frac{\hat{X}^2 + \hat{Y}^2}{2} - \frac{\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_y^2}{2eB} = \frac{\hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger}{4}2l_c^2eB - \frac{\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger}{4eB}\frac{2\hbar^2}{l_c^2} \\
&= \hbar(\hat{b}^\dagger\hat{b} - \hat{a}^\dagger\hat{a})
\end{aligned} \tag{17.12}$$

因此有

$$\hat{L}_z\hat{b}^\dagger|0\rangle = \hbar(\hat{b}^\dagger\hat{b} - \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{b}^\dagger|0\rangle = \hbar\hat{b}^\dagger(1 + \hat{b}^\dagger\hat{b})|0\rangle = \hbar\hat{b}^\dagger|0\rangle \tag{17.13}$$

这说明$\hat{b}^\dagger|0\rangle = |0,1\rangle$是角动量为$\hbar$的状态,$\hat{b}^\dagger$产生一个角动量为$\hbar$激发的算符.因此,对于一般的本征态$|n,m\rangle$,$m$表示($z$方向)角动量量子数.同时,我们注意到由于只能产生正数个玻色子$\hat{b}$,那么这要求$m > 0$,这说明体系的角动量都是大于等于零而不存在负的角动量态.

复数坐标和波函数

既然体系是一个二维系统,那么引入复数坐标是自然的选择,[9]

$$z = \frac{x + iy}{l_c}, \quad \bar{z} = \frac{x - iy}{l_c}. \tag{17.14}$$

[9]也许你会在其他二维强关联体系,例如高温超导,重费米子和自旋液体等用复数坐标改写体系哈密顿量或者波函数,但是遗憾的是到目前为之并没有成功的应用.

以及

$$x=\frac{z+\bar{z}}{2}l_c,\quad y=\frac{z-\bar{z}}{2i}l_c$$
$$\partial_x=\frac{\partial_z+\partial_{\bar{z}}}{l_c},\quad \partial_y=i\frac{\partial_z-\partial_{\bar{z}}}{l_c}. \tag{17.15}$$

这样我们可以把算符$\hat{a}$改写为

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{l_c}{\sqrt{2}\hbar}(\hat{\Pi}_x+i\hat{\Pi}_y)=\frac{l_c}{\sqrt{2}\hbar}\left(\hat{p}_x+\frac{eB}{2}\hat{y}+i\left(\hat{p}_y-\frac{eB}{2}\hat{x}\right)\right)\\ &= \frac{l_c}{\sqrt{2}\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial_z+\partial_{\bar{z}}}{l_c}+\frac{eB}{2}\frac{z-\bar{z}}{2i}l_c+i\left(-i\hbar i\frac{\partial_z-\partial_{\bar{z}}}{l_c}-\frac{eB}{2}\frac{z+\bar{z}}{2}l_c\right)\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-i(\partial_z+\partial_{\bar{z}})+\frac{1}{2}\frac{z-\bar{z}}{2i}+i\left((\partial_z-\partial_{\bar{z}})-\frac{1}{2}\frac{z+\bar{z}}{2}\right)\right)\\ &= \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(\frac{z}{2}+2\partial_{\bar{z}}\right)\end{aligned} \tag{17.16}$$

同理可得

$$\hat{a}^\dagger=\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{\bar{z}}{2}-2\partial_z\right)$$
$$\hat{b}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\bar{z}}{2}+2\partial_z\right),\quad \hat{b}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{z}{2}-2\partial_{\bar{z}}\right). \tag{17.17}$$

而

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}=\frac{1}{2}\left(\frac{\bar{z}}{2}-2\partial_z\right)\left(\frac{z}{2}+2\partial_{\bar{z}}\right)$$
$$\hat{b}^\dagger\hat{b}=\frac{1}{2}\left(\frac{z}{2}-2\partial_{\bar{z}}\right)\left(\frac{\bar{z}}{2}+2\partial_z\right) \tag{17.18}$$

由于$\hat{a}$湮灭最低Landau能级的态$|0\rangle$,那么我们可以把$|0\rangle$态在复数坐标下的波函数写成如下形式,[10]

$$\Psi(x,y)\equiv\langle x,y|0\rangle=f(z)e^{-\frac{\bar{z}z}{4}}. \tag{17.19}$$

进一步,我们可以要求$f(z)$是z的解析函数,这意味着$f(z)$可以展开为z的幂级数,即$f(z)=\sum_{m=0}^{\infty}a_m z^m$.当然,根据代数学基本定理,我们也可以把幂级数形式改写为如下明确显示零点结构的形式,

$$f(z)=\prod_j(z-z_j) \tag{17.20}$$

这里z_j是$f(z)=0$的零点.这种多项式形式通常又叫做Jastrow因子,一般而言是处理关联电子体系的常用技巧之一.现在,我们任取幂级数中的任意一项z^m,然后把角动量算符$\hat{L}_z$ 作用在上面可得

$$\hat{L}_z z^m=(\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x)z^m=\hbar(z\partial_z-\bar{z}\partial_{\bar{z}})z^m=(m\hbar)z^m. \tag{17.21}$$

[10]把$\hat{a}$作用于$\Psi(x,y)$可得$\hat{a}\Psi(x,y)=\frac{-i}{\sqrt{2}}\left(\frac{z}{2}f(z)e^{-\frac{\bar{z}z}{4}}+2f(z)\partial_{\bar{z}}e^{-\frac{\bar{z}z}{4}}\right)=0.$

因此我们发现z^m是角动量为$m\hbar$的态.由于$\hat{L}_z e^{-\frac{\bar{z}z}{4}} = 0$,因此$z^m e^{-\frac{\bar{z}z}{4}}$也是角动量为$m\hbar$的态.在实际上使用中,我们会定义如下归一化的角动量态φ_m:

$$\varphi_m(z,\bar{z}) = c_m z^m e^{-\frac{\bar{z}z}{4}}, \quad c_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi l_c^2 2^m m!}}. \tag{17.22}$$

这里的归一化可以证明如下:[11]

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_m|\varphi_m\rangle &= c_m^2 \int dxdy(\bar{z}z)^m e^{-\frac{\bar{z}z}{2}} = c_m^2 \int dxdy \left(\frac{x^2+y^2}{l_c^2}\right)^m e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2l_c^2}} \\
&= c_m^2 l_c^{-2m} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} dr r^{2m+1} e^{-r^2/(2l_c^2)} \\
&= c_m^2 l_c^{-2m} (2\pi)(\sqrt{2}l_c)^{2m+2} \frac{\Gamma(m+1)}{2} \\
&= \frac{1}{2\pi l_c^2 2^m m!} l_c^{-2m} (2\pi)(\sqrt{2}l_c)^{2m+2} \frac{m!}{2} = 1.
\end{aligned} \tag{17.23}$$

单体势

当我们考虑单体势能$U(\vec{r})$时,如果$U(\vec{r}) = U(|\vec{r}|)$,那么电子的角动量仍然是守恒的,因此不同角动量态$m, m'$之间的矩阵元仅当$m = m'$ 时非零,即

$$U_m = \langle\varphi_m|U(|\vec{r}|)|\varphi_{m'}\rangle = \langle\varphi_m|U(|\vec{r}|)|\varphi_m\rangle\delta_{m,m'}. \tag{17.24}$$

这说明计入U后φ_m仍然是本征态,其能量是$\frac{1}{2}\hbar\omega_c + U_m$.

两体问题和两体势

接下来,考虑磁场下的两电子问题,根据两体问题的一般处理思路,我们可以把体系划分为质心运动和相对运动两个部分,这样体系的哈密顿量是

$$H = \frac{\hat{\vec{\Pi}}_1^2 + \hat{\vec{\Pi}}_2^2}{2m} = \frac{\hat{\vec{\Pi}}_{cm}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{\Pi}}_r^2}{2\mu} \tag{17.25}$$

这里$M = 2m$是质心的质量,$\mu = m/2$是相对质量,$\hat{\vec{\Pi}}_{cm} = \hat{\vec{\Pi}}_1 + \hat{\vec{\Pi}}_2, \hat{\vec{\Pi}}_r = (\hat{\vec{\Pi}}_1 - \hat{\vec{\Pi}}_2)/2$ 分别是质心和相对运动的广义动量.注意到质心和相对运动广义动量彼此对易$[\hat{\Pi}_{cm}^{x,y}, \hat{\Pi}_r^{x,y}]$而其自身的对易关系是

$$[\hat{\Pi}_{cm}^x, \hat{\Pi}_{cm}^y] = 2i\frac{\hbar^2}{l_c^2}, \quad [\hat{\Pi}_r^x, \hat{\Pi}_r^y] = i\frac{\hbar^2}{2l_c^2} \tag{17.26}$$

这说明质心和相对运动其实都是频率为ω_c,磁长度为l_c的简谐运动,那么其波函数就是两者的乘积.例如两个处于最低Landau能级(lowest-Landau-level,简记为LLL)电子的波函数可以写成($\varphi_m\varphi_M$)

$$\Psi_{m,M}(z_1,\bar{z}_1,z_2,\bar{z}_2) = (z_1-z_2)^m (z_1+z_2)^M e^{-\frac{\bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2}{4}}. \tag{17.27}$$

[11]利用Γ函数的定义$\Gamma(x) = \int_0^\infty dt e^{-t} t^{x-1}$

其物理意义是两个电子间的相对角动量是$m\hbar$,质心运动的角动量是$M\hbar$.此时,如果考虑只依赖于电子相对位置的两体相互作用$V(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)$,那么上述波函数$\Psi_{m,M}$仍然是$H+V$的本征态,其能量为$\hbar\omega_c+V_m$:

$$v_m=\frac{\langle\Psi_{m,M}|V(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)|\Psi_{m,M}\rangle}{\langle\Psi_{m,M}|\Psi_{m,M}\rangle}. \tag{17.28}$$

v_m在文献中叫做Haldane赝势(pesudo-potential).[12]注意到由于相互作用只与相对运动有关,而与质心运动无关,因此v_m只与相对角动量指标m相关而与质心角动量M无关.对于最熟悉的Coulomb势$V(\vec{r})=\frac{e^2}{\epsilon|\vec{r}|}$,赝势$v_m=\frac{e^2}{2\epsilon l_c}\frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m+1)}$.

- 取$B=10T,\epsilon=10$,那么磁长度$l_c=\sqrt{\hbar/(eB)}=8.1nm,\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 l_c}\simeq 206K$,而回旋共振能量$\hbar\omega_c\simeq 13.4K$,因此$V_{m=3}\simeq 57K$;
- 直接计算Coulomb势的赝势可以发现由于磁场的存在,体系有一些列分立的束缚态,这些束缚态说明暗示多粒子体系的基态与激发态之间可能有能隙.

$\nu=1$量子Hall态的波函数

现在,让我们构造$\nu=1$量子Hall态的多体波函数.我们知道当电子之间不存在相互作用时,每一个电子都会填充单粒子态$\{\varphi_m\}$,此时的基态按照能量最低原则和Pauli不相容原理确定.例如,当体系有两个电子时,一个电子角动量为0而另一个是$\hbar$,那么相应的波函数是$\varphi_0(z_1)\varphi_1(z_2)$(从现在起我们略去$\bar{z}_1$的依赖).当然,这样的波函数并不满足费米子波函数的反对称要求,因此我们需要把它反对称化,也就是

$$\Psi(z_1,z_2)=\varphi_0(z_1)\varphi_1(z_2)-\varphi_0(z_2)\varphi_1(z_1)=(z_2-z_1)e^{-\frac{|z_1|^2+|z_2|^2}{4}}. \tag{17.29}$$

事实上,指数因子是平凡的,主要物理来自于$f_2(z)=z_2-z_1$的解析多项式部分,其可以改写为Slater行列式形式,[13]即

$$f_2(z)=z_2-z_1=\mathrm{Det}\begin{pmatrix}1 & 1\\ z_1 & z_2\end{pmatrix}. \tag{17.30}$$

类似的,当有三个电子时,多项式部分$f_3(z)$为(三个电子分别处于角动量为$0,\hbar,2\hbar$的状态)

$$f_2(z)=\mathrm{Det}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ z_1 & z_2 & z_3\\ z_1^2 & z_2^2 & z_3^2\end{pmatrix}=(z_3-z_1)(z_3-z_2)(z_2-z_1)=\prod_{i>j}(z_i-z_j). \tag{17.31}$$

[12]Haldane, Fractional Quantization of the Hall Effect: A Hierarchy of Incompressible Quantum Fluid States, Phys.Rev.Lett. **51**,605(1983)

[13]也叫做Vandermonde多项式

一般而言,对于N个电子的基态,其电子最高占据的单粒子态的角动量时$(N-1)\hbar$,这样相应的多项式$f_N(z)$中的最高次幂是z_i^{N-1},其具体形式为

$$f_N(z)=\prod_{i>j,j=1}^{N-1}(z_i-z_j) \tag{17.32}$$

这样$f_N(z)$的总角动量为$L_z^{tot}=(0+1+2+...+N-1)\hbar=\frac{N-1}{2}N\hbar$.假设体系总计有$N$个角动量态,而这些单粒子态都被电子占据,因此得到的就是$\nu=1$的量子Hall态:

$$\Psi_{\nu=1}=\prod_{i>j}(z_i-z_j)e^{-\frac{\sum_{j=1}^N|z_j|^2}{4}}. \tag{17.33}$$

显然,让我们考虑$\Psi_{\nu=1}$的模方,即

$$|\Psi_{\nu=1}|^2=\prod_{i>j}|z_i-z_j|^2e^{-\frac{\sum_{j=1}^N|z_j|^2}{2}}\equiv e^{-\beta U_{eff}}=e^{-\frac{2}{m}(-\frac{m}{2}\ln|\Psi_{\nu=1}|^2)}. \tag{17.34}$$

这里我们把多体波函数的模方写成了具有启发性的Boltzman因子$e^{-\beta U_{eff}}$形式,这里有效逆温度$\beta=2/m,(m=1)$而有效势能是

$$\begin{aligned}U_{eff} &= -\frac{m}{2}\ln|\Psi_{\nu=1}|^2=-m\sum_{i>j}\ln|z_i-z_j|+\frac{m}{4}\sum_{j=1}^N|z_j|^2\\ &= -m^2\sum_{i>j}\ln|z_i-z_j|+\frac{m}{4}\sum_{j=1}^N|z_j|^2\end{aligned} \tag{17.35}$$

事实上,由于U_{eff}等价于虚拟的带电为m的粒子在均匀电中性背景下的单分量等离子体的势能,我们可以利用经典等离子物理所获得的直觉研究波函数模方的性质.

- 这种把波函数模方解释为等离子体有效势能的想法通常叫做等离子体类似,由Laughlin首先提出,其被广泛用于分数量子Hall效应的理论研究.[14]

为了了解上式的物理意义,让我们回忆三维和二维静电学的内容.在三维空间,对于电荷为Q的粒子,有高斯定理可知其电场$\vec{E}$在球形边界面穿过的通量等于$4\pi Q$, 即

$$\int d\vec{S}\cdot\vec{E}=4\pi Q \tag{17.36}$$

这里半径为R的球面的表面积是$S=4\pi R^2$,这样相应的电场$\vec{E}(\vec{r})=\frac{Q}{|\vec{r}|^2}\hat{r}$($\hat{r}$为单位矢量).那么对应的电势是$\phi(\vec{r})=\frac{Q}{|\vec{r}|}$.此外,$\nabla\cdot\vec{E}=-\nabla^2\phi=4\pi\delta^3(\vec{r})$.

接下来,考虑二维空间.对于包围电荷Q的半径为R圆形回路l(周长为$2\pi R$),高斯定理给出$\int d\vec{l}\cdot\vec{E}=2\pi Q$,此时$Q$产生的电场是$\vec{E}=\frac{Q}{|\vec{r}|}\hat{r}$.相应的二维Coulomb势便是$\phi(r)=-\int_{r_0}^r d\vec{r}\cdot\vec{E}=-Q\ln\frac{r}{r_0}$.这样有

$$\nabla\cdot\vec{E}=-\nabla^2\phi=-Q\nabla^2\ln\frac{r}{r_0}=2\pi Q\delta(\vec{r}). \tag{17.37}$$

[14]不得不说,等离子体类比的想法确实不走寻常路,毕竟依照很多人的想法必然是硬算波函数模方和物理量的期望值然后根据数值结果瞎猜测物理本质.

现在,我们可以解释U_{eff}各项的意义.$-m^2\sum_{i>j}\ln|z_i-z_j|$可以看成有效电荷为$m$且分别位于$z_i,z_j$电荷之间的二维Coulomb势.另一方面

$$-\frac{1}{4}\nabla^2|z|^2=\frac{-1}{4}\frac{\partial_x^2x^2+\partial_y^2y^2}{4l_c^2}=\frac{-1}{l_c^2}\equiv 2\pi\rho_p \tag{17.38}$$

这说明上式可以看成带单位负(有效)电荷且密度为$\rho_p=-1/(2\pi l_c^2)$的均匀电荷背景的静电势,这样U_{eff}第二项便是均匀电荷对位于z_j处带电为m粒子的静电势.因此,整个体系可以看作是一个通过二维Coulomb势相互作用着的等离子体,其中负电荷均匀分布而正电位置是$\{z_i\}$.

当等离子体电中性时,体系会进入稳定状态,此时电中性条件要求正负电相抵消,即有

$$mn_e+(-1)\rho_p=0\Rightarrow n_e=\frac{\rho_p}{m}=-\frac{1}{m2\pi l_c^2}=\frac{1}{m}\frac{N_\Phi}{A}, \tag{17.39}$$

这里n_e是电子的密度也是等离子体中有效正电荷的密度,A是二维平面的面积,N_Φ是二维平面通过的总磁场量子数.由于这里$m=1$,这说明$n_eA=N_\Phi$,也就是说电子数与磁场量子数一致,其对应填充因子$\nu=1$.

需要强调,虚拟等离子体的能量与电子体系的能量没有关系.等离子体类似只是关于选择这类波函数的一种说明.

与自由费米气体类似,$\nu=1$态的激发应该是占据某些单粒子轨道或者已占据轨道中出现空位,前者是粒子激发而后者是空穴激发.与自由电子气体不同,既然最低Landau能级所有的单粒子态都已被占据,那么费米能必然处于Landan能级的能隙之内,因此与能带绝缘体类似,电子或空穴激发都需要有限能量.这个激发能隙导致了体系的不可压缩性和量子Hall效应.显然,电子激发肯定实在下一个Landan能级中产生而空穴激发则在最低Landau能级内.下面我们将讨论空穴激发,因为我们可以只用最低Landau能级的态来描述.

为了产生一个空穴,我们需要在最低Landau能级中移除一个电子.在所有单粒子轨道中,$|\varphi_{m=0}\rangle$态是最局域化的态,这样我们可以移除$|\varphi_{m=0}\rangle$态的电子而保持其他态仍然占据,这样的单空穴态可以表示为

$$\Psi_{hole}(z)=\left(\prod_i z_i\right)\Psi_1(z). \tag{17.40}$$

显然,这个态描述了局域在原点处并携带$+e$电荷的单个空穴.这里的局域性理解为当电子接近原点时波函数自动趋于零,这说明原点处电子密度为零,即有空位或者说空穴产生.接下来,如果我们在任意位置h_0产生一个空穴,那么其波函数自然是

$$\Psi_{hole}(h_0;z)=\left(\prod_i z_i-h_0\right)\Psi_1(z). \tag{17.41}$$

显然,电子密度在h_0处为零,但这个态已经无法明确指出我们在哪一个单粒子态$|\varphi_m\rangle$移除了电子,因此其电荷并不容易确定.为了绕过这个困难,我们可以采

用先前用过的等离子体类比也就把波函数的模方改写为Boltzman因子的形式$|\Psi_{hole}(h_0;z)|^2 = e^{-\beta U'_{eff}}$:

$$U'_{eff} = -\sum_{i<j} \ln|z_i - z_j| + \frac{1}{4}\sum_i |z_i|^2 - \sum_i \ln|z_i - h_0|. \tag{17.42}$$

对于比之前的U_{eff},我们发现($\prod_i z_i - h_0$)因子给出了上式右边的最后一项,其物理意义可以理解为带单位电荷的粒子与h_0处具有单位电荷的粒子的相互作用.结合等离子类比和物理上空穴的预期,我们知道空穴位于h_0处且携带单位正电荷.

最后,当有多个空穴时,其波函数可以写成,

$$\Psi_{hole}(h_1, h_2 ... h_M; z) = \left(\prod_{j=1}^{M}\prod_i (z_i - h_j)\right)\Psi_1(z). \tag{17.43}$$

Laughlin波函数

现在让我们正式考虑分数量子Hall效应的波函数.历史上,Langhlin在1983年首先指出如下的波函数是基态的良好近似:[15]

$$\boxed{\Psi_m(z) = \prod_{1\le j<k\le N}(z_j - z_k)^m e^{\sum_{j=1}^N -\frac{|z_j|^2}{4}}} \tag{17.44}$$

这个波函数描述了N个极化了的电子,每个电子的坐标用复数$z = x + iy$表示.波函数中的指数因子表示每个电子都处于最低Landau能级.这个波函数描述了每个电子之间都有$m\hbar$的相对角动量并且倾向于彼此远离($z_j \to z_k$导致波函数趋于零).对于有N个电子的波函数$\Psi_m(z)$,其总角动量为$\frac{N(N-1)}{2}M\hbar$.为了得到这个结果,我们可以给$\Psi_m(z)$作用上转动算符$e^{i\frac{1}{\hbar}\hat{L}_z\theta}$,这个转动把每个复数坐标转动$\theta$角度,即$z_i \to z_e e^{i\theta}$,对整个波函数而言就是乘上因子$e^{i\frac{N(N-1)}{2}M\theta}$,($N(N-1)/2$是不同电子对的数目)这样我们发现角动量的就是$\frac{N(N-1)}{2}M\hbar$.

然后,如果交换两个电子,那么得到

$$\Psi_m(z_1, ..., z_i, ..., z_j, ..., z_N) = (-1)^m \Psi_m(z_1, ..., z_j, ..., z_i, ..., z_N)$$

进一步考虑到这是一个费米子系统的波函数,这就要求m必须是奇数,即$m = 3, 5, 7, 9, 11....$($m = 1$对应先前研究过的$\nu = 1$的量子Hall态)

如果我们考虑两个电子,那么$m = 3$的态就是$\Psi_3(z_1, z_2) = (z_1 - z_2)^3 e^{-\frac{|z_1|^2+|z_2|^2}{4}}$,其可以写成

$$\Psi_3(z_1, z_2) = (z_1^3 + z_1^2 z_2 - z_1 z_2^2 - z_2^3)e^{-\frac{|z_1|^2+|z_2|^2}{4}} = f_3(z_1, z_2)e^{-\frac{|z_1|^2+|z_2|^2}{4}} \tag{17.45}$$

这样把总角动量算符$\hat{L}_z = \sum_{i=1,2}(z_i\partial_{z_i} - \bar{z}_i\partial_{\bar{z}_i})$作用于$f_3(z_1, z_2)$可得

$$\hat{L}_z f_3(z_1, z_2) = 3(z_1^3 + z_1^2 z_2 - z_1 z_2^2 - z_2^3)\hbar = 3\hbar f_3(z_1, z_2), \tag{17.46}$$

[15][Laughlin, Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations, Phys.Rev.Lett. **50**,1395(1983)]

这说明$\Psi_3(z_1,z_2)$态的总角动量为$3\hbar$.此外,$f_3(z_1,z_2)$可以写成两个Slater行列式的叠加,即

$$f_3(z_1,z_2)=-\mathrm{Det}\begin{pmatrix}1 & 1\\ z_1^3 & z_2^3\end{pmatrix}+3\mathrm{Det}\begin{pmatrix}z_1 & z_2\\ z_1^2 & z_2^2\end{pmatrix}, \tag{17.47}$$

这两个Slater行列式分别表示电子处于$\varphi_{m=3},\varphi_{m'=3}$态和$\varphi_{m=1},\varphi_{m'=2}$态.

为了获取Laughlin态的信息,让我们采用等离子体类比,即令

$$|\Psi_m(z)|^2=e^{-\beta U_{eff}}$$

$\beta=2/m$是等效的逆温度,U_{eff}是(单分量)等离子体的经典势能.这里经典势能是

$$U_{eff}=-m^2\sum_{j<k}\ln|z_j-z_k|+\frac{m}{4}\sum_{j=1}^{N}|z_j|^2$$

对比先前关于$\nu=1$态等离子体类比的讨论,我们发现这种等离子体中的粒子(电子)的(有效)电荷是m而均匀分布的单位负电荷密度为$\rho_p=-1/(2\pi l_c^2)$.当等离子体处于电中性时自然有$n_e=\frac{1}{m}\frac{N_\Phi}{A}$,这样电子的填充数就是$\nu=\frac{n_eA}{N_\Phi}=\frac{1}{m}$.

- 等离子体类比说明Laughlin的Ψ_m态实际上描述奇数分母态,即$\nu=1/3,1/5,1/7....$

尽管Laughlin波函数并不是FQHE在真实Coulomb势情况下的精确基态,它却是基态的良好近似[16]并且是Haldane构造的Haldane赝势模型哈密顿量的精确基态.

Laughlin态的准粒子与准空穴激发

在获得奇分母态后,我们也想知道这个态的低能激发,特别是其是否存在简单的准粒子或准空穴型激发.类似于$\nu=1$态,我们构造如下单个准空穴的波函数:

$$\Psi_m^{(+)}(h_0;z)=\prod_{j=1}^{N}(z_j-h_0)\Psi_m(z), \tag{17.48}$$

这里空穴位于h_0处并排斥附近的电子.

与$\nu=1$态不同,Laughlin态的准粒子激发并不需要涉及更高的Landau能级,对于一个准粒子,其波函数是

$$\Psi_m^{(-)}(p_0;z)=\prod_{j=1}^{N}\left(2\frac{\partial}{\partial z_j}-\bar{p}_0\right)\Psi_m(z),$$

这里的导数作用在$(z_j-z_k)^m$项上.

[16]Laughlin波函数与哈密顿量$H=P\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\sum_j\sum_{j<k}\frac{1}{|\vec{r}_j-\vec{r}_k|}\right)P$的对角化计算所得的精确基态重叠度大于0.98(15个电子,$\nu=1/3$).

进一步,让我们采用等离子体类比$|\Psi_m^{(+)}|^2 = e^{-\beta U_{eff}} e^{-\beta V}$,这里$U_{eff}$是$\Psi_m$态的等离子体类比势能,准空穴导致的势能是$V$,

$$V = -m\sum_{j=1}^{N} \ln|z_j - h_0|$$

这里势能V表明带电为m的粒子与位于h_0处带有单位电荷的'杂质'相互作用.物理上,这里可以理解为h_0处空穴的出现导致电子远离h_0处,等效来说,相当于在h_0产生了正电荷.可以看到这个电荷携带单位有效电荷并且与携带m电荷的电子通过二维Coulomb势相互作用,既然电子的实际电荷是$-e$,那么准空穴的电荷就是$q^* = \frac{e}{m}$,也就是说准空穴的具有分数电荷!

- 因此准空穴携带分数电荷e/m.

一个明显的问题是准空穴的电荷是否依赖于波函数的具体细节,其结果是不依赖. 分数电荷事实上是分数量子Hall态的一个稳定的拓扑性质,其在哈密顿量或者波函数的连续形变下不会改变(能隙总是存在时).物理上来说,e^*与Hall电导σ_{xy}的量子化密切相关,下面我们简要讨论这个问题.

让我们在空间位置h_0插入一个单位磁通量子$\Phi_0 = h/e$,根据法拉第电磁感应定律可知磁通插入这个过程中会诱导涡旋电场:

$$\oint d\vec{l}\cdot\vec{E} = -\partial_t\Phi(t) \tag{17.49}$$

这样以h_0为中心,半径为r处的涡旋电场是$\vec{E} = -\frac{1}{2\pi r}\partial_t\Phi(t)\vec{e}_\varphi$. 如果体系存在非零的Hall电导,那么电场会诱导出垂直于电场并从h_0流出的电流$\vec{j} = \sigma_{xy}\vec{e}_z \times \vec{E} = \frac{\sigma_{xy}}{2\pi r}\partial_t\Phi(t)\vec{e}_r$,这样这个磁通插入过程所导致的电荷变化是

$$Q = \int dt 2\pi r\vec{j}\cdot\vec{e}_r = \sigma_{xy}\int dt\partial_t\Phi(t) = \sigma_{xy}\Phi_0 = \frac{1}{m}\frac{e^2}{h}\frac{h}{e} = \frac{e}{m} \tag{17.50}$$

这个电荷与准空穴的电荷相同,因此分数电荷与波函数细节无关而与Hall电导σ_{xy}的量子化直接相关.我们也可以把上述过程解释为当插入一个磁通时,电子被排斥开因而在插入磁通处等效产生了正电荷,这个正电荷的电荷数等于离开此时电子电荷数.此外,我们看到在体系中插入一个单位磁通就可以诱导处准空穴,这暗示准空穴是携带单位磁通和分数电荷的复合体.

对于两个空穴的情况,波函数是

$$\Psi_m^{(+)}(h_0, w_0; z) = (h_0 - w_0)^{\frac{1}{m}}\prod_{j=1}^{N}(z_j - h_0)(z_j - w_0)e^{-\frac{|h_0|^2+|w_0|^2}{4m}}\Psi_m(z), \tag{17.51}$$

准空穴的位置是h_0和w_0.然后交换这两个准空穴我们得到一个相因子

$$\Psi_m^{(+)}(w_0, w_0; z_1, ..., z_N) = (-1)^{1/m}\Psi_m^{(+)}(h_0, w_0; z_1, ..., z_N) \tag{17.52}$$

注意到$(-1)^{1/m} = e^{i\pi/m}$.既然m是奇数,那么这表明Laughlin态中的准粒子由于交换而导致的统计角为$\theta = \pi/m$.为了区别通常的玻色子和费米子,我们把满足这类分数统计角的粒子叫做任意子.当然,我们知道两个粒子互相交换位置等价于一个粒子固定然后另一个粒子绕着它转一圈,如果我们在要求粒子交换前后体系状态是不变的,那么交换过程中应该总是满足绝热定理,这自然也要求体系具有能隙以保证绝热定理的成立.既然是量子体系的绝热过程,那么我们就可以计算这个过程中的Berry相位.[17]由于准空穴携带单位磁通,那么另一个准空穴绕着它转一周获得的相位等价于AB效应中的相位,即$\vartheta = \frac{e^*}{\hbar}\Phi_0 = \frac{e}{m\hbar}\frac{2\pi\hbar}{e} = \frac{2\pi}{m}$. 这样粒子交换获得大相位就是$\theta = \frac{\vartheta}{2} = \frac{\pi}{m}$与波函数直接计算吻合.

- FQHE中的准粒子/空穴是具有分数统计角π/m和分数电荷e/m的任意子.

集体激发:GMP理论

除了上面主要讨论的准粒子激发,对于分数量子霍尔体系而言,其还存在所谓的集体激发.这方面的早期研究是类比于Feynman 超流理论所发展出的Girvin-MacDonald-Platzman(GMP)理论.[18]

Feynman理论

既然GMP理论是Feynman理论的类比,那么我们先回顾Feynman理论的基本结构.Feynman理论处理的是电中性的He-4 原子体系处于超流态时的集体激发.因为He-4是玻色子体系,那么其基态波函数满足交换对称性且没有节点,由此,Feynman认为体系不存在低能的单粒子激发而只有长波密度激发.假设我们知道体系的基态是ψ,那么密度激发对应的波函数是

$$\phi_k(r_1...r_N) = N^{-1/2}\rho_k\psi(r_1...r_N) \tag{17.53}$$

这里N是粒子总数,ρ_k是密度$\rho(R) = \sum_{j=1}^{N}\delta(R - r_j)$的傅里叶变换,其具体形式是$\rho_k = \sum_{j=1}^{N} e^{-ikr_j}$.

注意到ϕ_k包含基态ψ,那么就自动包含了基态所带有的关联.此外,ϕ_k与ψ是正交的,这是因为如果我们写出两者的内积则有,

$$\langle\psi|\phi_k\rangle = N^{-1/2}\int dRe^{-ikR}\langle\psi|\rho(R)|\psi\rangle. \tag{17.54}$$

对于密度均匀的基态,显然$\langle\psi|\rho(R)|\psi\rangle$是位置无关的常数,因此对$R$的积分给出$\langle\psi|\phi_k\rangle \sim \delta(k)$,也就是说代表密度激发的模式$\rho_k(k \neq 0)$所得到的激发态$\phi_k$与基态$\psi$正交.

[17][Arovas,Schrieffer,Wilczek, Fractional Statistics and the Quantum Hall Effect, Phys.Rev.Lett. **53**,722(1984)]

[18][Girvin,MacDonald,Platzman,Magneto-roton theory of collective excitations in the fractional quantiitri Hall effect,Phys.Rev.B **33**,2481(1986)]

为了得到密度激发的能量$\Delta(k)$,我们需要计算(ϕ_k一般而言不是归一化的)

$$\Delta(k) = \frac{\langle\phi_k|H - E_0|\phi_k\rangle}{\langle\phi_k|\phi_k\rangle}. \tag{17.55}$$

E_0是基态能,满足$H\psi = E_0\psi$.我们可以把分母写成

$$S(k) = \langle\phi_k|\phi_k\rangle = N^{-1}\langle\psi|\rho_k^\dagger\rho_k|\psi\rangle \tag{17.56}$$

这也叫做静态结构因子.静态结构因子$S(k)$可以看作是动力学结构因子$S(k,\omega)$的积分,即有

$$\begin{aligned} S(k) &= \int_0^\infty d\omega S(k,\omega) \\ S(k,\omega) &= N^{-1}\sum_n \langle 0|\rho_k^\dagger|n\rangle\langle n|\rho_k|0\rangle\delta(\omega - E_n + E_0). \end{aligned} \tag{17.57}$$

其中$|n\rangle$是体系精确的激发态,E_n是相应的能量.

对于分子,我们有

$$\begin{aligned} f(k) &= \langle\phi_k|H - E_0|\phi_k\rangle = N^{-1}\langle\psi|\rho_k^\dagger H\rho_k - E_0\rho_k^\dagger\rho_k|\psi\rangle \\ &= N^{-1}\langle\psi|\rho_k^\dagger(H\rho_k - \rho_k H)|\psi\rangle = N^{-1}\langle\psi|\rho_k^\dagger[H,\rho_k]|\psi\rangle. \end{aligned} \tag{17.58}$$

我们把$f(k)$称作振子强度(oscillator strength).既然势能是粒子坐标的函数那么ρ_k只与粒子动能会有非零对易关系,计算可得$f(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$.这样,我们可以把激发能写成

$$\Delta(k) = \frac{f(k)}{S(k)} = \frac{\hbar^2k^2}{2mS(k)}, \tag{17.59}$$

这在超流理论中称作Feynman-Bijl公式.

- Feynman-Bijl公式表明集体激发的能量可以看作单粒子能量$\frac{\hbar^2k^2}{2m}$经由$S(k)$重整化后的结果,$S(k)$代表粒子之间的关联运动效应.

费米子体系

对于费米子体系,例如三维电子气问题,$S(k,\omega) \sim \mathrm{Im}\chi(k,\omega)$既包括集体模式的贡献也包含粒子- 空穴激发的贡献.当$k \to 0$时,集体模式其主要作用,此时$\Delta(k \to 0)$对应的是等离激元的最低激发能.如果$S(k,\omega)$可以看作单个模式主导,那么我们把这种近似叫做单模近似(single-mode-approximation,SMA).当k增加后,等离激元色散与粒子-空穴区相交,这说明前者会衰变为后者,这样单模近似就失效了.

下面,我们考虑量子霍尔问题.在量子霍尔问题中,单粒子动能由于磁场的原因而产生分立的Landau能级,能级间距为$\hbar\omega_c$,与此同时,体系的中性集体激发仍然具有明确的动量k.考虑最低Landau能级已经完全被电子占据,(整数量子霍尔

情况)此时的低能激发是从最低Landau能级到上一个Landau能级的粒子-空穴激发.我们需要消耗的能量是$\Delta(k\to 0)=\hbar\omega_c$.

对于分数量子霍尔体系,由于Landau能级仅被部分占据,这样Landau能级间的粒子-空穴激发自然不会是低能激发.为了得到低能激发,我们需要把密度激发限制到同一个Landau能级内部,这样通常通过Landau能级投影来实现.让我们把Landau能级投影后的密度激发写成$\bar{\rho}_k$,类似于Feynman的处理,分数量子霍尔体系中密度激发对应的低能激发态就是

$$\phi_k = N^{-1/2}\bar{\rho}_k\psi. \tag{17.60}$$

由此,我们原则上可以得到单模近似下集体激发的能谱

$$\Delta(k)=\frac{\bar{f}(k)}{\bar{S}(k)}. \tag{17.61}$$

其在文献中叫做magneto-roton谱.这里投影后的振子强度$\bar{f}(k)=N^{-1}\langle 0|\bar{\rho}_k^\dagger[\bar{H},\bar{\rho}_k]|0\rangle$,结构因子$\bar{S}(k)=N^{-1}\langle 0|\bar{\rho}_k^\dagger\bar{\rho}_k|0\rangle$.为了计算$\Delta(k)$,最核心的是需要得到Landau能级投影后的$\bar{\rho}_k$.

让我们用复数坐标$z=r_x+ir_y, z^*=r_x-ir_y$改写ρ_k,即有

$$\rho_k=\sum_{j=1}^N e^{-ikr_j}=\sum_{j=1}^N e^{-i\frac{1}{2}(k^*z_j+kz_j^*)}. \tag{17.62}$$

我们希望得到的是ρ_k在Landau能级投影后的$\bar{\rho}_k$.

回忆先前的讨论,我们知道量子霍尔问题的单粒子部分可以写成$H=\hbar\omega_c a^\dagger a$,角动量表示为$L_z=\hbar(b^\dagger b-a^\dagger a)$.$a,a^\dagger$分别湮灭基态和产生激发态,其与粒子坐标的关系是

$$z\sim a-ib^\dagger,\quad z^*\sim a^\dagger+ib,\quad \partial_z\sim a^\dagger-ib. \tag{17.63}$$

可以看到,由于z^*涉及$a^\dagger$,因此其一旦出现在ρ_k就会导致激发至更高Landau能级.同时,考虑到霍尔效应本征态并不涉及z^*而z^*还包含b,这提示我们用∂_z代替z^*.换句话说,如果我们用$2\partial_z$代替z^*就可以得到投影后的$\bar{\rho}_k$:

$$\bar{\rho}_k=\sum_{j=1}^N e^{-ik\partial_{z_j}}e^{-i\frac{1}{2}k^*z_j}. \tag{17.64}$$

直接的计算表明,当动量k比较小时,$\bar{f}(k),\bar{S}(k)\sim|k|^4$,这样$\Delta(k\to 0)\neq 0$.因此我们可以说分数量子霍尔体系的长波密度(集体)激发具有能隙.

- 对于简单的分数量子霍尔态,例如$\mu=1/3$Laughlin态,GMP单模近似所得的$\Delta(k)$与精确对角化计算基本符合;(图17.4)
- 关于GMP理论的一些细节与推广可以参考他们的原文和引用的文献.[19]

[19][Kumar,Haldane,Neutral excitations of quantum Hall states: A density matrix renormalization group study,Phys.Rev.B **106**,075116(2022);Nguyen,Haldane,Rezayi,Son,Yang,Multiple Magnetorotons and Spectral Sum Rules in Fractional Quantum Hall Systems,Phys.Rev.Lett. **128**,246402(2022)]

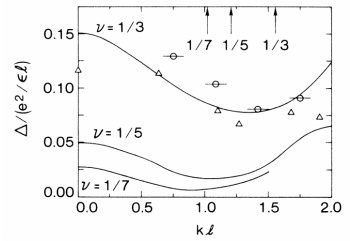


Figure 17.4: GMP单模近似所得的$\Delta(k)$与精确对角化计算的比较,实线是理论而圆形和三角是数值计算结果.

边界态

在先前整数量子Hall效应的讨论中,我们知道体系存在体能隙时边界处有无能隙的边界态.这些边界态的手性(单向性)是无耗散的量子化Hall输运的主要原因.既然整数和分数在输运行为上的相似性,我们自然也期待分数量子Hall效应也存在手性边界态.

整数量子Hall态的边界态

在整数量子Hall效应中,注意到静电势的等高线区分了占据态和未占据态,这可以看成费米面在实空间类似物.边界处的带电激发就是添加或移除通常的电子,而电中性激发则是电子空穴激发.如果我们考虑系统处于旋转不变的约束势场中,那么就需要采用对称规范,这实际上描述了碟形的样品(碟形样品有一个边界).

约束势的出现等价于在单粒子的能量中附加能量U_m,而U_m随着角动量量子数m单调增加.因此,对于N个无相互作用电子,所有$0 \leq m < N$的单电子态φ_m都被占据,这形成了$\nu = 1$整数量子Hall流体.(如图17.5a)为了产生电中性激发,我们可以把把一个电子从占据态转移到未占据态.显然,这会导致总角动量的增加(反映了手性).角动量(量子数)的最小改变量是$\Delta M = 1$,这种激发态是唯一的,这就是体系的第一激发态(如图17.5b).这个激发态对应的波函数是

$$\Psi_{\Delta M=1}(z) = \left(\prod_i^N z_i\right) \Psi_1(z) \tag{17.65}$$

当然,考虑到解析性和费米子反对称性的要求,任何激发态波函数都有$\Psi(z) = P(z)\Psi_1(z)$,$P(z)$是关于电子坐标z_i的对称多项式.对于固定的ΔM,$P(z)$还必须是ΔM阶的均匀多项式,考虑这些因素,对于$\Delta M = 1$,我们发现$P(z) = \prod_i z_i$.

一般而言,对于固定的ΔM,不同激发的数目$D(\Delta M)$与自由度为M的线性独立的均匀对称多项式的数目相同.例如对于$D(2) = 2$可以理解为两个独立的多项式$\prod_{i=1}^N z_i^2$和$\prod_{i<j}^N z_i z_j$.类似的我们发现,$D(1) = 1, D(2) = 2, D(3) = 3, D(4) =$

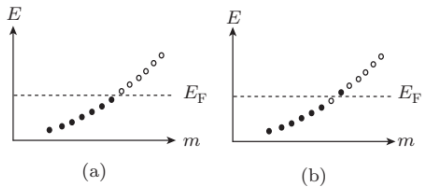


Figure 17.5: 电子在边界时(a)基态和(b)第一激发态所对应的电子占据情况.

$5, D(5) = 7$.只要$\Delta M \ll N$,这些激发总是对应于边界激发.

另一方面,$D(\Delta M)$等于在满足约束条件$\Delta M = \sum_{l=1}^{\infty} l \cdot n_l$下不同非负整数集合$\{n_l\}$的数目.例如,对于$\Delta M = 1$,我们只有唯一的选择$\{n_l\} = (1, 0, 0, ...)$,而对于$\Delta M = 2$,$\{n_l\} = (2, 0, 0, ...)$或$(0, 1, 0, ...)$.这个方法能够工作的原因其实是费米子占据数的构型($0, 1$表示的Fock态)与具体的$\{n_l\}$有一一对应的关系.

实际上,这些费米系统中的边界激发与玻色子系统的激发一一对应,这其实是所谓的玻色化.我们可以把n_l解释为具有$l\hbar$(轨道)角动量的玻色子的占据数,其对应的玻色子数算符是$\hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l$.这样,携带角动量$\Delta M$的(费米子)粒子-空穴激发的不同数目精确等于携带同样角动量的玻色子集合的数目. 换句话说,给定角动量,我们既可以用费米子来解释也可以用玻色子来解释.注意到这种费米子与玻色子的对应严格来说只对一维问题成立,但我们处理的其实是二维问题.不过注意到我们实际上可以只研究二维量子Hall态的边界态,这些边界态自然是一维的.因此,当研究Hall体系的边界态问题时,我们可以来用玻色子的语言来讨论,这在很多时候时更为方便的.既然边界态本身没有边界,那么我们可以认为玻色子满足周期边界条件,这样玻色子的动量量子化为$k = \frac{2\pi}{L} l$.($L = 2\pi R$是边界的长度,R是碟子的半径),那么其角动量是$Rk = l$.此外,产生一个激发所需要的激发能应该正比于$\Delta M \sim K = \sum_{k>0} k n_k$,($K$是玻色子的总动量),这样玻色子的能量是

$$E = \sum_{k>0} v k n_k \tag{17.66}$$

速度v来源于$\vec{E} \times \vec{B}$导致的漂移.对应的哈密顿量是$\hat{H} = \sum_{k>0} v k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$. [20]显然,这个能谱类似于一维声子的能谱.当然与通常玻色化后的哈密顿量不同,这里动量k取值都是正的,这说明玻色子只有一个传播方向(而通常玻色子动量可正可负对应两个传播方向),这体现了Hall态中边界模式的手性.

回忆第三章关于一维费米子体系的玻色化讨论,我们知道左右费米点附近展开的费米子自动具有手性或者说其传播具有方向性,这自然可以对应于整数量子Hall态中单向传播的边界态,这里我们可以选择右手费米子$\hat{c}_{Rk}$来代表边界态的费米子,其哈密顿量是$\hat{H} = \sum_k v k \hat{c}_{Rk}^\dagger \hat{c}_{Rk}$.既然费米子基态附近的低

[20]注意由于$Rk = l$,因此动量标记的玻色子算符$\hat{b}_k$与角动量标记的$\hat{b}_l$没有区别

能激发是电子-空穴构成的密度激发,那么体系可以用密度算符$\hat{\rho}_{Rk}$所对应的玻色子$\hat{b}_k = \sqrt{2\pi/(Lk)}\hat{\rho}_{Rk}$改写为$\hat{H} = \sum_{k>0} vk\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$,这与我们先前的唯象分析一致.在理论计算中,我们喜欢采用这些哈密顿量的实空间形式,右手费米子的哈密顿量是$\hat{H} = \int dx \hat{\psi}_R^\dagger(-iv\partial_x)\hat{\psi}_R$.如果我们考虑粒子数守恒的相互作用作为扰动,那么最直接的相互作用类型是$g\int dx \hat{\psi}_R^\dagger(x)\hat{\psi}_R^\dagger(x)\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_R(x)$,但是注意到费米子的反对易特性,这个相互作用自动为零,这表明自由手性费米子哈密顿量的稳定性,或者说整数量子Hall态的边界态对于相互作用的稳定性.

另一方面,玻色子哈密顿量的实空间形式更为复杂一些.首先,密度算符$\hat{\rho}_{Rq}$的实空间对应是$\hat{\rho}_R(x)$,然后$\hat{\rho}_R$可以用$\hat{\phi},\hat{\theta}$表示为$\hat{\rho}_R = \frac{1}{2\pi}\nabla(\hat{\theta} - \hat{\phi}) \equiv \frac{1}{2\pi}\nabla\hat{\phi}_R$,这样实空间哈密顿量是

$$\hat{H} = v\pi \int dx \hat{\rho}_R^2 = \frac{v}{4\pi}\int dx (\nabla\hat{\phi}_R)^2 \tag{17.67}$$

这里我们把哈密顿量完全由所谓的手性场$\hat{\phi} = \hat{\theta} - \hat{\phi}$表示.($[\hat{\phi}_R(x), \hat{\phi}_R(x')] = i\pi K\text{sign}(x - x')$,$K$ 是Luttinger参数,对自由费米子体系$K = 1$)简单尝试会发现如下作用量可重新产生手性场的哈密顿量,

$$S = \frac{1}{4\pi}\int dtdx(\partial_t - v\nabla)\phi_R\nabla\phi_R. \tag{17.68}$$

进一步做Wick转动($t = -i\tau$)可得虚时下的作用量是

$$S = \frac{1}{4\pi}\int d\tau dx(-i\partial_\tau + v\nabla)\phi_R\nabla\phi_R. \tag{17.69}$$

通过这个作用量直接计算可得$\langle\hat{\phi}_R(x,t)\hat{\phi}_R(0,0)\rangle = -\ln(x - vt)$.注意到根据玻色化的规则,电子算符满足$\hat{\psi}_R \sim e^{i\hat{\phi}_R}$,那么

$$\langle T\hat{\psi}_R^\dagger(x,t)\hat{\psi}_R(0,0)\rangle = e^{\langle\hat{\phi}_R(x,t)\hat{\phi}_R(0,0)\rangle} = \frac{1}{x - vt}. \tag{17.70}$$

这自然与自由费米子的预期完全符合.

分数量子Hall态的边界态

对于$\nu = 1/m$分数量子Hall态,体能隙由Coulomb相互作用提供.但是由于分数量子Hall态的强关联本质,我们不能简单的用电子的占据数来表征基态或者激发态.但是,采用玻色化以及对称多项式描述边界态的方式依然成立.物理上,这是因为边界激发是量子Hall流体的形变(保证),其不依赖于具体的低能电子结构.具体而言,这些激发可以用如下波函数描述:

$$\Psi(z) = P(z)\Psi_m(z). \tag{17.71}$$

这些一维激发在数学上可以用一维手性Luttinger模型来描述.

接下来,我们考虑边界上的带电激发.在整数量子Hall效应中,这些带电激发就是费米能附近的电子或空穴.对于分数量子Hall态,带电激发是与块体相似

的,具有分数电荷e/m的准粒子/空穴.为了在边界添加携带分数电荷$-e/m$的准粒子,我们可以在平面的原点产生一个带电为e/m的准空穴,既然电子总数保持不变且Hall流体是不可压缩的,那么原点附近减少的电荷必定会出现在边界处.这相当于原点处产生一对准粒子和准空穴,然后准空穴在远点附近局域化而准粒子从原点跑到边界附近,这个跑到边界处的准粒子就是分数量子Hall效应边界态的带电e/m的激发.

根据上面的讨论,我们可以认为在块体具有能隙的Laughlin准粒子在边界处是自由的(无能隙的).量子Hall流体中无能隙的形状变化可以看作带有分数电荷准粒子的形成的气体(当准粒子浓度不高时).因此,如果我们给体系注入一个电子,那么隧穿态密度会有很明显的变化.通过隧穿注入到边界的电子往往有很高的能量,为了与体系的能谱相匹配,这样它会分解为m个Laughlin准粒子.这会导致所谓正交性灾变(orthogonality catastrophe),这意味着诸如电子前后的态在热力学极限下是正交的,由此 隧穿节的电流-电压关系具有非线性行为$I \sim V^m$.

下面,让我们解释非线性电流-电压关系的起源.注意到分数准粒子并不是费米子,但它们和$\nu = 1$态的正常电子一样在边界处具有常数态密度,如果在金属性的接触施加电压V,那么化学势就会比Hall流体高几个eV.这样就会从化学势更高的接触隧穿到化学势更低的Hall流体的边界处,这些能够达到边界处的电子其能量范围是$[0, eV]$.假设我们忽略隧穿所涉及的矩阵元而只计数m个无相互作用准粒子在能量间隔$[0, eV]$内可能终态的数目,那么有

$$N(V) = \frac{\rho^m}{m!} \int_0^\infty d\varepsilon_1 \int_0^\infty d\varepsilon_2 ... \int_0^\infty d\varepsilon_m \theta \left(eV - \sum_{i=1}^{m} \varepsilon_m \right) \tag{17.72}$$

这里ρ是准粒子的态密度,$\theta(x)$是阶跃函数,$m!$则计入了m个准粒子的不可区分性.直接计算积分可知$N(V) = \frac{1}{(m!)^2}(\rho eV)^m \sim V^m$.

对于填满的Landau能级,也就是整数量子Hall态,我们$m = 1$,此时准粒子就是通常电子,那么$I - V$关系自然是线性的,这与上面的公式相符.图17.6给出了$m = 3$的实验结果,[21]可以看到理论与实验基本吻合,因此我们认为这类实验给出了分数量子Hall态具有分数带电粒子的间接证据.更加直接的实验证据来自于所谓的短噪声(short noise)测量,在量子Hall体系中,短噪声源自准粒子在不同边界态之间的隧穿.当两个Hall边界态彼此靠近时,准粒子在边界间的隧穿会导致原先边界电流($I_{qp} = \sigma_{xy} V_H$,V_H为Hall电压)的减弱,那么减弱后的边界电流与原先电流的差表示为$I_{back} = I_{qp} - I$,当$I_{back} \ll I_{qp}$ 时,短噪声谱$S_I(\omega) = e^* I_{back}$.实验结果(图17.6右图[22])很清晰的证明了对$\nu = 1/3$态有$e^* = e/3$,这说明分数带电准粒子确实存在于分数量子Hall体系之中.

仿照整数量子Hall效应的处理,我们可以明确写出分数量子Hall态的玻色

[21] [Grayson,Tsui,Pfeiffer,West,Chang, Continuum of Chiral Luttinger Liquids at the Fractional Quantum Hall Edge, Phys.Rev.Lett. **80**,1062(1998)]

[22] [Saminadayar,Glattli,Jin,Etienne, Observation of the $e/3$ Fractionally Charged Laughlin Quasiparticle, Phys.Rev.Lett. **79**,2526(1997)]

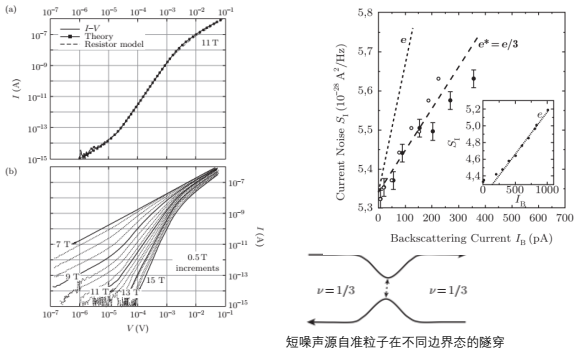


Figure 17.6: 左边(a)(b)显示量子Hall态的电流-电压($I-V$)关系;右图是短噪声测量的结果.

化描述.一般而言,相互作用的一维无能隙费米子体系仍然可以用玻色子语言描述,考虑到这里的手性特征,我们可以直接把整数时的玻色子的哈密顿量拿过来并添加上Luttinger参数K,

$$\hat{H}=\frac{v}{K}\pi\int dx\hat{\rho}_R^2=\frac{v}{4\pi K}\int dx(\nabla\hat{\phi}_R)^2 \tag{17.73}$$

原则上速度v也会被重整,这等价于把v换成$\tilde{v}$,为了符号简单下面默认v就是重整化了的速度.对应的作用量是

$$S=\frac{1}{4\pi K}\int dtdx(\partial_t-v\nabla)\phi_R\nabla\phi_R. \tag{17.74}$$

此时手性玻色场的关联函数是$\langle\hat{\phi}_R(x,t)\hat{\phi}_R(0,0)\rangle=-K\ln(x-vt)$.注意到电子算符$\hat{\psi}_R^\dagger$与$\hat{\rho}_R$ 必然满足$[\hat{\rho}(x),\hat{\psi}_R(x')]=\delta(x-x')\hat{\psi}_R(x')$(回忆费米生灭算符满足$[\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_i,\hat{c}_j^\dagger]=\delta_{ij}\hat{c}_j^\dagger$)并结合手性场的对易关系$[\hat{\phi}_R(x),\hat{\phi}_R(x')]=i\pi K\text{sign}(x-x')$,[23]可以发现$\hat{\psi}_R\sim e^{i\frac{1}{K}\hat{\phi}_R}$. 因此,分数量子Hall 态边界处电子的关联函数是

$$\langle T\hat{\psi}_R^\dagger(x,t)\hat{\psi}_R(0,0)\rangle=e^{\frac{1}{K^2}\langle\hat{\phi}(x,t)\hat{\phi}(0,0)\rangle}=\frac{1}{(x-vt)^K}. \tag{17.75}$$

这个结果似乎说明K是任意的,这难道与$\nu=1/m$无关吗?实际上,如果直接计算可以发现$\hat{\psi}_R(x)\hat{\psi}_R(x')=(-1)^K\hat{\psi}_R(x')\hat{\psi}_R(x)$,既然费米子算符必然满足反对易关系,因此$K$必定是正整数,而这自然可以假设为$K=1/\nu=m$.通过量纲分析可知电子关联函数的傅里叶变换是$G(k,\omega)\sim\frac{(\omega+vk)^{m-1}}{\omega-vk}$,然后再对动量积分就得到电子的态密度$N(\omega)\sim|\omega|^{m-1}$,最后令$\omega\to eV$,我们发现这个结果与先前基于准粒子气体的定性分析基本符合.

[23]这个对易关系中出现了Luttinger参数K,其原因是为了动量空间的玻色子哈密顿量仍然可以写成自由玻色子$\hat{H}=\sum_{k>0}vk\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k$的形式.

波函数	Laughlin波函数	Halperin波函数	Moore-Read波函数
适用对象	$\nu = 1/m$填充	多层	$\nu = 5/2$填充
原激发	阿贝尔任意子	阿贝尔任意子	非阿贝尔任意子

Table 17.1: 分数量子霍尔效应研究中的几个典型波函数.

其他量子Hall态

在先前的讨论中,我们假设电子自旋在外场下完全极化.事实上,在GaAs量子阱中Zeeman劈裂在$10T$磁场下只有$1K$量级,这比$100K$量级的Coulomb能要小很多,因此自旋自由度在某些情况下可以得到释放,换句话说,对这类体系,我们需要同时考虑自旋向上和向下的电子.一个典型的体系是多层二维电子气体,在这类体系中不同层的二维电子气彼此临近并通过层间的Coulomb相互作用或者电子隧穿而耦合在一起. 一个描述不同层电子形成分数量子Hall态的波函数是如下的Halperin波函数,[24]

$$\Psi_{m_1,m_2,n}(z;w) = \prod_{j<k}(z_j - z_k)^{m_1} \prod_{j<k}(w_j - w_k)^{m_2} \prod_{j\le k}(z_j - w_k)^n e^{\sum_{j=1}^{N/2} -\frac{|z_j|^2+|w_j|^2}{4l_0^2}}, \tag{17.76}$$

通常这个态可以记作Halperin(m_1, m_2, n)态.既然这个波函数表示电子波函数,那么m_1和m_2都应是奇数.同时,因为电子在不同层或者具有不同味自由度是可以区分的,那么n是整数或者零.

前面我们主要讨论的是$\nu = 1/m$的Laughlin态.但是1987年发现的$\nu = 5/2$显然无法用Laughlin态来理解,[25]这是因为$\nu = 5/2$可以看成自旋上和下的电子各种填充了最低Landau能级,而第一Landau能级是半填满的,即$\nu = 5/2 = 1 + 1 + 1/2$.既然填满的能级基本上可以理解为整数量子Hall态,那么真正起作用的就是第一Landau 能级的等效$\nu = 1/2$态,注意到Laughlin态仅对奇分母填充的态适用而这里是偶数分母自然无法套用Laughlin态(也不能用上面提到的Halperin态理解).目前,人们认为$\nu = 5/2$态的最有力候选者是Moore-Read态:[26]

$$\Psi_{MR}(z) = \mathrm{Pf}\left(\frac{1}{z_j - z_k}\right) \prod_{1\le j<k\le N}(z_j - z_k)^m e^{\sum_{j=1}^{N} -\frac{|z_j|^2}{4}} \tag{17.77}$$

通常这个态也叫做是Moore-Read Pfaffian态.$m = 2$是对应电子的有效填充因子$\nu = 1/2$,Pf是指行列式的开根号,这里是以$\frac{1}{z_j - z_k}$为元素的行列式,其可以看成发生Cooper配对后的电子波函数.由于电子配对会导致能谱中出现

[24] [Halperin, Statistics of Quasiparticles and the Hierarchy of Fractional Quantized Hall States, Phys.Rev.Lett. **52**,1583(1984)]

[25] [Willett et al., Observation of an even-denominator quantum number in the fractional quantum Hall effect, Phys.Rev.Lett. **59**,1776(1987)]

[26] [Moore,Read, Nonabelions in the Fractional Quantum Hall effect, Nucl.Phys.B **360**,362(1991)]

能隙,这就可以理解$\nu = 5/2$态的不可压缩性了.对于四个粒子的情况,Pf操作后有$\frac{1}{z_1-z_2}\frac{1}{z_3-z_4} + \frac{1}{z_1-z_3}\frac{1}{z_4-z_2} + \frac{1}{z_1-z_4}\frac{1}{z_2-z_3}$. 注意到这个波函数与Laughlin和Halperin态结构的明显差异($\frac{1}{z_j-z_k}$型因子),Moore – Read态的构造显然是非平凡.此外,通过后面会提到的共形场论构造,这个态的准粒子激发具有电荷$e^* = e/4$.

实际上,在Moore和Read的论文中,他们通过假定物理上可能的分数量子Hall态可以通过(二维)共形场论的某种关联函数构造来得到Laughlin态和Moore-Read.例如,$\nu = 1/m$的Laughlin态可以通过如下自由玻色场(最简单的共形场论)的关联函数得以实现:[27]

$$\Psi_m(z) = \left\langle \prod_{i=1}^{N} e^{i\sqrt{m}\phi(z_i)} e^{-i\int d^2z'\sqrt{m}\rho_0\phi(z')} \right\rangle \tag{17.78}$$

这里$\rho_0 = 1/(2\pi m)$代表基态的电子密度.自由玻色场的两点关联函数是$\langle\phi(z)\phi(w)\rangle = -\ln(z-w)$.注意到算符乘积展开$e^{i\sqrt{m}\phi(z)}e^{i\sqrt{m}\phi(w)} = (z-w)^m e^{2i\sqrt{m}(z+w)/2} + ...$,那么上式中的乘积部分自动可以产生Laughlin态的多项式因子部分,另一方面,上式右边的实部会产生指数因子$e^{-\sum_i |z_i|^2/4}$.[28]

进一步,在h_0处的准空穴态可以通过在关联函数中插入$e^{i\phi(h_0)/\sqrt{m}}$来实现,即

$$\begin{aligned} \Psi_m^{(+)}(h_0; z) &= \left\langle e^{i\phi(h_0)/\sqrt{m}} \prod_{i=1}^{N} e^{i\sqrt{m}\phi(z_i)} e^{-i\int d^2z'\sqrt{m}\rho_0\phi(z')} \right\rangle \\ &= \prod_{i=1}^{N}(z_i - h_0)\Psi_m(z). \end{aligned} \tag{17.79}$$

我们看到Laughlin态和它的准空穴态都可以通过最简单的共形场论的关联函数来重新获得,那如果我们考虑更为复杂的共形场论,比如最小模型所代表的共形场论会是什么结果呢?我们知道最简单的最小模型就是二维Ising模型处于临界点时所对应的自由Majorana费米子理论.这样,Moore和Read发现如果把Majoran费米子的关联函数与先前自由玻色子的关联函数乘在一起就可以获得一个新的波函数,这个波函数不是别的,就是之前已经写出的Moore-Read波函数:

$$\Psi_{MR}(z) = \langle\psi(z_1)...\psi(z_N)\rangle_{Ising} \left\langle \prod_{i=1}^{N} e^{i\sqrt{m}\phi(z_i)} e^{-i\int d^2z'\sqrt{m}\rho_0\phi(z')} \right\rangle \tag{17.80}$$

这里ψ是无质量的自由Majoran费米子,其两点关联函数是$\langle\psi(z)\psi(w)\rangle = \frac{1}{z-w}$.显然,我们可以用Majorana费米子和玻色子的复合体表示电子,即$\psi(z)e^{i\sqrt{m}\phi(z)}$.进

[27]用共形场论构造量子Hall波函数的简要介绍可以参考[Simon, Wavefunctionology: The Special Structure of Certain Fractional Quantum Hall Wavefunctions, arXiv:2107.00437;Hansson,Hermanns,Simon,Viefers, Quantum Hall physics: Hierarchies and conformal field theory techniques, Rev.Mod.Phys. **89**,025005(2017)]

[28]其虚部是病态定义的,但可通过规范变换消除

一步,利用Ising模型共形场论中的自旋场$\sigma(z)$可以构造准空穴态:

$$\begin{aligned}\Psi_{MR}(\eta;z) &= \langle\sigma(\eta)\psi(z_1)...\psi(z_N)\rangle_{Ising}\left\langle e^{i\frac{\phi(\eta)}{2\sqrt{2}}}\prod_{i=1}^{N}e^{i\sqrt{m}\phi(z_i)}e^{-i\int d^2z'\sqrt{m}\rho_0\phi(z')}\right\rangle \\ &= \mathrm{Pf}\left(\frac{1}{z_j-z_k}(z_i-\eta)(z_j-\eta)\right)\prod_{1\le j<k\le N}(z_j-z_k)^m e^{\sum_{j=1}^{N}-\frac{|z_j|^2}{4}} \quad (17.81)\end{aligned}$$

两准空穴态,

$$\begin{aligned}\Psi_{MR}(\eta_1,\eta_2;z) &= \langle\sigma(\eta_1)\sigma(\eta_2)\psi(z_1)...\psi(z_N)\rangle_{Ising}\left\langle e^{i\frac{\phi(\eta_1)}{2\sqrt{2}}}e^{i\frac{\phi(\eta_2)}{2\sqrt{2}}}\prod_{i=1}^{N}e^{i\sqrt{m}\phi(z_i)}e^{-i\int d^2z'\sqrt{m}\rho_0\phi(z')}\right\rangle \\ &= \mathrm{Pf}\left(\frac{1}{z_j-z_k}\left((z_i-\eta_1)(z_j-\eta_2)+(i\longleftrightarrow j)\right)\right)\prod_{1\le j<k\le N}(z_j-z_k)^m e^{\sum_{j=1}^{N}-\frac{|z_j|^2}{4}}.\end{aligned}$$

既然Moore-Read态的共形场论描述包含自由玻色子和Majorana费米子,那么其边界态也能用两者描述,回忆$\nu=1/m$态的结果($\mathcal{L}_{1/m}=\frac{m}{4\pi}(\partial_t-v\partial_x)\phi\partial_x\phi$),我们有

$$\mathcal{L}_{MR}=\frac{2}{4\pi}(\partial_t-v\partial_x)\phi\partial_x\phi-i\psi(\partial_t-v'\partial_x)\phi \quad (17.82)$$

ϕ,ψ分别是描述边界激发的手性玻色子和手性Majorana费米子.这里v'代表边界Majorana费米子的速度.(数值研究告诉我们$v\gg v'$)这样边界态的电荷密度完全由玻色场ϕ决定$\rho(x)=\frac{-e}{2\pi}\partial_x\phi$,(Majorana费米子是电中性的因而不会产生电导)其贡献了$e^2/(2h)$的Hall电导.如果加上两个被完全填满的最低Landau能级(自旋上和下)所各自贡献的e^2/h,那么就有$(1+1+1/2)\frac{e^2}{h}=\frac{5}{2}\frac{e^2}{h}$.

我们知道在Ising模型中,Majorana费米子的描述仅仅是数学技巧,但对于真实的凝聚态电子系统,电中性的Majorana费米子往往来自无自旋或者自旋完全极化电子的超导配对态(例如一些p波超导态).[29]因此,人们认为Moore-Read态中应该存在很强的超导配对关联.[30]如果可以通过杂质或者其磁通涡旋钉扎住这些Majorana费米子,那么我们就可以得到所谓的Majorana费米子零能模式.在前面章节的讨论中,我们知道多个Majorana零模可以构造出简并的Hilbert空间,它们之间交换等价于多体态的转动,而转动的矩阵可解释为矩阵形式的相位因子,所以我们把这些Majorana零模称为非阿贝尔任意子激发,而相应的Moore-Read量子Hall态就叫做非阿贝尔量子Hall态.此外,从原理上来看,这些Majorana零模有可能用来做容错的拓扑量子计算. [31]

我们注意到,Moore-Read态实际上是一个自旋完全极化态,如果我们认为$\nu=5/2$态中的电子没有完全极化,那么体系可能的基态是$(3,3,1)$,其结构

[29][Read,Green, Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum Hall effect, Phys.Rev.B **61**,10267(2000)]

[30]特别是所谓的$p+ip$波配对关联(其能隙函数为$\Delta_k=\Delta_0(k_x+ik_y)$),其对应Chern数$\mathcal{C}=1$的拓扑超导态.而$\mathcal{C}=1$自然由边界处的手性Majorana费米子贡献.

[31][Nayak,Simon,Stern,Freedman,Das Sarma, Non-Abelian anyons and topological quantum computation, Rev.Mod.Phys. **80**,1083(2008)]

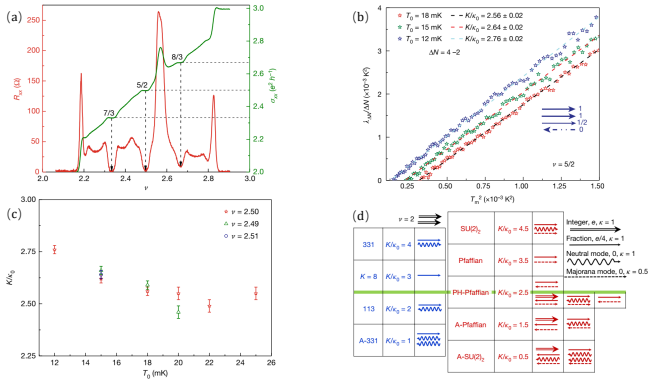


Figure 17.7: (a)$\nu = 5/2$附近的量子化平台;(b)(c)$\nu = 5/2$态的热导率测量结果;(d)不同量子Hall态理论给出的热导率预言.

类似于前面提及的Halperin态,其是一类阿贝尔量子Hall态.另一方面,强磁场极限下$nu = 5/2$态实际上具有粒子-空穴对称性,但Moore-Read态破坏了这种对称性,这样人们构造出了Moore-Read态的粒子-空穴对应态,也就是anti-Pfaffian态.[32]与Pfaffian态相同,anti-Pfaffian态的准粒子电荷也是$e^* = e/4$,其边界态包含三个手性Majorana费米子模式和一个玻色子模式,因此具有Chern数$\mathcal{C} = -3$.那到底哪个态真正描述$\nu = 5/2$态呢?这个问题从理论上来看并不容易回答,因此我们需要借助于实验来确定或者排除某些理论建议的量子Hall态.

- 隧穿实验表明$\nu = 5/2$体系存在$e^* = e/4$的准粒子;[33]
- Hall热导实验测量显示$\kappa_{xy}/T \simeq 2.5\frac{\pi^2 k_B^2}{3h}$,(如图17.7[34])
- 关于$\nu = 5/2$态理论和实验结果总结可以参考文献[35].

注意到虽然隧穿实验既可以用Moore-Read态解释也可以用anti-Pfaffian态理解,热导率测量的结果却与两者都不同,但是与越南理论家谭青山提出的复合Dirac费米子理论所得的粒子-空穴Pfaffian态的预言最为接近.[36]需要指出,复

[32][Lee,Ryu,Nayak,Fisher, Particlehole symmetry and the $\nu = 5/2$ quantum Hall state, Phys.Rev.Lett. **99**,236807(2007);Levin,Halperin,Rosenow, Particlehole symmetry and the Pfaffian state, Phys.Rev.Lett. **99**,236806(2007)]

[33][Dolev et al., Observation of quarter of an electron charge at the $\nu = 5/2$ quantum Hall state, Nature **452**,829(2008);Radu et al., Quasi-particle properties from tunneling in the $\nu = 5/2$ fractional quantum Hall state, Science **320**,899(2008)]

[34][Banerjee et al., Observation of half-integer thermal Hall conductance, Nature **559**,205(2018)]

[35][Ma,Peterson,Scarola,Yang, Fractional Quantum Hall Effect at the Filling Factor $\nu = 5/2$, arXiv:2208.07908]

[36][Son, Is the composite fermion a Dirac particle?, Phys.Rev.X **5**,031027(2015);Zucker,Feldman, Stabilization of the Particle-Hole Pfaffian Order by Landau-Level Mixing and Impurities That Break Particle-Hole Symmetry, Phys.Rev.Lett. **117**,096802(2016)]

合Dirac费米子明确保证粒子-空穴对称性,而粒子-空穴Pfaffian态可以看成复合Dirac 费米子的s波配对态,这个s波配对如果用普通费米子表示就是前面提到的p波配对态.

利用时间反演对称性,粒子-空穴Pfaffian态的边界态可以写成$\mathcal{L}_{MR} = \frac{2}{4\pi}(\partial_t - v\partial_x)\phi\partial_x\phi - i\psi(\partial_t + v'\partial_x)\phi$, 注意到这里玻色子和Majorana费米子模式速度相反,这意味着它们的传播方向恰好相反.[37]一个可能的块体波函数是

$$\Psi_{PH-P}(z) = \mathrm{Pf}\left(\frac{1}{\bar{z}_j - \bar{z}_k}\right)\prod_{1\le j<k\le N}(z_j - z_k)^m e^{\sum_{j=1}^N -\frac{|z_j|^2}{4}}. \tag{17.83}$$

[37]粒子-空穴Pfaffian态也得到了最近界面实验的支持[Dutta et al., Distinguishing between non-abelian topological orders in a quantum Hall system, Science **375**,193(2022)]

分数量子Hall效应的Chern-Simons-Landau-Ginzburg有效理论:场论的胜利

这一部分的讨论部分基于Nagaosa书以及张首晟的早前工作,[38]关于从有效理论推导Laughlin波函数的技术细节可参考这些文献.[39]

当然,一个明显的问题是既然Laughlin波函数及其扩展已经可以很好的描述绝大多数分数量子Hall态的性质,那么人们为何还要再搞一套数学上更为复杂和抽象的场论形式呢？一个简单的原因是Laughlin类型的波函数基本上是为量子Hall体系量身定做,其对于处理其他强关联问题,比如自旋液体,高温超导等问题并没有太好的推广价值,但是如果构造一套能够描述分数量子Hall态低能性质的场论框架,那么这个框架本身适用范围可能更为广泛.

历史上,受到Landau-Ginzburg理论框架的影响,人们刚开始特别希望给分数量子Hall态找一个序参量,这方面最早的工作来自Girvin和MacDonald.[40]他们通过对Laughlin 波函数做奇异规范变换(singular gauge transformation)得到了一个玻色子的波函数,并且这个波函数在分数量子Hall 态时具有代数非对角长程有序.他们认为这个非对角长程有序抓住了分数量子Hall态的本质,并且猜测了可能的Landau-Ginzburg理论.虽然后来的理论工作表明他们的理论并不适用于分数量子Hall态,但是他们这个想法对于后续的发展起了十分重要的作用.

一个完整并且从头推导分数量子Hall态的Landau-Ginzburg理论形式的工作由张首晟,Hansson和Kivelson(ZHK)共同完成,并有李东海和张首晟做了进一步的推广. [41] 从外磁场下的相互作用电子系统的微观哈密顿量出发,ZHK把相互作用费米子问题精确映射成有额外规范相互作用(由Chern-Simons项描述)的玻色子问题.通过分析所得的有效场论,即Chern-Simons-Landau-Ginzburg(CSLG)理论,ZHK得到了如下结果:

(1)只有当填充因子$\nu = \frac{1}{m}$时才能获得稳定且空间均匀的平均场解,这个解描述了不可压缩的流体;

(2)在接近这些填充因子时,Hall电阻ρ_{xy}显示量子Hall平台结构而纵向电阻ρ_{xx}为零;

(3)回旋共振模式(cyclotron mode)由拓扑平凡的相位自由度描述而磁旋子(magnetoroton)激发则由理论的拓扑涡旋刻画;

(4)涡旋携带分数电荷并满足分数统计.涡旋的完整量子理论可以用过对原始模型做对偶变换获得;

---

[38][Zhang,HanssonKivelson, Effective-Field-Theory Model for the Fractional Quantum Hall Effect, Phys.Rev.Lett. **62**,82(1989);Zhang, The Chern-Simons-Landau-Ginzburg theory of the fractional quantum Hall effect, Int.J.Mod.Phys.B **6**,25(1992)]

[39]更多的应用和讨论可参考在Z.F.Ezawa的量子霍尔效应专著.

[40][Girvin,MacDonald, Off-diagonal long-range order, oblique confinement, and the fractional quantum Hall effect, Phys.Rev.Lett. **58**,1252(1987)]

[41][Lee,Zhang, Collective Excitations in the Ginzburg-Landau Theory of the Fractional Quantum Hall Effect, Phys,Rev.Lett. **66**,1220(1991)]

(5)忽略涡旋对基态的贡献就可以通过这套理论推导出Laughlin波函数和Girvin-MacDonald序参量.

(6)Halperin类型的层次态也可以通过这套路理论获得. 因此,这套基于CSLG场论的理论框架给出了分数量子Hall效应的完整描述.虽然在逻辑上这套理论与Laughlin波函数方法彼此独立,但是却导致了同样的物理结果.

CSLG理论的基本物理图像

在具体讨论CSLG理论之前,让我们先介绍CSLG理论的基本物理图像.

首先,考虑二维外磁场$\vec{B} = -B\vec{e}_z$下的二维电子气体,为简单起见可以假设Zeeman劈裂足够大,这样我们只需要考虑自旋完全极化的电子.CSLG 理论的基本出发点是把相互作用电子气变为具有规范相互作用的玻色子问题.在这样的表示形式中,一个电子可以看作一个玻色子和携带奇数个磁通量子($\Phi_0 = h/e$)的磁通管的复合体.在数学上,我们可以通过引入统计规范场(或者叫做虚拟电磁场)$\vec{a}(x)$来实现,并且统计规范场满足

$$(\nabla \times \vec{a}(x))_z = m\Phi_0\rho(x) \tag{17.84}$$

这里m是奇数,$\rho(x)$是粒子(电子或者玻色子)的密度.($(\nabla \times \vec{a}(x))_z = b_z$是统计规范场对应的统计磁场或者虚拟磁场,其总是指向z方向)接下来,考虑一个位于原点的单位电荷,这样有$\rho(x) = \delta(x)$.这样对统计规范场满足的方程左右两边做面积分并利用Stokes公式可得

$$\oint d\vec{l}\cdot\vec{a} = m\Phi_0 \int dA\rho(x) = m\Phi_0. \tag{17.85}$$

这说明一个单位电荷可以诱导出带有m个单位磁通量子的统计通量.如果我们交换两个这种玻色子-磁通管复合体,那么其会获得Aharonov-Bohm(AB)效应的相位因子,即

$$e^{i\frac{e}{\hbar}\int_0^{\pi} d\vec{l}\cdot\vec{a}} = e^{i\frac{e}{\hbar}\frac{m\Phi_0}{2}} = e^{im\pi} = -1, \tag{17.86}$$

这当然正确反映了电子之间的交换因子-1.

通过上述形式,我们可以看到为何填充因子$\nu = 1/m$如此特殊.每个玻色子不仅感受到外磁场(外磁场的磁通密度$\rho_A = \frac{1}{\nu}\rho$)还能感受到统计规范场的影响.既然统计磁通的密度$\rho_a = m\rho$那么当$\nu = \rho/\rho_a = 1/m$时玻色子看到的总磁场为零,可以发生玻色凝聚.玻色子玻色凝聚所产生的Meissner效应反过来会导致原始电子系统的不可压缩性.为了看出这一点,利用公式17.85可以发现当粒子密度在局部的任意变化总会导致统计规范场的变化,在同一个区域产生总的磁通量.但是由于Meissner效应,产生的总磁通无法穿透带电玻色子的超流态(超导),因此粒子密度必须是均匀的,或者说体系必须是不可压缩的.[42]

[42]可压缩意味着可以产生任意的低能激发,这对应于粒子密度在局部的变化.反过来说,不可压缩性会抑制粒子密度变化.

虽然上述的玻色子图像自然解释了$\nu = 1/m$时的不可压缩性,但也会导致对于Hall效应的困惑.基于我们先前的推理，由于统计磁场和外磁场的抵消,玻色子看到的总磁场为零.但是在这种情况下Hall效应如何产生呢?这个问题可以直觉性的解释如下.

既然每个玻色子电荷为e,携带$m\Phi_0$个磁通量子,那么它运动时不仅会产生电流$I_c = e\frac{dN}{dt}$,还会导致涡旋流$I_v = m\Phi_0\frac{dN}{dt}$.根据法拉第定律,这样的涡旋流会导致横向电压降$V_H = m\Phi_0\frac{dN}{dt}$,这样导致的Hall电阻就是$R_H = V_H/I_c = m\frac{h}{e^2}$,这与分数量子Hall效应实验上看到的一致.

另一方面,我们可以进一步讨论分数量子Hall效应与玻色子超流性的类比.在二维超流体中存在拓扑型激发,也就是熟知的涡旋(环绕涡旋核心一周序参量的相位改变2π 的整数倍).在中性(不带电)的二维超流体中,产生涡旋需要消耗对数发散的能量,因而涡旋并不容易产生.与之相对,带电二维超流体中涡旋产生仅需要有限能量,这种有限能量要求使得规范场的通量量子化为单位磁通量子的整数倍,即$\oint d\vec{l}\cdot\vec{a} = n\Phi_0$.同样的讨论也适用于玻色子与Chern-Simons(统计)规范场相互作用的体系.从公式17.85可以看到统计规范场的量子化暗示涡度为±1的涡旋携带分数电荷$\pm\frac{1}{m}$,这与Laughlin波函数所得的结果一致.既然每个涡旋携带单位磁通Φ_0,$1/m$的电荷,那么相互交换涡旋所导致的AB相位因子是$e^{i\pi/m}$,这说明涡旋具有分数统计特性.

这些分数带电的涡旋对于解释Hall平台十分重要.我们知道磁场能够以规则的或者随机的涡旋晶格的方式穿透第二类超导体.只要涡旋能够被杂质钉扎住,那么超流(电流)仍然可以无耗散得流动.类似的情况也可以在分数量子Hall效应中出现.当填充数偏离$\nu = 1/m$时,体系会通过形成局域化涡旋的方式容纳多余的电荷,这与第二类超导体通过涡旋容纳磁场是一样的.这些涡旋同样会因为杂质形成规则或无规的晶格,因此,涡旋被钉扎态的低能输运行为与没有涡旋的$\nu = 1/m$态是相同的.特别是,这导致了Hall电导的平台和$\rho_{xx} = 0$(在$\nu = 1/m$附近的相当大范围内电导量子化为$\frac{1}{m}\frac{e^2}{h}$).

除了分数量子Hall态准粒子与带电超流态中涡旋的相似性,两者的集体激发也有对应关系.我们知道中性超流体的集体激发是小动量的声子模式和大动量的旋子模式.而在带电超流体中,声子模式的激发能会被提高到等离子体频率量级而同时旋子模式几乎不会受到Coulomb相互作用的影响,这样旋子模式是体系的低能激发.当动量小于粒子间距离之逆时,体系的激发是具有相反动量的旋子对.虽然说这些旋子对也出现在中性超流中,但是它们会很快衰变为声子模式因而并不作为稳定的准粒子.量子Hall态的基态激发基本上与带电超流体一致,只不过声子模式的等离子体频率由回旋共振频率ω_c代替,这代表Landau能级间的激发而低能部分则是Landau能级内的磁旋子激发.(磁旋子激发可以解释为CSLG理论中涡旋的复合体)

这样,我们看到分数量子Hall态与玻色子超流性的相似性,在下面的讨论中我们将会通过必要的数学形式来得到上面这些观念的定量描述.

二次量子化哈密顿量和拉格朗日量

在接下来的讨论中,考虑一个磁场下的相互作用电子系统,其一般性的二次量子化哈密顿量可以写成

$$H=\int d^2x\psi^\dagger(x)\left[\frac{1}{2m}(-i\nabla-e\vec{A}(x))^2+eA_0(x)\right]\psi(x)+\frac{1}{2}\int d^2xd^2yV(x-y)\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(y)\psi(y)\psi(x). \tag{17.87}$$

为简单起见,相互作用$V(x-y)$可选为最简单的接触势,即$V(x-y)=V(0)\delta(x-y)$.很显然,上述相互作用费米子体系的求解自然十分困难,但是我们知道玻色子体系由于存在玻色凝集,那么粒子之间关联效应主要提供的是玻色凝聚这个背景,剩下的关联可以认为比较弱,便于用熟悉的微扰理论计算.那么我们如何把费米子问题变为玻色子问题呢？我们注意到在一维自旋问题中,我们可以把自旋改写为费米子和弦算符的乘积.从统计性质的角度来看,空间不同位置的自旋是对易的,更接近与玻色子,而弦算符的作用是提供反对易性来抵消费米子的反对易关系,这样才能得到玻色子型的对易关系.因此,对于目前处理的二维相互作用电子气问题,我们也可以做类似的尝试,也就是把费米子改写为玻色子和弦算符的乘积.反过来说,我们也可以把玻色子用费米子和弦算符表示.这就引出了分数量子Hall效应研究中的一个著名的概念:

- 磁通钉扎(flux attachment):把原始的电子(玻色子)劈裂(split)成为一个带电的玻色子以及附着在这个玻色子上的(虚拟)磁通管(flux tube).

  在数学上,我们有

$$\psi(x)=\phi(x)e^{i\Theta(x)} \tag{17.88}$$

这里ψ,ϕ,Θ分别表示自旋极化的电子(玻色子),带电玻色子和磁通管.既然原始的粒子劈裂成了玻色子,那么这个理论通常叫做复合玻色子理论(composite boson theory). 可选的是,我们也可以让ϕ 代表费米子,这对应的是复合费米子理论(composite fermion theory). 注意到相位因子部分需要满足,

$$\boxed{\Theta(x)=m\int d^2y\theta(x-y)\rho(y)} \tag{17.89}$$

而粒子密度(算符)$\rho(x)=\psi^\dagger(x)\psi(x)=\phi^\dagger(x)\phi(x)$对于原始粒子和复合粒子是相等的.此外,上式中

$$\theta(x-y)=\arctan\frac{x_y-y_y}{x_x-y_x}$$

表示一个单位涡旋,这是因为任何环绕涡旋核心的封闭路径积分总是量子化为2π

$$\oint d\vec{l}\cdot\nabla\theta(x)=\int d\vec{S}\cdot\nabla\times\nabla\theta(x)=\int d^2x2\pi\delta(x)=2\pi,$$

在这里我们已经使用$\nabla\times\nabla\theta(x-y)=2\pi\delta(x-y)\vec{e}_z$.

- 公式17.88通常也叫做奇异规范变换,这是因为其形式上是给场算符添加了一个相位,这就是规范变换,但是与一般没有任何限制的相位因子不同,这类的相位因子与粒子的密度直接相关,所以叫做奇异的规范变换.

然后,注意到

$$\nabla \times \nabla\Theta(x) = m\int d^2y \nabla \times \nabla\theta(x-y)\rho(y) = 2\pi m\rho(x)\vec{e}_z,$$

这使得我们可以定义一个有效磁场(统计磁场)

$$b_z(x) = (\nabla \times \nabla\Theta(x))_z \tag{17.90}$$

以及一个统计规范场(statistical gauge field)

$$\vec{a}(x) = \nabla\Theta(x). \tag{17.91}$$

这样,利用统计磁场的定义,我们看到统计磁场与粒子密度紧密相连

$$b_z(x) = 2\pi m\rho(x), \tag{17.92}$$

这说明每一个粒子携带m个单位磁通/涡旋,这些磁通管同时产生有效磁场.上述关系在实际计算中通常可以当作约束条件来看待.

因此,我们可以计算粒子数N与有效磁通数N_b之间的比值:

$$\frac{N}{N_b} = \frac{\int d^2x\rho(x)}{\int d^2x b_z(x)/(2\pi)} = \frac{1}{m}.$$

这说明粒子数N与有效磁通数N_b之间的比值就是填充因子$v = \frac{1}{m}$.所以,如果固定在复合粒子上的有效磁通管被适当地选择以恰好抵消外磁场(一个有效磁通抵消一个真实的磁通),那么复合粒子感受到的总磁场就为零.在图17.8中我们给出了$\nu = 1/3$的例子,在这个例子中电子被劈裂成一个复合玻色子加上三个有效磁通,用这三个磁通来抵消外磁场.

需要指出,m的取值并不是任意的,这可以通过如下讨论看出.让我们考查原始粒子场算符的对易(玻色子)或者反对易关系(费米子):

$$\psi(x)\psi(y) = \phi(x)e^{i\Theta(x)}\phi(y)e^{i\Theta(y)},$$

注意到$[\Theta(y), \phi(x)] = -m\theta(y-x)\phi(x)$,那么有$e^{-i\Theta(y)}\phi(x)e^{i\Theta(y)} = \phi(x)$,这样上式可以改写为

$$\begin{aligned}\psi(x)\psi(y) &= e^{i\Theta(x)}e^{i\Theta(y)}e^{-i\Theta(y)}\phi(x)e^{i\Theta(y)}\phi(y),\\ &= e^{i\Theta(x)}e^{i\Theta(y)}e^{im\theta(y-x)}\phi(x)\phi(y)\\ &= e^{im\theta(y-x)}e^{i\Theta(x)}e^{i\Theta(y)}\phi(x)\phi(y).\end{aligned} \tag{17.93}$$

同理可得,

$$\psi(y)\psi(x) = e^{im\theta(x-y)}e^{i\Theta(y)}e^{i\Theta(x)}\phi(y)\phi(x).$$

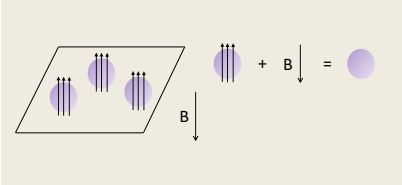


Figure 17.8: 磁通钉扎的物理图像:一个玻色子钉扎上$m=3$个磁通得以形成一个电子,玻色子感受到的总磁场为零.

然后,如果ϕ是玻色子,那么我们有

$$\psi(y)\psi(x)=e^{im\pi}\psi(x)\psi(y),$$

这样如果ψ是费米子(玻色子),那么m必须是奇(偶)整数.同时,当ϕ是费米子时,对于ψ是玻色子(费米子),m是奇数(偶数).无论我们使用复合玻色子还是复合费米子,磁通管$e^{i\Theta}$部分都需要被调节以重新生成原始粒子的正确的统计,这些结果我们总结如下

$$\begin{aligned}
&Composite\ Boson:\psi_F=\phi_B e^{i\Theta_{m=odd}} \\
&Composite\ Boson:\psi_B=\phi_B e^{i\Theta_{m=even}} \\
&Composite\ Fermion:\psi_F=\phi_F e^{i\Theta_{m=even}} \\
&Composite\ Fermion:\psi_B=\phi_F e^{i\Theta_{m=odd}}
\end{aligned} \tag{17.94}$$

- 为了满足原始的玻色子或费米子统计,m必须是奇数或者偶数.

在有了上述理论基础之后,我们终于可以使用奇异规范变换公式把相互作用费米子哈密顿狼改写为如下玻色型哈密顿量,(设m为奇数)

$$\begin{aligned}
H &= \int d^2x\phi^\dagger(x)\left[\frac{1}{2m}(-i\nabla-e\vec{A}(x)+\vec{a}(x))^2+eA_0(x)\right]\phi(x) \\
&+ \frac{1}{2}\int d^2xd^2yV(x-y)\phi^\dagger(x)\phi^\dagger(y)\phi(y)\phi(x)
\end{aligned} \tag{17.95}$$

这里我们使用了统计规范场的定义(公式17.91)以及关系式

$$(-i\nabla-e\vec{A})\psi=(-i\nabla-e\vec{A})e^{i\Theta}\phi=(-ie^{i\Theta}\nabla-ee^{i\Theta}\vec{A}+e^{i\Theta}\nabla\Theta)\phi.$$

需要指出,上述哈密顿量形式其实并不好用,原因是在这个框架下我们很难处理约束项$b_z(x)=2\pi m\rho(x)$.为了克服这个困难,我们可以采用路径积分形式,简单来

说,可以通过哈密顿量到拉格朗日量的标准替换操作$L=T-V$或者更确切的说利用玻色场相干态的路径积分方法,无论何种方式,我们都会得到如下拉式量:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_\phi &= \int d^2x\phi^\dagger(x)\left[i\partial_t+\frac{1}{2m}(-i\nabla-e\vec{A}+\vec{a})^2+eA_0\right]\phi(x)\\ &- \frac{1}{2}\int d^2xd^2yV(x-y)\phi^\dagger(x)\phi^\dagger(y)\phi(y)\phi(x).\end{aligned}\tag{17.96}$$

此时体系的零温配分函数,或者说是基态到基态的跃迁振幅是$\mathcal{Z}=\lim_{t\to\infty}\langle 0|e^{-iHt}|0\rangle=\int D\phi^\dagger D\phi Dae^{iS_\phi}.(S_\phi=\int dt\mathcal{L}_\phi)$

现在,我们可以考虑约束项,这可以通过在作用量S_ϕ中添加如下拉格朗日乘子项来实现,[43]

$$\int dt\int d^2xa_t\left(\frac{1}{2\pi m}b_z-\rho\right)=\int dt\int d^2xa_t\left(\frac{1}{2\pi m}(\partial_xa_y-\partial_ya_x)-\phi^\dagger\phi\right),$$

这里我们把拉格朗日乘子写成具有启发性质的a_t.当然,如果采用分部积分,我们可以把$a_t(\partial_xa_y-\partial_ya_x)$改写为更对称的形式,即有[44]

$$\int dt\int d^2xa_t(\partial_xa_y-\partial_ya_x)=\int dt\int d^2x\frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda\tag{17.97}$$

这里$\epsilon_{\mu\nu\lambda}$是全反对称张量,指标$\mu=0,1,2$对应t,x,y三个维度,三维矢量$a_\mu=(a_t,a_x,a_y)$.因此,我们可以把拉格朗日乘子项写成,

$$\frac{1}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda-a_0\phi^\dagger\phi.$$

在计入拉格朗日乘子项后,我们发现体系完整的作用量是包括两个部分,

$$\begin{aligned}&S=S_a+S_\phi\\ &S_a=\int d^2xdt\frac{1}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda\\ &S_\phi=\int d^2xdt\phi^\dagger(x)\left[i\partial_t+\frac{1}{2m}(-i\nabla-e\vec{A}+\vec{a})^2+eA_0-a_0\right]\phi(x)\\ &-\frac{1}{2}\int d^2xd^2ydtV(x-y)\phi^\dagger(x)\phi^\dagger(y)\phi(y)\phi(x).\end{aligned}\tag{17.98}$$

相应的零温配分函数是$\mathcal{Z}=\int D\phi^\dagger D\phi Dae^{i(S_a+S_\phi)}$.

Chern-Simons项的简要讨论

事实上公式17.98中的S_a就是著名的Chern-Simons项,a_μ可以叫做Chern-Simons场,其拉格朗日密度是

$$\boxed{\mathcal{L}_{CS}=\frac{1}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda-a_\mu j_\mu}\tag{17.99}$$

[43]更精确的写法其实是把约束项作为积分测度中的δ函数,然后再把δ函数改写为e指数的积分,即$\mathcal{Z}=\int D\phi^\dagger D\phi Da\delta(\frac{1}{2\pi m}b_z-\rho)e^{iS_\phi}=\int D\phi^\dagger D\phi Dae^{iS_\phi+i\int dt\int d^2xa_t(\frac{1}{2\pi m}b_z-\rho)}$.

[44]$\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda=a_0\epsilon_{\alpha\beta}\partial_\alpha a_\beta-\epsilon_{\alpha\beta}a_\alpha\partial_t a_\beta+\epsilon_{\alpha\beta}a_\alpha\partial_\beta a_0$

这里为了讨论方便加上了与粒子流j_μ的耦合项.在经典意义下,我们可以要求场的经典构型由作用量的极值确定,也就是对场a_μ的小扰动必须是稳定的,(对a_μ的泛函变分为零),即

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{CS}}{\partial a_\mu} = \frac{1}{2\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu a_\lambda - j_\mu = 0 \Rightarrow j_\mu = \frac{1}{2\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu a_\lambda.$$

我们发现$\partial_\mu j_\mu = \frac{1}{2\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\mu\partial_\nu a_\lambda = 0$,这自然说明与Chern-Simons场耦合的粒子流是守恒的.如果我们取粒子流的时间分量会发现$j_t = \rho = \frac{1}{2\pi m}(\partial_x a_y - \partial_y a_x) = \frac{1}{2\pi m}b_z$,这就是之前得到的粒子密度与统计磁场的关系.对于空间分量,我们有

$$j_x = \frac{1}{2\pi m}(\partial_y a_t - \partial_t a_y), \quad j_y = \frac{1}{2\pi m}(\partial_t a_x - \partial_x a_t). \tag{17.100}$$

如果定义虚拟电场$\vec{e} = (e_x, e_y)$,(可以取$a_t = 0$的规范)那么上面两个结果可以表示为$j_x = \frac{1}{2\pi m}e_y, j_y = -\frac{1}{2\pi m}e_x$, 这可以理解为虚拟电场能够产生横向粒子流,而其比例系数就是虚拟的Hall电导$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{1}{2\pi m}$.这个虚拟Hall电导可以理解为粒子带有有效电荷$q^\star = 1/m$,也就是具有分数电荷.

总之,我们可以通过统计规范场a_μ表示守恒的粒子流j_μ.一个简单的问题是Chern-Simons项是否破坏某些对称性呢?答案是其破坏了时间反演以及宇称(空间反演)对称.一个简单的推理是既然统计规范场与粒子流联系在一起,而时间反演下粒子密度不会改变,因此$b_z \to b_z$.但是粒子流会改变负号$j_{x,y} \to -j_{x,y}$,这必然与虚拟电场改变符号直接相关$e_{x,y} \to -e_{x,y}$.换句话说,实际反演下$(a_t, a_x, a_y) \to (-a_t, a_x, a_y)$.代入$\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda$可知其变为$-\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda$,这说明Chern-Simons项破坏时间反演对称.[45]

- 关于对称性:Chern-Simons项的存在破坏时间反演对称.

- 如果不考虑与流j_μ的耦合,那么$\mathcal{L}_{CS}$对应的哈密顿量实际上为零,即$H_{CS} = 0$.这样FQHE的Chern-Simons理论给出了一个不能用哈密顿量而只能用拉式量描述的独特例子.

通过对作用量(公式17.99)配完全平方(这个技巧在处理Chern-Simons理论时相当有用)我们得到

$$\mathcal{L}_{CS} = \frac{1}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}(a_\mu - \epsilon^{-1}_{\mu\nu\lambda}2\pi m j_\mu \partial_\nu^{-1})\partial_\nu(a_\lambda - \epsilon^{-1}_{\mu\nu\lambda}2\pi m \partial_\nu^{-1} j_\lambda) - \pi m j_\mu \frac{\epsilon^{-1}_{\mu\nu\lambda}}{\partial_\nu} j_\lambda.$$

然后,第一部分可以积掉(直接扔掉)而第二项就是所谓的Hopf项,

$$\mathcal{L}_{Hopf} = -\pi m j_\mu \frac{\epsilon^{-1}_{\mu\nu\lambda}}{\partial_\nu} j_\lambda = (\pi m) j_\mu \frac{-\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu}{\partial^2} j_\lambda.$$

[45]在空间反演下$(\rho, j_x, j_y) \to (\rho, -j_x, -j_y)$,根据粒子流与统计规范场的联系就有$(a_t, a_x, a_y) \to (a_t, -a_x, -a_y)$

平均场解

虽然我们已经把费米子理论改写为玻色子理论,但是玻色子理论其实也不可能严格求解.作为最简单的近似,我们可以考虑复合玻色子理论(公式17.98)的平均场解.所谓的平均场解,在路径积分形式下就是所谓的鞍点近似.为了方便处理,我们重新写出玻色子体系的作用量:

$$\begin{aligned}
&S = S_a + S_\phi \\
&S_a = \int d^2xdt \frac{1}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda \\
&S_\phi = \int d^2xdt\phi^\dagger(x)\left[i\partial_t + \frac{1}{2m}(-i\nabla - e\vec{A}+\vec{a})^2 + eA_0 - a_0\right]\phi(x) \\
&-\frac{1}{2}\int d^2xd^2ydtV(x-y)\phi^\dagger(x)\phi^\dagger(y)\phi(y)\phi(x).
\end{aligned}$$

鞍点近似就是我们用使得作用量最小时的场构型来近似,可以理解为能量最小条件.如果我们假设玻色场不依赖与时间和空间坐标,也就是假设(复合)玻色子发生玻色凝聚,那么就有$\phi(x)=\phi_0$.此时S_ϕ可以写成,

$$\frac{S_\phi}{AT} = \left(\frac{1}{2m}(-e\vec{A}+\vec{a})^2 + eA_0 - a_0 - \mu\right)\phi_0^2 - \frac{1}{2}V(0)\phi_0^4.$$

这里A是体系的面积,T是总时间尺度.为了方便起见我们也计入了化学势μ.很明显,为了S_ϕ能够最小,统计规范场需要抵消真实电磁场的作用,也就是

$$-e\vec{A}+\vec{a}=0, \quad eA_0 - a_0 = 0.$$

这意味着$\vec{a}=e\vec{A}, a_0 = eA_0$.这个关系实际上表明平均场意义下虚拟电磁场$a_\mu$恰好与真实电磁场$A_\mu$强度相等.这种情况下,粒子感受到的总磁场是

$$B_{eff} = B_z - \frac{1}{e}b_z = B_z - \frac{2\pi m}{e}\rho = B_z - m\Phi_0\rho,$$

显然,由于虚拟电磁场与真实电磁场强度相等,复合玻色子感受到的总磁场为零.也就是说复合玻色子基本上是在没有磁场的自由空间运动,而我们知道自由玻色子有发生玻色凝聚的倾向,这也是我们用空间均匀的ϕ_0来代替时空变换的玻色场$\phi(x)$的基本原因.

在统计规范场与电磁场抵消后,体系的拉式量可以写成

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_A + \mathcal{L}_{SF} = \frac{e^2}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}A_\mu\partial_\nu A_\lambda - \mu\phi_0^2 - \frac{1}{2}V(0)\phi_0^4.$$

第一项是电磁场的Chern-Simons项,其决定体系的电磁响应而第二项是复合玻色子部分.通过$\frac{\partial\mathcal{L}_{SF}}{\partial\phi_0^2}=0$我们就可以得到复合玻色场发生玻色凝聚时的取值($\phi_0^2=\frac{-\mu}{V(0)}$).如果我们仅讨论系统的拓扑性质,那么可以忽略这一项.

然后,通过电磁场的Chern-Simons项我们可以得到电流密度,

$$j_x = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial A_x} = \frac{e^2}{2\pi m}(\partial_y A_0 - \partial_t A_y) = \sigma_{xy}E_y$$

这样就得到了量子化的Hall电导,

$$\sigma_H = \sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi m} = \nu\frac{e^2}{h}.$$

这与实验以及Laughlin波函数理论所得保持一致.同时,电磁场对标量势的导数给出粒子密度:

$$\rho = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_0} = \frac{e^2}{2\pi m}B_z \tag{17.101}$$

由此,我们发现粒子数与磁通数的比是

$$\frac{N}{N_\Phi} = \frac{\int d^2x\rho}{\int d^2xB_z/\Phi_0} = \frac{1}{m} = \nu.$$

这正是填充因子ν本身的定义.

平均场近似下的扰动

接下来,让我们在平均场理论的基础上考虑相关的涨落或者说扰动.仿照玻色子超流时的一般处理思路,我们可以把玻色场写成振幅和相位的形式,即$\phi(x) = \rho^{1/2}(x)e^{i\theta(x)}$,然后把把这个形式插入公式17.98可得

$$L_\phi = \frac{-1}{2m}\left[\rho(\nabla\theta - e\vec{A} + \vec{a})^2 + \frac{(\nabla\rho)^2}{4\rho}\right] + i\frac{1}{2}\partial_t\rho + \rho(-\partial_t\theta + eA_0 - a_0 - \mu) - \frac{1}{2}\rho^2V(0).$$

在这里,如果a_μ设为零就得到带电超流时遇到的形式.

然后考虑围绕平均场值$\rho_0 = \phi_0^2$的密度扰动$\rho = \rho_0 + \delta\rho$,只计入$O(\delta^2\rho)$及以下的低阶贡献可得

$$L_\phi \approx \frac{-1}{2m}\left[\rho_0(\nabla\theta - e\vec{A} + \vec{a})^2 + \frac{(\nabla\delta\rho)^2}{4\rho_0}\right] + i\frac{1}{2}\partial_t\delta\rho + \delta\rho(-\partial_t\theta + eA_0 - a_0) - \frac{1}{2}\delta^2\rho V(0).$$

因为振幅模式$\delta\rho$的能隙是$\sim V(0)$,在低能物理的讨论中我们可以安全地忽略振幅模式,于是把$\delta\rho$配平方并积掉可得

$$L_\phi \approx \frac{-1}{2m}\rho_0(\nabla\theta - e\vec{A} + \vec{a})^2 + \frac{1}{2V(0)}(\partial_t\theta - eA_0 + a_0)^2.$$

为了与统计物理(场论)相联系,我们可以通过以下替换把实时形式转化为虚时形式

$$\begin{aligned} &t \to -i\tau \\ &-iA_0 \to A_0 \\ &-\mathcal{L} \to \mathcal{L} \\ &e^{iS} \to e^{-S}, \end{aligned}$$

我们得到虚时形式的拉式量是

$$L_\phi \approx \frac{1}{2m}\rho_0(\nabla\theta - e\vec{A} + \vec{a})^2 + \frac{1}{2V(0)}(\partial_\tau\theta - eA_0 + a_0)^2.$$

此时Chern-Smions项变成

$$S_{CS} = \int d^3x \left(-i\frac{e^2}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}A_\mu\partial_\nu A_\lambda \right).$$

最后我们重标L_ϕ,此时作用量是

$$S_\theta = \int d^3x \frac{J}{2}(\partial_\mu\theta - eA_\mu + a_\mu)^2 \tag{17.102}$$

这里耦合常数$J \sim \frac{\rho V(0)}{m}$.

涡旋作为FQHE的准粒子

为了讨论分数量子Hall态的准粒子激发,我们可以利用Hubbard-Stratonovich把公式17.102中的平方项转化为玻色型的流J_μ,我们得到

$$S_\theta = \int d^3x \left(\frac{J_\mu^2}{2J} + iJ_\mu(\partial_\mu\theta - eA_\mu + a_\mu) \right),$$

然后令$\theta = \theta_c + \theta_v$,$\theta_c$和$\theta_v$分别表示声子模式和奇异的涡旋自由度.

$$\begin{aligned} S_\theta &= \int d^3x \left(\frac{J_\mu^2}{2J} + iJ_\mu\partial_\mu\theta_c + iJ_\mu(\partial_\mu\theta_v - eA_\mu + a_\mu) \right) \\ &= \int d^3x \left(\frac{J_\mu^2}{2J} - i\theta_c\partial_\mu J_\mu + iJ_\mu(\partial_\mu\theta_v - eA_\mu + a_\mu) \right). \end{aligned} \tag{17.103}$$

接下来积掉光滑的场位形θ_c可得一个约束$\partial_\mu J_\mu = 0$.这表示玻色子流是守恒的,而为了满足这个约束,引入流的规范场表示

$$J_\mu = \frac{1}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda \tag{17.104}$$

并插入公式17.103可得如下表达式

$$S_\theta = \int d^3x \left(\frac{(\nabla_{3D}\times\tilde{a}_\mu)^2}{8\pi^2 J} + i\tilde{a}_\mu J_\mu^v + i\frac{1}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}(-eA_\mu + a_\mu)\partial_\nu\tilde{a}_\lambda \right), \tag{17.105}$$

这里我们定义了$\nabla_{3D}\times\tilde{a}_\mu \equiv \epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda$以及涡旋流

$$J_\mu^v = \frac{1}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\partial_\lambda\theta_v.$$

注意到我们可以把矢量形式写成如下的Maxwell场强形式

$$\frac{(\nabla_{3D}\times\tilde{a}_\mu)^2}{8\pi^2 J} = \frac{\tilde{f}_{\mu\nu}^2}{16\pi^2 J}$$

场强张量定义为$\tilde{f}_{\mu\nu} = \partial_\mu\tilde{a}_\nu - \partial_\nu\tilde{a}_\mu$.

结合Maxwell场强项以及统计规范场a_μ的Chern-Simons项$S_{CS}=\int d^3x\left(-i\frac{1}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda\right)$并积掉$a_\mu$可得

$$S=\int d^3x\left(\frac{\tilde{f}_{\mu\nu}^2}{16\pi^2 J}+i\frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\tilde{a}_\mu\partial_\nu\tilde{a}_\lambda+i\tilde{a}_\mu J_\mu^v+i\frac{1}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}(-eA_\mu)\partial_\nu\tilde{a}_\lambda\right). \tag{17.106}$$

Chern-Simons项导致质量

这里我们看到作用量中的第一和第二项分别是Maxwell和Chern-Simons项.如果只有Maxwell项存在,那么会得到无能隙的线性模式,这对应于原始复合玻色子在玻色凝聚下产生的集体声子模式.为了看出这一点,我们可以改写Maxwell项:

$$\frac{\tilde{f}_{\mu\nu}^2}{16\pi^2 J}=\frac{(\partial_\mu\tilde{a}_\nu)^2+(\partial_\nu\tilde{a}_\mu)^2-2\partial_\mu\tilde{a}_\nu\partial_\nu\tilde{a}_\mu}{16\pi^2 J}=\frac{(\partial_\mu\tilde{a}_\nu)^2+\tilde{a}_\nu\partial_\nu\partial_\mu\tilde{a}_\mu}{8\pi^2 J}=\frac{(\partial_\mu\tilde{a}_\nu)^2}{8\pi^2 J}=\frac{-\tilde{a}_\nu\partial^2\tilde{a}_\nu}{8\pi^2 J}$$
$$=\frac{\tilde{b}_z^2+\tilde{e}_x^2+\tilde{e}_y^2}{8\pi^2 J}.$$

因此,我们发现Maxwell项的运动方程是$\partial^2\tilde{a}_\nu=(\partial_\tau^2+\nabla^2)\tilde{a}_\nu=0$.做解析延拓就得到熟悉的结果 $(\nabla^2-\partial_t^2)\tilde{a}_\nu=0$,这自然表明$\tilde{a}_\nu$的能谱是$\omega=|\vec{q}|$.

但是,Chern-Simons项的出现会完全改变这种无能隙或者无质量的谱.为了明确看到这一点,我们暂时忽略除Maxwell和Chern-Simons项以外的所有项,

$$S=\int d^3x\left(\frac{\tilde{f}_{\mu\nu}^2}{16\pi^2 J}+i\frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\tilde{a}_\mu\partial_\nu\tilde{a}_\lambda\right).$$

然后,拉格朗日运动方程$\frac{\partial L}{\partial\tilde{a}_\nu}-\partial_\mu\frac{\partial L}{\partial\partial_\mu\tilde{a}_\nu}=0$ 给出

$$i\frac{m}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda-\frac{\partial^2\tilde{a}_\mu}{4\pi^2 J}=0$$

根据量纲分析,我们发现一个有能隙/有质量的能谱$\omega\sim Jm+O(|\vec{q}|)$,这明显由Chern-Simons项贡献,因为有统计因子m出现在能谱中.另一方面有

$$\begin{aligned}S &= \int d^3x\left(\frac{a_\mu(-\delta_{\mu\lambda}\partial^2)a_\lambda}{8\pi^2 J}+i\frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\tilde{a}_\mu\partial_\nu\tilde{a}_\lambda\right)=\int d^3x\tilde{a}_\mu\left(\frac{-\delta_{\mu\lambda}\partial^2}{8\pi^2 J}+i\frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\right)\tilde{a}_\lambda\\ &= \int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\tilde{a}_\mu\left(\frac{\delta_{\mu\lambda}q^2}{8\pi^2 J}-\frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}q_\nu\right)\tilde{a}_\lambda,\end{aligned}$$

这在$\omega\sim Jm$处导致一个极点.

- 所以,当二维量子电动力学拉格朗日量存在Chern-Simons项时,规范场的谱由于Chern-Simons 项而获得质量,系统的低能物理/拓扑性质由Chern-Simons项抓住,因而接下来的讨论中忽略Maxwell项.

Hopf项和Hall电导

进一步,积掉$\tilde{a}_\mu$可得

$$S=\int d^3x\left(-i\frac{e^2}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}A_\mu\partial_\nu A_\lambda+i\frac{e}{m}A_\mu J^v_\mu+i\frac{\pi}{m}J_\mu\frac{\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu}{\partial^2}J_\lambda\right). \quad (17.107)$$

这里的第一项给出量子化的霍尔电导而第二项暗示准粒子(涡旋)带有电荷e/m并与外电磁场耦合.

使用$J_\mu=\frac{\partial S}{\partial A_\mu}$,我们得到

$$J_\mu=-i\frac{e^2}{2\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu A_\lambda+i\frac{e}{m}J^v_\mu.$$

其时间分量给出

$$J_0=-i\frac{e^2}{2\pi m}B_z+i\frac{e}{m}J^v_0,$$

因此,对空间积分就给出总电荷

$$Q=-eN+\frac{e}{m}N_v.$$

这个公式说明没有涡旋激发的基态具有$-eN$的电荷,而当有一些涡旋激发时,总电荷的改变是每个涡旋的电荷e/m乘以涡旋的总数N_v.

因此,我们发现涡旋就是系统的准粒子并且携带分数电荷e/m.此外,第三项(Hopf项)显示准粒子遵循(阿贝尔)分数统计,因为其统计角是π/m.通过交换两个这种准粒子,我们发现其波函数的相因子变化是

$$e^{i\frac{e}{m}\frac{1}{2}\oint d\vec{l}\cdot\vec{A}^v}=e^{i\frac{e}{m}\frac{1}{2}\frac{2\pi}{e}}=e^{i\frac{\pi}{m}}$$

这里第一个e/m是来自于准粒子具有电荷e/m而准粒子也同时有一个单位量子磁通$2\pi/e$.注意到这里还有1/2因子,这是由于交换粒子等价于一个粒子绕另一个粒子旋转一圈的一半.

- 因此,系统的基态或者背景是带电玻色子的玻色凝聚,这些玻色子由于物理磁场和Chern-Simons统计规范场的抵消导致其感受到的总磁场为零.在平均场背景之上,扰动激发具有很大的能隙而非平凡的准粒子激发,即任意子,就是FQHE中的量子涡旋携带分数电荷遵从分数统计并具有单位磁通量.显然所有这些激发都是有质量的,因而FQH流体的不可压缩性是容易理解的.量子化Hall电导实际上由具有分数电荷的涡旋通过Chern-Simons辅助下的输运贡献.

- 这种复合玻色子理论的一个有趣应用是用来理解玻色子的整数量子Hall效应.[46]

[46][Senthil,Levin, Integer Quantum Hall Effect for Bosons, Phys.Rev.Lett. **110**,046801(2013)]

Chern-Simons项与边界态

实际上,通过分析Chern-Simons项就可以唯象得构造出分数量子Hall态的边界态理论.这种方式的优点是其并不依赖于特定的分数量子Hall态的波函数.让我们重新考虑$\nu = 1/m$态对应的Chern-Simons项$S_{CS} = \int dt \int d^2x \frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda$,如果做规范变换$a_\mu \to a_\mu + \partial_\mu f$,那么我们发现

$$\begin{aligned} S_{CS} \to S'_{CS} &= \int dt \int d^2x \frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}(a_\mu + \partial_\mu f)\partial_\nu(a_\lambda + \partial_\lambda f) \\ &= S_{CS} + \int dt \int d^2x \frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\left[a_\mu\partial_\nu\partial_\lambda f + \partial_\mu f\partial_\nu a_\lambda\right] \\ &= S_{CS} + \int dt \int d^2x \frac{m}{4\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu(a_\lambda\partial_\mu f). \end{aligned} \tag{17.108}$$

上式第二项是边界项,对于一个无穷大的系统可以设定为零.但是当我们考虑边界态时,我们自然不能再把它设定零.但是这个边界项非零会导致规范不变性的破坏,这是我们不愿意看到的情况.

不失一般性,我们可以把边界设定为x轴($y = 0$),这样S'_{CS}边界项就是

$$\Delta S_{y=0} = \frac{m}{4\pi}\int dt \int dx f(\partial_t a_x - \partial_x a_t). \tag{17.109}$$

为了保持规范不变性,那么f不能直接设定为零,但我们可以把边界处的$\partial_t a_x - \partial_x a_t$设定为零,即$\partial_t a_x - \partial_x a_t = 0$.要让这个方程恒成立只要令$a_x = \partial_x\phi, a_t = \partial_t\phi$.由此,我们可以把这个关系重新代入$S_{CS}$中并且只保留在边界处的全微分项$\partial_y(a_x a_t)$,那么就得到边界态的作用量:

$$S_{edge} = \int dt \int dx \frac{m}{4\pi}\partial_t\phi\partial_x\phi. \tag{17.110}$$

当然,直接计算实际上发现这一项的哈密顿量为零,也就是没有直接的动力学.但是注意到边界处粒子运动应该由速度v,这提示我们加入$v(\partial_x\phi)^2$项,因此,完整的边界态理论是

$$S_{edge} = \int dt \int dx \frac{m}{4\pi}(\partial_t + v\partial_x)\phi\partial_x\phi. \tag{17.111}$$

显然,这个作用量与之前小节所得的结果一致.

复合费米子图像

由于磁通钉扎,原始粒子由m个量子磁通和一个复合粒子组成.当我们考虑原始的粒子是电子而m是偶数时,这样导致的复合费米子是一个费米子,这就是复合费米子.[47]

[47][Jain,Theory of the fractional quantum Hall effect, Phys.Rev.B **41**,7653(1990) ;Jain,Composite Fermion Theory of Exotic Fractional Quantum Hall Effect,Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **6**,39(2015)]

然后,复合费米子感受到的总磁场是

$$B_{eff} = B - m\Phi_0\rho = \nu^{-1}\Phi_0\rho - m\Phi_0\rho = (\nu^{-1} - m)\Phi_0\rho$$

如果我们定义有效填充因子ν_{eff}为

$$\nu_{eff} = \frac{\rho\Phi_0}{B_{eff}} = \frac{1}{\nu^{-1} - m},$$

那么有

$$\nu_{eff}^{-1} = \nu^{-1} - m.$$

接下来,如果假定复合费米子形成填充数为$v_{eff} = p$的整数量子霍尔态(p是整数),那么最终的填充因子是

$$\nu = \frac{1}{m + p^{-1}} = \frac{p}{2pk + 1},$$

$m = 2k$(k是整数).因此,复合费米子的p个填充的等效Landau能级形成整数量子霍尔态,而每个复合费米子上钉扎的$2k$个量子磁通给出填充为$\nu = \frac{p}{2pk+1}$ 的分数量子霍尔效应.例如,$\nu = 1/3$ 态可以通过令$p = 1$和$k = 1$实现,也就是把2个磁通绑到一个电子上形成复合费米子,复合费米子在剩下的磁通影响下形成整数量子霍尔态.(如图17.9[48])

一个有趣的情况是,当$k = 1, p \to \infty$时,$\nu = 1/2$,也就是半填满Landau能级问题.此时复合费米子感受到的有效磁场$B_{eff} = ((1/2)^{-1} - 2)\Phi_0\rho = 0$.这样复合费米子相当于不受到磁场影响,理论上人们期待相应的态是一个类似于费米液体的金属态.实验上,通过使磁场B偏离$\nu = 1/2$的磁场,人们观测到电阻率的量子振荡并且发现复合费米子的费米面满足Luttinger定理.既然量子振荡与Luttinger定理都是费米液体的基本特性,因而半满Landau能级问题的基态似乎是一个强相互作用下的费米液体.[49]

Jain评论到:"分数量子霍尔效应的真实粒子是复合费米子,其是复合费米子的整数量子霍尔效应".

[48][Jain, THE COMPOSITE FERMION:A QUANTUM PARTICLE AND ITS QUANTUM FLUIDS, PHYSICS TODAY **39** APRIL 2000]

[49][Hossain et al., Precise Experimental Test of the Luttinger Theorem and Particle-Hole Symmetry for a Strongly Correlated Fermionic System, Phys.Rev.Lett. **125**,046601(2020)]

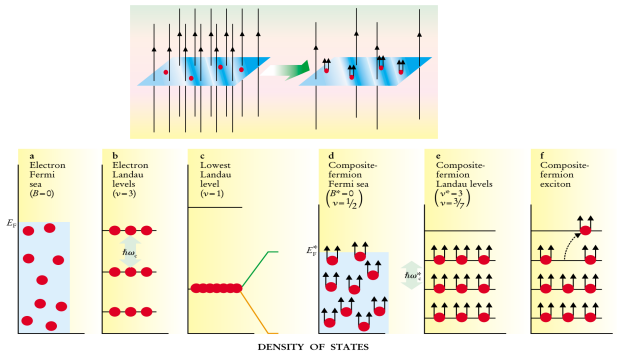


Figure 17.9: (上图)$\nu = 1/3$态在复合费米子物理图像下的形成,即2个磁通绑到一个电子上形成复合费米子,复合费米子在剩下的磁通影响下形成整数量子霍尔态.(下图)自由费米子与复合费米子的对比.

半满Landau能级的Dirac费米子描述和Dirac费米子之间的对偶:疑难依旧*

以当前的主流观点来看,分数量子霍尔效应中的准粒子是Jain建议的复合费米子.对于复合费米子而言,通常的理解是它是电子和偶数个磁通量子的复合体,并且是非相对论性质的费米子.然而,这种图像在粒子-空穴对称下并不是对称的.(粒子-空穴对称是强磁场下的精确对称)例如,对于$\nu = \frac{1}{2}$的半满Landau能级问题,问题本身具有明确的粒子-空穴对称性,即我们可以认为是粒子填充了一半Landau能级或者是填满的Landau能级有一半是空穴填充.在标准磁通钉扎图像中,我们可以给电子附着上两个磁通量子,这样平均而言,所形成的复合费米子并不感受到外磁场的效应而是形成费米液体,(当然偏离平均的涨落诱导复合费米子和有效Chern-Simons规范场的相互作用)这就是Halperin-Lee-Read关于半满Landau能级的理论模型.[50]回忆我们在分数量子霍尔效应时关于磁通钉扎理论的讨论,可以容易的得到半满Landau能级的HLR模型:

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left[i\partial_t + \frac{1}{2m}(-i\nabla - \vec{A} + \vec{a})^2 + A_0 - a_0 \right] \psi + \frac{1}{4\pi m}\epsilon_{\mu\nu\lambda} a_\mu \partial_\nu a_\lambda + \mathcal{L}_{int}$$

这里ψ是复合费米子场,A_μ是物理的电磁场,a_μ是磁通钉扎诱导的Chern-Simons规范场,对于半满Landau 能级有$m = 2$.为了简化记号我们设电子电荷$e = 1$,这样拉式量对a_0求导为零可得

$$\psi^\dagger \psi = \frac{1}{2}\frac{b}{2\pi}, \qquad b = b_z = \partial_x a_y - \partial_y a_x \tag{17.112}$$

这说明每个复合费米子上具有两个单位磁通量子.($\frac{1}{2}\frac{1}{2\pi} = \frac{1}{2}\frac{e}{h} = \frac{1}{2\Phi_0}$)

[50] [Halperin,Lee,Read, Theory of the Half-Filled Landau Level, Phys.Rev.B **47**,7312(1993)]

在文献当中,上述形式HLR模型一般认为是原始模型的精确改写.但不幸的是,这也意味着HLR模型不能精确求解.如果想要获得有价值的结果,那么就必须做近似,实际上人们总是从平均场理论开始.类似于先前讨论过的符合玻色子的平均场理论,我们用规范场a的平均值代替其本身,注意到电磁场和统计规范场以$A-a$的形似出现,并且复合费米子密度与原始电子密度一致,那么在平均场意义下复合费米子感受到的有效磁场是

$$B_{eff}=B-\langle b\rangle=B-4\pi\langle\psi^{\dagger}\psi\rangle=B-4\pi\rho. \tag{17.113}$$

ρ是复合费米子(电子)的密度.我们可以把上述结果翻译成电子填充数$\nu=\frac{\Phi_0\rho}{B}=\frac{\rho}{B/(2\pi)}$.同时如果定义复合费米子的填充数(也就是复合费米子密度与有效磁通密度$B_{eff}/(2\pi)$的比值)$\nu_{CF}=\frac{\rho}{B_{eff}/(2\pi)}$,那么两者之间的联系是$\frac{1}{\nu_{CF}}+1=\frac{1}{\nu}$.这样$\nu=\frac{n}{2n+1}$对应$\nu_{CF}=n$,这意味着填充因子$\nu=\frac{n}{2n+1}$的电子体系分数量子Hall态对应于有效填充因子$\nu_{CF}=n$的复合费米子整数量子Hall态.既然后者是整数量子Hall态,那么能隙就必然存在,这样前者的能隙存在性就得到了说明.

另一方面.如果我们考虑$\nu=\frac{n+1}{2n+1}$,此时有$\nu_{CF}=-(n+1)$,这意味着复合费米子感受到的有效磁场与外磁场方向相反.我们一般把$\nu=\frac{n}{2n+1}$和$\nu=\frac{n+1}{2n+1}$填充因子对应的分数量子Hall态叫做Jain序列.

当$\nu=1/2$时,$B_{eff}=B-4\pi\rho=0$,此时(平均场层次上)统计规范场完全抵消了外磁场,$(A-\langle a\rangle=0)$, 这样就得到平均场近似下的模型$(m=2)$

$$\mathcal{L}_{MF}=\psi^{\dagger}\left[i\partial_t+\frac{1}{2m}(-i\nabla)^2\right]\psi+\frac{1}{8\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\lambda}+\mathcal{L}_{int} \tag{17.114}$$

显然,如果忽略相互作用,那么系统就是(复合费米子的)简单的费米液体(气体),此时外场的Chern-Simons项会导致Hall电导$\sigma_{xy}=\frac{1}{2}\frac{e^2}{h}$. 这些费米液体类型的结果得到了实验的支持,这说明复合费米子具有物理真实性而非仅仅是数学上的工具.当我们超越平均场近似时,可以令$a=\langle a\rangle+2\tilde{a}$,这里$\tilde{a}$是围绕平均场的涨落,这样得到

$$\begin{aligned}\mathcal{L}=&\psi^{\dagger}(x)\left[i\partial_t+\frac{1}{2m}(-i\nabla+2\tilde{\vec{a}})^2-2\tilde{a}_0\right]\psi(x)+\frac{1}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\tilde{a}_{\mu}\partial_{\nu}\tilde{a}_{\lambda}+\frac{e}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}A_{\mu}\partial_{\nu}\tilde{a}_{\lambda}\\&+\frac{e^2}{8\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\lambda}+\mathcal{L}_{int}\end{aligned} \tag{17.115}$$

- 半满Landau能级可以由复合费米子的费米气体与动力学的Chern-Simons规范场的耦合模型描述,这是HLR理论的核心结果.

当然,HLR理论也有一些明显的问题.比如说这个理论中并没有关于投影到最低Landau能级的明显信息,因此HLR理论预言的能隙是eB_{eff}/m量级(复合费米子Landau能级间距),这与实验上看到的能隙Δ并不一致,虽然可以强行假设质量m由于重整化效应而得到修正,但由于二维HLR场论本身的强耦合性质,这个问题并不好解决.

半满Landau能级的Dirac费米子描述*

显然,HLR理论模型在粒子空穴变换$\psi \to \psi^\dagger, m \to -m, e \to -e$下并不是不变的,为了得到一个明确的粒子空穴对称的理论,Dam Thanh Son认识到复合费米子也可以是一种Dirac费米子.在凝聚态物理领域中,人们已经在石墨烯和三维拓扑绝缘体表面实现了Dirac费米子,而二维Dirac费米子的整数量子Hall效应给出Hall电导$\sigma_{xy} = (n + \frac{1}{2})\frac{e^2}{h}$,这已经被石墨烯中的实验所观测到.对于Dirac费米子而言,通常的磁通钉扎方法似乎并不能工作,因此只能利用间接的方式得到复合费米子的理论模型.在构造有效理论模型时最简单的尝试就是要求相应的理论满足所有的分离对称性以及一些唯象的限制,特别是$\nu = \frac{1}{2}$附近的Jain序列态.与HLR理论的相同的是Son的理论中基本粒子依然是费米子,但是其区别有三点:

- 费米子是Dirac费米子;
- 费米子是其自身的粒子空穴共轭;
- 费米子没有Chern-Simons相互作用项.(Chern-Simons项不符合粒子空穴对称性的要求)

那么Dirac费米子的费米液体与非相对论电子的费米液体有什么不同呢？虽然它们都由费米面附近准粒子的线性色散关系导致,但是对Dirac费米子而言当其沿着费米面运动时会获得$\pm\pi$的Berry相位.由此,复合费米子体系的Hall电导就是$\sigma_{xy}^{CF} = (n + \frac{\gamma}{2\pi})\frac{e^2}{h}(\gamma = \pm\pi$是Berry相位).

Son理论的出发点是如下的Dirac费米子模型:[51]

$$\mathcal{L} = i\overline{\psi}\gamma^\mu(\partial_\mu - iA_\mu)\psi - \frac{1}{4e^2}F_{\mu\nu}^2 \tag{17.116}$$

这里描述了$(2+1)$维无质量Dirac费米子与$(3+1)$维$U(1)$电磁规范场的耦合.ψ是两分量的旋量,$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2) = (\sigma^z, i\sigma^y, -i\sigma^x)$.注意到这个模型在$\mathcal{CP}$和$\mathcal{PT}$复合变换下的不变性.($\mathcal{C}$是电荷共轭,$\mathcal{P}$是空间宇称,$\mathcal{T}$是时间反演)注意这里的模型相当于是原始的模型,还没有涉及到复合费米子.

然后,Son考虑这个理论对应的复合费米子模型需要满足三个条件:(i)理论必须是$\mathcal{CP}$和$\mathcal{PT}$不变的;(ii)在电中性和非零磁场下,系统的基态应是费米液体;(iii)应该能够解释Jain的分数量子Hall序列.这样一个可能的有效复合费米子模型是

$$\mathcal{L} = i\overline{\Psi}\gamma^\mu(\partial_\mu + 2ia_\mu)\Psi + \frac{1}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}A_\mu\partial_\nu a_\lambda - \frac{1}{4e^2}F_{\mu\nu}^2 \tag{17.117}$$

Ψ是Dirac费米子型的复合费米子,a是等效规范场,另外由于没有Chern-Simons项,这里明确写出了通常的四维Maxwell项($\sim F_{\mu\nu}^2$).

[51] [Son, Is the Composite Fermion a Dirac Particle?, Phys.Rev.X **5**,031027(2015)]

- 当考虑Dirac复合费米子可能的配对不稳定性时,Son预言了通常Pfaffian(Moore-Read)态的粒子空穴对称版,即PH-Pfaffian态;

- 对于HLR理论的细致分析发现其一些物理量的计算结果与Son的Dirac费米子理论是一致的,(诸如磁化率和高频Hall电导的计算却仍然与粒子-空穴对称性不符合),详细内容可以参考文献[52];

- 关于半满Landau能级现状可以参考Son的综述文章.[53]

Dirac费米子之间的对偶*

作为Son理论的副产品,我们发现令电磁场为零可以得到自由无质量Dirac费米子可能对偶于$U(1)$规范场耦合的无质量Dirac费米子的重要结论:

$$\boxed{\mathcal{L}_{free}=i\overline{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi\Longleftrightarrow\mathcal{L}_{U(1)}=i\overline{\Psi}\gamma^{\mu}(\partial_{\mu}+2ia_{\mu})\Psi-\frac{1}{4g^{2}}f_{\mu\nu}^{2}} \tag{17.118}$$

在某种程度上这可以看成是磁通钉扎在Dirac费米子系统的一个推广,当然这里并没有代表统计交换的Chern-Simons规范场,因此不是传统意义上的磁通钉扎.

几乎在相同的一段时间,人们在研究三维拓扑绝缘体表面理论时也发现了上述对偶.[54]对偶的建立是通过考查两种不同的三维拓扑绝缘体表面的描述.第一种描述是通常的Dirac费米子表面态,第二种描述可以通过与规范场耦合的块体拓扑绝缘体的电磁对偶来得到.后者导致了一类新的表面理论,即上面已经提到的无质量Dirac 费米子与$U(1)$规范场耦合的QED_3理论.

- 文献[55]通过耦合线(coupled wires)的方法给出了上述对偶的一种微观证明,这使得Dirac费米子的对偶问题得到了明确的证实.

对偶之网*

在Dirac费米子之间对偶的基础上,人们进一步得到了下面这些对偶.[56]

[52] [Wang,Cooper,Halperin,Stern, Particle-Hole Symmetry in the Fermion-Chern-Simons and Dirac Descriptions of a Half-Filled Landau Level, Phys.Rev.X **7**,031029(2017)]

[53] [Son, The Dirac Composite Fermion of the Fractional Quantum Hall Effect, Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **9**,397(2018)]

[54] [Wang,Senthil, Dual Dirac Liquid on the Surface of the Electron Topological Insulator, Phys.Rev.X **5**,041031(2015);Metlitski,Vishwanath, Particle-vortex duality of $2D$ Dirac fermion from electric-magnetic duality of $3D$ topological insulators, Phys.Rev.B **93**,245151(2016)]

[55] [Mross,Alicea,Motrunich, Explicit Derivation of Duality between a Free Dirac Cone and Quantum Electrodynamics in $(2+1)$ Dimensions, Phys.Rev.Lett. **117**,016802(2016)]

[56] [Karch,Tong, Particle-Vortex Duality from $3D$ Bosonization, Phys.Rev.X **6**,031043(2016);Mross,Alicea,Motrunich, Symmetry and Duality in Bosonization of Two-Dimensional Dirac Fermions, Phys.Rev.X **7**,041016(2017)]

$$\begin{array}{ccc} iJ_{boson}\cdot A & \Leftrightarrow iJ_{Dirac}\cdot c - i\frac{cdc}{8\pi} + i\frac{Adc}{2\pi} - i\frac{AdA}{4\pi} \\ \Updownarrow & \Updownarrow \\ iJ_{vortex}\cdot\tilde{a} + i\frac{Ad\tilde{a}}{2\pi} & \Leftrightarrow iJ_{dualDirac}\cdot\tilde{c} + i\frac{\tilde{c}d\tilde{c}}{8\pi} + i\frac{Ad\tilde{c}}{2\pi} + i\frac{AdA}{4\pi} \end{array} \tag{17.119}$$

这里,J代表时空流($2+1$维),A是外矢量势,其他变量都是动力学的规范场.水平和垂直的箭头表示分别通过统计交换(引入Chern-Simons场的磁通钉扎)和对偶联系在一起.左边是熟悉的玻色子与涡旋对偶(粒子涡旋对偶),涡旋部分存在诱导涡旋之间长程相互作用的规范场.在右边,我们发现费米子理论是自对偶的,也就是对偶的理论与原先的理论形式上是一致的.Dirac费米子与$U(1)$Chern-Simons规范场耦合,并且玻色子的时间反演对称性给费米子施加了精确的自对偶.

$$\begin{array}{ccc} iJ_{Dirac}\cdot A & \Leftrightarrow iJ_{boson}\cdot c + i\frac{cdc}{4\pi} - i\frac{Adc}{2\pi} + i\frac{AdA}{8\pi} \\ \Updownarrow & \Updownarrow \\ iJ_{dualDirac}\cdot\tilde{a} + i\frac{Ad\tilde{a}}{4\pi} & \Leftrightarrow iJ_{vortex}\cdot\tilde{c} - i\frac{\tilde{c}d\tilde{c}}{4\pi} + i\frac{Ad\tilde{c}}{2\pi} - i\frac{AdA}{8\pi} \end{array} \tag{17.120}$$

左边是自由Dirac费米子与对偶的Dirac费米子与规范场耦合系统.这两个理论对偶于自对偶的Chern-Simons玻色子模型,费米子理论中的时间反演对称性导致了对偶.

$$\begin{array}{ccc} iJ_{boson}\cdot a + \mathcal{L}[a] & \Leftrightarrow iJ_{Dirac}\cdot c + \frac{1}{2}\mathcal{L}[c] \\ \Updownarrow & \Updownarrow \\ iJ_{vortex}\cdot\tilde{a} + \mathcal{L}[\tilde{a}] & \Leftrightarrow iJ_{dualDirac}\cdot\tilde{c} + \frac{1}{2}\mathcal{L}[\tilde{c}] \end{array} \tag{17.121}$$

这里$\mathcal{L}[a] = \frac{1}{4\pi|k|}|k\times a|^2$代表动量空间中拉格朗日量的形式.具有这类边缘相互作用的玻色子理论是精确自对偶的,并且由于这类相互作用不破坏时间反演对称性,因而费米子理论如果不破坏时间反演对称也是自对偶的.

综合上述三类对偶理论,可以发现以下这些理论都是等价的:

$$\begin{array}{l} iJ_{boson}\cdot a + \lambda_{boson}\mathcal{L}[a] - i\gamma_{boson}\frac{ada}{4\pi} \\ iJ_{vortex}\cdot\tilde{a} + \lambda_{vortex}\mathcal{L}[\tilde{a}] - i\gamma_{vortex}\frac{\tilde{a}d\tilde{a}}{4\pi} \\ iJ_{Dirac}\cdot c + \frac{\lambda_{Dirac}}{2}\mathcal{L}[c] - i\gamma_{Dirac}\frac{cdc}{8\pi} \\ iJ_{dualDirac}\cdot\tilde{c} + \frac{\lambda_{dualDirac}}{2}\mathcal{L}[\tilde{c}] - i\gamma_{dualDirac}\frac{\tilde{c}d\tilde{c}}{8\pi} \end{array} \tag{17.122}$$

这里定义了一些参数λ_j,γ_j,如果令$z_j = \gamma_j + i\lambda_j$,那么有$z_{vortex} = -z_{boson}^{-1}, z_{dualDirac} = -z_{Dirac}^{-1}$以及$z_{Dirac} = \frac{z_{boson}-1}{z_{boson}+1}$.

- 这些理论之间的对偶或者说等价性并不能在纯粹的$2+1$维场论框架下得到,它们实际上是$3+1$场论的某种表面态理论.

本章小结与进一步阅读

本章小结 Chern-Simons理论是分数量子Hall效应的有效理论;磁通与电子的复合物是分数Hall系统的准粒子.

本章关键词 Laughlin波函数;Moore-Read波函数;复合玻色子;复合费米子;Chern-Simons作用量

进一步阅读 Lancaster和Blundell合著的《Quantum Field Theory for the Gifted Amateur》第三十章和四十五章;S.Girvin和K.Yang的《Modern Condensed Matter Physics》第十六章;E.Fradkin的《Field Theories of Condensed Matter Physics》第十三到十五章

附录

流体力学方法

事实上,对于FQHE存在一种不依赖于磁通钉扎和粒子哈密顿量的构造低能有效场论的方法,这就是由文小刚和徐一鸿提出的量子Hall效应的流体力学方法.

首先,如果对于物质粒子具有守恒流

$$\partial_\mu J_\mu = 0,$$

并且系统处于一个二维空间中,那么我们可以采用

$$J_\mu = \frac{1}{2\pi}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu \tilde{a}_\lambda$$

来具体化这种守恒条件.

第二,如果我们进一步假定这个二维系统是绝缘的,那么它的电磁性质可以完全由规范场的Maxwell和Chern-Simons项描述.拓扑性质由Chern-Simons项表示.所以,我们可以写出如下的有效作用量

$$S = \int d^3x \ \frac{m}{4\pi}\tilde{a}_\mu\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda - \frac{1}{4g}\tilde{f}^2_{\mu\nu}.$$

然后,如果这些物质粒子对外场A_μ有相应,那么$J_\mu A_\mu$项也需要添加进来.同时,我们把准粒子流J^q_μ与a_μ耦合.所以导致的作用量是

$$S = \int d^3x \ \frac{m}{4\pi}\tilde{a}_\mu\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda - \tilde{a}_\mu J^q_\mu - \frac{e}{2\pi}A_\mu\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu\tilde{a}_\lambda.$$

这里,m这个整数是$U(1)_m$阿贝尔Chern-Simons理论中的层次并决定准粒子的统计.与外场的耦合有一个耦合常数e,这是因为物质场通常是携带单位电荷的电子或者玻色型的冷原子.积掉$\tilde{a}_\mu$导致一个关于A_μ的Chern-Simons项,这给出了量子化的霍尔电导$j_x = -\frac{\partial S}{\partial A_x} = \sigma_{xy}E_y$.此外,由于与准粒子流$J^q_\mu$耦合统计角是$\pi/m$.

层次态

现在,让我们考虑所谓层次态对应的Chern-Siomons理论,这类理论描述的是多层电子气体或者是自旋未极化的体系.作为一个例子,考虑如下Chern-Simons拉式量:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4\pi}K_{IJ}\epsilon_{\mu\nu\lambda}b^I_\mu\partial_\nu b^J_\lambda - \frac{e}{2\pi}t_I A_\mu\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial_\nu b_\lambda + j^q_\mu l_I b^I_\mu$$

这里我们引入了两分量的Chern-Simons场$b^I_\mu(I=1,2)$,每个分量与相应的准粒子流j^q_μ通过粒子矢量$l=(1,0)$或$(0,1)$耦合.K称为K矩阵,这里是个2×2的矩阵,电磁场则通过电荷矢量$t=(1,0)$与Chern-Simons场耦合.当取$K = \begin{matrix} m & n \\ n & m \end{matrix}$时,这

个Chern-Simons理论可以描述Halperin的(m,m,n)态.(波函数是$\Psi(z,w)=\prod_{i<j}(z_i-z_j)^m\prod_{k<l}(w_k-w_l)^m\prod_{i,k}(z_i-w_k)^n e^{-(\sum_i|z_i|^2+\sum_k|w_k|^2)/4}$)

上述系统的填充因子是$\nu=\sum_{I,J=1,2}K_{IJ}^{-1}t_It_J$.如果把体系放在环面上,那么基态简并度是|Det K|.另外,体系的准粒子电荷是

$$Q=-e\sum_{I,J=1,2}K_{IJ}^{-1}t_Il_J,$$

对应的统计角是

$$Q=\pi\sum_{I,J=1,2}K_{IJ}^{-1}l_Il_J.$$

第十七章习题

习题1:$\nu = 1/5$分数量子霍尔态

Q1:试指出费米子$\nu = 1/5$分数量子Hall态准粒子的电荷与统计角.

Q2:利用复合费米子图像解释费米子$\nu = 1/5$分数量子Hall态.

Q3:写出$\nu = 1/5$分数量子Hall态的Chern-Simons拉格朗日量$\mathcal{L}_{CS}$并证明其对应的哈密顿量为零.(考虑$j_\mu = 0$)

习题2:玻色子体系

Q1:写出Laughlin波函数并解释当m取值为偶数时对应什么样的系统.

Q2:写出玻色子体系分数量子霍尔态的Chern-Simons作用量.

习题3:GMP理论

Q1:对于$\nu = 1/m$的Laughlin态,试计算电子数$N = 2$时的结构因子$\bar{S}(k) = N^{-1}\langle \nu = 1/m|\bar{\rho}_k^\dagger \bar{\rho}_k|\nu = 1/m\rangle$.

Q2:与Q1参数相同,试计算未投影时结构因子$\bar{S}(k) = N^{-1}\langle \nu = 1/m|\rho_k^\dagger \rho_k|\nu = 1/m\rangle$,并比较投影前后的差别.

Bibliography

[1] John McGreevy, Viewpoint: Fermionic Vortices Find their Dual, Physics **9**, 72 (2016).

Chapter 18

SYK模型与非费米液体:Kitaev传说的延续

非费米液体:谁是费米液体?

现代凝聚态物理的一个重要问题是非费米液体,其核心是需要建立超越Landau费米液体理论框架描述强关联系统一般流体行为的普适理论.这里主要指的是无能隙量子液体,因为有能隙量子液体,例如量子霍尔流体和手征自旋液体已经有比较好的理论描述(例如拓扑场论).非费米液体的基本特点从实验观测量的角度来说一般有以下几个

- 直流电阻在较大的温度区间内是温度T的幂律,即$\rho \sim T^{\alpha}(0<\alpha<2)$;
- 热容是温度的幂律函数(或者对数),$C_v \sim T^{\beta}(\beta \neq 1)$;
- 磁化率是温度的幂律函数(或者对数),$\chi \sim T^{\gamma}(\gamma \neq 0)$.

比较典型且重要的例子来自于铜氧化物和重费米子系统,特别是铜氧化物在最佳掺杂附近的正常态电阻线性温度行为从$10K$量级一直延伸到几千K而没有显示电阻饱和的迹象.我们知道,费米液体的电阻随温度降低是二次型的温度依赖关系,并且正常金属有一个所谓的Ioffe-Regal电阻极限,可以估计为电子的平均自由程l等于晶格间距a,这样根据简单的Drude模型有

$$\rho=\frac{1}{\sigma}=\frac{m_e}{ne^2\tau}=\frac{m_e}{ne^2l/v_F}\simeq\frac{m_e v_F}{ne^2a}\sim e^{-2}n^{-2/3}a^{-1} \tag{18.1}$$

显然对于一般的金属,其密度基本是已知的,这样越小的晶格间距会有越大的电阻,当然晶格间距必定要大于原子半径,因此金属电阻应有一个饱和的最大值.显然,铜氧化物并不满足Ioffe-Regal电阻极限,此外,如果我们假定电子的散射率正比于温度或频率的一次方,那么可以唯象地描述电阻线性行为,这就是铜氧化物正常态的边缘费米液体(marginal Feimi liquid)描述.从理论的角度来看,在这个模型中具有边缘定义的Landau准粒子,其散射率与其本身能量可以比拟,我们通常称这类态为奇异金属(strange metal).

人们已经提出了一些理论框架来解释奇异金属现象:(i)耦合于费米面的玻色型自由度的量子临界涨落导致非费米液体基态,同时这些量子临界涨落也主导着临界点以上的一个有限温度区间(这个区域通常称为量子临界区域).这类理论的紧凑例子包括临界点的序参量场与电子费米面耦合(例如向列(nematic)和反铁磁序参量).(ii) 一类不同的非费米液体出现在费米面摧毁相关的电子型涨落驱动的临界点.典型的例子包括重费米子系统中的近藤崩塌以及金属和量子无序绝缘体之间的Mott相变.这些非费米液体量子临界点有临界费米面,即临界点的电子型激发由明锐的费米面表征,但却没有明确定义的Landau准粒子.当前已知的相关低能理论涉及分数化的自由度以及动力学的规范场.(iii)除了出现在临界点,非费米液体也可以是一个零温的稳定相,例如$\nu=1/2$填充的强磁场下的二维电子气体.(iv)在强相互作用和中间温度区,奇异金属行为可以不需要把体系精细调节到量子临界点附近.此时系统的基态是Landau费米液体或者其他常规的物态(例如超导),奇异金属区域仅仅出现在向高温过渡的区域.

需要指出的是这些理论框架在研究二维非费米液体行为时遇到了严重的挑战,具体而言就是通常所用的微扰理论求和即使在人为性很强的大N极限下也无法给出合理的结果.这实际上说明问题本身是非微扰的,需要超越Feynman图形技术的方案或者重新考虑物理模型的选择.

模型	SK模型	SY模型	SYK模型
对象	自旋	复费米子	实费米子
基态	自旋玻璃	非费米液体	非费米液体

Table 18.1: 无限长程随机相互作用的几个典型模型.

Majorana费米子的SYK模型:复杂的历史

从自旋玻璃到SY模型再到SYK模型

在讨论SYK模型之前,我们需要先根据历史发展的顺序先考虑自旋玻璃态的理论描述,这是因为自旋玻璃态所用到的理论观念和技巧是讨论SY以及SYK模型性质的前提.

自旋玻璃

首先,人们最初在稀磁合金,例如AuFe以及CuMn合金中,[1]发现体系低温下会出现一类非磁性长程有序态($\lim_{|R_i-R_j|\to\infty}\langle\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j\rangle=0$),这种态是磁无序态$\sum_j\langle\vec{S}_j\rangle=0$,可以看成局域磁矩/自旋被无规则得冻结在晶格中,数学上可以认为体系自旋自身出现时间上的长程关联,即$\lim_{t\to\infty}\langle\vec{S}_i(t)\cdot\vec{S}_i(0)\rangle\neq 0$,这个态被称为自旋玻璃(spin glass).因此,自旋玻璃可以看作是具有时间长程关联而没有空间长程关联的体系.

需要指出,稀磁场合金中自旋玻璃态出现要求磁性原子的浓度必须大于某个阈值(大约是百分之0.1的量级),在这个阈值之下体系低温时主要体现的是标准的单杂质Kondo效应.而在阈值之上则出现自旋玻璃态,更大的磁性原子浓度则会使体系进入铁磁或者反铁磁有序态.

物理上,稀磁合金中自旋玻璃态一般认为是源于局域磁矩通过交换传导电子而获得的RKKY相互作用,由于合金中局域磁矩分布的随机性,不同磁矩之间的RKKY相互作用可以为正或负(反铁磁或铁磁相互作用),这就导致自旋无法唯一的选定能量最低的自旋排列,这就是熟悉的自旋阻挫效应,这个阻挫效应最终在低温下抑制磁性长程有序的形成而使体系进入自旋玻璃态.

此外,自旋玻璃体系有如下实验特征:[2]

- 低场低频磁化率对温度的依赖关系在某个特征温度会出现一个尖峰(cusp),这个尖峰位置对应的温度称为自旋玻璃的冻结温度,一般记为T_f.我们可以认为$T<T_f$时体系进入自旋玻璃态.

[1][Cannella,Mydosht,Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys,Phys.Rev.B **6**,4220(1972); Gibbs et al.,The magnetic phase diagram of CuMn,J.Phys.F:Met.Phys. **15**,213(1985)]

[2]关注自旋玻璃的实验和理论总结可以参考176页得长篇综述论文[Binder,Young,Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts,and open questions,Rev.Mod.Phys. **58**,801(1986)]

- 有场冷却和零场冷却时磁化率曲线在$T > T_f$时重合而在$T < T_f$时则分开.这两者在$T < T_f$时的不同行为实际上说明$T < T_f$时体系进入自旋玻璃态,而这个态对热力学极限的体系有无穷多的微观(近似)简并态,这些态在自由能函数上体现为$T < T_f$时自由能有无穷多的极小值,零磁场时体系选择的自由能极小值一般而言会与有磁场时不同,而不同极小值在自旋玻璃态时又有很高的势垒阻隔,因此两者的磁化在温度进一步下降时会有明显差异.这类效应在实验上直接体现为对材料制备过程的强烈依赖性,这也是有场冷却和零场冷却时磁化率曲线出现差异的根源.

Edwards-Anderson序参量和Sherrington-Kirkpatrick模型

为了定量讨论自旋玻璃体系,考虑一个经典Heisenberg模型,

$$H = -\sum_{i<j} J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \tag{18.2}$$

这里相互作用$J_{ij} = \epsilon_{ij} J_0 \frac{\cos(2k_F|R_i - R_j|)}{(k_F|R_i - R_j|)^3}$是$\epsilon_{ij}$修饰下的RKKY相互作用.由于自旋玻璃体系中局域磁矩随机分布在体系中,因此ϵ_{ij}可以看作是相应格点上是否有局域磁矩的度量,有局域磁矩则$\epsilon_{ij} = 1$反之则为零,当然进一步的简化可以把J_{ij}限定到最近邻,同时我们还要对所有可能的$\{\epsilon_{ij}\}$的分布求平均,如果把ϵ_{ij}当作是无序/随机变量,那就说明我们在研究清楚固定ϵ_{ij}构型后需要对所有可能的构型求平均,这也叫做无序平均.这类无序平均主要是为了反应实际体系中体现的自平均(self-average)效应,也就是说虽然实际体系局域磁矩分布是确定的,但是由于这个体系足够巨大,因此我们在理论上可以认为这个大体系相当于更小体系的某种平均(无序平均).这说明对于这类涉及随机性或者说无序的体系,我们研究物理量时需要考虑两类平均,也就是通常的热力学平均和这里引入的无序平均:

$$\langle\mathcal{O}\rangle = \langle\langle\mathcal{O}\rangle_T\rangle_{disorder} = \left\langle \frac{\mathrm{Tr}e^{-\beta H}\mathcal{O}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta H}} \right\rangle_{disorder} = \int \prod_{ij} d\epsilon_{ij} P(\epsilon_{ij}) \frac{\mathrm{Tr}e^{-\beta H(\epsilon_{ij})}\mathcal{O}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta H(\epsilon_{ij})}}. \tag{18.3}$$

这里$\langle ...\rangle_T$代表热力学平均而$\langle ...\rangle_{disorder}$则是无序平均,$P(\epsilon_{ij})$是无序变量$\epsilon_{ij}$的概率分布函数,一般要求满足归一化条件.在此基础上,Edwards和Anderson建议把J_{ij}替换为满足高斯分布的无序变量来简化实际的讨论,这对于理论计算是重要的简化. [3]

当我们研究上述模型的相图时,我们需要定义相应的序参量以刻画不同的态,例如磁有序的序参量量可以用任意自旋的平均值来表示,即

$$\vec{m}_i = \langle\vec{S}_i\rangle = \langle\langle\vec{S}_i\rangle_T\rangle_{disorder} \tag{18.4}$$

另一方面,我们知道自旋玻璃态时自旋具有时间上的长程序,那么可以定义如

[3] [Edwards,Anderson,Theory of spin glasses,J.Phys.F:Met.Phys. **5**,965(1975)]

下Edwards-Anderson序参量来刻画自旋玻璃态:

$$q_{EA} = \lim_{t\to\infty} \langle \vec{S}_i(t) \cdot \vec{S}_i(0) \rangle. \tag{18.5}$$

当然,注意到平衡态热力学中的时间依赖并不是容易计算,因此Edwards-Anderson建议把不同时刻的自旋用其热力学平均值代替,则有

$$q_{EA} = \langle \langle \vec{S}_i \rangle_T \cdot \langle \vec{S}_i \rangle_T \rangle_{disorder}. \tag{18.6}$$

这样,在高温的顺磁态,我们期待$\vec{m}_i = 0, q_{EA} = 0$,在自旋玻璃态$\vec{m}_i = 0, q_{EA} \neq 0$.至于磁有序态,自旋之间的长程关联不仅使得$\vec{m}_i \neq 0$,同时自旋本身在时间上也是静态的,这自然意味着它具有时间上的关联,因此q_{EA}在磁有序态也非零.

虽然我们已经把RKKY型的相互作用J_{ij}简化为最近邻且满足高斯分布的无序变量,但是相应的计算还不足够简单.[4]为了得到更加简单的模型,Sherrington和Kirkpatrick指出我们可以假设相互作用J_{ij}涉及晶格上的所有自旋,这意味着相距无限远的自旋都存在相互作用,这当然与一般空间decay的相互作用有更本性的差异.另外,他们还建议用Ising类型的模型代替前面的Heisenberg型的模型,这样结合这两个假定就得到著名的Sherrington-Kirkpatrick模型(简称SK模型):[5]

$$H = -\sum_{i<j} J_{ij} S_i S_j = -\frac{1}{2} \sum_{i\neq j} J_{ij} S_i S_j \tag{18.7}$$

这里$S_i = \pm 1$是经典的Ising自旋,只有两个取值.求和$\sum_{i\neq j}$意味着对所有不同的Ising自旋求和,代表无限长程的自旋耦合,其耦合系数J_{ij}是随机变量,满足如下高斯型的分布:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J} e^{-\frac{(J_{ij}-J_0)^2}{2J^2}}. \tag{18.8}$$

显然,J_{ij}的平均值是

$$\overline{J_{ij}} = \int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij} P(J_{ij}) J_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij} P(J_{ij})(J_{ij}-J_0) + J_0 \int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij} P(J_{ij}) = 0 + J_0 = J_0. \tag{18.9}$$

而平方平均值为

$$\overline{J_{ij}^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij} P(J_{ij}) J_{ij}^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J} (2J^4) \frac{\partial}{\partial J^2} \int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij} e^{-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}} = J^2. \tag{18.10}$$

SK模型的热力学由无序平均的自由能决定,即有

$$\overline{F} = -T\overline{\ln \mathcal{Z}} = -T \lim_{n\to 0} \frac{\overline{\mathcal{Z}^n} - 1}{n}. \tag{18.11}$$

这里我们利用了对数函数的极限表示$\ln x = \lim_{n\to 0} \frac{x^n - 1}{n}$.[6]显然,我们这里用这个极限表示的动机自然是$\mathcal{Z}^n$的无序平均相比于$\ln \mathcal{Z}$更容易操作和计算.物理

[4] Einstein语'simple but not simpler', 在理论物理中通常理解为研究最简化的模型但不能过度简化以至于丢到最重要的物理.

[5] [Sherrington,Kirkpatrick,Solvable Model of a Spin-Glass,Phys.Rev.Lett. **35**,1792(1975)]

[6] 这个结果可由右边在$n \to 0$时做泰勒展开$x^n = e^{n \ln x} \simeq 1 + n \ln x$来获得.

上,当n为正整数时,$\mathcal{Z}^n$可以解释为我们把一个体系复制n份,每一份的配分函数都相同,这种方法叫做摹本技巧(replica trick),广泛应用于涉及无序的多体问题以及量子纠缠的理论计算.这里每一个拷贝称作一个replica,总的体系便是所有拷贝的总和.这样,我们只需要计算$\mathcal{Z}^n$的无序平均$\overline{\mathcal{Z}^n}$然后再取$n\to 0$的极限即可(这相当于某种意义上的解析延拓).对于$\mathcal{Z}^n$,我们有

$$\mathcal{Z}^n=\prod_{\alpha=1}^{n}\sum_{\{S_i^\alpha\}}e^{-\beta H(S_i^\alpha)}=\sum_{\{S_i^1,S_i^2\dots S_i^n\}}e^{-\sum_{\alpha=1}^{n}\beta H(S_i^\alpha)}=\sum_{\{S\}}e^{-\beta\tilde{H}} \tag{18.12}$$

这里我们定义了replica下的有效哈密顿量$\tilde{H}$,

$$\tilde{H}=\sum_{\alpha=1}^{n}H(S_i^\alpha)=-\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{i<j}J_{ij}S_i^\alpha S_j^\alpha. \tag{18.13}$$

对于$\tilde{H}$,我们看到不同拷贝中的自旋实际上彼此独立并没有任何的耦合,但是注意到我们还需要对无序变量J_{ij}取无序平均,这将会诱导不同拷贝自旋间的相互作用.

现在,让我们计算无序平均,即

$$\begin{aligned}\overline{\mathcal{Z}^n}&=\sum_{\{S\}}\overline{e^{-\beta\tilde{H}}}=\sum_{\{S\}}\overline{e^{\beta\sum_\alpha\sum_{i<j}J_{ij}S_i^\alpha S_j^\alpha}}=\sum_{\{S\}}\overline{\prod_{i<j}e^{\beta\sum_\alpha J_{ij}S_i^\alpha S_j^\alpha}}\\&=\sum_{\{S\}}\prod_{i<j}\overline{e^{\beta J_{ij}\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha}}\end{aligned} \tag{18.14}$$

而

$$\begin{aligned}\overline{e^{\beta J_{ij}\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha}}&=\int_{-\infty}^{\infty}dJ_{ij}P(J_{ij})e^{\beta J_{ij}\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}dJ_{ij}\frac{1}{\sqrt{2\pi}J}e^{-\frac{(J_{ij}-J_0)^2}{2J^2}}e^{\beta J_{ij}\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha}\end{aligned} \tag{18.15}$$

利用如下高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-a(x-x_0)^2}e^{bx}=\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ax^2}e^{b(x+x_0)}=e^{bx_0}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ax^2}e^{bx}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{4a}+bx_0},$$

并对比可知$a=\frac{1}{2J^2},b=\beta\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha,x_0=J_0$,这样有

$$\begin{aligned}\overline{e^{\beta J_{ij}\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha}}&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}J}\sqrt{\frac{\pi}{1/(2J^2)}}e^{\frac{(\beta\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha)^2}{4/(2J^2)}+(\beta\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha)J_0}\\&=e^{\frac{\beta^2J^2}{2}(\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha)^2+\beta J_0\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha}\\&=e^{\frac{\beta^2J^2}{2}\sum_{\alpha,\beta}S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta+\beta J_0\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha}.\end{aligned} \tag{18.16}$$

由此,我们发现

$$\overline{\mathcal{Z}^n}=\sum_{\{S\}}e^{\frac{\beta^2J^2}{2}\sum_{i<j}\sum_{\alpha,\beta}S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta+\beta J_0\sum_{i<j}\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha} \tag{18.17}$$

进一步,我们重新标度J, J_0:

$$J = \frac{\tilde{J}}{\sqrt{N}}, \quad J_0 = \frac{\tilde{J}_0}{N} \tag{18.18}$$

这样配分函数明确体现了格点总数N的依赖,即

$$\overline{\mathcal{Z}^n} = \sum_{\{S\}} e^{\frac{1}{N}\sum_{i<j}(\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}\sum_{\alpha,\beta}S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta + \beta\tilde{J}_0\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha)}. \tag{18.19}$$

这个配分函数可以进一步简化,首先

$$\sum_{\alpha,\beta} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta = \sum_{\alpha\neq\beta} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta + \sum_{\alpha=\beta} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha = \sum_{\alpha\neq\beta} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta + \sum_{\alpha=\beta} 1$$

这样常数部分$\sum_{\alpha=\beta} 1 = n$原则上可以扔掉但是为了与文献一致我们仍保留其贡献.接下来,

$$\begin{aligned}
\sum_{i<j} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta &= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta = \frac{1}{2}\sum_{i,j} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta - \frac{1}{2}\sum_{i=j} S_i^\alpha S_i^\beta S_i^\alpha S_i^\beta \\
&= \frac{1}{2}\overbrace{\sum_{i,j} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta}^{\mathcal{O}(N^2)} - \frac{N}{2} \simeq \frac{1}{2}\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \sum_j S_j^\alpha S_j^\beta \\
&= \frac{1}{2}\left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^2
\end{aligned} \tag{18.20}$$

因此

$$\sum_{\alpha,\beta}\sum_{i<j} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta \simeq \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^2 + \frac{N^2}{2}n = \sum_{\alpha<\beta}\left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^2 + \frac{N^2}{2}n \tag{18.21}$$

类似的,我们有

$$\sum_\alpha\sum_{i<j} S_i^\alpha S_j^\alpha = \frac{1}{2}\sum_\alpha\sum_{i\neq j} S_i^\alpha S_j^\alpha \simeq \frac{1}{2}\sum_\alpha\left(\sum_i S_i^\alpha\right)^2. \tag{18.22}$$

结合上述结果,则有

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{Z}^n} &= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}\sum_{\{S\}} e^{\frac{1}{N}(\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta)^2 + \frac{\beta\tilde{J}_0}{2}\sum_\alpha(\sum_i S_i^\alpha)^2)} \\
&= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}\sum_{\{S\}} e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}(\frac{1}{N}\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta)^2 + N\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}\sum_\alpha(\frac{1}{N}\sum_i S_i^\alpha)^2}
\end{aligned} \tag{18.23}$$

观察上述形式,这提示我们考虑如下序参量,

$$q^{\alpha\beta} = \frac{1}{N}\sum_i \langle S_i^\alpha S_i^\beta\rangle, \quad m^\alpha = \frac{1}{N}\sum_i \langle S_i^\alpha\rangle \tag{18.24}$$

对于$q^{\alpha\beta}$,若任意$\alpha\neq\beta$时$q^{\alpha\beta}$为非零常数,那么它相当于是这个体系中的Edwards-Anderson序参量q_{EA}(对比q_{EA}的定义并考虑当前体系是Ising自旋系统),而m^α可以看作是铁磁序参量.

在平均场近似下有

$$\left(\frac{1}{N}\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^2 \simeq 2\frac{1}{N}q^{\alpha\beta}\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta-(q^{\alpha\beta})^2$$
$$\left(\frac{1}{N}\sum_i S_i^\alpha\right)^2 \simeq 2\frac{1}{N}m^{\alpha}\sum_i S_i^\alpha-(m^{\alpha})^2 \tag{18.25}$$

那么

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{Z}^n} &\simeq e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}\sum_{\{S\}}e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}(2\frac{1}{N}q^{\alpha\beta}\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta-(q^{\alpha\beta})^2)+N\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}\sum_\alpha(2\frac{1}{N}m^\alpha\sum_i S_i^\alpha-(m^\alpha)^2)}\\
&= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}e^{-N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}(q^{\alpha\beta})^2-N\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}\sum_\alpha(m^\alpha)^2}\sum_{\{S\}}\prod_{i=1}^N e^{\beta^2\tilde{J}^2\sum_{\alpha<\beta}q^{\alpha\beta}S_i^\alpha S_i^\beta+\beta\tilde{J}_0\sum_\alpha m^\alpha S_i^\alpha}\\
&= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}e^{-N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}(q^{\alpha\beta})^2-N\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}\sum_\alpha(m^\alpha)^2}\prod_{i=1}^N\sum_{\{S_i^\alpha=\pm1\}}e^{\beta^2\tilde{J}^2\sum_{\alpha<\beta}q^{\alpha\beta}S_i^\alpha S_i^\beta+\beta\tilde{J}_0\sum_\alpha m^\alpha S_i^\alpha}.
\end{aligned}$$

让我们考虑最简单的序参量可能性,即设$q^{\alpha\beta}=q(\alpha\neq\beta)$,$m^\alpha=m$,那么有

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{Z}^n} &= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}e^{-N\frac{q^2\beta^2\tilde{J}^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}-Nm^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}\sum_\alpha}\prod_{i=1}^N\sum_{\{S^\alpha=\pm1\}}e^{q\beta^2\tilde{J}^2\sum_{\alpha<\beta}S^\alpha S^\beta+m\beta\tilde{J}_0\sum_\alpha S^\alpha}\\
&= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}e^{-N\frac{q^2\beta^2\tilde{J}^2}{4}n(n-1)-Nm^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}n}\prod_{i=1}^N\sum_{\{S^\alpha=\pm1\}}e^{\frac{q\beta^2\tilde{J}^2}{2}((\sum_\alpha S^\alpha)^2-n)+m\beta\tilde{J}_0\sum_\alpha S^\alpha}.
\end{aligned}$$

这样计算的主要困难便只剩下上式右边对所有自旋的求和.注意到$\sum_\alpha S^\alpha$作为整体出现,其在指数上有二次和一次项,这提示我们逆向使用高斯积分公式$\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-a(x-x_0)^2}e^{bx}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{4a}+bx_0}$,(取$b=\sum_\alpha S^\alpha$,$a=\frac{1}{2q\beta^2\tilde{J}^2}$,$x_0=m\beta\tilde{J}_0$),我们得到

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{Z}^n} &= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n}e^{-N\frac{q^2\beta^2\tilde{J}^2}{4}n(n-1)-Nm^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}n}e^{-Nq\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}n}\\
&\times\prod_{i=1}^N\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi q\beta^2\tilde{J}^2}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2q\beta^2\tilde{J}^2}(x-m\beta\tilde{J}_0)^2}\prod_{\alpha=1}^n\sum_{S^\alpha}e^{xS^\alpha}\right]\\
&= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n-N\frac{q^2\beta^2\tilde{J}^2}{4}n(n-1)-Nm^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}n-Nq\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}n}\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}(2\cosh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0))^n\right]^N\\
&= e^{N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n-N\frac{q^2\beta^2\tilde{J}^2}{4}n(n-1)-Nm^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}n-Nq\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}n+N\ln(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}(2\cosh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0))^n)}
\end{aligned}\tag{18.26}$$

既然$\overline{F}=-T\lim_{n\to0}\frac{\overline{\mathcal{Z}^n}-1}{n}$,那么需要把$\overline{\mathcal{Z}^n}$展开到$n$的一阶项,同时注意到$n\to0$时对数部分积分为$\lim_{y\to1}\ln y=0$,因此这部分需要把$(2\cosh(x))^n$展开为

$$(2\cosh(x))^n=e^{\ln(2\cosh(x))^n}=e^{n\ln(2\cosh(x))}\simeq1+n\ln(2\cosh(x)) \tag{18.27}$$

这样(利用当$y\to 0$时$\ln(1+y)\simeq y$)

$$\begin{aligned}
&\ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}(2\cosh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0))^n\\
\simeq\ &\ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}(1+n\ln(2\cosh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0)))\\
\simeq\ &\frac{n}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\ln(2\cosh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0)).
\end{aligned}$$

因此,把$\overline{Z^n}$的指数展开到一阶,我们发现

$$\begin{aligned}
\overline{F} &= -T\lim_{n\to 0}\frac{\overline{\mathcal{Z}^n}-1}{n}\\
&= -T\lim_{n\to 0}[1+N\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}n-N\frac{q^2\beta^2\tilde{J}^2}{4}n(n-1)-Nm^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}n-Nq\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}n\\
&+ N\frac{n}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\ln(2\cosh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0)-1]/n\\
&= -TN\left[\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}(1+q^2-2q)-m^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}+\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\ln(2\cosh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0)\right].
\end{aligned}$$

这样,自由能取极小值可以计算序参量q,m对应的方程,即

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\overline{F}}{\partial q}=0\Rightarrow\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{2}(q-1)+\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\tanh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0)\frac{\beta\tilde{J}x}{2\sqrt{q}}=0\\
&\frac{\partial\overline{F}}{\partial m}=0\Rightarrow-m\beta\tilde{J}_0+\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\tanh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0)\beta\tilde{J}_0=0
\end{aligned}$$

整理可得

$$\begin{aligned}
q&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\tanh^2(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0)\\
m&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\tanh(\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0).
\end{aligned}\tag{18.28}$$

通过数值求解上述方程就可以得到包含自旋玻璃,顺磁态以及铁磁态的基本相图.(如图18.1(a)) 进一步,如果我们考虑外磁场的效应,那么哈密顿量可以写成

$$H=-\sum_{i<j}J_{ij}S_iS_j-h\sum_i S_i,\tag{18.29}$$

采用零外磁场时相同的讨论可以发现体系的自由能,序参量q,m满足的方程只需要把$\cosh,\tanh$函数中的$\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0$替换为$\Xi=\sqrt{q}\beta\tilde{J}x+m\beta\tilde{J}_0+\beta h$即可.体系的热力学熵可以写成

$$S=-N\left[\frac{\beta^2\tilde{J}^2}{4}(1-q)(1+3q)-m^2\frac{\beta\tilde{J}_0}{2}-h\beta m+\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}x^2}\ln(2\cosh\Xi)\right].$$

在无外磁场的零温自旋玻璃态,我们有$T=0,m=0,q=1,h=0$,这样上式给出$S(0)=-1/(2\pi)\simeq -0.17<0$.显然,零温熵小于零这个非物理的结果表明平均

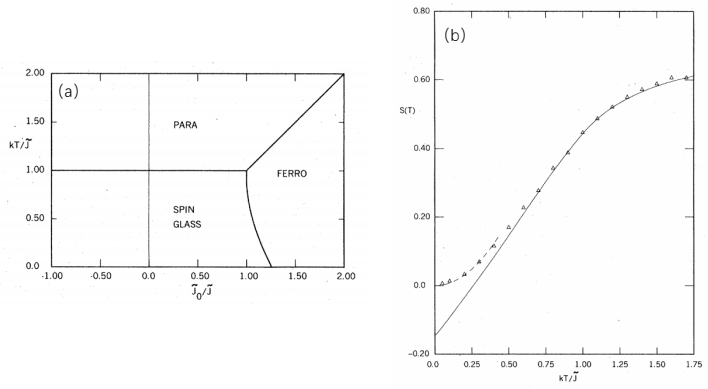


Figure 18.1: (a)SY模型的平均场相图,包括顺磁相(PARA),铁磁相(FERRO)和自旋玻璃相(SPIN GLASS);(b)平均场近似与蒙特卡洛模拟所得的SY模型的热力学熵$S(T)$随温度的变化.

场理论实际上在零温是失效的,更仔细的研究表明平均场结果在低温和弱磁场下都会失效.(图18.1(b)给出了平均场与蒙特卡洛模拟结果的比较)[7]平均场失效的原因在于我们采用了最简单的假定,也就是对所有的replica指标都有$q^{\alpha\beta}=q$,这叫做replica对称解.正确的自旋玻璃平均场理论实际上需要放弃replica对称这个假定,此时我们称相应的解为replica破缺解,这些结果由2021 年诺贝尔物理学奖获得者Parisi系统性研究.[8]

- Parisi在70年代末到80年代初的一系列工作给出了正确的自旋玻璃平均场理论,某种程度上可以说他解决了自旋玻璃体系的基本理论问题.当然,对于更实际的自旋玻璃体系(没有长程相互作用),采用蒙特卡洛模拟方法也是得到基本物理信息的重要手段;
- SK类型的自旋玻璃模型实际上也可以回避replica技巧来研究,这就是Thouless-Anderson-Palmer的理论.[9]
- 关于自旋玻璃比较好的入门读物是D.L.Stein,C.M.Newman所写的《Spin

[7]关于SK模型平均场与蒙特卡洛模拟的比较可以参考[Kirkpatrick,Sherrington,Infinite-ranged models of sinn-glasses,Phys.Rev.B **17**,4384(1978)]

[8]Giorgio Parisi获得了2021 年诺贝尔物理学奖的一半的奖金,其获奖原因为'发现从原子到行星尺度的物理系统无序和涨落的相互影响'.这里关于自旋玻璃的工作[Parisi,Infinite Number of Order Parameters for Spin-Glasses,Phys.Rev.Lett. **43**,1754(1979);Order Parameter for Spin-Glasses,Phys.Rev.Lett. **50**,1946(1983);The order parameter for spin glasses:a functional the interval $0-1$,J.Phys.A:Math.Gen. **13**,1101(1980);]是获奖最主要的原因,此外Kardar-Parisi-Zhang方程的工作也具有广泛影响.

[9][Thouless,Anderson,Palmer,Philos.Mag. **35**,593(1977)]

Glasses and Complexity》.

Kardar-Parisi-Zhang方程和表面生长

让我们暂时偏离这一章的主题,考虑Parisi的另一项重要工作,这就是著名的Kardar-Parisi-Zhang(张翼成)方程,简称KPZ方程.[10]这个方程主要描述材料表面生长,目前则是研究非平衡动力学的基本方程,如果设表面生长的高度记为$h(x,t)$,那么它满足如下KPZ方程:

$$\frac{\partial h}{\partial t}=\nu\nabla^2 h+\frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2+\eta(x,t) \tag{18.30}$$

上述方程右边第一项描述由表面张力ν所导致的弛豫过程(只有这一项就是熟悉的扩散方程).第二项是最低阶的非线性项,虽然我们可以考虑更高阶项,但它们的存在并不改变定性的物理.$\eta(x,t)$代表噪声项,一般假设其满足高斯型分布

$$P(\eta)\propto e^{-\frac{\eta(x,t)^2}{2\sigma^2}} \tag{18.31}$$

而其关联函数为$\langle\eta(x,t)\eta(x',t')\rangle\rangle=2\sigma^2\delta^d(x-x')\delta(t-t')$,这里的平均$\langle ...\rangle$指的就是对噪声项取上面假设的高斯平均.物理上感兴趣的是计算如下的关联函数中的指数因子χ,z,即

$$\langle(h(x,t)-h(x',t'))^2\rangle=|x-x'|^{2\chi}f\left(\frac{|x-x'|^z}{|t-t'|}\right). \tag{18.32}$$

这里χ,z分别称为粗糙度和动力学临界指数.根据我们关于相变和临界问题的讨论,上述形式就是处于相变点或者临界点(附近)时体系的关联函数.特别是动力学临界指数z 告诉我们时间和空间在标度变换$x\to b^{-1}x$下时间指标的变换规则$(t\to b^{-z}t)$.此外,函数f在相变理论中称为标度函数,其具体形式取决于体系本身,但最重要的时在临界点处具有$|x|^z/|t|$的形式.

接下来,让我们follow徐一鸿量子场论书的讨论来看看上述表面生长问题如何重写为一个量子场论问题.[11]首先,让我们构造如下虚假的配分函数:

$$\mathcal{Z}=\int\mathcal{D}h\int\mathcal{D}\eta e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\int d^dxdt\eta^2(x,t)}\delta\left(\frac{\partial h}{\partial t}-\nu\nabla^2h-\frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2-\eta(x,t)\right) \tag{18.33}$$

然后,对η积分并利用δ函数的性质可得

$$\mathcal{Z}=\int\mathcal{D}he^{-\frac{1}{2\sigma^2}\int d^dxdt(\partial_th-\nu\nabla^2h-\frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2)^2}=\int\mathcal{D}he^{-S(h)}. \tag{18.34}$$

这样我们发现上式实际上是一个相互作用的标量场理论.这样我们关于h的关联函数可以写成,

$$\langle(h(x,t)-h(x',t'))^2\rangle=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int\mathcal{D}he^{-S(h)}(h(x,t)-h(x',t'))^2. \tag{18.35}$$

[10][Kardar,Parisi,Zhang,Dynamic Scaling of Growing Interfaces, Phys. Rev. Lett. **56**, 889 (1986)]

[11]《果核中的量子场论》中文版354 – 355页

当然,为了进一步处理,我们可以重标$t \to t/\nu, h \to \sqrt{\sigma^2/\nu}h$,这样作用量$S(h)$可以写成

$$S(h) = \frac{1}{2}\int d^d x dt \left((\partial_t - \nabla^2)h - \frac{g}{2}(\nabla h)^2\right)^2 \tag{18.36}$$

这里$g = \sqrt{\lambda^2\sigma^2/\nu^3}$.最后,我们把上述作用量写开可得:

$$S(h) = \frac{1}{2}\int d^d x dt \left([(\partial_t - \nabla^2)h]^2 - g(\nabla h)^2(\partial_t - \nabla^2)h + \frac{g^2}{4}(\nabla h)^4\right), \tag{18.37}$$

这样我们得到一个非标准形式的标量场理论,对其采用标准的微扰重整化处理就可以近似计算临界指数χ, z.在KPZ的原始论文中,他们发现当体系空间维度$d = 1$时有$\chi = 1/2, z = 3/2$,这与数值模拟结果符合很好.

在上述例子中,我们看到一个具有随机噪声的偏微分方程的关联函数的计算问题可以转化为量子场论(更确切的说是统计场论问题)关联函数的计算.用著名数学物理学家吴咏时的话说,在那个时代很多人用场论方法来做统计物理而Parisi则反其道而行之,用统计物理(统计场论)反过来处理场论问题和其他涉及随机性的话题.这自然走出了一条独特且富有产出的道路(最后荣获炸药奖).

SY模型

1993年,Sachdev和Ye[12]考虑了一个具有无限长程相互作用并且相互作用本身也是无序变化的量子Heisenberg模型:[13]

$$H = \frac{1}{\sqrt{NM}}\sum_{1\le i<j\le N} J_{ij}\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \tag{18.38}$$

$\hat{S}_i$是用$SU(M)$群描述的自旋算符,我们最熟悉的自然是用$SU(2)$描述的$S = 1/2$情况,此时有$\hat{S}_i = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i$.($\hat{\sigma}_i$是Pauli矩阵)$N$代表体系的格点(自旋)总数.这里相互作用系数$J_{ij}$代表$i, j$格点自旋之间的相互作用.对于一般的$J_{ij}$,体系可以出现1)长程磁有序态,其序参量是$\langle\hat{S}_j\rangle \neq 0$;2)自旋玻璃态(spin glass,序参量为$q_{EA} = \lim_{t\to\infty}\langle\hat{S}_j(t)\cdot\hat{S}_j(0)\rangle \neq 0$而$\langle\hat{S}_j\rangle = 0$);3)自旋液体态,其不存在一般的局域序参量($q_{EA} = 0, \langle\hat{S}_j\rangle = 0$).

为了让体系能够出现非磁有序的解,例如自旋液体,假设J_{ij}的分布满足高斯分布,即有$P(J_{ij}) \sim e^{-J_{ij}^2/(2J^2)}$.这样自旋之间实际上感受到的是无序变化的相互作用.同时,求和$i > j$遍及所有格点,这样这个无序相互作用也是长程相互作用.为了计算方便,我们设分布函数为$P(J_{ij}) = Ae^{-J_{ij}^2/(2J^2)}$,既然分布函数可以归一化,那么有

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij}P(J_{ij}) = A\int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij}e^{-J_{ij}^2/(2J^2)} = A\sqrt{\frac{\pi}{1/2J^2}} = A\sqrt{2\pi}J \tag{18.39}$$

[12]Jinwu Ye中文名叫叶锦武,当时是Subir Sachdev的研究生

[13]Sachdev,Ye,Gapless Spin-Fluid Ground State in a Random Quantum Heisenberg Magnet,Phys.Rev.Lett. **70**,3339(1993)

这样得到归一化常数$A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}J}$.显然,关于$J_{ij}=0$对称的高斯分布必然使得J_{ij}的平均值为零,即$\overline{J}_{ij}=\int_{-\infty}^{\infty}dJ_{ij}P(J_{ij})J_{ij}=0$,而$J_{ij}$的平方平均值(方差)为

$$\overline{J_{ij}^2}=A\int_{-\infty}^{\infty}dJ_{ij}e^{-J_{ij}^2/(2J^2)}J_{ij}^2=A(2J^4)\frac{\partial}{\partial J^2}\int_{-\infty}^{\infty}dJ_{ij}e^{-J_{ij}^2/(2J^2)}=A(2J^4)\sqrt{2\pi}\frac{1}{2J}=J^2. \tag{18.40}$$

- 需要指出,对于物理上最重要的情况,即我们用$SU(2)$群描述的自旋算符,那么上述模型的基态会是自旋玻璃态(spin glass)而非自旋液体.

因此,为了得到自旋液体解,我们必须考虑更高的对称群.让我们写出用路径积分表示的配分函数,

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}&=\int D\hat{S}e^{-S}\\ S&=S_B+\frac{1}{\sqrt{NM}}\int d\tau\sum_{1\le i<j\le N}J_{ij}\hat{S}_i(\tau)\cdot\hat{S}_j(\tau).\end{aligned} \tag{18.41}$$

为了处理J_{ij}所包含的无序效应,我们可以考虑体系的n个全同的拷贝(replica),这样有

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}^n&=\int D\hat{S}e^{-S}\\ S&=\sum_{a=1}^{n}S_B^a+\frac{1}{\sqrt{NM}}\int d\tau\sum_{a=1}^{n}\sum_{1\le i<j\le N}J_{ij}\hat{S}_i^a(\tau)\cdot\hat{S}_j^a(\tau).\end{aligned} \tag{18.42}$$

接下来我们对J_{ij}取高斯平均,即有

$$\begin{aligned}\overline{\mathcal{Z}^n}&=\int D\hat{S}\overline{e^{-S}}=\int D\hat{S}\prod_{1\le i<j\le N}\int_{-\infty}^{\infty}P(J_{ij})e^{-S}\\ \overline{e^{-S}}&=e^{-\sum_{a=1}^{n}S_B^a}\prod_{1\le i<j\le N}\left(\int_{-\infty}^{\infty}dJ_{ij}e^{-\frac{1}{\sqrt{NM}}\int d\tau\sum_{a=1}^{n}J_{ij}\hat{S}_i^a(\tau)\cdot\hat{S}_j^a(\tau)}Ae^{-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}}\right)\\ &=e^{-\sum_{a=1}^{n}S_B^a}\prod_{1\le i<j\le N}\left(\int_{-\infty}^{\infty}dJ_{ij}Ae^{-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}}e^{\frac{1}{NM}\int d\tau\int\tau'\sum_{a,b=1}^{n}\frac{J^2}{2}\hat{S}_i^a(\tau)\cdot\hat{S}_j^a(\tau)\hat{S}_i^b(\tau')\cdot\hat{S}_j^b(\tau')}\right)\\ &=e^{-\sum_{a=1}^{n}S_B^a}e^{\frac{1}{NM}\int d\tau\int\tau'\sum_{a,b=1}^{n}\sum_{1\le i<j\le N}\frac{J^2}{2}\hat{S}_i^a(\tau)\cdot\hat{S}_j^a(\tau)\hat{S}_i^b(\tau')\cdot\hat{S}_j^b(\tau')}.\end{aligned} \tag{18.43}$$

这里利用了高斯积分公式$\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ax^2-bx}=e^{\frac{b^2}{4a}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ax^2}$.由此我们得到无序平均后的有效作用量

$$S_{eff}=\sum_{a=1}^{n}S_B^a-\frac{1}{NM}\int d\tau\int\tau'\sum_{a,b=1}^{n}\sum_{1\le i<j\le N}\frac{J^2}{2}\hat{S}_i^a(\tau)\cdot\hat{S}_j^a(\tau)\hat{S}_i^b(\tau')\cdot\hat{S}_j^b(\tau'). \tag{18.44}$$

为了进一步处理,定义如下时间依赖的平均值

$$Q^{ab}(\tau-\tau')=\sum_{j=1}^{N}\langle\hat{S}_j^a(\tau)\hat{S}_j^b(\tau')\rangle \tag{18.45}$$

这样有效作用量简化为$S_{eff}=\sum_{a=1}^{n}S_B^a-\frac{1}{NM}\int d\tau\int\tau'\sum_{a,b=1}^{n}\sum_i Q^{ab}(\tau-\tau')\frac{J^2}{2}\hat{S}_i^a(\tau)\hat{S}_i^b(\tau')$. 既然格点之间已经退耦和,那么对$i$的求和就抵消了$1/N$因子并且自旋算符的空间依赖可以忽略,我们发现

$$S_{eff}=\sum_{a=1}^{n}S_B^a-\frac{J^2}{2M}\int d\tau\int\tau'\sum_{a,b=1}^{n}Q^{ab}(\tau-\tau')\hat{S}_i^a(\tau)\hat{S}_i^b(\tau'). \tag{18.46}$$

当体系出现自旋玻璃态时,我们可以用Edwards-Anderson序参量$q_{EA}=Q^{ab}(\tau\to\infty)\neq 0$描述($a\neq b$),此时我们假设$Q^{ab}(\tau)\neq 0$且为时间无关的常数.

现在,用Schwinger玻色子表示自旋算符,即$\hat{S}_\mu^{a\nu}=\hat{b}_\mu^{a\dagger}\hat{b}^{a\nu}$,同时具有约束条件$\sum_{\mu=1}^{M}\hat{b}_\mu^{a\dagger}\hat{b}^{a\mu}=n_b$.在$M\to\infty$的极限下,我们可以只考虑玻色子的单圈图,这样玻色子的Green函数$G_B^{ab}(\tau)=\frac{1}{M}\sum_M\langle T_\tau\hat{b}^{a\mu}\hat{b}_\mu^{b\dagger}\rangle$可以表示为Dyson方程的形式:

$$G_B^{ab}(i\omega_n)=[-i\omega_n+\lambda-\Sigma_B(i\omega_n)]^{-1} \tag{18.47}$$

而自能函数$\Sigma_B(\tau)=J^2G_B^{ab}(\tau)G_B^{ab}(\tau)G_B^{ba}(-\tau)$,$\lambda$可以看作是化学势,通过调节化学势来满足约束条件$G_B^{aa}(\tau=0^-)=\kappa=n_b/M$.既然我们关心的是自旋液体类型的解,那么我们将只考虑$a=b$也就是replica对角的情况,此时所有的replica指标都可以略去不写.在低能下,如果设$G_B(\omega)\sim\omega^\mu$,那么我们发现玻色子自能$\Sigma_B(\omega)\sim\omega^{2+3\mu}$,把这个结果代入Dyson方程,那么我们发现$\lambda=\Sigma_B(\omega=0)$同时系数$\mu=-1/2$.更一般的,玻色子Green函数可以写成

$$G(z)=\frac{i\Lambda e^{-i\theta}}{\sqrt{z}}+...\mathrm{Im}z>0,\Lambda>0,0<\theta<\pi/2 \tag{18.48}$$

对于自能函数则有

$$\Sigma(z)=\Sigma(0)+i\frac{J^2\Lambda^3\sin 2\theta}{\pi}e^{i\theta}\sqrt{z}+... \tag{18.49}$$

而$\Lambda=(\pi/(J^2\sin 2\theta))^{1/4}$.这样我们发现$\theta$实际上是个未定参数,但是注意到$G_B(\tau=0^-)=\kappa$还没有用到,因此$\theta$相当于由$\kappa$确定.

当然,玻色子的Green函数并不是原始自旋模型的可观测量,但是$Q^{aa}(\tau)$所对应的局域磁化率是一类重要的可观测量.代入上面的结果可以发现,

$$\chi(\omega)\sim Q^{aa}(\omega)\sim\lim_{i\omega_n\to\omega+i0^+}\int d\tau e^{-i\omega_n\tau}G_B(\tau)G_B(-\tau)=X\left[\ln\frac{1}{|\omega|}+i\frac{\pi}{2}\mathrm{sign}(\omega)\right]+... \tag{18.50}$$

这里$X=\frac{\sqrt{\pi\sin 2\theta}}{2J}$.注意到$\theta=\pi/4$时$X$有最大值,同时数值求解方程发现$\theta>\pi/4$时数值迭代已经无法收敛,这说明$0<\theta\leq\pi/4$的区域应该对应自旋液体态而$\theta>\pi/4$物理上对应自旋玻璃态.

除了用玻色子表示自旋算符,我们也可以用费米子表示,类似于玻色子的处理,自旋液体态的费米子自能是$\Sigma_F(\tau)=-J^2n_bG_F^2(\tau)G_F(-\tau)$,这样费米子的Green函数成为

$$G_F(z)=\left(\frac{\pi}{4J^2n_b}\right)^{1/4}\frac{-1+i}{\sqrt{z}}+...,\mathrm{Im}z>0. \tag{18.51}$$

而$X = \frac{\sqrt{\pi n_b}}{2J}$,这说明费米子表示下$X$是$n_b$的单调函数,这体现了费米子表示下自旋液体的稳定性.

- 我们现在把费米子表示下的无限长程随机相互作用的Heisenberg模型称为Sachdev-Ye模型,简称SY模型.

在这个模型的基础上,Parcollet和Georges进一步考虑了SY模型的$t-J$模型版本以研究掺杂Mott自旋液体的基本性质.[14]

- 由于物理上最感兴趣的$SU(2)$情况无限长程随机Heisenberg模型基态只有自旋玻璃态,因此在$93-2015$这二十多年间关注SY模型的人并不很多. [15]

另一方面,Kitaev一直在为黑洞寻找相关的全息对偶模型.他首先尝试的也是上述无限长程随机Heisenberg模型,不过$J >> T$的强耦合所给出的自旋玻璃态并不能对应于任何黑洞物理.这样,Kitaev只能继续寻找其他模型,最后他终于在2015年找到了随机无限长程相互作用的Majorana费米子体系.这个模型最早由Kitaev在UCSB(加州大学圣巴巴拉分校)的KITP以"A simple model of quantum holography"为题目的报告上提出,其描述的是大量Majorana费米子通过随机的多体相互作用而导致的一个可解量子多体模型.[16] 这个模型可以通过常规的大N场论方法在$N \to \infty$下严格求解,并且所得的物理确实具有简单的全息对偶描述,即$(1+1)$维引力.因此,我们可以说SYK大放异彩主要归功于Kitaev所提出的Majorana费米子模型而非原先的SY模型.(这当然也源于Kitaev在理论界的巨大号召力[17])

现在,在不引起混淆的情况下,现在一般把SY模型以及Kitaev的Majorana费米子模型统称为SYK模型.当我们把SYK模型推广到晶格系统可以实现一些可解的非费米液体态. [1, 2]对于原始模型的计算细节和技术感兴趣的读者可以参考Maldacena和Stanford 的长文[3](这里的Maldacena就是提出Ads/CFT对偶的那位)

此外,SYK模型的求解表明这类模型是最大混沌的,因为其out-of-time-ordered关联函数所定义的Lyapunov指数饱和了普适的上限.即$\lambda_L = 2\pi T$.同时,普适上限的饱和也是黑洞的特性,因此这也从另一个方面暗示了该类模型与引力理论的对应.从物理上说.最大混沌意味着如果从一个随机态开始演化,那么其达到热平衡时所需要的时间是$\hbar/(k_B T)$,这个时间是独立于系统耦合的量,是普适的.

---

[14] Parcollet,Georges,Non-fermi-liquid regime of a doped Mott insulator,Phys.Rev.B **59**,5341(1999)

[15] $1993-2014$年APS网站上可以查到的引用数目为100+,而$2015-2022$年引用数为800+.

[16] http://online.kitp.ucsb.edu/online/entangled15/kitaev/;http://online.kitp.ucsb.edu/online/entangled15/kitaev2/

[17] Kitaev到目前为止已经提出了很多重要的模型,例如Kitaev一维超导模型,toric-code模型,Kitaev honeycomb模型以及SYK模型,除此之外他还提出了容错的拓扑量子计算的概念,拓扑纠缠熵的概念以及拓扑绝缘体和拓扑超导体的十重分类.

SYK模型的定义

让我们考虑如下相互作用的费米子模型,

$$\hat{H}_{SYK} = \sum_{1\leq i<j<k<l\leq N} J_{ijkl}\hat{\chi}_i\hat{\chi}_j\hat{\chi}_k\hat{\chi}_l, \tag{18.52}$$

这里$\hat{\chi}_i$是Majorana费米子算符($\hat{\chi}_i^\dagger = \hat{\chi}_i$),满足反对易关系$\{\hat{\chi}_i, \hat{\chi}_j\} = \delta_{ij}$.$N$是Majorana费米子模式的总数.上述模型也可以写成对指标i,j,k,l限制更弱的形式,即$\hat{H}_{SYK} = \frac{1}{4!}\sum_{i\neq j\neq k\neq l,i,j,k,l=1}^{N} J_{ijkl}\hat{\chi}_i\hat{\chi}_j\hat{\chi}_k\hat{\chi}_l$.SYK模型最核心的是相互作用系数$J_{ijkl}$,其代表四个Majarana费米子之间的随机相互作用,这个随机相互作用满足高斯分布:

$$P(J_{ijkl}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J(3!)^{1/2}/N^{3/2}} e^{-J_{ijkl}^2/(2J^2(3!)/N^3)}. \tag{18.53}$$

J是相互作用强度的度量,可取为正值.这样其无序平均为零($\overline{J_{ijkl}} = 0$)而平方平均不为零($\overline{J_{ijkl}^2} = \frac{3!}{N^3}J^2$).我们注意到通常的高斯分布实际上与$N$无关,即$P(J_{ijkl}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J} e^{-J_{ijkl}^2/(2J^2)}$,这样$\overline{J_{ijkl}^2} = J^2$.这里选择$N$依赖的高斯分布的原因是这样的分布在$N\to\infty$的大$N$极限下可以使得所有高阶费曼图的贡献都为零,这样我们就可以仅用二阶费曼图的结果作为体系的严格解.这是SYK模型可以精确求解的基本原因.

- 由于相互作用涉及四个Majorana费米子模式,因而这个模型也被称为SYK_4模型,更一般的具有q个Majorana费米子模式相互作用的模型是 $\hat{H}_{SYK_q} = (i)^{\frac{q}{2}}\sum_{1\leq j_1<j_2<\ldots<j_q\leq N} J_{j_1j_2\cdots j_q}\hat{\chi}_{j_1}\hat{\chi}_{j_1}\cdots\hat{\chi}_{j_q}, \overline{J_{j_1j_2\ldots j_q}^2} = \frac{J^2(q-1)!}{N^{q-1}}$.
- 这类SYK_q模型的一个优点是我们可以解析地分析大q极限下的行为.(当然$q \ll N$)

当然,注意到SYK模型与我们所熟悉的相互作用费米子模型明显不同,一个问题是我们如何从熟悉的模型得到SYK模型呢？注意到固体系统中电子总数是守恒的,这样其哈密顿量可以写成:

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_k\hat{c}_l \tag{18.54}$$

由H的厄密性$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$可得

$$\hat{H}^\dagger = \sum_{ij} t_{ij}^*\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_i + \sum_{ijkl} V_{ijkl}^*\hat{c}_l^\dagger\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_j\hat{c}_i = \sum_{ij} t_{ji}^*\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j + \sum_{ijkl} V_{lkji}^*\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_k\hat{c}_l, \tag{18.55}$$

这样有$t_{ij} = t_{ji}^*, V_{ijkl} = V_{lkji}^*$.我们通常选择实数的$t_{ij}, V_{ijkl}$,这要求$t_{ij} = t_{ji}, V_{ijkl} = V_{lkji}$.接下来,让我们把费米子用Majorana费米子表示,即$\hat{c}_j = (\hat{\chi}_{2j} + i\hat{\chi}_{2j+1})/2$,这样可以恢复通常的反对易关系:

$$\{\hat{c}_j, \hat{c}_j^\dagger\} = 2\frac{1}{4}(\hat{\chi}_{2j}^2 + \hat{\chi}_{2j+1}^2) = 1 \tag{18.56}$$

而哈密顿量可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{4}\sum_{ij} t_{ij}(\hat{\chi}_{2i}+i\hat{\chi}_{2i+1})(\hat{\chi}_{2j}+i\hat{\chi}_{2j+1}) \\ &+ \frac{1}{16}\sum_{ijkl} V_{ijkl}(\hat{\chi}_{2i}+i\hat{\chi}_{2i+1})(\hat{\chi}_{2j}+i\hat{\chi}_{2j+1})(\hat{\chi}_{2k}+i\hat{\chi}_{2k+1})(\hat{\chi}_{2l}+i\hat{\chi}_{2l+1})\end{aligned} \tag{18.57}$$

这显然是一个比较复杂的哈密顿量.假设由于某种机制,哈密顿量中只保留偶数格点的费米子,那么上述哈密顿量简化为

$$\hat{H} = \frac{1}{8}\sum_{ij}(\overbrace{t_{ij}\hat{\chi}_{2i}\hat{\chi}_{2j}+t_{ji}\hat{\chi}_{2j}\hat{\chi}_{2i}}^{=0}) + \frac{1}{16}\sum_{ijkl} V_{ijkl}\hat{\chi}_{2i}\hat{\chi}_{2j}\hat{\chi}_{2k}\hat{\chi}_{2l}. \tag{18.58}$$

对于奇数格点的费米子也有类似的形式.当然,加入我们考虑包含奇数费米子的项,例如$\hat{\chi}_{2i+1}\hat{\chi}_{2j+1}\hat{\chi}_{2k+1}$,为了让这一项具有时间反演对称性,注意到对于无自旋费米子,时间反演变换下有$\hat{c}_j \to \hat{c}_j, i \to -i$.这样,我们发现时间反演下Majorana费米子的变换规则是

$$\hat{\chi}_{2j} \to \hat{\chi}_{2j}, \quad \hat{\chi}_{2j+1} \to -\hat{\chi}_{2j+1}. \tag{18.59}$$

因此满足时间反演对称的三次项是$i\hat{\chi}_{2i+1}\hat{\chi}_{2j+1}\hat{\chi}_{2k+1}$.

自由Majorana费米子的Green函数

现在,让我们定义Majorana费米子的虚时Green函数

$$G(\tau) = G_{ii}(\tau) = \langle T_\tau \hat{\chi}_i(\tau)\hat{\chi}_i\rangle \tag{18.60}$$

这里$\hat{\chi}_i(\tau) = e^{\tau\hat{H}}\hat{\chi}_i e^{-\tau\hat{H}}$是虚时形式中Heisenberg绘景下的算符,$T_\tau$是时序算符.当相互作用不存在时,$\hat{H}=0$,费米子的时间依赖消失($\hat{\chi}_i(\tau) = e^{\tau\cdot 0}\hat{\chi}_i e^{-\tau\cdot 0} = \hat{\chi}_i$),由此我们很容易得到自由Majorana费米子的Green函数

$$G^{(0)}(\tau) = G^{(0)}_{ii}(\tau) = \langle T_\tau\hat{\chi}_i(\tau)\hat{\chi}_i\rangle_0 = \theta(\tau)\langle\hat{\chi}_i(\tau)\hat{\chi}_i\rangle_0 - \theta(-\tau)\langle\hat{\chi}_i\hat{\chi}_i(\tau)\rangle_0 = \frac{\theta(\tau)}{2} - \frac{\theta(-\tau)}{2} = \frac{\mathrm{sign}(\tau)}{2}. \tag{18.61}$$

这里sign(x)是符号函数,当$x>0$取值为1而$x<0$时为-1.当然,对于费米子Green函数,我们要求其满足反周期边界条件$G^{(0)}(\tau+\beta) = -G(\tau)$. 更一般的,$G^{(0)}_{ij} = \langle T_\tau\chi_i(\tau)\chi_j\rangle_0 = \delta_{ij}G^{(0)}(\tau)$.接下来,做傅里叶变换可得虚频率下的自由Majorana费米子Green函数

$$G^{(0)}(\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}G^{(0)}(\tau) = \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} = \frac{1}{2}\frac{1}{i\omega_n}e^{i\omega_n\tau}|_0^\beta = \frac{1}{-i\omega_n} \tag{18.62}$$

注意这里用到了费米子虚频率$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$,这样$e^{i\omega_n\tau}|_0^\beta = -2$.

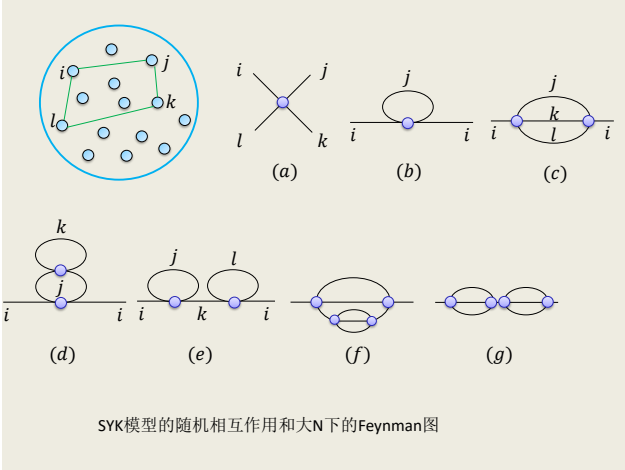


Figure 18.2: SYK模型的随机费米子相互作用,这里显示的是$q=4$,即四个Majorana费米子模式相互作用.(a)显示了无序平均前的相互作用,(b)是无序平均后的相互作用,同时也是最低阶的大N图形,(c)和(d)分别是下一阶的大N图形,其与(b)的贡献是同阶的,应同时考虑.

大N极限下的Green函数

一般而言,对于相互作用的费米子模型,我们并不能严格计算它的Green函数或者配分函数而只能通过基于微扰论的Feynman图形展开技术来做近似计算.Feynman图形技术的出发点是把相互作用体系的Green函数用无相互作用时的Green函数表示,相互作用的效果用顶角表示.对于SYK模型,我们有

$$G(\tau)=G_{ii}(\tau)=\langle T_\tau\chi_i(\tau)\chi_i\rangle=\frac{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}\chi_i(\tau)\chi_i}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}}=\frac{\langle\hat{U}(\beta)\chi_i(\tau)\chi_i\rangle_0}{\langle\hat{U}(\beta)\rangle_0} \tag{18.63}$$

这里时间演化算符$\hat{U}(\beta)=T_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau'\hat{H}(\tau')}=\sum_{n=0}^\infty\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2...d\tau_n T_\tau[\hat{H}(\tau_1)\hat{H}(\tau_2)...\hat{H}(\tau_n)]$.这样,$\hat{U}(\beta)$的零阶展开给出自由Majorana费米子Green函数$G^{(0)}(\tau)$,而一阶展开则有

$$G(\tau)\simeq\frac{\langle\chi_i(\tau)\chi_i\rangle_0-\int_0^\beta d\tau'\langle T_\tau\chi_i(\tau)\chi_i\hat{H}(\tau')\rangle_0}{1-\int_0^\beta d\tau'\langle T_\tau\hat{H}(\tau')\rangle_0} \tag{18.64}$$

利用无相互作用费米子满足Wick定理可得

$$\begin{aligned}\langle T_\tau \hat{H}(\tau')\rangle_0 &= \frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l} J_{ijkl}\langle T_\tau \hat{\chi}_i(\tau')\hat{\chi}_j(\tau')\hat{\chi}_k(\tau')\hat{\chi}_l(\tau')\rangle_0 \\ &= \frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l} J_{ijkl}(\langle T_\tau \hat{\chi}_i(\tau')\hat{\chi}_j(\tau')\rangle_0\langle T_\tau \hat{\chi}_k(\tau')\hat{\chi}_l(\tau')\rangle_0 + \langle T_\tau \hat{\chi}_i(\tau')\hat{\chi}_l(\tau')\rangle_0\langle T_\tau \hat{\chi}_j(\tau')\hat{\chi}_k(\tau')\rangle_0 \\ &- \langle T_\tau \hat{\chi}_i(\tau')\hat{\chi}_k(\tau')\rangle_0\langle T_\tau \hat{\chi}_j(\tau')\hat{\chi}_l(\tau')\rangle_0) \\ &= \frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l} J_{ijkl}(G^{(0)}_{ij}(0)G^{(0)}_{kl}(0) + G^{(0)}_{il}(0)G^{(0)}_{jk}(0) - G^{(0)}_{ik}(0)G_{jl}(0)) \\ &= \frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l} J_{ijkl}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{ik}\delta_{jl})(G^{(0)}(0))^2. \end{aligned} \tag{18.65}$$

注意到J_{ijkl}在i,j,k,l彼此不相等时才非零而上式中的δ函数必然导致两个指标相等,因此上式为零,即$\langle T_\tau \hat{H}(\tau')\rangle_0$.类似的,$\langle T_\tau \chi_i(\tau)\chi_i\hat{H}(\tau')\rangle_0$也为零.这说明我们需要至少考虑二阶修正下的Green函数:

$$G(\tau) \simeq \frac{\langle \chi_i(\tau)\chi_i\rangle_0 + \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle T_\tau \chi_i(\tau)\chi_i \hat{H}(\tau_1)\hat{H}(\tau_2)\rangle_0}{1 + \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle T_\tau \hat{H}(\tau_1)\hat{H}(\tau_2)\rangle_0}. \tag{18.66}$$

让我们直接计算分子$\langle T_\tau \chi_i(\tau)\chi_i\hat{H}(\tau_1)\hat{H}(\tau_2)\rangle_0$,

$$\begin{aligned}\langle T_\tau \chi_i(\tau)\chi_i\hat{H}(\tau_1)\hat{H}(\tau_2)\rangle_0 &= \frac{1}{(4!)^2}\sum_{i_1,j_1,k_1,l_1}\sum_{i_2,j_2,k_2,l_2} J_{i_1j_1k_1l_1}J_{i_2j_2k_2l_2} \\ &\times \langle T_\tau \chi_i(\tau)\hat{\chi}_{i_1}(\tau_1)\hat{\chi}_{j_1}(\tau_1)\hat{\chi}_{k_1}(\tau_1)\hat{\chi}_{l_1}(\tau_1)\hat{\chi}_{i_2}(\tau_2)\hat{\chi}_{j_2}(\tau_2)\hat{\chi}_{k_2}(\tau_2)\hat{\chi}_{l_2}(\tau_2)\chi_i\rangle_0. \end{aligned}$$

这样将会出现两类项,一类是所谓的非联通图对应的项,它们将会和分母部分抵消而剩下的就是连通图部分.为了方便表示,可以引入Feynman图像表示,也就是用实线代表Green函数$G^{(0)}$,用图18.2(a)代表相互作用顶角,其对应的数值因子是$-\frac{J_{ijkl}}{4!}$,i,j,k,l四个指标对应四条腿.任意连接图 18.2(a)的两条腿可得图18.2(b),这实际上就是一阶展开时的Green函数.对于$\frac{1}{2}\langle T_\tau \chi_i(\tau)\chi_i\hat{H}(\tau_1)\hat{H}(\tau_2)\rangle_0$所对应的二阶修正Green函数,其连通图所对应的图形表示是图18.2(c)(d)(e).这三类图形可以看作是两个图18.2(a)相互连接的产物.显然,图18.2(c)(d)(e)中非零的仅有图18.2(c),而后两个图形由于指标出现相同而为零.

对于图18.2(c),我们可以写出它对应的表达式,

$$G^{(2)}(\tau) = \frac{1}{2}\int d\tau_1 d\tau_2 G^{(0)}(\tau-\tau_1)\frac{1}{(4!)^2}\times 4\times 2\times 4!\sum_{jkl} J^2_{ijkl}(G^{(0)}(\tau_1-\tau_2))^3 G^{(0)}(\tau_2-0) \tag{18.67}$$

这里的4因子是因为我们在顶角图18.2(a)中选择其中一个指标作为固定的i指标,这样的选择方式有4种,2因子是因为τ_1,τ_2可以互相交换,这个因子自然抵消了指数展开的1/2因子.4!因子是i,j,k,l的排列数.或者说4×4因子也而可以理解为在顶角图18.2(a)中任意选一个脚有四种选择,然后这个脚与另一个顶角结合有四

种方式,接下来两个图之间脚之间结合方式有三种,最后剩下的脚结合方式有两种,这样就有$4\times 4!$.我们在接下来对J_{ijkl}^2 取无序平均,即有

$$\begin{aligned}\overline{G^{(2)}(\tau)} &= \int d\tau_1 d\tau_2 G^{(0)}(\tau-\tau_1)\frac{1}{(4!)^2}\times 4\times 4!\sum_{jkl}\overline{J_{ijkl}^2}(G^{(0)}(\tau_1-\tau_2))^3 G^{(0)}(\tau_2-0)\\ &= \int d\tau_1 d\tau_2 G^{(0)}(\tau-\tau_1)\frac{1}{(4!)^2}\times 4\times\frac{3!}{N^3}\times 4!J^2\sum_{jkl}(G^{(0)}(\tau_1-\tau_2))^3 G^{(0)}(\tau_2-0)\\ &= \int d\tau_1 d\tau_2 G^{(0)}(\tau-\tau_1)\frac{J^2}{N^3}\sum_{jkl}(G^{(0)}(\tau_1-\tau_2))^3 G^{(0)}(\tau_2-0)\end{aligned}$$

对于固定的i,对j,k,l求和的次数分别是$N-1,N-2,N-3$,这样总的求和因子是这三个数相乘,即$(N-1)(N-2)(N-3)=N^3-6N^2+11N-6$,在大$N$极限下就是$N^3$.这样我们发现无序平均后的二阶Green函数是

$$\overline{G^{(2)}(\tau)}=\int d\tau_1 d\tau_2 G^{(0)}(\tau-\tau_1)J^2(G^{(0)}(\tau_1-\tau_2))^3 G^{(0)}(\tau_2-0)$$

当然,我们可以把$\overline{G^{(2)}(\tau)}$两端的Green函数去掉,这样剩下的部分就是二阶展开下的自能,即有

$$\Sigma^{(2)}(\tau)=J^2(G^{(0)}(\tau))^3. \tag{18.68}$$

进一步,我们可以把Green函数展开到J_{ijkl}的三阶或者四阶项,三阶项对无序平均后并没有产生新的连通图,($\overline{J_{ijkl}^3}=0$)而四阶项主要是图 18.2(f)和(g),它们与(c)是同量级的($\mathcal{O}(1)$),这两个图形中后者相当于二阶图形的重复,在自能的定义中已经包含,而前者相当于对每一个内线的费米子都要考虑一次相互作用的修正,对于所有这类的求和相当于把(c)图里面的每一个内线费米子换成完全相互作用修正后的Green函数G.而其他类型的图形的贡献有$1/N^{3/2}$或者更强的抑制,因此在大N极限下只需要考虑图18.2(c)的图形并把里面的自由Green函数替换为完全Green函数(这叫做自洽图形求和),这样大N极限下的自能是

$$\boxed{\Sigma(\tau)=J^2G^3(\tau)} \tag{18.69}$$

利用Majorana费米子Green函数的定义和虚时上的平移不变性,可以证明$G(-\tau)=-G(\tau)$,这样也可以写成$\Sigma(\tau)=-J^2G^2(\tau)G(-\tau)$.最后, 利用自能并结合Dyson方程可得到完整的Green函数

$$\boxed{G(\omega_n)=\frac{1}{G^{(0)}(\omega_n)-\Sigma(\omega_n)}=\frac{1}{-i\omega_n-\Sigma(\omega_n)}} \tag{18.70}$$

- 在大N极限下,也就是我们考虑Majorana费米子模式数$N\to\infty$时,系统是可解的,这意味着最简单的自洽图形求和给出$N\to\infty$的所有Feynman图贡献.(在Feynman图形微扰理论中这对应于non-crossing近似,即NCA)
- SYK$_q$模型的自能推广为$\Sigma(\tau)=J^2G^{q-1}(\tau)$.

在得到自能与Green函数的具体依赖后,对于给定的J和β就可以通过求解两个自洽方程得到求Green函数的数值解.

弱耦合极限下的Green函数

在完整的数值求解之前,我们先审视两个极限,即弱耦合极限($J\beta \ll 1$)和强耦合极限$J\beta \gg 1$,在这里讨论弱耦合的情况.

在弱耦合时,自能修正相对而言是个小量因而可以只考虑低阶微扰的效应,简单而言就是把自能$\Sigma(\tau)$ 中的完全Green函数用自由Green函数来代替,这相当于图18.2(c),这样有

$$\Sigma(\tau) \simeq J^2(G^{(0)}(\tau))^3 = \frac{J^2}{8}\text{sign}(\tau) \tag{18.71}$$

傅里叶变换可得

$$\Sigma(\omega_n) \simeq \frac{J^2}{4}\frac{1}{-i\omega_n} \tag{18.72}$$

这样弱耦合时的Majorana费米子Green函数是

$$G(\omega_n) \simeq \frac{1}{-i\omega_n - \frac{J^2}{4}\frac{1}{-i\omega_n}} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{-i\omega_n + \frac{J}{2}} + \frac{1}{-i\omega_n - \frac{J}{2}}\right) \tag{18.73}$$

这样对应的谱函数是$A(\omega) = \frac{1}{\pi}\text{Im}G(i\omega_n \to \omega + i0^+) = \frac{1}{2}\left(\delta(\omega - \frac{J}{2}) + \delta(\omega + \frac{J}{2})\right)$,而自由Majorana费米子情况下的谱函数是$\delta(\omega)$.也就是说相互作用使得零能的谱转移到$\pm\frac{J}{2}$,换句话说自由的Majorana费米子模式由于相互作用变成有能量的激发.

强耦合极限下的Green函数

接下来我们考虑强耦合极限,此时自能大于无相互作用部分的$-i\omega_n$,因此可以忽略这一部分,我们有

$$G(\omega_n) = -\frac{1}{\Sigma(\omega_n)} \tag{18.74}$$

同时注意到自能与Green函数之间是幂律依赖的关系$\Sigma(\tau) = J^2G^3(\tau)$,这提示我们Green函数应是频率或者时间的幂律函数,设为

$$\boxed{G(\tau) = \frac{b}{|\tau|^{2\Delta}}\text{sign}(\tau)} \tag{18.75}$$

这里b和Δ都是待定的参数,而$\text{sgn}(\tau)$反映了Green函数反对称性的要求.在直接计算之前,我们可以通过量纲分析得到Δ的取值,即

$$G(\tau) \sim \frac{1}{|\tau|^{2\Delta}} \Rightarrow \Sigma(\tau) \sim \frac{1}{|\tau|^{6\Delta}} \Rightarrow \Sigma(\omega_n) \sim \int d\tau e^{i\omega_n\tau}\Sigma(\tau) \sim \frac{1}{|\tau|^{6\Delta-1}} \sim |\omega_n|^{6\Delta-1}$$

$$\Sigma(\omega_n) \sim |\omega_n|^{6\Delta-1} \Rightarrow G(\omega_n) \sim \Sigma^{-1}(\omega_n) \sim \frac{1}{|\omega_n|^{6\Delta-1}} \Rightarrow G(\tau) \sim T\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}G(\omega) \sim |\tau|^{6\Delta-2}$$

与先前假设的Green函数形式对比可得

$$|\tau|^{6\Delta-2} = \frac{1}{|\tau|^{2\Delta}} \Rightarrow 6\Delta - 2 = -2\Delta \Rightarrow \boxed{\Delta = \frac{1}{4}} \tag{18.76}$$

这样通过简单的量纲分析我们已经得到了参数Δ或者说所谓的算符标度维数的具体取值.

当然,要得到完整的Green函数需还需要定出参数b,把假设的Green函数完整带入方程可得

$$J^2b^4\pi=\left(\frac{1}{2}-\Delta\right)\tan\pi\Delta,\qquad \Delta=\frac{1}{4} \tag{18.77}$$

这样有$b=\frac{1}{\sqrt[4]{4J^2\pi}}$,

$$G(\tau)=\frac{1}{\sqrt[4]{4J^2\pi}}\frac{1}{|\tau|^{\frac{1}{2}}}\text{sign}(\tau) \tag{18.78}$$

可以看到Green函数是时间的幂律依赖,其与自由Majorana费米子情况以及弱耦合时是很不相同的.这里用到了以下公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\tau e^{i\omega\tau}\frac{\text{sgn}(\tau)}{|\tau|^{2\Delta}}=i2^{1-2\Delta}\sqrt{\pi}\frac{\Gamma(1-\Delta)}{\Gamma(\frac{1}{2}+\Delta)}|\omega|^{2\Delta-1}\text{sgn}(\omega) \tag{18.79}$$

这里的ω相当于零温极限下的ω_n.

- 非平凡的幂律行为通常意味着非平凡的物态,当然这里空间相当于是零维的,因此没有真正的非费米液体行为.
- 当有空间维度时,系统的大N强耦合解将会对应非费米液体态.[1, 2]
- 对SYK_q模型有$\Delta=1/q, J^2b^q\pi=(1/2-\Delta)\tan(\pi\Delta)$.

利用傅里叶变换可以得到频率空间的Green函数

$$G(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}d\tau e^{i\omega\tau}\frac{\pi^{-1/4}\text{sign}(\tau)}{\sqrt{2J|\tau|}}=\frac{i\pi^{1/4}}{\sqrt{J|\omega|}}\text{sign}(\omega) \tag{18.80}$$

为了得到相应的谱函数,我们需要解析延拓虚频Green函数至实频,对于$\omega_n>0$的部分,其解析延拓为$i\omega_n\to\omega+i0^+$而当$\omega_n<0$的部分,其解析延拓为$i\omega_n\to\omega-i0^+$,我们发现

$$\begin{aligned}
G(\omega) &= \lim_{i\omega_n\to\omega+i0^+}\frac{i\pi^{1/4}}{\sqrt{J(-i)(i\omega_n)}}\theta(\omega_n)-\lim_{i\omega_n\to\omega-i0^+}\frac{i\pi^{1/4}}{\sqrt{Ji(i\omega_n)}}\theta(-\omega_n)\\
&= \frac{i\pi^{1/4}}{\sqrt{J(-i\omega)}}\theta(\omega)-\frac{i\pi^{1/4}}{\sqrt{J(i\omega)}}\theta(-\omega)\\
&= \frac{i\pi^{1/4}e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{J\omega}}\theta(\omega)-\frac{i\pi^{1/4}e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{J(-\omega)}}\theta(-\omega)\\
&= \frac{i\pi^{1/4}e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{J|\omega|}}\text{sign}(\omega).
\end{aligned} \tag{18.81}$$

这样我们发现谱函数是

$$\boxed{A(\omega)=\frac{1}{\pi}\text{Im}G(\omega)=\frac{\pi^{-3/4}}{\sqrt{2J|\omega|}}} \tag{18.82}$$

此外,我们发现强耦合的Green函数具有标度不变性,即如果令$\tau' = \lambda\tau$代入Green函数可得

$$G(\lambda\tau) = \lambda^{-2\Delta}\frac{b}{|\tau|^{2\Delta}}\mathrm{sgn}(\tau) = \lambda^{-2\Delta}G(\tau) \tag{18.83}$$

回忆先前关于临界现象标度理论的讨论,那么这里$G(\tau)$就是一个标度函数,具有标度不变性,在SYK模型的中是重参数化(reparametrization)或者共形不变性的特殊形式.具体而言,$G(\omega_n) = -\frac{1}{\Sigma(\omega_n)}$可以做傅里叶变换改写为

$$\int d\tau_1 G(\tau-\tau_1)\Sigma(\tau_1-\tau') = -\delta(\tau-\tau'). \tag{18.84}$$

再代入$\Sigma(\tau) = J^2G^3(\tau)$有

$$J^2\int d\tau_1 G(\tau-\tau_1)G^3(\tau_1-\tau') = -\delta(\tau-\tau'). \tag{18.85}$$

重参数化不变性指的是在下列变换下上面的积分方程(Green函数自洽方程)形式不变

$$\begin{aligned}&\sigma = f(\tau)\\ &G(\tau_1,\tau_2) = |\partial_1 f(\tau_1)\partial_2 f(\tau_2)|^{1/4}G(\sigma_1,\sigma_2)\end{aligned} \tag{18.86}$$

而$\sigma = f(\tau)$这个变换就是重新参数化的过程,注意f是任意的函数,因而说明系统在低能强耦合下具有层展的对称性.

如果考虑有限温度的Green函数,可设$f(\tau) = e^{2\pi i\tau/\beta}$,这样就实现了把$\tau$从$(\infty,\infty)$限制到$[0,\beta]$.这样有

$$\boxed{G(\tau) = b\left[\frac{\pi}{\beta\sin\frac{\pi\tau}{\beta}}\right]^{2\Delta}\mathrm{sgn}(\tau)} \tag{18.87}$$

- 这说明系统达到平衡所需的时间$\tau_{eq}\sim\frac{\hbar}{k_BT}$.
- 当前系统能量并不能写成激发叠加的形式,即$E\neq\sum_\alpha\varepsilon_\alpha n_\alpha+\sum_{\alpha\beta}F_{\alpha\beta}n_\alpha n_\beta$. 换句话说,SYK模型中并没有定义良好的准粒子.
- 理论研究表明,无准粒子的量子多体系统能最快到达热平衡,其到达平衡所需时间满足$\tau_{eq} > C\frac{\hbar}{k_BT}$.
- 对于经典系统,τ_{eq}并没有限制,因此可以尽可能快得达到平衡.

最后,通过解析延拓$\tau > 0(\tau\to it+0^+)$的虚时Green函数可得实时Green函数

$$\langle\hat{\chi}(t)\hat{\chi}(0)\rangle = b\left[\frac{\pi}{\beta\sin\frac{\pi(it+0^+)}{\beta}}\right]^{2\Delta} = b\left[\frac{\pi}{\beta\sinh\frac{\pi(t)}{\beta}}\right]^{2\Delta}e^{-i\pi\Delta} \tag{18.88}$$

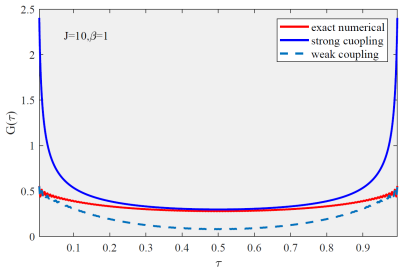


Figure 18.3: SYK_4模型的数值解和强弱耦合解的比较.

而对于$\tau<0$部分,可以令$\tilde{\tau}=-\tau=it+0^+$代入虚实Green函数中,我们得到

$$\langle\hat{\chi}(0)\hat{\chi}(t)\rangle=b\left[\frac{\pi}{\beta\sin\frac{\pi(-it-0^+)}{\beta}}\right]^{2\Delta}=b\left[\frac{\pi}{\beta\sinh\frac{\pi(t)}{\beta}}\right]^{2\Delta}e^{i\pi\Delta} \tag{18.89}$$

我们知道实时推迟Green函数定义为$G^R=\theta(t)\langle\hat{\chi}(t)\hat{\chi}(0)+\hat{\chi}(0)\hat{\chi}(t)\rangle$, 那么有

$$\boxed{G^R(t)=2b\cos(\pi\Delta)\left[\frac{\pi}{\beta\sinh\frac{\pi\tau}{\beta}}\right]^{2\Delta}\theta(t)} \tag{18.90}$$

Green函数的数值解

在图18.3中我们给出了$J=10,\beta=1$情况下虚时Green函数的数值解以及近似解析解的比较.可以看到在长时极限下,强耦合解与数值解符合的很好,而在短时极限,弱耦合解与数值解符合更好.这说明低能的物理主要是强耦合的而高能物理由弱耦合解(不动点)控制.随着能量尺度降低或者时间演化的增长,系统逐渐由近自由的Majorana费米子系统过渡到强耦合的非准粒子系统,也就是没有明确Majorana费米子模式存在的系统.注意到短时极限下Green函数有振荡行为,这是数值计算频率求和的误差导致的,在严格的理论中应是光滑的曲线.

- SYK模型可以提供一个低能下的强耦合非准粒子系统,如果把Majorana费米子换成复费米子就可得一类特殊的非费米液体.

额外的二次型相互作用

注意到在标准的SYK模型中并没有常见的两费米子项,但是这类项在更为实际的模型中总是存在的,所以我们这里考虑这一项的修正,即

$$\hat{H}_{SYK_2}=i\sum_{i<j}K_{ij}\hat{\chi}_i\hat{\chi}_j,\quad\overline{K_{ij}^2}=\frac{K^2}{N} \tag{18.91}$$

显然这一项就是只有两个Majorana费米子模式同时相互作用的SYK_2模型,因此我们立即得到其自能是$\Sigma(\tau)=K^2G(\tau)$,这样就有$\Sigma(\omega_n)=K^2G(\omega_n)$,Majorana费米子Green函数是

$$G(\omega_n)=\frac{1}{-i\omega_n-K^2G(\omega_n)} \tag{18.92}$$

求解以上方程可得

$$G(\omega_n)=\frac{2}{-i\omega_n-i\mathrm{sgn}(\omega_n)\sqrt{\omega_n^2+4K^2}} \tag{18.93}$$

(似乎$G(\omega_n)=\frac{-i\omega_n\pm i\sqrt{\omega_n^2+4K^2}}{2K^2}$也是方程的解,并且其解析延拓就是想要的结果)相应的谱函数是$A(\omega)=\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(i\omega_n\to\omega+i0^+)=\frac{1}{\pi K}\sqrt{1-(\frac{\omega}{2K})^2}$.

- 注意到谱函数显示出关于频率的半圆形分布,因此也称为无规矩阵的半圆律.
- 当二次和四次相互作用都存在时,我们有$\Sigma(\tau)=K^2G(\tau)+J^2G^3(\tau)$.

热力学熵

对于SYK模型,利用路径积分方法积掉Majorana费米子并引入相应的Green函数和自能函数可得其配分函数为

$$\mathcal{Z}=e^{-\beta\mathcal{F}}=\int\mathcal{D}\widetilde{G}\mathcal{D}\widetilde{\Sigma}e^{-NS}$$

$$S=-\ln\mathrm{Pf}(\partial_\tau-\widetilde{\Sigma})-\frac{1}{2}\int d\tau_1\int d\tau_2\left[\widetilde{\Sigma}(\tau_1,\tau_2)\widetilde{G}(\tau_1,\tau_2)-\frac{J^2}{q}\left(\widetilde{G}(\tau_1,\tau_2)\right)^q\right]$$

在这里,$\widetilde{G},\widetilde{\Sigma}$相当于是路径积分时为了把费米子化为可积分的二次型而引入的辅助场,是动力学变量因而需要对其所有可能取值进行积分.在大N极限下,路径积分由鞍点给出,也就是使得作用量S取极值的$\widetilde{G},\widetilde{\Sigma}$主导积分.这样可得我们先前用Feynman图得到的自洽方程.注意到$\mathrm{Pf}(...)=\sqrt{\mathrm{Det}(...)}$,而对$\partial_\tau-\widetilde{\Sigma}$求行列式实际上就是对$G^{-1}$求所有本征值之和,这在频率空间自然转化为对所有频率的$G^{-1}(\omega_n)$的求和.同时,注意到时间平移不变性,后面的双重积分可以化为单重积分,这样大N(鞍点)下有

$$\frac{\beta\mathcal{F}}{N}=S=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ln(G)-\frac{\beta}{2}\int d\tau\left[\Sigma(\tau)G(\tau)-\frac{J^2}{q}\left(G(\tau)\right)^q\right] \tag{18.94}$$

代入$\Sigma(\tau)=J^2G(\tau)^{q-1}$可得自由能密度

$$\begin{aligned}\frac{\mathcal{F}}{N} &= S=\frac{1}{2}\left[T\mathrm{Tr}\ln(G)-\frac{q-1}{q}\int d\tau\Sigma(\tau)G(\tau)\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[T\sum_{\omega_n}\ln(G(\omega_n))-\frac{q-1}{q}\sum_{\omega_n}\Sigma(\omega_n)G(\omega_n)\right]\end{aligned}$$

为了避免对Green函数取对数后频率求和的奇异性,可以人为地添加自由电子的贡献,即

$$\begin{aligned}\frac{\mathcal{F}}{N} &= \frac{1}{2}\left[T\sum_{\omega_n}\ln(G(\omega_n))+T\sum_{\omega_n}\ln(G^{(0)})-T\sum_{\omega_n}\ln(G^{(0)})-\frac{q-1}{q}\sum_{\omega_n}\Sigma(\omega_n)G(\omega_n)\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[T\sum_{\omega_n}\ln(G(\omega_n))-T\ln 2-T\sum_{\omega_n}\ln(-1/(i\omega_n))-\frac{q-1}{q}\sum_{\omega_n}\Sigma(\omega_n)G(\omega_n)\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[-T\ln 2+T\sum_{\omega_n}\ln(-i\omega_n G(\omega_n))-\frac{q-1}{q}\sum_{\omega_n}\Sigma(\omega_n)G(\omega_n)\right] \qquad (18.95)\end{aligned}$$

这里我们利用了自由费米子的结果$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}_0}=2=\mathrm{Det}((G^{(0)})^{-1})\Rightarrow\sum_{\omega_n}\ln(G^{(0)})=-\ln 2$。

对所有虚频率数值求和就可以得到系统的自由能密度$\mathcal{F}/N$,因而所有的热力学量都可以容易地得到.

一般而言,在低温下有

$$\beta F=\beta E_0-S_0-\frac{c}{2\beta}+... \qquad (18.96)$$

这里E_0是基态能,S_0是零温熵($S_0\simeq 0.24N$),c/β是热容.对于零温熵有

$$\frac{S_0}{N}=\frac{1}{2}\ln 2-\int_0^{\Delta}dx\pi\left(\frac{1}{2}-x\right)\tan(\pi x)\sim\frac{1}{2}\ln 2-\frac{\pi^2}{4q^2}+... \qquad (18.97)$$

而比热系数是

$$\frac{c}{2}=2\pi^2\frac{1}{4q^2}\frac{N}{J\sqrt{\frac{q}{2^{q-1}}}} \qquad (18.98)$$

对于$q=4$有$c\simeq 0.396N/J$.

在高温极限下($T\to\infty$),系统的动能和相互作用都不起作用,此时熵由Majorana费米子的$\sqrt{2}$个单粒子态主导,即

$$\frac{S(T\to\infty)}{N}=\ln\sqrt{2}=\frac{1}{2}\ln 2\simeq 0.3466 \qquad (18.99)$$

在图18.4中,我们给出了SYK_4模型的热力学熵随温度变化的情况.在低温时接近$S_0/N=0.24$, 在高温极限下接近$S(T\to\infty)/N=0.35$.

out-of-time-ordered关联函数*

在SYK模型中,out-of-time-ordered关联函数定义为

$$F_{ij}(t)=\langle\hat{\chi}_i(t)\hat{\chi}_i(0)\hat{\chi}_j(t)\hat{\chi}_j(0)\rangle \qquad (18.100)$$

在大N极限下可以求得[5]

$$1-F_{ij}(t)\sim\frac{J}{NT}e^{\lambda_L t}=\frac{J}{NT}e^{\frac{2\pi t}{T}} \qquad (18.101)$$

这里λ_L就是Lyapunov指数,注意到$\lambda_L=2\pi T$,饱和了普适的上限.

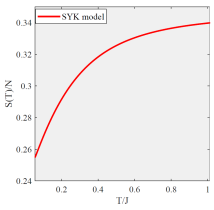


Figure 18.4: SYK_4模型的热力学熵.

与黑洞的对应*

关于黑洞,

- 黑洞有热力学熵且具有温度$T=\frac{\hbar c^3}{8\pi GMk_B}$.
- 黑洞熵正比于其视界包围的面积.
- 黑洞弛豫到热平衡所需时间是$\sim\frac{\hbar}{k_BT}$.

在SYK模型中,我们可以定义如下复合算符

$$\mathcal{O}_j=\sum_{klm}J_{jklm}\hat{\chi}_k\hat{\chi}_m\hat{\chi}_m. \tag{18.102}$$

由于SYK模型可以看作是一个$0+1$维的体系,因此其若存在全息对偶,那么它的对应应该是$1+1$维时空的引力系统.注意到$1+1$维AdS时空的黑洞解可以有以下形式,

$$ds^2=-f(r)dt^2+\frac{dr^2}{f(r)},\qquad f(r)=\frac{r(r-a)}{R^2}. \tag{18.103}$$

这样黑洞的视界面在$r=a$处.在这个黑洞背景下的Majorana费米子$\psi=(\psi_L(x,t),\psi_R(x,t))^T\sim r^{-\Delta}\mathcal{O}(t)$.SYK模型中的重参数化对称(一维共形对称)对应$AdS_2$时空的共形对称性.

- 粗略的说,$(0+1)$维SYK模型对应AdS_2时空中的黑洞.当然,严格说SYK模型对应的引力描述是所谓的二维dilaton引力,即Jackiw-Teitelboim引力.[18]

[18]相关的简要介绍可以参考[Trunin,Pedagogical introduction to SYK model and 2D Dilaton Gravity,arXiv:2002.12187]

复费米子的SYK模型:属于Sachdev的快乐

在讨论完Majoran费米子的SYK模型后,这一部分讨论复费米子的SYK模型.复费米子的SYK 模型最早来源于研究量子自旋液体的随机Heisenberg模型.[**?**, **?**]其基本形式如下:[4]

$$\hat{H}=\frac{1}{(2N)^{3/2}}\sum_{i,j,k,l=1}^{N}U_{ij;kl}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_k\hat{c}_l-\mu\sum_{j=1}^{N}\hat{c}_j^\dagger\hat{c}_j \tag{18.104}$$

这里复费米子满足标准的反对易关系$\{\hat{c}_j,\hat{c}_{j'}^\dagger\}=\delta_{jj'}$,$\mu$是化学势代表费米子系统的粒子数守恒.相互作用$U_{ij;kl}$ 满足$U_{ij;kl}=U_{kl;ij}=-U_{ji;kl}=-U_{ij;lk}$并且其无序平均为零,而平方平均为$\overline{U_{ij;kl}^2}=U^2$.在路径积分形式下有

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}&=\int\mathcal{D}c e^{-S_0[c]-S_U[c]}\\ S_0[c]&=\int d\tau\sum_j c_j^\dagger(\partial_\tau-\mu)c_j\\ S_U[c]&=\int d\tau\frac{1}{(2N)^{\frac{3}{2}}}\sum_{ijkl}U_{ij;kl}c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l\end{aligned} \tag{18.105}$$

- 与Majorana费米子的SYK模型不同,复费米子模型中费米子总数是守恒量,这说明后者出现在一般凝聚态系统中,而前者主要出现在超导系统.

为了处理SYK型相互作用$U_{ij;kl}$,我们需要对它的概率分布做平均.严格地说,这需要用replicas技巧.然而从先前的SYK模型研究来看,感兴趣的物理可以通过仅仅对一个复制样本的的平均来实现,也就是可以直接对配分函数求平均,这样我们就直接研究配分函数$\mathcal{Z}$.

现在,我们来实现对$U_{ij;kl}$的无序平均,引入$U_{ij;kl}$的概率分布函数$P(U_{ij;kl})$,那么根据开始的假设有$\overline{U_{ij;kl}}=\frac{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})U_{ij;kl}}{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})}=0,\overline{U_{ij;kl}^2}=\frac{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})U_{ij;kl}^2}{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})}=U^2$

$$\begin{aligned}\overline{\mathcal{Z}}&=\frac{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})\int\mathcal{D}c e^{-S_0[c]-S_U[c]}}{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})}\\ &=\int\mathcal{D}c e^{-S_0[c]}\left[1-\frac{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})S_U[c]}{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})}+\frac{1}{2}\frac{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})S_U^2[c]}{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})}+...\right]\end{aligned}$$

显然关于$S_U[c]$的一阶项在无序平均下为零,而二阶项为

$$\frac{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})S_U^2[c]}{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})}=\int d\tau\int d\tau'\frac{1}{(2N)^3}\sum_{ijkl,i'j'k'l'}\overline{U_{ij;kl}U_{i'j';k'l'}}c_i^\dagger(\tau)c_j^\dagger(\tau)c_k(\tau)c_l(\tau)c_{i'}^\dagger(\tau')c_{j'}^\dagger(\tau')c_{k'}(\tau')c_{l'}(\tau')$$

结合$U_{ij;kl}=U_{kl;ij}=-U_{ji;kl}=-U_{ij;lk}$以及Grassman数的反对易特性,我们发现在24种$ijkl,i'j'k'l'$可能的组合中只有4种有贡献,(不考虑配对的可能性)即$U_{i'j';k'l'}\to U_{kl;ij},U_{kl;ji},U_{lk;ij},U_{lk;ji}$,把费米子排好序后有

$$\frac{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})S_U^2[c]}{\int dU_{ij;kl}P(U_{ij;kl})}=\int d\tau\int d\tau'\frac{4U^2}{(2N)^3}\sum_{ijkl}c_i^\dagger(\tau)c_i(\tau')c_j^\dagger(\tau)c_j(\tau')c_k^\dagger(\tau')c_k(\tau)c_l^\dagger(\tau')c_l(\tau)$$

把二次项重新指数化到配分函数中,我们得到

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}c e^{-S_0[c]-S_{int}[c]}$$
$$S_{int} = -\frac{U^2}{4N^3}\int d\tau \int d\tau' \sum_{ijkl} c_i^\dagger(\tau)c_i(\tau')c_j^\dagger(\tau)c_j(\tau')c_k^\dagger(\tau')c_k(\tau)c_l^\dagger(\tau)c_l(\tau') \tag{18.106}$$

这样我们就完成了无序平均,接下来引入$G(\tau',\tau) = \frac{1}{N}\sum_j c_j^\dagger(\tau)c_j(\tau')$, 为了让这个定义成为恒等式,我们需要在路径积分中加入δ函数

$$1 = \int \mathcal{D}G\delta\left(G(\tau',\tau) - \frac{1}{N}\sum_j c_j^\dagger(\tau)c_j(\tau')\right) = \int \mathcal{D}\Sigma\int \mathcal{D}G e^{\int d\tau\int d\tau'\Sigma(\tau,\tau')(NG(\tau',\tau)-\sum_j c_j^\dagger(\tau)c_j(\tau'))} \tag{18.107}$$

这样我们可以把无序平均后的相互作用作用量写成

$$S_{int} = -\frac{NU^2}{4}\int d\tau\int d\tau' \left(G(\tau',\tau)G(\tau,\tau')\right)^2 = -\frac{NU^2}{4}\int d\tau\int d\tau' |G(\tau',\tau)|^4$$

注意$G(\tau',\tau) = G^*(\tau,\tau')$,这样我们得到

$$\begin{aligned} S &= \int d\tau\int \tau'\left[\sum_j c_j^\dagger(\tau)\left((\partial_{\tau'}-\mu)\delta(\tau-\tau') + \Sigma(\tau,\tau')\right)c_j(\tau')\right] \\ &\quad -N\int d\tau\int d\tau'\Sigma(\tau,\tau')G(\tau',\tau) - \frac{NU^2}{4}\int d\tau\int d\tau' |G(\tau',\tau)|^4 \end{aligned}$$

积掉费米子自由度可得

$$S = -N\ln\mathrm{Det}\left((\partial_\tau-\mu)\delta(\tau-\tau') + \Sigma(\tau,\tau')\right) - N\int d\tau\int d\tau'\Sigma(\tau,\tau')G(\tau',\tau)$$
$$-\frac{NU^2}{4}\int d\tau\int d\tau' |G(\tau',\tau)|^4$$

这样有

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\Sigma\int \mathcal{D}G e^{-N\widetilde{S}}$$
$$\widetilde{S} = -\ln\mathrm{Det}\left((\partial_\tau-\mu)\delta(\tau-\tau') + \Sigma(\tau,\tau')\right) - \int d\tau\int d\tau'\Sigma(\tau,\tau')G(\tau',\tau)$$
$$-\frac{U^2}{4}\int d\tau\int d\tau' |G(\tau',\tau)|^4$$

注意到

$$\Sigma(\tau,\tau')G(\tau',\tau) = \Sigma(\tau,\tau')|G(\tau',\tau)|e^{i\theta(\tau',\tau)} \tag{18.108}$$

当我们考虑$N\to\infty$的大N极限时,配分函数由其极值路径给出,也就是使得$\widetilde{S}$ 取极值的G,Σ 决定路径积分,那么有

$$\frac{\delta\widetilde{S}}{\delta|G|} = 0 \Rightarrow \Sigma(\tau,\tau') = -Ue^{-i\theta(\tau',\tau)}|G(\tau',\tau)|^3 = -UG^2(\tau,\tau')G(\tau',\tau)$$
$$\frac{\delta\widetilde{S}}{\delta\Sigma} = 0 \Rightarrow G = \frac{-1}{\partial_\tau-\mu+\Sigma} \tag{18.109}$$

注意到系统的时空平移不变性,那么以上两式也可写为

$$\begin{aligned} G(\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma(\omega_n)} \\ \Sigma(\tau) &= -U^2 G^2(\tau) G(-\tau) \end{aligned} \tag{18.110}$$

这就是复费米子SYK模型在大N极限下的自洽方程.

Green函数

注意到自能结构与Majorana费米子SYK模型的相似性,那么Green函数的强耦合解也是频率或者虚时的幂律函数

$$G(z) = C\frac{e^{-i(\pi/4+\theta)}}{\sqrt{z}}, \quad \mathrm{Im}(z) > 0, \quad |z| \ll U, \quad T = 0 \tag{18.111}$$

这里z是复数频率,$C = (\frac{\pi}{J^2\cos 2\theta})^{1/4}$，$|\theta| < \pi/4$.傅里叶变换至虚时可得

$$G(\tau) = \begin{cases} -C\frac{\sin(\pi/4+\theta)}{\sqrt{\pi\tau}}, & \tau \ll 1/U,\ T = 0; \\ C\frac{\cos(\pi/4+\theta)}{\sqrt{-\pi\tau}}, & -\tau \ll 1/U,\ T = 0. \end{cases} \tag{18.112}$$

注意当化学势$\mu = 0$时有$\theta = 0$,此时这里的Green函数与Majorana费米子SYK模型的Green函数完全相同.而在有限温度时则有

$$G(\tau) = -C\left(\frac{\Gamma(2\Delta)\sin(\pi\Delta+\theta)}{\pi}\right) e^{-2\pi\varepsilon T\tau} \left(\frac{\pi}{\beta\sin(\pi\tau/\beta)}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad 0 < \tau < \beta \tag{18.113}$$

这里$e^{2\pi q\varepsilon} = \frac{\sin(\pi\Delta+\theta)}{\sin(\pi\Delta+\theta)}, \Delta = 1/q$ 对一般的q 都是成立的.

在弱耦合时,可以采用微扰展开的方法计算Green函数,可以发现$G = G_0 + G_1 + G_2 + ..., \Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2 + ...(G_0 = \frac{1}{i\omega_n}$ 是自由Green函数)[4]

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= J^2\frac{1}{4i\omega_n} \\ G_1 &= J^2\frac{1}{4(i\omega_n)^3} \\ \Sigma_2 &= J^4\frac{3}{16(i\omega_n)^3} \\ G_2 &= J^4\frac{1}{4(i\omega_n)^5} \end{aligned} \tag{18.114}$$

热力学

把大N极限解代入有效作用量可以得到

$$\begin{aligned} \widetilde{S} &= -\mathrm{Tr}\ln\left(-G^{-1}\right) - \beta\int d\tau\Sigma(\tau)G(-\tau) - \beta\frac{U^2}{4}\int d\tau|G(\tau)|^4 \\ &= -\mathrm{Tr}\ln\left(-G^{-1}\right) - \frac{3}{4}\beta\int d\tau\Sigma(\tau)G(-\tau) \\ &= \sum_n \ln\left(-G(\omega_n)\right) - \frac{3}{4}\beta\int d\tau\Sigma(\tau)G(-\tau) \end{aligned} \tag{18.115}$$

这样自由能密度是

$$\frac{\mathcal{F}}{N} = T\widetilde{S} = -T\ln 2 + T\sum_n \ln\left(i\omega_n G(\omega_n)\right) - \frac{3}{4}T\sum_n \Sigma(\omega_n)G(\omega_n) \quad (18.116)$$

热力学熵密度则通过$\frac{\mathcal{S}}{N} = -\frac{1}{N}\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}$可以计算得到.

在微扰论成立的弱耦合或者高温极限下,我们有[4]

$$\frac{\mathcal{S}}{N} = \ln 2 - \frac{1}{64}\left(\frac{J}{T}\right)^2 + \frac{1}{512}\left(\frac{J}{T}\right)^4 + ... \quad (18.117)$$

SYK模型与非费米液体:后Landau时代最好的玩具

文献[2]结合SYK模型的基本形式,把复费米子的SYK模型推广到晶格上,每一个格点的费米子具有SYK型随机相互作用,不同格点之间的费米子只有简单的跃迁,具有平移不变性.如果我们考虑一个能带宽度为W,相互作用强度为U的系统,那么系统会从低温的Landau费米液体过渡到高温的局域量子临界非费米液体态(费米面完全摧毁但是有良好定义的费米能),这里渡越的温度是$T\sim W^2/U$.当考虑多带时,除了低温费米液体和高温的非相干区域,在中间温度区域可以发现具有更大能带宽度的能带形成边缘费米液体而具有关联的窄能带是局域量子临界的.当考虑$q>4$的SYK相互作用,我们可以得到具有奇异自能的非费米液体和临界费米面.

单带模型

我们首先考虑单带模型,

$$\hat{H}_c=\sum_{r,r'}\sum_{j=1}^{N}(-t_{r,r'}-\mu\delta_{r,r'})\hat{c}^{\dagger}_{rj}\hat{c}_{r'j}+\frac{1}{(2N)^{3/2}}\sum_{r}\sum_{i,j,k,l=1}^{N}U_{ij;kl}\hat{c}^{\dagger}_{ri}\hat{c}^{\dagger}_{rj}\hat{c}_{rk}\hat{c}_{rl} \tag{18.118}$$

并且$\{\hat{c}_{rj},\hat{c}^{\dagger}_{r'j'}\}=\delta_{rr'}\delta_{jj'}$,$t_{r,r'},\mu$ 分别是跃迁强度和化学势,能带宽度为W.同时在动量空间有

$$\hat{H}_c=\sum_{k}\sum_{l}\varepsilon_k\hat{c}^{\dagger}_{kl}\hat{c}_{kl}+\frac{1}{(2N)^{3/2}}\sum_{kk'q}\sum_{ijkl}U_{ij;kl}\hat{c}^{\dagger}_{k+q,i}\hat{c}^{\dagger}_{k'-q,j}\hat{c}_{k',k}\hat{c}_{k,l} \tag{18.119}$$

系统的配分函数是

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}&=\int\mathcal{D}c e^{-S_0[c]-S_U[c]}\\ S_0[c]&=\int d\tau\left[\sum_{rj}c^{\dagger}_{rj}(\partial_\tau-\mu_c)c_{rj}-\sum_{rr',j}t_{rr'}(c^{\dagger}_{rj}c_{r'j}+c^{\dagger}_{r'j}c_{rj})\right]\\ S_U[c]&=\int d\tau\frac{1}{(2N)^{\frac{3}{2}}}\sum_{r}\sum_{ijkl}U_{ij;kl}c^{\dagger}_{ri}c^{\dagger}_{rj}c_{rk}c_{rl}\end{aligned} \tag{18.120}$$

那么无序平均后的配分函数是

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}&=\int\mathcal{D}c e^{-S_0[c]-S_{int}[c]}\\ S_{int}&=-\frac{U^2}{4N^3}\int d\tau\int d\tau'\sum_{r,r'}\sum_{ijkl}c^{\dagger}_{ri}(\tau)c_{r'i}(\tau')c^{\dagger}_{rj}(\tau)c_{r'j}(\tau')c^{\dagger}_{r'k}(\tau')c_{rk}(\tau)c^{\dagger}_{r'l}(\tau')c_{rl}(\tau)\end{aligned}$$

引入Green函数$G(r',\tau';r,\tau)=\frac{1}{N}\sum_j c^\dagger_{rj}(\tau)c_{r'j}(\tau')$ 和拉格朗日乘子$\Sigma(r',\tau';r,\tau)$可得

$$\begin{aligned}S &= \int d\tau\int\tau'\left[\sum_{rr',j}c^\dagger_{rj}(\tau)\left((\partial_{\tau'}\delta_{rr'}-\mu\delta_{rr'}-t_{rr'})\delta(\tau-\tau')+\Sigma(r',\tau';r,\tau)\right)c_{r'j}(\tau')\right]\\ &\quad -N\int d\tau\int d\tau'\sum_{rr'}\Sigma(r',\tau';r,\tau)G(r',\tau';r,\tau)-\frac{NU^2}{4}\int d\tau\int d\tau'\sum_{r,r'}|G(r',\tau';r,\tau)|^4\end{aligned}$$

积掉费米子自由度可得有效作用量

$$\begin{aligned}&S=-N\ln\mathrm{Det}\left((\partial_\tau+\varepsilon_k)\delta(\tau-\tau')+\Sigma\right)-N\int d\tau\int d\tau'\sum_{rr'}\Sigma(r',\tau';r,\tau)G(r',\tau';r,\tau)\\ &-\frac{NU^2}{4}\int d\tau\int d\tau'\sum_{r,r'}|G(r',\tau';r,\tau)|^4\end{aligned}$$

那么大N极限下的自洽方程是

$$\begin{aligned}G(k,\omega_n)&=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k-\Sigma(k,\omega_n)}\\ \Sigma(r,\tau)&=-U^2G^2(r,\tau)G(-r,-\tau)\end{aligned}\tag{18.121}$$

或者写成积分形式

$$\begin{aligned}G(k,\omega_n)&=\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k-\Sigma(k,\omega_n)}\\ \Sigma(k,\omega_n)&=-U^2\int_{k_1}\int_{\omega_1}G(k_1,\omega_1)\Pi(k+k_1,\omega_n+\omega_1)\\ \Pi(q,\omega_n+\Omega_n)&=\int_k\int_\omega G(k,\omega_n)G(k+q,\omega_n+\Omega_n)\end{aligned}\tag{18.122}$$

这里为了符号简单已经把对频率的求和缩写成积分,这三个方程就是单带模型在大N极限下的自洽方程.

完整求解以上的自洽方程是困难的,但是在强耦合极限下可以证明,以下的Green函数是方程的一类自洽解,具体的证明可以参考文献[2]的附录D和E,其基本精神是我们在Landau费米液体微观基础时用的自洽方法.

$$G(k,i\omega)\sim\begin{cases}\frac{Z}{i\omega-Z\tilde{\varepsilon}_k+i\alpha N^2(0)U|\omega|^2\ln\frac{1}{|\omega|}\mathrm{sgn}(\omega)}, & \omega\ll\frac{W^2}{U};\\ \frac{i\mathrm{sgn}(\omega)}{\sqrt{U|\omega|}}-B(\omega)\frac{\varepsilon_k}{U|\omega|}, & \frac{W^2}{U_c}\ll\omega\ll U.\end{cases}\tag{18.123}$$

(注意到我们已经采用了零温极限下的虚时Green函数形式)可以看到,当低能时,系统的费米子Green函数显示费米液体的特性,即自能虚部是频率的二次依赖,准粒子权重$Z>0$.而当频率升高大于特征尺度$\Omega^*=\frac{W^2}{U}$,那么我们发现Green函数主要是显示SYK模型的特点,即幂律依赖的Green函数(动量依赖很弱),这里是指数是1/2次.(回忆SYK模型的强耦合Green函数$G(\tau)\sim\frac{\mathrm{sgn}(\tau)}{|\tau|^{1/2}}$)

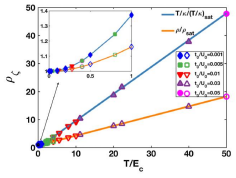


Figure 18.5: SYK晶格模型的电阻.[1]注意从低温费米液体行为$\rho \sim T^2$到高温非费米液体$\rho \sim T$的过渡.

系统的热力学可以通过计算大N极限下的作用量来得到.定性而言,我们已经知道低温(低能)下系统是费米液体,那么其热力学熵是$S(T \ll \Omega^*) = N\gamma T$.温度更高时的熵主要来自于SYK模型的贡献$S(T \gg \Omega^*) = N(S_0 + \gamma_0 T)$. 最后,高温时的光电导是$\sigma(\omega) \sim \frac{Nv^2}{U\omega}$,同时电阻是$\rho(T) \sim \frac{U}{Nv^2}T$.

对于电阻,其计算公式为$\rho = 1/\sigma_{dc}$,[8](热导率也有类似表达式)

$$\sigma_{dc} = 2\pi e^2 \int d\varepsilon \varphi(\varepsilon) \int d\omega \frac{\beta(A(\varepsilon,\omega))^2}{4\cosh^2(\omega/2T)},$$

这里$\beta = 1/T$,$A(\varepsilon,\omega) = -\mathrm{Im}G(\varepsilon_k,\omega)/\pi$,$\varphi(\varepsilon) = \frac{1}{N_s}\sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)(v_k^x)^2$. 显然,我们看到电导随温度的依赖行为主要取决于谱函数$A(\varepsilon,\omega)$的温度和频率依赖.在强耦合时,$\omega, T << U$,此时Green 函数近似为SYK模型中的形式,即具有标度形式$G(\omega,T) \sim T^\alpha \Upsilon(\omega/T)$.这样,我们发现电导近似为$\sigma_{dc} \sim T^{2\alpha}$,对于标准的SYK$_4$型相互作用,$\alpha = -1/2$,则$\sigma_{dc} \sim 1/T, \rho \sim T$,即存在线性电阻行为.

- 在SYK晶格模型基础上引入超导配对项可研究非相干金属下的超导问题.[9]

本章小结与进一步阅读

本章小结 SYK模型是研究非费米液体以及全息理论的理想模型.

本章关键词 Sachdev-Ye-Kitaev模型;自旋玻璃;Sherrington-Kirkpatrick模型;replica技术

进一步阅读 Zaanen等合著的《Holographic Duality in Condensed Matter Physics》第一章;S.Sachdev的《Quantum phase transitions》第二十一和二十二章;H.Nishimori和G.Ortiz《Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena》第八章

附录

SYK模型的对称破缺相变

尽管SYK模型描述了一类可解的非费米液体,但是与费米液体类似,在合适的相互作用作用扰动下,低温下系统会自发地破缺自身的对称性,进入更为平凡的对称破缺态.另一方面,我们也看到SYK模型具有零温熵,这也说明系统存在着大量简并态,有利于对称破缺态的产生.

文献[6, 7]考虑了SYK模型时间反演对称性破缺的可能性,这里以文献[6]中的模型为例进行简要讨论.首先,系统的模型是

$$\hat{H}=\frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l}J_{ijkl}\hat{\chi}_i\hat{\chi}_j\hat{\chi}_k\hat{\chi}_l+\frac{u}{2}\sum_{ijkl}C_{ij}C_{kl}\hat{\chi}_i\hat{\chi}_j\hat{\chi}_k\hat{\chi}_l \tag{18.124}$$

并且随机变量C_{ij}满足

$$\overline{C_{ij}}=0,\quad \overline{C_{ij}C_{kl}}=\frac{w^2}{N^2}(\delta_{ik}\delta_{jl}-\delta_{il}\delta_{jk}) \tag{18.125}$$

在时间反演变换下,

$$\hat{\chi}_j\to\hat{\chi}_j,\quad i\to -i \tag{18.126}$$

因此哈密顿量本身是时间反演不变的.

不存在SYK相互作用的情况,即$J_{ijkl}=0$

此时,哈密顿量仅包括第二项,

$$\hat{H}'=\frac{u}{2}\sum_{ijkl}C_{ij}C_{kl}\hat{\chi}_i\hat{\chi}_j\hat{\chi}_k\hat{\chi}_l \tag{18.127}$$

构造一个费米子双线性算符,或者说玻色子算符

$$\hat{b}=i\sum_{ij}C_{ij}\hat{\chi}_i\hat{\chi}_j \tag{18.128}$$

那么哈密顿量可以写成

$$\hat{H}'=-\frac{u}{2}\hat{b}^2 \tag{18.129}$$

既然$\hat{b}$与哈密顿量对易,那么系统的基态由$\hat{b}$的本征态确定.当$u<0$时,$\langle\hat{b}\rangle=0$ 是系统的基态,而当$u>0$时,$\langle\hat{b}\rangle\neq 0$的最大值决定了基态,也就是说$u>0$时的基态是$\hat{b}$的凝聚态.注意到$\hat{b}$在时间反演变化下满足$\hat{b}\to-\hat{b}$,这说明$\hat{b}$的凝聚意味着系统自发破缺了时间反演对称性.因此,我们可以把$\langle\hat{b}\rangle$看作是描述时间反演破缺的序参量.这样,我们看到$u=0$是系统发生时间反演对称破缺的相变点.当加入SYK相互作用后,$u<0$的部分相当于纯粹的SYK模型,显示非费米液体行为并且时间反演对称保持.而当$u>0$时,系统自发破缺时间反演对称,此时等效的二次型相互作用$-\frac{u}{2}\langle\hat{b}\rangle\sum_{kl}C_{kl}\hat{\chi}_k\hat{\chi}_l$会主导低能物理,进而使得系统显示无序的费米液体行为.

微扰重整化群方程

我们可以微扰地计算u项的重整化群方程,

$$\beta(u)=\frac{du}{d\ln l}=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{J}\sum_{ij}|C_{ij}|^2u^2=\frac{2w^2}{\sqrt{\pi}J}u^2 \tag{18.130}$$

可以看到$u=0$是系统的一个不稳定不动点,也就是相变点.对于初始的小正u,在标度下会不断增大,当增大到1的量级时可得

$$\widetilde{\Lambda}\sim\Lambda e^{-\frac{\sqrt{\pi}J}{2w^2u}} \tag{18.131}$$

这里Λ是裸的能量尺度,可估计为J,$\widetilde{\Lambda}$是标度后的因子,可以设定为临界温度T_c.这样我们就得到了时间反演破缺相变的临界温度

$$T_c\sim\Lambda e^{-\frac{\sqrt{\pi}J}{2w^2u}} \tag{18.132}$$

这个形式类似于BCS平均场理论中的超导相变温度.因此,通过微扰重整化我们也发现系统在$u=0$存在一个时间反演破缺相变.

大N场论处理

我们首先写出系统的作用量

$$S_{eff}=\int d\tau\frac{1}{2}\sum_i\chi_i\partial_\tau\chi_i+\frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l}[J_{ijkl}\chi_i\chi_j\chi_k\chi_l+\frac{u}{2}C_{ij}C_{kl}\chi_i\chi_j\chi_k\chi_l] \tag{18.133}$$

然后通过Hubbard-Stratonovich变换引入序参量场b,

$$S_{eff}=\int d\tau\frac{1}{2}\left(\sum_i\chi_i\partial_\tau\chi_i+\frac{u}{2}b^2-iu\sum_{ij}bC_{ij}\chi_i\chi_j\right)+\frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l}J_{ijkl}\chi_i\chi_j\chi_k\chi_l \tag{18.134}$$

对J_{ijkl},C_{ij}求无序平均并假定只考虑replica对角部分可得

$$S_{eff}=\int d\tau\frac{1}{2}\sum_i\chi_i\partial_\tau\chi_i+\frac{u}{2}b^2-u^2\frac{w^2}{N^2}\sum_i\int d\tau_1d\tau_2b(\tau_1)b(\tau_2)(\chi_i(\tau_1)\chi_i(\tau_2))^2-\frac{J^2}{8N^3}\sum_i\int d\tau_1d\tau_2(\chi_i(\tau_1)\chi_i(\tau_2))^4 \tag{18.135}$$

引入Majorana费米子的Green函数和自能,即有

$$\int D\Sigma DGe^{-\frac{N}{2}\Sigma(\tau_1,\tau_2)[G(\tau_1,\tau_2)-\frac{1}{N}\sum_i\chi_i(\tau_1)\chi_i(\tau_2)]} \tag{18.136}$$

那么有

$$\begin{aligned}S_{eff}&=-N\ln\mathrm{Pf}(\partial_\tau-\Sigma)+\int d\tau\frac{u}{2}b^2-u^2w^2\int d\tau_1d\tau_2b(\tau_1)b(\tau_2)G^2(\tau_1,\tau_2)-N\frac{J^2}{8}\int d\tau_1d\tau_2G^4(\tau_1,\tau_2)\\&\quad+N\int d\tau_1d\tau_2\frac{1}{2}\Sigma(\tau_1,\tau_2)G(\tau_1,\tau_2)\end{aligned} \tag{18.137}$$

为了进一步处理,假设$b=\sqrt{N}q$,即我们考虑序参量场的平均场处理,此时有

$$\begin{aligned} S_{eff} &= -N\ln \mathrm{Pf}(\partial_\tau-\Sigma)+Nq^2\frac{u}{2}\beta-Nu^2w^2q^2\int d\tau_1 d\tau_2 G^2(\tau_1,\tau_2)-N\frac{J^2}{8}\int d\tau_1 d\tau_2 G^4(\tau_1,\tau_2) \\ &+N\int d\tau_1 d\tau_2 \frac{1}{2}\Sigma(\tau_1,\tau_2)G(\tau_1,\tau_2) \end{aligned} \tag{18.138}$$

这样,分别对自能,Green函数以及q求极值可得如下自洽方程,

$$\begin{aligned} &G(\omega_n)=\frac{1}{-i\omega_n-\Sigma(\omega_n)} \\ &\Sigma(\tau)=J^2G^3(\tau)+4u^2w^2q^2G(\tau) \\ &\int d\tau\left[uw^2G^2(\tau)-\frac{1}{2}\delta(\tau)\right]uq=0 \end{aligned} \tag{18.139}$$

对于第三个方程,可以看到有两类解.一类是$q=0$的平凡解,这对应于纯SYK相互作用的情况,系统保持时间反演对称性.另一类是$q\neq 0$的时间反演对称破缺解,此时有

$$\int d\tau G^2(\tau)=\frac{1}{2uw^2} \tag{18.140}$$

可以看到,$u=0$是一个相变点,区分了对称破缺与非破缺态,这个结果与之前的讨论一致.而根据第二个方程可以看到系统有两个能量尺度uwq和J,因此就有两个对应的时间尺度$\tau_2^{UV}\sim\frac{1}{uwq}$和$\tau_4^{UV}\sim\frac{1}{J}$.在小$u$极限下,$\tau_2^{UV}>>\tau_4^{UV}$,因此Green函数$G(\tau)$具有SYK强耦合下的形式,那么可得

$$\int d\tau G^2(\tau)\simeq\int_{\tau_4^{UV}}^{\tau_2^{UV}}\frac{2}{\sqrt{\pi}J\tau}=\frac{2}{\sqrt{\pi}J}\ln\frac{J}{uwq}=\frac{1}{2uw^2} \tag{18.141}$$

这样我们得到

$$q=\frac{J}{uw}e^{-\frac{\sqrt{\pi}J}{4uw^2}} \tag{18.142}$$

注意到这个平均场解与重整化群估计的相变温度的相似性.

Bibliography

[1] X.-Y. Song, C.-M. Jian and L. Balents, Strongly Correlated Metal Built from Sachdev-Ye-Kitaev Models, Phys. Rev. Lett. **119**, 216601 (2017).

[2] D. Chowdhury, Y. Werman, E. Berg and T. Senthil, Translationally invariant non-Fermi liquid metals with critical Fermi-surfaces: Solvable models, Phys. Rev. X **8**, 031024 (2018).

[3] J. Maldacena and D. Stanford, Remarks on the Sachdev-Ye-Kitaev model, Phys. Rev. D **94**, 106002 (2016).

[4] W. Fu and S. Sachdev, Numerical study of fermion and boson models with infinite-range random interactions, Phys. Rev. B **94**, 035135 (2016).

[5] D. I. Pikulin and M. Franz, Black Hole on a Chip: Proposal for a Physical Realization of the Sachdev-Ye-Kitaev model in a Solid-State System, Phys. Rev. X **7**, 031006 (2017).

[6] Z. Bi, C.-M. Jian, Y.-Z. You, K. A. Pawlak, and C. Xu, Instability of the non-Fermi-liquid state of the Sachdev-Ye-Kitaev model Phys. Rev. B **95**, 205105 (2017).

[7] S.-K. Jian, Z.-Y. Xian, and H. Yao, Quantum criticality and duality in the Sachdev-Ye-Kitaev/AdS_2 chain Phys. Rev. B **97**, 205141 (2018).

[8] P. Cha, A. A. Patel, E. Gull, and E.-A. Kim, Slope invariant T-linear resistivity from local self-energy, Phys. Rev. Research **2**, 033434 (2020).

[9] A. A. Patel, M. J. Lawler and E.-A. Kim, Coherent Superconductivity with a Large Gap Ratio from Incoherent Metals Phys. Rev. Lett. **121**, 187001 (2018).

Chapter 19

展望:路在何方?

最近的发展:条条大路通罗马

在先前章节中,我们已经检视了凝聚态物理的一些主要话题,侧重点是强调电子相互作用以及拓扑所发挥的重要作用.浏览当前的关联电子系统相关的文献,可以发现几个新的增长点:

- 量子纠缠与多体物理[9, 10, 11];
- Many-body localization(多体局域化)[1];
- fracton(分形子)拓扑有序[10, 11, 12];
- 符号问题自由的量子蒙特卡洛模拟[13, 14, 15, 16];
- 机器学习研究量子多体物理[17, 18].

总体而言,这些进展反映了新的物理模型和新的计算工具与手段对于凝聚态物质系统研究的重要性.

多体局域化:想要加热也不容易

量子系统的热化

在经典统计物理中,孤立系统如果满足遍历性,那么系统在长时演化下最终会进入热平衡态(简称热态),满足相应的热分布(微正则分布),此时给定的系统能量下不同微观态出现的概率是相同的(等概率假设).这个从初态到热态的过程称为热化(thermalization).对量子多体系统,也存在类似的声明,即所谓的本征态热化假说(eigenstate thermalization hypothesis (ETH)).

考虑一个以哈密顿量$\hat{H}$描述的孤立量子多体系统.对于一个一般性的(非平衡)态$|\Psi(0)\rangle$,我们把它用$\hat{H}$的本征态$\{|\alpha\rangle\}$展开,$(\hat{H}|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle)$ 即$|\Psi(0)\rangle = \sum_\alpha A_\alpha|\alpha\rangle$,其中$A_\alpha = \langle\alpha|\Psi(0)\rangle$. 这样在幺正演化下,系统在$t$时刻的状态是

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle = \sum_\alpha A_\alpha e^{-iE_\alpha t}|\alpha\rangle. \tag{19.1}$$

此时,系统处于某一个本征态的概率是$p_\alpha = |A_\alpha|^2$,显然不满足等概率假设.

- 因此,对于一个量子系统,热化的定义需要修改为从一个物理态出发,系统可观测量的期望值在长时极限平均下等于微正则系统的统计平均值.

我们定义一个物理量$\hat{O}$的长时平均为

$$\langle\hat{O}\rangle_\infty = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T dt\langle\Psi(t)|\hat{O}|\Psi(t)\rangle = \sum_{\alpha\beta}A_\alpha^* A_\beta\langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle\lim_{T\to\infty}\int_0^T dt e^{i(E_\alpha - E_\beta)t}. \tag{19.2}$$

注意到,对于积分部分,如果$\alpha \neq \beta$,那么$T\to\infty$给出零的结果,而$\alpha = \beta$给出的结果是1.这样,长时平均下仅有对角项有贡献,因此我们得到

$$\langle\hat{O}\rangle_\infty = \sum_\alpha p_\alpha\langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle. \tag{19.3}$$

可以看到,p_α仅由初始态决定,因此当且仅当$\langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle$满足微正则系统的统计平均时,长时平均等于热系综平均,这就是量子系统的热化.这里假设$\langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle$满足微正则分布就是本征态热化假说.

- 从这里看出,即使系统初始时处于本征态,对其子系统而言,系统剩下部分相当于一个热库,子系统与热库交换粒子和能量达到热平衡.最终,系统的每一个部分彼此都达到热平衡,整个系统进入热态.

对于热化系统,其任意本征态$|\alpha\rangle$都满足ETH,那么其约化密度矩阵$\rho_A = \mathrm{Tr}_B|\alpha\rangle\langle\alpha|$必然满足热分布,这样关于$\rho_A$的纠缠熵满足传统的体积律,即纠缠熵的大小与子系统体积成正比.另一方面,对于满足ETH的本征态$\{E_\alpha\}$,如果我们定义能级间距$s_\alpha = E_{\alpha+1} - E_\alpha$,那么能级间距对应的概率密度函数$p(s)$满足Wigner-Dyson统计,即当$s\to 0$时有$p(s)\sim s^\beta, \beta = 1,2,4.$ 相反,如果系统拥有大量运动积分,那么本征能量的分布会类似随机变量,此时$p(s)$满足Poisson统计且$p(0) = 1$.

超越热化:Anderson局域化和多体局域化

那么,系统如何避免热化呢?热化的系统实际上要求遍历所有可能态,那么只要一个系统的某些态并不能被遍历或者从某些态出发只能在这些态附近运动,那么热化就无法实现.换句话说,如果出现Hilbert空间中的局域化,那么热化就不会发生.因此,单粒子系统中由无序导致的Anderson局域化实际上给我们提供了一个出发点.在1958年的文章中,Anderson指出他所建议的局域化系统为具有无穷多自由度的真实世界物理系统提供了一个例子,并且这个例子中到达平衡态是不可能的.

一个完全局域化的Anderson绝缘体(能谱中的所有单粒子态都局域化,或者说没有迁移率边)在任何温度都不能传输能量和电荷.在真实系统中,粒子之间的相互作用总是不可避免.当存在相互作用时,处于高能局域化态的粒子可以通过产生大量低能激发的方式回复能量和电荷的输运.这种退局域化效果可以理解为单粒子能级由于相互作用导致的能级展宽.

后来,Altshuler等人检视了零维量子点中相互作用诱导的激发衰变过程.[2]他们发现粒子衰变为粒子-空穴激发的过程可以理解为Fock空间中的单粒子Anderson局域化问题,并且能量低于某确定值的状态显示出局域化行为.尽管如此,这些局域化态还是类似于无相互作用的单粒子局域化,多体效应并不显著.

真正的突破来自Gornyi,Mirlin,Polyakov和Basko,Aleiner,Altshuler关于Anderson绝缘体对于短程相互作用稳定性的分析.[3, 4]他们考虑一个所有单粒子态都局域化的模型,其中局域化长度为ζ,而相互作用用无维度参数λ表示.λ由双粒子跃迁矩阵元与能级间距δ_ζ 的比值决定.利用自洽Born近似,他们发现系统的能级展宽类似于具有连通度$K \sim T/\delta_\zeta$的Anderson局域化问题.注意到这里对于温度T的依赖,这种依赖来自于更高的温度使得粒子衰减过程有更大的可能性.这样,系统在临界温度$T_c \approx K_c\delta_\zeta \approx \delta_\zeta/(\lambda \ln|\lambda|)$以下时进入局域化态.在这种情况下,单粒子能级非零衰减几率减少到零成为了任意维系统在有限程相互作用时局域化态稳定性的判据.

- 非零温度下完美的绝缘体即是多体局域化(many-body localization, MBL)相.
- 多体系统中高激发态的局域化也是为多体局域化.
- 多体局域化态可以看作是Anderson局域化在相互作用系统的推广.

当$T > T_c$时,多体本征态成为退局域化态.这样从局域化到退局域化相变发生的有限能量密度称为多体迁移率边.

多体局域化的模型研究

研究多体局域化的典型模型通常是包含无序的一维无自旋晶格费米子和自

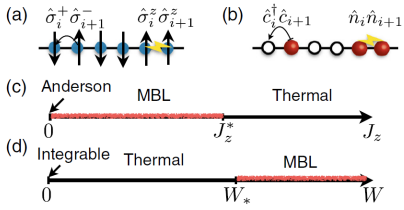


Figure 19.1: 研究多体局域化常用的晶格模型:(a)Heisenberg模型,(b)无自旋费米子模型.(c)(d)显示了XXZ 型无序Heisenberg模型从多体局域化态到热态的转变.

旋模型,后者主要包括Heisenberg和Ising模型.无序费米子模型定义如下,[5]

$$\hat{H} = t\sum_j (\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j) + V\sum_j \hat{n}_j\hat{n}_{j+1} + \sum_j \epsilon_j \hat{n}_j \tag{19.4}$$

这里ϵ_j是满足均匀分布$\epsilon_j \in [-W, W]$的随机势.对于自旋模型,我们考虑一个无序的XXZ型Heisenberg自旋链.[6]

$$\hat{H} = \frac{J_\perp}{2}\sum_j (\hat{\sigma}_j^x\hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y\hat{\sigma}_{j+1}^y) + \sum_j \left(\frac{J_z}{2}\hat{\sigma}_j^z\hat{\sigma}_{j+1}^z + h_j\hat{\sigma}_j^z\right). \tag{19.5}$$

h_j是满足均匀分布$\epsilon_j \in [-W, W]$的随机磁场项.上述两个模型可以通过Jordan-Wigner 变换联系在一起,费米子的跃迁项对应自旋系统的$J_\perp$,费米子相互作用项对应自旋z方向的耦合,而费米子部分的随机势对应自旋系统的随机外磁场.

当$J_z \to 0$时,自旋系统等价于随机势中运动的无相互作用电子气,对任意非零无序W,系统所有态都是显示Anderson局域化.对于固定的,不太大的W, 增加$J_z > J_z^*$会使系统进入退局域化.同理,固定J_z,调节W也会出现退局域化到局域化的转变.当W小于临界强度W^* 时,尽管系统整体处于退局域化态,但部分态已经出现局域化,因此W^*可以定为该系统的多体局域化迁移率边.

- 一维系统可以出现局域化态到热态的转变,这是多体局域化与单粒子Anderson局域化的重要差别.

需要指出,多体局域化实际上指的是多体系统的态或者说是本征态的一类普适行为.就像Anderson局域化可以对系统的每一个单粒子态来提,我们可以仔细考查系统每一个态是否有多体局域化行为,如果系统的每一个本征态都是局域化的,那么整个系统必定处于多体局域化.而如果出现Anderson局域化中的迁移率边,那么此时系统部分态局域化而另一些态是退局域化的.处于多体局域化的系统,因为粒子和电荷的传输依赖于不同本征态之间的跃迁,本征态的局域化导致

跃迁矩阵元为零,因此显示良好的绝缘特性.同时,既然是局域化系统,那么其子系统之间的纠缠应是短程的,根据短程相互作用的有能隙系统应具有面积律的特点,多体局域化态的纠缠熵应满足面积律.

那么如何从比较微观的层次理解多体局域化呢?一个直觉性的图像是类似Landau研究相互作用费米子系统引入的准粒子图像.[7]以无序Heisenberg模型为例,当$J_\perp = 0$时,系统的本征态是每一个格点自旋z方向构成的直积态$|\{\sigma\}\rangle = |\sigma_1\sigma_2\sigma_3...\sigma_N\rangle$, 这些态显然是局域化态.当逐渐加入$J_\perp$影响时,我们假定只要体系还处在局域化态,那么横向耦合并不严重改变系统的激发行为,这表明我们可以用只有局域耦合且仅包含重整化的$\sigma^z(\tau^z)$的模型来代表系统在多体局域化态的行为,即有

$$\hat{H}_{MBL} = \sum_i h_i\hat{\tau}_i^z + \sum_{i>j} J_{ij}\hat{\tau}_i^z\hat{\tau}_j^z + \sum_{i>j>k} h_i\hat{\tau}_i^z\hat{\tau}_j^z\hat{\tau}_k^z \tag{19.6}$$

这里$\tau_j^z = Z\sigma_j^z + ...$,$Z$相当于费米液体中的准粒子权重.因为$\tau^z$与$\hat{H}_{MBL}$ 对易,因此也称其为准局域运动积分(quasilocal integral of motion,LIOM).参数J_{ij}, J_{ijk}都是短程耦合,具有指数衰减形式.注意到,与费米液体不同,这里给出的多体局域化哈密顿量提供了所有能量尺度的正确描述,并且LIOM并不仅在低能适用,其对所有能量尺度也都成立.因此,这个图像给予我们理解多体局域化态的一个简单的出发点.

那么,在理论上如何区分热态和多体局域化态呢?

- 多体局域化态的能级间距概率分布函数满足Poisson分布,这与热态所满足的Wigner-Dyson分布是完全不同的,这也是区别两类态的重要标志.
- 多体局域化态的纠缠熵满足面积律而热态满足体积律.
- 多体局域化态中纠缠熵的时间依赖满足对数行为.
- 量子退火模拟,即考虑物理量在非平衡初态下随时间的演化.对于热态,长时下物理量会丢失初态的信息,而多体局域化态依然会保留初态的部分信息,例如图19.2.

多体局域化的实验研究

依照定义,多体局域化是某些孤立系统本征态的特性,然而实际系统总是与外界的热环境相耦合,因此在常规材料中观测多体局域化是十分困难的.相反,冷原子和离子系统相对而言与外界的耦合可以很弱,这样这类系统是观察多体局域化比较理想的候选者.

图19.4给出了冷原子系统中观测多体局域化的实验测量结果与DMRG模拟的比较.冷原子实验直接模拟的模型是具有准周期势的一维费米Hubbard模型,

$$\hat{H} = -J\sum_{j\sigma}(\hat{c}_{j\sigma}^\dagger\hat{c}_{j+1,\sigma} + \text{H.c.}) + \Delta\sum_{j\sigma}\cos(2\pi\beta j + \phi)\hat{n}_{j\sigma} + U\sum_j n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} \tag{19.7}$$

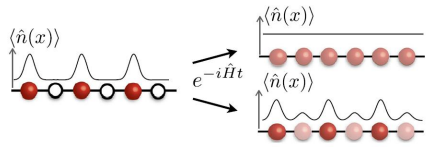


Figure 19.2: 在量子退火(quantum quench)中,晶格中的相互作用粒子首先被制备在具有非均匀分布的初态.依照幺正量子动力学的演化,热化的系统使得密度分布变得均匀.与之相反,多体局域化系统会保留初态的记忆,因此其粒子分布依旧是非均匀的.

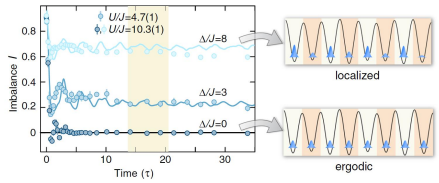


Figure 19.3: 具有准周期势的一维费米Hubbard模型的实验结果与理论比较.[8]可以看到强准周期势情况下系统进入多体局域化的倾向.

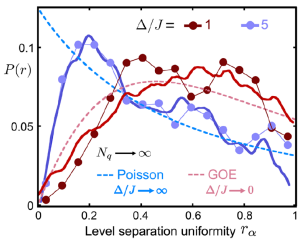


Figure 19.4: 超导电路系统中的能级间隔统计结果.[9]大无序满足Poisson统计而弱无序满足Wigner-Dyson(Gauss正交系,GOE)统计.

这里Δ代表准周期势的强度.当$U = 0$,且$\Delta/J > 2$时,系统显示准周期势导致的Anderson局域化.在实验中,系统初始态是密度波态,此时粒子主要占据偶数格点.直接测量量是粒子在奇偶格点的粒子数之差$I = \langle (N_{eve} - N_{odd})/(N_{eve} + N_{odd}) \rangle$.可以看到,随着准周期势的增加,系统从热态到多体局域化态的转变.

除了超冷原子系统,超冷离子,超导电路,核自旋链以及无序磁体$\mathrm{LiHo}_\alpha\mathrm{Y}_{1-\alpha}\mathrm{F}_4$都显示出多体局域化存在的证据.例如,图19.4显示了超导电路系统中对于能级间隔统计的实验结果.可以看到,大无序时能级间距统计基本满足Poisson统计,而弱无序满足Gauss正交系(GOE),注意GOE实际上对应Wigner-Dyson统计.因此,这个仅有九个格点两个相互作用光子的系统给出了符合理论预期的热态和局域化态的能级统计性质.

最后,我们列举多体局域化研究的一些开放性问题:

1. 多体局域化相变;
2. 多体局域化在高维空间的稳定性($d > 1$);
3. 是否多体局域化是量子系统中破坏遍历性的唯一例子.[1]

[1]可积模型[19]以及晶格规范场模型实际上都显示遍历性破缺,后者导致无序自由局域化(disorder-free localization).物理根源是Hilbert空间的分箱化,[20]这种现象在倾斜的一维Hubbard模型中已被冷原子实验所证实.[21]

非厄密与多体物理:对厄密体系说不

我们通常研究的量子多体系统用厄密的哈密顿量描述,即$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$.但是对于一个大系统当中的子系统,其有效描述所用到的哈密顿量可以是非厄密的,这是因为子系统和其他部分间的相互作用会使得子系统的状态总存在有限寿命,这种耗散行为必然要求相应的哈密顿量非厄密.一般来说,这类非厄密系统是开放量子系统研究的主要对象,例如量子光学和量子信息领域中关心的二能级子系统与环境的耦合.

对于量子多体系统,其非厄密性的研究还处于初步阶段.一种典型的研究内容是讨论准粒子系统有效哈密顿量的非厄密特性和其导致的新奇效应,比如费米弧(Fermi arc)和反常量子振荡行为.这个方面的最早尝试是MIT傅亮组的工作[22],下面我们将简要介绍其基本想法.

非厄密与费米弧

首先,考虑一个量子多体系统,其哈密顿量可以写成$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}$,这里$\hat{H}_0$一般可以理解为自由玻色子或费米子体系,而$\hat{H}_{int}$代表这些费米子或玻色子之间的相互作用.我们假定系统具有平移不变性,那么其无相互作用下的单粒子Green函数可以写成

$$\hat{G}_0(k,\omega) = (\omega - \hat{H}_0(k))^{-1} \tag{19.8}$$

而完全考虑相互作用效应的Green函数是

$$\hat{G}(k,\omega) = (\hat{G}_0^{-1}(k,\omega) - \hat{\Sigma}(k,\omega))^{-1} = (\omega - \hat{H}_0(k) - \hat{\Sigma}(k,\omega))^{-1}. \tag{19.9}$$

现在,让我们把自能$\hat{\Sigma}(k,\omega)$和$\hat{H}_0(k)$结合在一起并定义有效哈密顿量

$$\hat{H}(k,\omega) = \hat{H}_0(k) + \hat{\Sigma}(k,\omega) \tag{19.10}$$

这样系统的Green函数直接定义了这个有效哈密顿量,即$\hat{G}^{-1}(k,\omega) = \omega - \hat{H}(k,\omega)$.显然,因为自能函数$\Sigma$一般是复数值的函数,这样$\hat{H}(k,\omega)$也是复数值的.同时自能函数一般也不是厄密的,这样有效哈密顿量也不是厄密的,即$\hat{H}(k,\omega)$是非厄密的.那么$H(k,\omega)$的非厄密性会带来什么样的新物理便是我们需要关注的核心问题.

我们知道凝聚态物理的一大基石便是Landau的费米液体理论,这个理论告诉我们相互作用的费米子体系很多时候可以看成弱相互作用的准粒子的集合体,这些准粒子和原先的无相互作用费米子性质上十分相似,主要差别是有效质量等有定量上的修正.因此如果我们研究的系统可以用费米液体中的准粒子观念来描述,其性质自然是容易研究的,至于非费米液体,其本身尚未有成熟的理论框架,因此一般性的研究十分困难.[2]在这里我们假定所研究的系统可用准粒子观

[2]某些具有非费米液体特性的可解模型的非厄密特性可能是潜在的研究方向,例如SYK 和HK模型

念,那么此时,$H(k,\omega)$就是所谓的准粒子哈密顿量.这样,我们可以把自能函数写成实部和虚部,即$\hat{\Sigma}(k,\omega)=\mathrm{Re}\hat{\Sigma}(k,\omega)+i\mathrm{Im}\hat{\Sigma}(k,\omega)$.$\mathrm{Re}\hat{\Sigma}(k,\omega)$ 通产会改变系统粒子本身的色散关系而$\mathrm{Im}\hat{\Sigma}(k,\omega)$代表相互作用导致的准粒子的散射,其使得准粒子具有有限寿命,是一类耗散效应.非厄密特性实际上就来源于准粒子的散射或者说自能的虚部.

下面,让我们考虑一个简单的两带系统,其哈密顿量为

$$\hat{H}_0(k)=\begin{pmatrix} v_xk_x & v_yk_y \\ v_yk_y & -v_xk_x \end{pmatrix} \tag{19.11}$$

这描述了石墨烯中Dirac点($k_x=k_y=0$)附近电子的低能行为.现在考虑电−声相互作用对Dirac点附近电子的自能修正,该自能是对角化的且近似有如下形式

$$\hat{\Sigma}(k,\omega)=\begin{pmatrix} -i\Gamma^1(\omega) & 0 \\ 0 & -i\Gamma^2(\omega) \end{pmatrix} \tag{19.12}$$

在低频极限下,我们可以忽略上式中的频率依赖,这样系统的准粒子哈密顿量成为

$$\hat{H}(k,\omega=0)=\begin{pmatrix} v_xk_x-i\Gamma^1 & v_yk_y \\ v_yk_y & -v_xk_x-i\Gamma^2 \end{pmatrix}=(v_xk_x-i\gamma)\hat{\sigma}^z+v_yk_y\hat{\sigma}^x-i\Gamma \tag{19.13}$$

这里定义了$\gamma=\frac{\Gamma^1-\Gamma^2}{2},\Gamma=\frac{\Gamma^1+\Gamma^2}{2}$.$\hat{\sigma}^x,\hat{\sigma}^z$ 是Pauli矩阵.对角化上述哈密顿量可知系统有两支复的色散关系

$$E_\pm(k)=\pm\sqrt{(v_xk_x-i\gamma)^2+(v_yk_y)^2}-i\Gamma=\pm\sqrt{(v_xk_x)^2+(v_yk_y)^2-\gamma^2-2iv_xk_x\gamma}-i\Gamma.$$

当$\Gamma^1=\Gamma^2$即$\gamma=0$时,上述色散关系的根号部分是纯实的,系统电子的能带就由这两条实的色散$\mathrm{Re}E_\pm(k)$确定.因此从能带的角度来说,当无相互作用的两支电子所对应的散射率相同时,系统新的能带与原先相同,这是比较平凡的结果.

因此,我们假定$\Gamma^1\neq\Gamma^2$.这样,我们会发现,当$k_x=0$时有

$$E_\pm(0,k_y)=\pm\sqrt{(v_yk_y)^2-\gamma^2}-i\Gamma. \tag{19.14}$$

很显然,$(v_yk_y)^2<\gamma^2$会使得$E_\pm(0,k_y)$实部为零而虚部非零,这个条件实际上有很多k_y都可以满足$(-\gamma/v_y<k_y<\gamma/v_y)$,这些满足条件的点使得原先的零能的Dirac点成为了零能的费米弧(Fermi arc).另一方面,其他满足$(v_yk_y)^2>\gamma^2$ 的点存在能隙,即$\Delta=\mathrm{Re}(E_+(0,k_y)-E_-(0,k_y))=2\sqrt{(v_yk_y)^2-\gamma^2}\neq0$. 换句话说,原先的Dirac点位于$(k_x=0,k_y=0)$处,这是价带和导带的分界点,现在由于相互作用导致的散射效应,价带和导带的分界点扩展为一条线,这条线就是这里的费米弧.当然,这个费米弧的两个端点由$(v_yk_y)^2=\gamma^2$决定,即$k_y=\pm\gamma/v_y=\pm k_0$.

现在,让我们审视$k_x=0,k_y=\pm k_0$时的准粒子哈密顿量

$$\hat{H}(0,\pm k_0,\omega=0)=\gamma\begin{pmatrix} -i & \pm1 \\ \pm1 & i \end{pmatrix}-i\Gamma=\gamma\hat{h}-i\Gamma \tag{19.15}$$

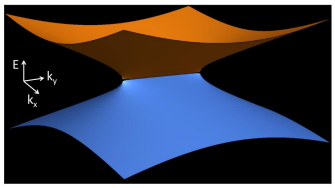


Figure 19.5: 二维Dirac半金属在两个不同寿命自能修正下的准粒子色散关系.准粒子的价带和导带不在Dirac点而是在费米弧处粘合在一起,而费米弧的端点是例外点. [22]

既然我们已经知道此时系统的本征值纯虚$-i\Gamma$,这说明矩阵$\hat{h}$的本征值必然是零,则有

$$\hat{h}|\psi\rangle = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} -i & \pm 1 \\ \pm 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \tag{19.16}$$

可以解得本征态为$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, \pm i)^T$.另一方面,注意到$\hat{h}$的行列式为零,这说明该矩阵不可逆或者说这个矩阵不可对角化(non-diagonalizable).数学上,这类不可对角化的矩阵被称为是有缺陷的(defective), 而使得相应矩阵有缺陷的$k_x = 0, k_y = \pm k_0$ 点就是所谓的缺陷的.当然注意到相应的本征值$E_\pm(0, k_y)$是关于$k_y - k_0$的根号依赖,因此这些缺陷的又称为例外点(exceptional point).

实际上,我们可以看到例外点是准粒子哈密顿量非单位矩阵部分的零能模式存在的条件,在该零模存在时相应矩阵不可对角化.同时例外点也成为了费米弧的端点,因此找到例外点就等于存在相应的费米弧.让我们考虑费米弧的温度演化.注意到散射率γ一般总是温度的函数,这样费米弧也会随着温度演化,例如高温时散射强,那么费米弧自然会比较大,而低温下散射减弱则导致费米弧逐渐减小以至于消失.

- 无能隙的石墨烯Dirac电子若具有两个不同的散射率可在Dirac点附近出现(体的)费米弧.(图19.5)

最后,我们考虑一个一般性的双带准粒子哈密顿量

$$\hat{H}(k, \omega = 0) = \begin{pmatrix} \varepsilon_k^1 - i\Gamma_k^1 & \Delta_k \\ \Delta_k^* & \varepsilon_k^2 - i\Gamma_k^2 \end{pmatrix} \tag{19.17}$$

其两支能谱为

$$E_{k\pm} = \frac{\varepsilon_k^1 + \varepsilon_k^2}{2} + i\Gamma_k \pm \sqrt{\frac{1}{4}((\varepsilon_k^1 - \varepsilon_k^2)^2 - \gamma_k^2 - 2i\gamma_k(\varepsilon_k^1 - \varepsilon_k^2)) + |\Delta_k|^2} \tag{19.18}$$

这里$2\Gamma_k = \Gamma_k^1 + \Gamma_k^2, \gamma_k = \Gamma_k^1 - \Gamma_k^2$.

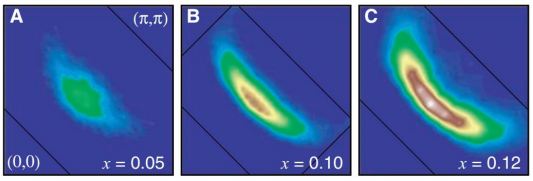


Figure 19.6: ARPES测量$Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$所得的费米面结构,类似于费米弧结构.[23]

系统的哈密顿量可改写为

$$\hat{H}(k,\omega=0)=\overbrace{\mathrm{Re}\Delta_k\hat{\sigma}^x-\mathrm{Im}\Delta_k\hat{\sigma}^y+\frac{\varepsilon_k^1-\varepsilon_k^2-i\gamma_k}{2}\hat{\sigma}^z}^{\hat{h}}+\frac{\varepsilon_k^1+\varepsilon_k^2-i2\Gamma_k}{2} \tag{19.19}$$

这样例外点可以通过前三个矩阵和$\hat{h}$的行列式为零而得到,即

$$\frac{(\varepsilon_k^1-\varepsilon_k^2-i\gamma_k)^2}{4}+|\Delta_k|^2=0 \tag{19.20}$$

这等价于两个方程

$$(\varepsilon_k^1-\varepsilon_k^2)\gamma_k=0,\quad (\varepsilon_k^1-\varepsilon_k^2)^2-\gamma_k^2+4|\Delta_k|^2=0 \tag{19.21}$$

显然非平凡解是$\varepsilon_k^1=\varepsilon_k^2,|\gamma_k|=2|\Delta_k|$.当然如果要求例外点在费米能上,那么还需要$\varepsilon_k^1=\varepsilon_k^2=0$.当这些条件都得到满足时,系统会出现由例外点作为端点的费米弧结构.一个有趣的事实是这类结构至少在形式上类似于欠掺杂铜氧化物的赝能隙态由ARPES实验观察到的费米弧.(如图19.6)[3]

非厄密与重费米子

在重费米子体系中,体系天然存在两类电子,即巡游性很强的d或者s电子(又称为传导电子)以及局域性很强的f电子.在通常的考虑下,f电子之间由强烈的局域Coulomb 排斥,这样如果把整个体系的低能激发可做是准粒子系统,那么f电子所受的散射远强于传导电子,这样只要能在不考虑相互作用时存在Dirac点,那么根据之前的讨论,系统在计入散射后就能够出现费米弧.一个实现这个要求的模型就是文献[24]中研究的d 波周期Anderson模型:

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}((\varepsilon_{kf}+E_f)\hat{f}_{k\sigma}^\dagger\hat{f}_{k\sigma}+\varepsilon_{kc}\hat{c}_{k\sigma}^\dagger\hat{c}_{k\sigma}+V_kf_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}+V_kc_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma})+U\sum_j\hat{f}_{j\uparrow}^\dagger\hat{f}_{j\uparrow}\hat{f}_{j\downarrow}^\dagger\hat{f}_{j\downarrow} \tag{19.22}$$

[3]尽管也有人认为是费米包(Fermi pocket)

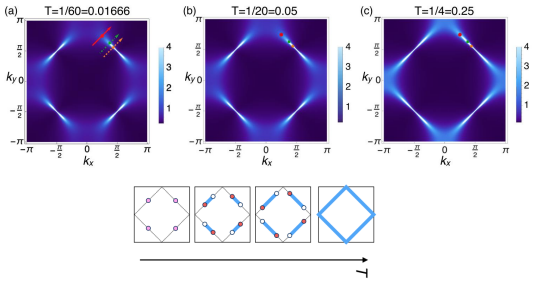


Figure 19.7: d波周期Anderson模型的费米弧结构.[24]

这里$\varepsilon_{kf} = t_f(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$和$\varepsilon_{kc} = -t_c(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$分别表示局域电子和传导电子的色散.$d$波特性体现在杂化函数$V_k$具有$d$波形式$V_k = V(\cos k_x - \cos k_y)$.最后的$U$项代表局域电子之间的Coulomb排斥能.

当$\mu = 0, E_f = -U/2$时系统具有粒子空穴对称,且处于半填满状态($n_c = n_f = 1$).若我们假设系统此时满足绝热连续性,也就是满足费米液体的特性,那么Coulomb相互作用对体系的修正可归结为一个简单的自能,即

$$\Sigma_f(k,\omega) = \frac{U}{2} - a\omega - ib\omega^2 - i\Gamma, \quad \Gamma > 0 \tag{19.23}$$

这里我们忽略了自能的动量依赖,这在直接的二阶微扰论计算或动力学平均场近似处理下都得到了证实.下标f 表明只有局域电子有自能修正.仿照之前的处理,我们可以写出系统在零频时的准粒子哈密顿量,

$$H(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{kf} - i\Gamma & V_k \\ V_k & \varepsilon_{kc} \end{pmatrix} = V_k\hat{\sigma}^x + \frac{\varepsilon_{kf} - \varepsilon_{kc} - i\Gamma}{2}\hat{\sigma}^z + \frac{\varepsilon_{kf} + \varepsilon_{kc} - i\Gamma}{2} \tag{19.24}$$

对比之前的两带模型(公式19.17)可知系统的例外点由下列方程决定

$$\frac{(\varepsilon_{kf} - \varepsilon_{kc} - i\Gamma)^2}{4} + V_k^2 = 0 \tag{19.25}$$

同时我们要求例外点在费米能上,那么有$\varepsilon_{kf} = \varepsilon_{kc} = 0$,且$\Gamma = 2|V_k|$.注意到$\Gamma = 0$时$\varepsilon_{kf} = \varepsilon_{kc} = V_k = 0$给出系统费米能处的四个Dirac点$(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$.而当存在非零的$\Gamma$时,Dirac点被劈裂为例外点,并产生相应的费米弧.图19.7 给出了动力学平均场计算所得的零能谱函数,其反应了系统的费米弧结构.当然随着温度升高,Γ逐渐增大,因此系统会从Dirac点过渡到费米弧然后费米弧扩展为原始的无相互作用费米面.

对于准粒子而言,实验上比较容易测量的是相关的谱函数$A(k,\omega)$,这可以通

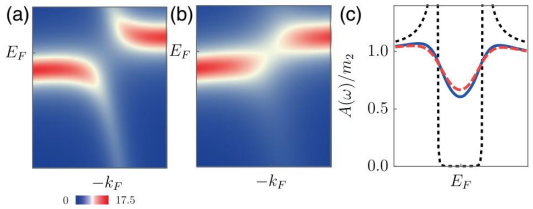


Figure 19.8: 非厄密双带模型,例如周期Anderson模型在半满时的典型谱函数和态密度.[25]

过单粒子Green函数直接得到,

$$\begin{aligned}\hat{G}(k,\omega) &= (\omega-\hat{H}(k,\omega))^{-1}=\frac{1}{(\omega-\varepsilon_{kf})(\omega-\varepsilon_{kf}+i\Gamma)-V_k^2}\begin{pmatrix}\omega-\varepsilon_{kc} & V_k\\ V_k & \omega-\varepsilon_{kf}\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix}G_{ff}(k,\omega) & G_{fc}(k,\omega)\\ G_{cf}(k,\omega) & G_{cc}(k,\omega)\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

而$A(k,\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}(G_{ff}(k,\omega)+G_{cc}(k,\omega))$.进一步对动量求和可得电子的态密度$N(\omega)=\sum_k A(k,\omega)$,这可由STM等隧穿谱技术获得.

当$\Gamma=0$时,我们知道由$\hat{G}(k,\omega)$分母为零可得两支能谱,

$$E_{k\pm}=\frac{\varepsilon_{kc}+\varepsilon_{kf}}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{kc}-\varepsilon_{kf}}{2}\right)^2+V_k^2} \tag{19.26}$$

对于s波($V_k=V$)或者p波($V_k=\sin k_x,\sin k_y$)杂化函数,两支能谱之间存在直接能隙$\Delta_d=E_{k+}-E_{k-}$和间接能隙$\Delta_{id}=\min(E_{k+})-\max(E_{k-})$,[4]而在半满情况下下能带$E_{k-}$恰好填满,这样体系成为绝缘体,在重费米子体系中又称为近藤绝缘体.[5]

当$\Gamma\neq 0$时,图19.8显示了系统在半满时的典型谱函数和态密度.注意到Γ非零导致隙间态(in-gap state),也就是原先完全的能隙出现了新的态密度.当然在文献[25]中,Γ来自于杂质散射而非相互作用.

这些隙间态的出现使得原先的绝缘态性质接近金属态,因而可以出现量子振荡行为.文献[25] 通过求解非厄密的Landau量子化问题证实了态密度的振荡行为,如图19.9.注意到振荡周期所对应的费米面是未杂化时的费米面(而非杂化后的费米面).

- DMFT研究表明例外点出现的温度近似是系统的近藤温度.[26]

[4]光学性质主要依赖于直接能隙而热力学依赖于间接能隙.
[5]真正的近藤绝缘体自然更为复杂,能带高度重整化.

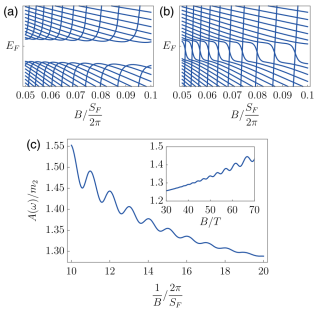


Figure 19.9: 非厄密Landau能级量子化和态密度的振荡.[25]

- 费米弧出现的条件:低能下体系是双分量Dirac费米子且有不同的散射率.

分形子:一个拓扑的新故事

在这一节,我们介绍最近几年比较热门的概念,也就是分形子(fracton).下面的讨论和图片基本上编译自Nandkishore和Hermele的综述文章. [6]

首先,分形子态的定义是体系在局域算符的作用下产生的原激发显示出受限制的运动,即原激发要么无法移动(除非产生额外激发),要么只能在某些特定方向移动,前者叫做分形子后者称为子维度粒子(subdimensional particles).同时,原激发的复合体是可以运动的粒子,这样原激发本身可以看作具有分数化了的运动性.这种被限制的运动性使得分形子态具有玻璃类型的动力学,与量子物质的玻璃态研究密切相关.另一方面,对于三维空间具有周期边界的有能隙分形子态,其基态简并度随着体系尺寸指数增加(不同的基态不能用局域测量来区分).注意到基态的局域不可区分性与通常的拓扑有序态(例如分数量子霍尔流体和有能隙自旋液体)十分相似,不过后者在热力学极限下只有常数的基态简并(不随体系尺寸增大).

从方法论的度角来说,我们一般用两种不同的方式来理解分形子态:

- 精确可解模型(例如X-cube和Haah's code), [7]主要适用于三维体系并能自然地得到有能隙的分形子态;
- 对称张量规范场论(symmetric tensor gauge fields),[8]这能够联系其他物理分支,例如弹性理论和引力,同时这种方法可以得到无能隙的分形子态并把分形子现象推广到二维.

可解模型

让我们考虑两个最典型的分形子模型,也就是Vijay等人提出的X-cube模型和Haah's code模型.X-cube可以实现所谓的Type-I有能隙分形子态,也就是在不可移动的分形子基础上也会有可移动的子维度激发.Haah's (cubic) code模型具有Type-II有能隙分形子态,在这类态中所有非平凡的激发都是不可移动的分形子.

X-cube

在X-cube模型中,$S = 1/2$自旋放置在简单立方晶格的所有链接上,可以

[6][Nandkishore,Hermele,Fractons,Annu.Rev.Condens.Matter Phys. **10**,295(2019)],也可以参考另一篇综述文章[Pretko,Chen,You,Fracton phases of matter,Int.J.Mod.Phys.A **35**,2030003(2020)]

[7][Vijay,Haah,Fu,Fracton topological order, generalized lattice gauge theory, and duality,Phys.Rev.B **94**,235157(2016);Haah,Local stabilizer codes in three dimensions without string logical operators,Phys,Rev.A **83**,042330(2011)]

[8][Pretko,Subdimensional particle structure of higher rank $U(1)$ spin liquids,Phys.Rev.B **95**,115139(2017)]

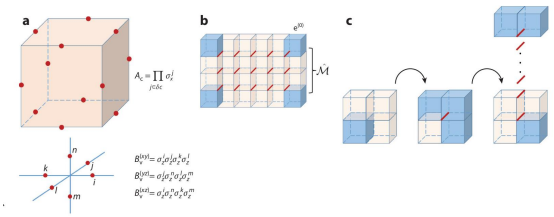


Figure 19.10: (a)X-cude模型,$X=\sigma_x, Z=\sigma_z$.(b)作用Z算符(红线)组成的矩形膜产生四个分形子(用$A_c=-1$表示,蓝色立方体).(c)一个分形子可以用局域算符移动(红线),但是需要产生额外的激发(两个翻转的蓝色立方体).

用Pauli算符X_l, Z_l表示,这样体系的哈密顿量是(图19.10(a))

$$H_{X-cube}=-u\sum_c A_c - K\sum_{\mu,\nu} B_\nu^\mu \tag{19.27}$$

这里u,K是大于零的参数,c表示对小立方体上自旋X_l的乘积求和,即$A_c=\prod_{l=1}^{12} X_l$,B_ν^μ表示以ν格点为中心,垂直于$\mu=x,y,z$轴的平面内的四自旋乘积,如果用晶格规范场中常用的记号来写就有$B_\nu^z=B_\nu^{(xy)}=Z_{\nu,\nu+x}Z_{\nu,\nu-x}Z_{\nu,\nu+y}Z_{\nu,\nu-y}$,这代表在$xy$平面内$\nu$格点最近邻的四个自旋.需要指出,类似于更加熟悉的toric-code模型,由于所有A_c, B_ν^μ都彼此对易,这样哈密顿量是严格可解的,其能量本征态由$A_c=\pm 1, B_\nu^\mu=\pm 1$来标记,也就是有$|\Psi\rangle=|A_c, B_\nu^\mu\rangle$,基态时所有$A_c, B_\nu^\mu$都为1.当然与toric-code不同,X-cube模型并没有Z_2规范对称性,也就是任意一个格点为中心的六自旋乘积项$\sum_{l=1}^6 X$与哈密顿量并不对易.由于哈密顿量中的每一项都是Pauli矩阵的乘积,因此我们也把这类模型叫做stabilizer code.

对于尺寸为$L\times L\times L$且有周期边界的体系,其基态简并度随着L指数增加,可以严格证明,当L为偶数时,简并度为2^{6L-3}. 这些简并的基态不能通过任何局域测量区分,因而体系具有拓扑有序.

X-cube模型有两类(低能)激发.第一类是不可移动的分形子激发,对应某个$A_c=-1$而其他A_c, B_ν^μ为1.在基态上如果作用上Z_l那么会在这条边所对应的四个小立方体上产生分别产生一个分形子(共计四个).进一步,采用所谓的膜算符(一些列Z_l的乘积,类似于toric-code中的string算符)就可以在膜的角落处产生四个分离的分形子.(图19.10(b))这说明我们可以把X-cube中的分形子看作膜角落处的缺陷.换句话说,为了移除一个分形子激发,我们必须在膜的其他角落处产生额外两个分形子,由于这些激发消耗能量,因此就算考虑一般性的局域扰动,低能下单独的分形子是仍然是无法移动的.(图19.10(c))

第二类激发是处于小立方体顶点处的一维粒子,例如设$B_\nu^x=B_\nu^y=-1, B_\nu^z=1$.这些激发可以在基态上作用$X_l$的string算符来实现.虽然他们可

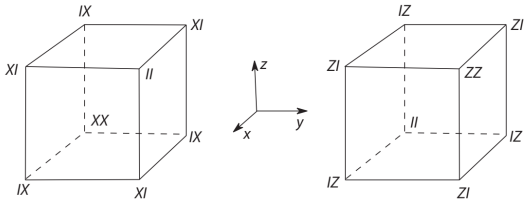


Figure 19.11: Haah's cubic cude模型.

以移动,但是只能沿着平行于z轴(或x, y)方向移动.我们可以把这些一维激发看作是string算符端点处的缺陷.

一般而言,我们认为玻色系统的任何非局域产生的激发可以通过一些过程来探测.比如说,在二维拓扑有序态,任意子a可以通过mutual统计来探测,也就是另一个任意子b 绕着a转一圈.等价的,由于任意子是string算符端点处的缺陷,我们可以通过b类型任意子的string算符所形成的圈来探测a.对于X-cube也有类似的方式.例如一个孤立的分形子可以通过一维粒子所对应的string算符来探测,所导致的统计相位是$(-1)^{n_f}$,(n_f是分形子的数目).

Haah's code

Haah's cubic code模型也是定义在简单立方晶格上,不过现在每个小立方体的顶点上有两个自旋.我们可以把每个顶点上两自旋乘积写成$XI = X \otimes I$, $XZ = X \otimes Z$,这里I是恒定算符,这样哈密顿量是

$$H_{Haah} = -\sum_c A_c - \sum_c B_c. \tag{19.28}$$

其中A_c, B_c是定义在小立方体上的自旋乘积.如图19.11所示,A_c是Z类算符的乘积而B_c是X算符的乘积. 虽然$L \times L \times L$周期体系的基态简并度对于体系尺寸有复杂的依赖,但基态简并度满足$\leqslant 2^{4L}$.

Haah's code模型具有一个重要的特性,也就是具有自对偶对称性,换句话说如果交换A_c, B_c则体系不变.这可以通过立方体中心的反演,每一个格点上两个自旋交换以及幺正变换($X \to Z$,$Z \to X$)来实现.因此,我们可以只关注$A_c = -1$的分形子激发.如果作用上XI或IX就在两个不同的四面体可以产生四个激发.这四个激发可以以分形的方式被分离得很远,这样体系得分形子可以看作是分形对象角落里的缺陷.我们可以在图19.12所示的二维三角形体系中展示Haah's code 模型分形子的产生过程.

对于通常的拓扑有序态,我们可以用拓扑纠缠熵来表征.拓扑纠缠熵是纠缠熵里面的非局域物理的贡献,其是拓扑态的普适性质.对于分形子模型,拓扑纠缠

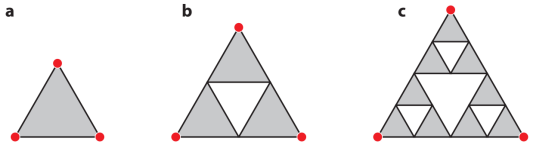


Figure 19.12: Haah's code模型的二维类比.(a)三角形角落处产生的三个Ising类型激发(红点).(b,c)为了分离这些激发,三角形可以彼此粘连在一起而形成分形结构

熵具有正比于子系统线性尺寸的部分.至少对于X-cube模型,这一项可以用圈气体(loop gas)图像来理解.以Z为基矢,那么基态可以看作$Z=-1$所形成的string的液体,并且在每个(100)平面都形成封闭的圈.(所有垂直于x轴的平面)每个平面都会切割所考虑区域这样就会对纠缠熵有常数的非局域贡献,这就导致了线性项.

有能隙分形子的拓扑和几何响应

在更加传统的拓扑序中,系统对整体空间拓扑的响应(基态简并度)是十分重要的.放在球面上的传统拓扑有序态具有唯一的基态,但若放在轮胎面或其他非平凡流形上就有基态简并度.这些简并基态并不能通过局域算符的关联函数局域测量来区分.

有能隙分形子也有简并度,其也具有局域不可区分的基态,因此也是拓扑有序的.但是,基态简并度依赖于体系尺寸并随着体系尺寸增加.这样,基态简并并不是整体拓扑的简单探测.实际上,基态简并探测的是有能隙分形子态所定义的空间的拓扑和几何性质.

现在人们知道如何在一般晶格和一般三维流形上定义X-cube模型的推广.比较直接的方式是用二维表面相互堆积在一起并嵌入更大的空间当中,然后把自旋放在两个表面交界的边上.三个表面交叉所形成的顶点可以看作立方晶格模型的顶点.这样我们就可以在所导致的晶格上定义X-cube哈密顿.

- 虽然有能隙分形子态的研究以精确可解模型为开端,最近的工作已经开始超越这个范式.人们发现分形子模型等价于一类广义晶格规范理论,并且对偶于具有子系统对称性的自旋模型.这些规范理论和自旋模型可以作为分形子物理的等价描述.

- 分形子模型可以通过更加熟悉模型来得到,例如X-cube模型可以由很多二维toric-code模型彼此耦合来实现.

无能隙分形子态

现在我们考虑能用张量规范理论描述的无能隙的分形子态.

在传统规范理论中,例如电磁理论,规范变量是矢量A_i,(即rank-one张量形式)由此可得矢量磁场B_i和电场E_i.在哈密顿形式下,电场E_i与规范场A_i正则共轭.同时物理态在规范变换下不变要求给出对电场的限制,即熟悉的Gauss定律$\nabla\cdot\vec{E}=\rho$.其对应的积分形式是

$$\int_V \rho dV=\int_V \nabla\cdot\vec{E}dV=\int_{\partial V}\vec{E}\cdot d\vec{S}. \tag{19.29}$$

当然,我们知道电磁理论中并不存在分形子,因此上述描述对我们而言并不适用.

为此,考虑rank-two张量的规范理论.当然,我们不考虑反对称张量规范理论,因此这种理论中也不会有分形子或子维度粒子.我们需要真正考虑的是对称rank-two张量理论. 最简单的对称张量规范理论的基本组件是规范场A_{ij},其具有规范变换$A_{ij}\rightarrow A_{ij}+\partial_i\partial_j\phi$.这里$A_{ij}$是实数值的场,$\phi$是实数值的标量函数.哈密顿形式中与规范场共轭的变量是对称张量型电场E_{ij},其满足对易关系$[A_{ij}(x),E_{kl}(y)]=i(\delta_{ik}\delta_{jl}+\delta_{il}\delta_{jk})\delta(x-y)$,这样对应的磁场可由$B_{ij}=\epsilon_{ikl}\partial^k A^l_j$构造.仿照经典的Maxwell理论,我们可以用$E_{ij},B_{ij}$得到如下对称张量规范理论:

$$H=\int d^3x\frac{1}{2}\left(E^{ij}E_{ij}+B^{ij}B_{ij}\right). \tag{19.30}$$

通过直接计算相应的运动方程可以看到这个模型会给出五个无能隙规范模式($\omega\sim k$).这些模式是光子的类似物,在文献中也被称作引力子模式.当我们考虑理论的电荷部分时,这类理论具有非寻常性质.根据规范变换$A_{ij}\rightarrow A_{ij}+\partial_i\partial_j\phi$和相应的对易关系,可以发现$\partial_i\partial_j E_{ij}=0$.这个约束可以看作是无源情况下的Gauss定律.很自然地,有限电荷密度会导致如下广义Gauss定律:

$$\partial_i\partial_j E_{ij}=\rho. \tag{19.31}$$

这是整个理论中最重要的方程.注意到该方程与电磁理论中的方程明显不同,我们自然期待一些有趣的物理.在Maxwell电磁理论中Gauss定律会导致电荷守恒.对于对称规范理论,我们可以把区域内的电荷表示为

$$Q=\int d^3x\rho=\int d^3x\partial_i\partial_j E_{ij}=\oint dn_j\partial_i E^{ij}, \tag{19.32}$$

上述方程的最右边表示通过边界的通量.这个方程告诉我们空间中电荷的变化只能通过边界处的通量来实现.换句话说,对于一个块体系统(没有边界的封闭系统或者边界为无穷远处),电荷是守恒量.虽然电荷守恒是预期的,这个理论包含另一个在电磁理论中不存在的守恒律.具体来说,考虑电荷所对应的电偶极矩:

$$P^i=\int d^3x x_i\rho=\int d^3x x_i\partial_j\partial_k E_{jk}=\oint dn_k(x^i\partial_j E^{jk}-E^{ik}), \tag{19.33}$$

可以看到,类似于电荷的情况,理论的偶极矩也是守恒量.

- 广义Gauss定律表明体系有两个守恒定律,也就是电荷守恒和电偶极矩守恒.

另一方面,偶极矩守恒意味着孤立的电荷并不能移动,这是因为任何孤立电荷的移动都会改变偶极矩.如果要保证偶极矩守恒,那么我们必须在移动一个电荷的同时产生另一个粒子,这一般会消耗能量.这些不可移动的电荷就是分形子.当然分形子的复合体,例如一对分形子,在这里就是一个偶极子,就可以自由运动.这样,广义Gauss定律和对称张量规范理论可以自然给出额外的守恒律,这使得体系动力学得产生了分形子现象.换句话说,张量规范理论给分形子现象得描述提供了自然的语言.

除了上面讨论的标量电荷规范理论$\partial_i\partial_j E^{ij}=\rho$,我们也可以根据规范变换$A_{ij}\to A_{ij}+\partial_i\phi_j+\partial_j\phi_i$得到矢量味道的Gauss定律:

$$\partial_i E^{ij}=\rho^j. \tag{19.34}$$

这里的矢量ρ^i解释为矢量电荷,因此相应的理论叫做矢量规范理论.与标量情况类似,矢量电荷理论也会限制电荷的运动.其原因是体系的矢量电荷$\vec{Q}=\int d^3x\vec{\rho}$以及角电荷矩(angular charge moment)$\vec{M}=\int d^3x(\vec{\rho}\times\vec{x})$.这些守恒律导致每个矢量电荷只能沿着矢量所指的方向运动.这些理论中的粒子可以认为是一维粒子,也叫做lineons.

偶极Bose-Hubbard模型

前面提到的分形子模型虽然可以得到分形子的基本物理,但是其距离通常的凝聚态模型还比较遥远,因此,我们需要更加简单或者真实的理论模型,这类模型有可能在不远的将来在实验中可以实现.Lake,Hermele和Senthil建议研究所谓的偶极Bose-Hubbard(dipolar Bose-Hubbard)模型:[9]

$$\begin{aligned}
&H_{DBHM}=H_{hop}+H_{onsite},\\
&H_{hop}=-t\sum_i b^\dagger_{i-a}b^\dagger_{i+a}b^2_i-t'\sum_{i,a}\sum_{b\neq a}b^\dagger_i b_{i+a}b^\dagger_{i+a+b}b_{i+b}+H.c.\\
&H_{onsite}=-\mu\sum_i n_i+\frac{U}{2}\sum_n n_i(n_i-1).
\end{aligned}\tag{19.35}$$

这里H_{onsite}代表涉及单个格点的化学势和Hubbard$U$项,H_{hop}则代表守恒偶极矩的部分,其中$t(t')$项分别是单粒子跃迁项(相互作用)的偶极矩守恒推广.

另一方面,通常的Bose-Hubbard模型由H_{onsite}和常规的跃迁项$-t_{sp}\sum_{i,a}b^\dagger_i b_{i+a}+H.c.$构成. 其相图可以参考图19.13.当单粒子跃迁$t_{sp}$为零时,通过调节$\mu/U$,体系会在每格点玻色子平均数目量子化为整数值时形成有能隙的Mott绝缘体.增加t_{sp}会减少掺杂粒子的能隙.当跃迁过程使得能隙为零时,掺杂的粒子会发生凝聚而进入超流态.

[9][Lake,Hermele,Senthil,Dipolar Bose-Hubbard model,Phys.Rev.B **106**,064511(2022)]

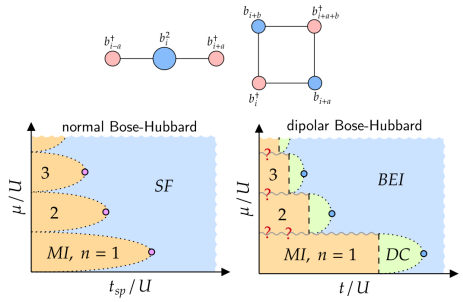


Figure 19.13: 偶极Bose-Hubbard模型跃迁部分的示意图和与通常Bose-Hubbard相图的比较.

Mott绝缘体和超流态之间的相变呈现一些列的dome型的临界线结构.当粒子逐渐掺杂入母体的Mott绝缘体时会发生相变,此时的相变由粒子所形成的稀薄玻色气体所描述,其动力学临界指数$z = 2$.(也叫做化学势调节的Mott相变)当然,在dome结构的尖端附近,掺杂粒子和空穴的能隙同时为零,这样会导致有效的粒子-空穴对称.在这种情况下,相变前后的粒子平均密度并不改变,因此相变由$d + 1$维XY模型描述($z = 1$).(相互作用调节的Mott相变)

对于偶极Bose-Hubbard模型,其$t = t' = 0$极限与Bose-Hubbard模型并无不同,因此我们可以得到一系列平均粒子数为整数的Mott绝缘体.在$t/U, t'/U$比较大的极限,偶极Bose-Hubbard模型会出现成团(clump)的不稳定性.这是因为当一个区域具有密度n时,跃迁算符$-tb^\dagger_{i-a}b^\dagger_{i+a}b^2_i, -t'\sum_{b\neq a} b^\dagger_i b_{i+a}b^\dagger_{i+a+b}b_{i+b}$的本征值正比于$-n^2$.这与Hubbard相互作用$U$的$Un^2$有同样的标度.当$t, t'$远大于$U$时,通过使局域的玻色子密度足够大,体系的能量总是得以降低,因而玻色子将会出现成团现象.下面的讨论主要关注$t/U, t'/U$为中间取值的情况,此时会有一些新奇的物态.

偶极Bose-Hubbard模型和通常Bose-Hubbard模型相图如图19.13所示.两者在整数粒子填充时都会有Mott绝缘态,而非整数填充时则分别存在Bose-Einstein绝缘体(BEI)和超流态.这里BEI是偶极Bose-Hubbard可能存在的新物态,其由偶极守恒部分所主导.

通过前面的讨论,我们知道粒子数守恒和偶极矩守恒实际上会导致分形子态.在偶极Bose-Hubbard模型的Mott绝缘态,如果考虑掺杂单个粒子,由于偶极矩守恒,孤立的掺杂粒子会完全无法移动(除非产生额外的激发).接下来,考虑一对近邻的掺杂粒子.由于偶极矩守恒,这些粒子只能以十分限制的方式运动.但是,一旦两者间的距离远大于跃迁项的距离,它们的运动仍然会被冻结.这说明掺杂的粒子只会在在平均粒子密度为1时完全退局域化.可以看到这类现象类似于通常分形子模型中的情况,也就是体系的原激发运动由于动力学原因被严重抑制.

由于任意小数目的玻色子无法退局域化,那么从Mott转变到退局域化态的

相变(凝聚单个玻色子)必然伴随着粒子密度的跳变,因此所发生的Mott相变应该是一级相变.这样当我们考虑单个玻色子的平均场理论,那么相应的相变是一阶的.注意到跃迁部分可以理解为$b_i b^\dagger_{i+a}$所形成偶极束缚态(有沿着a方向的偶极矩).这意味着当孤立的掺杂粒子由于动力学限制而局域化时,偶极束缚态可以在任何方向自由运动.既然偶极子运动是体系降低其动能的最廉价方式,偶极子凝聚可以比单粒子凝聚更早发生.

偶极凝聚

让我们考虑偶极凝聚相关的平均场描述.引入(中性的)偶极子算符$d^a_j = b^\dagger_{j+a} b_j$,和$A^a_{ij} = \sum_b [t\delta_{a,b} + t'(1-\delta_{a,b})](\delta_{i,j+b} + \delta_{i,j-b})$,那么跃迁部分的哈密顿量可以写成,

$$H_{hop} = -\sum_{i,a} (d^a_i)^\dagger A^a_{ij} d^a_j. \tag{19.36}$$

如果采用路径积分的方法,那么我们可以引入辅助场D^a_i(偶极场)把体系改写为如下形式:

$$S = \int d\tau \left\{ \sum_i b^\dagger_i \partial_\tau b_i - \sum_{i,a} [(d^a_i)^\dagger D^a_i + (D^a_i)^\dagger d^a_i] + \sum_{i,j,a} (D^a_i)^\dagger (A^a_{ij})^{-1} D^a_j + H_{onsite} \right\}. \tag{19.37}$$

鞍点或者平均场近似下我们有$\langle D^a_i \rangle = \sum_j A^a_{ij} \langle d^a_j \rangle$.接下来,积掉玻色场就可以得到关于$D^a$的有效作用量.根据偶极守恒和空间对称性可以写出如下一般性的有效作用量,

$$S = \int d\tau d^d x \left(w \sum_a |\partial_\tau D^a|^2 + r \sum_a |D^a|^2 + \sum_{ab} \frac{K^{ab}_D}{2} |\nabla_a D^b|^2 + \sum_{ab} \frac{u^{ab}}{2} |D^a|^2 |D^b|^2 \right). \tag{19.38}$$

注意到这里由于空间反射对称性并不出现D^a的线性时间导数项.在平均场层次,二次项系数$r = 0$是体系的相变点,具体计算表明(类似于Bose-Hubbard的平均场处理),

$$r = \frac{1}{2t + 2(d-1)t'} - \frac{2n(n+1)}{U} \tag{19.39}$$

因此当$t = t'$时,相变发生在$t_* = U/[4dn(n+1)]$.当n很大时,这种参数选取可以使得偶极凝聚与成团不稳定性彼此分开,至于n比较小的时候需要进一步的数值计算.r里面的第一项源自对$(D^a)^\dagger [A^a]^{-1} D^a$的零动量贡献,而第二项就是以$b^\dagger_i b_{i+a} D^a_i + H.c.$为微扰来计算的结果. U依赖来自Mott态上产生粒子-空穴对的能量消耗.既然这个能量在二阶微扰下并不依赖于化学势μ,Mott态与偶极凝聚态的相边界基本上独立于μ的取值.特别是, 对于固定的小t, t',改变μ会诱导不同Mott态之间的一级相变.如果超出平均场框架,那么体系可能会出现一些破缺晶格对称性的中间密度态.

现在考虑$r<0$的偶极凝聚态的性质.设$u^{ab}=u_d\delta^{ab}+u_o(1-\delta^{ab})(u_d>0)$.如果$u_o>u_d$,那么体系会破缺分立的晶格旋转对称,并且只有单个分量的偶极子发生凝聚,该凝聚体会有单个无能隙模式.若$u_o<u_d$,体系的偶极凝聚发生在所有方向.此时凝聚体依然会破缺晶格反射和旋转对称而晶格平移不变性得以保持(D^a只有零动量分量凝聚).

单玻色子凝聚

在偶极子凝聚后,凝聚单玻色子已经不存在动力学上的限制.在所有偶极子分量都凝聚的情况下,可以设$D^a=\sqrt{\rho_D}e^{i\varphi_D^a}$,这里$\rho_D$是代表非零的偶极子凝聚分数(密度).把这个形式代入哈密顿量就得到如下有效理论,

$$H=\sum_{i,a}\sqrt{\rho_D}\left[(d_i^a)^\dagger e^{i\varphi_D^a}+d_i^a e^{-i\varphi_D^a}\right]+H_{onsite}+\frac{K_L}{2}(\nabla\cdot\varphi_D)^2+\frac{K_T}{2}(\nabla\times\varphi_D)^2+\frac{K_A}{2}(\nabla_a\varphi_D^a)^2. \tag{19.40}$$

其中K_L,K_T,K_A是偶极子凝聚体相位模式φ_D^a的系数,各向异性系数K_A与立方体对称性吻合.注意到哈密顿量中的第一项(正比于$\sqrt{\rho_D}$)给出了有效的单玻色子跃迁$d_i^a=b_{i+a}^\dagger b_i$,这样在二维和三维情况下体系会进入单玻色子的凝聚态(其实可以理解为单玻色子和偶极子都凝聚的状态).单玻色子凝聚的相边界可由标准的平均场方法得到,由此可得相图中的dome结构.这样,我们发现体系相变是从Mott态到偶极子凝聚态再到单玻色子凝聚.

下面考虑单玻色子凝聚的有效理论.如果设$b\sim e^{i\phi}$,那么低能理论可以写成,

$$\mathcal{L}=\frac{\kappa}{2}(\partial_\tau\phi)^2+\frac{w}{2}(\partial_\tau\varphi_D)^2+\frac{K_\rho}{2}(\nabla\phi-\varphi_D)^2\frac{K_L}{2}(\nabla\cdot\varphi_D)^2+\frac{K_T}{2}(\nabla\times\varphi_D)^2+\frac{K_A}{2}(\nabla_a\varphi_D^a)^2. \tag{19.41}$$

可以看到单粒子凝聚通过Higgs机制使得偶极子的相位(Goldstone)模式被抑制.为了看出这一点,可以令$\varphi_D\to\varphi_D+\nabla\phi$,这样就有$K_\rho\varphi_D^2$项,这说明相位自由度$\varphi_D$是有能隙的,在低能下我们可以直接设$\varphi_D=0$.注意到低能理论中$\varphi_D$的消失是完全物理的,这是因为在单粒子凝聚出现时,$\langle d_i^a\rangle=\langle b_{i+a}^\dagger b_i\rangle$的相位不再是独立变量而是由$\langle b_i\rangle$的相位$\phi$决定,这样$\varphi_D$并不是此时的低能自由度.由此,我们得到(利用$\varphi_D\to\varphi_D+\nabla\phi$并忽略对应涡旋自由度的$\nabla\times\nabla\phi$)

$$\mathcal{L}=\frac{\kappa}{2}(\partial_\tau\phi)^2+\frac{K_L}{2}(\nabla^2\phi)^2+\frac{K_A}{2}(\nabla_a^2\phi)^2. \tag{19.42}$$

这个拉式量就是分形子超流性中出现过的各项异性量子Lifshitz模型的拉式量.

为了确定玻色子凝聚态是否是超流态,我们通常会检视体系的粒子数守恒是否自发破缺.但是,这种方式并不是超流态最可靠的定义,更加精确的定义是一个超流体具有非零的超流权重,也就是一个体系与外加电磁场耦合时显示Meissner效应.在这种定义下,单玻色凝聚态不是超流态.实际上,单玻色凝聚态的超流权重为零并不显示Meissner效应.让人惊讶的是,该凝聚态是完全绝缘的.为了理解这一点,我们可以把体系与外加电磁场A_μ耦合,(利用最小耦

合$\partial_\mu\phi \to \partial_\mu\phi - A_\mu$)

$$\mathcal{L} = \frac{\kappa}{2}(\partial_\tau\phi - A_0)^2 + \frac{K_L}{2}(\nabla^2\phi - \nabla\cdot A)^2 + \frac{K_A}{2}(\nabla_a^2\phi - \nabla_a A_a)^2. \quad (19.43)$$

可以看到矢量场A并不会有任何质量项,因此我们不会看到Meissner效应,同时交流电导率和超流权重都为零(偶极矩守恒的要求).这样,我们发现了一种新的物态,在这个状态中虽然玻色子凝聚但是体系是绝缘的.当凝聚态的粒子密度连续改变时,体系就是一个平移不变的可压缩绝缘体.因此,我们把单粒子凝聚态称作Bose-Einstein绝缘体.

一维偶极Bose-Hubbard模型

上述平均场理论指出了偶极Bose-Hubbard模型相图的一般性质,但是其精确度并不能完全让人信服.因此,人们转而研究更容易通过玻色化和DMRG得到可靠结果的一维偶极Bose-Hubbard模型.[10]

在Lake等人的工作中,他们考虑如下一维偶极Bose-Hubbard模型,

$$H_{DBHM} = -\sum_i (t_3 b_{i-1}^\dagger b_i^2 b_{i+1}^\dagger + t_4 b_{i-1}^\dagger b_i b_{i+1} b_{i+2}^\dagger + h.c.) + \frac{U}{2}\sum_i n_i^2 \quad (19.44)$$

这里t_3, t_4是一维时保证偶极矩守恒的最简单形式.由于这两项的出现,单个玻色子是无法自由运动的(t_3项),而两个相邻的玻色子可以沿着相反方向并向着下一个格点跳跃(t_4项).至于粒子-空穴的复合体$d_i = b_i^\dagger b_{i+1}$,也就是偶极子,则不会受到限制而可以自由运动,这可以通过把哈密顿量用d_i表示来看出:

$$H_{DBHM} = -\sum_i (t_3 d_i^\dagger d_{i-1} + t_4 d_{i+1} d_{i-1} + h.c.) + \frac{U}{2}\sum_i n_i^2 \quad (19.45)$$

显然,此时偶极子d_i可以通过t_3, t_4自由跃迁,这样在t_3, t_4比较大时会有偶极子的超流态.当然整数玻色子填充且U很大也会导致通常的Mott绝缘体.这两类态在DMRG的计算中得到了直接确认.(图19.14)

当然,偶极Bose-Hubbard模型在凝聚态体系中并不容易实现,因此Lake等人建议通过倾斜光晶格中玻色子体系的有效模型来实现.倾斜光晶格中的玻色子模型可以看作是标准Bose-Hubbard模型的基础上加上随着位置线性变化的势能,

$$H_{tilted} = -t_{sp}\sum_i (b_i^\dagger b_{i+1} + h.c.) + \frac{U}{2}\sum_i n_i^2 + V\sum_i i n_i \quad (19.46)$$

这里V项代表位置线性变化的势能,其可通过磁场的梯度产生.在强倾斜极限($t_{sp}/V, U/V \ll 1$),能量守恒禁止玻色子自由跃迁,但是并不禁止偶极矩守恒的跃迁过程. (如图19.14(b)所示)三阶微扰论给出想要的偶极模型,其参数为$t_3 =$

[10][Zechmann,Altman,Knap,Feldmeier,Fractonic Luttinger Liquids and Supersolids in a Constrained Bose-Hubbard Model,arXiv:2210.11072;Lake,Lee,Han,Senthil,Dipole condensates in tilted Bose-Hubbard chains,arXiv:2210.02470]

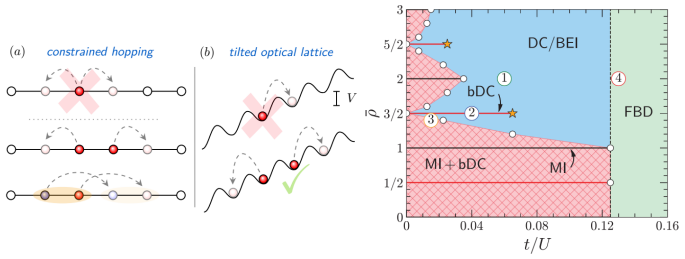


Figure 19.14: (a)被偶极矩守恒所限制的运动学.(上)单个玻色子不能移动,(中)两个临近的玻色子可以在相反方向移动,(下)玻色子和空穴的复合体可以自由移动.(b) 倾斜势V很大的倾斜光晶格中具有近似的偶极矩守恒.(上)能量守恒禁止单个玻色子的跃迁,(下)偶极矩守恒的(例如两玻色子)跃迁是允许的.(右边)一维偶极Bose-Hubbard模型的基态相图,$\bar{\rho}$是玻色子的密度,跃迁强度$t_3 = t_4 = t$.蓝色区域代表偶极凝聚态(dipole condensate,DC).有限尺寸下偶极凝聚态可以出现Bose-Einstein绝缘体. 红线表示另一类偶极凝聚态,也就是具有键中心电荷密度波的偶极凝聚体(bDC).整数$\bar{\rho}$的黑线代表Mott绝缘体.t/U比较大时的绿色区域代表断裂的Bose液滴态.(fractured Bose droplet,FBD

$t_{sp}^2 U/V^2, t_4 = 0$,(也包含额外的最近邻相互作用项$(2t_{sp}^2/V^2)\sum_i n_i n_{i+1}$)六阶微扰论可以产生非零的$t_4$,一般而言$t_3 \gg t_4$.注意到$t_3/U = (t_{sp}/V)^2$在强倾斜光晶格中总是远远小于一,因此可能会有人担心我们并不能探索整个相图.但是,直接的数值DMRG计算表明$t_3/U \lesssim 0.1$就足以得到整个相图.

Zechmann等人研究了包含三格点跃迁的偶极Bose-Hubbard模型,

$$H_{DBHM} = -t\sum_j (b_j^\dagger b_{j+1}^2 b_{i+2}^\dagger + h.c.) + \frac{U}{2}\sum_i n_j(n_j-1) - \mu\sum_j n_j \quad (19.47)$$

注意到该模型的总电荷Q和总偶极矩P都是守恒量:

$$Q = \sum_{j=1}^{L}(n_j - n), \qquad P = \sum_{j=1}^{L}(L-j)(n_j - n) \quad (19.48)$$

其中n是玻色子的平均密度.图19.15给出了iDMRG计算的相图,可以看到与Lake等人的相图类似,体系包含三个相,即不可压缩的偶极Mott绝缘态(d-Mott), 不可压缩的偶极凝聚态(偶极子形成Luttinger液体,d-Luttinger),以及可压缩的偶极子超固态(d-Supersolid),前两者之间存在BKT相变.此外,Mott态和Luttinger液体态中的电荷能隙都收敛到有限值.Mott态的偶极子能隙有限而Luttinger液体态的偶极子能隙以$1/L$方式趋于零.

进一步,偶极超固体显示密度波与偶极凝聚的共存.这个态具有为零的电荷能隙和有限的压缩率,自发破缺连续的偶极对称性,并由量子Lifshitz模型描述.物

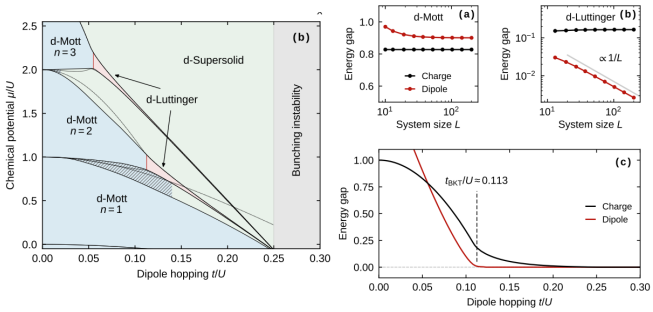


Figure 19.15: (左边)偶极Bose-Hubbard模型包含三个相,即不可压缩的偶极Mott绝缘态(d-Mott),不可压缩的偶极凝聚态(偶极子形成Luttinger液体,d-Luttinger),以及可压缩的偶极子超固态(d-Supersolid).激发能隙随体系尺寸L的变化,(a)Mott绝缘态($t/U = 0.100$),(b)Luttinger液体态($t/U = 0.115$).Mott态和Luttinger液体态中的电荷能隙都收敛到有限值.Mott 态的偶极子能隙有限而Luttinger液体态的偶极子能隙以$1/L$方式趋于零.(c)Mott态到偶极子凝聚态之间的BKT相变,可以看到电荷和偶极子能隙的不同行为.

理上偶极超固体对应于先前平均场理论所预言的Bose-Einstein绝缘体.(图19.16)

除了这里介绍的偶极Bose-Hubbard模型,还有一些凝聚态模型与分形子物理相关,例如

- 三格点相互作用的$S = 1$自旋链模型,其自旋的时间依赖显示非热化行为;[11]
- 极化子体系和掺杂的Ising反铁磁体;[12]
- Majoranan岛屿,plaquette顺磁体.[13]

[11][Sala,Rakovszky,Verresen,Knap,Pollmann,Ergodicity Breaking Arising from Hilbert Space Fragmentation in Dipole-Conserving Hamiltonians,Phys.Rev.X **10**,011047(2020)]

[12][Sous,Pretko,Fractons from polarons,Phys.Rev. B **102**,214437(2020)]

[13][You,Oppen,Building fracton phases by Majorana manipulation,Phys.Rev.Res. **1**,013011(2019);You,Bi,Pretko,Emergent fractons and algebraic quantum liquid from plaquette melting transitions,Phys.Rev.Res. **2**,013162(2020)]

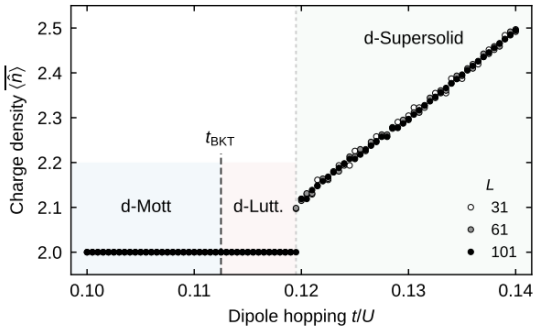


Figure 19.16: 非整数玻色子密度时,固定化学势$\mu/U = 0.95$会出现从偶极凝聚态到偶极超固体态的一级相变.

Bibliography

[1] D. A. Abanin, E. Altman, I. Bloch and M. Serbyn, Rev. Mod. Phys. **91**, 021001 (2019).

[2] L. B. Altshuler, Y. Gefen, A. Kamenev, and L. S. Levitov, Quasiparticle lifetime in a finite system: A nonperturbative approach, Phys. Rev. Lett. **78**, 2803 (1997).

[3] I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, and D. G. Polyakov, Interacting electrons in disordered wires: Anderson localization and low-T transport, Phys. Rev. Lett. **95**, 206603(2005).

[4] D. M. Basko, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler, Metal−insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states, Ann. Phys. (Amsterdam) **321**, 1126 (2006).

[5] V. Oganesyan, and D. A. Huse, Localization of interacting fermions at high temperature, Phys. Rev. B **75**, 155111 (2007).

[6] A. Pal, and D. A. Huse, Many-body localization phase transition, Phys. Rev. B **82**, 174411 (2010).

[7] M. Serbyn, Z. Papic, and D. A. Abanin, Local conservation laws and the structure of the many-body localized states, Phys. Rev. Lett. **111**, 127201 (2013).

[8] M. Schreiber, S. S. Hodgman, P. Bordia, H. P. Luschen, M. H. Fischer, R. Vosk, E. Altman, U. Schneider, and I. Bloch, Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasirandom optical lattice, Science **349**, 842 (2015).

[9] P. Roushan, et al., Spectroscopic signatures of localization with interacting photons in superconducting qubits, Science **358**, 1175 (2017).

[10] J. Haah, Local stabilizer codes in three dimensions without string logical operators, Phys. Rev. A **83**, 042330 (2011).

[11] S. Vijay, J. Haah, and Liang Fu, Fracton topological order, generalized lattice gauge theory, and duality, Phys. Rev. B **94**, 235157 (2016).

[12] R. M. Nandkishore and M. Hermele, Fractons, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**, 295 – 313 (2019).

[13] E. Berg, M. A. Metlitski, S. Sachdev, Sign-Problem – Free Quantum Monte Carlo of the Onset of Antiferromagnetism in Metals, Science **338**, 1606 (2012)

[14] S. Gazit, M. Randeria and A. Vishwanath, Emergent Dirac fermions and broken symmetries in confined and deconfined phases of Z_2 gauge theories, Nature Physics **13**, 484 (2017).

[15] Z. C. Wei, C. Wu, Y. Li, S. Zhang and T. Xiang, Majorana Positivity and the Fermion Sign Problem of Quantum Monte Carlo Simulations, Phys. Rev. Lett. **116**, 250601 (2016).

[16] Z.-X. Li, Y.-F. Jiang, and H. Yao, Majorana-Time-Reversal Symmetries: A Fundamental Principle for Sign-Problem-Free Quantum Monte Carlo Simulations, Phys. Rev. Lett. **117**, 267002 (2016).

[17] J. Carrasquilla and R. G. Melko, Machine learning phases of matter, Nature Physics **13**, 431 (2017).

[18] G. Carleo, M. Troyer, Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks, Science **355**, 602 (2017).

[19] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and M. Fagotti, Quantum Quench in the Transverse-Field Ising Chain, Phys. Rev. Lett. **106**, 227203 (2011).

[20] P. Sala, T. Rakovszky, R. Verresen, M. Knap, and F. Pollmann, Ergodicity Breaking Arising from Hilbert Space Fragmentation in Dipole-Conserving Hamiltonians , Phys. Rev. X **10**, 011047 (2020).

[21] S. Scherg, T. Kohlert, P. Sala, F. Pollmann, Bharath H. M., I. Bloch and M. Aidelsburger, Observing non-ergodicity due to kinetic constraints in tilted Fermi-Hubbard chains, arXiv:2010.12965v1.

[22] V. Kozii and L. Fu, Non-Hermitian Topological Theory of Finite-Lifetime Quasiparticles: Prediction of Bulk Fermi Arc Due to Exceptional Point, arXiv:1708.05841.

[23] K. M. Shen, F. Ronning, D. H. Lu, F. Baumberger, N. J. C. Ingle, W. S. Lee, W. Meevasana, Y. Kohsaka, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, Z.-X. Shen, Nature **307**, 901 (2005).

[24] Y. Nagai, Y. Qi, H. Isobe, V. Kozii, and L. Fu, DMFT Reveals the Non-Hermitian Topology and Fermi Arcs in Heavy-Fermion Systems, Phys. Rev. Lett. **125**, 227204 (2020).

[25] H. Shen and L. Fu, Quantum Oscillation from In-Gap States and a Non-Hermitian Landau Level Problem, Phys. Rev. Lett. **121**, 026403 (2018).

[26] Y. Michishita, T. Yoshida, and R. Peters, Relationship between exceptional points and the Kondo effect in f-electron materials, Phys. Rev. B **101**, 085122 (2020).