多体物理读书会: 第六章 Matsubara 的虚时演化

dx

<2018-12-27 四 >

目录

1 引入

1.1 引入一

格林函数的定义中有两项, 是

$$\langle A(t)B(t')\rangle \quad , \quad \langle B(t')A(t)\rangle$$

但是, 如果时间不是一个实数, 而可以是复数, 允许有虚部的话, 那么这两项就不是相互独立的了. 因为

$$\begin{aligned}
\Xi\langle A(t)B(0)\rangle =&\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H}\cdot e^{-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}Ht}A(0)e^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}Ht}\cdot B(0)\right\}\\
=&\mathrm{Tr}\left\{e^{-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t+\mathrm{i}\hbar\beta)}A(0)e^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t+\mathrm{i}\hbar\beta)}\cdot e^{-\beta H}\cdot B(0)\right\}\\
=&\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H}\cdot B(0)\cdot e^{-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t+\mathrm{i}\hbar\beta)}A(0)e^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t+\mathrm{i}\hbar\beta)}\right\}\\
=&\Xi\langle B(0)A(t+\mathrm{i}\hbar\beta)
\end{aligned}$$

也就是

$$\langle A(t)B(0)\rangle = \langle B(0)A(t+\mathrm{i}\hbar\beta) \tag{1}$$

因此, 引入复数时间将会使格林函数的定义更加精简? 这和其周期性有什么关系?

1.2 引入二

时间演化算符

$$U(t,0) = e^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}Ht} \tag{2}$$

和巨正则系综的密度算符

$$\rho = \frac{1}{\Xi}e^{-\beta H}$$
$$\rho\Xi = e^{-\beta H}$$

(其中 H 包含了化学势) 十分相似. 也可以说巨正则系综的密度算符是一个特殊的时间演化算符

$$
\begin{aligned}
U(t,0) &\to e^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}Ht} \\
\rho\Xi &\to e^{-\beta H} \\
&\Downarrow \\
\rho\Xi &= U(-i\hbar\beta,0) = e^{-\beta H}
\end{aligned}
$$

所以得出结论:

$\rho\Xi$ 是时间

$$t = -i\hbar\beta \tag{3}$$

的时间演化算符, 对应一个虚数时间. 它将系统从无穷高的温度 $T \to +\infty$ 演化到 $T = \frac{1}{k\beta}$.

这最先由 Kubo 在 1950s 早期发现. 接下来呢, Matsubara 就 pick up 了 Kubo 的这个发现, 写下了第一个有限温多体问题的虚时方程!

知道了配分函数, 就知道了一切. 而配分函数不过是演化算符的求迹!

$$\Xi = \mathrm{Tr}[U(-\mathrm{i}\hbar\beta,0)] \tag{4}$$

1.3 引入三

对于非零温的情况, 微扰 V 不仅出现在演化算符中, 还出现在密度算符中. 虚时的引入, 可以使得两部分合并, 在对 V 进行展开时只进行一次展开即可.

2 Modified Heisenberg Representation

一个纯虚的时间, 对应于温度的演化, 与真实的时间无关. 如果时间是虚, 那么可以定义

$$\tau = \mathrm{i}t$$

是一个实数.

由虚时演化的 Heisenberg Representation 叫做 Modified Heisenberg Representation , 在此表象下的算符为

$$A(\tau) = e^{\frac{1}{\hbar}H\tau}A(0)e^{-\frac{1}{\hbar}H\tau}$$

此算符关于虚时间, 实数 τ 对应的运动方程为

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}A(t) =& [A(t), H] \\ & \Downarrow \\ -\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{i}t}A(\tau) =& [A(\tau), H] \\ & \Downarrow \\ -\hbar\frac{\partial}{\partial \tau}A(\tau) =& [A(\tau), H] \end{aligned}$$

3 Matsubara function

3.1 Defination

与因果格林函数一样的定义, 只不过由于时间是虚的, i 被 t 吸收变成实数 τ , 定义中不再有 i 出现

$$G_{AB}^{M}(t,t') = -\langle T_{\varepsilon}(A(\tau)B(\tau))\rangle$$

对应的运动方程为

$$-\hbar\frac{\partial}{\partial \tau}G_{AB}^{M}(\tau,\tau') = \hbar\delta(\tau-\tau')\langle[A,B]_{-\varepsilon}\rangle + \langle\langle\, [A(\tau),H]\,;\, B(\tau')\,\rangle\rangle^{M}$$

有一疑问, 定义中是否要加一限制 $\tau - \tau' \in [-\hbar\beta, \hbar\beta]$? 为什么加? 这里暂且假设是. 下面的推导也说得通.

3.2 周期性

Matsubara function 在区间 $[-\hbar\beta, \hbar\beta]$ 之间, 对于 Boson 是关于原点对称的, Fermion 关于原点是反对称的. 证明如下

$$
\begin{aligned}
&\text{For} \tau < 0, \quad \text{then} \quad \tau + \hbar\beta > 0 \\
\Xi G(\tau + \hbar\beta) =& - \operatorname{Tr}\left\{ e^{-\beta H} \cdot e^{\frac{1}{\hbar}H(\tau+\hbar\beta)} A(0) e^{-\frac{1}{\hbar}H(\tau+\hbar\beta)} \cdot B(0) \right\} \\
=& - \operatorname{Tr}\left\{ e^{\frac{1}{\hbar}H\tau} A(0) e^{-\frac{1}{\hbar}H\tau} \cdot e^{-\beta H} \cdot B(0) \right\} \\
=& - \operatorname{Tr}\left\{ e^{-\beta H} \cdot B(0) \cdot e^{\frac{1}{\hbar}H\tau} A(0) e^{-\frac{1}{\hbar}H\tau} \right\} \\
=& - \varepsilon \operatorname{Tr}\left\{ T_\varepsilon(A(\tau) \cdot B(0)) \right\} \\
=& \varepsilon \Xi G(\tau)
\end{aligned}
$$

也可以利用关系 (1) 的变形

$$
\langle A(\tau) B(\tau') \rangle = \langle B(\tau') A(\tau - \hbar\beta) \rangle
$$

即

$$
\begin{aligned}
&\text{For} \tau < 0, \quad \text{then} \quad \tau + \hbar\beta > 0 \\
G(\tau + \hbar\beta) =& - \langle A(\tau + \hbar\beta) B(t) \rangle \\
=& - \langle B(0) A(\tau) \rangle \\
=& - \varepsilon \langle T_\tau A(\tau) B(0) \rangle \\
=& \varepsilon G(\tau)
\end{aligned}
$$

所以关系 (1) 与 Matsubara function 的对称与反对称性是相关的.

3.3 Fourier Transform

Matsubara function 按区间 $[-\hbar\beta, \hbar\beta]$ 延拓成周期为 $2\hbar\beta$ 的周期函数. 对周期函数的 Fourier Transform , 其结果是离散的

$$
\omega_n = n \frac{2\pi}{2\hbar\beta} = \frac{n\pi}{\hbar\beta}
$$

Fourier 展开为

$$G(\tau)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}C_n e^{-\mathrm{i}\omega_n\tau}$$

where

$$C_n=\frac{1}{2\hbar\beta}\int_{-\hbar\beta}^{\hbar\beta}\mathrm{d}\cdot\tau G(\tau)e^{\mathrm{i}\omega_n\tau}$$

记

$$\begin{aligned}E_n=&\hbar\omega=\frac{n\pi}{\beta}\\ G(E_n)=&\hbar\beta C_n\end{aligned}$$

则得到书上的形式

$$\begin{aligned}G(\tau)=&\frac{1}{\hbar\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}G(E_n)\\ G(E_n)=&\frac{1}{2}\int_{-\hbar\beta}^{\hbar\beta}\mathrm{d}\tau\cdot G(\tau)e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}\end{aligned}$$

对于 Boson, 其周期实际为 $\hbar\beta$, 所以其变换为

$$\begin{aligned}G(\tau)=&\frac{1}{\hbar\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}G(E_n)\\ G(E_n)=&\int_{0}^{\hbar\beta}\mathrm{d}\tau\cdot G(\tau)e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}\\ E_n=&n\frac{2\pi}{\hbar\beta}=\frac{2n\pi}{\hbar\beta}\end{aligned}$$

而对于 Fermion

$$\begin{aligned}&\int_{-\hbar\beta}^{0}\mathrm{d}\tau\cdot G(\tau)e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}\\ =&\int_{0}^{\hbar\beta}\mathrm{d}\tau'\cdot G(\tau+\hbar\beta)e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}\cdot e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\hbar\beta}\\ =&\int_{0}^{\hbar\beta}\mathrm{d}\tau\cdot(-G(\tau))e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}\cdot e^{\mathrm{i}\cdot n\pi}\end{aligned}$$

只有 $E_n=(2n+1)\pi/\beta$ 时 G_n 才不为零.

3.4 Relation to the Green's Function

它们的关系可以由 Spectral function 联系.

$$\langle A(\tau)B(0)\rangle = \frac{1}{\Xi}\sum_{nm}\langle E_n|A|E_m\rangle\langle E_m|B|E_n\rangle e^{\frac{1}{\hbar}(E_n-E_m)\tau}e^{-\beta E_n}$$

$$S_{AB}(E) = \frac{\hbar}{\Xi}\sum_{nm}\langle E_n|A|E_m\rangle\langle E_m|B|E_n\rangle e^{-\beta E_n}(1-\varepsilon e^{-\beta E})\delta[E-(E_m-E_n)]$$

比较以上两式可得

$$\langle A(\tau)B(0)\rangle = \frac{1}{\hbar}\int \mathrm{d}E\cdot\frac{S_{AB}(E)}{1-\varepsilon e^{-\beta E}}e^{-\frac{1}{\hbar}E\tau}$$

知道了 $\langle A(\tau)B(0)\rangle$, 便可求得 Matsubara function

$$\begin{aligned} G_{AB}(E_n) &= -\int_0^{\hbar\beta} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau}\langle A(\tau)B(0)\rangle\cdot\mathrm{d}\tau \\ &= \int \mathrm{d}E\cdot\frac{S_{AB}}{\mathrm{i}E_n - E} \end{aligned}$$

第一个等号是因为积分区间中 $\tau > 0$, 所以 $G(\tau) = -\langle A(\tau)B(0)\rangle$. 与 Grenn's function 相比, 只是把原来的 $E\pm\mathrm{i}0^+$ 换成了 $\mathrm{i}E_n$. 从原来的实轴附近变到了虚轴. 原因大概是与能量共轭的量时间也从实轴变到了虚轴.

4 Grand Canonical Partition Function

4.1 Dirac Representation

对应于实时, 虚时也可以定义 Dirac Representation .

$$A_D(\tau) = e^{\frac{1}{\hbar}H_0\tau}A_S e^{-\frac{1}{\hbar}H_0\tau}$$

运动方程

$$-\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_D(\tau,\tau') = V_D(\tau)U_D(\tau,\tau')$$

一切都与实时相类似. 虚时同样有

$$U_D(\tau,\tau') = T_\tau e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{\tau'}^{\tau}\mathrm{d}\tau''\cdot V_D(\tau'')}$$

4.2 Grand Canonical Partition Function

$$e^{-\frac{1}{\hbar}H\tau} = e^{-\frac{1}{\hbar}H_0\tau}U_D(\tau,0)$$

所以 Grand Canonical Partition Function 就表示为 Diarc 演化算符在无相互作用系统下的迹

$$\Xi = \mathrm{Tr}e^{-\frac{1}{\hbar}H_0\tau}U_D(\tau,0) = \mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H_0}U(\hbar\beta,0)\right\}$$

展开后就是

$$\begin{aligned}\Xi =&\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H_0}U(\hbar\beta,0)\right\}\\ =&\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\int_0^{\hbar\beta}\cdots\int_0^{\hbar\beta}\mathrm{d}\tau_1\cdots\mathrm{d}\tau_n\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H_0}T_\tau(V_D(\tau_1)\cdots V_D(\tau_n))\right\}\end{aligned}$$

5 Single-Particle Matsubara function

5.1 Defination

Single-Particle Matsubara function 定义为

$$G_k(\tau) = -\langle T_\tau(a_k(\tau)a_k^\dagger(0))\rangle$$

它也满足 Dyson equation

$$G_k(E_n) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}E_n - (\varepsilon(\vec{k})-\mu) - \Sigma^M(k,E_n)}$$

Equation of Motion

类似实时，由 Heisenberg 运动方程可以得到产生和消灭算符的虚时演化

$$\begin{aligned}a_k(\tau) =&a_k e^{-\frac{1}{\hbar}(\varepsilon(\vec{k})-\mu)\tau}\\ a_k^\dagger(\tau) =&a_k^\dagger e^{\frac{1}{\hbar}(\varepsilon(\vec{k})-\mu)\tau}\end{aligned}$$

注意二者并不互为厄米! 由单粒子的谱函数, 可以得到 Single-Particle Matsubara function 的具体形式

$$G_k^{0,M}(E_n) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}E_n - (\varepsilon(\vec{k}) - \mu)}$$

当然也可由 $G_k^{0,\alpha}(E)$ 做 $E \pm \mathrm{i}0^+ \to \mathrm{i}E_n$ 的替换得到上述结果.

5.2 Start Point of Digramatic Perturbation Theory

微扰 V 存在的情况下, Single-Particle Matsubara function 为

$$G_k^M(\tau_1, \tau_2) = -\frac{1}{\Xi}\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H_0}U_D(\hbar\beta, 0)T_\tau[a_k(\tau_1)a_k^\dagger(\tau_2)]\right\}$$

将其从 Heisenberg 表象换到 Dirac 表象

$$\begin{aligned} T_\tau[a_k(\tau_1)a_k^\dagger(\tau_2)] =& T_\tau[U(0,\tau_1)a_k^D(\tau_1)U(\tau_1,0)U(0,\tau_2)a_k^{\dagger D}(\tau_2)U(\tau_2,0)] \\ =& T_\tau[a_k^D(\tau_1)a_k^{\dagger D}(\tau_2)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_k^M(\tau_1, \tau_2) =& -\frac{1}{\Xi}\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H_0}U_D(\hbar\beta, 0)T_\tau[a_k^D(\tau_1)a_k^{\dagger D}(\tau_2)]\right\} \\ =& -\frac{\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H_0}T_\tau[U_D(\hbar\beta, 0)a_k^D(\tau_1)a_k^{\dagger D}(\tau_2)]\right\}}{\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H_0}T_\tau U_D(\hbar\beta, 0)\right\}} \end{aligned}$$

为什么把 $U_D(\hbar\beta, 0)$ 扔进了编时里边? 如果给 $U_D(\hbar\beta, 0)$ 编时的话, 按 0 算还是按 τ 算? 这和零温的情况很类似. 如果求迹也有 Wick 定理, 那么就可以发展非零温的 Digramatic Perturbation Theory .

6 致谢

除了 Wolfgang Nolting 的书外, 还参考了 Piers Coleman 的 Introduction to Many-Body Physics 一书.