Квантовая статфизика, операторы поля

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1, [\hat{a}, \hat{a}] = 0, [\hat{a}^+, \hat{a}^+] = 0 \qquad (1)$$

$$\hat{a}|0>= 0, \quad |n>= \hat{a}^+ ....\hat{a}^+|0> \quad \hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$$

$$\hat{n}|n>= \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ ....\hat{a}^+|0>= \hat{a}^+ ....\hat{a}^+|0> +\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}....\hat{a}^+|0>= ...$$

$$= n|n>$$

$$\Psi(x) = \sum_k \hat{a}_k \varphi_k(x), \quad \Psi^+(x) = \sum_k \hat{a}_k^+ \varphi_k^*(x) \qquad (2)$$

$$[\Psi(x), \Psi^+(y)] = \delta(x-y), [\Psi(x), \Psi(y)] = 0, [\Psi^+(x), \Psi^+(y)] = 0 \qquad (3)$$

$$\int dx \Psi^+(x)\Psi(x)|\alpha\rangle = \int dx \sum_{n,m} \hat{a}_n^+ \varphi^*(x)\hat{a}_m\varphi(x)|\alpha\rangle = \\ = \sum_n \hat{a}_n^+\hat{a}_n|\alpha\rangle = \sum_n N_n|\alpha\rangle \implies \Psi^+(x)\Psi(x) = \hat{\rho} \tag{4}$$

Свободная наука

$i\Psi^+ = \hat{p}$, $\Psi = \hat{q}$

$$\hat{H}_1 \varphi_k = \epsilon_k \varphi_k \quad \epsilon_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$$

$\int dx \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) = \delta_{kk'}$

$$E = \int dx \Psi^+(x) \hat{H}_1 \Psi(x) = \sum_k \hat{a}_k^+ \varphi_k^*(x) \sum_{k'} \hat{a}_{k'} \epsilon_{k'} \varphi_{k'}(x) = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k$$

$$S_\beta = \int\limits_0^\beta dt \int dx \Psi^+(x) \big(\partial_t + \hat{H}_1\big) \Psi(x)$$

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \Psi^+(x_1) \Psi(x_1) V(x_1 - x_2) \Psi^+(x_2) \Psi(x_2) \qquad (5)$$

Теперь мы можем написать статсумму системы взаимодействующих частиц в виде

$$\Sigma = \mathrm{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = C\int D\psi^{+} D\psi e^{-S_\beta(\psi^{+},\psi)}, \tag{6}$$

где C – несущественная для физики константа,

$$S_\beta = \int_0^\beta dt \int d\mathbf{x}\left(\psi^{+}(\mathbf{x},t)\left(\partial_t + \hat{H}_1\right)\psi(\mathbf{x},t) + \frac{g}{4}\psi^{+2}(\mathbf{x},t)\psi^{2}(\mathbf{x},t)\right), \tag{7}$$

в функциональном интеграле для статсуммы и температурных функций Грина интегрирование ведется по паре комплексно-сопряженных полей $\psi^{+}(\mathbf{x},\mathbf{t})$ и $\psi(\mathbf{x},\mathbf{t})$ с периодическими (для бозонов) граничными условиями на интервале $t \in [0,\beta]$.

Для температурной науки:

$$(\partial_t - \frac{\Delta}{2m} - \mu)G = \delta(t-t')\delta(x-x') \to$$

$$(\partial_t + \frac{k^2}{2m} - \mu)G(k,t-t') = (\partial_t + \epsilon_k)G(k,t-t') = \delta(t-t')$$

$$G(\omega,k) = \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon_k} \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}$$

– матсубаровские частоты

$$G(k,t-t') = g(k,t-t') + e^{-\epsilon_k(t-t')}\Theta(t-t')$$

$$(\partial_t + \epsilon_k)g(k,t-t') = 0 \implies g(k,t-t') = Ce^{-\epsilon_k(t-t')}$$

$$G(k,0-t') = G(k,\beta-t') \implies e^{\epsilon_k(t')}C = e^{\epsilon_k(t')}(e^{\epsilon_k\beta} + Ce^{\epsilon_k\beta})$$

$$G(k,t-t') = e^{-\epsilon_k(t-t')}(\Theta(t-t') + n_k) \quad n_k = \frac{1}{e^{-\epsilon_k\beta} - 1}$$

В свободной теории вычисление статсуммы в данном подходе является нетривиальным, поскольку в формализме первого порядка по временным производным ряд со старшими членами $\sim 1/\omega_n$ расходится и требует доопределения.Пусть $\epsilon_p = \epsilon$

$$\partial_\epsilon \ln \Sigma = -\frac{1}{\Sigma}\int D\psi^+ D\psi \int_0^\beta dt \int d\mathbf{x}\psi^+(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t) = \\ -\beta V G_\beta(t=t') = -\frac{\beta V}{e^{\beta\epsilon}-1} \tag{8}$$

$\Theta(t-t'=0)=0$ Тогда с точностью до независящей от спектра частиц константы можно написать

$$\Omega = -\beta^{-1}\ln\Sigma = \frac{V}{\beta}\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d}\ln(1-e^{-\beta\epsilon_p}) \tag{9}$$

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{j}} \frac{\hat{\pi}_{\mathbf{j}}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{j},\mathbf{k}} \hat{\varphi}_{\mathbf{j}} V_{\mathbf{j},\mathbf{k}} \hat{\varphi}_{\mathbf{k}}, \quad (2) \tag{10}$$

для кубической решетки с постоянной a операторы смещения и импульса можно представить в виде

$$\hat{\varphi}_s = \sqrt{\frac{a}{2\pi}}^d \int d\mathbf{p} \frac{1}{\sqrt{2\omega m}} [\hat{a}_p^+ e^{i\omega t - i\mathbf{p}\mathbf{R}_\mathbf{s}} + \hat{a}_p e^{-i\omega t + i\mathbf{p}\mathbf{R}_\mathbf{s}}]$$

$$\hat{\pi}_s = m\partial_t \hat{\varphi}_s = \sqrt{\frac{a}{2\pi}}^d \int d\mathbf{p} \frac{i\omega m}{\sqrt{2\omega m}} [\hat{a}_p^+ e^{i\omega t - i\mathbf{p}\mathbf{R}_\mathbf{s}} - \hat{a}_p e^{-i\omega t + i\mathbf{p}\mathbf{R}_\mathbf{s}}]$$

$\mathbf{R}_\mathbf{s}$ – координата $\mathbf{s}$ -го узла решетки температурное действие теории

$$S_\varphi = \int_0^\beta dt \sum_{\mathbf{j}} \left(i \overrightarrow{\pi}_{\mathbf{j}}(t) \partial_t \overrightarrow{\varphi}_{\mathbf{j}}(t) + \frac{\overrightarrow{\pi}^2_{\mathbf{j}}(t)}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \overrightarrow{\varphi}_{\mathbf{j}}(t) V_{\mathbf{j},\mathbf{k}} \overrightarrow{\varphi}_{\mathbf{k}}(t) \right).$$

гауссов интеграл по полю $\overrightarrow{\pi}$

$$S_{\varphi\beta} = \int_0^\beta dt \sum_{\mathbf{j}} \left(\frac{1}{2} m \partial_t \overrightarrow{\varphi}_{\mathbf{j}}(t) \partial_t \overrightarrow{\varphi}_{\mathbf{j}}(t) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \overrightarrow{\varphi}_{\mathbf{j}}(t) V_{\mathbf{j},\mathbf{k}} \overrightarrow{\varphi}_{\mathbf{k}}(t) \right) \tag{11}$$

спектр собственных колебаний ω_p
статсумма одноуровневого осциллятора на уровне p:

$$\Sigma_p = \mathrm{Const} \left(\omega_p \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\omega_p^2 \beta^2}{4\pi^2 n^2}\right) \right) = \mathrm{Const} \frac{1}{\mathrm{sh}(\frac{\beta\omega_p}{2})} \tag{12}$$

(Const здесь обозначают величины независящие от спектра системы)

$$F = \frac{V}{2}\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d}\omega_p + \frac{V}{\beta}\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d}\ln(1 - e^{-\beta\omega_p}) \tag{13}$$

С другой стороны, термодинамику твердого тела можно рассматривать посредством описания системы невзаимодействующих квазичастиц (фононов в низко-энергетической области) со спектром энергии ω_p с нулевым химическим потенциалом.

$$F = \frac{V}{\beta}\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d}\ln(1 - e^{-\beta\omega_p}) \tag{14}$$

$\Theta(0) = 0$ vs $\Theta(0) = 1/2$,

функциональный интеграл по грассмановым (антикоммутирующим) переменным ψ_l^+, ψ_l, индекс l нумерует проекцию спина.
Бозоны – $\Psi(x_1, ..., x_n)$ – симметрична. Фермионы – принцип запрета Паули – $\Psi(x_1, ..., x_n)$ – антисимметрична. Вероятность: $|\Psi|^2$.
Тогда $[,] \rightarrow \{,\}$.
Операторы рождения и уничтожения $\hat{a}_\alpha^+$, $\hat{a}_\alpha$

$$\{\hat{a}_\alpha, \hat{a}_{\alpha'}^+\} = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (7)$$

Операторы поля

$$\hat{\psi}^+ = \sum_\alpha e^{-i\epsilon_\alpha t} \phi_\alpha(x) \hat{a}_{\alpha'}^+ \quad \hat{\psi} = \sum_\alpha e^{i\epsilon_\alpha t} \phi_\alpha^*(x) \hat{a}_\alpha \quad (8)$$

$\hat{H}_1 \phi_\alpha = \epsilon_\alpha \phi_\alpha$

По прежнему $\hat{a}^+_{\alpha'}\hat{a}_\alpha = \hat{n}_\alpha$ =0,1, т.к. $\hat{a}^+_{\alpha'}\hat{a}^+_{\alpha'} = 0$,

$$\hat{H} = \hat{\psi}^+(t)\hat{H}_1\hat{\psi}(t) \quad \hat{\rho} = \hat{\psi}^+(t)\hat{\psi}(t) \quad (9)$$

По аналогии с Бозе газом можем ввести функциональный интеграл по формуле Фейнмана-Каца.
Поля в функциональном интеграле – классические объекты, но сохраняют главные свойства исходных операторов, для фермионов они – антикоммутирующие. – Грассманова алгебра.
$\psi_1, ..., \psi_n$ – образующие. $\psi_i\psi_j = -\psi_j\psi_i$. $\psi_i\psi_i = 0$. Матрицы.
Антипериодические граничные условия по t
Алгебра: $\psi = \sum_i a_i\psi_i \equiv \sum_i \psi_i$.
Функции:

$$f(\psi) = f_0 + \sum_i f_i\psi_i + \sum_{i<j} f_{ij}\psi_i\psi_j + ... + f_n\psi_1...\psi_n \quad (10)$$

Производные: $\overrightarrow{\partial}/\partial\psi_1$, $\overleftarrow{\partial}/\partial\psi_1$

$$\frac{\overrightarrow{\partial} f}{\partial \psi_1} = f_1 + \sum_j f_{1j}\psi_j + \dots$$

$$\frac{\overleftarrow{\partial} f}{\partial \psi_1} = f_1 - \sum_j f_{1j}\psi_j + \dots \quad (11)$$

Неопределенный интеграл – очевидно.

Определенный интеграл:

$$\int d\psi_1 = 0 \quad \int \psi_1 d\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (12)$$

Свойства интерала по грассменовым переменным:

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 f(\psi) = \int d\psi_n ... \int d\psi_1 (f_0 + \sum_i f_i \psi_i + \sum_{i,j} f_{ij} \psi_i \psi_j + ...$$

$$+ f_n \psi_1 ... \psi_n) = \frac{f_n}{(2\pi)^{n/2}} \quad (13)$$

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 f(\psi + a) = \int d\psi_n ... \int d\psi_1 (f_0 + \sum_i f_i (\psi_i + a_i)) + ...$$

$$+ f_n (\psi_1 + a_1) ... (\psi_n + a_n)) = \frac{f_n}{(2\pi)^{n/2}} \quad (14)$$

$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 f = \int d(\psi_n + a_n) ... \int d(\psi_1 + a_1) f$

Напомним для обычных интегралов

$$\int d\mathbf{x} f(L\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y} J f(\mathbf{y}) \quad J = \det \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{y}} = \det L^{-1} \quad (15)$$

Для грассмановых переменных

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 f(L\psi) = \int d\psi_n ... \int d\psi_1 (f_0 + \sum_i L_{ik} f_k \psi_k + \sum_{i,j} f_{ij} L_{ik_i} \psi_{k_i} L$$

$$+ f_n L_{1i_1} \psi_{i_1} ... L_{ni_n} \psi_{i_n}) = \frac{f_n}{(2\pi)^{n/2}} L_{1i_1} ... L_{ni_n} (-1)^{P(i_1,\dots,i_n)} \quad (16)$$

$$J = \det L \quad (17)$$

Напомним для обычных переменных

$$\int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}K\mathbf{x}+(\mathbf{xa})} = e^{\frac{1}{2}\mathbf{a}K^{-1}\mathbf{a}} \int d\mathbf{y} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{y}K\mathbf{y}} = e^{\frac{1}{2}\mathbf{a}K^{-1}\mathbf{a}} \det(\frac{K}{2\pi})^{-1/2} \quad (18)$$

Гауссов интеграл в грассмановых переменных

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 e^{-\frac{1}{2}\psi K\psi+(a\psi)} \quad (19)$$

Для бозонов

$$x_i K_{ij} x_j = x_j K_{ji} x_i = x_i K_{ji} x_j \quad (20)$$

матрица K симметризуется
В грассмановых

$$\psi_i K_{ij} \psi_j = \psi_j K_{ji} \psi_i = -\psi_i K_{ji} \psi_j \quad (21)$$

матрица K антисимметризуется

Замена в (19) $\psi \to \psi - K^{-1}a$

$$-\frac{1}{2}\psi K\psi + (a\psi) \to -\frac{1}{2}\psi K\psi + (a\psi) + \frac{1}{2}(K^{-1}a)K\psi + \frac{1}{2}\psi K K^{-1}a - \frac{1}{2}(K^{-1}a)$$

$$= -\frac{1}{2}\psi K\psi - \frac{1}{2}aK^{-1}a \quad (22)$$

Осталось вычислить

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 e^{-\frac{1}{2}\psi K\psi} \quad (23)$$

Ортонормированное преобразование

$$K \to \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \lambda_1 \\ -\lambda_1 & 0 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 0 & \lambda_{n/2} \\ -\lambda_{n/2} & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

пфаффова форма. Пф$K = \lambda_1 .... \lambda_n$ – Пфаффиан. n– четное, для нечетных n Пф$K = 0$.
Известно Пф$K = \pm \det K^{1/2}$

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 e^{-\frac{1}{2}\psi K \psi} = \int d\psi_n ... \int d\psi_1 (1+\lambda_1 \psi_1 \psi_2) ... (1+\lambda_{n/2} \psi_{n-1} \psi$$

Итого

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 e^{-\frac{1}{2}\psi K \psi + (a\psi)} = \pm e^{-\frac{1}{2} a K^{-1} a} \det(\frac{K}{2\pi})^{1/2} \quad (25)$$

$$\int d\psi_n ... \int d\psi_1 \frac{\delta f}{\delta \psi_i} = 0$$

отсюда Швингер, Лежандр