第八讲

§. 路径积分与统计物理

我们推导出

$$\langle x'|e^{-iHt'}|x\rangle = \int \mathcal{D}x\, e^{iS}, \quad S = \int_0^{t'} dt\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) - V(x(t))\right], \text{ 被积 } L = T - V \qquad ①$$

定义 $it' = \beta$, $idt = d\tau$ 考虑 $x' = x$ 则上式化为

$$\boxed{\langle x|e^{-\beta H}|x\rangle = \int \mathcal{D}x\, e^{-S(x(\tau))}} \qquad ②$$

其中

$$\boxed{S(x(\tau)) = -iS'(x(t)) = -\int_0^{\beta} d\tau\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{-id\tau}\right)^2 - V(x(\tau))\right] = \int_0^{\beta} d\tau\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x(\tau))\right]}$$

注意被积函数变成了 $H = T + V$，但是 $\dot{x} = \frac{dx}{d\tau}$

考虑粒子处于环境温度 T，其 density operator $\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$，

$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}$ 可以写成

$$Z = \int dx \langle x|e^{-\beta H}|x\rangle, \quad \text{其中 } \beta = \frac{1}{T}$$

被积函数就是②式。 推导②式时，$\beta = it'$ 是虚数，因为 t' 是实的。

但是若 t' 是纯虚数，则 β 为实数。

这样统计物理与量子力学的路径积分就是一回事了！

- 我们也可以从 $\langle x|e^{-\beta H}|x\rangle$ 出发，导出②式，再令 $\beta = it'$，$d\tau = idt$，得到①式。

以下为以 x, p 为变量的公式：

$$\boxed{\langle x'|\hat{U}|x\rangle = \int_{x(t_0)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}p(t)\,\mathcal{D}x(t)\; e^{iS}, \quad S(t) = \int_{t_0}^{t'} dt\left[p(t)\dot{x}(t) - H(x(t), p(t))\right]}$$

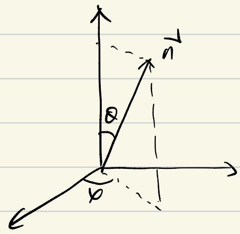
$$\Downarrow$$

$$\boxed{\langle x|e^{-\beta H}|x\rangle = \int \mathcal{D}x \int \mathcal{D}p\; e^{-S}, \quad S'(\tau) = \int_0^{\beta} d\tau\left[-i\, p(\tau)\frac{dx}{d\tau} + H(x(\tau), p(\tau))\right]}$$

重要：Berry phase，Topology

§ 自旋系统的路径积分

考虑一个自旋量子数 $S=\frac{1}{2}$ 的粒子. 其状态可写成



$$|\psi\rangle = c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle \overset{S_z}{\doteq} \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}$$

$$|c_\uparrow|^2 + |c_\downarrow|^2 = 1$$

设 $|\psi\rangle$ 是 $\vec{\sigma}\cdot\vec{n} = \sigma_{\vec{n}}$ 的本征矢：$\sigma_{\vec{n}}|\psi\rangle = |\psi\rangle$，则

$$|\psi\rangle = e^{ib}\left(\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}}|\uparrow\rangle + e^{\frac{i\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right) \equiv |b,\theta,\varphi\rangle$$，有时也写作 $|\vec{n}\rangle$

这里 $\vec{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$，$e^{ib}$ 是任意相因子，或 gauge 变换自由度.

- 首先，$|b,\theta,\varphi\rangle$ 是完备的.

$$\boxed{\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, |b,\theta,\varphi\rangle\langle b,\theta,\varphi| = \frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left(\cos^2\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \sin^2\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right) = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \mathbb{1}}$$

- 其次 $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ 的期望值非常简单

$$\boxed{\langle b,\theta,\varphi|\frac{\vec{\sigma}}{2}|b,\theta,\varphi\rangle = \frac{1}{2}\langle\vec{n}|\vec{\sigma}|\vec{n}\rangle = \frac{1}{2}\vec{n}}$$ $(\hbar=1)$ $\frac{1}{2}$ 正好是量子数 S

- 但是不同的 $|\vec{n}\rangle$ 不一定正交：$\langle\vec{n}|\vec{n}'\rangle \neq \delta(\vec{n}-\vec{n}')$

为了使用路径积分工具，我们只需要完备性.

以 $\{|\vec{n}\rangle\}$ 为基矢的表象，称为相干态表象：coherent state representation

- 以上结果可推广到 Spin-S（S 为 $\frac{1}{2}$ 的整数倍）

$$(2S+1)\int\frac{d\vec{n}}{4\pi}|\vec{n}\rangle\langle\vec{n}| = \mathbb{1} \qquad \left(\int d\vec{n} \equiv \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\right)$$

$$\langle\vec{n}|\vec{S}|\vec{n}\rangle = S\vec{n}$$

$$|\langle\vec{n}_1|\vec{n}_2\rangle|^2 = \left(\frac{1+\vec{n}_1\cdot\vec{n}_2}{2}\right)^{2S}$$

• 下面我们在相干态表象下导出自旋系统统计力学的路径积分形式：

$$\mathrm{Tr}\,A = \sum_\alpha \langle\alpha|A|\alpha\rangle$$

这里 $\{|\alpha\rangle\}$ 是正交归一基矢， 插入相干态表象的完备性关系

$$\mathrm{Tr}\,A = \sum_\alpha (2S+1)\int\frac{d\vec{n}}{4\pi}\langle\alpha|\vec{n}\rangle\langle\vec{n}|\alpha\rangle = (2S+1)\int\frac{d\vec{n}}{4\pi}\sum_\alpha\langle\vec{n}|\alpha\rangle\langle\alpha|\vec{n}\rangle$$

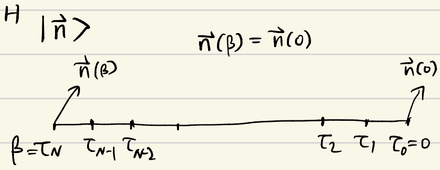
$$\boxed{\mathrm{Tr}\,A = (2S+1)\int\frac{d\vec{n}}{4\pi}\langle\vec{n}|A|\vec{n}\rangle}$$

对于给定 H 的自旋系统， 比如： $H = -\vec{B}\cdot\vec{S}$ 自旋在外磁场中

$$\boxed{Z = \mathrm{Tr}\,e^{-\beta H} = (2S+1)\int\frac{d\vec{n}}{4\pi}\langle\vec{n}|e^{-\beta H}|\vec{n}\rangle}$$

显然计算配分函数的关键是计算"传播子" $\langle\vec{n}|e^{-\beta H}|\vec{n}\rangle$

采用与单粒子运动类似方法， 将 β 分成 N 分： $\Delta\tau = \frac{\beta}{N}$，



$\tau_0=0$， $\tau_N=\beta$； $\tau_k = k\Delta\tau$， 再将 $|\vec{n}(\tau_k)\rangle$ 简写成 $|\tau\rangle$. $|\vec{n}(\tau_{k+1})\rangle \to |\tau+\Delta\tau\rangle$

最终关键的计算是： $\boxed{\langle\tau+\Delta\tau|e^{-\Delta\tau H}|\tau\rangle}$

利用 $\Delta\tau\to 0$， $\langle\tau+\Delta\tau|e^{-\Delta\tau H}|\tau\rangle = \langle\tau+\Delta\tau|(1-\Delta\tau H)|\tau\rangle = \langle\tau+\Delta\tau|\tau\rangle - \Delta\tau\langle\tau+\Delta\tau|\hat{H}|\tau\rangle$

由于 $|\tau+\Delta\tau\rangle = |\vec{n}(\tau)\rangle + \Delta\tau\frac{d|\vec{n}(\tau)\rangle}{d\tau}$， 再略去 $O(\Delta\tau^2)$ 项.

因此

$$\langle\tau+\Delta\tau|e^{-\Delta\tau H}|\tau\rangle = 1 + \Delta t\left(\frac{d\langle\vec{n}(\tau)|}{d\tau}\right)\cdot|\vec{n}(\tau)\rangle - \Delta\tau\langle\vec{n}(\tau)|\hat{H}|\vec{n}(\tau)\rangle$$

又由于 $\langle\vec{n}(\tau)|\hat{H}(\hat{\vec{S}})|\vec{n}(\tau)\rangle = \langle\vec{n}(\tau)|H(S\vec{n})|\vec{n}(\tau)\rangle$ （假设 $H(\hat{\vec{S}})$ 是 $\hat{\vec{S}}$ 的线性函数）

由于 $\langle\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle=1 \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\vec{n}(\tau)|\vec{n}(\tau)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{d\langle\vec{n}(\tau)|}{d\tau}\cdot|\vec{n}(\tau)\rangle + \langle\vec{n}(\tau)|\cdot\frac{d|\vec{n}(\tau)\rangle}{d\tau} = 0$

$\Rightarrow \frac{d\langle\vec{n}(\tau)|}{d\tau}\cdot|\vec{n}(\tau)\rangle = -\langle\vec{n}(\tau)|\cdot\frac{d|\vec{n}(\tau)\rangle}{d\tau}$ 且为纯虚数. 给出一个相位

$$\boxed{\langle\tau+\Delta\tau|e^{-\Delta\tau H}|\tau\rangle = e^{-\Delta\tau H(S\vec{n}) - \Delta\tau\langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}|\vec{n}(\tau)\rangle}}$$

这样我们最后写出配分函数

$$Z=\left(\frac{2S+1}{4\pi}\right)^N\int\prod_{k=0}^{N-1}d\vec{n}(\tau_k)\ e^{\sum_{k=0}^{N-1}-\Delta\tau\left[\langle\vec{n}(\tau_k)|\frac{d}{d\tau}|\vec{n}(\tau_k)\rangle+H(S\vec{n}(\tau_k))\right]}$$

$$\boxed{Z=\int_{\vec{n}(\beta)=\vec{n}(0)}\mathcal{D}\vec{n}(\tau)\quad e^{-\int_0^\beta d\tau\left[\langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}|\vec{n}(\tau)\rangle+H(S\vec{n}(\tau))\right]}}$$

$$\boxed{S=\int_0^\beta d\tau\left[\langle\vec{n}(\tau)|\dot{\vec{n}}(\tau)\rangle+H(S\vec{n}(\tau))\right]}$$

- 以上完成了单自旋的相干态路径积分。

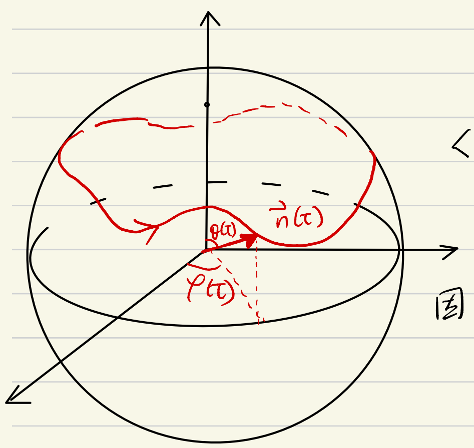
★ 如果没有相位 $\langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}\vec{n}(\tau)\rangle$，一条路径的权重说完全由对应的经典能量给出的 Boltzmann 权重决定。以 $\hat{H}=-\vec{B}\cdot\vec{S}$ 为例，$H(S\vec{n})=-\vec{B}\cdot S\vec{n}$ 可看成一条长为 β 的周期边界经典自旋链，处于约化磁场 B 下。

这给我们研究对应的量子系统带来很大便利：我们对经典系统行为的直觉可以派上用场。

★ 然而"相位项"携带了系统重要量子信息，对我们理解量子反铁磁非常重要！ 下面我们来计算 $\langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}|\vec{n}(\tau)\rangle$（以 $S=\frac{1}{2}$ 自旋为例）

$$|\vec{n}(\tau)\rangle=e^{ib}\left(e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle+e^{\frac{i\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right),\quad b\text{ 是任意相位，可以随 }\tau\text{ 变}$$

$$\frac{d|\vec{n}(\tau)\rangle}{d\tau}=i\dot{b}|\vec{n}(\tau)\rangle+e^{ib}\left[\left(-\frac{i\dot{\varphi}}{2}\cos\frac{\theta}{2}-\frac{\dot{\theta}}{2}\sin\frac{\theta}{2}\right)e^{-\frac{i\varphi}{2}}|\uparrow\rangle+\left(\frac{i\dot{\varphi}}{2}\sin\frac{\theta}{2}+\frac{\dot{\theta}}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right)e^{\frac{i\varphi}{2}}|\downarrow\rangle\right]$$



$\theta(\tau),\varphi(\tau)$ 描述了 $\vec{n}(\tau)$ 的路径

$$\langle\vec{n}(\tau)|\frac{d}{d\tau}|\vec{n}(\tau)\rangle=i\dot{b}+\cos\frac{\theta}{2}\left(-\frac{i\dot{\varphi}}{2}\cos\frac{\theta}{2}-\frac{\dot{\theta}}{2}\sin\frac{\theta}{2}\right)+\sin\frac{\theta}{2}\left(\frac{i\dot{\varphi}}{2}\sin\frac{\theta}{2}+\frac{\dot{\theta}}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right)$$

$$=i\left(\dot{b}-\frac{\dot{\varphi}}{2}\cos\theta\right)$$

因为我们之前的假设 $\vec{n}(\beta)=\vec{n}(0)$，并且 $|\vec{n}(\beta)\rangle$ 与 $|\vec{n}(0)\rangle$ 是同一量子态

即 $\boxed{|\vec{n}(\beta)\rangle=|\vec{n}(0)\rangle=|\vec{n}(0)\rangle e^{i2\pi n},\quad n\in\mathbb{Z}}$ ①

虽然 $|\psi\rangle$ 与 $|\psi\rangle e^{i\phi}$ 是同一个物理态，但是 $|\vec{n}(\beta)\rangle$ 和 $|\vec{n}(0)\rangle$ "绑定一个中"

因此 $|\vec n(\tau)\rangle = e^{ib}\left(e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{\frac{i\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right)$ 中的 b 受到一个限制：

当 $\varphi(\beta)=\varphi(0)+2\pi$，$\theta(0)=\theta(\beta)$ 时，$|\vec n(\beta)\rangle = e^{ib(\beta)}\, e^{-i\pi}\left(e^{-i\frac{\varphi(\beta)}{2}}\cos\frac{\theta(0)}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\frac{\varphi(\beta)}{2}}\sin\frac{\theta(0)}{2}|\downarrow\rangle\right)$

为保证①式，我们可选 $b(\tau)=\frac{\varphi(\tau)}{2}$，即 $|\vec n(\tau)\rangle = \cos\frac{\theta(\tau)}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi(\tau)}\sin\frac{\theta(\tau)}{2}|\downarrow\rangle$

(也可以选 $b(\tau)=-\frac{\varphi(\tau)}{2}$，即 $|\vec n(\tau)\rangle = e^{-i\varphi(\tau)}\cos\frac{\theta(\tau)}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta(\tau)}{2}|\downarrow\rangle$) • 还有很多选择

作用量 $S(\vec n)$ 中的

$$\boxed{\int_0^\beta d\tau \langle \vec n(\tau)|\dot{\vec n}(\tau)\rangle = \int_0^\beta d\tau\, i\frac{\dot\varphi}{2}(1-\cos\theta) = \frac{i}{2}\oint d\varphi(1-\cos\theta) = \frac{i}{2}\int_0^{2\pi}\int_0^{\theta}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \frac{i\Omega}{2} \equiv -4\pi i S W_0} \quad ②$$

Ω 为路径 $\vec n(\tau)$ 张开的立体角！ $\frac{\Omega}{2}$ 给出一条路径的位相，称为 Berry phase

通常将这部分作用量记为 $-4\pi S W_0$，S 为自旋量子数（推广到 spin-S）

如果选择 $b(\tau)=-\frac{\varphi(\tau)}{2}$，给出 Berry phase $= S(\Omega-4\pi)$ ⟶ winding number

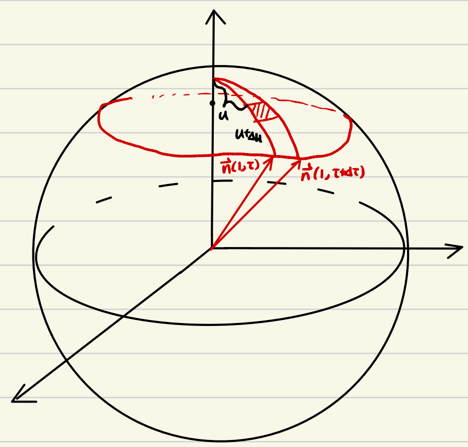
• 但是，只要 S 是 $\frac{1}{2}$ 的整数倍，路径的权重 $e^{-S(\vec n)}$ 不变！ 从物理角度看，规范选取不能改变物理结果，因此自旋量子数只能为 $\frac{1}{2}$ 的整数倍 ↔ 拓扑量子化

②式有非常漂亮的几何意义，但是依赖于球坐标，我们可以将其改写为坐标旋转不变的形式：

$$\boxed{W_0 = \frac{1}{4\pi}\int_0^1 du\int_0^\beta d\tau\ \vec n(u,\tau)\cdot\left[\frac{\partial\vec n(u,\tau)}{\partial u}\times\frac{\partial\vec n(u,\tau)}{\partial\tau}\right]} \quad ③$$

我们引入了辅助坐标 $u\in[0,1]$，将 $\vec n(\tau)$ 扩展到 $\vec n(u,t)$，$\vec n(0,\tau)=\hat z$　$\vec n(1,\tau)=\vec n(\tau)$.

以上公式称为 Wess-Zumino-Witten (WZW) action



图中阴影面积为：$\vec n(u,\tau)\cdot\left[\frac{\partial\vec n(u,\tau)}{\partial u}\times\frac{\partial\vec n(u,\tau)}{\partial\tau}\right]$