现代物理基础丛书 64

固体量子场论

史俊杰 刘自信 刘玉芳 著

科学出版社

现代物理基础丛书 64

固体量子场论

史俊杰 刘自信 刘玉芳 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书系统介绍了应用于固体物理的量子场论的一些基本概念和主要理论工具. 其中包括场的量子化、格林函数、费曼图技术、重整化群、规范理论等. 特别是介绍了场论中的一些计算技术及其在固体物理中的重要应用. 包括图形微扰论、运动方程方法、响应函数的计算、电荷输运、自旋输运、量子霍尔体系、拓扑绝缘体以及利用动力学平均场论(及其拓广)来作电子结构计算等.

本书可供物理系高年级本科生、研究生和从事固体物理、材料物理、理论物理研究的科研工作者使用.

图书在版编目(CIP)数据

固体量子场论/史俊杰, 刘自信, 刘玉芳著. —北京: 科学出版社, 2015.3
(现代物理基础丛书; 64)
ISBN 978-7-03-043829-4
Ⅰ. ①固… Ⅱ. ①史… ②刘… ③刘… Ⅲ. ①量子场论 Ⅳ. ①O413.3
中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 053784 号

责任编辑: 钱 俊 鲁永芳 / 责任校对: 邹慧卿
责任印制: 张 倩 / 封面设计: 陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717
http://www.sciencep.com

三河市骏杰印刷有限公司印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2015 年 3 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16
2015 年 3 月第一次印刷 印张: 28 1/4
字数: 570 000

定价: 158.00 元
(如有印装质量问题, 我社负责调换)

《现代物理基础丛书》编委会

前　言

量子场论方法日益广泛地应用于固体理论中, 一个典型的例子就是超导电性的 BCS 理论的建立, 并且普遍相信量子场论还将是建立高温超导理论所必需的. 在本书第一章的引论中我们较详细地介绍了量子场论的用途.

虽然传统的固体理论书籍往往包含一些场论方法, 但是由于这类书籍的侧重点是在固体物理问题本身上, 所以对场论的思想和方法缺乏全面而系统的论述, 读者也难以从中全面深刻领悟并灵活掌握场论方法. 本书的侧重点在固体中的场论方法, 而涉及的固体物理仅作为场论应用的例子而选择性地加以简略阐述. 正因为这样的目的, 首先系统地论述场论方法的基础, 从传统的正则量子化途径 (算符途径) 到路径积分量子化途径 (泛函积分途径), 详细介绍了一些主要的理论工具和计算技术, 例如, 格林函数、自能函数以及费曼图技术、运动方程方法、重整化群、动力学平均场论等. 本书也介绍了场论在固体理论中的几种最重要的运用, 其中包括了响应函数的计算、电荷输运和自旋输运, 特别是场论与广泛运用的局域近似下的密度泛函理论的结合 (LDA+DMFT) 来作材料的电子结构运算等. 然而限于篇幅, 我们主要考虑那些在固体理论中应用相对广泛的内容.

本书第一章介绍了场的正则量子化方法, 讨论了量子场与粒子、准粒子之间的关系, 并介绍了固体中的几种基本的粒子和准粒子. 第二章和第三章在算符途径中分别介绍了零温及有限温度下的图形微扰方法. 第四章则介绍了非平衡问题中的图形技术. 第五章和第六章分别论述了场论方法在动力学关联、电荷输运和自旋输运中的运用. 第七章论述了场的路径积分量子化方法并将该方法用于建立 BCS 超导电性理论. 第八章论述了应用于固体相变以及量子输运的重整化群方法. 第九章讨论了研究强关联体系的图形赝粒子技术、动力学平均场论 (及其拓广) 和利用动力学平均场论来进行电子能带结构计算并初步介绍了强关联体系的规范场论.

本书的论述尽可能详尽, 其中一些数学准备也以附录的形式给出, 以便让初次接触该领域的读者 (包括固体物理专业和材料物理专业研究生) 也能够容易掌握相关内容. 正因为如此, 我们只给出了一些必要的参考文献.

本书由北京大学史俊杰教授和河南师范大学刘自信教授、刘玉芳教授共同完成. 本书得到河南省高校科技创新团队支持计划 (131RTSTHN016)、2012 年度河南

省科技创新人才计划 (124200510013)、国家重点基础研究发展计划 (973 计划) 项目 (2012CB619304)、国家自然科学基金面上项目 (11474012, 11274096) 资助.

由于作者水平有限, 不妥之处敬请读者指正.

作 者

2014 年 11 月

目 录

第一章　粒子、准粒子和量子场

第一节　引　　论

量子场论能够以一种粒子与波动的统一观点来看待各种 “粒子”(包括光子等)，首先可以把粒子与某种经典的 (即未量子化的)“**场**” 相联系. 例如, 与非相对论性粒子相联系的场是满足薛定谔方程的场, 与相对论性粒子相对应的场满足相对性场方程 (其形式视粒子自旋而定). 其中与自旋为 1 的光子相对应的是满足麦克斯韦 (Maxwell) 方程的电磁场. 对这些经典场进行量子化, 就能得到相应的量子场.

量子场论是场的量子理论, 它把粒子看成场的量子 (例如, 光子就被看成电磁场的量子), 从而建立起粒子与场的对应. 粒子的性质以及粒子间的相互作用可由场的性质以及场之间的相互作用来反映. 也就是说量子场论可以描述粒子的性质以及粒子之间的相互作用 (粒子的产生、消灭和相互转变等).

这样, 量子场论成为了基本粒子物理最重要的解析工具. 然而量子场论的应用绝不仅限于此. 那些具有 “粒子” 行为的对象, 如凝聚态物理中的 “准粒子”(即元激发, 其行为类似于在介质中运动并具有一定能量动量的粒子, 如声子 (phonon) 等), 也可以用场论方法来研究. 在量子场论的自身发展过程中, 逐渐显示出它有许多适合于对量子多粒子系统中的现象作分析的特点. 这始于福克 (Fock) 表象理论, 它使得量子场论能够为那些状态能由一组数列来分类的量子体系提供恰当的语言. 量子场论还给我们提供了一些精美的工具, 它们是如此强有力, 使得场论方法具有巨大的普适性. 例如, 我们可以从统一的观点和方法去研究：从夸克、粒子到准粒子的行为, 从磁性金属中的相变到早期宇宙中的相变, 从量子体系到某些经典体系以及某些宏观与微观客体共存的体系等. 人们也找到了量子场论与统计力学之间的密切联系：一个 D 维体系的量子场论能够表述成一个 $D+1$ 维体系的统计力学的理论. 今天量子场论方法已被广泛应用于包括固体物理在内的多门学科中.

至于对经典波动场进行量子化的方法, 主要有正则量子化途径 (或称算符途径) 和路径积分量子化途径 (或称泛函积分途径). 我们在本章将以非相对论性粒子体系为例来说明正则量子化途径的基本思想和方法, 并在第七章中介绍路径积分量子化途径.

下面将采用如下约定：设场所处的空间为 d 维, 时空中任意点的坐标矢量 x 的 (逆变) 分量为 $x^\mu = (x^0, x^1, \cdots, x^d) = (t, \underline{x})$, 其中, $x^0 = t$, 希腊字母指标 $\mu =$

$0, 1, \cdots, d$, 而反映空间分量的指标将用拉丁字母表示, 如 $i = 1, 2, \cdots, d$. 导数 $\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x^d}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial \underline{x}}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \boldsymbol{\nabla}\right)$. **通常不加特别指出时, $\boldsymbol{d} =$ 3**. $d+1$ 维 Minkowshi 时空的度规张量为如下对角矩阵：$g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(1, -1, \cdots, -1)$. 这样可通过度规 $g_{\mu\nu}$ 及其逆矩阵 $g^{\mu\nu}$ 来实现时空指标的升降. 例如, 坐标矢量 x 的 (协变) 分量 $x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = (t, -\underline{x})$, $\partial^\mu = g^{\mu\nu}\partial_\nu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\boldsymbol{\nabla}\right)$ 等 (其中重复指标自动求和). 另外, **我们在不加说明时总采用自然单位制**：$\hbar = c = 1$.

第二节　经典场的正则量子化方法

一、经典场的拉格朗日形式

体系的拉格朗日函数 (简称**拉氏函数**) $L(t) = T - V$ 是提取该体系物理信息的基本理论工具 (T, V 分别为体系的动能和势能), 例如, 通常我们能从拉氏函数求出体系的运动方程. 对于经典场这种体系, 拉氏函数可以借助于**拉氏密度**$\mathcal{L}$ 来表达为 $L(t) \equiv \int \mathrm{d}^d x \mathcal{L}$. 设拉氏密度 $\mathcal{L}$ 是场量 $\varphi_a(\underline{x}, t) \equiv \varphi_a(x)$ (有时简记为 φ_a) 及其导数 $\partial_\mu \varphi_a$ 的函数 $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\varphi_a, \partial_\mu \varphi_a)$. 其中, 下标 $a = 1, 2, \cdots, n$, 它可以表示不同场量或者同一个场量的不同分量. 由作用量原理可导出如下**场的运动方程** (**拉氏方程**) (参见附录式 (1A.2.6))：

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_a} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi_a} = 0 \tag{1.2.1}$$

其中, 重复的时空指标自动求和 (**爱因斯坦求和规约**).

二、经典场的哈密顿形式

将场量 $\varphi_a(x)$ 视为正则坐标, 定义和它共轭的**正则动量**为

$$\pi_a(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_a} \tag{1.2.2}$$

其中, $\dot{\varphi}_a = \frac{\partial \varphi_a}{\partial t} = \partial_t \varphi_a$. 我们目前仅考虑 $\pi_a(x) \neq 0$(即无约束) 的情形. 这种情形下, 可以通过勒让德变换引入如下的场的哈密顿密度 (简称**哈氏密度**) $\mathcal{H}$ (参见附录式 (1B.7))：

$$\mathcal{H} \equiv \sum_a \pi_a \dot{\varphi}_a - \mathcal{L} \tag{1.2.3}$$

而场的 (总) 哈密顿为

$$H \equiv \int \mathrm{d}^d x \mathcal{H} \tag{1.2.4}$$

从拉氏运动方程 (1.2.1) 以及式 (1.2.2) 和式 (1.2.3) 可以得出场的运动方程 (哈密顿正则运动方程). 注意在式 (1.2.3) 中必须把 $\mathcal{H}$ 和 $\dot{\varphi}_a$ 理解成 φ_a, π_a 和 $\boldsymbol{\nabla}\varphi_a$ 的函数. 由该式可得

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_a} = \dot{\varphi}_a + \pi_b \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \pi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_b}\frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \pi_a} = \dot{\varphi}_a$$

其中, 重复指标自动求和. 因

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_a} &= \pi_b \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_b}\frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \varphi_a} = -\frac{\partial}{\partial x^\mu}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi_a} \\ &= -\dot{\pi}_a - \frac{\partial}{\partial x^i}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_i \varphi_a}\end{aligned}$$

其中, 第二等式利用了拉氏方程. 又因有

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \left(\dfrac{\partial \varphi_a}{\partial x^i}\right)} = \pi_b \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \partial_i \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_i \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_b}\frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \partial_i \varphi_a} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_i \varphi_a}$$

故有

$$\dot{\pi}_a = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_a} + \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \partial_i \varphi_a} \tag{1.2.5}$$

它连同

$$\dot{\varphi}_a = \frac{\partial H}{\partial \pi_a} \tag{1.2.6}$$

构成**场的正则运动方程**.

三、 经典场的正则量子化

经过量子化, 经典场量就会成为算符 (用符号 ^ 标记). 在无约束的情形, 经典场的正则量子化方法如下.

(1) 对正则变量 (即正则坐标和正则动量) 施加如下**等时量子化关系**:

$$[\hat{\varphi}_a(\underline{x}, t), \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)]_\mp = [\hat{\pi}_a(\underline{x}, t), \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)]_\mp = 0$$

$$[\hat{\varphi}_a(\underline{x}, t), \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)]_\mp = \mathrm{i}\delta^d(\underline{x} - \underline{y}) \tag{1.2.7}$$

其中, 有下标 $-$ 号的对易子用于玻色子场; 有 $+$ 号的反对易子用于费米子场; 若无正负下标, $[\cdots]$ 均理解成对易子. 此外, 费米子场总是和玻色子场对易. 场量和它共轭的动量之间的非零关系式表明它们现在已经是算符: **场算符**, 即**量子场**. 此时作为场量的函数的任何量 (如场的哈氏密度及总哈密顿) 也是算符.

(2) 量子场满足如下的**海森伯运动方程**:

$$\partial_t \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t) = \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)]$$

$$\partial_t \hat{\pi}_a(\underline{x}, t) = \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] \tag{1.2.8}$$

其中

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^d x \hat{\mathcal{H}} \tag{1.2.9}$$

是场的总哈密顿. 方程组 (1.2.8) 不是别的, 正是场的**正则运动方程的算符形式**. 虽然无论对玻色子场或是费米子场, 方程组 (1.2.8) 均成立, 但我们仅在玻色子场情形下来验证此结论:

$$\begin{aligned}
\partial_t \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t) &= \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)] = \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y [\hat{\mathcal{H}}(\underline{y}, t), \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)] \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)} [\hat{\pi}_b(\underline{y}, t), \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)] \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)} (-\mathrm{i}) \delta_{ab} \delta^d(\underline{x} - \underline{y}) \\
&= \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)}
\end{aligned} \tag{1.2.10}$$

上述推导中, 我们利用了公式

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B})[\hat{A}, \hat{B}]$$

其中, $\hat{A}, \hat{B}$ 都与 $[\hat{A}, \hat{B}]$ 对易.

$$\begin{aligned}
\partial_t \hat{\pi}_a(\underline{x}, t) &= \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] = \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y [\hat{\mathcal{H}}(\underline{y}, t), \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \left\{ \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} [\hat{\varphi}_b(\underline{y}, t), \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] + \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \partial_{y^i} \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} [\partial_{y^i} \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t), \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] \right\} \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \left\{ \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} \mathrm{i} \delta_{ab} \delta^d(\underline{x} - \underline{y}) + \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \partial_{y^i} \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} \mathrm{i} \delta_{ab} \partial_{y^i} \delta^d(\underline{x} - \underline{y}) \right\} \\
&= -\frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)} + \partial_i \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \partial_i \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)}
\end{aligned} \tag{1.2.11}$$

显然式 (1.2.10) 和式 (1.2.11) 正是式 (1.2.5) 和式 (1.2.6) 对应的量子化 (算符) 形式.

第三节　非相对论性粒子体系的场论描述

一、薛定谔场方程

量子力学 (QM) 中一个三维空间中的非相对论性粒子满足**薛定谔方程**(简称 S-

方程). 设电子处于外势场 $V(\underline{x})$ 中, 则有

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{x},t)=\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\psi(\underline{x},t) \tag{1.3.1}$$

为简单我们暂未计及自旋指标. 其中, 波函数 $\psi(\underline{x},t)$ 代表 t 时刻在 $\underline{x}$ 处出现这个粒子的概率幅. 假设我们能求解相应的**能量本征方程**:

$$\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\psi_\lambda(\underline{x})=E_\lambda\psi_\lambda(\underline{x}) \tag{1.3.2}$$

这至少对于某些特定的势函数能做到, 我们把本征函数 $\psi_\lambda(\underline{x})$ 或它对应的含时波函数 $\psi_\lambda(t,\underline{x})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_\lambda t}\psi_\lambda(\underline{x})$ 称为 **S-方程的模解**.

例如, **对于自由粒子** $(V(\underline{x})=0)$, 有正交归一的本征函数解:

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{x})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}\Big/\sqrt{V} \tag{1.3.3}$$

其中, V 是箱归一化体积, 并且由于此时它也是动量本征函数, 故下标 λ 可改用 $\underline{p}$ 来表示. 粒子动量满足关系式:

$$E_{\underline{p}}=\underline{p}^2/(2m) \tag{1.3.4}$$

进而也可以得到 S-方程的含时波函数:

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{x},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{\underline{p}}t-\underline{p}\cdot\underline{x})}\Big/\sqrt{V} \tag{1.3.5}$$

如果不采用**箱归一化**而采用**连续归一化**, 则应将 $1\Big/\sqrt{V}$ 换成 $1\Big/\sqrt{(2\pi)^3}$.

上述量子力学的 S-方程是一个单粒子方程, 它既不能描述多个粒子, 更不能描述粒子的产生和消灭. 但从量子场论的观点来看, 我们可以将 $\psi(t,\underline{x})$ 理解成一种"波动场", 薛定谔方程 (1.3.1) 被视为该波动场的**场方程**, 把这种场量子化后, 粒子将作为场的量子而出现. 这就像麦克斯韦波动方程被视为电磁场的场方程, 量子化后场的量子就是光子那样.

二、薛定谔场方程的量子化

易验证方程 (1.3.1) 是能由如下拉氏密度导出的拉氏方程:

$$\mathcal{L}=\psi^+(x)\left\{\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\right\}\psi(x) \tag{1.3.6}$$

定义和正则坐标 $\psi(x)$ 共轭的正则动量为

$$\pi(x)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}=\mathrm{i}\psi^+(x) \tag{1.3.7}$$