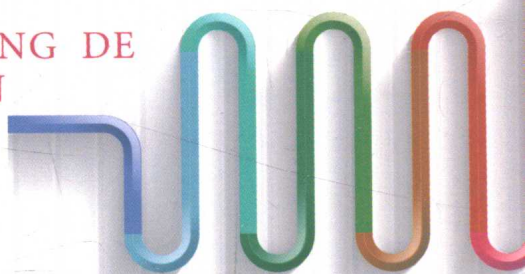


# 量子多体体系中的 量子相变

何培松 著

LIANGZI DUOTI TIXI ZHONG DE  
LIANGZI XIANGBIAN



北京邮电大学出版社  
[www.buptpress.com](http://www.buptpress.com)

# 量子多体体系中的量子相变

何培松 著



北京邮电大学出版社  
[www.buptpress.com](http://www.buptpress.com)

## 内 容 简 介

量子相变是最近二十多年来凝聚态物理领域实验和理论的一个研究的热点。本书对处理量子多体体系的量子相变的路径积分、高斯修正、重整化群等解析方法作了系统的讲述,对这些方法在石墨烯、金属巡游铁磁性、玻色型超冷原子等系统的相变及临界现象研究中的应用给出了详细的解析推导和物理分析。本书内容切合科学工作实际需要,物理分析细致,解析推导详尽,对于凝聚体物理量子相变方面的研究生以及科研工作者具有很好的参考价值。

### 图书在版编目(CIP)数据

量子多体体系中的量子相变 / 何培松著. --北京:北京邮电大学出版社, 2014.8

ISBN 978-7-5635-4054-9

I. ①量… II. ①何… III. ①固体理论—量子 IV. ①O481

中国版本图书馆CIP数据核字(2014)第166666号



书 名: 量子多体体系中的量子相变

著作责任者: 何培松 著

责任编辑: 李欣一

出版发行: 北京邮电大学出版社

社 址: 北京市海淀区西土城路10号(邮编:100876)

发行部: 电话: 010-62282185 传真: 010-62283578

E-mail: publish@bupt.edu.cn

经 销: 各地新华书店

印 刷: 北京源海印刷有限责任公司

开 本: 720 mm×1 000 mm 1/16

印 张: 9.5

字 数: 184千字

版 次: 2014年8月第1版 2014年8月第1次印刷

ISBN 978-7-5635-4054-9

定 价: 26.00元

• 如有印装质量问题,请与北京邮电大学出版社发行部联系 •

# 前言

当宏观量子数目的原子、分子等结合在一起的时候，它们可能会在合适的条件下呈现某种协调一致的集体行为来，这就是相变。相变行为随处可见。然而，对于相变规律的认识却经历了很长一段时间，经过了众多科学家的努力才渐渐地变得清楚。在研究方法上，理论学家们也发明了重整化群方法，通过它可以来研究一些相变的临界点、临界行为，求解临界指数，求解系统低能有效模型等。随着研究的深入，各种新的相变行为逐渐被人们认识。其中就有量子相变。量子相变严格的定义是在零温下，由于海森堡不确定性原理，当系统的一个相互作用与系统其他部分的哈密顿量不对易时，这一相互作用便会导致后者的本征态之间发生量子跃迁，也就是量子涨落。当量子涨落达到足够的强度以至于用来描述系统的主要物理过程的本征态发生了根本性的改变，这时候就是发生了量子相变。它是由量子涨落导致的。尽管这一过程发生在零温，但是在许多有限温度的情况中，特别是系统在量子相变临界点附近的物理性质却主要地由零温下的相变行为决定。这使得对零温下量子相变的研究显得尤其重要。

本人一直从事于量子多体体系的量子相变研究。在研究过程中，本人渐渐地萌生写一本专门关于量子多体体系的量子相变的书籍。这主要出于两方面考虑。首先是本人发现要进行这一方向的研究首先就需要一些解析技术的积累。已有的一些文献以及书籍往往在推导上不够详细，让初学者很难掌握。再加上很多的解析过程无资料可查，所以有必要对量子相变解析处理一些重要的方法进行详细的阐述。另一方面是，本人也有意把自己这些年来的一些研究成果进行归纳、整理，一是自己从中加深认识，提高科研水平，二是也向他人分享自己的经验和思考。

为了这两个目的，本书在选材以及内容上也有相应的特点。从章节内容来说，包括了路径积分方法、高斯修正、重整化群方法、非线性sigma模型等常用的且重要的处理量子多体体系相变的方法。研究的体系包括费米子、玻色子体系，零温以及有限温度情况，有长程序与无长程序。这样就使得内容相对比较全面并有代表性。而且，解析推导都给出了详细的过程。此外，选材也兼顾“新”。例如自旋轨道耦合玻色-爱因斯坦凝聚体是三年前才在超冷原子实验中实现，现在对它的理论和实验研究也处于相对初步的阶段。加上这一部分内容使得本书可以直接作为研究这一体系的一个有益的参考。

随着新材料的不断出现，许多新的物理现象也在不断涌现着。其中很多都需要对它零温下量子相变的行为有清楚的认识。理论上，新的研究方法和技术手段也在不断创新。量子多体体系的量子相变是一个很有潜力的研究方向。本书寄希望于对同行有实际的用处。

本书写作过程中，感谢北京工商大学青年教师启动基金的支持以及北京邮电大学出版社在文字编辑排版等方面付出的努力。

何培松

2014年05月

# 目 录

|                                        |    |
|----------------------------------------|----|
| 第 1 章 量子多体体系的路径积分 . . . . .            | 1  |
| 1.1 玻色子相干态 . . . . .                   | 1  |
| 1.2 费米子相干态 . . . . .                   | 2  |
| 1.3 配分函数的路径积分 . . . . .                | 3  |
| 第 2 章 重整化群的原理和方法 . . . . .             | 6  |
| 2.1 重整化群方法的基本出发点 . . . . .             | 6  |
| 2.2 重整化群方法在凝聚态多体体系研究中的应用 . . . . .     | 7  |
| 2.3 Wilson重整化群方法 . . . . .             | 12 |
| 第 3 章 石墨烯的非朗道费米液体行为 . . . . .          | 13 |
| 3.1 石墨烯简介 . . . . .                    | 16 |
| 3.2 石墨烯中电子的能带结构 . . . . .              | 21 |
| 3.3 石墨烯配分函数的路径积分形式 . . . . .           | 23 |
| 3.4 重整化群方程的推导——Wilson的重整化群方法 . . . . . | 28 |
| 3.4.1 粒子-空穴涨落导致的相互作用屏蔽效应 . . . . .     | 29 |
| 3.4.2 费米子传播子的重整化 . . . . .             | 31 |
| 3.4.3 求解重整化群方程, 得到低能有效作用量 . . . . .    | 35 |
| 3.5 重整化的石墨烯的自由能和比热的计算 . . . . .        | 37 |
| 3.6 重整化群下石墨烯的磁化率的计算 . . . . .          | 39 |
| 3.7 维度正规化方法求石墨的重整化群方程 . . . . .        | 43 |
| 第 4 章 高斯修正方法用于石墨烯比热和磁化率的计算 . . . . .   | 50 |
| 4.1 高斯修正 . . . . .                     | 50 |
| 4.1.1 高斯修正的推导 . . . . .                | 50 |
| 4.1.2 有限温度极化图 (不含磁场) . . . . .         | 55 |
| 4.1.3 有限温度极化图 (含磁场) . . . . .          | 61 |
| 4.2 高斯修正下比热的计算 . . . . .               | 65 |
| 4.3 高斯修正下磁化率的计算 . . . . .              | 71 |

|                                     |            |
|-------------------------------------|------------|
| <b>第 5 章 巡游电子体系的磁有序</b>             | <b>76</b>  |
| 5.1 配分函数                            | 76         |
| 5.1.1 铁磁交换作用                        | 76         |
| 5.1.2 路径积分下磁性模型的作用量                 | 78         |
| 5.2 重整化群方程                          | 79         |
| 5.2.1 动量及频率壳层分离                     | 79         |
| 5.2.2 高能涨落与低能涨落耦合项对低能涨落作用量的修正       | 80         |
| 5.2.3 重新标度的作用量                      | 83         |
| 5.2.4 重整化群流方程                       | 85         |
| <b>第 6 章 二维玻色系统的临界行为</b>            | <b>88</b>  |
| 6.1 玻色-爱因斯坦凝聚与超流                    | 88         |
| 6.2 凝聚密度、超流密度与超流刚度                  | 90         |
| 6.3 超流刚度公式的推导                       | 91         |
| 6.4 一圈图重整化群计算超流刚度                   | 96         |
| 6.4.1 重整化群方程的推导                     | 96         |
| 6.4.2 重整化群方程求解                      | 100        |
| 6.4.3 超流刚度的计算                       | 101        |
| <b>第 7 章 自旋轨道耦合玻色-爱因斯坦凝聚体的热力学性质</b> | <b>102</b> |
| 7.1 激发态性质                           | 102        |
| 7.1.1 激发子的色散关系                      | 103        |
| 7.1.2 静态结构因子                        | 108        |
| 7.1.3 费曼关系                          | 109        |
| 7.2 凝聚体稳定性                          | 111        |
| 7.2.1 量子耗散 $n_{\text{ex}}$          | 111        |
| 7.2.2 凝聚分数 $n_0/n$                  | 116        |
| 7.3 有限温度下凝聚体的热力学稳定性                 | 118        |
| <b>第 8 章 自旋轨道耦合玻色-爱因斯坦凝聚体的超流性质</b>  | <b>122</b> |
| 8.1 朗道判据                            | 122        |
| 8.2 阻尼力和超流临界速度                      | 127        |
| 8.2.1 超流临界速度                        | 129        |
| 8.2.2 杂质阈                           | 130        |
| 8.2.3 横向力                           | 131        |
| 8.2.4 阻尼力的非解析峰                      | 136        |
| <b>参考文献</b>                         | <b>138</b> |

# 第 1 章 量子多体体系的路径积分

本章，将讲述在量子多体体系的理论研究中广泛应用的费曼路径积分的概念。在解析方法研究量子多体体系过程中，利用量子力学算符处理两体相互作用带来的量子涨落时，由于玻色子算符满足的对易性质以及费米子算符满足的反对易性质，计算量子涨落时很不方便。这一问题可以通过费曼路径积分方法解决。费曼路径积分是量子力学的除海森堡矩阵力学、薛定谔方程外的第三种等价的表述形式。它在处理量子多体体系时最为方便。在路径积分的框架下，玻色子和费米子系统须建立在相干态表象下。在这一表象下，费米子算符和玻色子算符分别成为Grassmann和复数这两代数，从而使得计算量子涨落的圈图时特别方便。这部分内容更详细的讲述可以参考*Quantum many-particle systems* (Negele, Orland, 1988)一书。本章前两节将给出玻色子和费米子的相干态表象以及玻色子和费米子算符在这一表象中的作用的形式，在1.3节将给出量子多体体系的配分函数的路径积分表达式。本书第4章石墨体系、第5章巡游电子体系、第7章和第8章的相互作用玻色体系的研究中，主要部分将在路径积分框架下计算和研究。

## 1.1 玻色子相干态

在二次量子化表象中，玻色子满足对易关系 $[a_\alpha, a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}$ 。我们定义玻色子的相干态为玻色子消灭算符的本征态，即

$$\hat{a}_\alpha |z_1 \cdots z_k \cdots\rangle = z_\alpha |z_1 \cdots z_k \cdots\rangle \quad (1.1)$$

若令

$$|z_1 \cdots z_k \cdots\rangle = N(z) \exp \left[ \sum_{\alpha'} z_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'}^\dagger \right] |0\rangle \quad (1.2)$$

我们很容易验证 $|z_1 \cdots z_k \cdots\rangle$ 就是所要求的态。实际上，我们有

$$\begin{aligned} & \hat{a}_\alpha |z_1 \cdots z_k \cdots\rangle \\ &= N(z) \hat{a}_\alpha \exp \left[ \sum_{\alpha'} z_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'}^\dagger \right] |0\rangle \\ &= N(z) \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_p}} \frac{\hat{a}_\alpha}{n_{\alpha_1}! n_{\alpha_2}! \cdots n_{\alpha_p}!} (z_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger)^{n_{\alpha_1}} (z_{\alpha_2} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger)^{n_{\alpha_2}} \cdots (z_{\alpha_p} \hat{a}_{\alpha_p}^\dagger)^{n_{\alpha_p}} |0\rangle \end{aligned}$$

$$= N(z) \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_p}} \frac{z_{\alpha_1}^{n_{\alpha_1}} z_{\alpha_2}^{n_{\alpha_2}} \dots z_{\alpha_p}^{n_{\alpha_p}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!} \sqrt{n_{\alpha_2}!} \dots \sqrt{n_{\alpha_p}!}} \hat{a}_{\alpha} | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots n_{\alpha_p} \rangle$$

利用关系式

$$\hat{a}_{\alpha} | n_{\alpha} \rangle = \sqrt{n_{\alpha}} | n_{\alpha} - 1 \rangle \quad (1.3)$$

及  $| n_{\alpha} \rangle$  的表达式

$$| n_{\alpha} \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\alpha}}} (\hat{a}_{\alpha}^{\dagger})^{n_{\alpha}} | 0 \rangle \quad (1.4)$$

我们得到

$$\begin{aligned} & \hat{a}_{\alpha} | z_1 \dots z_k \dots \rangle \\ &= N(z) \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_p}} \frac{z_{\alpha_1}^{n_{\alpha_1}} z_{\alpha_2}^{n_{\alpha_2}} \dots z_{\alpha_p}^{n_{\alpha_p}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!} \sqrt{n_{\alpha_2}!} \dots \sqrt{n_{\alpha_p}!}} \sqrt{n_{\alpha}} | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots (n_{\alpha} - 1) \dots n_{\alpha_p} \rangle \\ &= z_{\alpha} N(z) \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_p}} \frac{(z_{\alpha_1} a_{\alpha_1}^{\dagger})^{n_{\alpha_1}} (z_{\alpha_2} a_{\alpha_2}^{\dagger})^{n_{\alpha_2}} \dots (z_{\alpha_p} a_{\alpha_p}^{\dagger})^{n_{\alpha_p}}}{n_{\alpha_1}! n_{\alpha_2}! \dots n_{\alpha_p}!} | 0 \rangle \\ &= z_{\alpha} | z_1 \dots z_k \dots \rangle \end{aligned}$$

按照定义,  $N(z)$  为归一化常数, 它可以通过计算  $\langle \dots z'_k \dots z'_1 | z_1 \dots z_k \dots \rangle$  来确定, 即

$$\begin{aligned} & \langle \dots z'_k \dots z'_1 | z_1 \dots z_k \dots \rangle \\ &= N^*(z') N(z) \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_p}} \sum_{n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}, \dots, n'_{\alpha_p}} \frac{z_{\alpha_1}^{n_{\alpha_1}} z_{\alpha_2}^{n_{\alpha_2}} \dots z_{\alpha_p}^{n_{\alpha_p}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!} \sqrt{n_{\alpha_2}!} \dots \sqrt{n_{\alpha_p}!}} \cdot \\ & \quad \frac{z_{\alpha_1}^{n'_{\alpha_1}} z_{\alpha_2}^{n'_{\alpha_2}} \dots z_{\alpha_p}^{n'_{\alpha_p}}}{\sqrt{n'_{\alpha_1}!} \sqrt{n'_{\alpha_2}!} \dots \sqrt{n'_{\alpha_p}!}} \langle n'_{\alpha_1} n'_{\alpha_2} \dots n'_{\alpha_p} | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots n_{\alpha_p} \rangle \end{aligned}$$

令  $\langle \dots z_k \dots z_1 | z_1 \dots z_k \dots \rangle = 1$ , 我们得到

$$N(z) = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} | z_{\alpha} |^2 \right] \quad (1.5)$$

因此, 我们得到归一化的玻色子相干态

$$| z_1 \dots z_k \dots \rangle = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} | z_{\alpha} |^2 \right] \exp \left[ \sum_{\alpha} z_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} \right] | 0 \rangle \quad (1.6)$$

## 1.2 费米子相干态

为了构建费米子的相干态, 我们必须利用反对易数, 即所谓 Grassmann 数。Grassmann 代数是由一组生成元  $\{\xi_{\alpha}\}$  来定义的, 它们满足反对易关系

$$\xi_{\alpha} \xi_{\beta} + \xi_{\beta} \xi_{\alpha} = 0 \quad (1.7)$$

另外,我们还需定义生成元的复共轭 $\xi_\alpha^*$ 。同时,我们要求

$$(\xi_\alpha^*)^* = \xi_\alpha \quad (1.8)$$

而对于任意生成元的乘积,我们有

$$(\xi_{\alpha_1} \cdots \xi_{\alpha_n})^* = \xi_{\alpha_n}^* \xi_{\alpha_{n-1}}^* \cdots \xi_{\alpha_1}^*$$

Grassmann代数的基就是由生成元的所有不同的乘积构成的。我们考虑一种最简单的情况:假设一个Grassmann代数只有两个生成元 $\xi$ 和 $\xi^*$ ,那么Grassmann代数的基为 $\{1, \xi, \xi^*, \xi\xi^*\}$ 。对于任意一个算符,它在Grassmann代数表象中的表示必然具有如下形式

$$A(\xi, \xi^*) = a_0 + a_1\xi + \bar{a}_1\xi^* + a_{12}\xi\xi^* \quad (1.9)$$

另外我们还可定义Grassmann函数的导数规则,我们要求导数算符 $\frac{\partial}{\partial \xi}$ 必须直接作用在 $\xi$ 上。例如

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi}(\xi^*\xi) &= \frac{\partial}{\partial \xi}(-\xi\xi^*) = -\xi^* \\ \frac{\partial}{\partial \xi}A(\xi^*\xi) &= a_1 - a_{12}\xi^* \\ \frac{\partial}{\partial \xi^*}A(\xi^*\xi) &= \bar{a}_1 + a_{12}\xi \\ \frac{\partial}{\partial \xi^*} \frac{\partial}{\partial \xi}A(\xi^*\xi) &= -a_{12} = -\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \xi^*}A(\xi^*\xi) \end{aligned} \quad (1.10)$$

对于Grassmann代数的积分,定义如下的形式

$$\begin{aligned} \int d\xi 1 &= 0, & \int d\xi^* 1 &= 0 \\ \int d\xi \xi &= 1, & \int d\xi^* \xi^* &= 1 \\ \int d\xi \xi^* &= 0, & \int d\xi^* \xi &= 0 \end{aligned} \quad (1.11)$$

现在可以仿造玻色子给出归一化的费米子相干态

$$|\xi_1 \cdots \xi_k \cdots\rangle = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha} \right] \exp \left[ \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle \right] \quad (1.12)$$

利用前面给出的Grassmann代数的运算规则,很容易验证 $|\xi_1 \cdots \xi_k \cdots\rangle$ 就是 $a_{\alpha}$ 算符的本征态。

### 1.3 配分函数的路径积分

路径积分的一个主要用途是计算一个多体体系的配分函数。在二次量子化表象中,对于一个多体系统的哈密顿量,我们可以利用相干态 $|z\rangle$ 来得到多体演化算符

的路径积分表示, 进而得到一个多体体系的配分函数。作为例子, 我们考虑哈密顿量  $H = \sum_k \varepsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \lambda \sum_{k, k', q} v(q) \hat{a}_{k+q}^\dagger \hat{a}_{k'-q}^\dagger \hat{a}_{k'} \hat{a}_k$ 。若假设其中的产生和湮灭算符是玻色型的, 其配分函数可以写作

$$\begin{aligned}
 Z &= \text{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)} \\
 &= \sum_n \langle n | e^{-\beta(H-\mu N)} | n \rangle \\
 &= \sum_n \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \langle n | e^{-\beta(H-\mu N)} | \alpha \rangle \langle \alpha | n \rangle, \quad \alpha = \{ |z_{k_1}, z_{k_2}, \dots \} \} \\
 &= \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \sum_n \langle \alpha | n \rangle \langle n | e^{-\beta(H-\mu N)} | \alpha \rangle \\
 &= \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \langle \alpha | e^{-\beta(H-\mu N)} | \alpha \rangle \\
 &= \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \alpha | (e^{-\frac{\beta}{N} H_0} e^{-\frac{\beta}{N} V})^N | \alpha \rangle \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \prod \frac{d^2 z_k(\tau_1) \dots d^2 z_k(\tau_N)}{\pi} \\
 &\quad \langle \alpha | e^{-\frac{\beta}{N} H_0} e^{-\frac{\beta}{N} V} | z_k(\tau_1) \rangle \dots \langle z_k(\tau_{N-1}) | e^{-\frac{\beta}{N} H_0} e^{-\frac{\beta}{N} V} | \alpha \rangle
 \end{aligned}$$

现在考察

$$\begin{aligned}
 &\left\langle z_k(\tau_i) \left| e^{-\frac{\beta}{N} H_0} e^{-\frac{\beta}{N} V} \right| z_k(\tau_{i+1}) \right\rangle \\
 &\approx \left\langle z_k(\tau_i) \left| 1 - \frac{\beta}{N} \sum_k (\varepsilon_k - \mu) a_k^+ a_k - \frac{\beta}{N} \lambda \sum v(q) a_{k+q}^+ a_{k'-q}^+ a_{k'} a_k \right| z_k(\tau_{i+1}) \right\rangle \\
 &= \langle z_k(\tau_i) | z_k(\tau_{i+1}) \rangle \left[ 1 - \frac{\beta}{N} \sum_k (\varepsilon_k - \mu) \bar{z}_k z_k - \frac{\beta}{N} \lambda \sum v(q) \bar{z}_{k+q} \bar{z}_{k'-q} z_{k'} z_k \right] \\
 &\approx \langle z_k(\tau_i) | z_k(\tau_{i+1}) \rangle \exp \left[ -\frac{\beta}{N} \sum_k (\varepsilon_k - \mu) \bar{z}_k z_k - \frac{\beta}{N} \lambda \sum v(q) \bar{z}_{k+q} \bar{z}_{k'-q} z_{k'} z_k \right] \\
 &= \exp \left[ -\frac{1}{2} |z_k(\tau_i)|^2 - \frac{1}{2} |z_k(\tau_{i+1})|^2 + \bar{z}_k(\tau_i) z_k(\tau_{i+1}) \right] \exp \left[ -\frac{\beta}{N} (H - \mu)(\bar{z}_k, z_k) \right] \\
 &= \exp \left[ -\frac{1}{2} \bar{z}_k(\tau_i) [z_k(\tau_i) - z_k(\tau_{i+1})] - \frac{1}{2} [\bar{z}_k(\tau_{i+1}) - \bar{z}_k(\tau_i)] z_k(\tau_{i+1}) \right] \\
 &\quad \exp \left[ -\frac{\beta}{N} (H - \mu)(\bar{z}_k, z_k) \right]
 \end{aligned}$$

因此, 我们最后有

$$\begin{aligned}
 &\text{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)} \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \prod \frac{d^2 z_k(\tau_1) \dots d^2 z_k(\tau_{N-1})}{\pi}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \exp \left\{ \sum_i -\frac{\beta}{2N} \left[ \bar{z}_k(\tau_i) \frac{z_k(\tau_i) - z_k(\tau_{i+1})}{\beta/N} + \frac{\bar{z}_k(\tau_{i+1}) - \bar{z}_k(\tau_i)}{\beta/N} z_k(\tau_{i+1}) \right] \right\} \\
& \exp \left\{ \sum_i -\frac{\beta}{N} (H - \mu) [\bar{z}_k(\tau_i), z_k(\tau_i)] \right\} \\
& = \int \frac{Dz(\tau)}{\pi} \exp \left[ \int_0^\beta \left( \frac{1}{2} \bar{z}_k \frac{dz_k}{d\tau} - \frac{1}{2} \frac{d\bar{z}_k}{d\tau} z_k \right) d\tau - \int_0^\beta d\tau [H(\bar{z}_k(\tau), z_k(\tau)) - \mu] \right] \\
& = \int \prod_k \frac{d^2 z_k}{\pi} \int \prod_k \frac{D^2 z_k(\tau)}{\pi} \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \cdot \right. \\
& \quad \left. \sum_k \left[ \frac{1}{2} \left( \bar{z}_k(\tau) \frac{dz_k(\tau)}{d\tau} - \frac{d\bar{z}_k(\tau)}{d\tau} z_k(\tau) \right) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. (\varepsilon_k - \mu) \bar{z}_k(\tau) z_k(\tau) + \lambda \sum_{k,k',q} v(q) \bar{z}_{k+q}(\tau) \bar{z}_{k'-q}(\tau) z_{k'}(\tau) z_k(\tau) \right] \right\} \quad (1.13)
\end{aligned}$$

同理, 对于一个已经正则化的多体费米子的哈密顿量系统  $H(a^\dagger, a)$ , 它的配分函数可以形式地写成

$$\begin{aligned}
Z &= \int_{\xi_\alpha(\beta) = -\xi_\alpha(0)} D[\xi_\alpha^*(\tau), \xi_\alpha(\tau)] \cdot \\
& \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_\alpha \left[ \frac{1}{2} \left( \bar{\xi}_\alpha(\tau) \frac{d\xi_\alpha(\tau)}{d\tau} - \frac{d\bar{\xi}_\alpha(\tau)}{d\tau} \xi_\alpha(\tau) \right) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. H(\xi_\alpha^*(\tau), \xi_\alpha(\tau)) - \mu \bar{\xi}_\alpha(\tau) \xi_\alpha(\tau) \right] \right\} \quad (1.14)
\end{aligned}$$

## 第 2 章 重整化群的原理和方法

### 2.1 重整化群方法的基本出发点

什么叫作重整化群？当我们在量子力学中提到群的时候，就会想到一种对称性变换，该变换使得系统的物理性质保持不变。重整化群中所说的变换又是如何的呢？它在量子多体体系的研究中会起到什么作用？我们下面做一个简单的介绍。

以量子电动力学为例。利用Feynman展开的微扰论方法，我们计算一个物理量，比如电子之间的散射率，会得到一个按照耦合常数 $\alpha$ 展开的级数，每一项的系数是粒子动量 $k$ 的积分式。这样的积分式会出现紫外发散，即 $k$ 允许的取值可以到无穷大时，系数趋向于正或负无穷，这使得整个理论失去意义。

为了克服这一困难，人们引入了重整化方法。用这个方法，我们首先对所有的积分作紫外截断 $\Lambda$ ，从而得到有限结果。显然，这样得到的展开系数将与截断 $\Lambda$ 有关。但是，在连续场论中这个截断是人为引入的，物理上并不存在。为了解决这个问题，对于任意 $\Lambda$ ，我们要求可以重新定义一个相应的耦合常数 $\alpha(\Lambda)$ ，使得计算最后给出的物理量与 $\Lambda$ 无关。在量子电动力学和其他可重整的理论中，这是可以做到的。换句话说，对于微扰展开的任意级次，可以定义该系统的一系列和截断 $\Lambda$ 相关的参数，使得系统在动量远小于 $\Lambda$ 时的物理性质和 $\Lambda$ 无关。由于实际的 $\Lambda$ 最后要取为无穷大，也就是说，系统在任意有限动量上的物理性质和 $\Lambda$ 无关，于是，我们要求理论具有这样的不变性：当 $\Lambda$ 改变一个比例 $s$ 时，耦合常数将作相应的变化，而最后给出的结果将是与 $s$ 无关的。这也就导致了重整化群的想法。也就是说，对于 $\Lambda$ 改变一个比例 $s$ 这种变换的全体有一个类似群的结构，即满足组合律；先改变 $\Lambda$ 比例为 $s_1$ ，再接着改变 $\Lambda$ 比例为 $s_2$ 得到的耦合常数等于作一次改变 $\Lambda$ 比例为 $s_1 s_2$ 得到的耦合常数。但严格说起来，这并不是一个群，而是一个所谓的半群。原因是在上述定义下，我们无法定义逆变换。

现在，我们把 $s$ 写成

$$s = e^t \quad (2.1)$$

并令

$$\Lambda(t) = \Lambda_0 / s = \Lambda_0 e^{-t} \quad (2.2)$$

其中 $\Lambda$ 是一个固定的数。如上所述，为了使得最后结果有物理意义，我们要让耦合常

数 $\alpha$ 也作相应的改变, 即 $\alpha(t)$ 也随参量 $t$ 改变。并令

$$\beta(\alpha) = \frac{d\alpha(t)}{dt} \quad (2.3)$$

由此, 我们可以定义所谓 $\beta$ 函数。它是重整化群理论中最重要的一个物理量, 决定了相应的相互作用在整个理论框架下所起的作用。在下一节讨论重整化群方法在研究量子多体体系中相变的应用时, 我们还会对 $\beta$ 函数给予更多的关注。

## 2.2 重整化群方法在凝聚态多体体系研究中的应用

如上所述, 在连续场论中, 主要的发散问题是由大动量自由度引起的, 故称为紫外发散。然而在凝聚态物理研究中, 考虑的模型须是建立在一个晶格上的。此时存在一个自然的大动量截断 $\Lambda \sim 1/a$ , 这里 $a$ 为晶格常数。因此, 紫外发散并不是凝聚态多体体系研究中遇到的主要问题。反倒是由于有序相中的对称性自发破缺后出现的软模引起的小动量(红外)发散的问题成为了主要矛盾。但即使在此情况下, 重整化群方法也不失为一种极为重要的研究方法。按照Anderson的讲法, 这种方法可以视作一种系统地去除高能量自由度, 但又保留由其存在引起的虚过程导致的效应, 从而推出低能有效哈密顿量的程序。关于这一点, 我们在下面的章节还会给以更为详细的讨论。

我们要用到的关于重整化群的理论框架是Kadanoff (Kadanoff, 1966)和Wilson (Wilson, 1971) 在研究凝聚态体系临界现象过程中引入的。在他们的理论中, 尽管体系中存在一个自然的紫外截断 $\Lambda$ , 故不存在紫外发散问题, 但还是能够通过形式地变换截断 $\Lambda$ 来发掘体系在临界点处的性质。其原因如下。

在凝聚态物理中, 电子之间的库仑相互作用的能量量级是 $1 \sim 10 \text{ eV}$ , 而实验一般是在 $10^2 \text{ K}$  量级的温度下进行的, 相当于 $10^{-2} \text{ eV}$ 。在此温度下, 决定多体系统主要物理性质的准粒子激发的能量小于 $k_B T$ 。此时, 能量远高于 $k_B T$ 的激发态对于体系自由度的贡献由于吉布斯分布 $\exp(-\epsilon/k_B T)$ 缘故, 可以略去不计。换句话说, 我们在计算体系的自由能时, 可以忽略掉高能激发态的贡献。但实际情况要比这复杂一些。根据量子力学的测不准原理 $\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$ , 当高能级态存在时, 体系时可以“自发”地从一个低能级态跳迁到一个高能级态, 但是它必须很快地跳迁回来, 以使得能量守恒不被破坏。因此, 这一快得无法观测的过程被称为虚过程。值得强调的是, 尽管虚过程本身不可观测, 但它会引起一些可观测的后果, 例如引起反铁磁超交换相互作用。

由于虚过程以及由它引起的可观测的后果的存在, 简单地从理论中略去高激发态的作法变得不可行。人们必须一方面保留由于虚过程导致的物理后果, 另一方面又能去除高激发态自由度自身, 从而得到关于低能涨落的有效作用量, 以描述在温度 $T$ 在 $10^2 \text{ K}$ 量级下多体体系的物理性质。对于这一目的, 正如Anderson所注意到的, Kadanoff和Wilson的重整化群方法是一个十分有效的手段。

让我们通过具体例子的研究来介绍重整化群是如何求出低能有效作用量上的。

我们考虑一个 $d$ 维的立方晶格。在每个格点(坐标表示成矢量 $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$ ),

$n_i$ 为整数) 上有一个实的标量场 $\phi(\mathbf{n})$ 。在统计力学中, 这个系统可以用配分函数

$$Z = \int \prod_{\mathbf{n}} d\phi(\mathbf{n}) e^{S(\mathbf{n})} \quad (2.4)$$

来描述。通过傅里叶变换, 我们将它变换到动量空间表示。首先, 我们有

$$\phi(\mathbf{n}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \quad (2.5)$$

这里 $V$ 为体系体积, 动量 $\mathbf{k}$ 位于第一布里渊区内。相应地, 配分函数变可以改写作

$$Z = \int \prod_{|\mathbf{k}| \leq \pi/a} d\phi(\mathbf{k}) e^{S[\phi(\mathbf{k})]} \quad (2.6)$$

如上所述, 与实验观测密切联系的是低能量涨落的行为, 它们对体系的物理性质起支配作用。在动量空间中, 这些低能量涨落具有小的动量 $\mathbf{k}$ 。为简单起见, 我们把上述问题的涨落模式的布里渊区取作简单的球面, 球心的动量为零, 从球心向外动量逐渐增大。由于我们主要关心接近于球心处的涨落模式的行为, 故定义如下的量:

$$\begin{aligned} \phi_{<} &= \phi(\mathbf{k}), 0 < |\mathbf{k}| < \Lambda/s \\ \phi_{>} &= \phi(\mathbf{k}), \Lambda/s < |\mathbf{k}| < \Lambda \end{aligned} \quad (2.7)$$

并把 $\phi_{<}$ 称作“慢模”, 而把 $\phi_{>}$ 称作“快模”。此时,  $S(\phi)$ 可以写成如下形式:

$$S(\phi_{<}, \phi_{>}) = S_0(\phi_{<}) + S_0(\phi_{>}) + S_{\text{int}}(\phi_{<}, \phi_{>}) \quad (2.8)$$

这里 $S_0$ 是 $\phi$ 的二次型, 并仅与慢模或是快模部分有关。 $S_{\text{int}}$ 是相互作用部分, 包含了慢模和快模的混合。由于慢模和快模之间存在相互作用(包含在 $S_{\text{int}}$ 中), 快模会对慢模的行为引起修正。重整化群方法就是要在计算快模对慢模行为的修正的同时, 将快模自由度积分掉, 从而得到关于慢模的有效作用量。将 $S(\phi)$ 的分解式(2.8)代入配分函数的表达式后, 我们得到

$$Z = \int d\phi_{<} d\phi_{>} e^{S_0(\phi_{<}) + S_0(\phi_{>}) + S_{\text{int}}(\phi_{<}, \phi_{>})} \quad (2.9)$$

$$= \int d\phi_{<} e^{S'(\phi_{<})} \quad (2.10)$$

这里, 有效作用量 $S'(\phi_{<})$ 被定义作

$$\begin{aligned} e^{S'(\phi_{<})} &= e^{S_0(\phi_{<})} \frac{\int d\phi_{>} e^{S_0(\phi_{>}) + S_{\text{int}}(\phi_{<}, \phi_{>})}}{\int d\phi_{>} e^{S_0(\phi_{>})}} \int d\phi_{>} e^{S_0(\phi_{>})} \\ &\approx e^{S_0(\phi_{<})} \langle e^{S_{\text{int}}(\phi_{<}, \phi_{>})} \rangle_{0>} \end{aligned} \quad (2.11)$$

其中,  $\langle \cdot \rangle_{0>}$ 表示对快模求平均。上式最后一行中, 我们略去了因子 $\int d\phi_{>} e^{S_0(\phi_{>})}$ , 后者只是快模的积分, 对于慢模没影响。到此, 我们得到了描述慢模的有效作用量 $S'(\phi_{<})$ 。

其中的参数已经和原来的作用量 $S(\phi)$ 中的参数不同了。而重整化群的目的是要求得到关于慢模的有效作用量中的参数随着慢模的动量截断 $\Lambda/s$ 改变时的行为,并最终得到在某个确定的动量截断下的参数的值以及低能的有效作用量。

为了将讨论具体化,现在我们考虑具有如下形式的作用量的体系。对于自由部分 $S_0$ ,有

$$S_0(\phi, \phi^*) = - \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \phi^*(\mathbf{k})(r_0 + |\mathbf{k}|^2)\phi(\mathbf{k}) \frac{d^4\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \quad (2.12)$$

而相互作用作用量 $S_{\text{int}}$ 则可写作

$$\begin{aligned} S_{\text{int}} &= - \frac{u_0}{2!2!} \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \prod_{i=1}^4 \frac{d^4\mathbf{k}_i}{(2\pi)^4} \phi^*(\mathbf{k}_4)\phi^*(\mathbf{k}_3)\phi(\mathbf{k}_2)\phi(\mathbf{k}_1)(2\pi)^4 \\ &\quad \delta^4(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \\ &\stackrel{\text{def}}{=} - \frac{u_0}{2!2!} \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \phi^*(4)\phi^*(3)\phi(2)\phi(1) \end{aligned} \quad (2.13)$$

如上所述,我们把涨落分为快模和慢模,并由此得到

$$\begin{aligned} S(\phi, \phi^*) &= S(\phi_<, \phi_>) \\ &= S_0(\phi_<) + S_0(\phi_>) + S_{\text{int}}(\phi_<, \phi_>) \\ S_0(\phi_<) &= - \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda/s} \frac{d^4\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \phi^*(\mathbf{k})(r_0 + |\mathbf{k}|^2)\phi(\mathbf{k}) \\ S_0(\phi_>) &= - \int_{\Lambda/s < |\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \phi^*(\mathbf{k})(r_0 + |\mathbf{k}|^2)\phi(\mathbf{k}) \\ S_{\text{int}}(\phi_<, \phi_>) &= - \frac{u_0}{2!2!} \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} (\phi_> + \phi_<)_4^* (\phi_> + \phi_<)_3^* (\phi_> + \phi_<)_2 (\phi_> + \phi_<)_1 \end{aligned} \quad (2.14)$$

为了得到流方程,我们把 $s$ 取作略大于1,也就是说快模只定义在薄壳层 $\Lambda/s < |\mathbf{k}| < \Lambda$ 内。于是根据式(2.11),我们得到

$$\begin{aligned} e^{S'(\phi_<)} &= e^{S_0(\phi_<)} \langle e^{S_{\text{int}}(\phi_<, \phi_>)} \rangle_{0>} \\ &= \exp \left[ S_0(\phi_<) + \langle S_{\text{int}} \rangle_{0>} + \frac{1}{2} (\langle S_{\text{int}}^2 \rangle_{0>} - \langle S_{\text{int}} \rangle_{0>}^2) + \cdots \right] \end{aligned} \quad (2.15)$$

在计算上式后,我们得到

$$S'(\phi_<) = S_0(\phi_<) + S_{\text{int}}(\phi_<) + \delta S_0(\phi_<) + \delta S_{\text{int}}(\phi_<) \quad (2.16)$$

这里,  $\delta S_0(\phi_<)$ 和 $\delta S_{\text{int}}(\phi_<)$ 是把快模积分之后得到的关于慢模的修正项。其中

$$\delta S_0(\phi_<) = - \frac{1}{2!2!} u_0 \left\langle \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} [\phi_>^*(4)\phi_<^*(3) + \phi_<^*(4)\phi_>^*(3)] \cdot \right.$$

$$\begin{aligned}
& [\phi_{>}(2)\phi_{<}(1) + \phi_{<}(2)\phi_{>}(1)] \Big\rangle_{0>} \\
&= -u_0 \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda/s} \frac{d^4\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \phi_{<}^*(\mathbf{k}) \phi_{<}(\mathbf{k}) \int_{\Lambda/s}^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \frac{1}{|\mathbf{k}|^2} \\
\delta S_{\text{int}}(\phi_{<}) &= \int_0^{\Lambda/s} \phi_{<}^*(4)\phi_{<}^*(3)\phi_{<}(2)\phi_{<}(1)\delta u(4321)
\end{aligned} \tag{2.17}$$

而 $\delta u(4321)$ 则由下式给出

$$\begin{aligned}
\delta u(4321) &= \frac{1}{2!2!} u_0^2 \left[ \int_{\Lambda/s}^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} \frac{1}{|\mathbf{k}'|^2 |\mathbf{k}' - \mathbf{k}_3/s + \mathbf{k}_1/s|^2} + \right. \\
&\quad \left. \int_{\Lambda/s}^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} \frac{1}{|\mathbf{k}'|^2 |\mathbf{k}' - \mathbf{k}_4/s + \mathbf{k}_1/s|^2} + \right. \\
&\quad \left. \frac{1}{2} \int_{\Lambda/s}^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} \frac{1}{|\mathbf{k}'|^2 |-\mathbf{k}' + \mathbf{k}_2/s + \mathbf{k}_1/s|^2} \right] \\
&= \frac{1}{2!2!} \frac{5u_0^2}{2} \int_{\Lambda/s}^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} \frac{1}{|\mathbf{k}'|^4} + \dots
\end{aligned} \tag{2.18}$$

将这些结果代入(2.16)式中, 我们得到

$$\begin{aligned}
S'(\phi_{<}) &= - \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda/s} \frac{d^4\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \left( r_0 + |\mathbf{k}|^2 + u_0 \int_{\Lambda/s}^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} \frac{1}{|\mathbf{k}'|^2} \right) \phi_{<}^*(\mathbf{k}) \phi_{<}(\mathbf{k}) - \\
&\quad \frac{1}{2!2!} \left( u_0 - \frac{5u_0^2}{2} \int_{\Lambda/s}^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} \frac{1}{|\mathbf{k}'|^4} \right) \int_0^{\Lambda/s} \frac{d^4\mathbf{k}}{(2\pi)^4} (2\pi)^4 \cdot \\
&\quad \delta(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \phi_{<}^*(\mathbf{k}_4) \phi_{<}^*(\mathbf{k}_3) \phi_{<}(\mathbf{k}_2) \phi_{<}(\mathbf{k}_1)
\end{aligned} \tag{2.19}$$

进一步, 引入如下变换

$$\begin{aligned}
\mathbf{k} &= \mathbf{k}'/s \\
\phi'(\mathbf{k}') &= \zeta^{-1} \phi_{<}(\mathbf{k}'/s)
\end{aligned} \tag{2.20}$$

以使得动量截断恢复到 $\Lambda$ , 并使得 $|\mathbf{k}|^2$ 项系数保持不变。由此我们得到

$$\begin{aligned}
S'(\phi_{<}) &= - \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} s^{-4} \zeta^2 \left[ r_0 + |\mathbf{k}'|^2 s^{-2} + u_0 \frac{\Lambda^2}{16\pi^2} (1 - s^{-2}) \right] \cdot \\
&\quad \phi'^*(\mathbf{k}) \phi'(\mathbf{k}) - \frac{1}{2!2!} \left( u_0 - \frac{5u_0^2}{16\pi^2} \frac{d\Lambda}{\Lambda} \right) \prod_{i=1}^4 \int_0^{\Lambda} \frac{d^4\mathbf{k}'_i}{(2\pi)^4} s^{-16} s^4 (2\pi)^4 \cdot \\
&\quad \delta(\mathbf{k}'_4 + \mathbf{k}'_3 - \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \zeta^4 \phi'^*(\mathbf{k}'_4) \phi'^*(\mathbf{k}'_3) \phi'(\mathbf{k}'_2) \phi'(\mathbf{k}'_1)
\end{aligned} \tag{2.21}$$

为了使得 $|k|^2$ 项系数保持不变, 我们要求

$$\zeta = s^3 \quad (2.22)$$

因此,  $S'(\phi_<)$ 的其余各项前的系数也需作相应的改变。我们有

$$r'_0 = s^2 \left[ r_0 + \frac{u_0}{16\pi^2} (1 - 1/s^2) \right] \quad (2.23)$$

以及

$$u'_0 = u_0 - \frac{5u_0^2}{16\pi^2} \frac{\Lambda - \Lambda/s}{\Lambda} \quad (2.24)$$

为了将这些方程改写为微分方程, 我们令

$$s = e^t \approx 1 + t \quad (2.25)$$

其中,  $t > 0$ 是一个参数, 将之代入(2.23)和(2.24)式后, 我们有

$$\frac{dr_0}{dt} = 2r_0 + au_0 \quad (2.26)$$

$$\frac{du_0}{dt} = -bu_0^2 \quad (2.27)$$

其中,  $a = \frac{1}{8\pi^2}$ ,  $b = \frac{5}{16\pi^2}$ 。积分后得到

$$r_0(t) = e^{2t} \left[ r_0(0) + \int_0^t e^{-2t'} \frac{au_0(0)}{1 + bu_0(0)t'} dt' \right] \quad (2.28)$$

$$u_0(t) = \frac{u_0(0)}{1 + bu_0(0)t} \quad (2.29)$$

这就是在截断 $\Lambda' = \Lambda_0 e^{-t}$ 下的作用量的参数表达式。

相应地, 此时作用量为

$$S(\phi, \phi^*) = S_0(\phi, \phi^*) + S_{\text{int}}(\phi, \phi^*)$$

$$S_0(\phi, \phi^*) = - \int_{|k| < \Lambda} \phi^*(k) [r_0(t) + |k|^2] \phi(k) \frac{d^4 k}{(2\pi)^4}$$

$$S_{\text{int}} = - \frac{u_0(t)}{2!2!} \int_{|k| < \Lambda} \prod_{i=1}^4 \frac{d^4 k_i}{(2\pi)^4} \phi^*(k_4) \phi^*(k_3) \phi(k_2) \phi(k_1) (2\pi)^4 \cdot \delta^4(k_4 + k_3 - k_2 - k_1) \quad (2.30)$$

我们看到, 尽管相互作用量的形式没有发生改变, 但其耦合常数的值发生了变化。从物理上讲, 这一重整化后的结果是由于虚过程跳迁引起的。

概括起来, 重整化的变换可大致分为以下三步。

(1) 积分掉快模自由度, 即把动量截断从在 $\Lambda/s$ 到 $\Lambda$ 的涨落积分掉。