

統計物理中的模拟方法*

陈春先 · 陈式刚

摘 要

本文进一步发展了文献[6]中所提出的统计物理中的模拟方法,仔细地比较了模型系统与真实体系的性质,得到了计算力学量平均值的一般公式,并指出了应用它研究不可逆过程的可能性。

(一) 引 言

用量子场论的方法来研究量子统计问题,是近年来理论物理中一个发展很快的新方向,并已在多体系统的集体效应与凝聚现象的研究中取得了一些有意义的结果。若不考虑现在在基本粒子理论中存在的根本困难,基本粒子与多体系统的一个根本差别,是后者有趋向平衡的现象。在运用场论方法以后,对多体系统趋向平衡现象也有了进一步的了解。但是现有的理论还没有很好表现出多体系统的这个特征,因而场论方法只在平衡态的问题上取得了成功的应用,在这里场论方法与在基本粒子中的应用并没有很大差异。从数学形式上来说,在统计物理中,由于系综平均代替了基本粒子理论中的真空平均,以及温度参量的出现,带来了基本粒子理论中所没有的新困难。例如在 Matsubara^[1]方法中的矩阵 $S(\beta) = \exp(\beta H_0) \exp(-\beta H)$ 的微扰展开式中,对变量 t (它对应于通常散射矩阵中的时间变量) 的积分限,是从 $t = 0$ 到 $t = \beta$, 因而给实际计算造成了很大的困难。又如在格林函数的谱表示理论中,因果格林函数失去了通常的解析性质^[2]。这使一些作者^[3]引用超前与推迟格林函数来代替它,后者解析性质较简单。

在处理系综平均上有二种不同的方法。一种是时间格林函数方法,在这种方法中,系综平均及温度参量都在它的公式中明显地出现。这方面的工作由 Martin 与 Schwinger^[4]作了比较全面而深刻的总结。另一方面,有 Bloch-de Dominicis^[5] 与陈春先^[6]等的工作。他们把系综平均变为量子力学平均,使温度变量仅作为参数在一些与计算过程无关的因子中出现。因此,某一系统热力学性质的研究,可以引用讨论该系统的运动性质(即在 $T = 0$ 时的性质)的方法,从而避免了上述 Matsubara 方法中的困难。

在参考文献[6]中,作者之一发展了一种处理统计系综的方法。依据这种方法,系统中相互作用引起的热力学势的改变是等于一相应模拟系统的基态能量移动。这样就使我们有可能更加平行于通常的场论方法来研究量子统计物理中的问题,进行更简便的计算。在本文中,我们将进一步发展这种方法,用它来计算热力学量,发展非微扰的方法,并对非

* 1960 年 7 月 16 日收到。

平衡态性质作一些讨论。在这里引入的格林函数没有时间格林函数的通常的非解析性质,但二者又完全等价。

在处理非平衡态问题时,可以象 Kubo^[7] 那样,直接从 Liouville 定理出发,避开趋向平衡问题的讨论,非常普遍地研究非平衡态在线性近似下的一些性质。在这里,由于用了模拟方法, Kubo 的思想就成为切实可行了。虽然现在还不能比较具体地对热导等问题进行一般的讨论,但是在形式上将非平衡态的问题归结于量子力学系统运动的研究则是可能的。

我们将从统计物理的概念出发,得到统计热力学中的一些基本量和关系的模拟系统的表示,从而阐明模拟系统的物理意义。在第二节中,证明物理量对系综的平均等于对模拟系统基态的平均,并用一种近似方法讨论了化学势的决定问题。在第三节中证明模拟系统的格林函数等于所考虑系统的时间格林函数。在第四节中讨论了统计平均的元激发概念,及它与模拟系统元激发的关系。在最后一节中,从 Liouville 定理出发,给以上各节的讨论以更直接的基础,并试将模拟方法用来讨论非平衡态的性质,从而进一步阐明了模拟系统激发态的意义。

(二) 系综平均与热力学公式

在这节中,我们将证明物理量对系综的平均等于对前文[6]中提出的模拟系统基态的平均。

物理量对系综的平均可以用系综的配分函数或热力学势表示出来。热力学势的定义是:

$$Q = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ \text{Sp} [\exp(-\beta H + \beta \mu N)] \right\}; \quad (1)$$

其中 H, N 为系统的哈密顿量与总粒子数算符, $\beta = 1/kT$, μ 是化学势。量 A 对系综的平均记为 $\bar{A}$, 其定义是:

$$\bar{A} = \text{Sp} [A e^{-\beta(H - \mu N)}] / \text{Sp} [e^{-\beta(H - \mu N)}]. \quad (2)$$

对于任意一个量 A , 总可以引入一个相应的参量 η , 使 ηA 的因次与能量相同。 η 可以看作是外场, ηA 为系统与外场的作用能。将 ηA 加到系统的哈密顿量中, 定义

$$\tilde{Q}(\eta A) = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ \text{Sp} [\exp(-\beta(H + \eta A - \mu N))] \right\}. \quad (3)$$

于是 A 的系综平均(2)可以写为 $\tilde{Q}(\eta A)$ 对 η 的微商:

$$\bar{A} = \frac{\partial}{\partial \eta} \tilde{Q}(\eta A) |_{\eta=0}. \quad (4)$$

这种方法在统计物理中是常见的, 不过在那里 η 具有明确的物理意义。

在参考文献[6]中, 曾证明以哈密顿量

$$H = H_0 + H_1$$

描述的系統由相互作用引起的热力学势的变化, 等于以哈密顿量

$$H'' = H_0'' + H_1$$

描述的模拟系统的基态能量移动, 即:

$$\Omega = \Omega_0 + \Delta E'' \quad (5)$$

其中 Ω_0 为自由系统的热力学势, $\Delta E''$ 为模拟系统基态能量移动:

$$\Delta E'' = \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \delta(\epsilon - H_0'') \left[H_1 + H_1 \frac{1}{\epsilon - H_0''} H_1 + \cdots \right] \right\rangle_c d\epsilon$$

脚标 c 表示只取相连图形. 由(4)与(5)可见, (4)给出了 $\bar{A}$ 的相连图形展开, 它包括一切含有唯一尖点是 ηA 的 Feynman 图之和. 利用场论中的一个公式^[8], $\Delta E''$ 可以写成为:

$$\Delta E'' = -[2\pi i \delta(0)]^{-1} \ln \langle \phi_F'' | S'' | \phi_F'' \rangle, \quad (6)$$

其中 ϕ_F'' 为 H_0'' 的基态, S'' 为 H'' 系统的散射矩阵:

$$S'' = T \left\{ \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} H_1(t) dt \right] \right\}, \quad (7)$$

其中: $H_1(t) = e^{iH_0''t} H_1 e^{-iH_0''t}$. 在 H_1 中加入 ηA 项, 得到

$$\tilde{S}''(\eta A) = T \left\{ \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} (H_1(t) + \eta A(t)) dt \right] \right\}.$$

用(5), (6)将 $\bar{Q}(\eta A)$ 表示为 $\tilde{S}''(\eta A)$, 由(4)得到:

$$\bar{A} = [2\pi \delta(0)]^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \phi_F'' | T[A(t) S''] | \phi_F'' \rangle / \langle \phi_F'' | S'' | \phi_F'' \rangle, \quad (8)$$

$A(t)$ 是模拟系统作用表象中的算符. 利用 H'' 的基态 ϕ_F'' , 可以将积分号中的时间消去:

$$\langle \phi_F'' | T[A(t) S''] | \phi_F'' \rangle / \langle \phi_F'' | S'' | \phi_F'' \rangle = \langle \phi_F'' | A | \psi_F'' \rangle,$$

这里设 ψ_F'' 是已经归一化了的. 将上式代入(8), 记得 $\int_{-\infty}^{\infty} dt = 2\pi \delta(0)$, 就得到一个简单

而又有意思的公式:

$$\bar{A} = \langle \phi_F'' | A | \psi_F'' \rangle, \quad (9)$$

即对系综的平均等于对模拟系统基态的平均. 有了这个公式, 就可以用 Feynman 图解方法计算系综平均, 并且显然完全平行于场论公式, 然而比 Matsubara 的方法要方便得多. 这个公式还提出了一个有启发意义的事实: 模拟系统的基态对应于系统的热力学平衡态.

利用与上面相似的步骤, 可以将热力学量的公式简化. 例如, 可将系统的热力学势表示为:

$$\begin{aligned} \Omega &= \Omega_0 + \int_0^g \frac{dg}{g} \langle \phi_F'' | T[H_1(0) S''] | \phi_F'' \rangle / \langle \phi_F'' | S'' | \phi_F'' \rangle = \\ &= \Omega_0 + \int_0^g \frac{dg}{g} \langle \phi_F'' | H_1 | \phi_F'' \rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

其中 g 表示相互作用的耦合常数. 又如系统的平均粒子数, 利用(9)式可写为

$$\bar{N} = -\partial \Omega / \partial \mu = \left\langle \phi_F'' \left| \int \phi^+(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right| \phi_F'' \right\rangle. \quad (11)$$

令平均粒子数等于总粒子数, 通过(11)就可以决定化学势 μ .

用上面的方法作热力学量的微扰展开是很方便的, 但同时遇到一个困难而又很重要的问题: 无法具体计算 μ 的值. 看来, 不可能通过 μ 的微扰展开而得到一个一般的公式. 即使对一具体系统, 因为 μ 是在分布函数 f_k 的指数上出现的^[6], 因此也很难计算高次修正.

在其他的一些方法中(如 Montroll 与 Ward 方法^[9]),虽然给出了 μ 的一般形式,但也很难作具体计算. 在一些实际问题中,往往估计微扰展开的最低次就够了. 例如高温低密度的 Debye-Hückel 近似,是对热长度与 Debye 长度之比展开的最低次近似. 在这种情况下,估计到展开参数的一次项,可以简单地消去 μ , 以自由系统的 μ_0 代替 μ . 证明如下. 以足标“0”表示自由系统的量,“ Δ ”表示相互作用引起的变化,则系统的自由能与热力学势为

$$F = F_0 + \Delta F, \quad (12)$$

$$\Omega = \Omega_0(\mu) + \Delta\Omega(\mu). \quad (13)$$

设 $\mu = \mu_0 + \delta\mu$, μ_0 由 $N = -\partial\Omega_0/\partial\mu_0$ 决定, $\delta\mu$ 是相互作用引起的变化. 考虑到展开的一次项,利用(11)式,(13)式成为

$$\begin{aligned} \Omega &= \Omega_0(\mu_0) + \frac{\partial\Omega_0}{\partial\mu_0} \delta\mu + \Delta\Omega(\mu_0), \\ &= \Omega_0(\mu_0) - N\delta\mu + \Delta\Omega(\mu_0). \end{aligned} \quad (14)$$

将(12)与(14)代入 $\Omega = F - \mu N$ 中,利用 $\Omega_0(\mu_0) = F_0 - \mu_0 N$, 得到

$$\Delta F = \Delta\Omega(\mu_0). \quad (15)$$

F_0 与 μ 无关,所以考虑到 $\delta\mu$ 的一次,系统的自由能可写为

$$F = F_0 + \Delta\Omega(\mu_0). \quad (16)$$

因此,若以 F 代替 Ω 描述系统,热力学公式中不再包含 $\delta\mu$, 并且近似地由 (T, V, μ) 变量过渡到 (T, V, N) 变量了. 在文章^[10]中给出了这种方法的具体例子.

(三) 格林函数方法

上节得到的公式与量子力学系统公式的相似性,使得至少在形式上完全可以用格林函数方法把这些公式表示出来. 这样引入的格林函数似乎都只有形式上的意义,因为在一热力学平衡的系统中没有时间变量的概念,而格林函数描述粒子的传播. 在上节公式中也可以看到,模拟系统的量都只在积分号中出现,不能说出它具有什么明确的物理意义. 但是进一步研究使我们发现一个很有意义的结果:模拟系统的格林函数等于通常所谓的时间格林函数. 以后可以看到,这使我们可用模拟方法研究非平衡过程.

考虑一种系统:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \\ H_0 &= \frac{1}{2m} \int \nabla\psi^+(\mathbf{x})\nabla\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} - \mu N, \\ H_1 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}d\mathbf{x}' \psi^+(\mathbf{x})\psi^+(\mathbf{x}')v(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (17)$$

为方便起见, H_0 与 H_1 将采用不同的表示方法, H_1 仍用上式,而 H_0 改用:

$$H_0 = \sum_{k,s} \epsilon(k) a_{k,s}^\dagger a_{k,s}, \quad \epsilon(k) = \frac{k^2}{2m} - \mu. \quad (18)$$

$\psi(\mathbf{x})$ 与 $a_{k,s}$ 的关系为:

$$\psi(\mathbf{x}) = V^{-1/2} \sum_{k,s} a_{k,s} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad (19)$$

V 为系统的体积, $\mathbf{k}$ 为波矢, S 为自旋坐标. 由前文^[6]知道, 对应的模拟系统的哈密顿量为:

$$H = H_0^H + H_1, \quad (20)$$

$$H_0^H = \sum_{k,s} \epsilon(k) (c_{ks}^\dagger c_{ks} - b_{ks}^\dagger b_{ks}).$$

其中 b, c 与 a 有关系:

$$a_{ks} = f_k^{1/2} b_{ks}^\dagger + (1 - f_k)^{1/2} c_{ks}, \quad (21)$$

f_k 为 Fermi 分布函数. 模拟系统的 Heisenberg 算符 $\phi_H^H(x)$ 随模拟系统时间变化由下式给出:

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi_H^H(x) &= [\phi_H^H(x), H^H] \\ &= \epsilon(-i\nabla) \phi_H^H(x) + \int d^3x'' v(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \phi_H^{H\dagger}(\mathbf{x}'') \times \\ &\quad \times \phi_H^H(\mathbf{x}'') \phi_H^H(x). \end{aligned} \quad (22)$$

可以看到, 由于 $[\phi(\mathbf{x}), H^H] = [\phi(\mathbf{x}), H]$, $\phi_H^H(x)$ 与 H 系统的 Heisenberg 算符满足同样的运动方程.

定义模拟系统的格林函数:

$$\begin{aligned} G_1^H(x, x') &= i \langle \phi_F^H | T(\phi_H^H(x) \phi_H^{H\dagger}(x')) | \phi_F^H \rangle, \\ G_2^H(x_1, x_2; x'_1, x'_2) &= i^2 \langle \phi_F^H | T(\phi_H^H(x_1) \times \\ &\quad \times \phi_H^H(x_2) \phi_H^{H\dagger}(x'_2) \phi_H^{H\dagger}(x'_1)) | \phi_F^H \rangle, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (23)$$

可以看到, 它们满足通常的无限方程系:

$$\begin{aligned} &[-i\partial_t + \epsilon(-i\nabla)] G_1^H(x, x') + \\ &+ i \int d^3x'' v(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}) G_2^H(\mathbf{x}''t, x; \mathbf{x}''t, x') = \delta^4(x - x') \\ &\dots\dots\dots \\ &[-i\partial_{t_1} + \epsilon(-i\nabla_1)] G_n^H(x_1 \dots x_n; x'_n \dots x'_1) + \\ &+ i \int d^3x'' v(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}_1) G_{n+1}^H(\mathbf{x}''t, x_1 \dots x_n; \mathbf{x}''t, x'_n \dots x'_1) = \\ &= \sum_i \delta^4(x_1 - x'_i) G_{n-1}^H(x_2 \dots x_n; x'_n \dots x'_2). \end{aligned} \quad (24)$$

在这些方程式的基础上, 可以脱离开 S 矩阵进行微扰处理, 用 Feynman 图展开. $G_1^H(x, x')$ 展开到 n 次时, 可以丢掉 G_{n+2}^H , 而将 G_{n+1}^H 表示为自由的格林函数. 由于这些计算都是在模拟系统中进行的, 并没有管它的物理意义, 在数学上与量子力学系统相同, 也可以应用 Wick 定理, 所以,

$$\begin{aligned} G_{n+1}^{H0}(x_1 \dots x_{n+1}; x'_{n+1} \dots x'_1) &= \\ &= \sum \epsilon(x'_1 \dots x'_{n+1}) G_1^{H0}(x_1, x'_1) \dots G_1^{H0}(x_{n+1}, x'_{n+1}), \end{aligned} \quad (25)$$

其中, $\epsilon(x'_1 \dots x'_{n+1})$ 为交换 $x'_1 \dots x'_{n+1}$ 时的符号因子. 重复上面的过程, 可以将 $G_1(x, x')$ 展为一无穷级数, 它由 $v(\mathbf{x})$ 与 G_1^{H0} 构成. 级数中每一项对应一个 Feynman 图形. 这种展开至少在形式上是可能的. 态 ϕ_F^H 给 $G(x, x')$ 的边界条件可以加到 G_1^{H0} 上, 这样当

$G_1^{f_0}$ 决定时; $G_1(x, x')$ 也完全决定. 多体格林函数的讨论完全相同.

容易看出,

$$\begin{aligned} G_1^{f_0}(x, x') &= \langle \phi_F^f | \phi(x) \phi^+(x') | \phi_F^f \rangle = \\ &= \frac{i}{V} \sum_k \{ \theta(t-t')(1-f_k) - \theta(t'-t)f_k \} e^{ik(x-x')}. \end{aligned} \quad (26)$$

θ 函数的定义:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

(26)的傅立叶分量为:

$$\begin{aligned} G_1^{f_0}(\mathbf{k}, k^0) &= (1-f_k)/(-k^0 + \epsilon(\mathbf{k}) - i\epsilon) + \\ &+ f_k/(-k^0 + \epsilon(\mathbf{k}) + i\epsilon). \end{aligned} \quad (27)$$

从上面模拟系统的展开讨论来看,本是完全可以在散射矩阵形式上作的. 但对时间格林函数就没有散射矩阵形式,只能在格林函数所满足的方程上进行展开. 定义时间格林函数为

$$G_1(x, x') = i \text{Sp}[T(\psi_H(x)\psi_H^+(x'))e^{-\beta(H-\mu N)}]/\text{Sp}e^{-\beta(H-\mu N)} \text{ 等等}, \quad (28)$$

容易看到,它与 G_n^f 满足同样的方程系(24)式. 现在只要证明(25)的分法对 G_n^0 也成立,则时间格林函数也可以象量子力学系统中的格林函数一样展开. 这可以采用象 Matsubara^[1] 讨论温度格林函数时所曾采用的方法来证明. 定义 N 乘积,使它满足下式:

$$\text{Sp}[N(\psi(x)\psi^+(x'))e^{-\beta(H_0-\mu N)}] = 0, \quad (29)$$

其中 $\psi(x)$ 为作用表象中的算符. T 乘积的 Wick 定理仍旧适用. 现以二体格林函数为例来证明(25)式对时间格林函数也成立. 利用了(29),得到

$$\begin{aligned} G_2^0(x_1x_2; x_2'x_1') &= \text{Sp}[T(\psi(x_1)\psi(x_2)\psi^+(x_2')\psi^+(x_1')) \times \\ &\times e^{-\beta(H_0-\mu H)}]/\text{Sp}[e^{-\beta(H_0-\mu N)}] \\ &= G_1^0(x_1-x_1')G_1^0(x_2-x_2') - G_1^0(x_1-x_2')G_1^0(x_2-x_1') + \\ &+ \text{Sp}[N(\psi(x_1)\psi(x_2)\psi^+(x_2')\psi^+(x_1'))e^{-\beta(H_0-\mu N)}]/\text{Sp}[e^{-\beta(H_0-\mu N)}]. \end{aligned} \quad (30)$$

另一方面,可以把 G_2^0 直接算出来,并与(30)比较,结果发现

$$\begin{aligned} &\text{Sp}[N(\psi(x_1)\psi(x_2)\psi^+(x_2')\psi^+(x_1'))e^{-\beta(H_0-\mu N)}]/\text{Sp}[e^{-\beta(H_0-\mu N)}] = \\ &= V^{-2} \sum_{ks} e^{ik(x_1+x_2-x_1'-x_2')} \text{Sp}[a_{ks}^+ a_{ks} a_{ks}^+ a_{ks} e^{-\beta(H_0-\mu N)}]/\text{Sp}e^{-\beta(H_0-\mu N)}. \end{aligned} \quad (31)$$

当 $V \rightarrow \infty$ 时, (31)以 $\frac{1}{V} \rightarrow 0$, $2n$ 因子的 N 乘积的系综平均以 $1/V^{n-1} \rightarrow 0$. 所以对

G_{n+1}^0 同样有(25)式存在,因而 G_n 也可用 Feynman 图形展开¹⁾. G 的展开式与 G^f 的展开式有同样结构. 最后,利用(26),直接计算证明:

$$G_1^0(x_1x') = G_1^{f_0}(x_1x'), \quad (32)$$

1) Абрикосов^[11] 等曾认为时间格林函数不能用 Feynman 技术,我们认为这断言并不正确,或许他们没考虑到上述方法.

这样就证明了:

$$G_1(x_1x') = G_1''(x_1x') \quad \text{等等} \quad (33)$$

(33)式使我们可以用模拟系统的格林函数进行热力学量的微扰计算.

利用格林函数, 可以如 Klein^[12] 那样引入不可约质量算符 M 及可约质量算符 M_K :

$$M_K G^0 = M G, \quad (34)$$

并将系统的热力学势表示为

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{2} i \int_0^{\beta} \frac{dg}{g} \int d^3x d^3x' M_K(x_1x') G^0(x'_1x). \quad (35)$$

(35)是利用(5)式在模拟系统中得到的, 现在它对时间格林函数也成立.

最后, 值得提一下格林函数的谱表示理论. 容易看到, $G_1''(\mathbf{k}, k^0)$ 在 k^0 平面上具有与绝对零度时系统的格林函数同样的解析性质, 这与 Ландау 的结果截然不同. 利用 G_1'' 代替 G_1 使我们可以利用 G_1'' 的解析性质进行一些讨论. 在下面还可以看到, 模拟系统的“谱”确是有它的物理意义.

(四) 单粒子元激发的讨论

统计物理讨论的是 H 系统各个本征态之间的平衡问题, 统计系统中与温度有关的元激发概念一直被人们采用, 但是还没有一个明确的意义. 我们将引用 Ландау 在费米液体中的概念^[13] 来考察统计系统的单粒子激发以及它与模拟系统元激发的关系. 反过来也讨论了 Ландау 概念的微观基础问题.

利用热力学关系 $E = F + TS$, 得到所考虑系统能量 E 与模拟系统能量之间的关系 (μN 为 0 点):

$$E = E_0 + \Delta E'' + T \Delta S, \quad (36)$$

E_0 为自由系统的总能量:

$$E_0 = \sum_k \epsilon(k) f_k, \quad (37)$$

ΔS 为作用引起的熵的变化, 当 $T \rightarrow 0$ 时 $\Delta S \sim T$, 所以在绝对零度附近有(模拟系统的 $E'' = \Delta E''$):

$$E = E_0 + E'' + 0(T^2). \quad (38)$$

下面只讨论绝对零度附近的情况.

Ландау 在费米液体理论中, 认为 E 对 f_k 的变分给出“元激发”的能谱:

$$E(k) = \delta E / \delta f_k. \quad (39)$$

由(38), (37):

$$E(k) = \epsilon(k) + \delta \Delta \Omega / \delta f_k, \quad (40)$$

利用(35), 变为:

$$E(k) = \epsilon(k) - \frac{i}{2} \int_0^{\beta} \frac{dg}{g} \int d^3x d^3x' \frac{\delta}{\delta f_k} [M_K(x_1x') G^0(x'_1x)]. \quad (41)$$

考虑一个 n 级的 $\int M_K^{(n)}(x_1x') G^0(x'_1x) d^3x d^3x'$ 的图, 每一图中有 $2n$ 条 G^0 线, 当所有 n 级

的图加在一起考虑时,各条 G^0 綫都处在相互对称的地位,所以有

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{\delta f_k} [M_k^{(n)}(x_1 x') G^0(x_1 x)] \\ &= 2n M_k^{(n)}(x_1 x') \frac{\delta}{\delta f_k} G^0(x_1 x), \end{aligned} \quad (42)$$

由(26)式得到

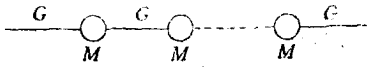
$$\delta G^0(x_1 x') / \delta f_k = -\frac{i}{V} e^{ik(x'-x)}.$$

所以:

$$E(k) = \epsilon(k) - \int d^3x d^4x' M_k(x_1 x') \exp ik(x' - x).$$

或改用 M_R 的傅立叶分量表示:

$$E(k) = \epsilon(k) - \int d^4k^0 \delta(k^0 - \epsilon(\mathbf{k})) M_R(\mathbf{k}, k^0) \quad (43)$$



若 $M_R(\mathbf{k}, k^0)$ 在 $k^0 = \epsilon(\mathbf{k})$ 时没有奇异点,上式第二项就变为 $M_R(\mathbf{k}, \epsilon(\mathbf{k}))$. 但是由左图可以看出: M_R 图中 $2n-1$ 个 G^0 綫在 $k^0 = \epsilon(\mathbf{k})$ 都有奇异点. 因为(40)右边第二项表示模拟系统基态上增加一个粒子

时能量变化的綫性项. 一个态的能量只由“相連图形”表示,即不以初态为中間态,所以 M_R 中在中間态出現的 G^0 需取主值:

$$G_0 = P / -k^0 + \epsilon(\mathbf{k}). \quad (44)$$

有了这个考虑,就可以象 Klein^[12] 一样完成(43)中的积分. $M_R(k_1^0, \mathbf{k})$ 可表示为

$$M_R(k_1^0, \mathbf{k}) = M(k_1^0, \mathbf{k}) + M(k_1^0, \mathbf{k}) G^0(k_1^0, \mathbf{k}) M(k_1^0, \mathbf{k}) + \dots \quad (45)$$

中 M 为 M_R 的不可約部分;由(44), (45)与下式

$$\delta(x) P / x^n = (-1)^n [(n+1)!]^{-1} \delta^{(n)}(x), \quad (46)$$

(43)式变为

$$\begin{aligned} E(k) &= \epsilon(k) - M(\mathbf{k}, \epsilon(\mathbf{k})) + \frac{1}{2!} \frac{\partial}{\partial \epsilon} M^2(\mathbf{k}, \epsilon(\mathbf{k})) \\ &\quad - \frac{1}{3!} \frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2} M^3(\mathbf{k}, \epsilon(\mathbf{k})) + \dots \end{aligned} \quad (47)$$

$G(\mathbf{k}, k^0)$ 的极点給出元激发的能量(模拟系統的), 由方程系(24)知道这极点为

$$E''(k) = \epsilon(k) - M(\mathbf{k}, E''(k)). \quad (48)$$

将 M 在 $E'' = \epsilon(k)$ 展开后得到

$$\begin{aligned} E''(k) &= \epsilon(k) - M(\mathbf{k}, \epsilon(k)) + \frac{1}{2!} \frac{\partial}{\partial \epsilon} M^2(\mathbf{k}, \epsilon(k)) - \\ &\quad - \frac{1}{3!} \frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2} M^3(\mathbf{k}, \epsilon(k)) + \dots, \end{aligned} \quad (49)$$

所以

$$E(k) = E''(k). \quad (50)$$

因而在 $T \rightarrow 0$ 时模拟系统的元激发能量等于所考虑的物理系统的元激发能量，而 Jau-
lay 定义的元激发确实与微观理论给出的相同。

单粒子激发事实上属于非平衡态问题，由于方法的缺陷，不能决定粒子在什么能态是稳定的，在什么能态要衰变。

(五) 非平衡态问题

描述非平衡过程，需要有与时间有关的算符平均值，有时也需要非时序排列算符的平均值，例如 $\text{Sp}[A(t)B(t')e^{-\beta H}]$ ，其中 t, t' 为任意的。把模拟方法用到非平衡态，须要把这些平均值用模拟系统的量表示出来，这时单用上节得到的格林函数是不能做到这一点的。上节的结果告诉我们，把系综平均表示为模拟系统量子力学平均的最简便方法，是在微扰法的基础上将二者进行比较。在讨论非平衡态时，Kubo^[7] 直接在 Liouville 定理基础上进行了微扰计算。下面我们将证明：当 H 的本征态中没有束缚态时，自由系统平衡态密度矩阵与有相互作用系统平衡态密度矩阵间存在着相似于场论中 Gell-Mann-Low 的绝热定理。在这基础上，可以进行作用系统密度矩阵的微扰计算。当用微扰法把密度矩阵与模拟系统本征态联系起来后，上面几节的讨论都是本节一般结论的一些特例。

由 Liouville 定理：

$$i\partial_t \rho = [H, \rho], \quad (51)$$

得到

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0). \quad (52)$$

其中 $U(t, t_0)$ 满足方程：

$$i\partial_t U(t, t_0) = H U(t, t_0). \quad (53)$$

立刻可以看出：当系统无束缚态、而相互作用又不引起任何能量移动时，可以在 $t = -\infty$ 时在自由平衡系统中绝热地引入作用，而在 $t = 0$ 时给出作用系统的平衡态密度矩阵。因为如所熟知，

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} U_\epsilon(0 - \infty) \phi_n = \phi_n,$$

其中 ϕ_n 是 H_0 的本征态， ϕ_n 是 H 的本征态， ϵ 的极限过程即表绝热地引入作用。利用自由系统密度矩阵 ρ_0 与作用系统密度矩阵 ρ 的定义：

$$\rho_0 = \sum_n |\phi_n\rangle e^{-\beta E_{0n}} \langle \phi_n|, \quad (54)$$

$$\rho = \sum_n |\psi_n\rangle e^{-\beta E_n} \langle \psi_n|,$$

以及关系 $E_n = E_{0n}$ (E_{0n}, E_n 各表自由系统及作用系统的能量本征值)，得到

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} U_\epsilon(0, -\infty) \rho_0 U_\epsilon^\dagger(0, -\infty) = \rho. \quad (55)$$

当 $E_n \neq E_{0n}$ 时 (55) 不简单地成立，不过存在一个自由系统

$$H'_0 = H_0 + \sum_n \Delta_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|,$$

$\Delta_n = E_n - E_{0n}$ ，在这系统与 H 系统之间，(55) 式仍成立。当 H_0 系统有退化态时，原

則上是可以解一个久期方程將退化态重新組合来处理。麻煩的問題是：当 $E_n \approx E_{n_0}$ 时，在 (55) 的微扰展开式中包含未知的 Δn 。我們知道， $U_\epsilon(0, -\infty) |\phi_n\rangle$ 可以写成 Wigner 微扰形式，于敏等^[11]曾証明 Wigner 形式中的 Δn 可以被消去，而 U_ϵ 的展开形式被相連集团展开 (linked-cluster expansion) (即不包含自能图) 所代替。 ρ_0 (“,” 表 H_0 系統) 中的 Δn 不能被简单地消去，但是在計算平均值时，它不起任何作用。因为把平均值用 Wick 定理展开 (或非时序乘积的，用交換关系直接展开)，結果总可归結于 $\text{Sp}(a_k^\dagger a_k' \rho_0)$ 等量上， ρ_0 在 ϕ_n 表象中是对角化的，上量只在 $k = k'$ 时不为零，它等于 $(1 + e^{-\beta(E_{0k} + \epsilon_k)})^{-1}$ ， Δ_k 是粒子在真空中 (非多体系統基态) 的自能。在多体問題中，我們不考虑粒子的固有場，所以 $\Delta_k = 0$ 。这样，我們看到，对于計算一个系統的平均值問題，可以利用下面等价的密度矩陣：

$$\rho = U_\epsilon^{Lc}(0, -\infty) \rho_0 U_\epsilon^{Lc+}(0, -\infty). \quad (56)$$

Lc 表只取相連图形。在 (56) 中不再包含 Δn 。因为 ρ 在平均值公式中，如 (2) 式所示，在分子分母中都出現，分子分母中不相連图形可以消去，所以可以采用不含 Δn 的 (55) 作为等价的密度矩陣。

現在来看如何計算算符 $A(t)$ 与 $B(t')$ 之积的平均值問題，这里

$$A(t) = e^{-iHt} A e^{iHt}, \quad (57)$$

$$B(t') = e^{-iHt'} B e^{iHt'}.$$

把 ρ 及 A, B 都用 U 矩陣表示，結果平均值可写为

$$\begin{aligned} \overline{A(t)B(t')} &= \text{Sp}[U^+(0, -\infty)U^+(t_1, 0)AU(t_1, 0) \times \\ &\quad \times U^+(t_1', 0)BU(t_1', 0)U(0, -\infty)\rho_0]/\text{Sp}\rho = \\ &= \text{Sp}[U^+(t_1 - \infty)AU(t_1, t_1')BU(t_1' - \infty)\rho_0]/\text{Sp}\rho_0. \end{aligned} \quad (58)$$

將 U 用对作用展开的关系式代入，并注意 A, B 都是 a, a^+ 之乘积时，(58) 可以写成：

$$= \sum c_{k,e,m,\dots}(t, t') \text{Sp}[a_k^\dagger a_e a_m \dots \rho_0]/\text{Sp}\rho_0.$$

由前文 [6] 中証明的定理，可将上式写为

$$= \sum c_{k,e,m,\dots}(t, t') \langle \phi_F'' | a_k^\dagger a_e a_m \dots | \phi_F'' \rangle.$$

再注意 a_k 等随 H_0 与 H_0'' 的时间变化是一样的：

$$\begin{aligned} e^{-iH_0 t} a_k e^{iH_0 t} &= e^{-iH_0'' t} a_k e^{iH_0'' t} \\ &= a_k e^{-i\epsilon(k)t} \end{aligned}$$

結果可以把 (58) 中的 U 矩陣都改成模拟系統的 U'' 矩陣，而 $\text{Sp}[\dots \rho_0]/\text{Sp}\rho_0$ 改为对 ϕ_F'' 的平均：

$$\begin{aligned} \overline{A(t)B(t')} &= \langle \phi_F'' | U''^{st+}(t_1 - \infty)AU''(t_1, t_1') \times \\ &\quad \times BU''(t_1' - \infty) | \phi_F'' \rangle \end{aligned} \quad (59)$$

以模拟系統的海森堡表象表示 A, B ，(59) 变成

$$\begin{aligned} \overline{A(t)B(t')} &= \langle \phi_F'' | U''^{st+}(0, -\infty)A_H''(t) \\ &\quad B_H''(t')U''^{st}(0, -\infty) | \phi_F'' \rangle. \end{aligned} \quad (60)$$

由場論中的研究知道， $U''^{st}(0, -\infty) | \phi_F'' \rangle = e^{-i\Delta E_F'' t} | \phi_F'' \rangle$ ，代入 (60)，最后得到所

期望的公式:

$$A(t)B(t') = \langle \phi_F^H | A_H^H(t) B_H^H(t') | \phi_F^H \rangle. \quad (61)$$

这个关系可以推广到任意个在任意时间的算符乘积的平均值上去.

有了(61),就可以用模拟系统的方法讨论非平衡态的问题,下面只举对外场的线性响应一例以示之. 设外场 $F(t)$ 引起的系统的附加哈密顿量为

$$H'(t) = AF(t). \quad (62)$$

按 Kubo^[7] 的工作,系统的量 B 对 $F(t)$ 的线性响应由下式给出:

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^t dt' \{i \text{Sp} [A_H(t'), B_H(t)] e^{-\beta H} \} / \text{Sp} e^{-\beta H} F(t'). \quad (63)$$

由(61),

$$\Delta B(t) = i \int_{-\infty}^t dt' \langle \phi_F^H | [A_H^H(t'), B_H^H(t)] | \phi_F^H \rangle F(t'). \quad (64)$$

用 H' 的本征态完备组,完成上式对时间的积分,并设 $F = F_0 e^{i\omega t}$,就可分出 $\Delta B(t)$ 的 ω 分量:

$$\Delta B(\omega) = \sum_n \left\{ \frac{A_{on} B_{no}}{-\omega_{no} + \omega - i\epsilon} + \frac{B_{on} A_{no}}{\omega_{no} + \omega - i\epsilon} \right\} F_0 \quad (65)$$

其中: $A_{on} = \langle \phi_F^H | A | \phi_n^H \rangle$ 等等,

$$\omega_{no} = E_n^H - E_o^H. \quad (66)$$

(65)与(66)告诉我们一个有意思的事实:当 $\omega = \omega_{no}$ 时引起了系统的共振吸收,即激发起系统的特征振荡, H' 激发态能量与基态能量之差给出了这种宏观性质的振荡谱. 在文章[10]中,事实上就利用了这种方法算出了在高温低密度下电子系统的等离子区振荡频率,所得频率与温度关系和一般经典方程的结果是一致的. 在第二节中提到 H' 的基态性质正好对应系统在热平衡时的性质,现在我们看到 H' 的激发态又提供了描述非平衡态的可能.

用模拟系统的方法,把 Kubo 的计算都变成量子力学的计算,把非平衡态变成模拟系统的量子力学运动问题. 因而提供了一种可能:根本不把多体系统作为统计物理的问题来研究,而是作为量子力学的运动来研究. 所以有可能避开趋向平衡问题来很普遍的研究一些非平衡态问题. 在这方面,我们暂时不作比较深入具体的讨论.

参 考 文 献

- [1] T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **14** (1955) 351.
- [2] Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ* **34** (1958) 262.
- [3] Н. Н. Боголюбов *等*, *Д.А.Н. СССР*. **126** (1959) 53.
- [4] P. C. Martin, J. Schwinger, *Phys. Rev.* **115** (1959) 1342.
- [5] C. Bloch, C. de Dominicis, *Nucl. Phys.* **7** (1958) 459.
- [6] 陈春先, *ЖЭТФ* **35** (1958) 1518.
- [7] R. Kubo *J. of Phys. Soc. Japan.* **12** (1957) 570.
- [8] Schweber, Bethe *等*, *Mesons and Fields*.
- [9] E. Montroll, J. Ward, *Phys. of Fluids*. **1** (1958) 55.
- [10] 刘大乾 *等*, *物理学报* **15** (1959) 664.
- [11] А. А. Абрикосов *等*, *ЖЭТФ* **36** (1959) 900.
- [12] A. Klein, R. Prange, *Phys. Res.* **112** (1958) 994.
- [13] Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ*. **30** (1956) 1058.
- [14] 于敏 *等*, *物理学报*. **15** (1959) 397.

МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Чэнь Чунь-сянь, Чэнь Ши-гань

Резюме

В работе развивается метод моделирования в статистической физике, впервые рассмотренный в работе [6]. Дано детальное сравнение свойств статистической модельной системы и исходной системы. Получены формулы для вычисления средних значений динамических величин, и указана возможность обобщения данного метода для исследований необратимого процесса.