

DQMC 中的量子力学

曾植 20343003

中山大学物理学院, 广州, 510275

摘要: 本文是初等量子力学课程论文, 主要陈述对量子力学的一部分课外学习的内容和理解。我在文中结合初等量子力学课程中的内容, 对行列式量子蒙特卡洛 (DQMC) 中的量子力学结论和原理作了展示与推导, 分为 4 小节。最后在文末陈述总结与心得。

关键词: 行列式量子蒙特卡洛; 配分函数; 费米子系统; 路径积分; Trotter 分解;

1. 前言

在科研训练中, 我跟随导师, 做凝聚态和相变的物理, 研究强关联体系的非平衡动力学, 用的数值计算方法主要是行列式量子蒙特卡洛 (Determinant Quantum Monte Carlo, DQMC)。在学习数值计算方法的过程中, 我接触了一些经典统计物理和量子物理的文献和教材, DQMC 方法来源于 Boulder 2003 Summer School 里的 Lecture Note 和 Assaad 的 Quantum Monte Carlo Methods on Lattices: The Determinantal Approach。实际上这些讲义是学习资料, 故不放入参考文献中, 而本文的量子力学原理推导也并没有参考其他文献, 故本论文不设置参考文献。

在学习 DQMC 方法的过程中, 因为讲义的简要性和面向对象的不同, 只涉猎了初等量子力学的我对其中的量子力学结论作了推导并有所收获, 下面将在第二节中分为四小节分别叙述: 配分函数从求和到求迹、时间演化算符与虚时间轴、哈密顿量与 Trotter 分解、从求迹到求矩阵行列式。另外, 本论文中不对蒙特卡洛算法作讲解, 因为这个算法本身更多的涉及数理统计、统计力学而与量子力学无多大关联。

2. 量子力学原理

2.1 配分函数从求和到求迹

在统计物理学中, 对于一个处于温度 T 的热平衡系统来说, 其处在能量为 E 的态的概率正比于 $e^{-\beta E}$, 其中 $\beta = 1/kT$ 。如果对所有态求和, 则总的概率应为一。因此, 若以角标 λ 区分系统的各个本征态, 归一化后的概率可以表示为

$$P(E_\lambda) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\lambda} \quad (1)$$

系统的配分函数定义为

$$Z \equiv \sum_{\lambda} e^{-\beta E_\lambda} \quad (2)$$

而在 DQMC 讲义中配分函数直接写作

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \quad (3)$$

其中 \hat{H} 为系统的哈密顿算符, Tr 为求迹。

怎么理解? 注意到 $e^{-\beta E_\lambda}$ 实际上是算符 $e^{-\beta \hat{H}}$ 的本征值, 因此配分函数实际上就是 $e^{-\beta \hat{H}}$ 的所有本征值的和。在初等量子力学中我们知道在算符 \hat{F} 自身的表象中, \hat{F} 的矩阵表示对角化, 这时 \hat{F} 的对角元就是 \hat{F} 的本征值, 因此 $e^{-\beta \hat{H}}$ 的所有本征值的和即 $e^{-\beta \hat{H}}$ 的迹, 可以写出推导为

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\lambda} e^{-\beta E_\lambda} \\ &= \sum_{\lambda} \langle \lambda | e^{-\beta \hat{H}} | \lambda \rangle \\ &= \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \end{aligned} \quad (4)$$

由于么正变换不改变矩阵的迹, 因此在任意一个表象之下, 算符的迹取值都是不变的。

2.2 时间演化算符与虚时间轴

在初等量子力学的定态薛定谔方程那一节中,

定态波函数写为

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (5)$$

$e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$ 是 $U(\mathbf{r})$ 不含时间时，波函数中分离出来的含时量。

实际上在更普遍的情形中，对于薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (6)$$

可以形式地写出其解为

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t} |\psi(0)\rangle \quad (7)$$

算符 $e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t}$ 称为时间演化算符，刻画态随时间的变化关系。

容易看出，算符 $e^{-\beta\hat{H}}$ 有着量子力学中时间演化算符的形式， β 对应 it/\hbar ，类比狭义相对论中的四维矢量，可以将其视作虚时间。当温度趋向于0时， β 趋向于无穷。把虚时看作新的一维，发现可以将量子的配分函数改写为经典的更高一维的配分函数的形式，这是 d 维量子系统与 $d+1$ 维经典系统的对应。

2.3 哈密顿量与 Trotter 分解

Hubbard 模型的哈密顿量写为

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i \left(\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (8)$$

其中 $\langle ij \rangle$ 表示最近邻格点， $h.c.$ 是复共轭， σ 表示自旋，有朝上和朝下两个方向， $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ 是在格点 i 上自旋为 σ 的费米子产生算符， $\hat{c}_{j\sigma}$ 是在格点 j 上自旋为 σ 的费米子湮灭算符， $\hat{n}_{i\uparrow}$ 是在格点 i 上自旋朝上的粒子数算符。

容易看出，(8)式等号右边第一项是动能项，记作 \hat{H}_t ，右边第二项是势能项，记作 \hat{H}_U ，则有

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_U \quad (9)$$

\hat{H}_t 和 \hat{H}_U 不对易，由线性代数的知识我们知道指数上的两个不对易的矩阵相加不直接等于分别在两个指数上的矩阵相乘，但当矩阵很小的时候可以有近似，我们采用 Trotter-Suzuki 近似：

$$e^{\Delta(A+B)} = e^{\Delta A} e^{\Delta B} + O(\Delta^2) \quad (10)$$

由 2.2，将 β 视为虚时，作分解

$$\beta = L\Delta\tau \quad (11)$$

其中 $\Delta\tau$ 足够小，则配分函数可写作

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = \text{Tr} [e^{-\Delta\tau\hat{H}}]^L \\ &\approx \text{Tr} [e^{-\Delta\tau\hat{H}_t} e^{-\Delta\tau\hat{H}_U}]^L \end{aligned} \quad (12)$$

这使得动能项和势能项可以分开来而能进行后续计算，这里是 DQMC 会造成误差的地方之一。

2.4 从求迹到求矩阵行列式

DQMC 之所以叫行列式量子蒙特卡洛，就在于它将求迹转化为了求一个矩阵的行列式。讲义中直接给出了配分函数从求迹到行列式的运算的结论。

讲义先给出哈密顿量的形式，假设哈密顿量是费米子算符的二次型：

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{1\sigma}^\dagger & \hat{c}_{2\sigma}^\dagger & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots \\ h_{21} & h_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{1\sigma} \\ \hat{c}_{2\sigma} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (13)$$

h 是一个 $N \times N$ 系数矩阵， N 为格点数。则有

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = \det[I + e^{-\beta h}] \quad (14)$$

其中 Tr 是在 4^N 维希尔伯特空间上的求迹， I 为 N 维单位矩阵。

(14)式的证明既可以将求迹写成积分形式然后使用 Grassman 积分的一些结论，也可以把 e 指数上的部分对角化然后进行展开。前者我并没有推出来正确的结果，故使用了后者，推导如下：

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}} &= \text{Tr} e^{-\beta c^\dagger h c} \\ &= \text{Tr} e^{-\beta \sum_k \hat{c}_k^\dagger h_k \hat{c}_k} \\ &= \prod_k \text{Tr} e^{-\beta h_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k} \\ &= \prod_k \text{Tr} \left[1 - \beta h_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \frac{1}{2!} (\beta h_k)^2 (\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k)^2 + \cdots \right] \\ &= \prod_k \text{Tr} \left[1 - \beta h_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \frac{1}{2!} (\beta h_k)^2 \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \cdots \right] \\ &= \prod_k \text{Tr} [1 + (e^{-\beta h_k} - 1) \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k] \\ &= \prod_k \text{Tr} [1 + (e^{-\beta h_k} - 1) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_k \left(\langle 0 | [1 + ((e^{-\beta h_k} - 1)) \hat{n}_i] | 0 \rangle \right. \\
&\quad \left. + \langle 1 | [1 + (e^{-\beta h_k} - 1) \hat{n}_i] | 1 \rangle \right) \\
&= \prod_k (1 + e^{-\beta h_k}) \\
&= \det[I + e^{-\beta h}] \tag{15}
\end{aligned}$$

现在来解释上述推导：

第一行到第二行，使用 h 对角化的基， h_k 为 h 的本征值， \hat{c}_k 为 $\hat{c}^\dagger h \hat{c}$ 的本征矢，注意 \hat{c}_k 不同于 \hat{c}_i 。求迹下的基变换是任意的，第六行到第七行再变换到 \hat{c}_i 的基下。

第三行到第四行做展开，五到六则相反。

第四行到第五行，由全同粒子的知识，我们知道对于费米子，有

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \tag{16}$$

$$\{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \tag{17}$$

其中 i 可以等于 j ，大括号表示反对易关系。容易推出

$$\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k = \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_k = \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \tag{18}$$

第七、八、九行，对于费米子，单格点粒子数算符的本征值只能为0或1。

第九行到第十行，对角矩阵对角元的连乘等于对角矩阵行列式。证毕。

容易看出，(14)式对于二费米子算符相互作用的哈密顿量有效，但 Hubbard 模型的哈密顿量的势能项是四费米子算符相互作用，因此我们需要将其 decouple。通过离散的 Hubbard-Stratonovitch (HS)变换，引入辅助场，将相互作用

decouple 为无相互作用费米子和辅助场的耦合。

HS 变换既可以由逆向高斯积分来得出，也可以由待定系数法直接得出。但因为我用的是待定系数法，体现为一个小的数学问题，便不再叙述。

3. 心得与致谢

对 DQMC 主要的量子力学原理已经讲的很清晰。在过去几个月的量子力学学习生活中，我得以把课本上的量子力学与实际科研经历结合起来，这给了我更真实的感觉：量子力学中的地位、量子力学的应用、量子力学与数值算法的结合，而不只是书中的一个个简单模型和作业题。

另外，我发现量子力学跟线性代数密不可分，甚至很多时候推文献上的公式就是在做线性代数。梁世东老师说的线性代数不好很难学量子力学真的很对。

他还说过的我记住的最重要的一点是，“很多时候不是数学不好妨碍了物理学家推数学，而是物理不好妨碍了物理学家推数学”。这点我在课外学习中真的深有体会——量子力学的物理图像在看文献、推公式时是否清晰真的决定你是否能很快看懂文献，物理图像真的太重要了！

最后，在此对梁世东老师一学期的淳淳教导表示感谢，既教导我们做物理和学习量子力学的方法论，又能够让我们以自己的方式学习量子力学。还要感谢我的导师阴帅时常 push 我学习，感谢我的同学们无私相助教我难题，最后感谢自己对量子力学的好奇与不懈探索。