格点理论中谱权重函数的体积依赖

牛志元
导师：刘川

北京大学物理学院

2010年4月，南昌大学

引言

怎么区分单粒子态和两粒子态?

- 无限体积:运动学行为

  单粒子在静止系中具有分立谱。

  两粒子态在阈值以上有连续谱。

- 有限体积:所有的谱均分立!
  - 办法1: 相邻能级的体积行为:

    单粒子: $L \to \infty$, $\Delta E(L) \to$ 有限值

    两粒子: $L \to \infty$, $\Delta E(L) \to 0$

    需要计算激发态，模拟困难
  - 办法2: 谱权重函数的体积依赖行为。

谱权重函数的定义

两点关联函数:

$$C(t) = \langle 0|O(t)O^\dagger(0)|0\rangle = \sum_E |\langle E|O^\dagger|0\rangle|^2 e^{-Et}$$

谱权重函数:

$$W(E,L) \stackrel{\text{def}}{=} |\langle E|O^\dagger|0\rangle|^2$$

$|E\rangle$ 是哈密顿量严格本征态，在模型中可以严格解出。

$O^\dagger|0\rangle$ 是构造的具有某种格子对称性的两粒子散射态。

谱权重函数的定义

谱权重函数 [1]可以区分单粒子态和两粒子态:

- 单粒子态的谱权重函数基本不依赖于体积
- 两粒子态的谱权重函数有明显的 $1/L^3$ 行为。

从可解的 Lee model 出发 [2]

- 稳定粒子或窄的共振谱权重函数不依赖体积，像单粒子态。
- 对于宽共振，谱权重函数有明显的 $1/L^3$ 行为,像两粒子态。

从更为一般情况的 Lüscher 量子散射模型出发 [3]，得到类似的结论。

N.Mathur,F.X.Lee et al,Phys.Rev.D 70,074508(2004)

Guozhan Meng and Chuan Liu,Phys.Rev.D 78,074506(2008)

Zhi-Yuan Niu,Ming Gong,Chuan Liu and Yan Shen,Phys.Rev.D 80,114509(2009)

无限体积情况

质心系中，两粒子相互作用的哈密顿量 [1, 2, 3]:

$$H = -\frac{1}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\,, r > a, V(r) = 0$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_{lm}(r)Y_{lm}(\mathbf{n})\,,\ \mathbf{r} = r\mathbf{n}$$

解为:

- $\psi_{lm}(r) = b_{lm}u_l(r;k)$
- $r > a, u_l(r;k) = \alpha_l(k)j_l(kr) + \beta_l(k)n_l(kr)$

由此得到散射相移:

$$e^{2i\delta_l(k)} = \frac{\alpha_l(k) + i\beta_l(k)}{\alpha_l(k) - i\beta_l(k)}, \cot\delta_l(k) = \frac{\alpha_l(k)}{\beta_l(k)}$$

M.Lüscher,Commun.Math.Phys.105,153(1986)

M.Lüscher,Nucl.Phys.B354,531(1991)

M.Lüscher,Nucl.Phys.B364,237(1991)

立方盒子模型

将 $V(r)$ 修改成:

$$V_L(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^3} V(|\mathbf{r}+\mathbf{n}L|)$$

定义"外部区域"，也就是无相互作用的区域:

$$\Omega = \left\{\mathbf{r} : |\mathbf{r}+\mathbf{n}L| > a,\ for\ \mathbf{n}\in\mathbb{Z}^3\right\}$$

外部区域解为:

$$\Psi(\mathbf{r};k)|_{\mathbf{r}\in\Omega} = \sum_{lm} v_{lm} G_{lm}(\mathbf{r};k^2)$$

G_{lm} 为 Helmholtz 方程线性独立的周期奇异解:

$$G_{lm}(\mathbf{r};k^2) = \frac{(-1)^l k^{l+1}}{4\pi}\left[Y_{lm}(\mathbf{n})n_l(kr) + \sum_{l'm'} \mathcal{M}_{lm;l'm'} Y_{l'm'}(\mathbf{n}) j_{l'}(kr)\right]$$

立方盒子模型

$$
\begin{aligned}
\mathcal{M}_{lm;js}(k^2) &= \sum_{l'm'} \frac{(-1)^s i^{j-l} \mathcal{Z}_{l'm'}(1,q^2)}{\pi^{3/2} q^{l'+1}} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)(2j+1)} \\
&\times \begin{pmatrix} l & l' & j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l' & j \\ m & m' & -s \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

这里用了 Wigner 3j 符号。

Zeta 函数:

$$
\mathcal{Z}_{lm}(s,q^2) = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{n})}{(\mathbf{n}^2 - q^2)^s}
$$

其中 $\mathcal{Y}(\mathbf{r}) = r^l Y_{lm}(\mathbf{n})$, $q = kL/(2\pi)$

立方群的对称性

立方盒子模型的对称群为 $O(3,\mathbb{Z}) = SO(3,\mathbb{Z}) \otimes Z_2$,此时角动量 l 已经不是好量子数。 l 一般说来是可约的。

$$
\begin{aligned}
0 &= A_1^+ \\
1 &= T_1^- \\
2 &= E^+ \oplus T_2^+ \\
3 &= A_2^- \oplus T_1^- \oplus T_2^- \\
4 &= A_1^+ \oplus E^+ \oplus T_1^+ \oplus T_2^+
\end{aligned}
$$

可以看到，由于立方群 $O(3,\mathbb{Z})$ 保留了宇称对称性，所以宇称没有破缺。

我们考虑都是具有某种立方对称性的本征态和算符。
这就自然的涉及到格点上的立方群的表示与角动量 l 的对应关系。

立方群的对称性

$$
\begin{aligned}
A_1 &\longrightarrow l = 0, 4, 6, 8, \cdots \\
A_2 &\longrightarrow l = 3, 6, 7, 9, \cdots \\
E &\longrightarrow l = 2, 4, 5, 6, \cdots \\
T_1 &\longrightarrow l = 1, 3, 4, 5, \cdots \\
T_2 &\longrightarrow l = 2, 3, 4, 5, \cdots
\end{aligned} \tag{1}
$$

A_1^+ 道是对 $l = 0$,即 s 波的非常好的近似，如果忽略 $l = 4$ 的混合。
T_1^- 道是对 $l = 1$ 比较好的近似，如果忽略 $l = 3$ 的混合。
那么哪个对应于 $l = 2$ 呢？好的近似应该是 E 和 T_2 两个道的某种混合。现在我们只是讨论 A_1^+ 和 T_1^- 两个道的波函数以及相应的谱权重。

A_1^+ 波函数的在盒子里的归一化

A_1^+ 道的波函数:

$$
\begin{aligned}
\psi^{(A_1^+)}(\mathbf{r};k)|_{\mathbf{r}\in B} &\simeq b_0 u_0(r;k) Y_{00}(\mathbf{n}) \\
\psi^{(A_1^+)}(\mathbf{r};k)|_{\mathbf{r}\in \Omega} &\simeq \frac{4\pi}{k} v_0 G_{00}(\mathbf{r};k)
\end{aligned}
$$

其中 $B = \{\mathbf{r} : r \leq a\}$ 为有相互作用的区域。
$\Omega = \{\mathbf{r} : r > a\}$ 为无相互作用的外部区域。
归一化条件 $\langle E|E\rangle = 1$,即:

$$
\int \mathrm{d}^3\mathbf{r} |\langle \mathbf{r}|E\rangle|^2 = \int_B \mathrm{d}r^3 |\psi^{(A_1^+)}(\mathbf{r};k)|^2 + \int_\Omega \mathrm{d}r^3 |\psi^{(A_1^+)}(\mathbf{r};k)|^2 = \frac{1}{L^3}
$$

A_1^+ 波函数的在盒子里的归一化

对于第一个积分，尽管在相互作用区域 B 内波函数 u_0 的具体形式不知道，但是积分却可以严格得到。

$$\int_0^a r^2|u_0(r;k)|^2\mathrm{d}r = 2\left(a+\frac{\mathrm{d}\delta_0(k)}{\mathrm{d}k}\right) - \frac{1}{k}\sin 2(ka+\delta_0)$$

如果能量 E 附近有一个很窄的共振 $E_\star = k_\star^2/(2m)$,那么上面这个积分将贡献一个很大的值。
因为当散射能量扫过该共振 $E_\star$ 时，经过很窄的宽度 Γ ,散射相移 δ_0 要跃变 π ,显然导数会很大。其中能量在 $E_\star$ 处， δ_0 经过 $\pi/2$
。

$$\frac{\mathrm{d}\delta_0(k)}{\mathrm{d}k} = \frac{k}{m}\frac{\mathrm{d}\delta_0}{\mathrm{d}E} \simeq \frac{\Gamma/2}{(E_\star - E)^2+\Gamma^2/4}$$

当 Γ 很窄时，上式 $\propto 1/\Gamma$ 。当然，如果 E 附近没有共振，那么这个积分相对于第二个积分是可以忽略的！

A_1^+ 波函数的在盒子里的归一化

这样我们就得到了归一化条件:

$$|v_0|^2\left[\varepsilon+\frac{\eta\Gamma}{(E_\star-E)^2+\Gamma^2/4}+\frac{1}{2k^3}\cot\delta_0(k)+\frac{\pi}{k\Delta\mathbf{p}^2}\csc^2\delta_0(k)\right]=\frac{1}{L^3}$$

质心系中, A_1^+ 道两粒子散射态:

$$O^\dagger|0\rangle=\frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\mathbf{p}}\Phi(\mathbf{p})\pi_1^+(\mathbf{p})\pi_2^+(-\mathbf{p})|0\rangle$$

散射态的归一化条件:

$$\frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{p}}|\Phi(\mathbf{p})|^2=1$$

用 $|E\rangle$ 和 $O^\dagger|0\rangle$ 就可以算谱权重函数了。

A_1^+ 道的谱权重函数

$$W(E,L) = \frac{8\pi k|\varphi_L(k^2)|^2}{2k^3\left(\varepsilon + \frac{\eta\Gamma}{(E_\star - E)^2 + \Gamma^2/4}\right) + \cot\delta_0(k) + \frac{2\pi k^2}{\Delta \mathbf{p}^2}\csc^2\delta_0(k)}$$

$$\varphi_L(k^2) = \frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{p}} \frac{\Phi(\mathbf{p})}{\mathbf{p}^2 - k^2}$$

在 $L \to \infty$ 时，

$$\varphi_\infty(k^2) = \mathcal{P}\int \frac{\mathrm{d}^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{\Phi(\mathbf{p})}{\mathbf{p}^2 - k^2} + \frac{k\Phi(k^2)}{4\pi}\cot\delta_0(k)$$

不依赖于体积。

A_1^+ 道的谱权重函数

$$W(E,L)=\frac{8\pi k|\varphi_L(k^2)|^2}{2k^3\left(\varepsilon+\frac{\eta\Gamma}{(E_\star-E)^2+\Gamma^2/4}\right)+\cot\delta_0(k)+\frac{2\pi k^2}{\Delta\mathbf{p}^2}\csc^2\delta_0(k)}$$

其中 $\Delta\mathbf{p}^2$ 为格子上典型的能级间隔。

$$\frac{L^3}{(2\pi)^3}2\pi\sqrt{\mathbf{p}^2}\Delta\mathbf{p}^2=1\Rightarrow\Delta\mathbf{p}^2=\frac{(2\pi)^2}{L^3\sqrt{\mathbf{p}^2}}\propto\frac{1}{L^3}$$

分子不依赖体积，分母中的特征尺度:
第一项只是在 Γ 很小的时候，贡献一个很大的量 $\simeq\frac{1}{\Gamma}$;
第二项在共振态附近是一个量级为1的常数,可以忽略。
第三项贡献一个 $\propto L^3$ 的量，这是谱权重函数中唯一一项明显的体积依赖。

A_1^+ 道的谱权重函数

$$W(E,L)=\frac{8\pi k|\varphi_L(k^2)|^2}{2k^3\left(\varepsilon+\frac{\eta\Gamma}{(E_\star-E)^2+\Gamma^2/4}\right)+\cot\delta_0(k)+\frac{2\pi k^2}{\Delta\mathbf{p}^2}\csc^2\delta_0(k)}$$

$$\frac{\eta\Gamma}{(E_\star-E)^2+\Gamma^2/4}\xrightarrow{\Gamma\to 0}\frac{1}{\Gamma}\qquad\frac{1}{\Delta\mathbf{p}^2}\propto L^3$$

- 当 $1/\Gamma\gg 1/\Delta\mathbf{p}^2$ 时， $W(E,L)$ 不依赖体积，窄的粒子像单粒子态。
- 当 $1/\Gamma\ll 1/\Delta\mathbf{p}^2$ 时， $W(E,L)$ 有明显的 $1/L^3$ 行为。宽的粒子像两粒子态。
- 体积足够大，粒子相对来说总是宽的。但是在一定有限的体积范围内，就会有 $1/\Gamma$ 和 $1/\Delta\mathbf{p}^2$ 谁占主导的问题。

T_1^- 道波函数及归一化

T_1^- 是三维表示，有三个正交的波函数，我们取 Z 分量的波函数讨论。
如果忽略掉 $l=3$ 的混合

$$\Psi^{(T_1^-)}(\mathbf{r};k)|_{\mathbf{r}\in B} \simeq b_1 u_1(r;k) Y_{10}(\mathbf{n}), \Psi^{(T_1^-)}(\mathbf{r};k)|_{\mathbf{r}\in\Omega} \simeq \frac{4\pi}{k^2} v_1 G_{10}(\mathbf{r};k)$$

取 $|b_1|^2 = \eta |v_1|^2$

$$|v_1|^2 \left[\eta \int_0^a \mathrm{d}r\, r^2 |u_1(r;k)|^2 + \left(\frac{4\pi}{k^2}\right) \int_\Omega \mathrm{d}^3\mathbf{r} |G_{10}(\mathbf{r};k)|^2 \right] = \frac{1}{L^3}$$

第一个积分同样可以证明

$$\int_0^a \mathrm{d}r r^2 |u_1(r;k)|^2 = 2\left(a + \frac{\mathrm{d}\delta_1(k)}{\mathrm{d}k}\right) - \frac{1}{k}\sin 2(ka+\delta_1)$$

T_1^- 道波函数及归一化

归一化条件:

$$|v_1|^2 \left[\varepsilon + \frac{\eta\Gamma}{(E_\star - E)^2 + \Gamma^2/4} + \frac{3}{2k^2} \cot \delta_1(k) + \frac{\pi}{k\Delta \mathbf{p}^2} \csc^2 \delta_1(k) \right] = \frac{1}{L^3}$$

T_1^- 道两粒子散射态:

$$O^\dagger|0\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{p}} \Phi(\mathbf{p}) p_z \left[\pi_1^\dagger(\mathbf{p}) \pi_2^\dagger(-\mathbf{p}) - \pi_2^\dagger(\mathbf{p}) \pi_1^\dagger(-\mathbf{p}) \right] |0\rangle$$

散射态归一化条件:

$$\frac{4}{L^3} \sum_{\mathbf{p}} p_z^2 |\Phi(\mathbf{p})|^2 = 1$$

T_1^- 道谱权重函数

$$W(E,L)=\frac{32\pi\left[\alpha+k^2\varphi_L(k^2)\right]^2}{3k\left[2k^3\left(\varepsilon+\frac{\eta\Gamma}{(E_\star-E)^2+\Gamma^2/4}\right)+3\cot\delta_1(k)+\frac{2\pi k^2}{\Delta\mathbf{p}^2}\csc^2\delta_1(k)\right]}$$

其中

$$\alpha=\frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{p}}\Phi(\mathbf{p})\sim\frac{1}{2\pi^3}\int \mathrm{d}^3\mathbf{p}\Phi(\mathbf{p})$$

α 是一个不依赖于体积的有限量。得到跟 A_1^+ 道一样的结论:

- 当 $1/\Gamma \gg 1/\Delta\mathbf{p}^2$ 即 $\Gamma/\Delta\mathbf{p}^2 \ll 1$ 时， $W(E,L)$ 不依赖体积。
- 当 $1/\Gamma \ll 1/\Delta\mathbf{p}^2$ 即 $\Gamma/\Delta\mathbf{p}^2 \gg 1$ 时， $W(E,L)$ 有明显的 $1/L^3$ 行为。

总结与展望

- 总结： A_1^+ 和 T_1^- 道的谱权重函数对体积的依赖行为
  - 当 $1/\Gamma \gg 1/\Delta\mathbf{p}^2$ 即 $\Gamma/\Delta\mathbf{p}^2 \ll 1$ 时， $W(E,L)$ 不依赖体积。也就是，一个很窄的粒子看上去像一个单粒子态。
  - 当 $1/\Gamma \ll 1/\Delta\mathbf{p}^2$ 即 $\Gamma/\Delta\mathbf{p}^2 \gg 1$ 时， $W(E,L)$ 有明显的 $1/L^3$ 行为。也就是，一个很宽的粒子看上去像两粒子态。
  - 如果体积足够足够大，一定宽度的粒子就算再窄，相对来说也是宽的。因为此时散射态具有接近连续的能量。这个时候该粒子与散射态总是混合在一起难以区分的。但是在一定有限的体积范围内，就会有 $1/\Gamma$ 和 $1/\Delta\mathbf{p}^2$ 谁占主导的问题。
- 展望：由于谱权重函数中包含了共振宽度 Γ 的信息，所以为格点理论中计算共振宽度提供了一种可能的方法。