DATE . . NOTES

Many-Body Quantum-Theory in Condensed Matter Physics.

Henrik Bruus: Karsten Flensberg.

Chapter 1. , Bruus. 钟寅

① Second Quantization. ③ ~~Green~~ function ③ electrodynamics

② Free electron Gas.. 微扰+平均场 ④ statistics.

N-particle systems. 3-assumptions:

①: $P = \int |\psi|^2 dr \Rightarrow P = \int |\psi(r_1 \cdots r_N)|^2 \prod_{j=1}^{N} dr_j$

② "indistinguishable"

or
$$\begin{cases} \psi(r_1 \cdots r_j \cdots r_K \cdots r_N) = \psi(r_1 .. r_K .. r_j .. r_N) & \text{bosons} \\ \psi(r_1 \cdots r_j \cdots r_K .. r_N) = -\psi(r_1 .. r_K .. r_j .. r_N) & \text{fermions} \end{cases}$$

$\psi(r_1 \ldots r_N) =$ 本征展开 $= \sum_{\nu_1 \cdots \nu_n} A_{\nu_1 \cdots \nu_n} \psi_{\nu_1}(r_1) \ldots \psi_{\nu_n}(r_N)$.

③ Operaters:

$T(r \cdot \nabla_r)$ Kinetic energy operater.

T_j (Matrix) $= \sum_{\nu_a \cdot \nu_b} T_{\nu_b \nu_a} |\nu_b\rangle_j \langle \nu_a|_j$ for particle-j

$T_{tot} = \sum_{j=1}^{N} T_j$

V_{jK} potential energy $V(r_j - r_K)$ actually.

$$V_{jK} = \sum_{\nu_a \nu_b \nu_c \nu_d} V_{\nu_a \nu_b \nu_c \nu_d} |\nu_c\rangle_j |\nu_d\rangle_K \langle \nu_a|_j \langle \nu_b|_K$$

$$V_{\nu_a \nu_b \nu_c \nu_d} = \int dr_j \, dr_K \, \psi^*_{\nu_c}(r_j) \psi^*_{\nu_d}(r_K) V(r_j - r_K) \psi_{\nu_a}(r_j) \psi_{\nu_b}(r_K).$$

$V_{jK} = V_{Kj}$. So:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} T_j + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k}^{N} V_{jK}$$

The occupation number representation.

N-particle system, many indistinguishable particle in one state, first quantization we ask "which state is certain particle in" and may contain redundancy (冗余。) Second quantization we ask "how many particles are there in one state" due to indistinguish~~ab~~ment:

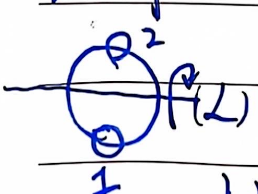
N-particle basis states:

$$|n_{\nu_1}, n_{\nu_2} \cdots\cdots\rangle \qquad \sum_j n_{\nu_j} = N$$

Bosons and fermions (Griffith. 陈童).

自旋 1/2 or 1 or ⋯ 由实验确定，而自旋 1/2 or 1 or ⋯ 的性质由（对称群）场论给出。对自旋 1/2. 绕 z 轴 2π 旋转矩阵元 $e^{i(\theta\cdot n)J_n/\hbar}|j.m\rangle \Leftrightarrow e^{i(2\pi)J_z/\hbar}|j.m\rangle$. 结果（Griffith. chapter 4. Exercise 4.56）$U(z.2\pi)=(-1)^{2j}$ $j=1/2$ $(-1)^{2j}=-1$.

说明：全同粒子 $\psi(r_1,r_2)=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)$，旋转（交换）称绕 L 轴的 π



的旋转至 $\psi(r_2.r_1)$ $\psi_1(r_2)'=e^{i\pi J_z/\hbar}\psi_1(r_2)$ $\psi_2(r_1')=e^{i\pi J_z/\hbar}\psi_2($

$\therefore \psi(r_2.r_1)=(e^{i\pi J_z/\hbar})^2\cdot\psi(r_2.r_1)=e^{i2\pi J_z/\hbar}\psi(r_1.r_2)$.

对费米子，为 (-1) 对玻色子为 1. 即交换对称与反对称.

对：$(-1)^{2j}=-1$ $(-1)^{2j}=1$ 可把旋转群：元素 $U(n\cdot\theta)$ 的 Hilbert space $\mathcal{H}_1$ 分为 $\mathcal{H}_{玻}\oplus\mathcal{H}_{费}$ 由于直积的性质，两者间元素必正交，$\mathcal{H}_{玻}$ 中量子态 $|\psi_{玻}\rangle$ 与 $\mathcal{H}_{费}$ 中量子态 $|\psi_{费}\rangle$，由于 $[U.H]$ 相容，U 分开的 Hilbert space，对 $\hat{H}$，即所有可观测量也分开了。 $\hat{X}$ 物理量算符满足：$\langle\psi_{玻}|\hat{X}|\psi_{费}\rangle=0$ 玻色子与费米子是不相容，彼此即彼（有例外），无法观测到其干涉与能级简并.

* 上文严格讨论在基于量子场论.

fermi-Dirac and Boson-Einestein statistics

Now, $E_{All} = 363 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ with 3 indistinguishable particles, $(n_1 . n_2 . n_3)$ energy level, we have many "N-particle basis states". For $n_1 \Leftrightarrow n_2 \Leftrightarrow n_3$, $\nu_1 = 1$ $\nu_2 = 2$. $\nu_3 = 3$ —, The states are: n=1态, n=2态, n=3态.

有如下排列. (11.11.11); (5.13.13) 3重简并.

(1.1.19); 3重 (5.7.17) 6重.

若3粒子皆处于 ψ_{11},

组态 $(\underset{n=1}{0}, \underset{n=2}{0}, 0 \cdots\cdots \underset{n=11}{3}, 0 \cdots \cdots)$ |configuration) ← 占有数.

ψ_5 , ψ_{13}.

组态 $(0.0.0.0,1 \cdots\cdots 2.0.0.0 \cdots)$

$$P(E_1 = 1) = \frac{3}{\text{All态数}} \times \frac{2 \leftarrow n=1 \text{ occupation number}}{3 \leftarrow \text{particle number}} = 2/13.$$

Now, for indistinguishable fermions, Pauli's Principle means: (11.11.11) X can't exist. (1.1.19). (5.13.13) can't exist, which means:

$$\begin{cases} n_{\nu_j} = 0, 1 & \text{fermions} \quad P(5) = P(17) = P(7) = 1/ \\ n_{\nu_j} = 0.1.2 \cdots & \text{bosons}. \end{cases}$$

Other hand, indistinguishable bosons, different configura with n 简并视作1简并. $P(1.1.19) = 1/4 = P(11.11.11) = P(5.13.13) = P(5,7.17)$ $\psi(1.1.19) = \psi(1.19.1) = \psi(19.1.1)$ 交换对称.

对 Fermions, $\psi(1个5.1个7.1个17) = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_5(x_A) & \psi_5(x_B) & \psi_5(x_C) \\ \psi_7(x_A) & \psi_7(x_B) & \psi_7(x_C) \\ \psi_{17}(x_A) & \psi_{17}(x_B) & \psi_{17}(x_C) \end{vmatrix}$ = (6项) (反对称).

$\frac{1}{\sqrt{6}} \leftarrow \sqrt{\frac{\prod n_i!}{N!}}$

对 Bosons $\psi(1个5.1个7.1个17) = \frac{1}{\sqrt{6}}$ (6项相加) (对称).

推广 (Griffith).

Now: Energy level $E_1(d_1重)$ $E_2(d_2重)$ ...... $E_n(d_n重)$)

with N-particles: (N_1 . N_2 . . . . N_n) . . .

① 粒子均可分辨:

↗每个可在 E_i 中又有 d_i 个选择.

有多少种方法得到 (N_1 .... N_n) 组态).

即: 多有少个态对应此组态?

N_1 个在 E_1 中. step 1 $Q = \frac{N!\ d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}$ → 从N中拿出 N_1 个, 每个有 d_1 种态的选择(可分辨)(每个态可有多个)

② $Q_{All} = \prod Q = N! \cdot \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n^{N_n}}{N_n!}$

② 全同费米子: 全同: 原本 $d_n^{N_n}$ 变为"把 N_n 粒子填入 d_n 态中",

且"每个态仅一粒子 or 0"变为: $d_n! / [(d_n-N_n)!\ N_n!]$

$\therefore Q_{All} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n!}{N_n!(d_n-N_n)!}$

变化: ① 不关心N个中抽 N_1 个怎么抽(全同)

② 每个态至多1粒子.(费米), 这 N_1 粒子组合而不排列 (全同)

③. 全同玻色子:

变化: ① 不区分态(态全同) N_1 粒子放入 d_n 箱子. 中可有0个粒子的箱子: 怎么放? 0|**|0|| (d_n+N_1-1) 个"隔板+粒子", 隔板不可分辨: ÷$(d_n-1)!$ 粒子全同: ÷$N_n!$

$\therefore Q_{All} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(N_n+d_n-1)!}{N_n!(d_n-1)!}$

最概然组态: N_n 哪种分布 st $(Q_{All})_{max}$?

过程略. 对 $(E_1 \cdots\cdots E_n)(d_1 \cdots\cdots d_n)$.

满足: $\sum N_n = N$ $\quad \sum N_n E_n = E$ $\quad$ N非常大近似下.

$$N(E_n)=\begin{cases} e^{-[E(n)-\mu(T)]/k_BT} & \text{Maxwell-Bozeman.} \\ \left[e^{(E(n)-\mu(T))/k_BT}+1\right]^{-1} & \text{Fermi-Dirac} \\ \left[e^{(E(n)-\mu(T))/k_BT}-1\right]^{-1} & \text{Boson-Einstein} \end{cases}$$

$\mu(T)$: 化学势.

综上. 我们知道 N个粒子可被填入能级中: 每个能级对应若干 $(\psi(r_1)\cdots\psi(r_N))$ 的简并态。

产生 湮灭

The boson creation and annihilation operators

称: $\hat{b}_j^+$, $\hat{b}_j$, creation and annihilation operators

$\hat{b}_j^+ \Leftrightarrow$ particle $\hbar\omega_j$ to stimulate $|0\rangle_j \to |1\rangle_j$

= 给了 $\hbar\omega_j$ 能量, 使得第 j 个能级上粒子从

= 真空态 $|0\rangle$ 提一个粒子, 直上 j 能级而不经过 j-1 能级

由于玻色子 $|0\rangle_j$ 至 $|1\rangle_j$ 至 $|2\rangle\cdots$ 可一直进行.

$$|\underset{1}{n_1}\ \underset{2}{n_2}\ \underset{3}{n_3}\cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod n_i!}}(\hat{b}_1^+)^{n_1}(\hat{b}_2^+)^{n_2}\cdots|0.0.0\cdots\rangle$$

从"谐振子"可推出. $\quad 0 \xleftarrow{-} |0\rangle \underset{-}{\overset{+}{\rightleftarrows}} |1\rangle \underset{-}{\overset{+}{\rightleftarrows}} |2\rangle$

properties:

$[\hat{b}_j^+, \hat{b}_k^+]=0$ (j.k能级粒子自然无关)

$[\hat{b}_j^-, \hat{b}_k^-]=0$

$[\hat{b}_j^-, \hat{b}_k^+]=0 \quad j\neq k$

$[\hat{b}_j^-, \hat{b}_j^+]=1$ (类比谐振子).

$\hat{b}^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

$\hat{b}^-|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$\nearrow$ eigenstate of b^+b

$\Rightarrow (b^+b^-)b^-|\phi_0\rangle = b^-(n_0-1)|\phi_0\rangle$

$(b^+b^-)|n\rangle = b^+a_0 \cdot |n-1\rangle = a_0 a_1 |n\rangle$ $\therefore |n\rangle$ is eigenstate of b^+b^-

$\Rightarrow (b^+b^-)\hat{b}^+|n_\nu\rangle = (n+1)\hat{b}^+|n_\nu\rangle \xRightarrow{n_\nu = n+1} (\hat{b}^+\hat{b}^-)|n_\nu\rangle = n|n_\nu\rangle$

$\Rightarrow \| b_\nu^- |n_\nu\rangle \|^2 = \langle n_\nu | b_\nu^+ b_\nu^- | n_\nu \rangle = n_\nu$

$\| b_\nu^+ |n_\nu\rangle \|^2 = n_\nu + 1$

$\Rightarrow b_\nu^-|n_\nu\rangle = \sqrt{n_\nu}\,|n_\nu - 1\rangle$ $\quad b^+|n_\nu\rangle = \sqrt{n_\nu+1}\,|n_\nu+1\rangle$ $\quad (b_\nu^+)^{n_\nu}|0\rangle = \sqrt{n_\nu!}\,|n_\nu\rangle$

The fermion creation and annihilation operators

$|1010, 1010, \cdots\rangle \rightarrow \hat{C}_{\nu_i}^+, \hat{C}_{\nu_i}$

同样有：$\{\hat{C}_{\nu_i}^+, \hat{C}_{\nu_j}^+\} = 0$ 而 $\{\hat{C}_{\nu_i}^+, \hat{C}_{\nu_j}^-\} = \delta_{ij}$ ☆

$0 \xleftarrow{-} |0\rangle \underset{-}{\overset{+}{\rightleftarrows}} |1\rangle \xrightarrow{+} 0$

where: $(\hat{C}_j^+)^2 = 0 \quad (\hat{C}_{\nu_j}^-)^2 = 0$

and: $\hat{C}_j^+|0\rangle = |1\rangle \quad \hat{C}_{\nu_j}^+|1\rangle = 0$

$\hat{C}_j^-|1\rangle = |0\rangle \quad \hat{C}_{\nu_j}^-|0\rangle = 0$ $\quad \Rightarrow$ 对易

注：attention：$\underbrace{\{\hat{C}_{\nu_i}^+, \hat{C}_{\nu_j}^-\}}_{\text{反对易}} = \delta_{ij}$ 而 $[b_{\nu_i}^+, b_{\nu_j}^-] = \delta_{ij}$

体现交换反对称性.

pf: $a^+a^-|1\rangle = |1\rangle$ $\quad a^-a^+|1\rangle = 0$ $\quad (a^+a^- + a^-a^+)|1\rangle = |1\rangle$ $\quad \overset{\Rightarrow\text{反对易式}}{\{a^+, a^-\} = \delta_{ij}}$

$a^+a^-|0\rangle = 0$ $\quad a^-a^+|0\rangle = |0\rangle$ $\quad (a^-a^+ + a^+a^-)|0\rangle = |0\rangle$

由于算符反对易，不能再如：b：$\hat{b}_j^+|n_0 \cdots n_j\rangle = \sqrt{n} \cdots |n_j+1\rangle$

因为 Actually：$\hat{C}_j^+|n_0 n_1 \cdots n_j \cdots\rangle = \underbrace{\hat{C}_j^+(\hat{C}_0^+)^{n}(\hat{C}_1^+)^{n}}_{\text{不可交换}} \cdots |0\rangle$

"跨过" $\hat{C}_j^+\hat{C}_0^+ = -\hat{C}_0^+\hat{C}_j^+ \cdots\cdots$

故"跨过"一直乘以负一.

$$\Rightarrow \hat{C}_j^+|n_1 \cdots n_j\rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum_{\nu=1}^{\alpha-1} n_\nu} |n_1 \cdots \overset{j}{1} \cdots\rangle & n_j = 0 \\ 0 & n_j = 1 \end{cases}$$

$\{C_\sigma^+, C_{\sigma'}^+\} = 0 \quad \{C_\sigma, C_{\sigma'}^+\} = \delta_{\sigma\sigma'}$

DATE

Explain:

vaccum state: $|0\rangle$ A state with no particle $\neq 0$

"无数基态构成集合"?

Explain: 交换对称 & 反对称; 对易/反对易

Bosons: 交换对称 $|1,5,3\rangle = \hat{a}_1^+(\hat{a}_2^+)^5(\hat{a}_3^+)^3|0\rangle$

$|1,(2+3),3\rangle = \hat{a}_1^+$

$|1,2,3,2\rangle = \hat{a}_1^+(\hat{a}_3^+)^3(\hat{a}_2^+)^3$

$n_1 \; n_2 \; n_3 \; n_2$ $\qquad (\hat{a}_2^+)^2$

$\therefore \hat{a}_2^+\hat{a}_3^+ = \hat{a}_3^+\hat{a}_2^+ \quad [\hat{a}_2^+, \hat{a}_3^+] = 0$ 对易

Fermions 反对易源于反对称同理

只有一个粒子

本质: $|n_1\rangle$ 经过 T(跃迁振幅)后有确定概率跑到各种态上.

The general form for second quantization operators.

Former, T is expreseed in eigenstates $|\nu_j\rangle|\nu_k\rangle$ - - -

Now, we want T expressened in $|$number$\rangle$ phases.

Boson: $\hat{F}$ 单体算符

eg: 总角动量 $\hat{L} = \sum_{\text{particle } i=1}^{N} \hat{L}_i$

in number phases. $(a^+a^-)|\alpha\rangle = k|\alpha\rangle$ 为本征算符.

自然地: $\hat{F} = \sum_{\alpha\beta}(f_{\alpha\beta})\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\beta$

$f_{\alpha\beta} = ($数$)$: $\langle\psi_\alpha|\hat{f}|\psi_\beta\rangle$

比如：动能算符 T（作用单体上）对 N 个粒子

step1：$\hat{T} = \sum^N \hat{T}_i$ 是分别看动能算符作用到每个粒子上，由于粒子全同 $\hat{T} \Leftrightarrow N\hat{T}_i$。

step2. 讨论 $\hat{T}_i$，比如 $\hat{T}_1$，我们是在粒子数表象下讨论 $\hat{T}_1|n_1,n_2\cdots\rangle$，对 $|n_i\rangle$ 上每个粒子，$\hat{T}_1$ 表示作用到单个粒子上，设 $\hat{T}_1|\varphi(k)\rangle = f_{kk}|\varphi(k)\rangle$

平均值 $T_{average} = N\cdot(\frac{1}{N}\text{sum}\, T_i \text{ on } k)$ 共有 n_k 填充数个 f_{kk}，则

动能平均：$T_{average} = \sum_k n_k f_{kk}$. $n_k \Leftrightarrow \hat{a}_k^+\hat{a}_k$

step3. 如果仅 argue average，止于此；而比如 $V=0$ $H=\hat{T}$，$\hat{T}$ 代表含时演化，包括 Δt 后 $|n_1\cdots n_j\cdots\rangle$ n_j 自身动能 $n_i\to n_j$ 有粒子上下能级带来的动能，而后者包括在交叉项中。T_{ij} 作用是 st i 中粒子少一个，j 能级粒子多一个，从而改变动能，(不证)为：

$$\hat{T}_{交叉} = \sum_{i,k}\sqrt{(n_i+1)n_k}\, f_{ik} \quad 而 \quad \sqrt{(n_i+1)n_k} \Leftrightarrow \hat{a}_i^+\hat{a}_k$$

故：$\hat{T} \Leftrightarrow \sum_{\alpha\beta} \hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\beta\cdot(T_{\alpha\beta})$ $T_{\alpha\beta} = \langle\psi_\alpha|\hat{T}|\psi_\beta\rangle$ 即跃迁概率振幅。

各种跃迁皆有概率。

Boson：$\hat{F}$ 二体算符。

V_{ijkl} 表明上文 step3 可包含两粒子态加一，二态减一

$\hat{V}(n_1,n_2)$ 同理做上，包括交叉项 $(k,j,l,m) \overset{①}{\Rightarrow} (k-1,j-1,l+2,m)$ ② $(k-1,j-1,l+1,m+1)$ ③ $(k-1,j-1,l,m+2)$ ④ $(k-2,j,l,m) \Rightarrow (k,j,l+2,m)$ 等

④可能源于 $(a_l^+a_l^+)V(4)(a_k^- a_k^-)$ $(-_1 = -_2)(+_1=+_2)$ 即涉及两粒子视在同一态

以及："交叉 and 不变项" $(k,j,l,m) \overset{⑤}{\Rightarrow} (k,j-1,l+1,m)$

$(a_i^+a_j^+Va_l^-a_k^-)$ 4 项，总之：

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\nu,\theta} V_{\alpha\beta\nu\theta}(\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\beta^+\hat{a}_\nu^-\hat{a}_\theta^-) \quad V_{\alpha\beta\nu\theta} = \langle\psi_{(\alpha)}\psi_{(\beta)}|\hat{V}|\psi_{(\nu)}\psi_{(\theta)}\rangle$$

DATE · ·

Fermion：（给一个简证）

Known： $T_j = \sum_{\nu_a}\sum_{\nu_b} |\psi_{\nu_b}(\vec r_j)\rangle\langle\psi_{\nu_b}(\vec r_j)|\hat T_j|\psi_{\nu_a}(\vec r_j)\rangle\langle\psi_{\nu_a}(\vec r_j)|$

$T_{\nu_a\nu_b} = \langle\psi_{\nu_b}(\vec r_j)|\hat T_j|\psi_{\nu_a}(\vec r_j)\rangle$

$$\hat T \underbrace{|\psi_{\nu_1}(\vec r_1)\rangle\cdots|\psi_{\nu_N}(\vec r_N)\rangle}_{|n_1\cdots n_N\rangle} = \sum_j\Big(\sum_{\nu_a}\sum_{\nu_b} \underbrace{|\psi_{\nu_b}(\vec r_j)\rangle}_{T_{\nu_b\nu_a}}\langle\psi_{\nu_a}(\vec r_j)|\Big)|\psi_{\nu_1}(\vec r_1)\rangle\cdots|\psi_{\nu_N}(\vec r_N)\rangle$$

? $\times(-1)^j$ $(-1)^j$

交换

$$= \sum_j\sum_{\nu_a\nu_b}|\psi_{\nu_b}(\vec r_j)\rangle|\psi_{\nu_1}(\vec r_1)\rangle\cdots\langle\psi_{\nu_a}(\vec r_j)|\psi_{\nu_j}(\vec r_j)\rangle\cdots|\psi_{\nu_N}(\vec r_N)\rangle\times(-1)^j$$

$\times(-1)^j$ 交换　　仅 ν_j 可正交 $=\delta_{a\nu_j}$　　交换的

$$= \sum_j \cancel{(-1)^{2j}}\ |\psi_{\nu_1}(\vec r_1)\rangle\cdots|\psi_{\nu_b}(\vec r_j)\rangle\cdots|\psi_{\nu_N}(\vec r_N)\rangle\,\delta_{\nu_a\nu_j}$$

$=1$

$\langle \hat c^+_{\nu_{n_j}}\hat c_{\nu_{n_j}}\rangle = 1$

误区：此均为一次量子波函数，不涉及 (ν_i,ν_j) 的"交换！"

$\sum_j$ 支 $\delta_{\nu_a\nu_{n_j}} = 1$

$$~~= \sum\sum\sum|\psi_b(\vec r_j)\rangle\,\delta_{a\nu_j}\,|\psi_{\nu_1}(\vec r_1)\rangle\cdots|\psi_{\nu_1}(\vec r_1)\rangle\cdots\cdots|\psi_{\nu_{j-1}}(\vec r_{j-1})\rangle|\psi_{\nu_{j+1}}(\vec r_{j+1})\rangle\cdots|\psi_{\nu_N}(\vec r_N)\rangle~~$$

换表象

$$= \sum_j\sum_{\nu_a\nu_b} T_{\nu_b\nu_a}\,\delta_{\nu_a\nu_{n_j}}\, \hat c^+_{\nu_b}(\hat c^+_{\nu_{n_1}})^{m_1}\cdots(\hat c^+_{\nu_{n_j}})^{m_j-1}\cdots(\hat c^+_{\nu_{n_k}})^{m_k}|0\rangle$$

联立

$$= \hat T\,(\hat c^+_{\nu_{n_1}})^{m_1}\cdots(\hat c^+_{\nu_{n_j}})^{m_j}\cdots(\hat c^+_{\nu_{n_k}})^{m_k}|0\rangle$$

$$\Downarrow\quad = \underbrace{(\hat c_{\nu_{n_j}}\hat c^+_{\nu_{n_j}})}(\hat c^+_{\nu_{n_j}})^{m_j-1}，\text{去}$$

$$\Rightarrow \sum_j\sum_{\nu_a\nu_b} T_{\nu_b\nu_a}\,\hat c^+_{\nu_b}(\hat c^+_{\nu_{n_1}})^{m_1}\underbrace{(\hat\delta_{\nu_a\nu_{n_j}}\hat c_{\nu_{n_j}})}_{\text{对 } j \text{ 求和}}(\hat c^+_{\nu_{n_j}})^{m_j}\cdots|0\rangle$$

$\hat c^+_{\nu_{n_j}}\hat c_{\nu_{n_j}}|n\rangle = n|n\rangle$

$$= \sum\sum \hat c^+_{\nu_b} T_{\nu_b\nu_a}\hat c_{\nu_a}|n\rangle$$ 就是：$\hat c_{\nu_{n_a}}$

$\hat c^+_{\nu_b}|0\rangle \cdots (-1)^j \cdots \hat c_{\nu_a}$ 相消！ $(-1)^j$

∴ 矩阵元即 $\sum T_{\nu_b\nu_a}(\hat c^+_{\nu_b}\hat c_{\nu_a})$

结论全同 Boson 情况　$\hat n$：粒子数算符

Change of basis in second quantization

Former, in position basis: $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ $\begin{cases} u\text{ basis } \langle x|u\rangle \\ v\text{ basis } \langle x|v\rangle \end{cases}$

eg: $(1, x, x^2 \cdots)$ $(1, \sin x, \sin 2x \cdots)$.

fits: $\langle x|u\rangle = \sum_v \langle u|v\rangle^* \langle x|v\rangle$

$\hat{a}^+$ works on single particle, gives: ψ基态x: $|0\rangle$ 相同, 由

$$\psi_n(x) = \hat{a}^+ (\psi(\text{基态}x))$$

于 $\hat{a}_u$, $\hat{a}_v^+$ 不同, 出现不同 $(1, x, x^2 \cdots)(1, \sin x, \sin 2x)$

$$\Rightarrow \quad \hat{a}_u^+ |\psi\text{基态}(x)\rangle = \sum_v \langle u|v\rangle\, \hat{a}_v^+ |\psi\text{基态}x\rangle$$

which means: $\hat{a}_u^+ = \sum_v \langle u|v\rangle\, \hat{a}_v^+$

for N-particle system:

$$|\psi_{n_1}(x_1)\, \psi_{n_1}(x_2)\, \psi_{n_1}(x_3)\, \psi_{n_2}(x_4)\, \psi_{n_2}(x_5) \cdots\cdots \rangle$$

$$= \hat{a}_{u_{n_1}}^+ \hat{a}_{u_{n_1}}^+ \hat{a}_{u_{n_1}}^+ \hat{a}_{u_{n_2}}^+ \hat{a}_{u_{n_2}}^+ \cdots\cdots |0\rangle \text{ vaccum state}$$

$$= \Big(\sum_{v_{n_1}} \langle u_{n_1}|v_{n_1}\rangle\, a_{v_{n_1}}^+\Big) \times (\ ) \times (\ ) \times \Big(\sum_{v_{n_2}} \langle u_{n_2}|v_{n_2}\rangle\, \hat{a}_{v_{n_2}}^+\Big) \times (\ ) \cdots \times |0\rangle$$

from: position basis $\langle x|\psi\rangle$, we change into particle-number basis $|n\rangle$ with operater $\hat{a}_v$, $\hat{a}_v^+$.

Quantum field operators ☆

Former, the discuss is an analogy between position basis ~ position basis and p-n basis ~ p-n basis. Now, we want to express a transform from position basis to p-n basis.

$$\Rightarrow \quad \hat{a}_u^+ = \sum_\nu \langle u|\nu\rangle^* \hat{a}_\nu^+$$

let: $u = |r\rangle$ $\quad \hat{\Psi}^+(r) = \sum \langle r|\nu\rangle^* \hat{a}_\nu^+ = \sum_\nu \psi_\nu^*(r)\, \hat{a}_\nu^+$

$$\hat{\Psi}^-(r) = \sum_\nu \psi_\nu(r)\, \hat{a}_\nu^-$$

本质上就是分立谱(用+, −即可)到连续谱(需要表象展开)的过程

于N_{α} 的条件. 至示你的概率.

DATE · ·

若 $i=P_1 \cdot P_2 \cdots\cdots$ 代表
~~有P动量粒子概率振幅~~
~~各种路径~~(动量P的分布 $\psi_p(r)$)
积是为 $\psi(r)|0\rangle$ 为在 $|r\rangle$
发现一粒子的概率
场论中等价于激发一个粒子出来 $|r\rangle$

在分立谱 $[\hat{a}^+_{u_1}\ \hat{a}_{u_2}] = \delta_{u_1 u_2}$

此为在连续谱中:

$[\Psi(r_1), \Psi^+(r_2)] = \delta(r_1-r_2)$ Boson fields.

$\{\Psi(r_1), \Psi^+(r_2)\} = \delta(r_1-r_2)$ fermion fields.

我们从 change of basis 初步定义了 field operators. 实际上, 看到所有上文的 operator 皆为某表象下产生/湮灭算符的展开。一次量子化能量表象下 $\hat{a}_+\ \hat{a}_-$ 定义在"升一个能级", 而粒子数表象下 $\hat{a}_+\ \hat{a}_-$ 为从真空态中激发粒子一个至 j 态 $|n\rangle \to |n+1\rangle_j$ Boson. 同样, 在位置, 动量表象下 a_+ 代表了激发一个粒子到 $|r\rangle$ 处, 以及激发一个粒子拥有动量 p $|p\rangle$, 它们自然满足.

$$\underset{\text{自旋}}{\psi^+(r, s_z)} = \sum_p \exp\left(\frac{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}\right)\frac{1}{\sqrt{V}}\ \hat{a}^+_p$$

箱归一化 $\frac{1}{\sqrt{V}}$, $\langle r|p\rangle^*$, 离散 Fourier

场算符: 位置表象下 $\hat{a}_+$

以及 $\langle r' s_z'|\psi^+(r s_z)|0\rangle \overset{\text{代上式}}{=} \sum_p \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(\frac{-ipr}{\hbar}\right)\langle r' s_z'|p\ s_z\rangle$

$$= \sum_p \frac{\exp(-ip(r-r')/\hbar)}{V}\delta_{s_z s_z'} = \delta(r-r')\delta_{s_z s_z'}$$

更进一步. $\psi^+(\ )$ 表明(粒子数表象) n 个粒子的概率振幅, 到 n+1 个粒子时的变化; (坐标表象) 新增一个 r 处粒子对波函数(多体)的改变; 注意场论中 $\psi^+(r, s_z)$ r 不代表位置算符, 而作为 ψ^+ 位置不同处的一种标记而存在。比如..

$\hat{a}_+|n\rangle = a|n+1\rangle$ 粒子数表象中. 若以粒子数为基矢元, 则

$|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ C_k \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ 第n处有概率幅 $C_1 C_2 C_3$

$\hat{a}_{+n} \overset{\text{if}}{=} \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ \sqrt{1} & 0 & & & \\ & \sqrt{2} & 0 & & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \\ & & & \sqrt{4} & 0 \end{pmatrix}$ (line n)

$\hat{a}_{+n}|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sqrt{3}C_k \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$ 第n+1处 $|n+1\rangle$

而 $\sqrt{3}$ 正为"转移概率"之类。

反变换：$\hat{a}_p^+ = \int d\vec{r}^3 \frac{\exp(ip\cdot r/\hbar)}{\sqrt{V}} \hat{\psi}^+(r.S_z)$

$\hat{a}_p^- = \int d\vec{r}^3 \frac{\exp(-ip\cdot r/\hbar)}{\sqrt{V}} \hat{\psi}^-(r.S_z)$.

比如：之前的动能算符：(粒子数表象) $\sum \psi_{\gamma_i}^*(r)\, \hat{a}_{\gamma_i}^+$

$\hat{T} = \sum_{\gamma_i \gamma_j} \int dr \cdot \psi_{\gamma_i}^*(r)\, \hat{T}_r\, \psi_{\gamma_j}(r)\, \hat{a}_{\gamma_i}^+ \hat{a}_{\gamma_j}$

$= \int dr\, \hat{\Psi}^+(r)\, \hat{T}_r\, \hat{\Psi}(r) \quad \hat{T}_r = (\nabla^2 \frac{\hbar^2}{2m})$

严格来说：$\hat{T} = \sum_{\gamma_i \gamma_j} \langle \psi_{\gamma_i} | \hat{T} | \psi_{\gamma_j} \rangle\, \hat{a}_{\gamma_i}^+ \hat{a}_{\gamma_j}$

Now：推论 r：$\hat{T}_{\text{All}}(r) = \sum_{\gamma_i \gamma_j} \langle \psi_{\gamma_i}(r) | \hat{T}(r) | \psi_{\gamma_j}(r) \rangle\, \hat{a}_{\gamma_i}^+ \hat{a}_{\gamma_j}$

推论 p：$\hat{T}_{\text{All}}(r) = \sum_{p.p'} \int dV \langle p|r\rangle\, \underset{\Downarrow}{\hat{T}(r)}\, \langle r|p'\rangle\, dr\, \hat{a}_p^+\, \hat{a}_{p'}^-$ ， $\frac{\nabla^2}{2m}\hbar^2$

$\Rightarrow \int dr \left(\sum_p \langle p|r\rangle \hat{a}_p^+\right) \hat{T}(r) \left(\sum_{p'} \langle r|p'\rangle \hat{a}_{p'}^-\right)$

$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r}^3\, \hat{\psi}^+(r, S_z)\, \nabla^2\, \hat{\psi}^-(r, S_z) \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r}^3\, \nabla \hat{\psi}^+(r.S_z) \cdot \nabla \hat{\psi}(r.S_z)$

比如：define：$\hat{a}^- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\lambda} + i\frac{p\lambda}{\hbar}\right)$

$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\lambda} - i\frac{p\lambda}{\hbar}\right)$

1-D oscillator：$\hat{H} = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

$= \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{1}{2})$

$H|n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle \quad |n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$

DATE . . NOTES

再议 Quantum Field Operator：

从分析力学 $q_i(t)$ 可用 (P_i, q_i) 代表粒子，多体体系下化为系综，对 $N\to\infty$ 下：$|(P_1,q_1)(P_2,q_2)\cdots\rangle$ ∞粒子组成体系，而 P 由于全同性与能量满足概率分布，如 Boltzmann 速度分布，就是从 $q_i(t)$ 变到了 $\rho(p,t)$ $\rho(x,t)$。粒子数∞下，$\rho(x,t)$ 表示多粒子体系下抽出单粒子的概率分布，由式 $e^{-\beta E_n}$ $E_n=T+E_p$ $T=0$ 而 E_p 即势能。由于势能不同，粒子不再均匀分布，而是有 $\rho(x,t)$ 分布，物理量往往可以表示为 $\bar{f}=\int f(x,t)\rho(x,t)(dxdp)$ 此即为从分析至统计的转变。

而经典至量子之变，即引入波函数 ψ $|\psi|^2 \to \rho$ 上文，满足：

$$\hat{H}\psi = i\hbar\psi_t$$

从量子至 Quantum field 转变，在于多体体系下，$(N\to\infty)$ 如上文，全同粒子本身已包含一概率分布如 $\psi^+(r_i)|0\rangle=|r\rangle$ 表示如 Bose-Einstein 分布下粒子本身具有一种分布，不同 $|r\rangle$ 处比率不同，再作用至哈密顿量上，即上文在势场下粒子分布的重排，示动力学过程。

从统计至量子，引入量子假设即分立的能量，of 上文 $dxdp=\hbar/2$，表明一次只能增减一份能量（粒子），即产生湮灭算符。所以我们说 Quantum field Operator 由于量子由升降算符表出。而升降算符数学形式中既有量子部分，又有统计概率部分。

$$\hat{H}\hat{\psi}^+(x,t)=i\hbar\,\hat{\psi}^+_t(x,t) \qquad \hat{H}: f(\hat{a}^+,\hat{a}^-)$$

连续谱中：
$$\hat{H}=\int d^3x\,\hat{\psi}^+(x)T(x)\hat{\psi}(x)+\frac{1}{2}\iint d^3x\,d^3x'\,\hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}^+(x')V(x,x')\hat{\psi}(x')\hat{\psi}(x)$$

$$\hat{\psi}^+(x)=\sum_{K(基)}\psi_K(x)\hat{a}_K^+ \qquad \hat{\psi}(x)=\sum_K\psi_K(x)\hat{a}_K$$

离散谱中：
$$\hat{H}=\sum_{rs}\hat{a}_r^+\langle r|T|s\rangle\hat{a}_s+\frac{1}{2}\sum_{tsru}\hat{a}_r^+\hat{a}_s^+\langle rs|V|tu\rangle\hat{a}_u\hat{a}_t$$

粒子数（前者）$\hat{N}=\int d^3x\,\hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}(x)$ (后面) $\Rightarrow$ 应

例子 for Chapter 1 : (~~Alexander Altland~~ Fetter)

Degenerate election Gas Griffith 中提过, Now:

Schodinger Equation: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\underbrace{\psi(t)}_{\text{many particles}}\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

写出 Hamiltonian:

Assumption: $V(x)$ inside the box $=0$ box: cubical (无关紧要)

利用箱归一化:

箱归一化: 若箱边缘 $\psi=0$ 边值, 破坏平移不变性

若箱边缘 $\psi_左=\psi_右$ 周期性, 在周期(一晶格)上保不变性

3-D free particle $\psi_k(r) = C_k \cdot \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) \to k_x x + k_y y + k_z z$

$\cancel{k_{x,y,z}} \in$

在 $\psi_左=\psi_右$ 中: k 以 $2\pi/L$ 代入满足边值, 归一积分

3-D free particle 箱归一化: $\psi_k(r) = L^{-3/2}\cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ or $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $k_x = 2\pi/L\cdot n_x$

part 1: 由动能与其它电子势能组成, 对~~每~~电子共

$$H_{el} = \sum_{i=1}^{N}\frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2}e^2\sum_{i,i\neq j}^{N}\frac{e^{-u|r_i-r_j|}}{|r_i-r_j|}$$ $\to$ convergence factor

为什么要引入 exponential convergence factor, 在 $L\to\infty$ 时 $u\to 0$

part 2. 阳背景势能

$$H_b = \frac{1}{2}e^2\iint d^3x\, d^3x'\,\frac{n(x)\,n(x')\,e^{-u|x-x'|}}{|x-x'|}$$

part 3. ~~每~~电子与阳背景势能

$$H_{el-b} = \sum_{i=1}^{N}\int d^3x\,\frac{n(x)\,e^{-u|x-r_j|}}{|x-r_j|}(-e^2)$$

为什么动电子不生磁场, 不用推迟势, 电磁场 Hamilton

DATE · · NOTES

解答：Jellium 对元素 I-IV 周期，外层导电电子几乎如自由电子，两势 $V_{el-lattice} + V_{el-el}$ Pauli + Columb 相抵消，粒子近似平滑势，称赝势，这就是自由电子处于阳背景的来源。Bloch 函数 $u_{kn} = 1$，可用平面波描述。

Now，model 中视背景均匀，则 $n(x) = N/V$

$$H_b = \frac{1}{2}e^2 \left(N/V\right)^2 \iint d^3x\, d^3x' \, e^{-\mu|x-x'|}/|x-x'| \quad 令\ x-x' = z$$

$$dx' = d(x-z) = dz$$

积出：$\frac{1}{2}e^2 (N/V)^2 \underbrace{\int d^3x}_{V} \underbrace{\int_{\Downarrow} d^3z}_{全空间\Leftrightarrow dV} \frac{e^{-\mu z}}{z} = \frac{1}{2}e^2 \frac{N^2}{V} \cdot \frac{4\pi}{\mu^2}$

H_{el-b} 同理：$-e^2 N^2/V \; 4\pi/\mu^2$ $\quad \therefore H_{All} = -\frac{1}{2}e^2 \frac{N^2}{V} \cdot \frac{4\pi}{\mu^2} + \hat{H}_{el}$

三者矛盾：

① 假设周期边值 V 有限，又在计算时对全空间积分，为了积出不为 ∞ 写入 $e^{-\mu z}$ 保护？

DATE . . NOTES

以二次量子化重写:

$$H_b = \frac{1}{2}e^2\frac{N^2}{V}\cdot\frac{4\pi}{\mu^2} \qquad H_{el\text{-}b} = -e^2\frac{N^2}{V}\cdot\frac{4\pi}{\mu^2}$$

$$H_{el} = \sum_{k\sigma} {}^{k^2}\!/_{2m}\, C^+_{k\sigma}C^-_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{kk'\sigma'\sigma} V_q \cdot C^+_{k+q\sigma}C^+_{k'-q\sigma'}C^-_{k'\sigma'}C^-_{k\sigma}$$

$\sum_{k\sigma' k\sigma}\langle k'\sigma'|\hat{p}|k\sigma\rangle C^+_{k'\sigma'}C_{k'\sigma}$ 当 $k'\neq k$ or $\sigma'\neq\sigma$. $\langle k'|\hat{p}|k\rangle = P_k\langle k'|k\rangle = 0$

故一项为: $\frac{k^2}{2m}\hat{C}^+_{k\sigma}\hat{C}^-_{k\sigma}$

二项: $V = \sum_{i\neq j}^{N}\frac{e^{-\mu|r_i-r_j|}}{|r_i-r_j|}\cdot\frac{1}{2}e^2 \quad \langle k\sigma k'\sigma'|V|k''\sigma'' k'''\sigma'''\rangle$

换到k表象: $\frac{1}{V}\int dr\cdot e^{-ik\cdot r}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2}\underbrace{\frac{e^{-\mu|r_i-r_j|}}{|r_i-r_j|}}\cdot\frac{1}{2}e^2$

换质心坐标: $r=\vec{x}-\vec{y} \quad R=\frac{\vec{x}+\vec{y}}{2} \qquad \overset{\shortparallel}{V(\vec{r})}$

$$e^{-ik\cdot r} = e^{-i(k+k''')\vec{x}-i(k'+k'')\vec{y}} \Rightarrow \langle k\sigma k'\sigma'|V|k''\sigma'' k'''\sigma'''\rangle$$

$$= \delta_{kk'k'k''}\int \overset{\shortparallel}{dy}\cdot V(\vec{r})\cdot e^{i(k'''+k''-k'-k)R}e^{i(k+k'-k''-k''')r}\, dr\,dR$$

$$\Rightarrow V_q = \frac{1}{V}\int dr\, V(r)\, e^{-iqr}\left\{\begin{array}{ll} k'''=k+q & k''=k_2 \\ k'=k_2-q & k''=k\end{array}\right.$$ 则: 积分≠0 要求

$$e^{i(k'''+k''-k'-k)R} = 1$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\sum_{kk'q\sigma'\sigma} V_q\, C^+_{(k+q)\sigma}C^+_{(k'-q)\sigma'}C^-_{k'\sigma'}C^-_{k\sigma}\cdot\frac{1}{2}$$

即: $\int d\vec{x}\,d\vec{y}\,\psi^+_\sigma(\vec{x})\psi^+_{\sigma'}(\vec{y})V(\vec{x}-\vec{y})\psi_\sigma(\vec{x})\psi_{\sigma'}(\vec{y})$

$= \frac{1}{2}\sum V_q\, C$

$\left(\sum_k \langle k|\vec{x}\rangle \hat{a}^+_k\right)$ $\quad$ $\int V(r)$

e^{ikx}

问题: 欠募

$$L_i = \sum_{k,k'\sigma} u_{k'-k}\hat{C}^+_{k'\sigma}\hat{C}^-_{k\sigma}$$

Now $H_{el} = \sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}C^\dagger_{k\sigma}C_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{kk'q\sigma\sigma'} V_q\, C^\dagger_{(k+q)\sigma} C^\dagger_{(k'-q)\sigma'} C_{k'\sigma'} C_{k\sigma}$

其中: $V_q = \frac{1}{2}e^2\frac{1}{V}\int d\vec{r}\cdot e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\cdot\frac{e^{-\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}$

对称性

$= 2\pi e^2\cdot\frac{1}{V}\int_{R^+} dr\cdot r^2 e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\cdot\frac{e^{-\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}\sin\theta\, d\theta \qquad |\vec{r}| = r$

$= \frac{\pi e^2}{V}\int dr\, e^{-\mu r}/r\cdot r^2\int_{-1}^{1}\underbrace{d\theta\sin\theta}_{-d\cos\theta}\, e^{-iqr\cos\theta}$

$= \frac{2\pi e^2}{iqV}\int_{R^+} dr\left(e^{(-\mu+iq)r} - e^{(-\mu-iq)r}\right) = \frac{2\pi e^2}{iqV}\left(\frac{e^{(-\mu+iq)\infty}-1}{-\mu+iq} + \frac{e^{(-\mu-iq)\infty}-1}{-\mu-iq}\right)$

= 注意 $\mu\to 0$ 但仍有限 $\Rightarrow$ 令 $\mu=\mu_0$ 以 st $e^{iq\infty}=0$ 这样

$= \frac{1}{V}\cdot\frac{4\pi e^2}{\mu^2+q^2}$

比如: $q=0$ 时. $k''+k''' = k'+k$ 交换能量相同. 其实 V_{el} 也可直接积出. 此写可看出 V_{el} 中 $q=0$ 部分作用

$\langle\alpha|\hat{T}|\beta\rangle = \begin{pmatrix}\ddots\end{pmatrix} \quad \langle kk'|V|k''k'''\rangle = \begin{pmatrix}\ddots\end{pmatrix} \Rightarrow q=0$ 无切力, 直接电子间的作用交换能量.

$V_q(q=0) \Rightarrow \frac{4\pi e^2}{V\mu^2}\sum C^\dagger_{k\sigma}C^\dagger_{k'\sigma'}C_{k'\sigma'}C_{k\sigma} = -\frac{4\pi e^2}{2V\mu^2}\left[\hat{N}-\hat{N}^2\right] \quad \hat{N}|\phi\rangle = N|\phi\rangle \ldots$

$\Leftarrow \underbrace{\left(\sum C^\dagger_{k\sigma}C_{k\sigma}\right)}_{N}\underbrace{\left(C^\dagger_{k'\sigma'}C_{k'\sigma'}\right)}_{N}$ − ($k'=k$ 情况): N 不可交换 $C_{k\sigma}$ $k\sigma$

N 甚大, 热力学极限下..

$H_{el-b} + H_b + H(V_q\, q=0) = 0$

体现电中性

∴ 用微扰论一阶: $E = E^0 + \langle F|\hat{H}_{int}|F\rangle$ 假定相互作用 H_{el-b} 为小量，则 H_0: $E^0 = \langle 基态|\sum\frac{k^2}{2m}C_k^+C_k^-|基态\rangle$

费米子基态应为: $|1.1\cdots 11|0.0\cdots 0\rangle$

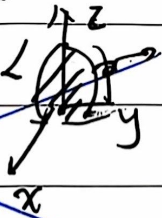
费米面 $k_F = (3\pi^2 N)^{1/3}$

∴ $E^0 = C_k^-|基态\rangle$ 对那些"0"即 $k<k_F$ 的k来说，此项为0.

对那些"1"即 $k>k_F$ 的k来说，此项为: 1个费米子

$\Rightarrow \theta(x) = \begin{cases}1 & x>0\\ 0 & x<0\end{cases}$ 即: $E^0 = \sum_{ks}\frac{k^2}{2m}\theta(k_F-k)$ k甚多.

$= \int_0^{k_F}\frac{k^2}{2m}\cancel{\rho(k)}dk$ ~~$\rho(k)$ 态密度~~



Wrong!

~~k^2 球多积分多批~~

~~$k^3\cdot 4\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$~~

$= 2\frac{4\pi V}{2m(2\pi)^3}\int_0^{k_F}k^4dk = \frac{3}{5}NE_F \quad E_F = \frac{k_F^2}{2m}.$

一阶修正: $\frac{1}{2V}\sum_{kk'q\sigma\sigma'}\frac{4\pi e^2}{q^2}\langle F|C^+_{(k+q)\sigma}C^+_{(k'-q)\sigma'}C_{k'\sigma'}C_{k\sigma}|F\rangle$

Wick 定理: (不议) 为满足: $\hat{A}_-|\varphi\rangle = 0$，可定义

$\hat{A}_- = [\hat{A} - \langle\varphi|A|\varphi\rangle](\hat{1} - |\varphi\rangle\langle\varphi|)$

$\langle\varphi|i^+j^+k^-l^-|\varphi\rangle = \langle\varphi|i^+l^-|\varphi\rangle\langle j^+k^-\rangle - \langle i^+k^-\rangle\langle j^+l^-\rangle$

注意 Wick 定理为解决交换关系 $N[A_1\cdots A_L] = (-1)^P A_{1'}\cdots A_{L'}$ 的正负. 费米子反对易此中。只有 $i=l$，等此值才非零

$= \langle F|C^+_{(k+q)}C^-_k|F\rangle\langle F|C^+_{k'-q}C_{k'}|F\rangle - \langle F|C^+_{k+q}C_{k'}|F\rangle\langle C_{k'-q}C_k$

$= \delta_{q=0}\,\theta(k_F-|\vec{k}|)\,\theta(k_F-|\vec{k}'|) - \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{k',k+q}\,\theta(k_F-|\vec{k}|)\,\theta(k_F-|\vec{k}'|)$

DATE · · NOTES

原式: $\langle F|H_{int}|F\rangle$ 不讨论 $q=0$ 之前去掉. 余下 $K'=K+q$

$$= -\frac{1}{2V}\sum_{K.q\neq 0\,\sigma}\frac{4\pi e^2}{q^2}\theta(k_F-|\vec{K}|)\,\theta(k_F-\underbrace{|K+q|}_{\cos\theta\ \text{积}})$$

$$= -\frac{1}{2V}\int\frac{1}{q^2}dq\int_0^{k_F+q}d\vec{k}\cdot\frac{4\pi V}{(8\pi)^3}k^3\cdot 4\pi e^2$$

总之可算

(Part 1)

二. 平均场近似

$$\hat{A}\hat{B} = (\langle A\rangle+\Delta A)(B+\Delta B) \quad \text{认为 } \Delta A\Delta B \text{ 小量}$$

$$= \hat{A}\langle\hat{B}\rangle+\hat{B}\langle\hat{A}\rangle-\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle$$

$$\hat{A} = -c^+_{(k+q)\sigma}C_{k'\sigma'} \qquad \hat{B} = C^+_{(k'-q)\sigma'}C_{k\sigma}$$

$$C^+_{(k+q)\sigma}C^+_{(k'-q)\sigma'}C_{k'\sigma'}C_{k\sigma} = -\delta_{(k+q).k'}\delta_{\sigma'\sigma}\left[\langle C^+_{k'\sigma'}C_{k'\sigma}\rangle C^+_{k\sigma}C_{k\sigma}\right.$$
$$\left.+\ C^+_{k'\sigma}C_{k'\sigma}\langle C^+_{k\sigma}C_{k\sigma}\rangle\right] \quad \text{系 } k'=(k+q) \text{ 才非零}$$

此两部分相同. 代入 $q=k'-k$

$$\hat{H}_{int} = \sum_{k'.k.\sigma}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\cdot\left(-\frac{1}{V}\right)\cdot\langle C^+_{k'\sigma}C_{k'\sigma}\rangle\hat{C}^+_{k\sigma}\hat{C}_{k\sigma}$$

$$\therefore \hat{H}_{el} = \left[\frac{k^2}{2m}-\frac{1}{V}\sum_{k'}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\cancel{\frac{1}{V}}\langle C^+_{k'\sigma}C_{k'\sigma}\rangle\right]C^+_{k\sigma}C_{k\sigma}$$

相当于单电子能量~~多出~~少了 $\varepsilon(k)$.

$$\varepsilon(k) = \frac{-1}{V}\sum_{k'}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\langle C^+_{k'\sigma}C_{k'\sigma}\rangle = \frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3}\int d^3k'\frac{1}{|k'-k|^2}\theta(k_F-|\vec{k}|)$$

$$= 2\pi\cdot\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3}\int_{-1}^{1}d\cos\theta\int_0^{k_F}k'^2dk'\cdot\frac{1}{k^2+k'^2-2k'k\cos\theta}$$

$$= \frac{e^2k_F}{\pi}\left[1+\frac{k_F^2-k^2}{2k_Fk}\ln\frac{k_F+k}{k-k_F}\right] \quad \text{会导致相速度 } \left.\frac{\partial\varepsilon(k)}{\partial k}\right|_{k=k_F} \text{ 发散}$$

于费米面上. 近似不准

DATE . . NOTES

Green Function:

In electrodynamics we solve:

$\nabla^2\phi(x) = -\rho(x)/\varepsilon_0$ by: solving.

$\nabla^2 G(x-y) = \delta(x-y)$ $\phi(x) = \int dy\, G(x-y) f(y)$

~~Exercises for Chapter 1~~.

Examples: electrodynamics.

电流也是流，也满足 $\rho_t + \nabla\cdot\vec{j} = 0$ 对应的 ρ，$(q\cdot\rho)$，$(q\cdot\vec{j})$
若 ρ 代表概率密度，$(q\cdot\rho)$ 即电荷密度，$\vec{j}$ 代表概率流密度，$(q\vec{j})$ 即电流密度，而因此 current 有形式：

$$\hat{J}(x) = \frac{1}{2mi}\left[\hat{\psi}^{+}(x)\nabla\hat{\psi}(x) - \hat{\psi}(x)\nabla\hat{\psi}^{+}(x)\right]$$

外场为电磁场时，无非 $\hat{u}(x)$ 形式不变内容变，$J(x)$ 形式不变，而：

$$\hat{H} = \int dv\, \hat{\psi}^{+}(x)\left[\frac{(-i\nabla - qA)^2}{2m} + u(x) - q\phi(x)\right]\hat{\psi}(x) + \frac{1}{2}\int dV_x dV_y\, \hat{\psi}^{+}(x)\hat{\psi}^{+}(y)V(x-y)\hat{\psi}(y)\hat{\psi}(x)$$

磁场耦合 $(-i\nabla - qA)^2 + \nabla^2 + u(x)$ 相当于改变电流之外场，之前 H 单粒子部分：$-i\nabla^2 + u(x)$ Now：$(-i\nabla^2 + qA)^2$ 在 columb 规范下为：

$$H' = \left(-\nabla^2/2m + u(x) - i\phi(x) + \frac{q^2A^2}{2m} + qiA\nabla/m\right)$$ 因此 $\rho_t = \frac{\partial\psi^{+}(t)}{\partial t}\psi(t) + \frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\psi^{+}(t)$

$$i\hbar\hat{\psi}_t = \hat{H}\hat{\psi}(t) = \left(-\nabla^2/2m + qiA\nabla/m\right)\psi(t) + \left(u + i\phi + \frac{q^2A^2}{2m}\right)\psi(t)$$

多了一项：$\left[\frac{qiA\nabla}{m}\psi^{+}(t)\right]\psi(t) + \left[\frac{qiA\nabla}{m}\psi(t)\right]\psi^{+}(t)$ 可消去

$\Rightarrow \rho_t + \nabla\cdot\vec{j} = 0$ $\nabla\psi^{+}(t)\psi(t) + \psi^{+}(t)\nabla\psi(t) = (\nabla\cdot\psi^{+}(t)\psi(t)) + \nabla\cdot\vec{j} = 0$.

$\therefore$ Extra: $\psi^{+}(t)\psi(t)$ 项. Now.

$$\hat{J}(x) = \underbrace{\frac{q}{2mi}\left[\hat{\psi}^{+}(x)\nabla\hat{\psi}(x) - \hat{\psi}(x)\nabla\hat{\psi}^{+}(x)\right]}_{\text{顺磁流}} + \underbrace{\frac{q^2A}{m}\hat{\psi}^{+}(x)\hat{\psi}(x)}_{\text{抗磁流}} = \vec{J}_e + \vec{J}_A$$

进一步可用 Fourier Transform 用 k 空间产生湮灭对来表述.

$$j^A(r) = \frac{qA}{m}\hat{\psi}^+(r)\hat{\psi}(r) = \frac{qA}{m}\sum_k \psi_k^*(r) a_k^+ \sum_{k'} \psi_{k'}(r) a_{k'} \left(\frac{1}{\sqrt{V}}\frac{1}{\sqrt{V}}\right)$$ 箱归一化

$$\psi^+ = \sum_\nu \langle r|\nu\rangle^* a_\nu^+ \qquad \psi = \sum_\nu \langle r|\nu\rangle a_\nu$$

$\Rightarrow \langle r|k\rangle = e^{ik\cdot r}$ 由之

$$= \frac{qA}{mV}\sum_k e^{-ik\cdot r} a_k^+ \sum_{k'} e^{ik'\cdot r} a_{k'} = \frac{qA}{mV}\sum_{k\cdot k'} e^{i(k'-k)\cdot r}\hat{a}_k^+ \hat{a}_{k'}$$

令 $k'-k = s$

$$= \sum_{k\cdot s} e^{is\cdot r}\hat{a}_k^+ \hat{a}_{s+k}$$

$$\vec{J}^e(r) = \frac{1}{2mi V}\left[\sum_k e^{-ik\cdot r}\hat{a}_k^+\right]\left[\nabla \sum_{k'} e^{ik'\cdot r}\hat{a}_{k'}\right] - \left[\nabla \sum_k e^{-ik\cdot r}\hat{a}_k^+\right]\sum_{k'} e^{ik'\cdot r} a_{k'}$$

$$= \frac{1}{2miV} \qquad i\sum_{k'} k' e^{ik'\cdot r} a_{k'} \qquad (-i)\sum_k k e^{-ik\cdot r}\hat{a}_k^+$$

令 $k'-k = s$

$$= \frac{1}{2mV}\sum_{k\cdot s}(k+s)\, e^{i(s-k)\cdot r}\hat{a}_k^+ \hat{a}_s$$

Statistical mechanics:

① 混合系统. 密度算符写出物理量统计平均.

$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = Tr(\rho A)$ 纯态. $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

$= \sum_i P_i \langle\psi_i|A|\psi_i\rangle = Tr(\rho A)$ 混合态 $\rho = \sum P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

② 归一化密度算符写成配分函数形式:

相流也是流. 分布概率密度统计中为单位体积在 (a.b.c) 物理变量下微观态数. 密度算符就是概率密度.

	微正(孤立)	正	巨正(开放)
ρ:	$\frac{1}{\Omega}$	$\frac{1}{Z}e^{-\beta E_s}$	$\frac{1}{\Xi}e^{-\alpha N-\beta E_s}$.
配分函数	Ω	$Z = \sum_s e^{-\beta s}$	$\Xi = \sum_{N,s} e^{-\alpha N-\beta E_s}$.

比如正则系综：令 $\rho' = e^{-\beta H}$ $H|\nu\rangle = E_s|\nu\rangle$.

$H=\sum_\nu E_\nu |\nu\rangle\langle\nu|$ ① $e^{-\beta H} = \sum_\nu |\nu\rangle e^{-\beta E_s}\langle\nu| = \rho$，故：

$\boxed{\text{Number}}$ ② $Z = \sum_s e^{-\beta E_s} = \sum_\nu \langle\nu|\rho|\nu\rangle = Tr(\rho)$

$\Rightarrow \langle A\rangle = Tr(\rho A) = Tr(\rho' \cdot \frac{1}{Z} \cdot A) = \frac{1}{Z} Tr(\rho A)$

~~若求一物理量，先测密度矩阵，再~~：$\boxed{\langle A\rangle = \frac{Tr[\rho A]}{Tr[\rho]}}$

Exercises: Chapter 1.

① 证明刚球势 $V(\vec{x}-\vec{y}) = \delta(\vec{x}-\vec{y})\cdot\lambda$ F系数 $V_q = \frac{\lambda}{V}$

$V_q = \frac{1}{V}\int dv\, V(r) e^{-iqr} = \frac{1}{V}\int dv\, \delta(r) e^{-iqr}\lambda = \frac{e^{-iq0}\cdot\lambda}{V} = \frac{\lambda}{V}$

② $\hat{H} = \sum_{k\delta} \frac{k^2}{2m} C^+_{k\delta} C^-_{k\delta} + \frac{\lambda}{2V}\sum_{kk'q\delta'\delta} C^+_{k+q,\delta} C^+_{k'-q,\delta'} C_{k'\delta'} C_{k\delta}$

求能量一阶修正.

$\langle F| \frac{\lambda}{2V} C^+_{k+q,\delta} C^+_{k'-q,\delta'} C_{k'\delta'} C_{k\delta} |F\rangle = \lambda V (\frac{4\pi}{3})^2 (\frac{k_F}{2\pi})^6$