1 序章

凝聚态物理学

凝聚态物理学的定义：从微观角度出发，研究相互作用多粒子系统组成的凝聚态物质的结构和动力学过程，及其与宏观物理过程之间关系的一门科学。

凝聚态物理的哲学是呈展论 (emergent)，其与高能物理和场论研究所秉持的还原论 (reductionism) 截然不同。

凝聚态物理学之父

Anderson是凝聚态物理学之父。

涉及无序效应的一系列现象：无序驱动的Anderson局域化，（gang of four的）局域化的标度理论，自旋玻璃理论；

涉及磁性杂质问题的Anderson杂质模型和Kondo杂质问题的Poor man's标度理论；

高温超导和量子自旋液体的共振价键理论；

局域磁性的超交换机制和反铁磁自旋波理论；

超导杂质问题的Anderson定理，超流He-3A相配对理论，Anderson-Higgs机制。

凝聚态理论

凝聚态理论是研究凝聚态物质时所发展的理论和方法，其基本观念包括：

对称性破缺 (Symmetry Breaking)：物质的相与对称性相联系，相变伴随对称性的变化。

准粒子 (Quasi-particle)：系统的低能激发可看成一些弱相互作用准粒子的集合。

拓扑序 (Topological Order)：物态在参数空间可拥有非平凡的拓扑结构。

习题1.1

Q1：对于还原论和呈展论各列举一个例子进行说明。

还原论：粒子物理研究。

呈展论："more is different"

Q2：解释什么是能带理论，并用其解释金属与绝缘体的区别。

在绝热近似、单电子近似、周期性势场近似下，电子的能级呈带状，每条能带内的能级准连续。

金属：价带没填满或价带与导带重叠

绝缘体：价带完全填满，与导带之间有大能隙

Q3：解释什么是费米面，并画出一维费米气体的费米面。

在绝对零度时，电子按照能量从低到高填充。电子在动量空间所占据的最高能量（费米能级 E_F）所构成的几何曲面就叫作费米面。$\left\{\vec{k}|E\left(\vec{k}\right)=E_F\right\}$

一维费米子气体的费米面是两个点。

2 二次量子化

Qs

$\delta(x)$傅里叶变换

$$\int \delta(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x = 1, \quad \delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int 1\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{1}$$

无相互作用电子气基态能量

考虑 N 个电子，则基态是费米球内全填满的态。

$$E_{\mathrm{GS}} = \sum_{|\boldsymbol{k}|\leqslant k_F,\sigma}\frac{k^2}{2m} = \sum_{\sigma}\int_{|\boldsymbol{k}|\leqslant k_F}\frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d/V}\frac{k^2}{2m} = 2\frac{V}{(2\pi)^d 2m}\int_{|\boldsymbol{k}|\leqslant k_F}\mathrm{d}^d k k^2 \tag{2}$$

三维情况下 $d=3$，粒子数可由下式确定：

$$N = \sum_{\sigma}\int_{|\boldsymbol{k}\leqslant k_F|}\frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3/V} = \frac{V}{3\pi^2}k_F^3 \tag{3}$$

基态能量：

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{GS}} &= 2\frac{V}{(2\pi)^3 2m}\int_{|\boldsymbol{k}|\leqslant k_F}\mathrm{d}^3 k k^2 = 2\frac{V}{(2\pi)^3 2m}\int_{k=0}^{k=k_F} 4\pi k^2\cdot k^2\mathrm{d}k \\ &= 2\frac{V}{(2\pi)^3 2m}\cdot 4\pi\frac{k_F^5}{5} = \frac{V}{10\pi^2 m}k_F^5 = \frac{3}{5}N\varepsilon_F \end{aligned} \tag{4}$$

无相互作用自由电子气体基态能量：

$$\begin{aligned} E_g^0 &= \left\langle F\left|\sum_{k,\sigma}\frac{k^2}{2m}c_{k\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}\right|F\right\rangle = \sum_{k,\sigma}\frac{k^2}{2m}n_{k\sigma} = \sum_{k,\sigma}\frac{k^2}{2m}\theta(k_F-k) \\ &= \sum_{\sigma}\int\frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3/V}\frac{k^2}{2m}\theta(k_F-k) = \sum_{\sigma}\int_{k=0}^{k=k_F}\frac{4\pi k^2\mathrm{d}k}{(2\pi)^3/V}\frac{k^2}{2m} \\ &= \frac{V}{2m\pi^2}\frac{k_F^5}{5} \end{aligned} \tag{5}$$

一次量子化与二次量子化

在经典力学中，单粒子哈密顿量是正则坐标和正则动量的函数

$$H = H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x), \tag{6}$$

体系的动力学由如下的哈密顿方程给出：

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \tag{7}$$

一次量子化形式把坐标和动量换成算符 $x\to\hat{x}, p\to\hat{p}$，并赋予正则对易关系

$$[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar \tag{8}$$

相应哈密顿量替换成哈密顿量算符

$$H \to \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{9}$$

粒子的运动状态由Hilbert空间中的态矢 $|\psi(t)\rangle$ 描述，体系的动力学由薛定谔方程给出：

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \tag{10}$$

在坐标表象下即

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \left\langle x \middle| \hat{H} \middle| \psi(t) \right\rangle \tag{11}$$

在二次量子化形式中，我们把波函数替换成场算符

$$\psi \to \hat{\psi}, \quad \psi^* \to \hat{\psi}^\dagger \tag{12}$$

并赋予对易关系

$$\left[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)\right]_\pm = \delta(x-y) \tag{13}$$

$+$ 号代表反对易关系，对应费米子体系；$-$ 号代表对易关系，对应玻色子体系。

一次量子化形式中的多体波函数

我们知道，$|\boldsymbol{r}_1\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\boldsymbol{r}_N\rangle_N$ 表示 1 号粒子处于 $\boldsymbol{r}_1, \cdots, N$ 号粒子处于 $\boldsymbol{r}_N$ 的态。然而全同粒子不可区分，因此我们需要一个不依赖编号的态。

可以构造对称化且归一的态：

$$|\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N\rangle_S \equiv \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} |\boldsymbol{r}_{\sigma_1}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\boldsymbol{r}_{\sigma_N}\rangle_N \tag{14}$$

也可以构造反对称化的态：

$$|\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N\rangle_A \equiv \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \operatorname{sign}(p) |\boldsymbol{r}_{\sigma_1}\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\boldsymbol{r}_{\sigma_N}\rangle_N \tag{15}$$

N 全同粒子体系波函数

$$\psi\left(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N\right) \equiv \langle \boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N \mid \psi \rangle \tag{16}$$

假设有一组完备的单粒子波函数 $\{\phi_\alpha\}$，则可以构造出对称的全同粒子波函数（描述全同玻色子体系）：

$$\psi_S(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \phi_{\sigma_1}(\boldsymbol{r}_1) \cdots \phi_{\sigma_N} \phi(\boldsymbol{r}_N) \tag{17}$$

也可以构造出反对称的全同粒子波函数（描述全同费米子体系）：

$$\psi_A(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \operatorname{sign}(\sigma) \phi_{\sigma_1}(\boldsymbol{r}_1) \cdots \phi_{\sigma_N} \phi(\boldsymbol{r}_N) \tag{18}$$

对 N 全同费米子体系，可以用多体Slater行列式来构造反对称波函数：

$$\psi_A(\{\boldsymbol{r}_i\}) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \phi_1(\boldsymbol{r}_1) & \phi_1(\boldsymbol{r}_2) & \cdots & \phi_1(\boldsymbol{r}_N) \\ \phi_2(\boldsymbol{r}_1) & \phi_2(\boldsymbol{r}_2) & \cdots & \phi_2(\boldsymbol{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\boldsymbol{r}_1) & \phi_N(\boldsymbol{r}_2) & \cdots & \phi_N(\boldsymbol{r}_N) \end{pmatrix} \tag{19}$$

一次量子化的简单应用

HF近似

二次量子化形式

谐振子的升降算符表示

谐振子哈密顿量

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \tag{20}$$

利用坐标算符和动量算符可以构造升降算符。反过来，可以用升降算符表示坐标算符和动量算符

$$x = \sqrt{\frac{1}{2m\omega}} \left(a + a^\dagger\right), \quad p = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(-a + a^\dagger\right) \tag{21}$$

哈密顿量可用升降算符表达为

$$H = \omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) \tag{22}$$

其中 $\hat{n} \equiv a^\dagger a$ 是占据数算符。

占据数算符的本征解为：

$$\hat{n}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \cdots, \quad \left|n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n\left|0\right\rangle \tag{23}$$

$$a^\dagger\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle, \quad a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \tag{24}$$

$$\langle n \,|\, \hat{x} \,|\, n\rangle = \langle n \,|\, \hat{p} \,|\, n\rangle = 0 \tag{25}$$

占据数表示

玻色子

玻色子产生湮灭算符满足对易关系

$$\left[a_i, a_j^\dagger\right] = \delta_{ij}, \quad \left[a_i, a_j\right] = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger\right] = 0 \tag{26}$$

用 $\left|n_1, n_2, \cdots, n_N\right\rangle$ 表示有 n_j 个粒子占据 j 状态的态（由于是玻色子，n_j 可以大于 1）。

$$\left|n_1, \cdots, n_j, \cdots\right\rangle \equiv \prod_i \frac{\left(a_i^\dagger\right)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}\left|0\right\rangle \tag{27}$$

$$a_j^\dagger\left|n_1, \cdots, n_j, \cdots\right\rangle = \sqrt{n_j+1}\left|n_1, \cdots, n_j+1, \cdots\right\rangle \tag{28}$$

$$a_j\left|n_1, \cdots, n_j, \cdots\right\rangle = \sqrt{n_j}\left|n_1, \cdots, n_j-1, \cdots\right\rangle \tag{29}$$

$$\hat{n}_j\left|n_1, \cdots, n_j, \cdots\right\rangle = n_j\left|n_1, \cdots, n_j, \cdots\right\rangle \tag{30}$$

$$a_j\left|0, 0, \cdots, 0\right\rangle = 0 \tag{31}$$

费米子

费米子产生湮灭算符满足反对易关系

$$\left\{a_i, a_j^\dagger\right\} = \delta_{ij}, \quad \left\{a_i, a_j\right\} = \left\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\right\} = 0 \tag{32}$$

$$\left|n_1, \cdots, n_j, \cdots\right\rangle \equiv \prod_i \left(a_i^\dagger\right)^{n_i}\left|0\right\rangle \equiv \left(a_1\right)^{n_1}\cdots\left(a_j\right)^{n_j}\cdots\left|0\right\rangle, \quad n_i \in \{0, 1\} \tag{33}$$

$$a_j^\dagger \left| n_1, \cdots, n_j, \cdots \right\rangle = (-1)^\nu \sqrt{1-n_j} \left| n_1, \cdots, n_j+1, \cdots \right\rangle, \quad \nu \equiv \sum_{k=1}^{j-1} n_k \tag{34}$$

$$a_j \left| n_1, \cdots, n_j, \cdots \right\rangle = (-1)^\nu \sqrt{n_j} \left| n_1, \cdots, n_j-1, \cdots \right\rangle \tag{35}$$

生灭算符的基矢变换

场算符

多体哈密顿量的二次量子化形式

单体算符 $\mathcal{O} = \sum_j o_j$ 的二次量子化形式：

$$\mathcal{O} = \sum_{\alpha,\beta} \langle \alpha \,|\, o \,|\, \beta \rangle \, a_\alpha^\dagger a_\beta \tag{36}$$

其中 $\{|\alpha\rangle\}, \{|\beta\rangle\}$ 单粒子完备基。

两体算符 $V = \sum_{j \neq m} v_{jm}$ 的二次量子化形式：

$$V = \sum_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle \alpha\beta \,|\, v \,|\, \delta\gamma \rangle \, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\lambda a_\delta \tag{37}$$

其中 $|\delta\gamma\rangle \equiv |\delta\rangle \otimes |\gamma\rangle$

考虑一个一般的包含单体和两体相互作用的多粒子习题哈密顿量

$$H = \sum_j \left[\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + U(\hat{x}_j) \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq m} V(\hat{x}_j, \hat{x}_m) \tag{38}$$

现在想求在坐标表象下，该哈密顿量的二次量子化形式。

先看单体动能项的二次量子化形式，利用动量算符在坐标表象下对态的作用

$$\langle x \,|\, \hat{p} \,|\, \Psi \rangle = -\mathrm{i}\hbar \nabla_x \left| \Psi \right\rangle = -\mathrm{i} \nabla_x \left| \Psi \right\rangle \tag{39}$$

以及delta函数的高阶导数的筛选性质

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(x-x') f(x) \mathrm{d}x = (-1)^n f^{(n)}(x') \tag{40}$$

可得

$$\begin{aligned}
\sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2m} &= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \left\langle x \,\middle|\, \frac{\hat{p}^2}{2m} \,\middle|\, y \right\rangle \psi^\dagger(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \left(\frac{-\nabla_x^2}{2m} \langle x \,|\, y \rangle \right) \psi^\dagger(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \left(\frac{-\nabla_x^2}{2m} \delta(x-y) \right) \psi^\dagger(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \left(\frac{-\nabla_x^2}{2m} \delta(y-x) \right) \psi^\dagger(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \left(\frac{-\nabla_y^2}{2m} \delta(y-x) \right) \psi^\dagger(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \psi^\dagger(x) \int \mathrm{d}^d y \left(\frac{-\nabla_y^2}{2m} \delta(y-x) \right) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \psi^\dagger(x) \frac{-\nabla_x^2}{2m} \psi(x)
\end{aligned} \tag{41}$$

再看单体势能项

$$
\begin{aligned}
\sum_j U\left(\hat{x}_j\right) &= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \left\langle x \left| U\left(\hat{x}\right) \right| y \right\rangle \psi^{\dagger}(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y U\left(y\right) \left\langle x \mid y \right\rangle \psi^{\dagger}(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y U\left(y\right) \delta(x-y) \psi^{\dagger}(x) \psi(y) \\
&= \int \mathrm{d}^d x U\left(x\right) \psi^{\dagger}(x) \psi(x) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \psi^{\dagger}(x) U\left(x\right) \psi(x)
\end{aligned} \tag{42}
$$

再看两体势能项

$$
\begin{aligned}
\sum_{j \neq m} V\left(\hat{x}_j, \hat{x}_m\right) &= \int \mathrm{d}^d x \mathrm{d}^d y \mathrm{d}^d x' \mathrm{d}^d y' \left\langle x, y \left| V\left(\hat{x}, \hat{y}\right) \right| x', y' \right\rangle \psi^{\dagger}(x) \psi^{\dagger}(y) \psi(y') \psi(x') \\
&= \int \mathrm{d}^d x \mathrm{d}^d y \mathrm{d}^d x' \mathrm{d}^d y' V\left(\hat{x}, \hat{y}\right) \left\langle x, y \mid x', y' \right\rangle \psi^{\dagger}(x) \psi^{\dagger}(y) \psi(y') \psi(x') \\
&= \int \mathrm{d}^d x \mathrm{d}^d y \mathrm{d}^d x' \mathrm{d}^d y' V\left(x', y'\right) \delta(x-x') \delta(y-y') \psi^{\dagger}(x) \psi^{\dagger}(y) \psi(y') \psi(x') \\
&= \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \psi^{\dagger}(x) \psi^{\dagger}(y) V(x,y) \psi(y) \psi(x)
\end{aligned} \tag{43}
$$

综上，坐标表象二次量子化哈密顿量为

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_j \left[\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + U\left(\hat{x}_j\right)\right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq m} V\left(\hat{x}_j, \hat{x}_m\right) \\
&= \int \mathrm{d}^d x \psi^{\dagger}(x) \left[\frac{-\nabla_x^2}{2m} + U(x)\right] \psi(x) + \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \psi^{\dagger}(x) \psi^{\dagger}(y) V(x,y) \psi(y) \psi(x)
\end{aligned} \tag{44}
$$

如果考虑电子系统，还要考虑自旋，此时

$$
H = \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} \int \mathrm{d}^d x \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \left[\frac{-\nabla_x^2}{2m} + U(x)\right] \psi_{\sigma}(x) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma' \in \{\uparrow, \downarrow\}} \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(y) V(x,y) \psi_{\sigma'}(y) \psi_{\sigma}(x) \tag{45}
$$

这里场算符满足如下的反对易关系

$$
\left\{\psi_{\sigma}(x), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(y)\right\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(x-y), \quad \left\{\psi_{\sigma}(x), \psi_{\sigma'}(y)\right\} = \left\{\psi_{\sigma}^{\dagger}(x), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(y)\right\} = 0 \tag{46}
$$

粒子数密度算符、电流密度算符

平面波展开下的二次量子化哈密顿量

$$
\psi_{\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} c_{k\sigma}, \quad \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} c_{k\sigma}^{\dagger} \tag{47}
$$

$$
H = \sum_{\sigma} \int \mathrm{d}^d x \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \left[\frac{-\nabla_x^2}{2m} + U(x)\right] \psi_{\sigma}(x) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(y) V(x,y) \psi_{\sigma'}(y) \psi_{\sigma}(x) \tag{48}
$$

动能部分

$$
\sum_{\sigma} \int \mathrm{d}^d x \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \frac{-\nabla_x^2}{2m} \psi_{\sigma}(x) = \sum_{k,\sigma} \frac{k^2}{2m} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \tag{49}
$$

外势项

$$
\sum_{\sigma} \int \mathrm{d}^d x \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) U(x) \psi_{\sigma}(x) = \sum_{k,k',\sigma} \tilde{U}_{k-k'} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k'\sigma} \tag{50}
$$

其中定义了外势的傅里叶变换

$$\tilde{U}_q \equiv \frac{1}{V}\int \mathrm{d}^d x U(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k-k')x} \tag{51}$$

相互作用势能项，考虑势能只依赖于坐标差

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}\int \mathrm{d}^d x \int \mathrm{d}^d y \psi_\sigma^\dagger(x)\psi_{\sigma'}^\dagger(y)V(x,y)\psi_{\sigma'}(y)\psi_\sigma(x) \\ =&\frac{1}{2}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\tilde{V}_q c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma} \end{aligned} \tag{52}$$

其中

$$\tilde{V}_q \equiv \frac{1}{V}\int \mathrm{d}^d r V(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr} \tag{53}$$

平面波基矢下哈密顿量：

$$H = \sum_{k,\sigma}\frac{k^2}{2m}c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,k',\sigma}\tilde{U}_{k-k'}c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\tilde{V}_q c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma} \tag{54}$$

Coulomb电子气

$$H = H_\mathrm{e} + H_\mathrm{b} + H_\mathrm{eb}$$

$$H_\mathrm{e} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}e^2\sum_{i=1}^N\sum_{j=1,j\neq i}^N \frac{\mathrm{e}^{-\mu|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}$$

$$H_\mathrm{b} = \frac{1}{2}e^2\int \mathrm{d}^3\vec{x}\int \mathrm{d}^3\vec{x}'\frac{n(\vec{x})n(\vec{x}')\mathrm{e}^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

$$H_\mathrm{eb} = -e^2\sum_{i=1}^N\int \mathrm{d}^3\vec{x}\frac{n(\vec{x})\mathrm{e}^{-\mu|\vec{x}-\vec{r}_i|}}{|\vec{x}-\vec{r}_i|}$$

$$n(\vec{x}) = \frac{N}{V}$$

$$H_\mathrm{b} = 4\pi e^2\frac{N^2}{2V\mu^2}$$

$$H_\mathrm{eb} = -4\pi e^2\frac{N^2}{V\mu^2}$$

$$H_\mathrm{e} = \sum_{k,\sigma}\frac{k^2}{2m}c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\tilde{V}_q c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma} \tag{55}$$

$$\tilde{V}_q \equiv \frac{e^2}{V}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|} = \frac{1}{V}\frac{4\pi e^2}{\mu^2+q^2} \tag{56}$$

热力学极限下，H_e 中 $q=0$ 项与另外两项抵消，再取回 $\mu=0$，因此

$$\boxed{H = \sum_{k,\sigma}\frac{k^2}{2m}c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{1}{2V}\sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi e^2}{q^2}c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma}} \tag{57}$$

微扰理论计算

当没有相互作用时，体系基态是费米球分布。

$$|F\rangle = \prod_{k<k_F}c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger|0\rangle = \prod_{k\sigma}|n_{k\sigma}\rangle\,, \quad n_{k\sigma} = \theta(k_F-k) \tag{58}$$

其中 $n_{k\sigma}$ 是动量为 k 且自旋为 σ 的电子的占据数。可以看出，无相互作用自由电子气体的占据数不依赖于自旋。

费米动量由基态时的总电子数决定

$$
\begin{aligned}
N &= \left\langle F \left| \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right| F \right\rangle = \sum_{k,\sigma} n_{k\sigma} = \sum_{k,\sigma} \theta(k_F - k) \\
&= \sum_{\sigma} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3 / V} \theta(k_F - k) = \sum_{\sigma} \int_{k=0}^{k=k_F} \frac{4\pi k^2 \mathrm{d}k}{(2\pi)^3 / V} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3
\end{aligned} \tag{59}
$$

无相互作用自由电子气体基态能量:

$$
\begin{aligned}
E_g^0 &= \left\langle F \left| \sum_{k,\sigma} \frac{k^2}{2m} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right| F \right\rangle = \sum_{k,\sigma} \frac{k^2}{2m} n_{k\sigma} = \sum_{k,\sigma} \frac{k^2}{2m} \theta(k_F - k) \\
&= \sum_{\sigma} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3 / V} \frac{k^2}{2m} \theta(k_F - k) = \sum_{\sigma} \int_{k=0}^{k=k_F} \frac{4\pi k^2 \mathrm{d}k}{(2\pi)^3 / V} \frac{k^2}{2m} \\
&= \frac{V}{2m\pi^2} \frac{k_F^5}{5}
\end{aligned} \tag{60}
$$

加微扰后，体系基态能量精确到一阶修正:

$$
E_g = E_g^0 + \langle F \mid H_{\mathrm{int}} \mid F \rangle \tag{61}
$$

相互作用哈密顿量:

$$
H_{\mathrm{int}} = \frac{1}{2V} \sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger} c_{k',\sigma'} c_{k,\sigma} \tag{62}
$$

基态能量的一阶修正:

$$
\langle F \mid H_{\mathrm{int}} \mid F \rangle = \frac{1}{2V} \sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \left\langle F \left| c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger} c_{k',\sigma'} c_{k,\sigma} \right| F \right\rangle \tag{63}
$$

Wick定理说，对于无相互作用费米子系统 $H = \sum_{i,j} c_i^{\dagger} \varepsilon_{ij} c_j$ 的任何本征态 $|\Psi\rangle$，有

$$
\left\langle \Psi \left| c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} c_l c_m \right| \Psi \right\rangle = -\left\langle \Psi \left| c_i^{\dagger} c_l \right| \Psi \right\rangle \left\langle \Psi \left| c_j^{\dagger} c_m \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| c_i^{\dagger} c_m \right| \Psi \right\rangle \left\langle \Psi \left| c_j^{\dagger} c_l \right| \Psi \right\rangle \tag{64}
$$

利用Wick定理，基态能量一阶修正为

$$
\begin{aligned}
\langle F \mid H_{\mathrm{int}} \mid F \rangle &= \frac{1}{2V} \sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \left\langle F \left| c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger} c_{k',\sigma'} c_{k,\sigma} \right| F \right\rangle \\
&= \frac{1}{2V} \sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \left[-\left\langle F \left| c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k',\sigma'} \right| F \right\rangle \left\langle F \left| c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger} c_{k,\sigma} \right| F \right\rangle + \left\langle F \left| c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} \right| F \right\rangle \left\langle F \left| c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger} c_{k',\sigma'} \right| F \right\rangle \right] \\
&= \frac{1}{2V} \sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \left[-\delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k',k+q} \delta_{k,k'-q} \theta \left(k_F - \left| \vec{k} \right| \right) \theta \left(k_F - \left| \vec{k} + \vec{q} \right| \right) + \delta_{k,k+q} \delta_{k',k'-q} ??? \right] \\
&= \frac{1}{2V} \sum_{k,q\neq 0,\sigma} \frac{4\pi e^2}{q^2} \left[-\theta \left(k_F - \left| \vec{k} \right| \right) \theta \left(k_F - \left| \vec{k} + \vec{q} \right| \right) \right] \\
&= -\frac{1}{2V} \sum_{k,q\neq 0,\sigma} \frac{4\pi e^2}{q^2} \theta \left(k_F - \left| \vec{k} \right| \right) \theta \left(k_F - \left| \vec{k} + \vec{q} \right| \right) \\
&= -\frac{3e^2}{4\pi} N k_F
\end{aligned} \tag{65}
$$

> 求和转积分参考讲义

电荷密度

$$
n(\vec{r}) = n_{\uparrow}(\vec{r}) + n_{\downarrow}(\vec{r}) \tag{66}
$$

自旋密度:

$$
S^z(\vec{r}) \equiv n_{\uparrow}(\vec{r}) - n_{\downarrow}(\vec{r}) \tag{67}
$$

Hartree-Fock近似（平均场近似）

$$AB \approx \langle A\rangle B + A\langle B\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle \tag{68}$$

这里 $\langle\rangle$ 代表系综平均或基态期望。

对于Coulomb电子气，对相互作用项中的四费米子项用H-F近似：

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2V}\sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi e^2}{q^2}c^\dagger_{k+q,\sigma}c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma} \tag{69}$$

$$\begin{aligned}
&c^\dagger_{k+q,\sigma}c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma}\\
&=-c^\dagger_{k+q,\sigma}c_{k',\sigma'}c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k,\sigma}\\
&\approx-\left\langle c^\dagger_{k+q,\sigma}c_{k',\sigma'}\right\rangle c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k,\sigma}-c^\dagger_{k+q,\sigma}c_{k',\sigma'}\left\langle c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k,\sigma}\right\rangle+\left\langle c^\dagger_{k+q,\sigma}c_{k',\sigma'}\right\rangle\left\langle c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k,\sigma}\right\rangle\\
&=-\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\right\rangle c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k,\sigma}-\delta_{k,k'-q}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}\right\rangle c^\dagger_{k+q,\sigma}c_{k',\sigma'}+\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{k,k'-q}\left\langle c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\right\rangle\left\langle c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}\right\rangle\\
&=-\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\right\rangle c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}-\delta_{k,k'-q}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}\right\rangle c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}+\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{k,k'-q}\left\langle c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\right\rangle\left\langle c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}\right\rangle
\end{aligned}\tag{70}$$

忽略最后的常数项就有

$$\begin{aligned}
c^\dagger_{k+q,\sigma}c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma}&\approx-\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\right\rangle c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}-\delta_{k,k'-q}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}\right\rangle c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\\
&=-\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}n_{k',\sigma'}c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}-\delta_{k,k'-q}\delta_{\sigma,\sigma'}n_{k,\sigma}c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\\
&=-\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}\theta(k_F-k')c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}-\delta_{k,k'-q}\delta_{\sigma,\sigma'}\theta(k_F-k)c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}
\end{aligned}\tag{71}$$

则

$$\begin{aligned}
H_{\text{int}}&=\frac{1}{2V}\sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi e^2}{q^2}c^\dagger_{k+q,\sigma}c^\dagger_{k'-q,\sigma'}c_{k',\sigma'}c_{k,\sigma}\\
&\approx\frac{1}{2V}\sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'}\frac{4\pi e^2}{q^2}\left[-\delta_{k',k+q}\delta_{\sigma,\sigma'}\theta(k_F-k')c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}-\delta_{k,k'-q}\delta_{\sigma,\sigma'}\theta(k_F-k)c^\dagger_{k',\sigma'}c_{k',\sigma'}\right]\\
&=-\frac{1}{2V}\sum_{k,k',\sigma}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\left[\theta(k_F-k')c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}+\theta(k_F-k)c^\dagger_{k',\sigma}c_{k',\sigma}\right]\\
&=-\frac{1}{2V}\sum_{k,k',\sigma}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\left[\theta(k_F-k')c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}+\theta(k_F-k')c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}\right]\\
&=-\frac{1}{V}\sum_{k,k',\sigma}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\theta(k_F-k')c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma}
\end{aligned}\tag{72}$$

等效单电子能量：

$$\varepsilon_k=\frac{k^2}{2m}-\frac{1}{V}\sum_{k'}\frac{4\pi e^2}{|k'-k|^2}\theta(k_F-k') \tag{73}$$

交换项或Fock项：

$$-\varepsilon_k^{\text{ex}}=\frac{e^2k_F}{\pi}\left(1+\frac{k_F^2-k^2}{2k_Fk}\ln\left|\frac{k+k_F}{k-k_F}\right|\right) \tag{74}$$

H-F近似下单电子能量：

$$\varepsilon_k^{\text{HF}}=\frac{k^2}{2m}-\frac{2e^2k_F}{\pi}F\left(\frac{k}{k_F}\right) \tag{75}$$

习题

习题1：二次量子化的计算

Q1：设 $\hat{a}^\dagger$、$\hat{a}$ 为玻色子产生湮灭算符，计算 $\hat{a}|0\rangle$、$\hat{a}|1\rangle$、$\hat{a}^\dagger|0\rangle$、$\hat{a}^\dagger|1\rangle$。

$$a\left|0\right\rangle = 0, \quad a\left|1\right\rangle = \sqrt{1}\left|0\right\rangle, \quad a^{\dagger}\left|0\right\rangle = \sqrt{0+1}\left|1\right\rangle, \quad a^{\dagger}\left|1\right\rangle = \sqrt{1+1}\left|2\right\rangle \tag{76}$$

Q2：设 $\hat{c}^{\dagger}$、$\hat{c}$ 为费米子产生湮灭算符，计算 $\hat{c}|0\rangle$、$\hat{c}|1\rangle$、$\hat{c}^{\dagger}|0\rangle$、$\hat{c}^{\dagger}|1\rangle$。

$$c\left|0\right\rangle = 0, \quad c\left|1\right\rangle = (-1)^{0}\sqrt{1}\left|0\right\rangle, \quad c^{\dagger}\left|0\right\rangle = (-1)^{0}\sqrt{1-0}\left|1\right\rangle, \quad c^{\dagger}\left|1\right\rangle = 0 \tag{77}$$

Q3：设有两个费米子的多体 Fock 态 $|1,1,0,0\rangle$ 与 $|1,0,0,0\rangle$。$\hat{c}_j^{\dagger}$ 是第 j 个态的产生算符（$j=1,2,3,4$ 按顺次排列），计算 $\hat{c}_3^{\dagger}|1,1,0,0\rangle$、$\hat{c}_3^{\dagger}|1,0,0,0\rangle$。

$$c_3^{\dagger}\left|1,1,0,0\right\rangle = (-1)^{2}\left|1,1,1,0\right\rangle \tag{78}$$

$$c_3^{\dagger}\left|1,0,0,0\right\rangle = (-1)^{1}\left|1,0,1,0\right\rangle \tag{79}$$

Q4：证明双带费米子模型 $H=\sum_k\left(\varepsilon_k a_k^{\dagger}a_k+\omega_k b_k^{\dagger}b_k+g a_k^{\dagger}b_k+g b_k^{\dagger}a_k\right)$ 的能谱是 $E_{k\pm}=\frac{1}{2}\left(\varepsilon_k+\omega_k\pm\sqrt{(\varepsilon_k-\omega_k)^2+4g^2}\right)$. 提示：采用旋量表示 $\psi=(a_k,b_k)^{\top}$ 把哈密顿量写成 2×2 的矩阵形式，对角化矩阵可得能谱。

$$\begin{aligned} H &= \sum_k\left(\varepsilon_k a_k^{\dagger}a_k+\omega_k b_k^{\dagger}b_k+g a_k^{\dagger}b_k+g b_k^{\dagger}a_k\right) \\ &= \sum_k \begin{pmatrix} a_k^{\dagger} & b_k^{\dagger}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_k & g \\ g & \omega_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_k \\ b_k\end{pmatrix} \\ &\equiv \sum_k \psi_k^{\dagger}h_k\psi_k \end{aligned} \tag{80}$$

要求能谱，也就是求 h_k 的本征值。考虑

$$\det(h_k-E_kI)=0 \Longrightarrow \begin{vmatrix}\varepsilon_k-E_k & g \\ g & \omega_k-E_k\end{vmatrix}=0 \tag{81}$$

解得：

$$E_{k\pm}=\frac{1}{2}\left(\varepsilon_k+\omega_k\pm\sqrt{(\varepsilon_k-\omega_k)^2+4g^2}\right) \tag{82}$$

习题2：热容的统计表达式

Q1: 证明系统 $\hat{H}$ 热容的以下表达关系

$$C_v=\frac{\partial\langle\hat{H}\rangle}{\partial T}=-T\frac{\partial^2\mathcal{F}}{\partial T^2}=T\frac{\partial S}{\partial T}=\frac{\langle\hat{H}^2\rangle-\langle\hat{H}\rangle^2}{T^2}. \tag{83}$$

以下计算取玻尔兹曼常数 $k_{\mathrm{B}}=1$.

$$T=\frac{1}{\beta}, \quad \frac{\partial}{\partial\beta}=\frac{\partial T}{\partial\beta}\frac{\partial}{\partial T}=-\frac{1}{\beta^2}\frac{\partial}{\partial T}=-T^2\frac{\partial}{\partial T} \tag{84}$$

$$\langle H\rangle=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z=T^2\frac{\partial}{\partial T}\ln Z \tag{85}$$

$$C_v\equiv\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial T}=\frac{\partial}{\partial T}\left(T^2\frac{\partial}{\partial T}\ln Z\right)=2T\frac{\partial}{\partial T}\ln Z+T^2\frac{\partial^2}{\partial T^2}\ln Z \tag{86}$$

$$F=-T\ln Z, \tag{87}$$

$$\frac{\partial F}{\partial T}=-\ln Z-T\frac{\partial}{\partial T}\ln Z, \quad \frac{\partial^2\mathcal{F}}{\partial T^2}=-\frac{\partial}{\partial T}\ln Z-\frac{\partial}{\partial T}\ln Z-T\frac{\partial^2}{\partial T^2}\ln Z=-2\frac{\partial}{\partial T}\ln Z-T\frac{\partial^2}{\partial T^2}\ln Z \tag{88}$$

$$-T\frac{\partial^2\mathcal{F}}{\partial T^2}=2T\frac{\partial}{\partial T}\ln Z+2T^2\frac{\partial^2}{\partial T^2}\ln Z=C_v \tag{89}$$

$$S=-\frac{\partial F}{\partial T} \tag{90}$$

$$T\frac{\partial S}{\partial T}=-T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}=C_v \tag{91}$$

$$\langle H\rangle=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z=T^2\frac{\partial}{\partial T}\ln Z \tag{92}$$

$$\langle H\rangle = \mathrm{Tr}\left(\frac{\mathrm{e}^{-\beta H}}{Z}H\right) \tag{93}$$

注意 Z 是温度的函数，

$$\begin{aligned}
\left\langle H^2\right\rangle &= \mathrm{Tr}\left(\frac{\mathrm{e}^{-\beta H}}{Z}H^2\right) = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}H\right) = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(Z\langle H\rangle\right) \\
&= -\frac{1}{Z}\langle H\rangle\frac{\partial}{\partial\beta}Z - \frac{\partial}{\partial\beta}\langle H\rangle \\
&= -\frac{1}{Z}\langle H\rangle\frac{\partial}{\partial\beta}\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}\right) + T^2\frac{\partial}{\partial T}\langle H\rangle \\
&= +\frac{1}{Z}\langle H\rangle\,\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}H\right) + T^2\frac{\partial}{\partial T}\langle H\rangle \\
&= \langle H\rangle^2 + T^2\frac{\partial}{\partial T}\langle H\rangle
\end{aligned} \tag{94}$$

$$\frac{\left\langle H^2\right\rangle - \langle H\rangle^2}{T^2} = \frac{\partial\langle H\rangle}{\partial T} = C_v \tag{95}$$

Q2: 考虑费米子模型 $\hat{H} = \varepsilon\hat{c}^\dagger\hat{c}$，利用 Q1 的结果计算其热容。

单模费米子哈密顿量本征解为

$$H|0\rangle = 0|0\rangle, \quad H|1\rangle = \varepsilon|1\rangle \tag{96}$$

配分函数

$$Z = \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}\right) = \left\langle 0\middle|\mathrm{e}^{-\beta H}\middle|0\right\rangle + \left\langle 1\middle|\mathrm{e}^{-\beta H}\middle|1\right\rangle = \mathrm{e}^{-\beta 0} + \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon} = 1 + \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon} \tag{97}$$

$$\langle H\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}\right) = \frac{\varepsilon\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}}{1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}} = \frac{\varepsilon}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}+1} \tag{98}$$

$$C_v = \frac{\partial\langle H\rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\varepsilon}{\mathrm{e}^{\varepsilon/T}+1}\right) = \frac{\varepsilon^2}{T^2}\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon/T}}{\left(e^{\varepsilon/T}+1\right)^2} \tag{99}$$

Q3: 考虑玻色子模型 $\hat{H} = \omega\hat{b}^\dagger\hat{b}$，利用 Q1 的结果计算其热容。

单模玻色子哈密顿量 $H = \omega b^\dagger b$ 的本征解为

$$H|n\rangle = n\omega|n\rangle \tag{100}$$

配分函数为

$$Z \equiv \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\left\langle n\middle|\mathrm{e}^{-\beta H}\middle|n\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\beta n\omega} = \frac{1}{1-\mathrm{e}^{-\beta\omega}} \tag{101}$$

$$\langle H\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \frac{\omega\mathrm{e}^{-\beta\omega}}{1-\mathrm{e}^{-\beta\omega}} = \frac{\omega}{\mathrm{e}^{\beta\omega}-1} = \frac{\omega}{\mathrm{e}^{\omega/T}-1} \tag{102}$$

$$C_v = \frac{\partial\langle H\rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{\omega}{\mathrm{e}^{\omega/T}-1} = \frac{\omega^2}{T^2}\frac{\mathrm{e}^{\omega/T}}{\left(\mathrm{e}^{\omega/T}-1\right)^2} \tag{103}$$

Q4: 设 Majorana 费米子的哈密顿量为 $\hat{H} = i\varepsilon\hat{x}_1\hat{x}_2$，这里 $\hat{c} = \hat{x}_1 + i\hat{x}_2$，$\hat{c}^\dagger = \hat{x}_1 - i\hat{x}_2$，$\hat{x}_1, \hat{x}_2$ 为 Majorana 费米子。试利用 Q1 的结果计算其热容。（提示：把 Majorana 费米子重新用标准费米子 $\hat{c}, \hat{c}^\dagger$ 表示）

$$x_1 = \frac{1}{2}\left(c+c^\dagger\right), \quad x_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(c-c^\dagger\right) \tag{104}$$

$$H = \mathrm{i}\varepsilon x_1x_2 = \mathrm{i}\varepsilon\frac{1}{2}\left(c+c^\dagger\right)\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(c-c^\dagger\right) = \frac{\varepsilon}{4}\left(c^2+\left(c^\dagger\right)^2+cc^\dagger-c^\dagger c\right) = \frac{\varepsilon}{2}c^\dagger c - \frac{\varepsilon}{4} \tag{105}$$

这就化成了单模费米子的哈密顿量，常数不影响热容，因此只需要把单模费米子热容的 ε 替换成 $\varepsilon/2$ 即可。

$$C_v = \frac{(\varepsilon/2)^2}{T^2}\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon/(2T)}}{\left(e^{\varepsilon/(2T)}+1\right)^2} \tag{106}$$

习题4：刚球势

Q1: 证明刚球势 $V(x-y)=\lambda\delta(x-y)$ 的傅里叶变换系数 $V_q=\frac{\lambda}{V}$。

$$V_q=\frac{1}{V}\int V(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}\mathrm{d}^dx=\frac{\lambda}{V} \tag{107}$$

Q2: 仿照 Coulomb 电子气的处理, 证明以下相互作用费米子系统基态能量的一阶修正为 $E_g^1=\lambda V\left(\frac{4\pi}{3}\right)^2\left(\frac{k_F}{2\pi}\right)^6$:

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}\frac{k^2}{2m}c_{k\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}+\frac{\lambda}{2V}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}c_{k+q,\sigma}^{\dagger}c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}c_{k\sigma}.$$

定义 $\langle\cdots\rangle\equiv\langle F\,|\cdots|\,F\rangle$，利用费米子Wick定理有

$$\begin{aligned}
&\left\langle c_{k+q,\sigma}^{\dagger}c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}c_{k\sigma}\right\rangle\\
=&-\left\langle c_{k+q,\sigma}^{\dagger}c_{k'\sigma'}\right\rangle\left\langle c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger}c_{k\sigma}\right\rangle+\left\langle c_{k+q,\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}\right\rangle\left\langle c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}\right\rangle\\
=&-\delta_{k+q,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c_{k',\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}\right\rangle\delta_{k'-q,k}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c_{k,\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}\right\rangle+\delta_{k+q,k}\left\langle c_{k,\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}\right\rangle\delta_{k'-q,k'}\left\langle c_{k',\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}\right\rangle\\
=&-\delta_{q,k'-k}\delta_{\sigma,\sigma'}\left\langle c_{k',\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}\right\rangle\left\langle c_{k,\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}\right\rangle+\delta_{q,0}\left\langle c_{k,\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}\right\rangle\left\langle c_{k',\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}\right\rangle\\
=&-\delta_{q,k'-k}\delta_{\sigma,\sigma'}\theta(k_F-k')\theta(k_F-k)+\delta_{q,0}\theta(k_F-k)\theta(k_F-k')
\end{aligned} \tag{108}$$

基态能量一阶修正为:

$$\begin{aligned}
E_g^1&=\langle F\,|\,H_{\text{int}}\,|\,F\rangle\\
&=\frac{\lambda}{2V}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\left\langle c_{k+q,\sigma}^{\dagger}c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger}c_{k'\sigma'}c_{k\sigma}\right\rangle\\
&=\frac{\lambda}{2V}\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'}\left[-\delta_{q,k'-k}\delta_{\sigma,\sigma'}\theta(k_F-k')\theta(k_F-k)+\delta_{q,0}\theta(k_F-k)\theta(k_F-k')\right]\\
&=\frac{\lambda}{2V}\sum_{k,k'}\left[-2\theta(k_F-k')\theta(k_F-k)+4\theta(k_F-k')\theta(k_F-k)\right]\\
&=\frac{\lambda}{V}\sum_{k,k'}\theta(k_F-k')\theta(k_F-k)\\
&=\frac{\lambda}{V}\left[\sum_k\theta(k_F-k)\right]^2\\
&=\frac{\lambda}{V}\left[\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3/V}\theta(k_F-k)\right]^2\\
&=\frac{\lambda}{V}\left[\int_{k=0}^{k=k_F}\frac{4\pi k^2\mathrm{d}k}{(2\pi)^3/V}\right]^2\\
&=\frac{\lambda}{V}\cdot\frac{(4\pi)^2V^2}{(2\pi)^6}\left(\frac{k_F^3}{3}\right)^2\\
&=\lambda V\left(\frac{4\pi}{3}\right)^2\left(\frac{k_F}{2\pi}\right)^6
\end{aligned} \tag{109}$$

Q3: 若把 Q2 中的费米子换成玻色子, 那么基态能量的一阶修正是什么呢? (提示: 自由玻色子的基态是什么?)

N 无自旋自由玻色子基态

$$|\mathrm{GS}\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\left(c_0^{\dagger}\right)^N|0\rangle \tag{110}$$

定义 $\langle\cdots\rangle\equiv\langle\mathrm{GS}\,|\cdots|\,\mathrm{GS}\rangle$,

基态能量一阶修正为

$$
\begin{aligned}
E_g^1 &= \langle F \mid H_{\text{int}} \mid F\rangle \\
&= \frac{\lambda}{2V} \sum_{k,k',q} \left\langle c_{k+q}^{\dagger} c_{k'-q}^{\dagger} c_{k'} c_k \right\rangle
\end{aligned} \tag{111}
$$

只有当 $k = k' = q = 0$ 时求和项才不为零，因此

$$
\begin{aligned}
E_g^1 &= \frac{\lambda}{2V} \sum_{k,k',q} \left\langle c_{k+q}^{\dagger} c_{k'-q}^{\dagger} c_{k'} c_k \right\rangle \\
&= \frac{\lambda}{2V} \left\langle \mathrm{GS} \middle| c_0^{\dagger} c_0^{\dagger} c_0 c_0 \middle| \mathrm{GS} \right\rangle \\
&= \frac{\lambda}{2V} \left(\sqrt{N}\right)^2 \left(\sqrt{N-1}\right)^2 \\
&= \frac{\lambda}{2V} N(N-1)
\end{aligned} \tag{112}
$$

习题5：三维电子气体的铁磁态

Q1: 我们知道 Coulomb 电子气体可以显示顺磁性的金属态、铁磁性的金属态和 Wigner 晶体。这里我们考虑铁磁金属态。当电子间相互作用不存在时，假设所有电子都完全极化，也就是自旋都取同一个方向，试给出此时体系的费米波矢 k_F^* 与费米气体时费米波矢 k_F 的关系。

顺磁电子气体基态 $|F\rangle$ 每个 $k < k_F$ 态可填充两个不同自旋的电子。

$$
\begin{aligned}
N &= \left\langle F \middle| \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \middle| F \right\rangle = \sum_{k,\sigma} \theta(k - k_F) = \sum_{\sigma} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3 / V} \theta(k - k_F) \\
&= \sum_{\sigma} \int_{k=0}^{k=k_F} \frac{4\pi k^2 \mathrm{d}k}{(2\pi)^3 / V} \\
&= \frac{V}{3\pi^2} k_F^3
\end{aligned} \tag{113}
$$

自旋极化态每个 $k < k_F^*$ 态只填充一个自旋固定为 σ 的电子。

$$
\begin{aligned}
N &= \left\langle F \middle| \sum_{k} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \middle| F \right\rangle = \sum_{k} \theta(k - k_F^*) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3 / V} \theta(k - k_F^*) \\
&= \int_{k=0}^{k=k_F^*} \frac{4\pi k^2 \mathrm{d}k}{(2\pi)^3 / V} \\
&= \frac{V}{6\pi^2} \left(k_F^*\right)^3
\end{aligned} \tag{114}
$$

对比可得

$$
2\left(k_F\right)^3 = \left(k_F^*\right)^3 \tag{115}
$$

Q2: 利用一阶微扰理论计算 Q1 中完全极化铁磁态的基态能量，并与本章中所讨论的 Coulomb 电子气基态能比较，试找出从顺磁金属态到完全极化铁磁态相变时的 r_s 的取值。把这个取值与本章中所给出的蒙特卡洛结果进行比较，试解释其差别的原因。

3 晶格费米子

Hubbard模型

Hubbard模型的导出

Bloch波函数

Wannier波函数

单粒子部分

相互作用部分

Hubbard模型

单带Hubbard模型：

$$H=-t\sum_{\langle j,m\rangle,\sigma}\left(c_{j\sigma}^{\dagger}c_{m\sigma}+\mathrm{h.c.}\right)+U\sum_{j}n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} \tag{116}$$

$\langle j,m\rangle$ 表示对最近邻pair求和。

两格点Hubbard模型

$$H=-t\sum_{\sigma}\left(c_{1\sigma}^{\dagger}c_{2\sigma}+c_{2\sigma}^{\dagger}c_{1\sigma}\right)+U\left(n_{1\uparrow}n_{1\downarrow}+n_{2\uparrow}n_{2\downarrow}\right) \tag{117}$$

总粒子数算符 $N\equiv\sum_{\sigma}\left(n_{1\sigma}+n_{2\sigma}\right)$ 与哈密顿量对易，因此电子总数守恒，可以用总电子书来标记哈密顿量本征态。

$N=2$ 半满时体系的所有Fock态：

Heisenberg模型与自旋波激发

铁磁Heisenberg模型

一维最近邻耦合铁磁量子Heisenberg模型模型：

$$H=-J\sum_{j}\vec{S}_{j}\cdot\vec{S}_{j+1}=-J\sum_{j}\left(S_{j}^{x}S_{j+1}^{x}+S_{j}^{y}S_{j+1}^{y}+S_{j}^{z}S_{j+1}^{z}\right) \tag{118}$$

引入升降算符

$$S_{j}^{\pm}\equiv S_{j}^{x}\pm\mathrm{i}S_{j}^{y} \tag{119}$$

改写哈密顿量

$$H_{FM}=-J\sum_{j}\left[\frac{1}{2}\left(S_{j}^{+}S_{j+1}^{-}+S_{j}^{-}S_{j+1}^{+}\right)+S_{j}^{z}S_{j+1}^{z}\right] \tag{120}$$

考虑周期边界条件，可以发现铁磁态（所有自旋都朝一个方向）是体系的本征态，并且是基态。

$$|\psi_{FM}\rangle\equiv|\uparrow\rangle_{1}\cdots|\uparrow\rangle_{N_{s}} \tag{121}$$

$$H_{FM}|\psi_{FM}\rangle=-\frac{J}{4}N_{s}|\psi_{FM}\rangle \tag{122}$$

考虑完全极化铁磁态基础上，某个自旋翻转得到的态：

$$|\psi_{i}\rangle\equiv|\downarrow\rangle_{i}\prod_{j\neq i}|\uparrow\rangle_{j} \tag{123}$$

这个态不是哈密顿量本征态。可以发现

$$H_{FM}\left|\psi_i\right\rangle=-\frac{J}{2}\left(\left|\psi_{i-1}\right\rangle+\left|\psi_{i+1}\right\rangle\right)+\left(-\frac{J}{4}\left(N_s-2\right)+\frac{J}{4}\cdot 2\right)\left|\psi_i\right\rangle \tag{124}$$

因此构造如下的态是体系哈密顿量本征态：

$$|\psi\rangle \equiv \sum_i c_i\left|\psi_i\right\rangle \tag{125}$$

若所有的系数 c_i 都不为零，则这个态描述的是在晶格自旋体系中传播的自旋翻转。

利用本征方程

$$H_{FM}|\psi\rangle=E|\psi\rangle \tag{126}$$

可以求得：

$$|\psi\rangle=\sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_i}\left|\psi_i\right\rangle \tag{127}$$

$$E=E_{FM}+J(1-\cos k) \tag{128}$$

其中 R_i 是格点 i 的位置，这就是铁磁自旋波与其激发谱。

反铁磁Heisenberg模型

反铁磁Neel态

$$H_{AF}=J\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\frac{1}{2}S_i^+S_j^-+\frac{1}{2}S_i^-S_j^++S_i^zS_j^z\right) \tag{129}$$

反铁磁Neel态：

$$\left|\Psi_{Neel}\right\rangle \equiv|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle \tag{130}$$

可以划分两套子格，每套子格内部自旋相同。

Neel态不是 H_{AF} 的本征态，但可以以其为参考态尝试构造本征态。

反铁磁Heisenberg模型的HP玻色子表示

$$S_{Aj}^+=\sqrt{2S-a_j^\dagger a_j}\,a_j,\quad S_{Aj}^-=a_j^\dagger\sqrt{2S-a_j^\dagger a_j},\quad S_{Aj}^z=S-a_j^\dagger a_j \tag{131}$$

$$S_{Bj}^+=b_j^\dagger\sqrt{2S-b_j^\dagger b_j},\quad S_{Bj}^-=\sqrt{2S-b_j^\dagger b_j}\,b_j,\quad S_{Bj}^z=-S+b_j^\dagger b_j \tag{132}$$

在大自旋近似下

$$H_{AF}\approx JS\sum_{i,\delta}\left(a_i^\dagger a_i+b_{i+\delta}^\dagger b_{i+\delta}+a_i^\dagger b_{i+\delta}^\dagger+a_ib_{i+\delta}\right)-JN_s\frac{Z}{2}S^2 \tag{133}$$

进行如下的分解

$$a_i=\frac{1}{\sqrt{N_s/2}}\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_i}a_k, \tag{134}$$

$$b_i=\frac{1}{\sqrt{N_s/2}}\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR_i}b_k \tag{135}$$

则

$$H_{AF}=JS\sum_k\left[Za_k^\dagger a_k+Zb_k^\dagger b_k+\left(\sum_\delta \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\delta}\right)a_k^\dagger b_k^\dagger+\left(\sum_\delta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\delta}\right)a_kb_k\right]-JN_s\frac{Z}{2}S^2 \tag{136}$$

定义 $\gamma_k \equiv \frac{1}{Z}\sum_\delta \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\delta}$，且在超立方晶格有 $\gamma_k^*=\gamma_k$ 则

$$H_{AF}=JSZ\sum_k\left(a_k^\dagger a_k+b_k^\dagger b_k+\gamma_k a_k^\dagger b_k^\dagger+\gamma_k a_k b_k\right)-JN_s\frac{Z}{2}S^2 \tag{137}$$

采用玻色子Bogoliubov变换

$$\begin{pmatrix}a_k\\ b_k^\dagger\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cosh\theta_k & -\sinh\theta_k\\ -\sinh\theta_k & \cosh\theta_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_k\\ \beta_k^\dagger\end{pmatrix} \tag{138}$$

为了消去非对角项，取

$$\gamma_k=\tanh 2\theta_k \tag{139}$$

则哈密顿量化为

$$H_{AF}=JSZ\sum_k(\cosh 2\theta_k-\gamma_k\sinh 2\theta_k)\left(\alpha_k^\dagger\alpha_k+\beta^\dagger\beta_k\right)+JSZ\sum_k(\cosh 2\theta_k-\gamma_k\sinh 2\theta_k) \tag{140}$$

可进一步改写为

$$H_{AF}=\sum_k\omega_k\left(\alpha_k^\dagger\alpha_k+\beta^\dagger\beta_k\right)+\sum_k\omega_k-JN_s\frac{Z}{2}S(S+1) \tag{141}$$

$$\omega_k=JSZ\sqrt{1-\gamma_k^2} \tag{142}$$

这里 ω_k 是自旋波的色散关系。动量求和只对磁布里渊区进行。

长波极限下 $\gamma_k\sim 1-k^2/Z$，则 $\omega_k\sim|k|$

一维量子XY模型与Jordan-Wigner变换

$$\begin{aligned}H_{XY}&=-J\sum_j\left(S_j^xS_{j+1}^x+S_j^yS_{j+1}^y\right)=-\frac{J}{2}\sum_j\left(S_j^+S_{j+1}^-+S_j^-S_{j+1}^+\right)=-\frac{J}{2}\sum_j\left(S_j^+S_{j+1}^-+S_{j+1}^+S_j^-\right)\\&=-\frac{J}{2}\sum_j\left(S_j^+S_{j+1}^-+\text{h.c.}\right)\end{aligned} \tag{143}$$

单个 $S=1/2$ 自旋的费米子表示

$$S^+=f^\dagger,\quad S^-=f,\quad S^z=f^\dagger f-\frac{1}{2} \tag{144}$$

利用单模费米子性质，可验证

$$(S^x)^2=(S^y)^2=(S^z)^2=\frac{1}{4} \tag{145}$$

$$[S^x,S^y]=\mathrm{i}S^z,\quad \{S^x,S^y\}=0 \tag{146}$$

两个 $S=1/2$ 自旋的费米子表示

两自旋对易，故想要用费米子表示自旋必须要满足这一点。

Jordan-Wigner变换

对于一维 $S=1/2$ 系统

$$S_j^+=f_j^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat\phi_j},\quad S_j^-=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat\phi_j}f_j,\quad \hat\phi_j\equiv\pi\sum_{m=1}^{j-1}f_m^\dagger f_m,\quad S_j^z=f_j^\dagger f_j^\dagger-\frac{1}{2} \tag{147}$$

$$S_j^x=\frac{1}{2}\left(S_j^++S_j^-\right)=\frac{1}{2}\left(f_j^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_j}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_j}f_j\right) \tag{148}$$

$$S_j^y=\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(S_j^+-S_j^-\right)=\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(f_j^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_j}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_j}f_j\right) \tag{149}$$

且实际上

$$
\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi f_m^\dagger f_m} = (-1)^{f_m^\dagger f_m} = 1 - 2f_m^\dagger f_m \tag{150}
$$

$$
\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}_j} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\phi}_j}, \quad \phi_{j+1} = \phi_j + f_j^\dagger f_j \tag{151}
$$

$$
S_j^+ S_{j+1}^- = f_j^\dagger f_{j+1} \tag{152}
$$

$$
\begin{aligned}
S_j^z S_{j+1}^z &= \left(f_j^\dagger f_j - \frac{1}{2}\right)\left(f_{j+1}^\dagger f_{j+1} - \frac{1}{2}\right) \\
&= \left(n_j - \frac{1}{2}\right)\left(n_{j+1} - \frac{1}{2}\right) \\
&= n_j n_{j+1} - \frac{1}{2}(n_j + n_{j+1}) + \frac{1}{4}
\end{aligned} \tag{153}
$$

利用Jordan-Wigner变换求解XY模型

$$
H_{XY} = -\frac{J}{2}\sum_j \left(f_j^\dagger f_{j+1} + f_{j+1}^\dagger f_j\right) \tag{154}
$$

设第一个自旋与最后一个自旋有相互作用

总费米子算符 $N_f \equiv \sum_{m=1}^{N_s} f_m^\dagger f_m$ 是守恒量

$$
H_{XY} = \sum_k \left(-J\cos k\right) f_k^\dagger f_k \tag{155}
$$

零温基态，费米子按色散关系 $-J\cos k < 0$ 填满 $k \in [-\pi/2, \pi/2]$ 的半个一维第一布里渊区(取$a=1$)。

习题3：XXZ模型

Q1: $S=1/2$ 自旋的 XXZ 模型定义如下:

$$
H = -J\sum_i \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y\right) - J_z \sum_i S_i^z S_{i+1}^z \tag{156}
$$

利用Jordan-Wigner变换写出该模型的费米子表示形式。

$$
\begin{aligned}
H &= -J\sum_i \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y\right) - J_z \sum_i S_i^z S_{i+1}^z \\
&= -\frac{J}{2}\sum_j \left(S_j^+ S_{j+1}^- + \mathrm{h.c.}\right) - J_z \sum_j S_j^z S_{j+1}^z
\end{aligned} \tag{157}
$$

$$
S_j^+ S_{j+1}^- = f_j^\dagger f_{j+1} \tag{158}
$$

$$
S_j^z S_{j+1}^z = n_j n_{j+1} - \frac{1}{2}(n_j + n_{j+1}) + \frac{1}{4} \tag{159}
$$

$$
\begin{aligned}
H &= -\frac{J}{2}\sum_j \left(S_j^+ S_{j+1}^- + \mathrm{h.c.}\right) - J_z \sum_j S_j^z S_{j+1}^z \\
&= -\frac{J}{2}\sum_j \left(f_j^\dagger f_{j+1} + f_{j+1}^\dagger f_j\right) - J_z \sum_j \left[n_j n_{j+1} - \frac{1}{2}(n_j + n_{j+1}) + \frac{1}{4}\right]
\end{aligned} \tag{160}
$$

Q2: 假设 Q1 中的模型只有三个格点（考虑开边界条件，也就是 1, 3 自旋无耦合），试写出其所有本征值和本征态。（提示：以 S_1^z, S_2^z, S_3^z 为基矢，哈密顿量可以写成 8×8 矩阵；注意到 z 方向总自旋 $\hat{S}_{\mathrm{tot}}^z = \hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z + \hat{S}_3^z$ 与哈密顿量对易，那么 8×8 矩阵可分块对角化为两个 1×1 和两个 3×3 矩阵的直和。）

Q3: 假设 Q1 中的模型满足周期边界条件；计算 $J_z = 0$ 时费米子的色散关系并写出相应的基态波函数。

Q4: 利用自旋波理论解释一维 $S=1/2$ 反铁磁 Heisenberg 模型的近似基态不是 Neel 反铁磁态。
（提示：考虑子格磁化是否发散。）

4 费米液体

Landau与费米液体

He-3流体

费米液体的精髓

费米液体的两个基本假设：

绝热性：无相互作用费米气体在缓慢加入相互作用后变成费米液体；

一对一：费米子液体的准粒子/空穴激发与费米气体的粒子/空穴一一对应。

绝热性

开启相互作用时，自由费米气体基态会逐渐演化到相互作用费米子基态。

自由费米气体

费米液体基态

$$|\Psi_{FL}\rangle = \prod_{k \leqslant k_F, \sigma} |\tilde{n}_{k\sigma}\rangle \tag{161}$$

$\tilde{n}_{k\sigma} = \theta\left(k_F - \left|\vec{k}\right|\right)$ 是相互作用费米子分布函数。

费米气体的激发

在费米气体的费米球态添加一个动量为 k_0 自旋为 σ_0 的粒子

$$\left|\Psi_0^{k_0,\sigma_0}\right\rangle = |n_{k_0,\sigma_0}\rangle \prod_{k \leqslant k_F, \sigma} |n_{k\sigma}\rangle \tag{162}$$

相对费米能的激发能：

$$\varepsilon_{k_0} \equiv \frac{k_0^2}{2m} - E_F > 0 \tag{163}$$

在费米子球内移除一个动量为 k_0 自旋为 σ_0 的粒子

$$\left|\Psi_0^{-k_0,-\sigma_0}\right\rangle = \prod_{k \leqslant k_F, \sigma, k \neq k_0, \sigma \neq \sigma_0} |n_{k\sigma}\rangle \tag{164}$$

费米液体的激发

费米气体中的粒子、空穴态激发对应费米液体中的准粒子、准空穴态激发。

$$\left|\Psi_{FL}^{k_0,\sigma_0}\right\rangle = |\tilde{n}_{k_0,\sigma_0}\rangle \prod_{k \leqslant k_F, \sigma} |\tilde{n}_{k\sigma}\rangle \tag{165}$$

$$\left|\Psi_{FL}^{-k_0,-\sigma_0}\right\rangle = \prod_{k \leqslant k_F, \sigma, k \neq k_0, \sigma \neq \sigma_0} |\tilde{n}_{k\sigma}\rangle \tag{166}$$

准粒子分布函数

$$\delta n_{k\sigma} = \tilde{n}_{k\sigma} - n_{k\sigma}^0 \tag{167}$$

单个准粒子能量

$$E_{k_0,\sigma_0}^0 = E_{k_0,\sigma_0} - E_0 \tag{168}$$

E_0 代表完全填满的费米子基态的能量，E_{k_0,σ_0} 是有一个准粒子激发的系统总能量。

粒子数可变情况下准粒子能量(零温下化学势等于费米能)

$$
\varepsilon_{k_0,\sigma_0}^0 = E_{k_0,\sigma}^0 - \mu \tag{169}
$$

Landau能量泛函

系统能量 $\mathcal{E}$ 依赖于分布函数 $\{n_{k\sigma}\}$

$$
\mathcal{E} = \mathcal{E}\left(\{n_\sigma\}\right) \tag{170}
$$

在低温下，分布函数 $\{n_{k\sigma}\}$ 与基态分布函数 $\left\{n_{k\sigma}^0\right\}$ 相差不大，可以在基态分布进行泰勒展开：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{E}\left(\{n_{k\sigma}\}\right) &= \mathcal{E}\left(\left\{n_{k\sigma}^0\right\}\right) + \sum_{k\sigma}\left(n_{k\sigma} - n_{k\sigma}^0\right)\left.\frac{\partial\mathcal{E}\left(\{n_{k\sigma}\}\right)}{\partial n_{k\sigma}}\right|_{n_{k\sigma}=n_{k\sigma}^0} \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{k\sigma,k'\sigma'}\left(n_{k\sigma} - n_{k\sigma}^0\right)\left(n_{k'\sigma'} - n_{k\sigma}^0\right)\left.\frac{\partial^2\mathcal{E}\left(\{n_{k\sigma}\}\right)}{\partial n_{k\sigma}\partial n_{k'\sigma'}}\right|_{n_{k\sigma}=n_{k\sigma}^0,n_{k'\sigma'}=n_{k'\sigma'}^0} + \cdots \\
&= E_0 + \sum_{k\sigma}\varepsilon_{k\sigma}^0\delta n_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k\sigma,k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k\sigma}\delta n_{k'\sigma'} + \cdots
\end{aligned} \tag{171}
$$

Landau能量泛函与Hartree-Fock近似的关系

Hartree-Fock近似能给出Landau相互作用函数的估计。

准粒子的有效质量和态密度

把准粒子能量在费米面附近展开

$$
\varepsilon_{k\sigma}^0 \approx v_F^*\left(k - k_F\right), \quad V_F^* \equiv \left.\frac{\partial\varepsilon_{k\sigma}^0}{\partial k}\right|_{k=k_F} \tag{172}
$$

准粒子的有效质量

$$
m^* \equiv \frac{k_F}{v_F} \tag{173}
$$

$$
\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial n_{k\sigma}} = \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\left(\delta n_{k\sigma}\right)} = \varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_{k\sigma}^0 + \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k'\sigma'} \tag{174}
$$

费米液体的热力学熵和自由能

费米液体的熵：

$$
S = -\sum_{k\sigma}\left[n_{k\sigma}\ln n_{k\sigma} + \left(1 - n_{k\sigma}\right)\ln(1 - n_{k\sigma})\right] \tag{175}
$$

费米液体的自由能：

$$
F = \mathcal{E} - TS = E_0 + \sum_{k\sigma}\varepsilon_{k\sigma}^0\delta n_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{k\sigma,k'\sigma'} f_{k\sigma,k'\sigma'}\delta n_{k\sigma}\delta n_{k'\sigma'} + \cdots + T\sum_{k\sigma}\left[n_{k\sigma}\ln n_{k\sigma} + \left(1 - n_{k\sigma}\right)\ln(1 - n_{k\sigma})\right] \tag{176}
$$

热平衡下的分布函数使得自由能取极小值。用 $\bar{\delta}n_{k\sigma}$ 表示 $n_{k\sigma}$ 的变分，那么 $\delta n_{k\sigma}$ 的变分也是 $\bar{\delta}n_{k\sigma}$，于是

\$\$ \begin{equation} 0=\bar{\delta} F

\end{equation}
\$\$

给出

$$n_{k\sigma}=\frac{1}{\mathrm{e}^{\varepsilon_{k\sigma}/T}+1}=f_F(\varepsilon_{k\sigma}) \tag{177}$$

费米液体的低温热容

低温时，准粒子数较少，系统能量主要由单粒子部分提供。

$$\mathcal{E}\approx E_0+\sum_{k\sigma}\varepsilon_{k\sigma}^0\delta n_{k\sigma} \tag{178}$$

$$C_v\equiv\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial T}=\sum_{k\sigma}\varepsilon_{k\sigma}^0\frac{\partial f_F\left(\varepsilon_{k\sigma}^0\right)}{\partial T}=\int\mathrm{d}\varepsilon N^*(\varepsilon)\varepsilon\frac{\partial f_F(\varepsilon)}{\partial T}\approx N^*(0)\frac{\pi^2}{3}T\equiv\gamma^*T \tag{179}$$

Landau参数

自旋守恒系统的Landau相互作用函数可分解为

$$f_{k\sigma,k'\sigma'}=f_{k,k'}^s+f_{k,k'}^a\sigma\sigma' \tag{180}$$

考虑准粒子都在费米面附近，且各向同性，

$$f_{k,k'}^{s/a}\approx f^{s/a}(\cos\theta),\quad \cos\theta=\frac{\vec{k}_F\cdot\vec{k}_F'}{k_F^2} \tag{181}$$

构造无量纲的

$$F^{s/a}(\cos\theta)=N^*(0)f^{s/a}(\cos\theta) \tag{182}$$

并用勒让德多项式展开：

$$F^{s/a}(\cos\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)F_l^{s/a}\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{183}$$

只需要少数Landau参数 $F_0^{s/a},F_1^{s/a}$ 就可以表征一般费米液体的可观测量。

费米液体的集体模式与Boltzman方程

无碰撞Boltzman方程与零声

如果给系统加依赖于时间和空间的电磁场，则分布函数 $n_{k\sigma}=n_{k\sigma}(x,t)$

无碰撞Boltzman方程：

$$\frac{\partial n_{k\sigma}}{\partial t}+\nabla_k\varepsilon_{k\sigma}\cdot\nabla_x n_{k\sigma}-\nabla_x\varepsilon_{k\sigma}\cdot\nabla_k n_{k\sigma}=0 \tag{184}$$

设分布函数满足

$$n_{k\sigma}(x,t)=f_F\left(\varepsilon_{k\sigma}^0\right)+\delta n_{k\sigma}(x,t)=f_F\left(\varepsilon_{k\sigma}^0\right)+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(qx-\omega t)}\alpha_{k\sigma} \tag{185}$$

最终可得

$$\omega=sv_F^*q,\quad \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1}-1=\frac{1}{F_0^s} \tag{186}$$

习题1:一些概念

Q1: 费米液体的费米面相比于其对应的无相互作用费米气体是否有变化。

Q2: 费米液体的热容以及电阻随温度依赖关系为何。

Q3: 当存在长程相互作用时费米液体还能使用吗?

5 相变和对称破缺

相变和对称破缺

Landau平均场理论

假设自由能是序参量的函数。

有序态时序参量非零，无序态时序参量为零。

在相变点附近，序参量趋于零，可以把自由能密度按序参量 Ψ 展开

$$f_L\left[\Psi\right] \equiv \frac{F_L\left[\Psi\right]}{V} = f_0 + \frac{r}{2}\Psi^2 + \frac{u}{4}\Psi^4 + \cdots \tag{187}$$

通常假设 r 是温度的函数，$u > 0$ 并忽略高阶项。

$$r = a(T - T_c), \quad a > 0 \tag{188}$$

$$\frac{\partial f_L\left[\Psi\right]}{\partial \Psi} = 0 \Longrightarrow \Psi\left(r + u\Psi^2\right) = 0, \quad \Psi = 0, \quad \Psi = \pm\sqrt{-\frac{r}{u}} \tag{189}$$

当 $T > T_c$，有 $r > 0$，物理上 $\Psi = 0$ 的零点对应系统稳定时的态，而我们能说 $\Psi = 0$ 对应无序态，因此温度大于临界温度时，体系处于无序态。此时自由能密度为

$$f_L\left[\Psi = 0\right] = 0, \quad T > T_c \tag{190}$$

当 $T < T_c$，有 $r < 0$，此时 $\Psi = \pm\sqrt{-r/u}$ 这两个零点对应自由能密度的最小值，而我们说序参量非零对应有序态，因此温度小于临界温度时，系统进入有序态。此时自由能密度为

$$f_L\left[\Psi \neq 0\right] = -\frac{r^2}{4u}, \quad T < T_c \tag{191}$$

Landau平均场理论的可观测量

在Landau理论中，当 $T > T_c$ 时，$\Psi \equiv 0, f_L = 0$，因此热容 $C_V \equiv 0.$

当 $T < T_c$ 时，自由能密度

$$f_L = -\frac{r^2}{4u} = -\frac{\left(T - T_c\right)^2}{4u} \tag{192}$$

单位体积热容

$$C_V = -T\frac{\partial^2 f_L}{\partial T^2} = \frac{T}{2u} \tag{193}$$

在相变点，热容跳变

$$\Delta C_V\big|_{T_c} = C_V\big|_{T\to T_c^-} - C_V\big|_{T\to T_c^+} = \frac{T_c}{2u} \tag{194}$$

如果考虑外场下的物理量，比如磁场，那依赖于序参量的自由能密度写为

$$f_L\left[\Psi\right] = \frac{r}{2}\Psi + \frac{u}{4}\Psi^4 - h\Psi \tag{195}$$

$$\frac{\partial f_L}{\partial \Psi} = 0 \Longrightarrow r\Psi + u\Psi^3 = h \tag{196}$$

由于只考虑相变点附近，因此 Ψ^3 是高阶小量，约去得到

$$\Psi = \frac{h}{r} \tag{197}$$

序参量的磁化率为

$$\chi \equiv \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}h} = \frac{1}{r} = \frac{1}{T-T_c} \tag{198}$$

在相变点 $T = T_c$ 有 $r = 0$，此时有

$$\Psi = \left(\frac{h}{u}\right)^{1/3} \tag{199}$$

临界指数与标度律

一般在相变点附近，有

$$C_V \propto |T-T_c|^{-\alpha}, \quad \Psi \propto |T-T_c|^{\beta}, \quad \chi \propto |T-T_c|^{-\gamma}, \quad \Psi \propto |h|^{1/\delta}, \quad T = T_c \tag{200}$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ 称为临界指数。

Landau平均场的临界指数为

$$\alpha = 0, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3 \tag{201}$$

它们满足标度律：

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{202}$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \tag{203}$$

$$(2-\eta)\nu = \gamma \tag{204}$$

对于一些系统还有超标度律

$$2 - \alpha = \nu d \tag{205}$$

Ginzburg-Landau理论

对于依赖于空间坐标的序参量

$$F_{GL} = \int \mathrm{d}^d x f_{GL}\left[\Psi(x)\right] \tag{206}$$

$$f_{GL}[\Psi] = \frac{s}{2}(\nabla\Psi)^2 + \frac{r}{2}\Psi^2 + \frac{u}{4}\Psi^4 - h\Psi, \quad s > 0 \tag{207}$$

体系的晶格对称性决定G-L自由能的一般形式。

定义关联长度

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{s}{|r|}} \propto |T-T_c|^{-1/2} \tag{208}$$

体系稳定时，自由能取极小值

$$\delta F_{GL} = 0 \tag{209}$$

$$\frac{\partial f_{GL}}{\partial \Psi} = -s^2\nabla^2\Psi + r\Psi + u\Psi^3 - h = 0 \tag{210}$$

考虑傅里叶变换后有

$$\Psi_k = \frac{h_k}{(sk^2 + r)} \tag{211}$$

定义依赖于动量的磁化率 $\chi_k \equiv \Psi_k / h_k$

$$\chi_k = \frac{1}{s\left(k^2 + \xi^{-2}\right)}, \quad T > T_c \tag{212}$$

在相变点有

$$\chi_k \propto \frac{1}{k^{2-\eta}} \tag{213}$$

多分量情况

$$f_L\left[\vec{\Psi}\right] = \frac{r}{2}\left(\vec{\Psi}\cdot\vec{\Psi}\right) + \frac{u}{4}\left(\vec{\Psi}\cdot\vec{\Psi}\right)^2 \tag{214}$$

$\mathrm{O}(2)$ 不变理论

$$f_L\left[\vec{\Psi}\right] = r\left(\Psi_1^2+\Psi_2^2\right) + \frac{u}{2}\left(\Psi_1^2+\Psi_2^2\right)^2 \tag{215}$$

$\mathrm{O}(2)$ 理论等价于 $\mathrm{U}(1)$ 理论，引入 $\Psi = \Psi_1 + \mathrm{i}\Psi_2 = |\Psi|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$

$$f_L[\Psi] = r\,|\Psi|^2 + \frac{u}{2}\left(|\Psi|^2\right)^2 \tag{216}$$

$$\frac{\partial f_L}{\partial \Psi^*} = r\Psi + u\,|\Psi|^2\,\Psi = 0 \tag{217}$$

O(2)模式中的相位机制

$$f_{\mathrm{O}(2)} = |\nabla\Psi|^2 + r\,|\Psi|^2 + \frac{u}{2}\left(|\Psi|^2\right)^2 = \frac{1}{4\rho}\left(\nabla\rho\right)^2 + \rho\left(\nabla\theta\right)^2 + r\rho + \frac{u}{2}\rho^2 \tag{218}$$

$$f_{\mathrm{O}(2)} \approx \tag{219}$$

Anderson-Higgs机制

习题1：一些概念

Q1: 指出晶态固体和反铁磁体主要破缺了哪类对称性。

Q2: 写出Landau理论给出的六个临界指数并指出这些指数是否满足超标度关系。

Q3: 简述Goldstone机制和Anderson-Higgs机制并判断晶格振动导致的声子以及电磁场的量子即光子是否是Goldstone粒子。

13 超导

Cooper不稳定性

考虑费米面外两个电子，相互作用 $V(r_1-r_2)$，且与费米子球内电子无相互作用，哈密顿量可用质心坐标 $R=(r_1+r_2)/2$ 和相对坐标 $r=r_1-r_2$ 表达为

$$H = -\frac{1}{4m}\frac{\partial^2}{\partial R^2} - 2\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \tag{220}$$

质心运动与相对运动分量，本征波函数的质心运动部分是平面波

$$\Psi(R,r) = \frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{R}}\psi(r) \tag{221}$$

相对运动波函数满足本征方程

$$\left[-2\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r)\right]\psi(r) = \left(E - \frac{q^2}{4m}\right)\psi(r) \tag{222}$$

对 $\psi(r)$ 和 $V(r)$ 进行傅里叶分解

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}g(k), \quad V(r) = \sum_{k'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r}V_{k'} \tag{223}$$

后得到

$$\sum_k\left(2\frac{k^2}{2m} - E + \frac{q^2}{4m}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}g(k) + \sum_{k,k'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(k+k'\right)r}g(k)V_{k'} = 0 \tag{224}$$

一番变形并引入相对费米能得单电子能量 $\varepsilon_k \equiv k^2/2m - E_F$ 后得到

$$\left(2\varepsilon_k + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}\right) g(k) + \sum_{\tilde{k}} V_{k-\tilde{k}} g\left(\tilde{k}\right) = 0 \tag{225}$$

假定如下的相互作用势

$$V_{k-\tilde{k}} = \begin{cases} -g/V & , 0 < \varepsilon_k, \varepsilon_{\tilde{k}} < \omega_c \\ 0 & , \text{otherwise} \end{cases}$$

可得

$$1 = \frac{g}{V} \sum_k \frac{1}{2\varepsilon_k + 2E_F - E + q^2/4m} \tag{226}$$

求和换成积分

$$1 = g \int_0^{\omega_c} \mathrm{d}\varepsilon \frac{N(\varepsilon)}{2\varepsilon + 2E_F - E + q^2/4m} \tag{227}$$

$N(\varepsilon) \approx N(0)$ 给出

$$E = 2E_F + \frac{q^2}{4m} - \left(2\omega_c + 2E_F - E + \frac{q^2}{4m}\right) \mathrm{e}^{-\frac{2}{gN(0)}} \tag{228}$$

弱耦合极限下有

$$E \approx 2E_F + \frac{q^2}{4m} - 2\omega_c \mathrm{e}^{-\frac{2}{gN(0)}} \tag{229}$$

体系最小能量

$$E_{\min} = 2E_F - 2\omega_c \mathrm{e}^{-\frac{2}{gN(0)}} \tag{230}$$

当电子自旋波函数是单重态时（自旋部分交换反对称），此时空间部分波函数交换对称。

当存在吸引相互作用时，动量相反的电子且自旋部分形成自旋单重态的电子会倾向于配对而是体系能量降低，这种电子对称为Cooper pair.

BCS超导的平均场理论

BCS平均场哈密顿量

BCS哈密顿量为

$$H = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \tag{231}$$

假设配对 $V_{k,k'}$ 可写成

$$V_{k,k'} = -\frac{g}{V} \gamma_k \gamma_{k'}, \quad \gamma_k \in \mathbb{R} \tag{232}$$

则哈密顿量化为

$$H = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \frac{g}{V} \left(\sum_k \gamma_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger\right) \left(\sum_{k'} \gamma_{k'} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\right) \tag{233}$$

考虑平均场近似：

$$\begin{aligned} &\left(\sum_k \gamma_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger\right) \left(\sum_{k'} \gamma_{k'} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\right) \\ \approx &\left(\sum_k \gamma_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger\right) \left(\sum_{k'} \gamma_{k'} \left\langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\right\rangle\right) + \left(\sum_k \gamma_k \left\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger\right\rangle\right) \left(\sum_{k'} \gamma_{k'} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\right) - \left(\sum_k \left\langle \gamma_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger\right\rangle\right) \left(\sum_{k'} \gamma_{k'} \left\langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\right\rangle\right) \end{aligned} \tag{234}$$

定义超导能隙

$$\Delta \equiv -\frac{g}{V}\sum_{k'}\gamma_{k'}\left\langle c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right\rangle, \quad \Delta^* = -\frac{g}{V}\sum_{k}\gamma_{k}\left\langle c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right\rangle \tag{235}$$

则

$$\begin{aligned}
&\left(\sum_k \gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right)\\
\approx&\left(\sum_k \gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\left\langle c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right\rangle\right)+\left(\sum_k \gamma_k \left\langle c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right\rangle\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right)-\left(\sum_k \left\langle\gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right\rangle\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\left\langle c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right\rangle\right)\\
=&\frac{-V\Delta}{g}\left(\sum_k \gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right)+\frac{-V\Delta^*}{g}\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right)-\frac{V^2\left|\Delta\right|^2}{g^2}
\end{aligned} \tag{236}$$

于是平均场哈密顿量为：

$$\begin{aligned}
H&=\sum_{k,\sigma}\left(\varepsilon_k-\mu\right)c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}-\frac{g}{V}\left(\sum_k \gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right)\\
&\approx\sum_{k,\sigma}\left(\varepsilon_k-\mu\right)c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}-\frac{g}{V}\Bigg[\left(\sum_k \gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}\left\langle c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right\rangle\right)+\left(\sum_k \gamma_k \left\langle c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right\rangle\right)\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right)-\left(\sum_k \left\langle\gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right\rangle\right)\Bigg(\\
&=\sum_{k,\sigma}\left(\varepsilon_k-\mu\right)c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}-\frac{g}{V}\left[\frac{-V\Delta}{g}\left(\sum_k \gamma_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\right)+\frac{-V\Delta^*}{g}\left(\sum_{k'}\gamma_{k'}c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}\right)-\frac{V^2\left|\Delta\right|^2}{g^2}\right]\\
&=\sum_{k,\sigma}\left(\varepsilon_k-\mu\right)c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}+\sum_k\left(\Delta\gamma_k\right)c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}+\sum_{k'}\left(\Delta^*\gamma_{k'}\right)c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}+\frac{V}{g}\left|\Delta\right|^2
\end{aligned} \tag{237}$$

定义超导配对能隙函数

$$\Delta_k \equiv \Delta\gamma_k, \quad \Delta^*_{k'} = \Delta^*\gamma_{k'} \tag{238}$$

定义相对于化学势的单电子能量

$$\xi_k \equiv \varepsilon_k - \mu \tag{239}$$

最终得到BCS平均场哈密顿量：

$$H=\sum_{k,\sigma}\xi_k c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}+\sum_k \Delta_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}+\sum_{k'}\Delta^*_k c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}+\frac{V}{g}\left|\Delta\right|^2 \tag{240}$$

时间反演不变性对 ξ_k, Δ_k 的要求

$$H=\sum_{k,\sigma}\xi_k c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}+\sum_k \Delta_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}+\sum_{k'}\Delta^*_k c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}+\frac{V}{g}\left|\Delta\right|^2 \tag{241}$$

H 的厄米性给出：

$$\xi_k = \xi_k^* \tag{242}$$

把哈密顿量中的自旋项写开，再利用费米子算符反对易关系，有

$$\begin{aligned}
H&=\sum_{k,\sigma}\xi_k c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma}+\sum_k \Delta_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}+\sum_{k'}\Delta^*_k c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}+\frac{V}{g}\left|\Delta\right|^2\\
&=\sum_{k,\sigma}\xi_k\left(c^\dagger_{k\uparrow}c_{k\uparrow}+c^\dagger_{k\downarrow}c_{k\downarrow}\right)+\sum_k \Delta_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}+\sum_{k'}\Delta^*_k c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}+\frac{V}{g}\left|\Delta\right|^2\\
&=\sum_{k,\sigma}\xi_k\left(c^\dagger_{k\uparrow}c_{k\uparrow}+\left(1-c_{k\downarrow}c^\dagger_{k\downarrow}\right)\right)+\sum_k \Delta_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}+\sum_{k'}\Delta^*_k c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}+\frac{V}{g}\left|\Delta\right|^2\\
&=\sum_k\xi_k+\sum_{k,\sigma}\xi_k\left(c^\dagger_{k\uparrow}c_{k\uparrow}-c_{k\downarrow}c^\dagger_{k\downarrow}\right)+\sum_k \Delta_k c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}+\sum_{k'}\Delta^*_k c_{-k'\downarrow}c_{k'\uparrow}+\frac{V}{g}\left|\Delta\right|^2
\end{aligned} \tag{243}$$

Bogoliubov变换

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{V}{g} |\Delta|^2 + \sum_k \xi_k \\ &\equiv \sum_k \psi_k^\dagger h_k \psi_k + \frac{V}{g} |\Delta|^2 + \sum_k \xi_k \end{aligned} \tag{244}$$

把 h_k 对角化，得到

$$h_k = U_k D_k U_k^\dagger \tag{245}$$

其中

$$U_k = \begin{pmatrix} u_k & -v_k^* \\ v_k & u_k^* \end{pmatrix}, \quad u_k = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right)}, \quad v_k = \frac{\Delta_k^*}{|\Delta_k|} \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right)} \tag{246}$$

$$D_k = \operatorname{diag}(E_k, -E_k), \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2} > 0 \tag{247}$$

定义

$$\begin{pmatrix} \alpha_k \\ \beta_k^\dagger \end{pmatrix} = U_k^\dagger \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \tag{248}$$

则

$$H = \sum_k E_k \left(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k \right) + \frac{V}{g} |\Delta|^2 + \sum_k (\xi_k - E_k) \tag{249}$$

体系能量

$$E = \langle H \rangle = 2 \sum_k E_k f_F(E_k) + \frac{V}{g} |\Delta|^2 + \sum_k (\xi_k - E_k) \tag{250}$$

BCS超导波函数

超导平均场方程

单个费米子模式的熵：

$$s_k = -\left[f_k \ln f_k + (1 - f_k) \ln (1 - f_k) \right] \tag{251}$$

总熵：

$$S = \sum_k 2 s_k \tag{252}$$

自由能：

$$F = E - TS \tag{253}$$

考虑时间反演对称情况，自由能

$$F = \frac{V}{g} \Delta^2 + \sum_k (\xi_k - E_k) - 2T \sum_k \ln\left(1 + \mathrm{e}^{-\beta E_k}\right) \tag{254}$$

序参量是超导配对强度 Δ，

$$\frac{\partial F}{\partial (\Delta^2)} = 0 \tag{255}$$

利用费米分布函数 $f(E) = 1/(\mathrm{e}^{\beta E} + 1)$ 与 $\tanh(x) \equiv (\mathrm{e}^x - \mathrm{e}^{-x}) / (\mathrm{e}^x + \mathrm{e}^{-x})$ 的关系

$$1 - 2f(E_k) = \tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right) \tag{256}$$

可得超导能隙方程

$$1 = \frac{g}{V} \sum_k \frac{\gamma_k^2}{2E_k} \tanh \frac{E_k}{2T} \tag{257}$$

总电子数密度

$$n_c = \frac{1}{V} \sum_k \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \tanh \frac{E_k}{2T}\right) \tag{258}$$

拓扑超导

配对哈密顿量

无自旋/自旋极化费米子的p+ip波态

15 晶格规范理论

玩具模型

Z_2 晶格规范理论（经典）

Z_2 晶格规范理论（量子）

Kitaev的toric-code模型

基态简并度与拓扑序