

# 二次量子化

---

冯琪

中国科学技术大学

邮箱: [feqi@mail.ustc.edu.cn](mailto:feqi@mail.ustc.edu.cn)

---

## 目录

<b>1</b>	<b>二次量子化的引入</b>	<b>1</b>
1.1	占据数表象	1
1.2	生灭算符的基矢变换	2
1.3	场算符	2
<b>2</b>	<b>多体哈密顿量的二次量子化形式</b>	<b>2</b>
2.1	单体算符和两体算符	2
2.2	平面波展开	3
<b>3</b>	<b>二次量子化的应用</b>	<b>5</b>
3.1	凝胶模型	5

---

# 1 二次量子化的引入

二次量子化可以理解为场的量子化，即将 $\psi$ 提升为 $\hat{\psi}$ ，此时可以更好地体现出粒子性，更容易生灭粒子。

实际上引入二次量子化的动机还有一次量子化处理粒子数 $N$ 过大时的不便。对于 $N$ 巨大的体系，即使仅仅想要写下波函数都是不可能的事情，我们需要一套新的语言，一种新的方式来描述并处理这类问题。

## 1.1 占据数表象

在谈论占据数表象时，我们先回忆下谐振子模型。在谐振子模型中，我们可以通过引入升降算符，将哈密顿量改写为

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

且有

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

其中 $a^\dagger$ ,  $a$ 分别为上升算符和下降算符，作用在 $|n\rangle$ 上可得

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

若把 $n$ 解释成某种粒子的粒子数，那么 $a^\dagger$ 的作用就是增加粒子数， $a$ 的作用就是减少粒子数，因此也可把 $a^\dagger$ ,  $a$ 称作产生算符和湮灭算符。此时 $\hat{n}$ 是粒子数算符，给出对应态的粒子数。

对于大量粒子构成的多粒子系统，我们实际上并不关心某个具体的粒子处于哪个具体的态上，我们只关心每个粒子态的占据情况。因此引入占据数表象来考虑由大量粒子构成的体系是相当自然的。

占据数基矢为大量粒子数态的直积构成的多体态

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle$$

其中任意一个 $n_j$ 表示占据 $j$ 状态的粒子数为 $n_j$ ，体系的真空态为 $|0, 0, \dots, 0\rangle$ ，表示每个态上都没有粒子。

当 $n_1, n_2, \dots, n_j$ 取遍所有可能时，对应的 $|n_1, n_2, \dots, n_j\rangle$ 就构成了一个完备的Hilbert空间，用占据数基矢张成的空间我们称之为Fock空间，表示为

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{F}_N \oplus \dots$$

其中 $\mathcal{F}_0$ 代表真空态的空间。

我们就像在谐振子模型中做的那样，引入产生湮灭算符，表示在状态 $j$ 增加一个粒子或减少一个粒子：

$$a_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_j + 1} \zeta^{s_j} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle, \quad a_j |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_j} \zeta^{s_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle$$

其中， $s_j = \sum_{j=1}^{n-1} n_j$ ，对于费米子， $\zeta = -1$ ，且 $n_i = 0, 1$ ，对于玻色子， $\zeta = 1$ ， $n_j$ 没有限制。

同样，我们可以给出产生湮灭算符的对易关系， $[a_j, a_k^\dagger]_{\pm} = \delta_{jk}$ ， $[a_j, a_k]_{\pm} = 0$ ， $[a_j^\dagger, a_k^\dagger]_{\pm} = 0$ ，玻色对易，费米反之。

类比谐振子中的粒子数算符，我们有占据数算符 $\hat{n}_j \equiv a_j^\dagger a_j$ ，且

$$\hat{n}_j |n_1, n_2, \dots\rangle = n_j |n_1, n_2, \dots\rangle$$

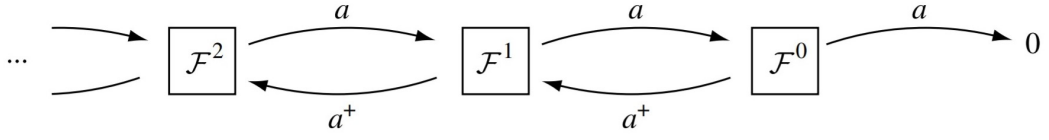


图 1. 可以清楚地看到 $a$ 和 $a^\dagger$ 的作用

## 1.2 生灭算符的基矢变换

在研究具体问题时，我们会在不同表象下工作，为了将不同表象的形式统一起来，我们需要来考虑生灭算符在不同基矢下的变换形式。完备性关系 $1 = \sum_j |j\rangle \langle j|$ 将是我们有力的工具。

考虑在某个表象的基矢 $|j\rangle$ 下， $|j\rangle = a_j^\dagger |0\rangle$ ，即 $|j\rangle$ 可由产生算符 $a^\dagger$ 作用在 $|0\rangle$ 上产生，另一个表象的基矢 $|\lambda\rangle$ 有完备性关系 $\sum_\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda| = 1$ ， $|\lambda\rangle = a_\lambda^\dagger |0\rangle$ ，那么有

$$|j\rangle = \sum_\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda|j\rangle = a_j^\dagger |0\rangle = \sum_\lambda a_\lambda |0\rangle \langle \lambda|j\rangle$$

最终我们得到 $a_j^\dagger = \sum_\lambda \langle \lambda|j\rangle a_\lambda^\dagger$ ，两边取共轭可以得到湮灭算符的变换， $a_j = \sum_\lambda \langle j|\lambda\rangle a_\lambda$

## 1.3 场算符

我们可以定义位置基矢 $|x\rangle$ 下的生灭算符为所谓的场算符，即

$$\hat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle \equiv a^\dagger(x) |0\rangle = |x\rangle$$

场算符的意义我们会在下面看到。场算符的物理意义相当明确，就是表示在空间位置 $x$ 处产生/湮灭一个粒子，我们可以利用算符间的基矢变换，将场算符与不同表象下的生灭算符联系在一起，

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_j \phi_j^*(x) a_j^\dagger, \quad \hat{\psi}(x) = \sum_j \phi_j(x) a_j$$

其中， $\phi_j(x) = \langle x|j\rangle$ 。

我们同样可以很容易地计算得场算符间的对易关系，

$$\left[ \hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y) \right]_\pm = \langle x|y\rangle = \delta(x-y), \quad \left[ \hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y) \right]_\pm = \left[ \hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(y) \right]_\pm = 0$$

## 2 多体哈密顿量的二次量子化形式

### 2.1 单体算符和两体算符

一般的多体哈密顿量可以写成

$$H = \sum_j \left[ -\frac{\nabla_j^2}{2m_j} + U(x_j) \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq m} V(x_j, x_m)$$

这里只考虑到了单体和两体相互作用，实际问题中最常见的就是这两种情形。

首先考虑单体算符  $\hat{O} = \sum_j \hat{o}(x_j)$ 。在对角化的基矢下，可以很容易写出

$$\hat{O} = \sum_j \langle \lambda | \hat{o} | \lambda \rangle a_\lambda^\dagger a_\lambda$$

这里应当注意到  $|\lambda\rangle$  为占据数表象，对  $j$  的求和已经塞入其中。我们可以通过插入完备性关系来进行基矢的变换，最终得到 **一般基矢下的单体算符**

$$\hat{O} = \sum_\alpha \sum_\beta \langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta$$

如果选取大家喜闻乐见的位置空间  $\{|x\rangle\}$  作为基矢，动能项和外势项两者都是对角的，将求和改积分，生灭算符改**场算符**，矩阵元  $\langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle$  改成  $\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right) \delta(x-y)$ ，我们可以得到  $H = \sum_j \left[-\frac{\nabla_j^2}{2m_j} + U(x_j)\right]$  的二次量子化的形式

$$\hat{H} = \int d^d x \int d^d y \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right) \delta(x-y) \hat{\psi}(y) = \int d^d x \hat{\psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right] \hat{\psi}(x)$$

两体算符的改写也是类似的， $V = \frac{1}{2} \sum_{j \neq m} V(x_j, x_m)$  可以改写成

$$\hat{V} = \sum_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle \alpha\beta | v | \delta\gamma \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma$$

**在位置空间中**，一样可以得到

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^d x \int d^d y \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) V(x, y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x)$$

合起来，我们得到了在位置空间中，**多粒子系统的二次量子化哈密顿量**

$$\hat{H} = \int d^d x \hat{\psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right] \hat{\psi}(x) + \frac{1}{2} \int d^d x \int d^d y \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) V(x, y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x)$$

其中场算符间有对易关系：

$$\left[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)\right]_\pm = \delta(x-y), \quad \left[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)\right]_\pm = \left[\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(y)\right]_\pm = 0$$

考虑一个电子系统时，我们需要计入自旋，对应的哈密顿量改写为

$$\hat{H} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int d^d x \hat{\psi}^\dagger_\sigma(x) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(x)\right] \hat{\psi}_\sigma(x) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} \int d^d x \int d^d y \hat{\psi}^\dagger_\sigma(x) \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(y) V(x, y) \hat{\psi}_{\sigma'}(y) \hat{\psi}_\sigma(x)$$

对应的场算符有

$$\left[\hat{\psi}_\sigma(x), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(y)\right]_+ = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(x-y), \quad \left[\hat{\psi}_\sigma(x), \hat{\psi}_{\sigma'}(y)\right]_+ = \left[\hat{\psi}_\sigma^\dagger(x), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(y)\right]_+ = 0$$

## 2.2 平面波展开

固体物理中相当重要的一个话题就是周期结构中波的传播，因此我们考虑在平面波展开下的二次量

子化形式，引入场算符的傅里叶变换及其逆变换，

$$\hat{\psi}_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ikx} \hat{c}_{k\sigma}, \quad \hat{c}_{k\sigma} \int d^d x e^{-ikx} \hat{\psi}_\sigma(x)$$

这里应当注意到这样几个事实，

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \int_0^L dx e^{i(k'-k)x} &= \delta_{k',k}, & \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(x'-x)} &= \delta(x-x') \\ \frac{1}{V} \int d^d x e^{i(k'-k)x} &= \delta_{k,k'}, & \frac{1}{V} \sum_k e^{ik(x-x')} &= \delta(x-x') \end{aligned}$$

前一行的证明是比较容易的，后一行的推广应当是显然的。

利用这些事实，我们可以证明 $\hat{c}_{k\sigma}$ 和 $\hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger$ 间的对易关系，

$$[\hat{c}_{k\sigma}, \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'}, \quad [\hat{c}_{k\sigma}, \hat{c}_{k'\sigma'}] = [\hat{c}_{k\sigma}^\dagger, \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger] = 0$$

我们接着利用平面波展开改写原先得到的二次量子化形态下的哈密顿量。对于动能，我们有

$$\int d^d x \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_\sigma(x) = \sum_{k,k'} \int \frac{d^d x}{V} e^{i(k-k')x} \frac{k^2}{2m} \hat{c}_{k'\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} = \sum_{k,k'} \delta_{k,k'} \frac{k^2}{2m} \hat{c}_{k'\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} = \sum_k \frac{k^2}{2m} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma}$$

这里有个微妙的问题，为什么 $\hat{\psi}_\sigma^\dagger$ 和 $\hat{\psi}_\sigma$ 会放在现在这个位置上，而不是反过来或者紧紧靠在一起，这是我们在原先选取位置空间为基矢 $\{|x\rangle\}$ 时没有详细提到的问题。一个想法是来自于直接的量子化，物体的动能 $T$ 被写为

$$T = \int d^d x \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(x)|^2 \right) = \int d^d x \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^\dagger \cdot \nabla \psi \right) = \int d^d x \psi^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi$$

其中最后一部用到了分部积分。但这也存在着一个问题，那就是为什么拆 $\nabla \psi^\dagger$ 而不是 $\nabla \psi$ ，显然这两者是完全等价的地位，没有理由有谁特殊。如果拆 $\nabla \psi$ ，那我们期望得到对应的动能项应该是 $\int d^d x \hat{\psi}_\sigma(x) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x)$ 而不是 $\int d^d x \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_\sigma(x)$ 。我们可以对势能项思考同样的事情。我个人给出的答案是在其中默认了正规排序(normal ordering)这样的事情，以期消掉那些我们不希望看到的无穷大。因此我们会看到 $\hat{\psi}^\dagger$ 都在最左边， $\hat{\psi}$ 都在最右边这样的事情。

对于外势，我们有

$$\int d^d x \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x) U(x) \hat{\psi}_\sigma(x) = \sum_{k,k'} \int \frac{d^d x}{V} e^{i(k-k')x} U(x) \hat{c}_{k'\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} = \sum_{k,k'} U_{k-k'} \hat{c}_{k'\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma}$$

其中， $U_q = \frac{1}{V} \int d^d x e^{-iqx} U(x)$ 。这种形式下的外势看起来比较整洁，实际上只是将垃圾扫入地毯下，并没有改变其复杂的本质。

~~相互作用部分看起来是更复杂的东西~~，但我们抓住相互作用的关键——作用强度仅与两者距离有关，作用效果体现为动量的交换，这样的话，换元的思路就有了

$$\begin{aligned}
& \int d^d x \int d^d y \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(y) V(x-y) \hat{\psi}_{\sigma'}(y) \hat{\psi}_\sigma(x) = \frac{1}{V^2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \int d x d y e^{-i(k_1 x + k_2 y - k_3 y - k_4 x)} V(x-y) \hat{c}_{k_1 \sigma}^\dagger \hat{c}_{k_2 \sigma'}^\dagger \hat{c}_{k_3 \sigma'} \hat{c}_{k_4 \sigma} \\
& = \frac{1}{V^2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \int d r \frac{d R}{2} e^{i(-k_1 - k_2 + k_3 + k_4) R / 2} e^{i(-k_1 + k_2 - k_3 + k_4) r / 2} V(r) \hat{c}_{k_1 \sigma}^\dagger \hat{c}_{k_2 \sigma'}^\dagger \hat{c}_{k_3 \sigma'} \hat{c}_{k_4 \sigma} \\
& = \sum_{k k' q} \int \frac{d r}{V} e^{-i q r} V(r) \hat{c}_{k+q \sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q \sigma'}^\dagger \hat{c}_{k' \sigma'} \hat{c}_{k \sigma} \\
& = \sum_{k k' q} V_q \hat{c}_{k+q \sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q \sigma'}^\dagger \hat{c}_{k' \sigma'} \hat{c}_{k \sigma}
\end{aligned}$$

其中,  $V_q = \frac{1}{V} \int d^d r e^{-i q x} V(r)$

整理一下, 整个哈密顿量在平面波基矢下可以写成

$$\hat{H} = \sum_{k \sigma} \frac{k^2}{2m} \hat{c}_{k \sigma}^\dagger \hat{c}_{k \sigma} + \sum_{k k' \sigma} U_{k'-k} \hat{c}_{k' \sigma}^\dagger \hat{c}_{k \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k k' q \sigma \sigma'} V_q \hat{c}_{k+q \sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q \sigma'}^\dagger \hat{c}_{k' \sigma'} \hat{c}_{k \sigma}$$

这类哈密顿量常用于讨论空间平移不变系统, 如电子气体, 液氦以及晶格周期势影响不大的晶格电子问题。

## 3 二次量子化的应用

### 3.1 凝胶模型

在处理离子实和电子时, 最简单的想法就是将离子实作为均匀的正电荷背景, 考虑电子在这样的势场中的运动。比较自然的想法就是电子间的直接库伦相互作用会和正电背景相互作用相抵消, 我们接下来用二次量子化的语言来描述这个模型。

体系的哈密顿量由三部分组成, 电子、正背景和正背景与电子间的作用, 即

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b}$$

我们注意到长程库伦相互作用的发散性, 用汤川势暂时代替裸库伦作用, 最后会令压低指数为1。

我们假定正电荷均匀分布且与电子数相同, 因此  $n(\mathbf{x}) = \frac{N}{V}$ , 我们可以写出几个哈密顿量, 正背景的哈密顿量

$$\begin{aligned}
H_b &= \frac{e^2}{2} \int d^3 x d^3 x' \frac{n(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}') e^{-\mu |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = \frac{e}{2} \left( \frac{N}{V} \right)^2 \int d^3 R 4\pi r^2 dr \frac{e^{-\mu r}}{r} \\
&= \frac{e}{2} \left( \frac{N}{V} \right)^2 V \frac{4\pi}{\mu^2} = \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu}
\end{aligned}$$

电子与正背景相作用

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^N \int d^3 x \frac{n(\mathbf{x}) e^{-\mu |\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|} = -e^2 \frac{N}{V} N \int d^3 x \frac{e^{-\mu |\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|} = -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$

电子的哈密顿量

$$\hat{H}_{el} = \sum_{k \sigma} \frac{k^2}{2m} \hat{c}_{k \sigma}^\dagger \hat{c}_{k \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k k' \sigma \sigma' q} V_q \hat{c}_{k+q \sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q \sigma'}^\dagger \hat{c}_{k' \sigma'} \hat{c}_{k \sigma}$$

其中,  $V_q$  为

$$V_q = \frac{e^2}{V} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{-\mu|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|} = \frac{2\pi e^2}{V} \int_0^\infty r^2 dr \frac{e^{-\mu r}}{r} \int_{-1}^1 dx e^{-iqr x} = \frac{1}{V} \frac{4\pi e^2}{\mu^2 + q^2}$$

取  $q = 0$ , 则

$$V_0 = \frac{4\pi e^2}{2\mu^2 V} \sum_{kk'\sigma\sigma'} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} = -\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \left[ \sum_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} - \left( \sum_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} \right) \left( \sum_{k'\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma'} \right) \right] = -\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} (N - N^2)$$

在热力学极限下, 可以忽略负号项,  $V_0 + H_b + H_{el-b} = 0$ , 符合我们的预期。因此, 总的哈密顿量化简为

$$\hat{H}_{el} = \sum_{k\sigma} \frac{k^2}{2m} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{kk'\sigma\sigma'q \neq 0} \frac{4\pi e^2}{q^2} \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q\sigma'} \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma}$$

假定相互作用是小量, 可以用微扰计算, 基态为费米球分布

$$|F\rangle = \prod_{k < k_F} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger |0\rangle = \prod_{k < k_F, \sigma} |n_{k\sigma}\rangle$$

粒子数  $N$  为

$$N = \langle F | \sum_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle = \sum_{k\sigma} \theta(k_F - k) = 2 \frac{4\pi V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$

其中, 费米能为  $E_F = \frac{k_F^2}{2m}$ , 引入特征长度  $r_0$ , 代表每个电子间平均距离, 由  $\frac{V}{N} = \frac{4}{3}\pi r_0^3$  给出, 而我们熟悉的波尔半径为  $a_B = \frac{1}{me^2}$ , 对于一般的金属,  $r_s = \frac{r_0}{a_B} \sim 2 - 6$ , 我们可以利用  $r_s$  这一无量纲量作参数, 来简化我们的计算。

我们可以计算能量的一阶修正,

$$E_g = E_g^0 + \langle F | \hat{H}_{int} | F \rangle$$

其中,  $E_g^0$  为电子动能的无相互作用基态平均值,

$$E_g^0 = \langle F | \sum_{k\sigma} \frac{k^2}{2m} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle = \sum_{k\sigma} \frac{k^2}{2m} \theta(k_F - k) = 2 \frac{4\pi V}{2m(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{V}{2m\pi^2} \frac{k_F^5}{5} = \frac{3}{5} N E_F = 2.21 \frac{N}{r_s^2} \frac{e^2}{2a_B}$$

一阶修正为

$$\langle F | \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma'} \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle = \frac{1}{2V} \sum_{kk'q \neq 0 \sigma\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \langle F | \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma'} \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle$$

考虑到基态的费米球分布, 只有当算符排列成粒子数算符的形态才能有贡献, 因此改写上式,

$$\begin{aligned} \langle F | \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma'} \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle &= \langle F | \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle \delta_{k'-q, k'} - \langle F | \hat{c}_{k+q\sigma} \hat{c}_{k'\sigma'} | F \rangle \langle F | \hat{c}_{k'-q\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle \\ &= \delta_{q=0} \langle F | \hat{c}_{k+q\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} | F \rangle - \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{k'+q, k} \theta(k_F - |\vec{k}|) \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \end{aligned}$$

第一项为直接项, 也叫 **Hartree项**, 第二项为交换项, 也叫 **Fock项**。注意到求和号中的条件  $q \neq 0$ , 则此时没



有直接项，我们只需要关心交换项的计算即可。

$$\langle F | \hat{H}_{int} | F \rangle = -\frac{1}{2V} \sum_{kq \neq 0\sigma} \frac{4\pi e^2}{q^2} \theta(k_F - |\vec{k}|) \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|)$$

作代换  $\vec{k} \rightarrow \vec{p} = \vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}$ ，则

$$\begin{aligned} E_g^1 &= \langle F | \hat{H}_{int} | F \rangle = -\frac{4\pi e^2 V}{(2\pi)^6} \int d^3 q \frac{1}{q^2} \int d^3 p \theta(k_F - |\vec{p} - \frac{1}{2}\vec{q}|) \theta(k_F - |\vec{p} + \frac{1}{2}\vec{q}|) \\ &= -\frac{4\pi e^2 V}{(2\pi)^6} \frac{4}{3} \pi k_F^3 2k_F \int_0^1 dx 4\pi (1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3) = -\frac{e^2}{2a_B} \frac{N}{r_s} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{3}{2\pi} = -0.916 \frac{e^2}{2a_B} \frac{N}{r_s} \end{aligned}$$

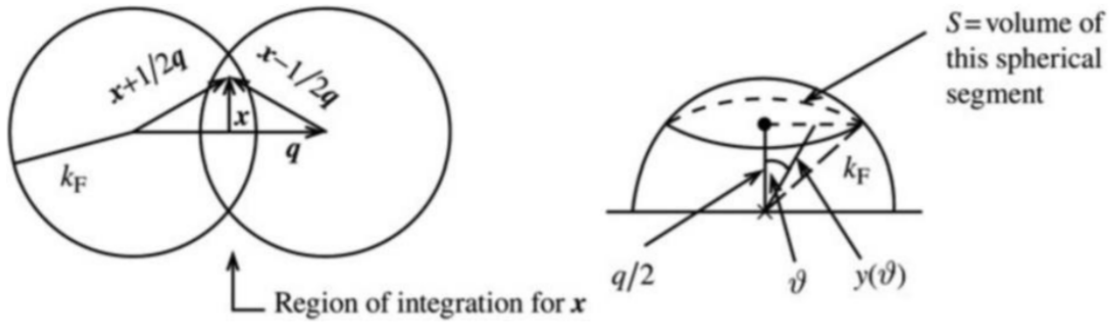


图 2. 积分区域的计算

图中画出了相应的积分区域，我们可以写出

$$\begin{aligned} \int d^3 p \theta(k_F - |\vec{p} - \frac{1}{2}\vec{q}|) \theta(k_F - |\vec{p} + \frac{1}{2}\vec{q}|) &= 2\theta(k_F - \frac{q}{2}) \int_{q/2k_F}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{q/2\cos\theta}^{k_F} dp p^2 \\ &= \frac{4\pi}{3} \theta(k_F - \frac{q}{2}) (k_F^3 - \frac{3}{4}qk_F^2 + \frac{1}{16}q^3) \end{aligned}$$

因此平均每个电子的能量为

$$\frac{E_g}{N} = \frac{1}{N} (E_g^0 + E_g^1) = \frac{e^2}{2a_B} \left[ \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right]$$

把  $r_s$  当变分参数，可以求得  $r_s^{min} = 4.83$ ， $\frac{E_g}{N} = -0.095 \frac{e^2}{2a_B} = -1.23\text{eV}$ ，钠的实验值为  $r_s = 3.36$ ， $\frac{E_g}{N} = -1.13\text{eV}$ 。

## References

- [1] 钟寅. 凝聚态物理学导论
- [2] Altland Simons. *Condensed Matter Field Theory*
- [3] Piers Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*