二次量子化与反铁磁自旋波

2022302021011 毛柯翔

2025 年 3 月 1 日　龙抬头

本 note 为 2025 春武汉大学物理科学与**技术**学院理论物理讨论班的 note. 本次讨论班主要讨论凝聚态理论中有价值的技术以及模型。此为后面各种讨论做铺垫，先回顾**二次量子化**的概念，并简单介绍紧束缚模型。

之后，以二次量子化为基石介绍求解一个模型——反铁磁的 Heisenberg 模型，展示二次量子化的实操运用，介绍其中关键技术 Holstein-Primakoff 变换和 Boglivbov 变换。顺便建立起长程序、元激发、Goldstone 模式的图像。

1　二次量子化

1.1　量子谐振子回顾

一维量子谐振子 Hamiltonian 为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \equiv \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

由正则量子化条件容易验证：

$$[a, a^\dagger] = 1$$

这一代数结构保证算符 $N = a^\dagger a$ 的本征值谱必为自然数集，本征矢记为 $|n\rangle$，有 $N|n\rangle = n|n\rangle$, $n \in \mathbb{N}$

而算符 $a^\dagger, a$ 分别对应升降算符：

$$N(a^\dagger|n\rangle) = (a^\dagger N + [N, a^\dagger])|n\rangle = a^\dagger(N+1)|n\rangle = (n+1)(a^\dagger|n\rangle)$$

$$N(a|n\rangle)|n\rangle = (aN + [N, a])|n\rangle = a(N-1)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$$

进而有 $a^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle \quad , a|n\rangle \propto |n-1\rangle$，计算模长归一化，有：

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

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

1.2 对称化基矢

从多体物理的引入，二次量子化其实不是一个好的名字。更应该说，是在占据数表象下重新叙述了一遍量子力学。我们先看原本我们会怎么描述多体系统。

我们根据量子力学的公设，可以将多个单体的状态空间直积起来，得到多体系统的状态空间。$\mathcal{H} = \bigotimes_n \mathcal{H}_n$，进而原本单体状态空间中的一套完备正交基 $\{|\lambda_n\rangle\}$ 直积起来，就是总多体状态空间的完备基。

$$|\Psi\rangle = |\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_N\rangle$$

这里，我们默认将粒子编号了，编号行为在数学上的体现是单体状态空间直积的顺序。

在统计力学中，发现如果微观粒子可编号，即可区分，那么在计算熵时会出现 Gibbs 悖论。为此我们引入全同粒子假设，解决了这一悖论。

这一假设就要求，我们随意交换粒子的身份（编号），并不会产生另一个状态。即对于 N 元对成群 $S_N, \forall p \in S_N$，取直积总空间 $\mathcal{H}$ 为其表示空间，作用于其上基矢的定义为

$$p|\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_N\rangle := |\lambda_{p(1)}\rangle \otimes |\lambda_{p(2)}\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_{p(N)}\rangle$$

由于实际状态不变，基于量子力学公设，作用效果仅差一个相位：

$$|\lambda_{p(1)}\rangle \otimes |\lambda_{p(2)}\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_{p(N)}\rangle = e^{i\phi}|\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_N\rangle$$

进而这就相当于要求作为多体系统真实状态空间的基矢必须为 S_N 群的一维不可约表示，而其一维表示只有两种。

在不考虑归一化的情况下，有

$$|\Psi_B\rangle = \sum_{p \in S_N} p|\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_N\rangle$$
$$|\Psi_F\rangle = \sum_{p \in S_N} (-1)^{\pi(p)} p|\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_N\rangle$$

分别对应玻色子和费米子，一次对换产生 1,-1 的因子。

考虑归一化，其中有 m 种状态，第 i 种状态有 n_i 个粒子时，有：

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i=1}^{m} n_i!}} \sum_{p \in S_N} \xi^{\pi(p)} p|\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes ... \otimes |\lambda_N\rangle$$

其中 ξ 在玻色系统中取 $\xi = 1$；在费米系统中取 $\xi = -1$。容易注意到，在费米系统中 $n_i = 0, 1$，不然矛盾！

根据习惯，这里求和后的状态默认顺序按照一个约定的顺序排列（如能量从小到大）。

这样虽然理论上可以描述多体系统了，但是表示起来光基矢描述起来就很麻烦了。所以这种描述不方便。

1.3 占据数表象

还是回顾统计力学。全同粒子假设让我们不能再说「这个系统中的哪个粒子处于什么状态」，但是我们可以说「这个系统中有多少个粒子处于什么状态」。

实际上我们之前构造的那个复杂的基（所谓对称化基矢）就是在表此意。那我们何不以此为出发点呢?

定义：一个有 N 个粒子的系统，各个粒子总有 m 种状态（对应单体状态空间中的一组完备正交基），第 i 种状态 (λ_i) 有 n_{λ_i} 个粒子时，这个状态为一个归一化基矢：

$$|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ...\rangle$$

进而所有情况对应的基矢量组成了 N 粒子系统的一套完备正交基，张成空间 $\mathcal{H}_N$

$$\langle n'_{\lambda_1}, n'_{\lambda_2}, ...|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ...\rangle = \delta_{n_{\lambda_1} n'_{\lambda_1}} \delta_{n_{\lambda_2} n'_{\lambda_2}} ...$$

而为了描述变粒子系统，可以把所有粒子数情况的状态空间直和起来，得到总的状态空间

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N$$

称为 Fock 空间。（没有粒子的态叫真空态）

那么一个很自然的问题是，如何实现不同粒子数空间之间的跃迁呢？一个很自然的想法是，构造两者基矢之间的映射。

从量子谐振子中升降算符的效果，可以自然想到构造：

$$a^\dagger_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}, ...\rangle = \sqrt{n_{\lambda_i}+1}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}+1, ...\rangle$$

但是回到原本对称化基矢的描述下，相当于需要多直积一个单体状态空间，这个状态空间应该插在哪?

根据长久以来的规定，我们约定新的空间放在原本所有空间的最前面，而这与我们之前对称化基矢的约定会有一些矛盾（排序约定）。应当要将这个态对换到合适的位置上。

于是升算符定义为：

$$a^\dagger_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}, ...\rangle = \sqrt{n_{\lambda_i}+1}\xi^{s(i)}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}+1, ...\rangle \tag{1}$$

其中 $s(i) = \sum_{j<i} n_{\lambda_j}$，这成为了一种惯用的约定。

取厄米，可以推导出 a_{λ_i} 为降算符：

$$\begin{aligned}\langle n'_{\lambda_1}, n'_{\lambda_2}, ...|a^\dagger_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ...\rangle &= \sqrt{n_{\lambda_i}+1}\xi^{s(i)}\langle n'_{\lambda_1}, n'_{\lambda_2}, ..., n'_{\lambda_i}, ...|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}+1, ...\rangle \\ &= \sqrt{n_{\lambda_i}+1}\xi^{s(i)}\delta_{n_{\lambda_1} n'_{\lambda_1}}\delta_{n_{\lambda_2} n'_{\lambda_2}}...\delta_{n_{\lambda_i}+1, n'_{\lambda_i}}...\end{aligned}$$

而又

$$\langle n'_{\lambda_1}, n'_{\lambda_2}, ...|a^\dagger_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ...\rangle = (\langle n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ...|a_{\lambda_i}|n'_{\lambda_1}, n'_{\lambda_2}, ...\rangle)^*$$

对比上一个式子，有：$(s'(i) = \sum_{j<i} n'_{\lambda_j})$

$$\begin{aligned}\langle n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ...|a_{\lambda_i}|n'_{\lambda_1}, n'_{\lambda_2}, ...\rangle &= \sqrt{n_{\lambda_i}+1}\xi^{s(i)}\delta_{n_{\lambda_1}n'_{\lambda_1}}\delta_{n_{\lambda_2}n'_{\lambda_2}}...\delta_{n_{\lambda_i}+1,n'_{\lambda_i}}\cdots \\ &= \sqrt{n'_{\lambda_i}}\xi^{s'(i)}\delta_{n'_{\lambda_1}n_{\lambda_1}}\delta_{n'_{\lambda_2}n_{\lambda_2}}...\delta_{n'_{\lambda_i}-1,n_{\lambda_i}}\cdots \\ &= \sqrt{n'_{\lambda_i}}\xi^{s'(i)}\langle n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}, ...|n'_{\lambda_1}, n'_{\lambda_2}, ..., n'_{\lambda_i}, ...\rangle\end{aligned}$$

因此推得

$$a_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}, ...\rangle = \sqrt{n_{\lambda_i}}\xi^{s(i)}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}-1, ...\rangle \tag{2}$$

a_{λ_i} 确实是降算符。

即我们定义了生成或湮灭算符，生成或湮灭一个某种状态的粒子。

显然有 $a^\dagger_{\lambda_i}a_{\lambda_i} = N_{\lambda_i}$ 是状态 λ_i 的粒子数算符，有：

$$\begin{aligned}a^\dagger_{\lambda_i}a_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}, ...\rangle &= \sqrt{n_{\lambda_i}}\xi^{s(i)}a^\dagger_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}-1, ...\rangle \\ &= \sqrt{n_{\lambda_i}}\xi^{s(i)}\sqrt{(n_{\lambda_i}-1)+1}\xi^{s(i)}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}-1, ...\rangle \\ &= n_{\lambda_i}|n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, ..., n_{\lambda_i}, ...\rangle\end{aligned}$$

读出体系中 λ_i 状态的粒子。

升降算符的对易关系在谐振子中很关键，这里一样讨论对易关系：

$$[a_{\lambda_i}, a^\dagger_{\lambda_j}]_\xi = \delta_{ij} \tag{3}$$

$$[a_{\lambda_i}, a_{\lambda_j}]_\xi = 0 \tag{4}$$

$$[a^\dagger_{\lambda_i}, a^\dagger_{\lambda_j}]_\xi = 0 \tag{5}$$

其中 $[A, B]_\xi = AB - \xi BA$，因此对 Boson 时为对易子，对 Fermion 时为反对易子。(之后在不产生歧义的情况下，将记 $\lambda_i \mapsto i$)

简单验证：

$$[a^\dagger_i, a^\dagger_j]_\xi|n_1, n_2, ...\rangle = (a^\dagger_i a^\dagger_j - \xi a^\dagger_j a^\dagger_i)|n_1, n_2, ...\rangle$$

而分别计算：

$$\begin{aligned}a^\dagger_i a^\dagger_j|n_1, n_2, ...\rangle &= a^\dagger_i\sqrt{n_j+1}\xi^{s(j)}|n_1, n_2, ..., n_j+1, ...\rangle \\ &= \begin{cases}\sqrt{n_i+1}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+s(j)}|n_1, n_2, ..., n_i+1, ..., n_j+1, ...\rangle & i<j \\ \sqrt{n_i+1}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+1+s(j)}|n_1, n_2, ..., n_j+1, ..., n_i+1, ...\rangle & i>j\end{cases}\end{aligned}$$

从 i, j 地位上的对称性，可以直接看出：

$$a_j^\dagger a_i^\dagger |n_1, n_2, ...\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_i+1}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+1+s(j)}|n_1, n_2, ..., n_i+1, ..., n_j+1, ...\rangle & i<j \\ \sqrt{n_i+1}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+s(j)}|n_1, n_2, ..., n_j+1, ..., n_i+1, ...\rangle & i>j \end{cases}$$

进而由 $\xi^{2n} = 1\, n \in \mathbb{Z}$，有：

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger]_\xi |n_1, n_2, ...\rangle = (a_i^\dagger a_j^\dagger - \xi a_j^\dagger a_i^\dagger)|n_1, n_2, ...\rangle = 0$$

由基任意性与完备性，得：

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger]_\xi = 0$$

在 $i = j$ 时，Boson 情况显然成立，而 Fermion 情况下，对同一状态连作用两次升算符，必然太不存在，映射为零映射，则总有上式成立。

取厄米共轭可以验证：

$$[a_i, a_j]_\xi = 0$$

再验证式 (3)，有：

$$\begin{aligned} a_i a_j^\dagger |n_1, n_2, ...\rangle &= a_i \sqrt{n_j+1}\xi^{s(j)}|n_1, n_2, ..., n_j+1, ...\rangle \\ &= \begin{cases} \sqrt{n_i}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+s(j)}|n_1, n_2, ..., n_i-1, ..., n_j+1, ...\rangle & i<j \\ \sqrt{n_i}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+1+s(j)}|n_1, n_2, ..., n_j+1, ..., n_i-1, ...\rangle & i>j \end{cases} \end{aligned}$$

计算另一个

$$\begin{aligned} a_j^\dagger a_i |n_1, n_2, ...\rangle &= a_j^\dagger \sqrt{n_i}\xi^{s(i)}|n_1, n_2, ..., n_i-1, ...\rangle \\ &= \begin{cases} \sqrt{n_i}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+s(j)-1}|n_1, n_2, ..., n_i-1, ..., n_j+1, ...\rangle & i<j \\ \sqrt{n_i}\sqrt{n_j+1}\xi^{s(i)+s(j)}|n_1, n_2, ..., n_j+1, ..., n_i-1, ...\rangle & i>j \end{cases} \end{aligned}$$

则 $i \neq j$ 时，有：

$$[a_i, a_j^\dagger]_\xi |n_1, n_2, ...\rangle = (a_i a_j^\dagger - \xi a_j^\dagger a_i)|n_1, n_2, ...\rangle = 0$$

对于 $i = j$ 时，分类讨论：Fermion 情况下，$a_i a_i^\dagger$ 与 $a_i^\dagger a_i$ 中必有一个零映射，而另一个是恒等映射，则 $[a_i, a_i^\dagger]_\xi = 1$；

对于 Boson 情况：

$$a_i^\dagger a_i |..., n_i, ...\rangle = n_i |...n_i, ...\rangle$$

同时

$$
\begin{aligned}
a_i a_i^\dagger |...,n_i,...\rangle &= a_i \sqrt{n_i+1} |...,n_i+1,...\rangle \\
&= (n_i+1)|...,n_i,...\rangle
\end{aligned}
$$

则有

$$a_i a_i^\dagger - a_i^\dagger a_i = [a_i, a_i^\dagger] = 1$$

综上有:

$$[a_i, a_j^\dagger]_\xi = \delta_{ij}$$

1.4 升降算符的基变换

实际上由于一个单体空间中的完备基有许多种，比如 $\{|\lambda_i\rangle\}, \{|\mu_j\rangle\}$ 为两个完备基，那么显然有:

$$|\lambda_i\rangle = \sum_j |\mu_j\rangle\langle\mu_j|\lambda_i\rangle$$

根据生成算符的定义，有:

$$a^\dagger_{\lambda_i}|0\rangle = \sum_j \langle\mu_j|\lambda_i\rangle a^\dagger_{\mu_j}|0\rangle$$

于是我们确定有基变换时，生成算符的关系变化:

$$a^\dagger_{\lambda_i} = \sum_j \langle\mu_j|\lambda_i\rangle a^\dagger_{\mu_j} \tag{6}$$

取共轭，有:

$$a_{\lambda_i} = \sum_j \langle\lambda_i|\mu_j\rangle a_{\mu_j} \tag{7}$$

我们可以取两个非常经典的完备基 $\{|\vec{x}\rangle\}, \{|\vec{p}\rangle\}$。在某个位置生成一个粒子的算符称为**场算符** (field operator)

从量子力学我们已知: $\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle \propto e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$，在不同的位置空间，归一化系数不同:

$$|\vec{p}\rangle = \int_\Omega \mathrm{d}\vec{x}\, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle$$

要求:

$$C^2 \int_\Omega |e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}| \mathrm{d}^3\vec{x} = C^2 \int_\Omega \mathrm{d}^3\vec{x} = 1$$

而 $\int_\Omega \mathrm{d}^3\vec{x}$ 正是考虑的位置空间大小，或者说是这个空间的某种测度，计为 V

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

在三维有限空间情况下，V 就是体积；对于一维线条，$V=L$ 是长度；对于 N 个离散格点，$V=N$ 就是格点数。

进而场算符与动量生成算符之间有关系：

$$\psi^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}a^\dagger_{\vec{p}} \equiv \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{8}$$

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}a_{\vec{p}} \equiv \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{9}$$

与场的量子化已经很像了，所以可能在这个意义上，称此为二次量子化。

1.5 单粒子算符

现在考虑将多体系统的哈密顿量按照二次量子化的形式写出来。

考虑一个多体系统中的物理量，有若干从具体的单个粒子的可观测量 $\hat{s}$ 诱导产生的物理量（这里取 single 的首字母），或者说对于每个粒子，都由其状态（取本征态）确定这种物理量的数值：

$$\langle s_i|\hat{s}|s_i\rangle = s_i$$

而对于整个体系，该物理量为各个粒子此物理量的总和。

$$S = \sum_i n_i s_i$$

进而显然对于一个多体体系，二次量子化形式写出单体算符：

$$\hat{S} = \sum_i \hat{N}_i s_i = \sum_i \langle i|\hat{s}|i\rangle a^\dagger_i a_i$$

而如果换一套基，取非 $\hat{s}$ 本征基的一套完备基 $\{|\mu_j\rangle\}$ ，有：

$$\begin{aligned}
\hat{S} &= \sum_i s_i a^\dagger_{s_i} a_{s_i} \\
&= \sum_i s_i\Big(\sum_j \langle\mu_j|s_i\rangle a^\dagger_{\mu_j}\Big)\Big(\sum_k \langle s_i|\mu_k\rangle a_{\mu_k}\Big) \\
&= \sum_{j,k}\langle\mu_j|\Big(\sum_i s_i|s_i\rangle\langle s_i|\Big)|\mu_k\rangle a^\dagger_{\mu_j}a_{\mu_k} \\
&= \sum_{j,k}\langle\mu_j|\hat{s}|\mu_k\rangle a^\dagger_{\mu_j}a_{\mu_k}
\end{aligned}$$

于是我们一般写单体算符作：($s_{ij}=\langle i|\hat{s}|j\rangle$)

$$\hat{S}=\sum_{i,j}s_{ij}a_i^\dagger a_j \tag{10}$$

在对应可观测量的本征态下（对角化），即：

$$\hat{S}=\sum_{i}s_{i}a_i^\dagger a_i \tag{11}$$

对于单粒子算符有一个典型的例子，就是体系的动能 T。哈密顿量中的动能就需要用单体算符写出。

自旋算符的二次量子化形式

对于角动量体系，特别是 1/2 自旋体系，需要进行一点特别的讨论。对于单个粒子的自旋算符，原本有泡利矩阵描述：

$$\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

本身是以 $|\uparrow\rangle,|\downarrow\rangle$ 作为基底，那么有多体系统合自旋，可以这样讨论：对于一个系统有在不考虑

S_z 相当于进行了自旋态的计数，向上为 1，向下为-1：

$$S_z=\frac{\hbar}{2}(a_\uparrow^\dagger a_\uparrow-a_\downarrow^\dagger a_\downarrow)$$

如果还区分除自旋外的状态：

$$S_z=\frac{\hbar}{2}\sum_\lambda a_{\lambda,\uparrow}^\dagger a_{\lambda,\uparrow}-a_{\lambda,\downarrow}^\dagger a_{\lambda,\downarrow}$$

而由于 $S_x=\frac{1}{2}(S_++S_-)\quad S_y=\frac{1}{2i}(S_+-S_-)$，$S_+$ 将向下转为向上，S_- 将向上转为向下：

$$S_+=\hbar a_\uparrow^\dagger a_\downarrow$$

$$S_-=\hbar a_\downarrow^\dagger a_\uparrow$$

则有：

$$S_x=\frac{\hbar}{2}\sum_\lambda a_{\lambda,\uparrow}^\dagger a_{\lambda,\downarrow}+a_{\lambda,\downarrow}^\dagger a_{\lambda,\uparrow}$$

$$S_y=\frac{\hbar}{2}\sum_\lambda -ia_{\lambda,\uparrow}^\dagger a_{\lambda,\downarrow}+ia_{\lambda,\downarrow}^\dagger a_{\lambda,\uparrow}$$

进而显然整体可以写为形式：

$$\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\sum_{\lambda,s,s'}a_{\lambda,s}^\dagger\vec{\sigma}_{ss'}a_{\lambda,s'} \tag{12}$$

1.6 双粒子算符

还有一些可观测量，需要通过两个粒子才能定义。比如我们考虑写哈密顿量的时候，势能项常常就是描述两个粒子之间的相互作用，必须有两个粒子才能定义（与顺序无关）。

对于两个粒子，有可观测量 $\hat{d}$（取 double 首字母），那么其本征基由两个粒子确定，记为 $|i\rangle|j\rangle \equiv |i,j\rangle$（这里已完成对称化，只是简记），有：

$$d_{ij} = \langle i,j|\hat{d}|i,j\rangle$$

进而总多体体系该量，我们也要求将这些量加和起来，有：

$$\begin{aligned}
D &= \sum_{i<j} n_i n_j d_{ij} + \sum_i C_{n_i}^2 d_{ii} \\
&= \frac{1}{2!}\sum_{i\neq j} n_i n_j d_{ij} + \frac{1}{2}\sum_i n_i(n_i-1)d_{ii} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i,j} n_i(n_j-\delta_{ij})d_{ij}
\end{aligned}$$

考虑将这个结果写为二次量子化的形式，有：

$$\begin{aligned}
n_i(n_j-\delta_{ij}) &= a_i^\dagger a_i(a_j^\dagger a_j - \delta_{ij}) \\
&= a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} \\
&= \xi a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j + a_i^\dagger [a_i, a_j^\dagger]_\xi a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} \\
&= \xi^2 a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i + a_i^\dagger a_j \delta_{ij} - a_i^\dagger a_j \delta_{ij} \\
&= a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i
\end{aligned}$$

那么就有：

$$\hat{D} = \frac{1}{2}\sum_{i,j} a_i^\dagger a_j^\dagger d_{ij} a_j a_i \tag{13}$$

而自然地，推广到任意基上，有：

$$\begin{aligned}
\hat{D} &= \frac{1}{2}\sum_{i,j} a_{\lambda_i}^\dagger a_{\lambda_j}^\dagger d_{ij} a_{\lambda_j} a_{\lambda_i} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i,j}\Big(\sum_k \langle\mu_k|\lambda_i\rangle a_{\mu_k}^\dagger\Big)\Big(\sum_l \langle\mu_l|\lambda_i\rangle a_{\mu_l}^\dagger\Big) d_{ij}\Big(\sum_{k'}\langle\lambda_j|\mu_{k'}\rangle a_{\mu_{k'}}\Big)\Big(\sum_{l'}\langle\lambda_i|\mu_{l'}\rangle a_{\mu_{l'}}\Big) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{k,l,k',l'}\langle\mu_k|\langle\mu_l|\Big(\sum_{i,j} d_{ij}|\lambda_i\rangle|\lambda_j\rangle\langle\lambda_i|\langle\lambda_j|\Big)|\mu_{l'}\rangle|\mu_{k'}\rangle a_{\mu_k}^\dagger a_{\mu_l}^\dagger a_{\mu_{k'}} a_{\mu_{l'}} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{k,l,k',l'}\langle\mu_k,\mu_l|\Big(\sum_{i,j} d_{ij}|\lambda_i,\lambda_j\rangle\langle\lambda_i,\lambda_j|\Big)|\mu_{l'},\mu_{k'}\rangle a_{\mu_k}^\dagger a_{\mu_l}^\dagger a_{\mu_{k'}} a_{\mu_{l'}}
\end{aligned}$$

进而一般基底时，有：

$$\hat{D} = \frac{1}{2}\sum_{i,j} a_i^\dagger a_j^\dagger d_{ijkl} a_l a_k \tag{14}$$

其中 $d_{ijkl} = \langle i,j|\hat{d}|k,l\rangle$

只与相对位置有关的相互作用势

位势作为算符 $\hat{V}$，有：

$$V(\vec{r},\vec{r'}) = \langle \vec{r},\vec{r'}|\hat{V}|\vec{r},\vec{r'}\rangle$$

而相互作用势只与相对位置有关时：

$$V(\vec{r},\vec{r'}) = V(\vec{r}-\vec{r'})$$

有位置空间中总势能的二次量子化形式：

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\int \mathrm{d}^3\vec{r'}\psi^\dagger(\vec{r})\psi^\dagger(\vec{r}')V(\vec{r}-\vec{r'})\psi(\vec{r'})\psi(\vec{r})$$

这时如果转到动量空间：

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{k}',\vec{p}'} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{p}}^\dagger \langle \vec{k},\vec{p}|\hat{V}|\vec{k}',\vec{p}'\rangle a_{\vec{p}'} a_{\vec{k}'}$$

而有：($\hbar = 1$)

$$\begin{aligned}
\langle \vec{k},\vec{p}|\hat{V}|\vec{k}',\vec{p}'\rangle &= \int \mathrm{d}^3\vec{r}\int \mathrm{d}^3\vec{r'}\langle \vec{k},\vec{p}|\vec{r},\vec{r'}\rangle\langle \vec{r},\vec{r'}|\hat{V}|\vec{r},\vec{r'}\rangle\langle \vec{r},\vec{r'}|\vec{k}',\vec{p}'\rangle \\
&= \frac{1}{V^2}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\int \mathrm{d}^3\vec{r'}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}e^{-\vec{p}\cdot\vec{r'}}V(\vec{r}-\vec{r'})e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}e^{i\vec{p}'\cdot\vec{r'}} \\
&= \frac{1}{V^3}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\int \mathrm{d}^3\vec{r'}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}e^{-\vec{p}\cdot\vec{r'}}\int \mathrm{d}^3\vec{q}\,V_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r'})}e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}e^{i\vec{p}'\cdot\vec{r'}} \\
&= \frac{1}{V^3}\int \mathrm{d}^3\vec{q}\,V_{\vec{q}}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,e^{i(\vec{q}+\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}}\int \mathrm{d}^3\vec{r'}\,e^{i(\vec{p}'-\vec{q}-\vec{p})\cdot\vec{r'}} \\
&= \frac{1}{V}\int \mathrm{d}\vec{q}\,V_{\vec{q}}\delta_{\vec{q}+\vec{k}'-\vec{k}}\delta_{\vec{p}'-\vec{q}-\vec{p}}
\end{aligned}$$

则有：

$$\begin{aligned}
\hat{V} &= \frac{1}{2V}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{k}',\vec{p}',\vec{q}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{p}}^\dagger V_{\vec{q}} a_{\vec{p}'} a_{\vec{k}'}\delta_{\vec{q}+\vec{k}'-\vec{k}}\delta_{\vec{p}'-\vec{q}-\vec{p}} \\
&= \frac{1}{2V}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{p}}^\dagger V_{\vec{q}} a_{\vec{p}+\vec{q}} a_{\vec{k}-\vec{q}} \\
&= \frac{1}{2V}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}}^\dagger V_{\vec{q}} a_{\vec{p}} a_{\vec{k}}
\end{aligned}$$

于是 $V_{\vec{q}}$ 的物理意义就是明显的了，即作为相互作用传递 $\vec{q}$ 的动量，即发生改变动量 $\vec{q}$ 的散射。

$V_{\vec{q}}$ 的计算就是进行一次傅里叶变换：

$$V_{\vec{q}} = \int V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \mathrm{d}^3\vec{r} \tag{15}$$

对于常用的库伦势，

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

可以作该傅里叶变换，得到一个相对常用的结果。这里使用一个 trick，加一个收敛因子 $e^{-\mu r}$（其实就是对 Yukawa 势进行讨论）：

$$\begin{aligned}
V_{\vec{q}} &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_\infty \frac{e^{-\mu r}}{r} e^{-iqr\cos\theta} \mathrm{d}^3\vec{r} \\
&= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{+\infty} r^2 \mathrm{d}r \int_0^{\pi} \frac{e^{-\mu r}}{r} e^{-iqr\cos\theta} \sin\theta \mathrm{d}\theta \\
&= \frac{e^2}{2\varepsilon_0}\int_0^{+\infty} r e^{-\mu r} \mathrm{d}r \int_{-1}^{1} e^{-iqr\cos\theta} \mathrm{d}(\cos\theta) \\
&= \frac{e^2}{2\varepsilon_0}\int_0^{+\infty} r e^{-\mu r} \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} \mathrm{d}r \\
&= \frac{e^2}{2i\varepsilon_0 q}\int_0^{+\infty} e^{-(\mu - iq)r} - e^{-(\mu+iq)r} \mathrm{d}r \\
&= \frac{e^2}{\varepsilon_0(q^2+\mu^2)}
\end{aligned}$$

取 $\mu \to 0$，就得到库伦势常用情况：

$$V_{\vec{q}}^{ee} = \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2}$$

综上，关键的结果是

$$\hat{V} = \frac{1}{2V}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}} a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}} V_{\vec{q}} a_{\vec{p}} a_{\vec{k}} \tag{16}$$

自旋相互作用

实际上对于考虑自旋相互作用时常写的项：

$$H = J\vec{S}\cdot\vec{S}'$$

仿照单体算符结果，可以写出多体时二次量子化形式：

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3\vec{r} \int \mathrm{d}^3\vec{r'} \sum_{\alpha,\alpha',\beta,\beta'} J(\vec{r},\vec{r'}) \vec{S}_{\alpha\beta}\cdot\vec{S}_{\alpha'\beta'} a^\dagger_\alpha(\vec{r}) a^\dagger_{\alpha'}(\vec{r'}) a_{\beta'}(\vec{r'}) a_\beta(\vec{r}) \tag{17}$$

经过上述讨论，可以用类似的方法发展更多体的算符，如三体算符...

2 紧束缚模型简介

二次量子化的第一个好处，就是方便我们写体系的哈密顿量。除了上述单体算符和双体算符可以用于写出哈密顿量，在凝聚态理论中，常常近似只考虑最近邻的作用。

考虑在一个晶格上，对于某个晶格附近局域的波函数作为一个晶格附近的态（Wannier 函数的想法），可以对不同晶格定义态的生成和湮灭算符。

对于最近邻近似，就是哈密顿量只有至多晶格上最相邻的格子之间有相互作用。

比如常见的单原子链模型（相邻格点距离 a ）：

$$H=\epsilon_0\sum_n c_n^\dagger c_n - t\sum_n c_{n+1}^\dagger c_n + h.c.$$

双原子链模型：

$$H=V_a\sum_n a_n^\dagger a_n + V_b\sum_n b_n^\dagger b_n - t\sum_n a_n^\dagger b_n + a_n^\dagger b_{n-1} + h.c.$$

由于晶格有周期性，由 Bloch 定理，本征态总可以用 Bloch 动量标记。于是自然的，求把哈密顿量对角化时就是以波矢状态为基底时。所以对于紧束缚模型，做傅里叶变换总能实现对角化，得到形如 (11) 式的形式。

例解单原子链：定义傅里叶变换

$$c_k^\dagger=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n c_n^\dagger e^{-ikna} \quad c_k=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n c_n e^{inka}$$

则有逆变换：

$$c_n^\dagger=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k c_k^\dagger e^{inka} \quad c_n=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k c_k e^{-inka}$$

于是哈密顿量变换为：

$$\begin{aligned}
H&=\epsilon_0\sum_n\Big(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k c_k^\dagger e^{inka}\Big)\Big(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k'} c_{k'} e^{-ink'a}\Big) - t\sum_n\Big(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k c_k^\dagger e^{i(n+1)ka}\Big)\Big(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k'} c_{k'} e^{-ink'a}\Big)\\
&=\epsilon_0\sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'}\frac{1}{N}\sum_n e^{in(k-k')a} - t\sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'} e^{ika}\frac{1}{N}\sum_n e^{in(k-k')a} + h.c.\\
&=\epsilon_0\sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'}\delta_{k,k'} - t\sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'} e^{ika}\delta_{k,k'} + h.c.\\
&=\epsilon_0\sum_{k,k'} c_k^\dagger c_k - t\sum_{k,k'} c_k^\dagger c_k e^{ika} + h.c.\\
&=\sum_k(\epsilon_0-2t\cos(ka))c_k^\dagger c_k
\end{aligned}$$

进而单原子链能带为

$$E(k)=\epsilon_0-2t\cos(ka)$$

3 反铁磁自旋波

接下来介绍另外一个二次量子化的运用，那就是将自旋这个物理量映射为玻色子或费米子的个数。在历史上，这实际上帮助解出了自旋波和反铁磁自旋波。

映为玻色子的思想引出了 Holstein-Primakoff 变换，映为费米子的思想引出了 Jodan-Wigner 变换。时间原因，我们为体现其思想，选择讲反铁磁 Heisenberg 模型在大自旋情况下的求解，用类似的思想，可以在自旋 1/2 情况下映为费米子；同样可解铁磁 Heisenberg 模型。

而最早提出正确处理反铁磁 Heisenberg 模型方法的人，正是 1952 年的 Anderson。

3.1 反铁磁 Heisenberg 模型

对于一个周期性格点体系，格点上有总自旋同为 S 的粒子（为了简单，讨论大自旋情况）。取最近邻近似，要求系统哈密顿量为：

$$H = J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad J > 0$$

取周期性晶格（如一维链），但规避 Magnetic frustration 的情况 (见 Griffith Problem 4.67)。

不像铁磁情况，即 $J < 0$ 时，基态可以直接猜出来，只要全体自旋同向即可。但 $J > 0$ 时，基态就不好猜了，我们可以先假设，基态是自旋交替指的：

$$|\psi\rangle_{\text{Neel}} = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \ldots \uparrow\downarrow \ldots\rangle$$

这种态称为 Neel 态，我们标记向上的粒子为 A 粒子，向下的为 B 粒子。

为了考察 Neel 态是否为基态，我们想办法将哈密顿量改写得更多与 z 分量有关：

$$\begin{aligned}
\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j &= S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \\
&= S_i^z S_j^z + \frac{1}{4}(S_i^+ + S_i^-)(S_j^+ + S_j^-) - \frac{1}{4}(S_i^+ - S_i^-)(S_j^+ - S_j^-) \\
&= S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)
\end{aligned}$$

该模型哈密顿量为：

$$H = J \sum_{<i,j>} S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \tag{18}$$

显然可以看出，Neel 态至少不是给定 i, j 时 $S_i^+ S_j^-, S_i^- S_j^+$ 中某一个算符的本征态。所以 Neel 态不是系统本征态。所以这个问题从一开始求基态起就很难。

3.2 Holstein-Primakoff 变换

虽然 Neel 态不是本征态，但是确实是一个能量很低的态。这里将其映射为一个更熟悉的情况，映为玻色子，有：

对于 A,B 粒子，定义粒子数：

$$n_{iA} = S - S_{iA}^z \quad n_{jB} = S + S_{jB}^z$$

这样定义一下，Neel 态映为玻色体系中的态：

$$|\psi\rangle_{\text{Neel}} = |000...00...\rangle$$

而这时，S^-, S^+ 从之前自旋升降算符的意义变为粒子数升降算符的意义，有：

$$S_i^{\pm}|S_i^z\rangle = \sqrt{(S \mp S_i^z)(S \pm S_i^z + 1)}|S_i^z \pm 1\rangle$$

对于 A 粒子，$S_{iA}^- \to a_i^\dagger$

$$\begin{aligned} S_{iA}^-|S_{iA}^z\rangle &= \sqrt{(S + S_{iA}^z)(S - S_{iA}^z + 1)}|S_{iA}^z - 1\rangle \\ &= \sqrt{(2S - n_{iA})(n_{iA} + 1)}|S_{iA}^z - 1\rangle \end{aligned}$$

对比

$$a_i^\dagger|n_{iA}\rangle = \sqrt{n_{iA} + 1}|n_{iA} + 1\rangle$$

得 A 粒子映射对应关系

$$\begin{cases} S_{iA}^- = \sqrt{2S - n_{iA}}\, a_i^\dagger \\ S_{iA}^+ = \sqrt{2S - n_{iA}}\, a_i \\ S_{iA}^z = S - a_i^\dagger a_i \end{cases}$$

又注意到对于低能态 $n_{iA} << S$，取近似规避算符开根：

$$\begin{cases} S_{iA}^- \approx \sqrt{2S}\, a_i^\dagger \\ S_{iA}^+ \approx \sqrt{2S}\, a_i \end{cases} \tag{19}$$

此时，为了保证角动量算符的自洽，在近似下更精确地：$(S_c^2 \equiv S(S+1))$

$$\begin{aligned} S_{iA}^z &= \Big(\hat{S}^2 - \frac{1}{2}(S_{iA}^+ S_{iA}^- + S_{iA}^- S_{iA}^+)\Big)^{1/2} \\ &\approx S_c\Big(1 - \frac{1}{4S_c^2} \cdot 2S(a_i^\dagger a_i + a_i a_i^\dagger)\Big) \\ &= S_c - \frac{S}{2S_c}(2a_i^\dagger a_i + 1) \\ &\approx S_c - a_i^\dagger a_i \end{aligned}$$

进而我们取

$$\begin{cases} S_{iA}^- = \sqrt{2S}\, a_i^\dagger \\ S_{iA}^+ = \sqrt{2S}\, a_i \\ S_{iA}^z = S_c - a_i^\dagger a_i \end{cases} \tag{20}$$

这个变换即 H-P 变换。下面证明这个变换下真的映为了玻色子。

注意到：

$$[S_{iA}^+, S_{iA}^-] = 2S_{iA}^z = 2(S - n_{iA}) \approx 2S$$

得关系：$\begin{cases} [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \\ [a_i, a_j] = 0 \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \end{cases}$，可见确实映为玻色子。

对于 B 粒子，$S_{jB}^+ \to b_j^\dagger$

$$\begin{aligned} S_{jB}^+ |S_{jB}^z\rangle &= \sqrt{(S - S_{jB}^z)(S + S_{jB}^z + 1)}|S_{jB}^z - 1\rangle \\ &= \sqrt{(2S - n_{jB})(n_{jB} + 1)}|S_{jB}^z - 1\rangle \end{aligned}$$

完全类似地，取：

$$\begin{cases} S_{jB}^+ = \sqrt{2S - n_{jB}}\, b_j^\dagger \\ S_{jB}^- = \sqrt{2S - n_{jB}}\, b_j \\ S_{jB}^z = b_j^\dagger b_j - S \end{cases}$$

考虑低能态有近似：

$$\begin{cases} S_{jB}^+ = \sqrt{2S}\, b_j^\dagger \\ S_{jB}^- = \sqrt{2S}\, b_j \\ S_{jB}^z = b_j^\dagger b_j - S_c \end{cases} \tag{21}$$

类似也可以验证：$\begin{cases} [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij} \\ [b_i, b_j] = 0 \\ [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0 \end{cases}$，是玻色子。

现在我们不难写出进行 H-P 变换后，系统的 Hamiltonian：

$$
\begin{aligned}
H &= J\sum_{<i,j>} S^z_{iA}S^z_{jB} + \frac{1}{2}(S^+_{iA}S^-_{jB} + S^-_{iA}S^+_{jB}) \\
&= J\sum_{<i,j>} (S_c - a_i^\dagger a_i)(b_j^\dagger b_j - S_c) + \frac{1}{2}\cdot 2S(a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger) \\
&= J\sum_{<i,j>} -S_c^2 + S_c(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j) + S(a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger) - a_i^\dagger a_i b_j^\dagger b_j \\
&= -2JNzS_c^2 + JS\sum_{<i,j>} \frac{S_c}{S}(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j) + a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger - J\sum_{<i,j>} a_i^\dagger a_i b_j^\dagger b_j
\end{aligned}
$$

舍弃最后的 4 阶项（难以计算）并 $S_c/S \approx 1$，得到 H-P 变换近似后的哈密顿量：(z 为配位数)

$$
H = -2JNzS_c^2 + 2JSz\Big(\sum_i a_i^\dagger a_i + \sum_j b_j^\dagger b_j + \frac{1}{2z}\sum_{<i,j>} a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger\Big) \tag{22}
$$

由于这时一个周期性晶格系统，有离散平移对称性。进行傅里叶变换可以帮助我们对角化，所以定义：

$$
a_{\vec{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N/2}}\sum_i a_i^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}
$$

$$
b_{\vec{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N/2}}\sum_j b_j^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_j}
$$

从紧束缚模型简介中的计算，可知：

$$
\sum_i a_i^\dagger a_i = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}
$$

$$
\sum_j b_j^\dagger b_j = \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}
$$

计算另外两项：

$$
\begin{aligned}
\sum_{<i,j>} a_i b_j &= \frac{2}{N}\sum_{<i,j>}\Big(\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}\Big)\Big(\sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{R}_j}\Big) \\
&= \sum_{\vec{k},\vec{k}'} a_{\vec{k}} b_{\vec{k}'}\Big(\frac{2}{N}\cdot 2\sum_{i,\delta} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_i+\vec{R}_\delta)}\Big) \\
&= 2\sum_{\vec{k},\vec{k}'} a_{\vec{k}} b_{\vec{k}'}\sum_\delta e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{R}_\delta}\Big(\frac{2}{N}\sum_i e^{-i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{R}_i}\Big) \\
&= 2\sum_{\vec{k},\vec{k}'} a_{\vec{k}} b_{\vec{k}'}\sum_\delta e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{R}_\delta}\delta_{\vec{k},-\vec{k}'} \\
&= 2\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}\sum_\delta e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta}
\end{aligned}
$$

进而有

$$\frac{1}{2z}\sum_{<i,j>}a_ib_j=\sum_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}}a_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}$$

其中

$$\gamma_{\vec{k}}:=\frac{1}{z}\sum_{\delta}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta} \tag{23}$$

而又

$$\begin{aligned}\frac{1}{2z}\sum_{<i,j>}a_i^\dagger b_j^\dagger&=\Big(\frac{1}{2z}\sum_{<i,j>}a_ib_j\Big)^\dagger\\&=\Big(\sum_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}}a_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}\Big)^\dagger\\&=\sum_{\vec{k}}\gamma_{-\vec{k}}a_{\vec{k}}^\dagger b^\dagger_{-\vec{k}}=\sum_{\vec{k}}\gamma^*_{\vec{k}}a_{\vec{k}}^\dagger b^\dagger_{-\vec{k}}\end{aligned}$$

因此得到傅里叶变换后的哈密顿量：

$$H=-2JNzS_c^2+2JSz\sum_{\vec{k}}a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}+b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}+\gamma_{\vec{k}}a_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}+\gamma^*_{\vec{k}}a^\dagger_{\vec{k}}b^\dagger_{-\vec{k}} \tag{24}$$

可以观察到每一项都保证了准动量守恒，符合物理直觉。

3.3 Bogliubov 变换

但是很可惜，这傅里叶变换后，并没有完美地实现对角化，还存在一些奇怪的交叉项。这些交叉项导致不能用 $\vec{k}$ 状态的 A 或 B 粒子数来对角化，因为粒子数不守恒。

观察到交叉项实际上同时湮灭或生成两个粒子，虽然没有粒子数守恒，但是粒子数的宇称（奇偶性）是守恒的，这个系统还是有 Z_2 对称性的。

对于这样的系统，有一个比较普适的技术实现对角化，即 Bogliubov 变换以实现对角化。如果关心量子计算，量子光学中的 Rabi 模型就是这种情况，不用旋波近似的 Rabi 模型的解析解也就是使用了 Bogliubov 变换求解。这里对这种变换进行介绍。

观察哈密顿量，有：

$$H=-2JNzS_c^2+2JSz\sum_{\vec{k}}a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}+b_{-\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}+\gamma_{\vec{k}}a_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}+\gamma^*_{\vec{k}}a^\dagger_{\vec{k}}b^\dagger_{-\vec{k}}$$

后面的二次型可以写为：

$$\begin{bmatrix}a_{\vec{k}}^\dagger & b_{-\vec{k}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \gamma_{\vec{k}}\\ \gamma^*_{\vec{k}} & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{\vec{k}}\\ b^\dagger_{-\vec{k}}\end{bmatrix}$$

这必定是厄米矩阵，根据复谱定理，一定可以对角化，本征值为实数，所以只要对 $a_{\vec{k}}, b^\dagger_{-\vec{k}}$ 进行冲线性组合，一定可以标准化这个二次型，并且新的基依然是正交的。取 $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}} \in \mathbb{C}$

$$\alpha_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}} \tag{25}$$

$$\alpha^\dagger_{\vec{k}} = u^*_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} - v^*_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} \tag{26}$$

再组合另一类基 $\beta_{\vec{k}}$ ，期望其与 $\alpha_{\vec{k}}$ 正交，于是取：

$$\beta_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} - v_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} \tag{27}$$

$$\beta^\dagger_{\vec{k}} = u^*_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}} - v^*_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \tag{28}$$

可以计算：

$$\begin{aligned}
[\alpha_{\vec{k}}, \beta_{\vec{k}}] &= [u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}}, u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} - v_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}}] \\
&= -u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} ([a_{\vec{k}}, a^\dagger_{\vec{k}}] + [b^\dagger_{-\vec{k}}, b_{-\vec{k}}]) \\
&= -u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (1-1) = 0
\end{aligned}$$

不妨验证：$[a_{\vec{k}}, a^\dagger_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$

$$\begin{aligned}
[a_{\vec{k}}, a^\dagger_{\vec{k}'}] &= [\frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_i a_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}, \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{i'} a^\dagger_{i'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{R}_{i'}}] \\
&= \frac{2}{N} \sum_{i,i'} [a_i, a^\dagger_{i'}] e^{i(\vec{k}\cdot\vec{R}_i - \vec{k}'\cdot\vec{R}_{i'})} = \frac{2}{N} \sum_i e^{i\vec{R}_i\cdot(\vec{k}-\vec{k}')} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}
\end{aligned}$$

可见上述变换构造了两类新的无关粒子，而期待新的粒子是 Boson，有：

$$\begin{aligned}
[\alpha_{\vec{k}}, \alpha^\dagger_{\vec{k}}] &= [u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}}, u^*_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} - v^*_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}] \\
&= |u_{\vec{k}}|^2 [a_{\vec{k}}, a^\dagger_{\vec{k}}] + |v_{\vec{k}}|^2 [b^\dagger_{-\vec{k}}, b_{-\vec{k}}] \\
&= |u_{\vec{k}}|^2 - |v_{\vec{k}}|^2
\end{aligned}$$

这就要求：

$$|u_{\vec{k}}|^2 - |v_{\vec{k}}|^2 = 1 \tag{29}$$

是 Boson Bogliubov 变换的要求。

　　我们希望通过这个变换实现对角化，令为形式：

$$H = \text{const.} + \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}} (\alpha^\dagger_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + \beta^\dagger_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}})$$

这样就可以定出 $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$：先用这个假设形式计算

$$\begin{aligned}[\alpha_{\vec{k}}^\dagger, H] &= \lambda_{\vec{k}}[\alpha_{\vec{k}}^\dagger, \alpha_{\vec{k}}^\dagger\alpha_{\vec{k}}] \\ &= -\lambda_{\vec{k}}\alpha_{\vec{k}}^\dagger \\ &= -\lambda_{\vec{k}}(u_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}}^\dagger - v_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}})\end{aligned}$$

再用实际 (22) 式进行计算：($\omega_0 \equiv 2JSz\,, \omega_1 \equiv 2JSz\gamma_{\vec{k}}$)

$$\begin{aligned}[\alpha_{\vec{k}}^\dagger, H] &= u_{\vec{k}}^*[a_{\vec{k}}^\dagger, H] - v_{\vec{k}}^*[b_{-\vec{k}}, H] \\ &= 2JSz\Big(u_{\vec{k}}^*[a_{\vec{k}}^\dagger, a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \gamma_{\vec{k}} a_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}] - v_{\vec{k}}^*[b_{-\vec{k}}, b_{-\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}} + \gamma_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}^\dagger]\Big) \\ &= -u_{\vec{k}}^*(\omega_0 a_{\vec{k}}^\dagger + \omega_1 b_{-\vec{k}}) - v_{\vec{k}}^*(\omega_0 b_{-\vec{k}} + \omega_1^* a_{\vec{k}}^\dagger)\end{aligned}$$

则对比两个计算结果，有：

$$\begin{cases}\omega_0 u_{\vec{k}}^* + \omega_1^* v_{\vec{k}}^* = \lambda_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^* \\ \omega_1 u_{\vec{k}}^* + \omega_0 v_{\vec{k}}^* = -\lambda_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^*\end{cases}$$

此时 $u_{\vec{k}}^*, v_{\vec{k}}^*$ 有非零解要求：

$$\begin{vmatrix}\omega_0 - \lambda_{\vec{k}} & \omega_1^* \\ \omega_1 & \omega_0 + \lambda_{\vec{k}}\end{vmatrix} = 0$$

进而有：

$$\lambda_{\vec{k}}^{\pm} = \pm\sqrt{\omega_0^2 - |\omega_1|^2} = \pm 2JSz\sqrt{1 - |\gamma_{\vec{k}}|^2}$$

根据物理意义，这个系统存在基态，就要求：$\lambda_{\vec{k}} \geq 0$，则：(显然 $|\gamma_{\vec{k}}| \leq 1$)

$$\lambda_{\vec{k}} = 2JSz\sqrt{1 - |\gamma_{\vec{k}}|^2} \tag{30}$$

在这种情况下，二次型变为：

$$\begin{bmatrix}\alpha_{\vec{k}}^\dagger & \beta_{\vec{k}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \lambda_{\vec{k}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}}^\dagger\end{bmatrix}$$

进而有：

$$\begin{aligned}H &= -2JNzS_c^2 + \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}}(\alpha_{\vec{k}}^\dagger\alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}^\dagger) \\ &= -2JNzS_c^2 + 2JSz\sum_{\vec{k}}\sqrt{1 - |\gamma_{\vec{k}}|^2}(\alpha_{\vec{k}}^\dagger\alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger\beta_{\vec{k}} + 1)\end{aligned}$$

即最终变换完的哈密顿量为：

$$H = -2NJzS(S+1) + 2JSz\sum_{\vec{k}}\sqrt{1 - |\gamma_{\vec{k}}|^2}(\alpha_{\vec{k}}^\dagger\alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger\beta_{\vec{k}} + 1) \tag{31}$$

3.4 反铁磁自旋波

因此基态能量为：

$$E_0 = -2NJzS(S+1) + 2JSz\sum_{\vec{k}}\sqrt{1-|\gamma_{\vec{k}}|^2} \tag{32}$$

而有低能激发（元激发）——反铁磁自旋波，由 $\alpha^\dagger_{\vec{k}}\alpha_{\vec{k}}, \beta^\dagger_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}$ 标记磁子 ($\vec{k}$ 标记着波的属性)。这两类波能量是简并的，其能带关系：

$$\omega_{\vec{k}} = 2JSz\sqrt{1-|\gamma_{\vec{k}}|^2} \tag{33}$$

对能带进行分析：取 $|\vec{k}| = k \to 0$：

$$\begin{aligned}
\gamma_{\vec{k}} &= \frac{1}{z}\sum_\delta e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta} \\
&\approx \frac{1}{z}\sum_\delta 1 + i\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta - \frac{1}{2}(\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta)^2 \\
&= 1 + \frac{i}{z}\vec{k}\cdot\sum_\delta\vec{R}_\delta - \frac{1}{2z}\sum_\delta(\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta)^2 \\
&= 1 - \frac{1}{2z}\sum_\delta(\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta)^2
\end{aligned}$$

进而：

$$\begin{aligned}
1-|\gamma_{\vec{k}}|^2 &\approx 1 - \left(1 - \frac{1}{z}\sum_\delta(\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta)^2\right) \\
&= \frac{1}{z}\sum_\delta(\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta)^2 \propto k^2
\end{aligned}$$

此时我们就发现：

$$\omega_{\vec{k}} \propto k \tag{34}$$

这说明色散关系是线性的，对应于无质量粒子。于是这就是一个 Goldstone 定理的典型例子。

在场论中，有 Nambu-Goldstone 定理：

每个自发对称性破缺都对应一个无质量的玻色子。

反铁磁自旋波，对应于磁子 (magnon)。是破坏时间反演对称性（产生了磁场）以及自旋指向 $SU(2)$ 对称性，产生的一种 Goldstone mode，即无质量玻色子。

同时这种 mode 也作为一种破坏反铁磁中长程有序的元激发。但是这种长程序是否在低温时总存在呢？对于磁系统有 Honherberg-Mermin-Wagner 定理，保证维数 $d \leq 2$ 时不存在长程序。但目前前沿的研究发现某些磁二维材料可以违反这个定理，说明其有局限性。若感兴趣可自行了解。