计算物理 $\begin{cases} \text{Bogoliubov transformation.} \\ \text{k-space model.} \end{cases}$

葵明

复习上一节课 TB ⇒ lattice.

今天目的：TB ⇔ k-space H_k.

$\begin{cases} \psi(x,t) \text{ 的物理定义} \Leftrightarrow x\text{点处, } t\text{时的振幅/位移.} \\ \pi(x,t) \text{ 的物理定义} \Leftrightarrow \text{- - - - - 速度/动量.} \end{cases}$

$\left.\begin{cases} [\psi(x,t), \pi(y,t)] = i\hbar\delta(x-y) \\ [x, p] = i\hbar \end{cases} \quad \begin{matrix} \pi = i\hbar\psi^\dagger \;☆ \\ \psi(x,t) = \sum_n C_n(t)\varphi_n(x) \end{matrix} \right\} \Leftrightarrow [C_n, C_m^\dagger] = \delta_{nm}$

☆ C_n 到底是什么

算子.

Hilbert空间.

单粒子.

Hilbert space $|1000\cdots\rangle = |1\rangle$
$|0 1 \cdots\cdots\rangle = |2\rangle$

而 $\sum_i |i\rangle\langle i| = 1$.

P.S.

$H = \sum_n t_{nm} C_n^\dagger C_m.$

C_n 是什么？

⇕

$H = \sum_{nm} t_{nm} z_n^* z_m.$

$H = (z_1^*, \ldots, z_n^*)(t)\begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}$

☆ 不同 z_n, z_n^* 是复数，C_n, $C_n^\dagger$ 是算子.

☆ 相同 都是物理量

☆对称性 ⇒ Spectra $\begin{cases} D \to D \\ \exists \to P \end{cases}$

Bogoliubov 系数

$\psi = \sum_i \xi_i c_i^\dagger |0\rangle$

$= \sum_i \xi_i |i\rangle$

☆ $H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j = (c_1^\dagger c_2^\dagger \cdots c_N^\dagger) H \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$

$H\psi = E\psi \Leftrightarrow [H]\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_N \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_N \end{pmatrix}$

$H = \sum_{ij}\sum_{ss'} t_{ij}^{ss'} c_{is}^\dagger c_{js'} \Leftrightarrow [H]$，矩阵形式，上节线已做.

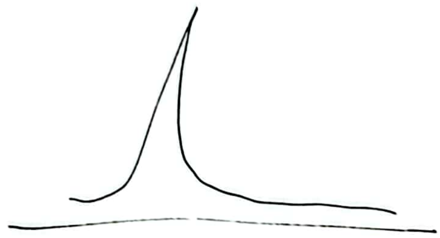
接下：1) TB → k-space

2) · pairing (B, F) ⇒ Bogoliubov 变换.

· F

· B.

☆ Anderson localization, disorder



方法(与其他一样)：简单 ⇒ 复杂

理论：去掉多余的东西，从简单开始，一项一项加回去.

首先考虑 Spinless, 1D.

$H = -\mu \sum_i c_i^\dagger c_i + t \sum_i c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.$

具有平移对称性. $c_i \to c_{i+k}$.

$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik\cdot R_i} c_k$, Fourier 变换.

check. c_i 是 B/F ⟺ c_k 也是 B/F.

☆ $N=\sum_i c_i^\dagger c_i = \sum_k c_k^\dagger c_k$. (物理直觉)

$$\sum_i c_i^\dagger c_i = \sum_{kk'} \frac{1}{N}\sum_i e^{i(k-k')} c_{k'}^\dagger c_k = \sum_{kk'} \delta_{kk'} c_{k'}^\dagger c_k = \sum_k c_k^\dagger c_k$$

☆ 和对应多项: $-\mu\sum_i c_i^\dagger c_i = -\mu\sum_k c_k^\dagger c_k$.

$-t\sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c) \to$ 动能.

$$= -t\sum_{kq}\sum_i e^{-ik\cdot R_i + iq\cdot R_{i+1}} c_k^\dagger c_q.$$

$R_{i+1} = R_i + a$

$$= -t\sum_{kq} e^{iqa} \frac{1}{N}\sum_i e^{-ik\cdot R_i + iq\cdot R_i} c_k^\dagger c_q + h.c.$$

$$= -t\sum_k (e^{ika} c_k^\dagger c_k + h.c.)$$

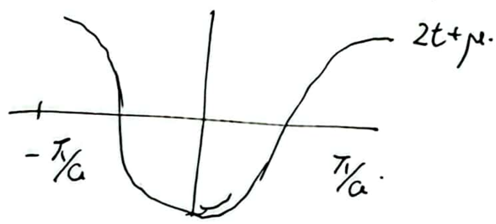
$$= -2t\sum_k \cos(ka)\, c_k^\dagger c_k.$$

$$\mathcal{H} = \sum_k (-2t\cos ka + \mu) c_k^\dagger c_k.$$

⇑

已经对角化

TB → k-space.



对应关系 $\begin{cases} \sum_i c_i^\dagger c_i \Leftrightarrow \sum_k c_k^\dagger c_k. \\ \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c) \Leftrightarrow -2t\sum_k \cos(ka) c_k^\dagger c_k. \end{cases}$

对于多分量也是一样的.

类比.

$$\sum_k -2\cos(k\,2a)\, c_k^\dagger c_k \longrightarrow \sum_i \left(c_i^\dagger c_{i+2} + c_{i+2}^\dagger c_i\right)$$

$\Uparrow$

$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i e^{-ikR_i} c_i$ 带入也可求解。

2d spinless.

先把 $x \to k_x$.

再把 $y \to k_y$

也可直接 Fourier 变换.

$$-t\left(c_{i,j}^\dagger c_{i+1,j} + c_{i,j}^\dagger c_{i-1,j} + c_{i,j}^\dagger c_{i,j+1} + c_{i,j}^\dagger c_{i,j-1} + h.c.\right)$$
$$+\mu\sum_{ij} c_{i,j}^\dagger c_{i,j}$$

① $\sum_{ij} c_{ij}^\dagger c_{ij} = \sum_{k_x k_y} c_{k_x,k_y}^\dagger c_{k_x,k_y}$.

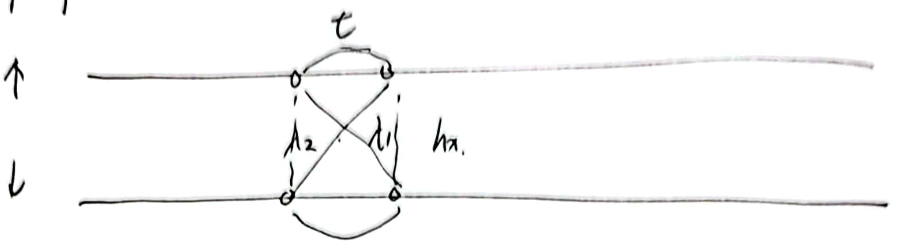
$$c_{ij} = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}}\sum_{k} e^{i(k_x R_i + k_y R_j)} c_{k_x k_y} = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}}\sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} c_{\vec{k}}$$

② 而 $\sum_{ij}\left(c_{ij}^\dagger c_{i+1,j} + h.c.\right) = \frac{1}{N_x N_y}\sum_{\vec{k},\vec{q}}\sum_{ij} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_{ij} + i\vec{q}\cdot\vec{R}_{i+1,j}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{q}}$

$$= \sum_{k_x,k_y} c_{k_x,k_y}^\dagger c_{k_x,k_y}\cdot\left(2\cos(k_x a_x)\right)$$

$$H = \sum_{k_x k_y}\left(\mu - 2t\cos(k_x a_x) - 2t\cos(k_y a_y)\right) c_{k_x,k_y}^\dagger c_{k_x,k_y}$$

1d spinful.



$$H = -t\sum_{i\sigma}\left(c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i+1\sigma} + h.c.\right) + \lambda_1 c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{i+1\downarrow} + \lambda_2 c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{i+1\uparrow}$$

$$+ h.c$$

$$+ \sum_{i\sigma}\mu_{i\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma} + h_x\sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{i\downarrow} + h.c$$

★不要一次性处理所有项.

★一项一项处理.

① $\sum_{i\sigma}\left(c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i+1\sigma} + h.c.\right) = 2\sum_k \cos(ka)\, c_{k\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}$

② $\sum_{i\sigma}\mu_\sigma c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma} = \sum_{k\sigma}\mu_\sigma c_{k\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma}$

③ $\sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{i\downarrow} = \sum_k c_{k\uparrow}^{\dagger}c_{k\downarrow}$

④ $\sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{i+1\downarrow} = \sum_k e^{ika}\, c_{k\uparrow}^{\dagger}c_{k\downarrow}$.

⑤ $\sum_i c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{i+1\uparrow} = \sum_k e^{ika}\, c_{k\downarrow}^{\dagger}c_{k\uparrow}$

$$\Rightarrow H = \sum_{k\sigma}\left(-2t\cos(ka) + \mu_\sigma\right)c_{k\sigma}^{\dagger}c_{k\sigma} + h_x\sum_k\left(c_{k\uparrow}^{\dagger}c_{k\downarrow} + h.c\right).$$

$$+\sum_k\left(\lambda_1 e^{ika}c_{k\uparrow}^{\dagger}c_{k\downarrow} + \lambda_2 e^{ika}c_{k\downarrow}^{\dagger}c_{k\uparrow} + h.c.\right)$$

$$= \sum_k H_k.$$

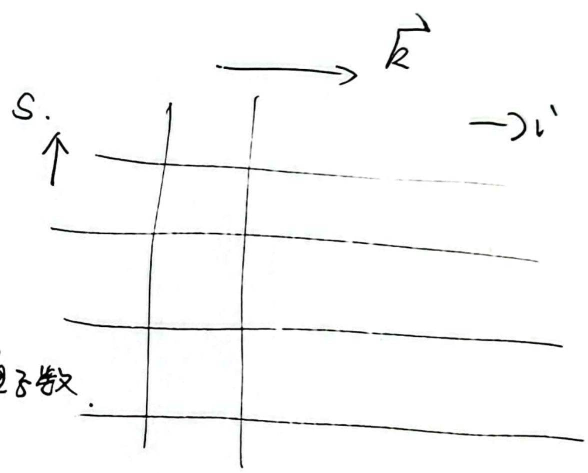
$$H = \left(C_{k\uparrow}^{\dagger}\ C_{k\downarrow}^{\dagger}\right)\begin{pmatrix} & 2\times 2 & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_{k\uparrow} \\ C_{k\downarrow} \end{pmatrix}$$

TB ⟺ $N\times N$ 矩阵 ⟺ 很难求解

$\downarrow k$

$H = \sum_k H_k$ 　 H_k 是一个 2×2 矩阵，可以方便的求解.

更复杂的模型.



$$\sum_i C_{is}^{\dagger} C_{js}$$

$$= \sum_k e^{ik\cdot la} C_{ks}^{\dagger} C_{ks}$$

个相位.　k是好的量子数.

距离相位. $\boxed{la = j - i}$

H_k: $(2S+1)\times(2S+1)$ 维矩阵

---

pair 以及 Bogoliubov 对角化.

二次型 ⟺ $H = \Xi_n^{\dagger} t_{nm} \Xi_n$, $\Xi_n \in \mathbb{C}$.

$$H = \sum_{nm} \Xi_n^{\dagger} t_{nm} \Xi_n + \Delta_{nm} \underline{\underline{\Xi_n^{\dagger}\Xi_m^{\dagger}}} + h.c.$$

哪些系统中可能会有这些情况.

1) $H = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2)}_{\hbar\omega(a_1^{\dagger}a_1 + a_2^{\dagger}a_2 + 1)} + \underbrace{\lambda x_1 x_2}_{x \sim (a + a^{\dagger})}$

$$H = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) + \lambda(a_1 + a_1^\dagger)(a_2 + a_2^\dagger)$$

$$\Rightarrow = \hbar\omega(\underline{a_1^\dagger a_1} + \underline{a_2^\dagger a_2}) + \lambda(\underline{\underline{a_1 a_2}} + \underline{a_1 a_2^\dagger} + \underline{a_1^\dagger a_2} + \underline{\underline{a_1^\dagger a_2^\dagger}})$$

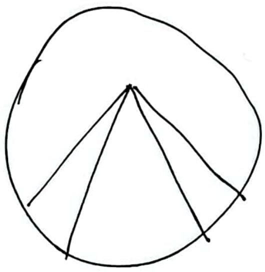
—— 是正常项 $a^\dagger a$ $aa^\dagger$

== 是反常项 aa, $a^\dagger a^\dagger$ 同时产生，同时湮灭.

① Fermion.

Cooper pairs. $\underline{\underline{c_{k\uparrow}c_{-k\downarrow}}}$.

为什么会有这个？



略：可以看超导的BCS理论.

$$H = -\sum t(c_n^\dagger c_{n+1} + h.c.) + \underline{\underline{\Delta c_n^\dagger c_{n+1}^\dagger}} + h.c.$$

$$+ \mu \sum c_n^\dagger c_{n+1}.$$ p-wave superconductor

(⇒ B/F.

最简单的例子.

$$H = \omega(a^\dagger a + b^\dagger b) + \lambda(a^\dagger b + b^\dagger a) + \Delta a^\dagger b^\dagger + \Delta ba.$$

a, b 可以是 F, B，只有两个算符.

☆ 如何写矩阵形式？

一个尝试 $H = (a^\dagger\ b^\dagger)\begin{pmatrix}\omega & \lambda \\ \lambda & \omega\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a \\ b\end{pmatrix}$, $\boxed{a^\dagger b^\dagger \text{ 去哪了？}}$

10个参数.

$$H=(a^+,b^+,a,b)\left(\begin{array}{c|c} & \\ \hline & \end{array}\right)\begin{pmatrix}a\\ b\\ a^+\\ b^+\end{pmatrix}$$

而原方程只有3个系数.

这说明有无穷多的矩阵可以给出上述的矩阵.

一个更简单的例子

$$H=\omega a^+a$$

$$H=(a^+\ a)\left[\begin{array}{c|c} x & 0 \\ \hline 0 & \omega-x \end{array}\right]\begin{bmatrix}a\\ a^+\end{bmatrix}+\overset{(x-\omega)}{\cancel{(\omega-x)}}$$

对于任意 x 都成立.

☆ 4×4 形式 ⇒ 技巧.

☆ 技巧的原因. ⇒ 保持 $B\to B$, $F\to F$.
统计的性质.

$$a_i = u_{ij}\gamma_j + v_{ij}^*\gamma_j^+$$

$$(a,\ a^+)\to\underline{(\gamma,\ \gamma^+)}$$

$$\begin{array}{cc} B & B \\ F & F \end{array}$$