

高等量子力学

孙昌璞

中物院研究生院/北京计算科学研究中心

Beijing Computational Science Research Center (CSRC)



第四章

电磁场中的带电粒子

版权归孙昌璞院士和中物院研究生院所有！
翹享学术在线传播专用，未经许可请勿转载！

第4章：电磁场中的带电粒子

4.1 电磁场与带电粒子相互作用

4.2 二维平面中的带电粒子：朗道能级与量子霍尔效应

4.3 二能级原子与量子光场相互作用的基本模型

4.4 相对论带电粒子的量子力学与自旋

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

*4.7 费米子二次量子化应用：非理想电子气基态与超导的BCS理论

本章学习要点：对称性与相互作用

1. 局域对称性如何决定相互作用形式
—— $U(1)$ 规范场理论与电磁场
2. 光与原子相互作用
——J-C模型
3. 洛伦兹对称性（相对论协变性）如何决定微观粒子的基本属性？

4. 1 电磁场与带电粒子相互作用

带电粒子在电磁场中运动满足洛伦兹力方程

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = q \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right)$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \phi, \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}.$$

对 $\vec{A}$ 和 ϕ 作规范变换

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla f(r, t)$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} f(r, t),$$

若场强保持不变

$$\vec{E} \rightarrow \vec{E}' = \vec{E}, \quad \vec{B} \rightarrow \vec{B}' = \vec{B}.$$

那么在电磁势的定域规范变换下，场与带电粒子的运动方程形式也不变。

4.1 电磁场与带电粒子相互作用

经典物理中的规范不变性分析推广到量子力学：

带电自由粒子的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi$$

作依赖时空点 (x, t) 的局域位相变换（定域 $U(1)$ 规范变换）

$$\psi'(x, t) = \psi(x, t) e^{iqf(x, t)}$$

几率诠释要求粒子在时空中的概率密度不变

$$P_\psi(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = |\psi'(x, t)|^2 = P_{\psi'}(x, t)$$

4.1 电磁场与带电粒子相互作用

$f(x, t)$ 依赖于时空点，保几率密度的变换改变运动方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(x, t) = -q\dot{f}(x, t)\psi'(x, t) + \frac{1}{2m} [\hat{p} - \hbar q \nabla f(x, t)]^2 \psi'$$

为了使运动方程不变，将 $\hat{p}$ 视为正则动量，并在薛定谔方程中补充上电磁场：

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla \rightarrow \hat{p}' = \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} = -i\hbar \left(\nabla - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A} \right)$$

4.1 最小耦合原理

带电粒子的薛定谔方程变为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A}(x, t) \right)^2 + q\phi(x, t) \right] \psi(x, t)$$

上述变换引入了电磁相互作用项，亦称最小耦合原理。

以下将证明：

规范变换和波函数局域位相变换的共同效果，使得薛定谔方程形式不变。

上述联合变换称为 $U(1)$ 规范，即电磁场中的薛定谔方程具有 $U(1)$ 定域规范不变性。

4.1 电磁相互作用 $U(1)$ 规范不变性证明

取 $\hbar = c = 1$, 经过定域规范变换

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla f(x, t), \quad \phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial f(x, t)}{\partial t}$$

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{iqf(x, t)}\psi$$

那么

$$(\hat{p} - q\vec{A}')\psi' = [-i\hbar\nabla - q(\vec{A} + \nabla f)]e^{iqf}\psi = e^{iqf}(\vec{p} - q\vec{A})\psi$$

$$\Rightarrow (\hat{p} - q\vec{A}')^2\psi' = e^{iqf}(\vec{p} - q\vec{A})^2\psi;$$

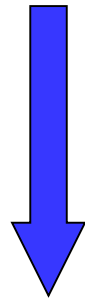
$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi' - q\phi'\psi' = -q\frac{\partial f}{\partial t}e^{iqf}\psi + i\frac{\partial\psi}{\partial t}e^{iqf} - q\left(\phi - \frac{\partial f}{\partial t}\right)e^{iqf}\psi$$

$$= e^{iqf}\left(i\frac{\partial}{\partial t}\psi - q\phi\psi\right);$$

4.1 电磁相互作用 $U(1)$ 规范不变性证明

由此可以验证经过以上变换

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[\frac{1}{2m} (\hat{p} - q\vec{A})^2 + q\phi \right] \psi$$



$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla f \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \partial f / \partial t \\ \psi &\rightarrow \psi' = e^{iqf} \psi\end{aligned}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi' = \left[\frac{1}{2m} (\hat{p} - q\vec{A}')^2 + q\phi' \right] \psi'$$

因而薛定谔方程是规范不变的。

4.2 二维平面中带电粒子：朗道能级与量子霍尔效应

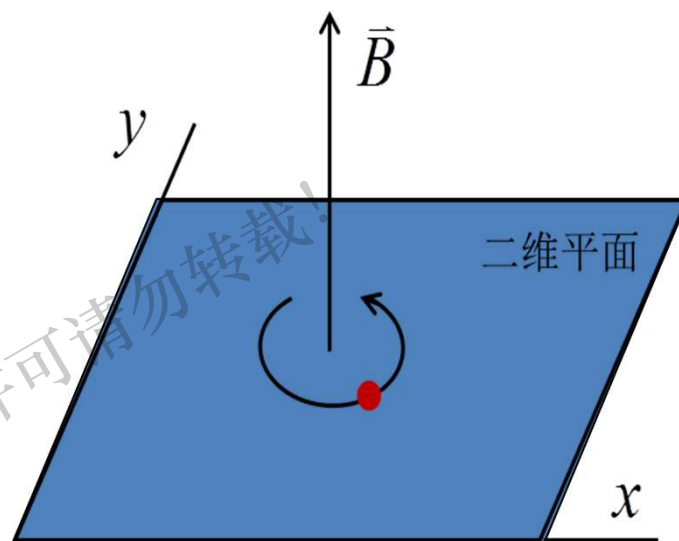
平面 xy 内运动的带电粒子(例如一个电子)，在垂直于平面的磁场 $\vec{B} = (0,0,B)$ 作用下，做回旋运动。若不计电子自旋，体系的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2$$

朗道规范下的电磁势

$$\vec{A} = (-By, 0, 0)$$

$$\Rightarrow \vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -By & 0 & 0 \end{vmatrix} = \hat{k}B$$



4.2 二维平面中带电粒子：朗道能级与量子霍尔效应

$$H = \frac{1}{2M} \left(p_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m}$$

$$[p_x, H] = 0 \Rightarrow p_x \text{ 是守恒量}$$

p_x 和 H 的共同本征函数设为

$$\psi(x, y) = e^{\frac{ipx}{\hbar}} \psi(y)$$

$\psi(y)$ 满足 y 方向上谐振子势的本征方程

$$H_y \psi(y) \equiv \left[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(\frac{eB}{c} y - p \right)^2 \right] \psi(y) = E \psi(y)$$

4.2 二维平面中带电粒子：朗道能级与量子霍尔效应

$$H_y = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(\frac{eB}{c} y - p \right)^2 = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_y^2 \left(y - \frac{cp}{eB} \right)^2$$

谐振子中心在 $y_0 = cp/eB$ ，Larmor 回旋频率 $\omega_y = eB/mc$ 。

中心的位置由电子沿 x 方向运动的动量决定。由此可见，磁场 $\vec{B}$ 变强时，回旋中心更接近于坐标原点，而且回旋的速度越来越快。

朗道能级

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega_n$$

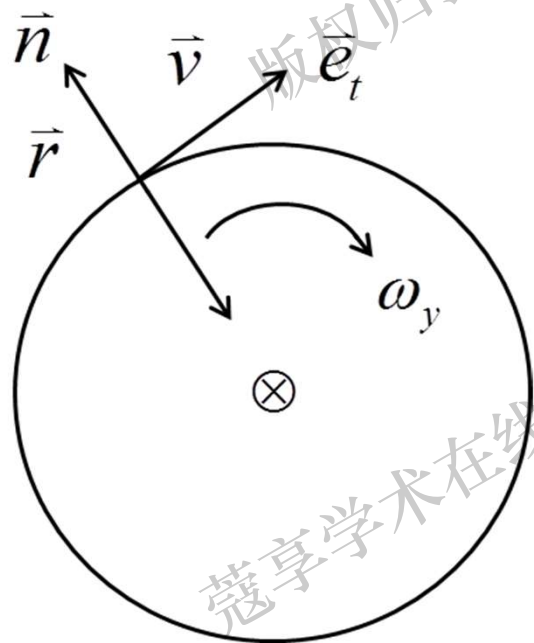
$$\psi_{np}(x, y) = e^{ipx/\hbar} \Phi_n(y)$$

4.2 二维平面中带电粒子：朗道能级与量子霍尔效应

给定量子数 n ，能级高度简并：所有 p 有相同能量

$$E_n(p) = (n + 1/2)\hbar\omega_y$$

$\omega_y = eB/mc$ 是经典带电粒子在磁场 $\vec{B}$ 中的角频率



电子在平面电磁场中做回旋运动：

洛伦兹方程

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B}$$

粒子加速度

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{eB}{cm} v \vec{n}$$

4.2 二维平面中带电粒子运动：对称规范

对称规范下的电磁势

$$\vec{A} = \left(-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0 \right)$$

$$\Rightarrow \vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -\frac{1}{2}By & \frac{1}{2}Bx & 0 \end{vmatrix} = \vec{k}B$$

哈密顿量描述 $x - y$ 方向相互耦合的谐振子

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y + \frac{eB}{2c} x \right)^2$$

4.2 二维平面中带电粒子运动：对称规范

无量纲化的哈密顿量

$$H = \frac{1}{2} \left(-i\partial_x - \frac{1}{2}y \right)^2 + \frac{1}{2} \left(-i\partial_y + \frac{1}{2}x \right)^2$$

引入复变量

$$z = x + iy, \quad \bar{z} = x - iy$$

相应的微分

$$\partial_z = \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y), \quad \partial_{\bar{z}} = \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y)$$

有基本对易关系

$$[z, \partial_z] = [\bar{z}, \partial_{\bar{z}}] = -1, \quad [\bar{z}, \partial_z] = [z, \partial_{\bar{z}}] = 0$$

习题

在不用上述变换时，直接求解耦合谐振子

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y + \frac{eB}{2c} x \right)^2$$

并分析磁场 B 很大时，系统能谱结构变化。

翹享学术在线传播专用，未经许可请勿转载！

4.2 二维平面中带电粒子运动：对称规范

定义产生消灭算子

$$a = \sqrt{2} \left(\partial_z + \frac{1}{4} \bar{z} \right)$$

$$a^\dagger = \sqrt{2} \left(-\partial_{\bar{z}} + \frac{1}{4} z \right)$$

则 $[a, a^\dagger] = 1$, 且

$$H = -2\partial_z\partial_{\bar{z}} + \frac{1}{8}z\bar{z} + \frac{1}{2}z\partial_z - \frac{1}{2}\bar{z}\partial_{\bar{z}} = a^\dagger a + \frac{1}{2}$$

4.2 二维平面中带电粒子运动：对称规范

本征函数可构造如下

$$\psi_{Nm} = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{\dagger N} \psi_{0m}$$

$$\psi_{0m} = c_m \bar{z}^m e^{-\frac{1}{4}z\bar{z}} = c_m (x - iy)^m e^{-\frac{1}{4}(x^2+y^2)}, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

其中

$$\psi_{00} = e^{-\frac{1}{4}z\bar{z}} = e^{-\frac{1}{4}(x^2+y^2)}$$

ψ_{0m} 是系统的基态, 满足

$$a\psi_{0m} = 0$$

4.2 二维平面中带电粒子运动：对称规范

证明：

$$ae^{-\frac{1}{4}z\bar{z}} = \sqrt{2} \left(\partial_z - \frac{1}{4}\bar{z} \right) e^{-\frac{1}{4}z\bar{z}} = 0$$

$$[a, \bar{z}] = \sqrt{2} \left[\partial_z - \frac{1}{4}\bar{z}, \bar{z} \right] = 0$$

则对任意 m ,

$$[a, \bar{z}^m] = 0$$

因而

$$a\psi_{0m} = 0$$

从而有简并的本征态

$$\psi_{Nm} = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{\dagger N} \psi_{0m}$$

(整数) 量子霍尔效应(quantum Hall effect)

经典霍尔效应

运动电子在 x 方向上受力为

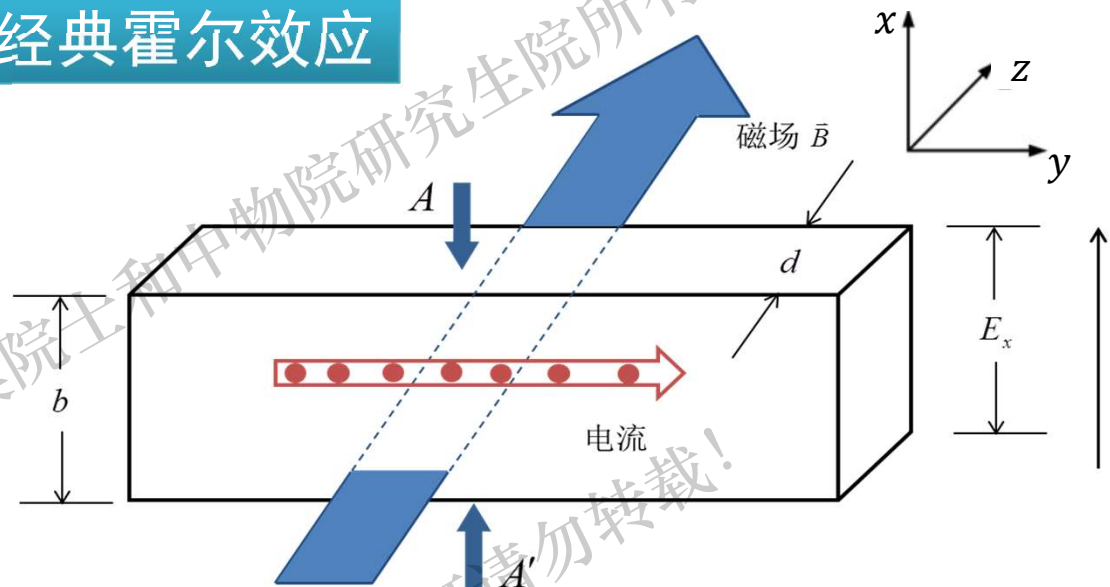
$$F_x = -eE_x + \frac{vB}{c}$$

达到平衡时

$$F_x = 0, E_x = \frac{vB}{c}$$

A 和 A' 间的电压正比于磁场大小。

$$U_{AA'} = E_x b = \frac{bvB}{c}$$



霍尔效应示意图

经典霍尔效应

设载流子(电子)的浓度为 ρ , 则 y 方向的电流为

$$I = ebd\rho v$$

x 方向的电压

$$U_{AA'} = \frac{1}{c\rho e} \frac{IB}{d} = R_H I$$

定义

$$R_H = \frac{B}{c\rho de} = \frac{B}{c\bar{n}e}$$

为霍尔电阻, $\bar{n} = \rho d$ 为载流子浓度

经典霍尔效应

霍尔电导定义为

$$\sigma_H = \frac{1}{R_H} = \frac{c\bar{n}e}{B} = \frac{\gamma e^2}{h},$$

$$\gamma = \frac{\bar{n}}{n_b} = 2\pi\bar{n}l_B^2, \quad l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \text{ 是磁长度}$$

考虑沿 x 方向电流，有霍尔电导张量

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma \frac{e^2}{h} \\ \gamma \frac{e^2}{h} & 0 \end{pmatrix}$$

(整数) 量子霍尔效应(quantum Hall effect)

量子霍尔效应:

Klaus von Klitzing等人发现, γ 只取正整数。

对于矩形样品 $0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq b$, 证明每一个朗道能级只包含有限个电子。

证明:

假设周期边界条件 $\psi(x + L, y) = \psi(x, y)$,

那么 x 方向动量

$$p_x = 2\pi\hbar n/L$$

是量子化的; 本征态在 y 方向上是量子化的, 且中心

$$y_0 = \frac{cp}{eB}$$

量子霍尔效应(quantum Hall effect)

$$\frac{cp}{eB} = n \frac{2\pi\hbar c}{eBL} \in [0, b]$$

$$\Rightarrow n = 0, 1, 2, \dots, N_m, \quad N_m = \frac{Lb}{2\pi l_B^2}, \quad l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$$

Lb 是样品的面积，因此，单位面积内态的数目为

$$n_B = \frac{1}{2\pi l_B^2} = \frac{eB}{hc}$$

它可以理解为单位面积上朗道能级的简并度，不依赖于哪一个朗道能级；即

n_B 和朗道能级的量子数 n 无关。

量子霍尔效应(quantum Hall effect)

假定到第 s 个能级为止，每一个朗道能级都被填满，则样品的单位面积内电子数

$$N_s = sn_B = \frac{eBs}{hc}$$

如果在 $x-y$ 平面内加一个电场 $\vec{E}$ 和垂直于平面的磁场 $\vec{B}$ ，平衡情况下

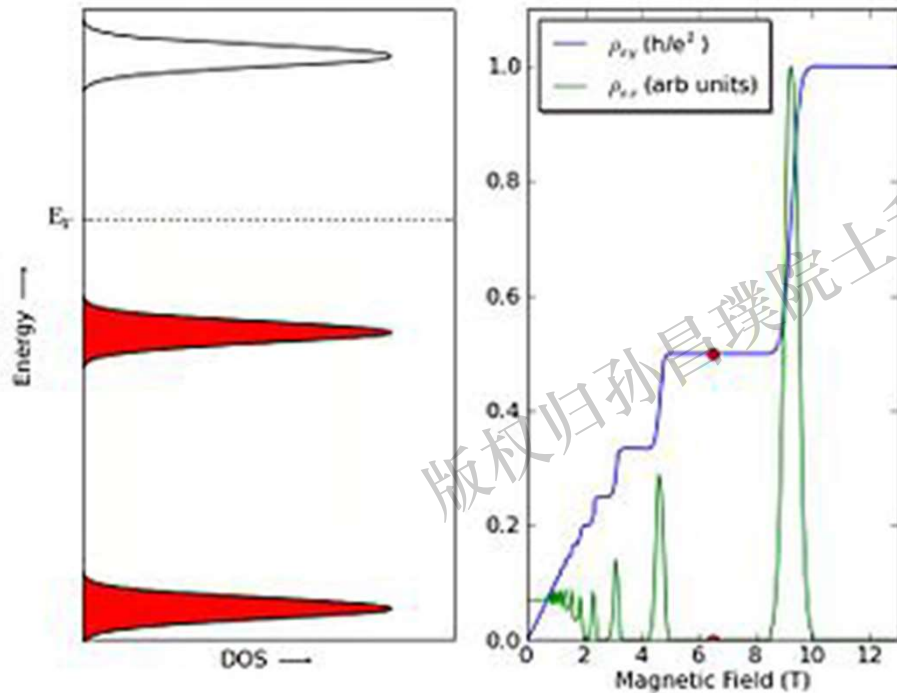
$$\begin{aligned} e\vec{E} + \frac{e}{c}\vec{v} \times \vec{B} &= 0 \\ \Rightarrow \vec{v} &= c\vec{E} \times \vec{B}/B^2 \end{aligned}$$

电流矢量

$$\vec{J} = esn_B v = \begin{pmatrix} 0 & -se^2/h \\ se^2/h & 0 \end{pmatrix} \vec{E}$$

这意味着霍尔电导是量子化的。

量子霍尔效应(quantum Hall effect)



杂质和霍尔台阶的出现

以上分析，只是说明了霍尔电导是整数的，但并未解释随磁场改变为什么会出现台阶，要解释这种台阶，需要考虑弱杂质的作用。杂质势的微扰作用是产生展宽朗道的能级，而另一个作用产生不参与导电的局域态。这两种作用共同的效应导致了平台的出现，在有关的文献中详细分析了这个结果。

4.3 二能级原子与量子光场相互作用的基本模型

在电磁场中运动的带电粒子哈密顿量

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (\hat{p} - q\vec{A})^2 + q\phi \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + q\phi - \frac{q}{2m} (\hat{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{p}) + \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2 \end{aligned}$$

由

$$\hat{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{p} = \frac{\hbar}{i} [(\nabla \cdot \vec{A}) + 2\vec{A} \cdot \nabla]$$

在库伦规范下 $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ ，并忽略小量 $\frac{q^2}{2m} \vec{A}^2$ ，则有
低能近似下的哈密顿量

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + q\phi - \frac{q}{m} (\vec{A} \cdot \hat{p})$$

4.3 原子—光场相互作用形式

在电磁场的能量表象中，实场 $\vec{A}_R = \vec{A} + \vec{A}^\dagger$ 可以量子化为

$$\vec{A}_R = \sum_l (a_l \vec{A}_l(x) + \text{h.c.})$$

用

$\vec{A}_l$ 为电磁场的本征振动模式
 $a_l^\dagger (a_l)$ 是模式 $\vec{A}_l$ 的产生 (消灭) 算子

$$\varphi(x) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(x) b_\alpha$$

代表带电粒子的场，那么电磁场与粒子相互作用哈密顿量

$$H' = -\frac{q}{m} \vec{A} \cdot \vec{p}$$

可以写为二次量子化形式：

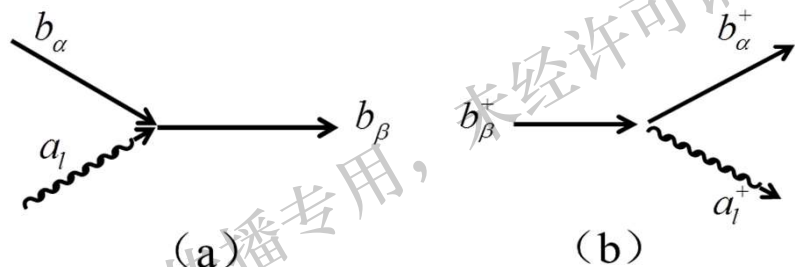
4.3 原子—光场相互作用的费曼图

$$H' = -\frac{q}{m} \sum_{\alpha\beta l} \left[\int \varphi_{\beta}^{\dagger}(x) \vec{A}_l(x) \hat{p} \varphi_{\alpha}(x) dx b_{\beta}^{\dagger} a_l b_{\alpha} + \text{h.c.} \right]$$

即

$$H' = \sum_{\alpha\beta l} \left[g_{\alpha\beta l} b_{\beta}^{\dagger} b_{\alpha} a_l + g_{\alpha\beta l}^{*} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta} a_l^{\dagger} \right]$$

费曼图形式：



其中第一项对应图 (a)，代表了处在 α 状态上带电粒子吸收一个 l 模光子变成状态 β ，图 (b) 代表它的共轭过程。

4.3 原子—光场相互作用导致自发辐射

微扰论下, H' 一级扰动引起的 $|n_l, I_\beta\rangle$ 到态 $|n_l + 1, I_\alpha\rangle$ 的跃迁为

$$\langle n_l + 1, I_\alpha | H' | n_l, I_\beta \rangle = g_{\alpha\beta l}^* \sqrt{n_l + 1}$$

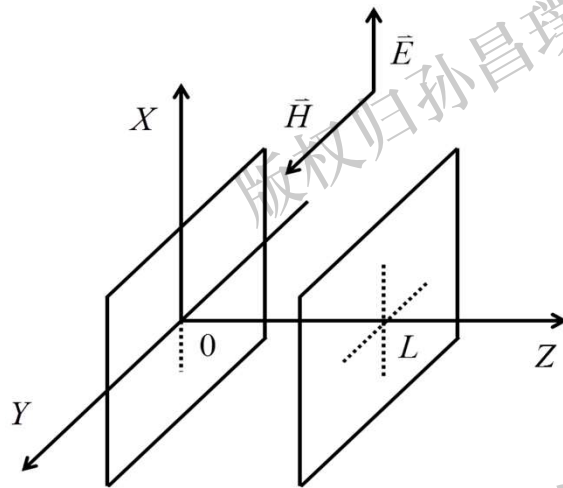
特别是当 $n_l = 0$, 跃迁矩阵元不为零, 这代表自发辐射 (跃迁)。

接下来讨论单模光场与单个二能级原子的相互作用。

4.3 一维腔中电场的量子化

一维法布里-泊罗（FP）微腔中电磁场的量子化问题：

FP腔中的电磁场满足Maxwell波动方程



$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E} = 0$$

由两无穷大超导平板构成的一维微共振腔（FP腔）

4.3 微波腔电磁场的量子化

镜面是理想导体，电场 $\vec{E} = E_x(z, t)\vec{e}_x$ 只有 x 分量，在 $z = 0$ 和 $z = L$ 处， $E_x(0) = E_x(L) = 0$ 。

经典电磁场的本征解：

$$E_x = q_n(t) \sin \frac{n\pi z}{L}$$

其中 $q_n(t)$ 满足谐振子运动方程

$$\ddot{q}_n(t) + \frac{n^2 \pi^2 c^2}{L^2} q_n(t) = 0$$

4.3 量子电磁场哈密顿量

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \vec{D} = \epsilon_0 \vec{E},$$

因此磁场

$$\vec{H} = H_y(z, t) \vec{e}_y$$

只有y分量

$$H_y(z, t) = \frac{\epsilon_0 L}{n\pi} \cos \frac{n\pi z}{L} \dot{q}_n(t)$$

FP腔中电磁场的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2} \int_0^L S dz [\epsilon_0 E_x^2 + \mu_0 H_y^2] = \frac{1}{2} \left(\frac{\mu_0 \epsilon_0^2}{2k_n} V \right)^2 [\dot{q}_n^2(t) + \omega_l^2 q_n^2(t)]$$

ϵ_0 ——真空介电常数

μ_0 ——真空磁导率

$V = SL$ ——微腔体积

$k_n = n\pi/L$ ——驻波波矢

$\omega_n = Ck_n$ ——驻波频率

4.3 微腔中电磁场量子化

电磁场的产生消灭算子定义为

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_n}} [\omega_n q_n + ip_n] \times \sqrt{\frac{\mu_0 \epsilon_0}{2k_l^2}} V$$

单模哈密顿量

$$H_n = \hbar\omega_n \left(a_n^\dagger a_n + \frac{1}{2} \right)$$

相应的对易关系

$$[a_n, a_m^\dagger] = \delta_{mn}$$

电磁场的量子化为

$$E_n(z, t) = \xi_n (a_n + a_n^\dagger) \sin \frac{n\pi z}{L}$$

$$\xi_n = \sqrt{\hbar\omega_n / (V\epsilon_0)}$$

是单位体积的场振幅。

4.3 二能级原子与量子光场相互作用的基本模型

以单电子中性原子为例考虑原子部分及其与光场的相互作用。

原子核质量 = M ，坐标 = R ，

电子质量 = m ，电荷 = e ，坐标 = r ，

原子在电磁势中的哈密顿量

$$H_a = \frac{1}{2M} [p_R - A(R)]^2 + \frac{1}{2m} [p_r + A(r)]^2 + V(|R - r|)$$

引入相对坐标和质心坐标

$$x = R - r, \quad Q = \frac{MR + mr}{M + m}$$

原子核质量很大 $m/M \rightarrow 0$ ，则

$$H_a \cong \frac{p^2}{2M} + \frac{p_x^2}{2m} + V(x) - \frac{\vec{p}_x \cdot \vec{A}(Q)}{m}$$

固定 Q 解快变部分的本征方程

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$$

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

4.3 二能级原子与量子光场相互作用的基本模型

设 $E_n = \hbar\omega_n$, x 与 H_0 的对易子为

$$\frac{1}{i\hbar} [x, H_0] = \frac{p_x}{m}$$

计算矩阵元

$$\langle m | p_x | n \rangle = \frac{m}{i\hbar} (E_n - E_m) \langle m | x | n \rangle$$

哈密顿量可以写为

$$H \cong \frac{p^2}{2M} + \hbar \sum \omega_n |n\rangle \langle n| + iA \cdot \sum (\omega_n - \omega_m) \langle m | x | n \rangle |m\rangle \langle n|$$

4.3 二能级原子与量子光场相互作用的基本模型

假设单模电磁场只与其中的两个能级 $|e\rangle$ 和 $|g\rangle$ 共振，
考虑二能级近似

$$H = \frac{p^2}{2M} + \hbar\omega_e |e\rangle\langle e| + i\omega_e A \cdot D(|e\rangle\langle g| - |g\rangle\langle e|)$$

由于电偶极跃迁的选择定则，

$$\langle g|x|g\rangle = 0, \quad D = \langle e|x|g\rangle$$

$$\int g^*(x) x g(x) dx = 0$$

(奇)
偶宇称

奇宇称

(奇)
偶宇称

4.3 单原子与单模光场相互作用

由电磁场量子化

$$E_x = -\dot{A}_x, \quad H_y = \mu_0 \partial_z A_x,$$

$$A_x = \alpha(Q)a^\dagger + \alpha^*(Q)a$$

单原子+单模电磁场哈密顿量:

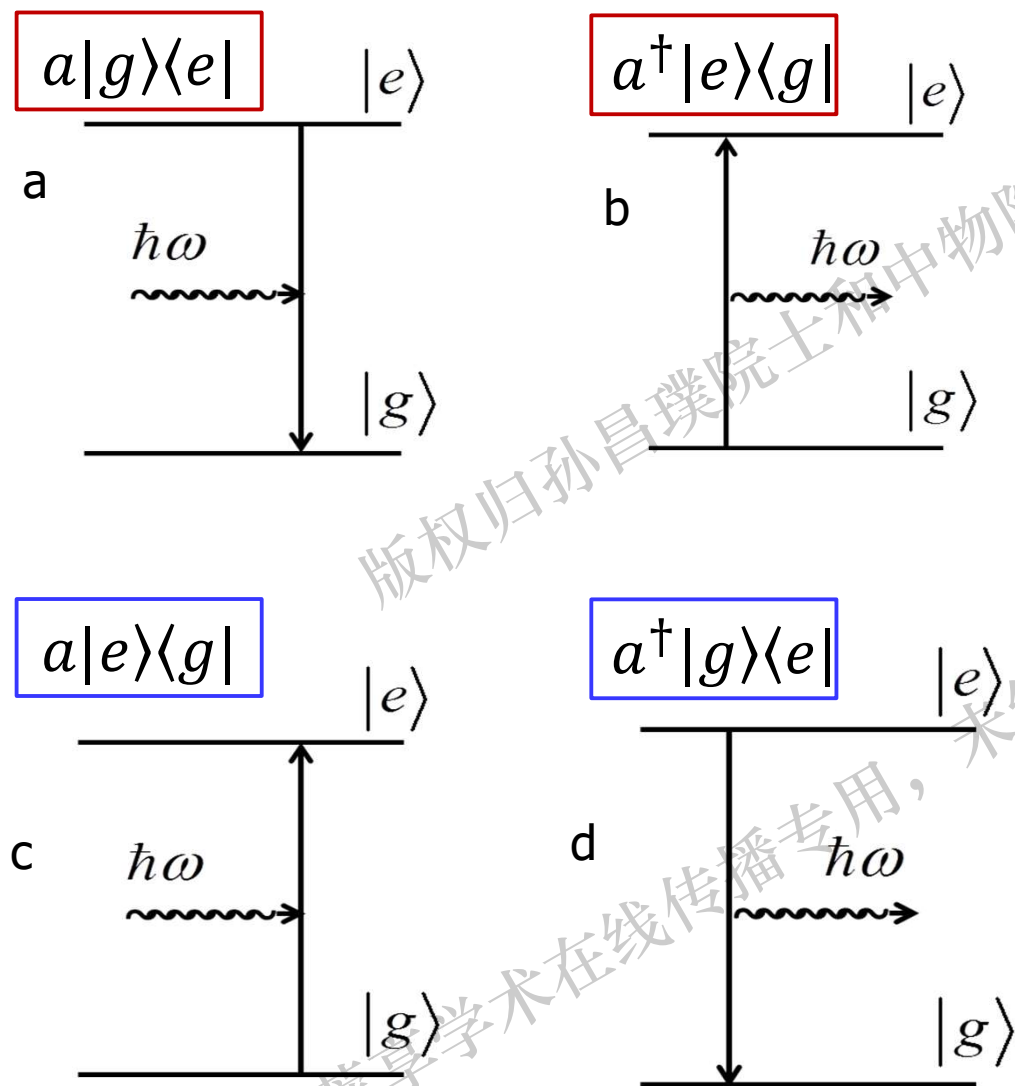
$$H = \frac{p^2}{2M} + \omega_e |e\rangle\langle e| + \omega a^\dagger a + g(a + a^\dagger)(|e\rangle\langle g| - |g\rangle\langle e|)$$

$$g = \omega_e D \sqrt{\frac{\hbar}{\omega \epsilon_0 V}} \sin kQ$$

FP腔的体积越小，光与原子的耦合就越强。因此

只有在体积很小的微腔中单模电磁场才有可观测效应。

4.3 原子与光场相互作用的过程



从物理上讲，四个相互作用项中，前两项（a）和（b）代表了难以发生的虚过程；而（c）和（d）代表了容易发生的实过程，因此前者可以忽略。

4.3 旋转波近似：JC模型

变换到相互作用表象，利用零阶哈密顿量

$$H_0 = \hbar\omega_e |e\rangle\langle e| + \hbar\omega a^\dagger a$$

相互作用项变为

$$|e\rangle\langle g|a \rightarrow |e\rangle\langle g|ae^{-i(\omega-\omega_e)t} \quad (\text{低频项})$$

$$|g\rangle\langle e|a \rightarrow |g\rangle\langle e|ae^{-i(\omega+\omega_e)t} \quad (\text{高频可忽略})$$

利用

$$\int_0^\infty e^{i\omega t} f(t) dt \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} 0$$

4.3 旋转波近似：JC模型

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle = (H_0 + V e^{i\omega t} + \text{h.c.}) |\varphi\rangle$$

的形式解为

$$i\hbar (|\varphi(t) - \varphi(0)\rangle) = H_0 |\varphi\rangle + \int_0^t (V e^{i\omega t} + \text{h.c.}) |\varphi\rangle dt$$

最后一项近似为零。因此，哈密顿量中的高频项可以忽略不计。

忽略高频项的近似称为旋转波近似，

⇒ 精确可解光与原子相互作用的J-C模型：

$$H_{JC} = \omega_e |e\rangle\langle e| + \omega a^\dagger a + g a^\dagger |g\rangle\langle e| + \text{h.c.}$$

4.3 JC模型的解

$$|n, e\rangle = |n\rangle \otimes |e\rangle$$

$$|n, g\rangle = |n\rangle \otimes |g\rangle$$

其中

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{+n} |0\rangle$$

是光场的Fock态,

在 H_{JC} 作用下有变换

$$H_{JC}|n, e\rangle = (\omega_e + n\omega)|n, e\rangle + g\sqrt{n+1}|n+1, g\rangle$$

$$H_{JC}|n+1, g\rangle = (n+1)\omega|n+1, g\rangle + g\sqrt{n+1}|n, e\rangle$$

4.3 JC模型的解

对于给定的 $n \neq 0$, $\{|n, e\rangle, |n+1, g\rangle\}$ 张成二维不变子空间。

$$H_{JC} = \begin{bmatrix} \omega_e + n\omega & \sqrt{n+1}g \\ \sqrt{n+1}g & (n+1)\omega \end{bmatrix}$$

$$\delta = \omega_e - \omega$$
$$\sin\theta_n = \frac{\sqrt{n+1}g}{\sqrt{\frac{\delta^2}{4} + (n+1)g^2}}$$

$$= \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \omega + \frac{\omega_e}{2} \right] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\omega_e - \omega}{2} & \sqrt{n+1}g \\ \sqrt{n+1}g & -\frac{\omega_e - \omega}{2} \end{bmatrix}$$

$$= \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \omega + \frac{\omega_e}{2} \right] I + \sqrt{\frac{1}{4} \delta^2 + (n+1)g^2} \begin{bmatrix} \cos\theta_n & \sin\theta_n \\ \sin\theta_n & -\cos\theta_n \end{bmatrix}$$

4.3 JC模型的解

对角化得到 H_{JC} 的本征值

$$E_n^{\pm} = n\omega + \epsilon_0 \pm \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + (n+1)g^2}$$

其中

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2}(\omega_e + \omega), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

相应本征函数为

$$\begin{aligned} |+, n\rangle &= \cos \frac{\theta_n}{2} |e, n\rangle + \sin \frac{\theta_n}{2} |g, n+1\rangle \\ |-, n\rangle &= \sin \frac{\theta_n}{2} |e, n\rangle - \cos \frac{\theta_n}{2} |g, n+1\rangle \end{aligned}$$

共振时

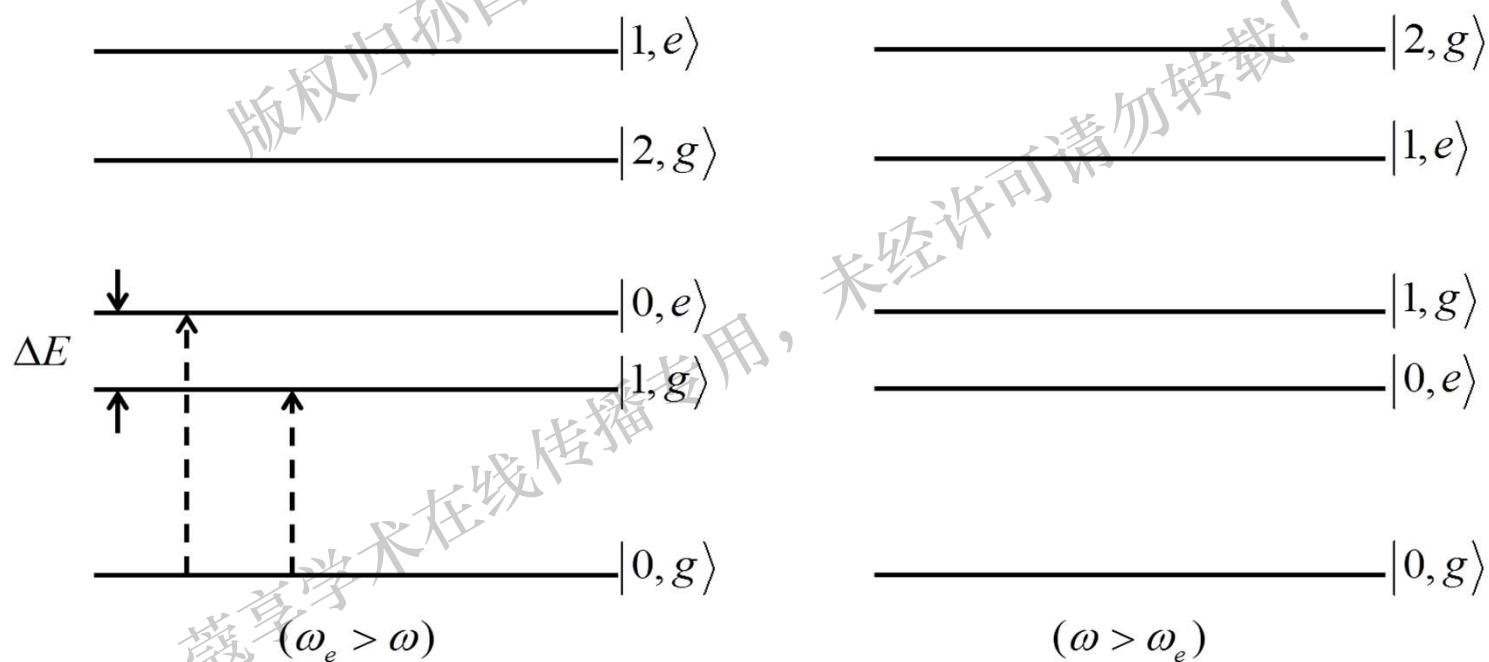
$$E_n^{\pm} = n\omega + \epsilon_0 \pm g\sqrt{n+1}$$

4.3 单原子与单模光场相互作用的能级结构

$|0, g\rangle$ 是 H_{JC} 本征态，本征值为 0， $E_0^I = \epsilon_0 \pm g$

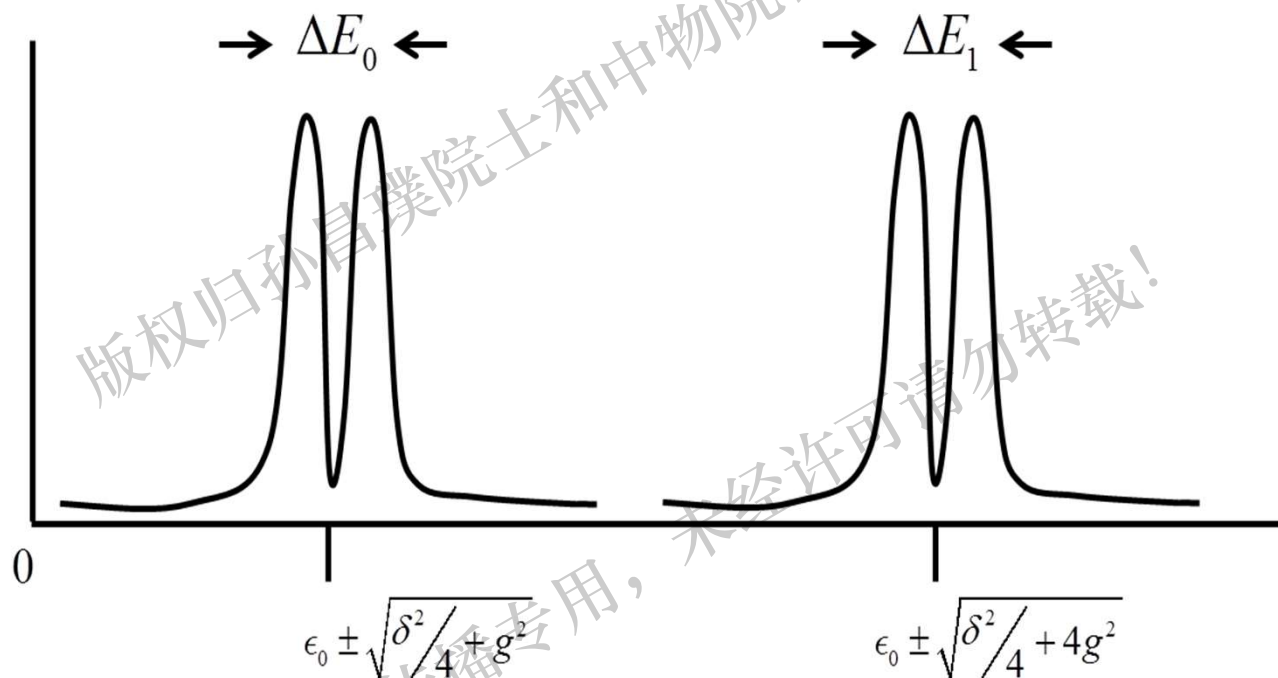
能级差正比于场与原子的耦合强度，称为真空 Rabi 分裂。

$$\Delta E = E_0^+ - E_0^- = 2g$$



4.3 二能级原子与光场相互作用导致Rabi劈裂

单模光场与二能级原子相互作用系统的吸收谱：



双峰结构的存在预示着光场的量子效应，特别是 $n = 0$ 时，真空场仍然会导致Rabi分裂。

全同的多原子体系与光场的相互作用

J-C模型：对原子部分的二次量子化 $\Rightarrow$ 多体哈密顿量

$$H = \omega_e b_e^\dagger b_e + \omega a^\dagger a + g b_e b_g^\dagger a^\dagger + g^* a b_e^\dagger b_g$$

当原子系统发生凝聚，大量粒子处于基态，求解薛定谔方程，初值条件为

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle \quad (b_g |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle)$$

由于大量粒子聚集在 $|g\rangle$ 态，粒子数平均值

$$\langle \alpha | b_g^\dagger b_g | \alpha \rangle = |\alpha|^2$$

是一个很大的量。

全同的多原子体系与光场的相互作用

对薛定谔方程和初值条件做么正变换

$$H \rightarrow H' = D^\dagger(\alpha) H D(\alpha), \quad |\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi'(0)\rangle = D(-\alpha)|\alpha\rangle = |0\rangle$$

其中相干态

则

$$D(\alpha) = \exp(\alpha b_g^\dagger - a^* b_g)$$

$$H' = \omega_e b_e^\dagger b_e + g \alpha b_e^\dagger a + g^* \alpha^* b_e a^\dagger + \omega a^\dagger a + g b_e^\dagger b_g a + \text{h.c.}$$

由于 $|\alpha|$ 很大，在凝聚条件下，可以忽略量子涨落项

$$g b_e^\dagger b_g a + \text{h.c.}$$

得到有效哈密顿量

$$H' \approx H_{\text{eff}} = \omega_e b_e^\dagger b_e + g \alpha b_e^\dagger a + g^* \alpha^* b_e a^\dagger + \omega a^\dagger a$$

全同的多原子体系与光场的相互作用

对角化上述哈密顿量

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= (b_e^\dagger, a^\dagger) \begin{pmatrix} \omega_e & g\alpha \\ g^*\alpha^* & \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix} \\ &= (b_e^\dagger, a^\dagger) \begin{pmatrix} \frac{\omega_e + \omega}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\omega_e + \omega}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix} + (b_e^\dagger, a^\dagger) \begin{pmatrix} \frac{\omega_e - \omega}{2} & g\alpha \\ g^*\alpha^* & -\frac{\omega_e - \omega}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix} \\ &= \epsilon_0(b_e^\dagger b_e + a^\dagger a) + (b_e^\dagger, a^\dagger) \begin{pmatrix} \Omega & g\alpha \\ g^*\alpha^* & -\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix} \\ &= \epsilon_0 \hat{N} + \sqrt{\Omega^2 + |g\alpha|^2} (b_e^\dagger, a^\dagger) \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{i\varphi} \\ \sin\theta e^{-i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix} \end{aligned}$$

全同的多原子体系与光场的相互作用

接下来只要对角化哈密顿矩阵

$$H = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{i\varphi} \\ \sin\theta e^{-i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}.$$

对应于本征值 ± 1 ，有本征函数

$$|\varphi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad |\varphi_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

构造用于对角化 H 的么正矩阵

$$W = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} & \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} & -\cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

全同的多原子体系与光场的相互作用

它使得

$$W^\dagger H W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

于是

$$H_{\text{eff}} = \epsilon_0 \hat{N} + \sqrt{\Omega^2 + |g\alpha|^2} (b_e^\dagger, a^\dagger) W \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} W^\dagger \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix}$$

定义极化基元的产生消灭算子

$$\begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} = W^\dagger \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} & -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_e \\ a \end{pmatrix}$$

全同的多原子体系与光场的相互作用

$$\begin{aligned} B &= e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} b_e + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} a \\ A &= \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} b_e - \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} a \end{aligned}$$

A 和 B 中混合了原子激发 b_e 和光子激发 a .

对角化的哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = \epsilon_0 \hat{N} + \sqrt{\Omega^2 + |g\alpha|^2} (B^\dagger B - A^\dagger A)$$

其中

$$N = b_e^\dagger b_e + a^\dagger a = B^\dagger B + A^\dagger A$$

代表总激发数；能量本征态

$$|N_A, N_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_A! N_B!}} B^{\dagger N_A} B^{\dagger N_B} |0\rangle$$

全同的多原子体系与光场的相互作用

称为多原子的Dressed States；其激发谱

$$E_{N_A, N_B} = \epsilon_0(N_A + N_B) + E(N_B - N_A)$$

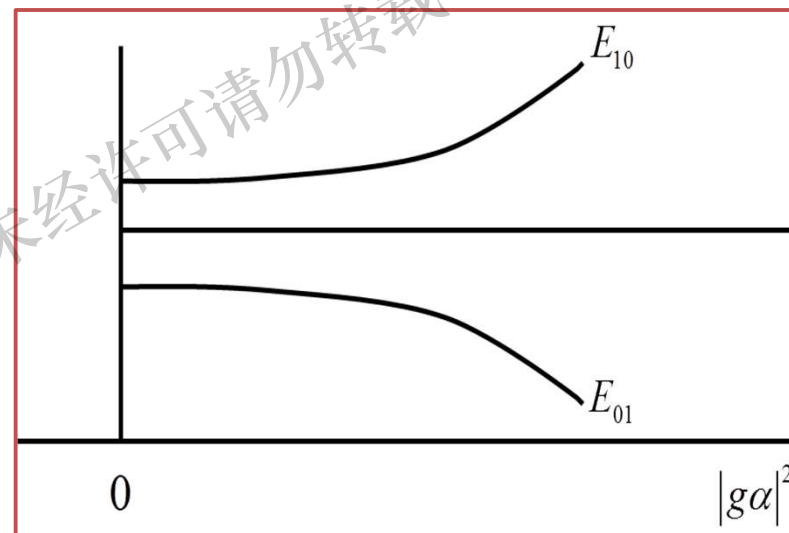
$$E = \sqrt{\Omega^2 + |g\alpha|^2}$$

两个最低激发态 $|1,0\rangle$ 和 $|0,1\rangle$ 的能量随耦合强度变化

$$E_{10} = \epsilon_0 + \sqrt{\Omega^2 + |g\alpha|^2}$$

$$E_{01} = \epsilon_0 - \sqrt{\Omega^2 + |g\alpha|^2}$$

两个能量分支表示光场与多原子集体态的耦合，形成了相干的复合系统束缚态。



受激跃迁和真空自发辐射

从J-C模型出发，考虑场量子化的物理效应。由

$$|\psi(0)\rangle = |e, n\rangle$$

$$|e, n\rangle = \cos \frac{\theta_n}{2} |+, n\rangle + \sin \frac{\theta_n}{2} |-, n\rangle$$

则

$$|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta_n}{2} e^{-iE_n^+ t} |+, n\rangle + \sin \frac{\theta_n}{2} e^{-iE_n^- t} |-, n\rangle$$

受激跃迁和真空自发辐射

跃迁到 $|g, n+1\rangle$ 的几率为

$$\begin{aligned} P_n &= |\langle g, n+1 | \psi(t) \rangle|^2 \\ &= \left| \cos \frac{\theta_n}{2} e^{-iE_n^+ t} \langle g, n+1 | +n \rangle + \sin \frac{\theta_n}{2} e^{-iE_n^- t} \langle g, n+1 | -n \rangle \right|^2 \\ &= \left| -\sin \frac{\theta_n}{2} \cos \frac{\theta_n}{2} e^{-iE_n^+ t} + \sin \frac{\theta_n}{2} \cos \frac{\theta_n}{2} e^{-iE_n^- t} \right|^2 \\ &= \sin^2 \theta_n \sin^2 \left[\sqrt{\frac{\delta^2}{4} + (n+1)g^2} t \right] \\ &= \frac{4g^2(n+1)}{\delta^2 + 4(n+1)g^2} \sin^2 \left[\sqrt{\frac{\delta^2}{4} + (n+1)g^2} t \right] \end{aligned}$$

真空自发辐射

光场处在真空态上 $n = 0$, 量子光场也会导致从激发态到真空态的跃迁。

跃迁几率

$$P_0 = \frac{4g^2}{\sqrt{\delta^2 + 4g^2}} \sin^2 \left[\sqrt{\frac{\delta^2}{4} + g^2} t \right]$$

真空中的原子可以发生从激发态到基态的辐射——自发辐射 (spontaneous radiation) , 是电磁场的真空涨落引起的纯量子效应。

真空自发辐射：一般讨论

自发辐射（爱因斯坦）：

即使不存在外部电磁场，处在激发态的原子是不稳定的，会从激发态跃迁到基态并辐射光子。

微扰哈密顿量

$$H_I = \frac{1}{M} p \cdot A + \frac{A^2}{2M},$$

- 矩阵元 $\langle g | H_I | e \rangle$ 决定了跃迁几率幅，当 $A = 0$ 时它为零。
- 解释自发辐射必然涉及场的量子化：真空态的场场强为零，但真空涨落不为零，这是自发辐射的根本原因。

早在量子力学建立之前，爱因斯坦就提出了自发辐射的唯象描述，这个理论在近似的意义下至今仍然是正确的。

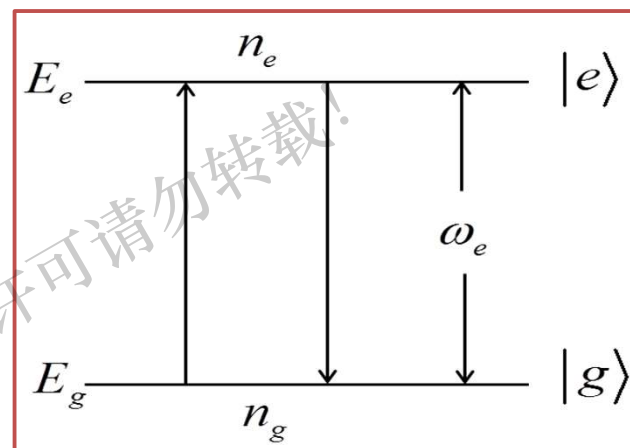
自发辐射的半经典唯象描述

在强度分布为 $\rho(\omega)$ 的光场下，原子从 $|g\rangle$ 到 $|e\rangle$ 的受激吸收几率

$$W_{eg} = B_{eg}\rho(\omega_e), \quad E_e > E_g$$

偶极近似下的吸收系数 B_{eg} （微扰理论）

$$B_{eg} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\langle e|r|g\rangle|^2$$



受激辐射：从 $|e\rangle$ 到 $|g\rangle$ 的跃迁几率

$$W_{ge} = B_{ge}\rho(\omega_e)$$

位置算符 r 的厄米性决定了 $B_{eg} = B_{ge}$

受激跃迁和真空自发辐射

Boltzmann分布：稳定状态时， $|e\rangle$ 和 $|g\rangle$ 上原子数之比

$$\frac{n_e}{n_g} = e^{(E_g - E_e)/k_B T} = e^{\hbar\omega_e/k_B T}$$

因此

$$n_g B_{eg} \rho(\omega_e) \neq n_e B_{ge} \rho(\omega_e)$$

即仅有受激过程时，辐射和吸收无法平衡。

维持平衡必须唯象地加入自发辐射项（ A 系数），使受激吸收辐射过程平衡：

$$n_g B_{eg} \rho(\omega_e) = n_e B_{ge} \rho(\omega_e) + n_e A_{ge}$$

受激跃迁和真空自发辐射

联立两式：

$$\rho(\omega_e) = \frac{A_{eg}}{B_{eg}} \frac{1}{n_g/n_e - 1} = \frac{A_{eg}}{B_{eg}} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_e} - 1}$$

高温极限下

$$e^{\beta\hbar\omega_e} \simeq 1 + \beta\hbar\omega_e$$

与黑体辐射经验公式相一致：

$$\rho(\omega_e) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{A_{eg}}{B_{eg}} \frac{1}{\beta\hbar\omega_e}$$

受激跃迁和真空自发辐射

比较高温极限的经验结果—Reyleigh-Jeans公式

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T$$

得到自发辐射系数

$$\begin{aligned} A_{eg} &= \beta B_{eg} \hbar \omega_e \rho(\omega_e) \\ &= \frac{4e^2 \omega_e^3}{3\hbar c^3} |\langle e|r|g \rangle|^2 \end{aligned}$$

—与一阶微扰结论相似：描述自发辐射的短时间行为。

受激跃迁和真空自发辐射

从 $|2P\rangle$ 态到 $|1S\rangle$ 的跃迁的A系数

$$A_{1S,2P} = \frac{4e^2}{3\hbar c^3} \omega_{1S,2P}^3 |\langle 1S | r | 2P \rangle|^2$$

氢原子本征函数

$$\psi_{210} = \langle r | 2P \rangle = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{z}{a^{5/2}} e^{-r/2a}$$

$$\psi_{100} = \langle r | 1S \rangle = \frac{1}{\pi^{1/2} a^{3/2}} e^{-r/a}$$

$$a = \hbar^2 / m_e e^2$$

计算出

$$A_{1S,2P} \sim 6.27 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$$

$|2P\rangle$ 态寿命

$$\tau = 1/A \sim 1.6 \times 10^{-9} \text{ s}$$

真空自发辐射：一般讨论

自由空间中：

必须考虑多模光场与二能级原子通过电偶极作用耦合。

$b_{\alpha}^{\dagger}, b_{\alpha}$: 电磁场的产生消灭算子

$|e\rangle, |g\rangle$: 原子的激发态和基态

旋波近似下系统哈密顿量

$$H = \hbar\omega_e |e\rangle\langle e| + \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} + \sum_{\alpha} (V_{\alpha}^{*} b_{\alpha} |e\rangle\langle g| + V_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} |g\rangle\langle e|)$$

真空自发辐射：一般讨论

自发辐射：原子处在激发态且场处在真空态时的量子跃迁。

这个过程可以描述为从初态

$$|\psi(0)\rangle = |e\rangle \otimes |0_1\rangle \otimes \cdots \otimes |0_n\rangle \equiv |e\rangle \otimes |0\rangle \equiv |e, 0\rangle$$

到末态

$$|\psi_f\rangle = |g\rangle \otimes |1_\alpha\rangle \equiv |g, 1_\alpha\rangle$$

的跃迁。

$$|0\rangle \equiv |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots |0\rangle$$

$$|1_\alpha\rangle \equiv |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots \otimes |1_\alpha\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots \otimes |0\rangle$$

真空自发辐射：一般讨论

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega_e t} \left(A(t)|e, 0\rangle + \sum_{\lambda} B_{\lambda}(t)|g, 1_{\lambda}\rangle \right)$$

则

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial A(t)}{\partial t} = \sum_{\lambda} V_{\lambda}^* B_{\lambda}(t) \\ i\hbar \frac{\partial B_{\lambda}(t)}{\partial t} = \hbar(\omega_{\lambda} - \omega_e) B_{\lambda}(t) + V_{\lambda} A(t) \end{cases}$$

Laplace变换

$$\bar{f}(P) = \int_0^{\infty} dt f(t) e^{-Pt} \quad (f = A, B_{\lambda})$$

真空自发辐射：一般讨论

$$\Rightarrow \begin{cases} P\bar{A}(P) = \sum_{\lambda} \frac{V_{\lambda}^*}{i\hbar} \bar{B}_{\lambda}(P) + 1 \\ (P + i(\omega_{\lambda} - \omega_e))\bar{B}_{\lambda}(P) = \frac{V_{\lambda}}{i\hbar} \bar{A}(P) \end{cases}$$
$$\Rightarrow \begin{cases} \bar{A}(P) = \frac{1}{P + \Gamma(P)} \\ \bar{B}_{\lambda}(P) = \frac{V_{\lambda}}{i\hbar} \frac{1}{(P + \Gamma(P))(P + i(\omega_{\lambda} - \omega_e))} \end{cases}$$

其中

$$\Gamma(P) = \sum_{\lambda} \frac{|V_{\lambda}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{P + i(\omega_{\lambda} - \omega_e)}$$

真空自发辐射：一般讨论

Wigner-Weisskopf近似：

无相互作用时 $|V_\lambda|^2 = 0$ ， $P + \Gamma(P)$ 的零点为 $P_0 = 0$ ；

$|V_\lambda|$ 很小时，零点是0附近的微扰展开

$$P_0 = P^{[0]} + \mu P^{[1]} + \mu^2 P^{[2]} + \dots$$

$$P_0 + \sum_{\lambda} \frac{|V_{\lambda}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{P_0 + i(\omega_{\lambda} - \omega_e)} = 0$$

μ 为微扰参量， $\mu \sim |V_{\lambda}|^2$

真空自发辐射：一般讨论

比较 μ 的同次系数有

$$P^{[0]} = 0, \quad P^{[1]} = - \sum_{\lambda} \frac{1}{\hbar^2} \frac{|V_{\lambda}|^2}{P^{[0]} + i\Delta_{\lambda}}$$

其中 $\Delta_{\lambda} = (\omega_{\lambda} - \omega_e)$

一级近似下零点为

$$P \approx P^{[1]} = - \lim_{P^{[0]} \rightarrow 0} \sum_{\lambda} \frac{1}{\hbar^2} \frac{|V_{\lambda}|^2}{P^{[0]} + i\Delta_{\lambda}}$$

真空自发辐射：一般讨论

$$\begin{aligned} P^{[1]} &= - \lim_{P^{[0]} \rightarrow 0} \sum_{\lambda} \frac{|V_{\lambda}|^2 / \hbar^2}{P^{[0]} + i\Delta_{\lambda}} \\ &= i \sum_{\lambda} \frac{|V_{\lambda}|^2 / \hbar^2}{\Delta_{\lambda}} - \pi \sum_{\lambda} \frac{|V_{\lambda}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{\lambda} - \omega_e) \\ &\equiv -\frac{1}{2}\gamma - i\Delta\omega \end{aligned}$$

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{x + is} = \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

其中衰减率

$$\gamma = 2\pi \sum_{\lambda} \frac{|V_{\lambda}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{\lambda} - \omega_e)$$

Lamb移动

$$\Delta\omega = \sum_{\lambda} \frac{|V_{\lambda}|^2 / \hbar^2}{\omega_e - \omega_{\lambda}}$$

真空自发辐射：一般讨论

弱作用极限下：

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{A}(P) \approx \frac{1}{P + \frac{1}{2}\gamma + i\Delta\omega} \\ \bar{B}_\lambda(P) \approx \frac{V_\lambda}{i\hbar} \frac{1}{\left(P + \frac{1}{2}\gamma + i\Delta\omega\right) \left(P + i(\omega_\lambda - \omega_e)\right)} \end{array} \right.$$

反演给出演化态中各个分量的几率幅

$$\left\{ \begin{array}{l} A(t) = e^{-\frac{1}{2}\gamma t - i\Delta\omega t} \\ B_\lambda(t) = -\frac{V_\lambda}{\hbar} \frac{\left(e^{-\frac{\gamma}{2}t - i(\omega_e - \omega_\lambda + \Delta\omega)t} - 1\right) e^{-i(\omega_\lambda - \omega_e)t}}{\omega_\lambda - \omega_e - \Delta\omega + i\frac{1}{2}\gamma} \end{array} \right.$$

真空自发辐射：一般讨论

引入重整化频率 $\omega_p = \omega_e + \Delta\omega$

$$\begin{cases} a(t) = e^{-i\omega_e t} A(t) = e^{-\frac{1}{2}\gamma t - i\omega_p t} \\ B_\lambda(t) = -\frac{V_\lambda \left(e^{-\frac{\gamma}{2}t - i(\omega_p - \omega_\lambda)t} - 1 \right) e^{-i(\omega_\lambda - \omega_e)t}}{\hbar \left(-(\omega_p - \omega_\lambda) + i\frac{1}{2}\gamma \right)} \end{cases}$$

单位时间内原子由激发态跃迁到基态的几率（衰变率）

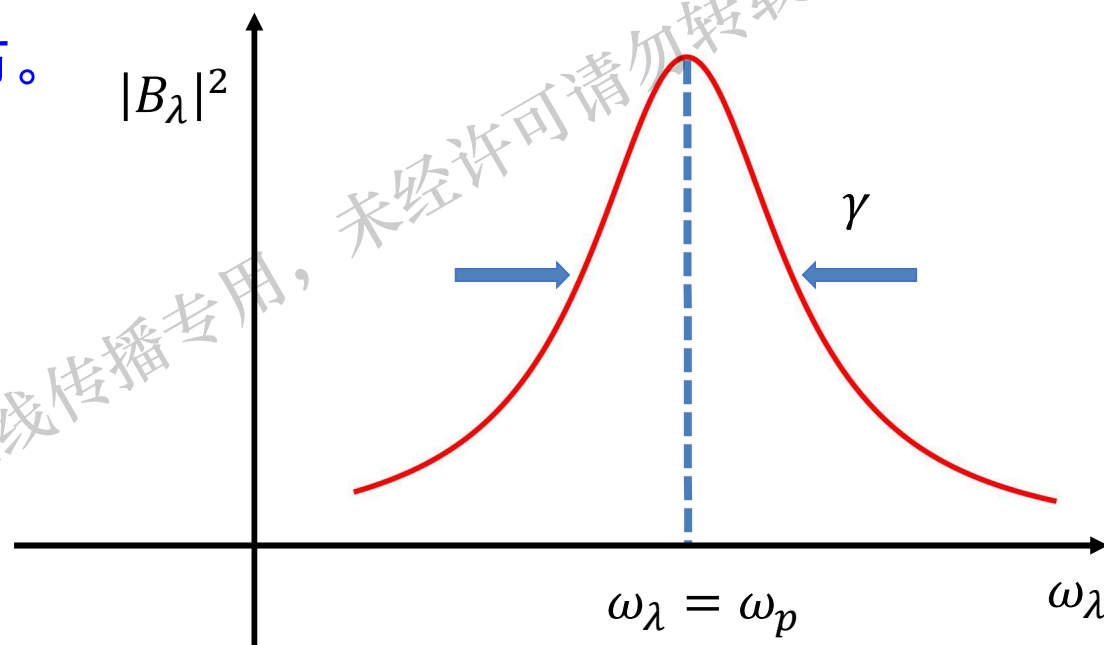
$$P_{e \rightarrow g} = -\frac{1}{|a(t)|^2} \frac{d}{dt} |a(t)|^2 = \gamma$$

真空自发辐射：一般讨论

辐射场的光子数分布，即吸收谱：

$$|B_{\lambda}(t \rightarrow \infty)|^2 = \frac{|V_{\lambda}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\frac{\gamma^2}{4} + (\omega_p - \omega_{\lambda})^2}$$

是典型的洛伦兹分布。



真空自发辐射：一般讨论

记 $V(\omega_\lambda) = V_\lambda$ ，量子化的电磁场

$$\vec{E}(r, t) = i \sum_{\lambda=(q, \delta)} \sqrt{\frac{\hbar \omega_\alpha}{2\epsilon_0 V}} \vec{e}_\delta(q) (b_{q\delta}(t) e^{iq \cdot r} - b_{q\delta}^\dagger(t) e^{-iq \cdot r})$$

偶极近似下的相互作用

$$V_{\text{dipole}} = -e\vec{E} \cdot \vec{r} = -\vec{\mu} \cdot \vec{E}$$

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_q \frac{\hbar \omega_\alpha}{2\epsilon V} \sum_\delta |\langle e | \vec{e}_\delta(q) \cdot \mu | g \rangle|^2 \delta(\omega_q - \omega_\alpha) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_q \frac{\hbar \omega_\alpha}{2\epsilon_0 V} |\mu_{eg}|^2 (1 - \cos^2 \theta) \delta(\omega_q - \omega_\alpha) \end{aligned}$$

真空自发辐射：一般讨论

非简并情况下，把求和换成积分，给出自发辐射率的明显表达式

$$\gamma = \frac{\omega_\alpha^3 |\mu|^2}{3\pi\hbar c^3 \epsilon_0}$$

谱分布为 $\rho(\omega)$

$$\gamma = \frac{\omega_\alpha^3 |\mu|^2 \rho(\omega_\alpha)}{3\pi\hbar c^3 \epsilon_0}$$

上述结果与爱因斯坦最早从半经典近似得到的结果一致

4.4 相对论带电粒子的经典力学

非相对论量子力学给出描述带电粒子运动的哈密顿量

$$H = \frac{1}{2m} (p - eA)^2 + e\varphi$$

相对论下的洛伦兹方程

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m \vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right) = e [\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}]$$

对应的哈密顿量

$$H = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 (\hat{p} - e \vec{A})^2} + e\varphi \quad *$$

4.4 相对论带电粒子的运动方程

正则方程

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{c^2(p_x - eA_x)}{\sqrt{m^2c^4 + c^2(p - eA)^2}}$$

$$\dot{p}_x = \frac{\partial H}{\partial x} = -e \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial (p - eA)} \left(-e \frac{\partial \vec{A}}{\partial x} \right)$$

应用麦克斯韦方程

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

$$\dot{A}_x = \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial r} \cdot \dot{\vec{r}}$$

正则方程给出相对论带电粒子的运动方程。

4.4 相对论带电粒子的量子力学 (I)

$A = 0$ 时, 不妨把*当成量子化的哈密顿量

$$\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} |\psi\rangle = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right) |\psi\rangle$$

问题:

1. 关于时空坐标不对称。方程左边涉及到时空坐标的高阶微分, 而右边是时间的一阶微分, 方程不协变。
2. 二阶对称的克莱因-戈登 (Klein-Gordon) 方程:
从协变的质能关系出发

4.4 相对论带电粒子的量子力学 (II)

$$E^2 = c^2 \hat{p}^2 + m^2 c^4$$

对应的克莱因-戈登方程

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = c^2 \hbar^2 \nabla^2 \phi + m^2 c^4 \phi$$

然而，它的平面波解

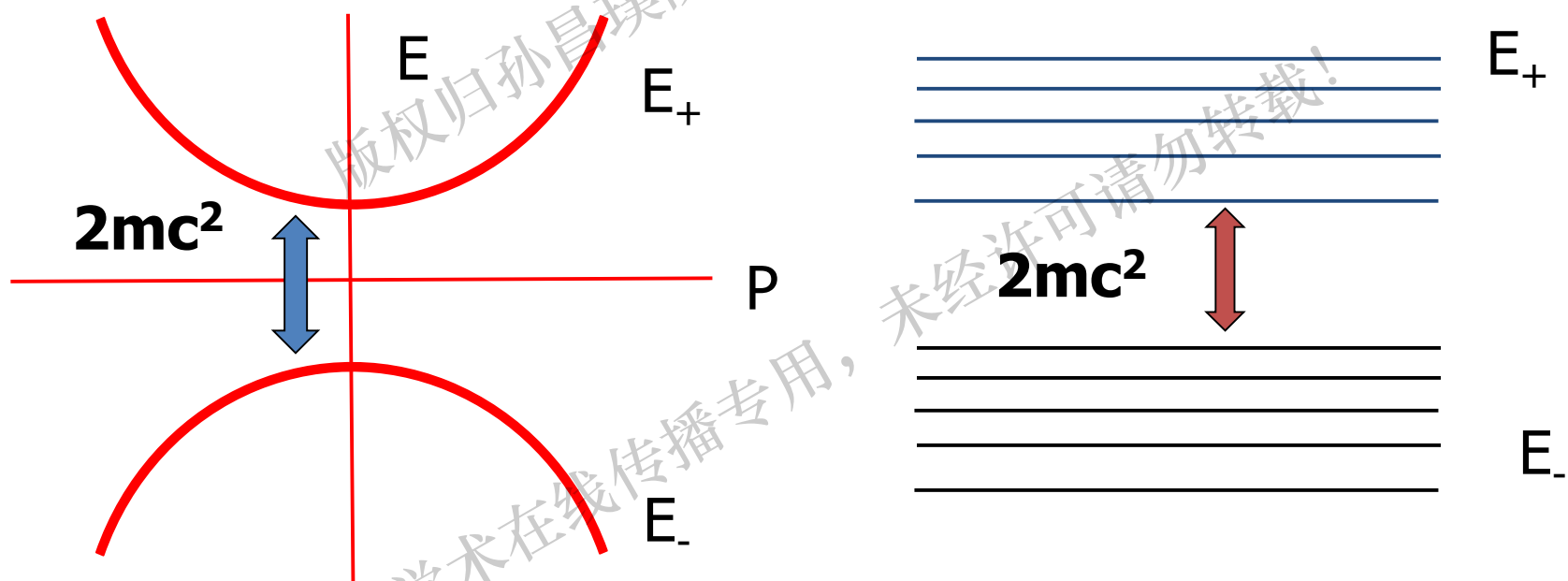
$$\psi \cong \exp(ipx) e^{-iEt}$$

有色散关系

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$$

4.4 相对论带电粒子的量子力学 (II)

克莱因-戈登方程存在负能解，系统极不稳定：



4.4 相对论带电粒子的量子力学与自旋

狄拉克方程相对论协变，波函数多分量 $\Rightarrow$ 自旋

哈密顿量

$$H = c[\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z] + \beta mc^2$$
$$\equiv c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$$

本征方程给出质能关系

$$c(\alpha_x \frac{\hbar}{i} \partial_x + \alpha_y \frac{\hbar}{i} \partial_y + \alpha_z \frac{\hbar}{i} \partial_z + \beta mc^2)\psi = E\psi \quad **$$

$$E^2 = m^2 c^4 + c^2 p^2$$

确定 $\vec{\alpha}$ 和 $\vec{\beta}$ 的形式



4.4 相对论带电粒子的量子力学：DIRAC方程

定态狄拉克方程

$$(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 - E)\psi = 0$$

用

$$D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 - E$$

再作用一次：

$$(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 - E)^2\psi = 0 \equiv D^2\psi$$

假设 $\{\alpha_l, l = x, y, z, 0\}$ 与空间坐标和动量对易：

$$[\alpha_l, r] = 0, \quad r = x, y, z$$

4.4 相对论带电粒子的量子力学：DIRAC方程

$$D^2 = -\alpha_x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \alpha_y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \alpha_z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ + (\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + \cdots (\beta \alpha_x + \alpha_x \beta) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cdots$$

要求

$$\begin{cases} l = x, y, z, 0 \\ \alpha_l^2 = 1, \alpha_0 = \beta \\ \alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x = 0 \\ \alpha_l \beta + \beta \alpha_l = 0 \end{cases}$$

得到

$$c(\alpha_x \frac{\hbar}{i} \partial_x + \alpha_y \frac{\hbar}{i} \partial_y + \alpha_z \frac{\hbar}{i} \partial_z + \beta mc^2) \psi = E \psi \quad **$$

4.4 相对论带电粒子的量子力学：DIRAC方程

证明分两步

(1) 满足上述条件的 α, β 最低阶是 4×4 矩阵

(2) 假设 4×4 矩阵

$$\alpha_x = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_y = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_z = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{bmatrix}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}$$

4.4 相对论带电粒子的量子力学：DIRAC方程

得到Dirac方程的矩阵形式

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{bmatrix} mc^2 I & c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -mc^2 I \end{bmatrix}, I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

解四分量本征方程

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

4.4 相对论带电粒子的海森堡方程

Dirac方程的理论预言——自由电子的Zitterbewegung效应

$$\dot{x} = \frac{1}{i\hbar} [x, H] = c\alpha_x;$$

$$\begin{aligned}\dot{\alpha}_x &= \frac{1}{i\hbar} [\alpha_x, H] = \frac{1}{i\hbar} [\alpha_x H - H\alpha_x] = \frac{1}{i\hbar} [2\alpha_x H - \{\alpha_x, H\}] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [2\alpha_x H - 2cp_x];\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha_x \alpha_l + \alpha_l \alpha_x &= 0 \\ \alpha_x^2 &= 1\end{aligned}$$

则有

$$\ddot{\alpha}_x = \frac{1}{i\hbar} [2\dot{\alpha}_x H - \underbrace{2c\dot{p}_x}_{=0}] = \frac{1}{i\hbar} (2\dot{\alpha}_x H)$$

4.4 相对论带电粒子的海森堡方程

把 p_x 和 H 作为常数得到

$$\alpha_x(t) = \frac{i\hbar}{2H} \ddot{\alpha}_x(0) \exp\left(-\frac{2iH}{\hbar}t\right) + \frac{cp_x}{H}$$

$$\dot{x} = \frac{i\hbar}{2H} c \dot{\alpha}_x(0) \exp\left[-\frac{2iH}{\hbar}t\right] + \frac{c^2 p_x}{H}$$

$$x(t) = -\frac{\hbar^2}{4H^2} c \left(\exp\left[-\frac{2iH}{\hbar}t\right] - 1 \right) \ddot{\alpha}_x(0) + \frac{c^2 p_x}{H} t + \alpha$$

4.4 相对论带电粒子的海森堡方程

结论：自由电子速度包含两部分：

1. 依赖于初始速度的常数部分

$$v_c = \frac{c^2 p_x}{H} \cong \frac{c^2 p_x}{mc^2} = \frac{p_x}{m}$$

2. 初态加速度的振荡部分

$$v_{os} = \frac{i\hbar}{2H} c \ddot{\alpha}_x(0) \exp\left[-\frac{2iH}{\hbar} t\right]$$

其中

$$H \approx mc^2$$

4.4 相对论带电粒子的海森堡方程

考察

$$x(t) = -\frac{\hbar^2}{4H^2} c \left(\exp \left[-\frac{2iH}{\hbar} t \right] - 1 \right) \dot{\alpha}_x(0) + \frac{c^2 p_x}{H} t + \alpha$$

中振荡部分的贡献正比于

Zitterbewegung效应

$$\left| \exp \left[-\frac{2iH}{\hbar} t \right] - 1 \right|^2 = 4 \sin^2 \frac{H}{\hbar} t \approx 4 \sin^2 \frac{mc^2}{\hbar} t$$

对时间做平均

$$\langle x \rangle_T = \alpha + c^2 p_x / H$$

$$\simeq \alpha + \frac{p_x}{m} t$$

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

最小耦合原理（规范不变性）：

$$p = -i\hbar\nabla \text{ 换为机械动量 } \vec{\pi} = \vec{p} - e\vec{A}$$

电子在电磁场中哈密顿量为

$$H = c \vec{\pi} \cdot \vec{\alpha} + \beta mc^2 + e\varphi$$

令 $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_S \end{pmatrix}$, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 给出

$$\begin{pmatrix} mc^2 & c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_S \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_S \end{pmatrix}$$

习题

a) 试给出在规范变换下，不含电磁场的Dirac方程的

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$$

变换结果。

b) 验证具有最小耦合作用的Dirac方程在规范变换下是不变的

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

分量表达

$$c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_S = (E - mc^2 - e\varphi)\psi_L \equiv (E_N - e\varphi)\psi_L$$

$$c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L = (E_N + 2mc^2 - e\varphi)\psi_S$$

在非相对论极限下

$$E_N = (E - mc^2) \ll 2mc^2$$

$$e\varphi \ll 2mc^2$$

$$mc^2 = 511 \text{ KeV}$$

$$\psi_S \simeq \frac{1}{2mc^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L$$

故

$$(E_N - e\varphi)\psi_L = \frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 \psi_L$$

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

利用公式

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b}) + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

得到

$$\begin{aligned}\vec{\pi} \times \vec{\pi} &= (\vec{p} - e\vec{A}) \times (\vec{p} - e\vec{A}) \\ &= \vec{p} \times \vec{p} + e^2(\vec{A} \times \vec{A}) - e(\vec{p} \times \vec{A} - \vec{A} \times \vec{p}) \\ &= -\frac{e\hbar}{i}(\nabla \times \vec{A} - \vec{A} \times \nabla) \equiv +ie\hbar \vec{B}\end{aligned}$$

其中用到了

$$(\nabla \times \vec{A} - \vec{A} \times \nabla)f(x) = (\nabla \times \vec{A})f(x) = \vec{B}f(x)$$

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

导出了自旋与磁场的耦合项：

$$\frac{1}{2m} (p - eA)^2 \psi_L - \frac{e\hbar}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \psi_L = \varepsilon \psi_L$$

非相对论近似下哈密顿量

$$H_N = \frac{1}{2m} (p - eA)^2 - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

其中

$$\vec{\mu} \equiv -\frac{\partial H}{\partial \vec{B}} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \equiv \frac{e}{m} \vec{S}$$

为自旋磁矩

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

例子：

$$B_z = B, \quad B_x = 0, \quad B_y = 0$$

对称规范

$$A_y = \frac{1}{2} B_x, \quad A_x = -\frac{1}{2} B_y, \quad A_z = 0$$

自由电子运动方程

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m} (p - eA)^2 \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{m} (\vec{A} \cdot \vec{p}) \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{2m} B (xp_y - yp_x) \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B} \end{aligned}$$

自旋的旋磁比 e/m 比轨道的磁旋比大了一倍

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子：最低相对论修正

最低阶的相对论修正，保留到 c^2 阶

$$\begin{aligned}\psi_S &= \frac{1}{2mc^2 + E_N - e\varphi} c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L \\ &\simeq \left(1 - \frac{E_N - e\varphi}{2mc^2 + E_N - e\varphi}\right) \frac{1}{2mc^2} c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L \\ &\simeq \left(1 - \frac{E_N - e\varphi}{2mc^2}\right) \frac{1}{2mc^2} c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L\end{aligned}$$

$$\psi_S \cong \frac{1}{2mc} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L - \frac{1}{2mc} \left(\frac{E_N - e\varphi}{2mc^2 + E_N - e\varphi}\right) (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L$$

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

$$(E_N - e\varphi)\psi_L = \frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2\psi_L$$



$$\begin{aligned}\varepsilon\psi_L &= c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_S \cong c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\left(1 - \frac{\varepsilon}{2mc^2}\right)c(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L \\ &\equiv c^2(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\left(1 - \frac{\varepsilon}{2mc^2}\right)(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L \\ &= c^2(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_L - \frac{\varepsilon}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varepsilon \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \psi_L\end{aligned}$$

其中定义了

$$\varepsilon(\varphi) = E_N - e\varphi$$

对任何函数 f

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})f = f(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) - ie\hbar f'(\varphi)(\vec{\sigma} \cdot \vec{E})$$

其中

$$\vec{E} = -\nabla\varphi$$

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

$$[\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}, e\varphi] = e\varphi \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} - \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} (e\varphi) = ie\hbar \vec{\sigma} \cdot \nabla\varphi$$

$$[p_x - eA_x, e\varphi] = -i\hbar e \left(-\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) = \frac{e\hbar}{i} E_x$$

最后有

$$\frac{1}{2m} [(p - eA)^2 - e\hbar(\vec{\sigma} \cdot \vec{B})] \psi_L - \frac{e\hbar}{ic} \frac{1}{2m} \vec{E} [(p - eA) + i(p - eA) \times \vec{\sigma}] \psi_L = \varepsilon \psi_L$$

$$\left\{ \frac{1}{2m} (p - eA)^2 - \frac{e\hbar}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) - \frac{p^4}{8m^3 c^2} - \frac{e\hbar}{4m^2 c^2} \left[\vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}) + \underbrace{\frac{e\hbar^2}{4m^2 c^2} \vec{E} \cdot \nabla}_* \right] \right\} \psi_L = \varepsilon \psi_L$$

4.5 自旋与电磁场中的带电粒子

最后一项不依赖于自旋，在中心力场中，

$$\vec{E} = E \frac{\vec{r}}{r}$$

平行于 $\vec{r}$ ，则第四项为自旋轨道耦合项

$$-\frac{e}{2m^2c^2} \frac{E}{r} (\vec{s} \cdot \vec{l}), \vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$$

它将给出超精细结构。

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

设自由电子满足狄拉克方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

$$\hat{H} = c\alpha \cdot \hat{p} + mc^2\beta$$

平面波解为

$$\psi_{p,E} = u(p)e^{i(p \cdot r - Et)/\hbar}$$

则有本征方程

$$(c\alpha \cdot \hat{p} + mc^2\beta)u = Eu$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

设 $u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}$ ，并取电子动量的方向为 z 轴方向

则有本征方程的矩阵形式

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & cp & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -cp \\ cp & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -cp & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} + mc^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

$$(mc^2 - E)u_1 + cpu_3 = 0 \quad \text{a} \quad \left. \begin{array}{l} \text{a} \\ \text{b} \end{array} \right\} u_1 \text{与} u_3 \text{的联立方程组}$$

$$cpu_1 - (mc^2 + E)u_3 = 0 \quad \text{b}$$

$$(mc^2 - E)u_2 - cpu_4 = 0 \quad \text{c} \quad \left. \begin{array}{l} \text{c} \\ \text{d} \end{array} \right\} u_2 \text{与} u_4 \text{的联立方程组}$$

$$-cpu_2 - (mc^2 + E)u_4 = 0 \quad \text{d}$$

它们有解的必要条件为

$$\begin{vmatrix} mc^2 - E & cp \\ cp & -(mc^2 + E) \end{vmatrix} = 0$$

解出 E 的两个根为

$$E = E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} = \pm |E|$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

先求正能解：

把 $E = E_+$ 分别代入

$$\begin{cases} cpu_1 - (mc^2 + E)u_3 = 0 \\ -cpu_2 - (mc^2 + E)u_4 = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow u_3 = \left[\frac{cp}{mc^2 + E_+} \right] u_1, \quad u_4 = \left[\frac{-cp}{mc^2 + E_+} \right] u_2$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

选 $(\hat{p}, \hat{H}, \Sigma_z)$ 作为力学量完全集，求其共同本征态

即要求 u 也必须是 Σ_z 的本征态

$$\Sigma_z \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}$$

按照 $\Sigma_z^2 = 1$ ，可求出它的本征值是 $\lambda = \pm 1$ ，

Σ_z 的矩阵表示为

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

代入 Σ_z 的本征方程，得

$$u_1 = \lambda u_1, \quad -u_2 = \lambda u_2, \quad u_3 = \lambda u_3, \quad -u_4 = \lambda u_4$$

对于 $E = E_+$ ，有如下两组解

$$\lambda = +1 (s_z = \hbar/2)$$

$$\lambda = -1 (s_z = -\hbar/2)$$

即

$$u^{(1)} \sim \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{mc^2 + E_+} \\ 0 \end{bmatrix}, u^{(2)} \sim \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-cp}{mc^2 + E_+} \end{bmatrix}$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

经过归一化，得

$$u^{(1)} \sim N \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ cp \\ mc^2 + E_+ \\ 0 \end{bmatrix}, u^{(2)} \sim N \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -cp \\ mc^2 + E_+ \end{bmatrix}$$

其中

$$N = \left(1 + \frac{c^2 p^2}{(mc^2 + E_+)^2} \right)^{-1/2}$$

以上所得，是两个正能解。类似可求出两个负能解。

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

动量(设沿 z 轴方向)值为 p 的电子的四个可能态归纳如下:

$$u^{(1)} = N \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ cp \\ mc^2 + E_+ \\ 0 \end{bmatrix}, E = E_+, s_z = \hbar/2 (\uparrow), \quad u^{(2)} = N \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -cp \\ mc^2 + E_+ \end{bmatrix}, E = E_+, s_z = -\hbar/2 (\downarrow)$$

$$u^{(3)} = N \begin{bmatrix} -cp \\ mc^2 - E_- \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, E = E_-, s_z = \hbar/2 (\uparrow), \quad u^{(4)} = N \begin{bmatrix} 0 \\ cp \\ mc^2 - E_- \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, E = E_-, s_z = -\hbar/2 (\downarrow)$$

其中

$u^{(1)}, u^{(2)}$ 是正能解
 $u^{(3)}, u^{(4)}$ 是负能解

$$N = \left(1 + \frac{c^2 p^2}{(mc^2 + |E|)^2} \right)^{-1/2}$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

在非相对论极限 $v/c \rightarrow 0$ 情况下，趋于

$$u^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u^{(4)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

负能级的出现，是相对论量子力学的普遍困难，只有把波动方程解释为场方程并进行量子化以后，才能克服这个困难。

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

为了加深对狄拉克方程的理解，现在把狄拉克方程应用于质量为零的粒子，考虑中微子二分量理论的建立。

自旋 $s = \hbar/2$, 质量 $m = 0$

协变的中微子波动方程可表示为

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi_\lambda + \sum_{\mu} \sigma_{\lambda\mu} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \phi_\mu = 0$$

把 ϕ_λ 写成列矢形式：

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi + \sum_{i=1}^3 \sigma_i \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \phi = 0$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

按照狭义相对论中的能量动量关系式, $m = 0$ 时有

$$E^2 = p^2 c^2$$

要求 ϕ 的每一个分量满足一个含时间的二阶导数的微分方程,
即

$$\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 \hbar^2 \nabla^2 \right) \phi = 0$$

或

$$\left(-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2 \right) \phi = 0$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

上述方程是对波动方程中矩阵 $\sigma_i (i = x, y, z)$ 的限制。

用 $\left(-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \sum_k \sigma_k \frac{\partial}{\partial x_k}\right)$ 对波动方程进行运算，得到

$$\left(-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \sum_{ki} \sigma_k \sigma_i \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_i}\right) \phi = 0$$

经过对称化后，得

$$\left[-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{2} \sum_{ki} (\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k}\right] \phi = 0$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

与方程

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2\right)\phi = 0$$

比较, 可得出

$$\frac{1}{2}(\sigma_i\sigma_k + \sigma_k\sigma_i) = \delta_{ik}$$

$$i, k = x, y, z$$

即

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \quad \sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x, \dots$$

这正是泡利矩阵所满足的关系式。因此, σ 可取为 2×2 矩阵, 通常就采用泡利矩阵的表示式。

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

几率守恒要求

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i, i = 1, 2, 3 \text{ 或 } x, y, z$$

可以验证, 上述方程保证几率守恒。

可求出连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot j = 0$$

其中

$$\rho = \phi^\dagger \phi = \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}^* \phi_{\lambda}$$

$$j = c \phi^\dagger \alpha \phi = c \sum_{\lambda, \mu} \phi_{\lambda}^* \sigma_{\lambda \mu} \phi_{\mu}$$

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

与狄拉克方程有所不同，由于中微子静质量为零，在波动方程中只出现三个彼此反对易的矩阵，波动方程还常写成

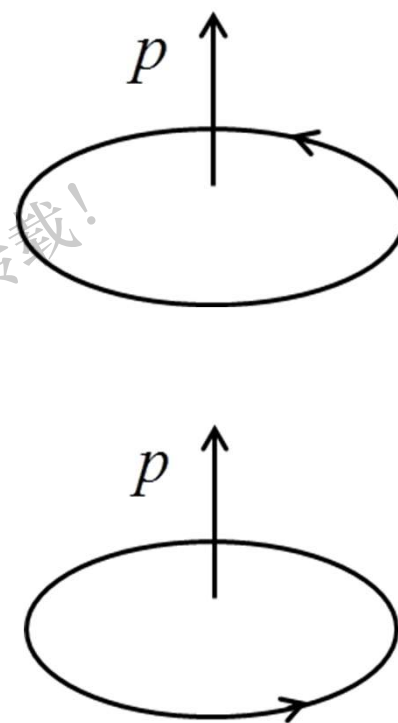
$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\sigma \cdot \frac{\partial}{\partial x} \phi$$

或

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = \hat{H} \phi$$

$$\hat{H} = -i\hbar c \sigma \cdot \frac{\partial}{\partial x} = c \sigma \cdot \hat{p}$$

这就是静质量 $m = 0$ ，自旋 $s = 1/2$ 的粒子满足的二分量波动方程。



4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

讨论

1. 显然 $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$, 所以动量 p 是守恒量。
2. 由 $[\sigma \cdot \hat{p}, \hat{H}] = 0$, 所以 $\sigma \cdot \hat{p}$ 是守恒量, $\sigma \cdot \hat{p}/|p|$ 也是守恒量, 即 σ 沿动量方向 p 的投影是守恒量。

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

考虑到 $(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} / |A||B|$, 即

$$\frac{\sigma \cdot p}{|p|} \frac{\sigma \cdot p}{|p|} = 1$$

所以

$$\frac{\sigma \cdot p}{|p|} = \pm 1$$

其中

$\sigma \cdot p / |p| = +1$ 为右旋粒子态

$\sigma \cdot p / |p| = -1$ 为左旋粒子态

4.6 相对论电子的平面波解与中微子二分量理论

练习题

与电子相似，证明

$$[\hat{l}, \hat{H}] = i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}} \neq 0$$

这说明轨道角动量不是守恒量。再证明

$$\frac{\hbar}{2} [\boldsymbol{\sigma}, \hat{H}] = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}}$$

$$\text{令 } \hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad \hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$$

则

$$[\hat{\mathbf{j}}, \hat{H}] = 0$$

$\hat{\mathbf{s}}$ 称为中微子自旋算符， $\hat{\mathbf{j}}$ 是总角动量。

上式表明总角动量是守恒量。

4.7 费米子二次量子化应用：超导的BCS理论

金属电子的凝胶模型

晶体中相互作用电子的有效哈密顿量

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + H_+$$

H_+ 抹平了晶格正离子形成的正点背景哈密顿量

$$\frac{e}{r} = \sum_q v(q) e^{iq\vec{r}}, \quad v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{i \neq j} v(q) e^{iq(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + H_+$$

金属电子的凝胶模型

电子密度算子

$$\rho(\vec{r}) = \sum_j \delta(r - r_j) = \sum_q \sum_j e^{iq(\vec{r}_j - \vec{r})} \equiv \sum_q \rho_q e^{iqr},$$

$$\rho_q = \sum_j e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_j}$$

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_q v(q) (\rho_q^* \rho_q - N) - \frac{1}{2} v(q) N = \frac{1}{2} \sum_q v(q) \rho_q^* \rho_q$$

$q = 0$ 项是均匀分布电子的自作用能(抵消 H)

$$\frac{e^2}{r} = \sum_q v(q) e^{iqr} = \sum_{q=0} v(q = 0) + \sum_{q \neq 0} v(q \neq 0) e^{iqr}$$

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} v(q) (\rho_q^\dagger \rho_q - N)$$

金属电子的凝胶模型

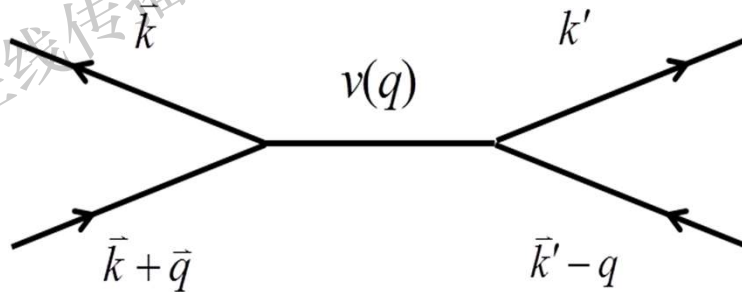
$$\rho(\vec{r}) = \int \psi^\dagger(r) \delta(r - r') \psi(\vec{r}) = \psi^\dagger(\vec{r}, t) \psi(\vec{r})$$

$$= \sum_{kk'} C_k^\dagger C_{k'} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} = \sum_{kq} C_k^\dagger C_{k+q} e^{iqr}$$

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$$

$$\rho_q = \sum_k C_{k-q}^\dagger C_k$$

$$\hat{H} = \sum_k E_k C_k^\dagger C_k + \frac{1}{2} \sum_{kk'} v(q) C_{k+q}^\dagger C_{k'-q}^\dagger C_{k'} C_k$$



BCS超导理论初阶

电声子相互作用

离子固定时，电子与晶格的作用为

$$H_e^0 = \sum_{jl} V(\vec{r}_j - \vec{l})$$

离子有小振动时，在 $\vec{l}$ 格点上偏离 $\vec{u}$ ，相互作用能为

$$H_e = \sum_{jl} V(\vec{r}_j - \vec{l} - \vec{u}_l)$$

电声子作用能为

$$H_{ep} = H_e - H_e^0 = \sum_{jl} \{V(\vec{r}_j - \vec{l} - \vec{u}_l) - V(\vec{r}_j - \vec{l})\}$$

$$= - \sum_{jl} \vec{u}_l \cdot \nabla V(\vec{r}_j - \vec{l}) \equiv \sum_i h(r_i)$$

单体势

$$h(r) = - \sum_l u_l \cdot \nabla V(\vec{r} - \vec{l})$$

BCS超导理论初阶

电声作用二次量子化表达

$$H_{ep} = \sum_{k,k'} \langle k | h(r) | k' \rangle = - \sum_l \sum_{kk'} \vec{u}_l \cdot \langle \vec{k}' | \nabla V(\vec{r} - \vec{l}) | k \rangle C_k^\dagger C_k$$

声子=晶格振动模相当于谐振子

$$u_l \sim \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_l}} (a_l + a_l^\dagger) \dots$$

$$H_{ep} = \sum_{kq} D_q a_q C_{k+q}^\dagger C_k + D_q^* a_q^\dagger C_{k-q}^\dagger C_k$$

有效电子—电子相互作用

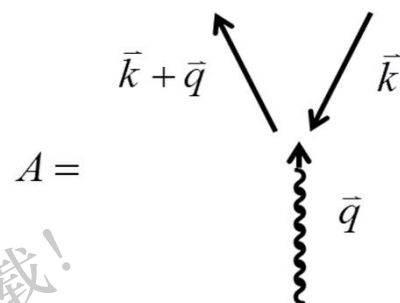
$$H_{eff} = \hat{H}$$

BCS超导理论初阶

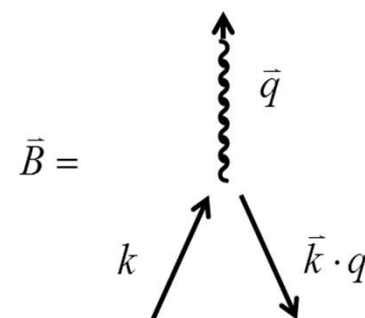
任务：平均掉声子自由度，得到电子—电子有效作用。

Frohlich正则变换方法：

$$H = H_0 + H_1: \begin{cases} H_0 = \sum_q \hbar \omega_q a_q^\dagger a_q + \sum_k \epsilon_k C_k^\dagger C_k \\ H_1 = H_{ep} = \sum_{kq} D_q a_q C_{k+q}^\dagger C_k + D_q^* a_q^\dagger C_{k-q}^\dagger C_k \end{cases}$$



吸收声子产生电子空穴对



电子空穴对复合产生声子

正则变换(相似变换):

$$H \rightarrow H_S = e^{-S} H e^S$$

BCS超导理论初阶

不改变 H 的“物理”：能谱结构

设 S 和 H_1 同阶量，

$$H_S = e^{-\lambda S} H e^{\lambda S}, H = H_0 + \lambda H_1$$

则

$$\begin{aligned} H_S &= H + [H, S] + \frac{1}{2} [[HS], S] \\ &= H_0 + \lambda([H_0, S] + H_1) + \frac{1}{2} \lambda^2 [(H_1 + [H_0, S]), S] + \frac{1}{2} \lambda^2 [H_1, S] \end{aligned}$$

到二阶近似：选 S 使

$$[H_0, S] + H_1 = 0$$

⇒确定 S

$$\langle m | [H_0, S] | n \rangle = (E_m - E_n) \langle m | S | n \rangle = -\langle m | H_1 | n \rangle$$

BCS超导理论初阶

$$H_0|m\rangle = E_m|m\rangle$$

$$\Rightarrow \langle m|S|n\rangle = \frac{\langle m|H_1|n\rangle}{E_n - E_m}$$

$$|n\rangle = \prod_k c_k^\dagger |0\rangle \otimes \prod_\alpha |n_\alpha\rangle \equiv c_k^\dagger |0\rangle \otimes |a_q^\dagger\rangle \otimes |0\rangle$$

其中

$$E_n = (\epsilon_k + \hbar\omega_q)$$

$$|m\rangle = c_{k+q}^\dagger |0\rangle \otimes |0\rangle$$

$$E_m = \epsilon_{k+q}$$

BCS超导理论初阶

H_1 只使声子数改变1

$$A_q = \frac{D_q}{\epsilon_k + \hbar\omega_q - \epsilon_{k+q}}, \quad B_q = \frac{D_q^*}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega_q}$$

这时

$$\begin{cases} |m\rangle = C_{k-q}^\dagger \times a_q^\dagger \\ |n\rangle = C_k^\dagger \\ E_n = \epsilon_k \\ E_m = \epsilon_{k-q} + \hbar\omega_q \end{cases}$$

$$S = \sum_{k,q} (A_q a_q C_{k+q}^\dagger C_k + B_q a_q^\dagger C_{k-q}^\dagger C_k)$$

$$\text{满足 } [H_0, S] + H_1 = 0$$

BCS超导理论初阶

只考虑声子部分从真空态到真空态的跃迁

$$H = H_0 + \frac{1}{2} [H_1, S]$$

$$H_{\text{eff}} = \langle 0 | \frac{1}{2} [H_1, S] | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_q \{ \langle 0 | H_1 | I_q \rangle \langle I_q | S | 0 \rangle - \langle 0 | S | I_q \rangle \langle I_q | H_1 | 0 \rangle \}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle 0 | H_1 | I_q \rangle = \sum_k D_q C_{k+q}^\dagger C_k \\ \langle I_q | H_1 | 0 \rangle = \sum_k D_q C_{k-q}^\dagger C_k \\ \langle I_q | S | 0 \rangle = \sum_k \frac{D_q^*}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega_q} C_{k-q}^\dagger C_k \\ \langle 0 | S | I_q \rangle = \sum_k \frac{D_q}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + \hbar\omega_q} C_{k+q}^\dagger C_k \end{array} \right.$$

BCS超导理论初阶

要求 $q \leftrightarrow -q$ 对称性, 则

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{k, k', q} |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{(\epsilon_k - \epsilon_{k+q})^2 - (\hbar\omega_q)^2} C_{k+q}^\dagger C_{k'-q}^\dagger C_{k'} C_k$$

$$H_{\text{eff}} \equiv \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 q} V_{k_1 q} C_{k_1+q}^\dagger C_{k_2-q}^\dagger C_{k_2} C_{k_1}$$

电子间的库伦作用

$$H_{\text{coul}} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 q} \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2} C_{k_1+q}^\dagger C_{k_2-q}^\dagger C_{k_2} C_{k_1}$$

当 $|\epsilon_k - \epsilon_{k+q}| < \hbar\omega_q$, $V_{k_1 q} < 0$ 为吸引力作用。若吸引作用

超过库伦斥力作用 $\frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2}$, 则产生电子间的吸引。

BCS超导理论初阶

在费米面附近，净吸引势 $V_{k,q} + \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2}$ 用常数代替，设为 $-V$ 。

BCS有效哈密顿

$$\bar{H} = \sum_k \epsilon_k (C_k^\dagger C_k + C_{-k}^\dagger C_{-k}) - V \sum_{kk'} C_{k'}^\dagger C_{-k'}^\dagger C_{-k} C_k$$

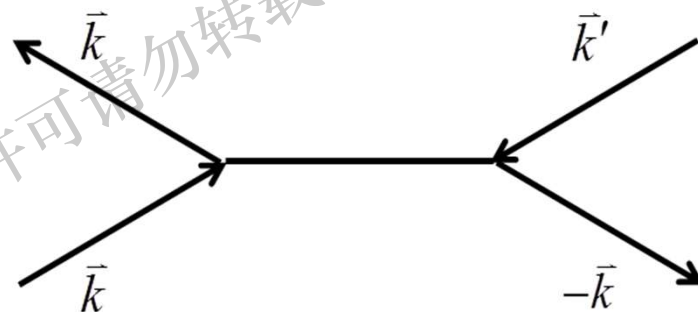
动量为 k 和 $-k$ 的电子成对产生或成对地消失

$$\epsilon_k = E_k - E_F$$

$$|v\rangle = \text{vacuum state}, C_R |v\rangle = 0$$

设 $|0\rangle = \prod_{k=1}^N (u_k + v_k C_k^\dagger C_{-k}^\dagger) |v\rangle$ 为BCS基态，

归一化条件 $\langle 0|0\rangle = 1 \Rightarrow u_k^2 + v_k^2 = 1$



BCS超导理论初阶

为求 $\bar{H}$ 基态，把 $\bar{H}$ 化为二次型：基态上，对算子平均值为

$$\begin{cases} \langle C_k^\dagger C_{-k}^\dagger \rangle \equiv \langle 0 | C_k^\dagger C_{-k}^\dagger | 0 \rangle \neq 0 \\ \langle C_{-k} C_k \rangle \equiv \langle 0 | C_{-k} C_k | 0 \rangle \neq 0 \end{cases}$$

利用在对算子附近的偏差

$$\begin{aligned} \delta &= C_{-k} C_{-k} - C_{-k} C_k \\ \delta' \delta'' \delta' &= C_k^\dagger C_k^\dagger - k + \end{aligned}$$

作为微扰子量，作 $\bar{H}\bar{H}$ 并记

$$\Delta = V \sum_k \langle C_{-k} C_k \rangle \sum_k \langle C_{-k} C_k \rangle^\dagger C_{-k}^\dagger = \Delta$$

BCS超导理论初阶

则在一级近似下， $\bar{H}$ 为二次型

$$\bar{H} \cong \sum_k \epsilon_k (C_k^\dagger C_k + C_{-k}^\dagger C_{-k}) - \Delta \sum_k (C_k^\dagger C_{-k}^\dagger + C_{-k} C_k) + \Delta^2 / V$$

利用Bogoliubov变换对角化 $\bar{H}$ ：令

$$\alpha_k = u_k C_k + v_{-k} C_{-k}^\dagger \Rightarrow \begin{cases} \alpha_k^\dagger = u_k C_k^\dagger + v_{-k} C_{-k} \\ \alpha_{-k} = u_{-k} C_{-k} + v_k C_k^\dagger \\ \alpha_{-k}^\dagger = u_{-k} C_{-k}^\dagger + v_k C_k \end{cases} \quad (\Delta)$$

$$\begin{aligned} \{\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger\} &= u_k u_{k'} \{C_k, C_{k'}^\dagger\} + v_{-k} v_{-k'} \{C_{-k}^\dagger, C_{-k'}\} \\ &= \delta_{kk'} (u_k^2 + v_{-k}^2) \end{aligned}$$

$$\{\alpha_k, \alpha_{k'}\} = \delta_{kk'} (u_k v_k + u_{-k} v_{-k})$$

BCS超导理论初阶

我们取特解

$$\begin{cases} u_k = u_{-k} \\ v_k = -v_{-k} \end{cases} \quad v_k^2 + u_k^2 = 1$$

(Δ) 的逆变换

$$C_k = u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^\dagger \Rightarrow \begin{cases} C_k^\dagger = u_k \alpha_k^\dagger + v_k \alpha_{-k} \\ C_{-k} = u_k \alpha_{-k} - v_k \alpha_k^\dagger \\ C_{-k}^\dagger = u_k \alpha_{-k}^\dagger - v_k \alpha_k \end{cases}$$

代入 $\bar{H}$ 得

$$\bar{H}_0 = \sum_k [2\epsilon_k v_k^2 - 2u_k v_k \Delta] + \frac{\Delta^2}{V} + \sum_k \{ [\epsilon_k (u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta u_k v_k] (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) + [2\epsilon_k u_k v_k - \Delta (u_k^2 - v_k^2)] (\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k} \alpha_k) \}$$

BCS超导理论初阶

令对角项为0, $\Delta(u_k^2 - v_k^2) = 2\epsilon_k u_k v_k$

由上式和 $v_k^2 + u_k^2 = 1$ 消除 v_k

$$(u_k^2)^2 - (u_k^2) + \frac{1}{4} \frac{\Delta^2}{\xi_k^2} = 0$$

$$\xi_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2} \quad (\epsilon_k = E_k - E_F)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\epsilon_k}{\xi_k} \right) \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\epsilon_k}{\xi_k} \right) \quad (\text{有两组解})$$

BCS超导理论初阶

取

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{\xi_k} \right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\xi_k} \right)$$

则在 $\Delta = 0$ 时给出合理结果

$$u_k = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{|\epsilon_k|} \right) = \begin{cases} 1, & k > k_F (E_k > K_F, |\epsilon_k| = \epsilon_k > 0) & A \\ 0, & k < k_F (E_k < K_F, |\epsilon_k| = -\epsilon_k > 0) & B \end{cases}$$

$$v_k = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{|\epsilon_k|} \right) = \begin{cases} 0, & k > k_F \\ 1, & k < k_F \end{cases}$$

BCS超导理论初阶

此时

$$\alpha_k^\dagger = u_k C_k^\dagger - v_k C_{-k} = \begin{cases} C_k^\dagger & (k > k_F) \\ C_{-k} & (k < k_F) \end{cases}$$

α_k 和 $\alpha_k^\dagger$ 是描述正常电子态与空穴激发的统一算子。 $\Delta \neq 0$ 时, α_k 代表电子和空穴的混合

$$\begin{cases} \epsilon_k(u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta u_k v_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2} = \xi_k \\ \bar{H} = E_S(0) + \sum_k \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2} (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \\ E_S(0) = 2 \sum_k \epsilon_k^2 v_k^2 - 2\Delta \sum_k u_k v_k + \frac{\Delta^2}{V} \end{cases}$$

$\xi_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2}$ 代表元激发能量, 存在能隙 Δ , Δ 是从费米面激发一准粒子能量

BCS超导理论初阶

BCS基态 $|0\rangle$ ，满足 $\alpha_k|0\rangle = \alpha_{-k}|0\rangle = 0$

显然

$$|0\rangle \sim \prod_k \alpha_k \alpha_{-k} |v\rangle \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha_k \alpha_k = 0 \\ \alpha_{-k} \alpha_{-k} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} |0\rangle &\sim \prod_k (u_k C_k - v_k C_{-k}^\dagger)(u_k C_k + v_k C_k^\dagger) |v\rangle \\ &= \prod_k (u_k v_k C_k C_k^\dagger - v_k^2 C_{-k}^\dagger C_k^\dagger) |v\rangle \\ &= \prod_k (u_k v_k + v_k^2 C_{-k}^\dagger C_k^\dagger) |v\rangle \end{aligned}$$

*正常态

$$\Delta = 0$$

$$v_k = \begin{cases} 0, & k > k_F \\ 1, & k < k_F \end{cases} \quad u_k v_k = 0$$

BCS超导理论初阶

$$|F\rangle = \prod_{k < k_F} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger |v\rangle$$

是正常的费米球分布。归一化：

$$\begin{aligned} & \langle v | \prod_k (u_k v_k + v_k^2 c_{-k} c_k) (u_k v_k + v_k^2 c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) | v \rangle \\ &= \langle v | \prod_k (u_k^2 v_k^2 + v_k^4 c_{-k} c_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) | v \rangle \\ &= \prod_k (u_k^2 v_k^2 + v_k^4) \\ &= \prod_k v_k^2 \end{aligned}$$

BCS超导理论初阶

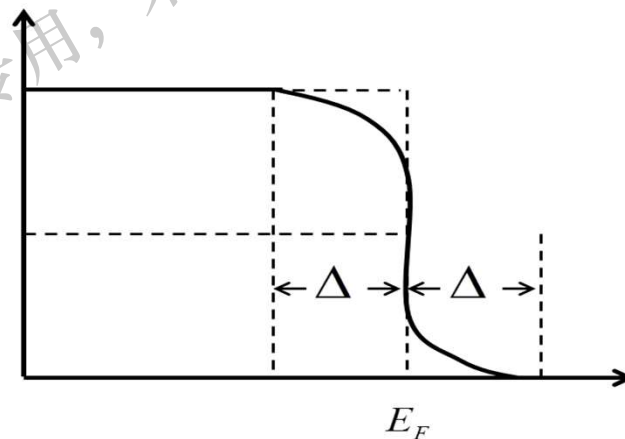
$$v_k^2 + u_k^2 = 1$$

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \frac{1}{(\prod v_k)} \prod_k (u_k v_k + v_k^2 C_k^\dagger C_{-k}^\dagger) |0\rangle \\ &= \prod_k (u_k + v_k C_k^\dagger C_{-k}^\dagger) |v\rangle \end{aligned}$$

电子态平均数

$$\langle 0 | C_k^\dagger C_k | 0 \rangle = v^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{(E_k - E_F)}{\sqrt{(E_k - E_F)^2 + \Delta^2}} \right\}$$

超导金属中电子分布：



费米面模糊化

能隙 Δ 的计算：(I) 零温情况

在基态上

$$\langle \alpha_{-k} \alpha_k \rangle = \langle \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger \rangle = 0$$

$$\begin{aligned} \Delta &\equiv V \sum_k \langle C_{-k} C_k \rangle = V \sum_k \langle 0 | (u_k \alpha_k - v_k \alpha_k^\dagger) (u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^\dagger) | 0 \rangle \\ &= V \sum_k u_k v_k \end{aligned}$$

$$u_k v_k = \sqrt{v_k^2 u_k^2} = \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2} \right)} = \frac{1}{2} \frac{\Delta}{\xi_k}$$

$$\Delta = \frac{1}{2} V \sum_k \frac{\Delta}{\xi_k}$$

费米面模糊化

零温能隙方程

$$1 = \frac{1}{2} V \sum_k \frac{1}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2}}$$

取费米面处的态密度 $g(0)$ 近似地作为吸引区态密度

$$1 = V g(0) \int_0^{\hbar\omega_p} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}$$

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_0}{\text{sh}\left(\frac{1}{g(0)V}\right)} \simeq 2\hbar\omega_0 e^{-\frac{1}{g(0)V}} \quad (g(0)V \ll 1)$$

金属元素

$$g(0)V = 0.2 \sim 0.3, \quad \hbar\omega_p = 10^{-2} \text{eV}, \quad \Delta = 10^{-4} \text{eV}$$

费米面模糊化

能隙 Δ 的计算：(II) 有限温度情况

$$\begin{aligned}\Delta(T) &= V \sum_k \langle C_{-k} C_k \rangle_T \\ &= V \sum_k \langle (u_k \alpha_{-k} - v_k \alpha_k^\dagger)(u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^\dagger) \rangle_T \\ &= V \sum_k u_k v_k (\langle \alpha_{-k} \alpha_{-k}^\dagger \rangle_T - \langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle_T) \\ &= V \sum_k u_k v_k (1 - \langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle_T - \langle \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k} \rangle_T)\end{aligned}$$

$$\langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle_T = \langle \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k} \rangle_T = \frac{1}{e^{\frac{\xi_k}{k_B T}} + 1} = f(\xi_k) \quad (\text{费米子分布})$$

费米面模糊化

能隙方程

$$\Delta(T) = V \sum_k u_k(\Delta(T)) v_k(\Delta(T)) \{1 - 2f(\xi_k)\}$$

$$\xi_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2(T)}, \quad u_k = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2(T)}} \right)$$

$$v_k = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2(T)}} \right), \quad 1 = \frac{1}{2} V \sum_k \frac{\tanh\left(\frac{1}{2} \beta \xi_k\right)}{\xi_k}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

费米面模糊化

$$\Delta(T) \rightarrow 0, \quad \xi_k \rightarrow |\epsilon_k|$$

超导态变成正常金属态。

$$\Delta(T_c) = 0$$

$$1 = g(0)V \int_0^{\hbar\omega_p} d\epsilon \frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta_c\epsilon\right)}{\epsilon}$$

费米面模糊化

Euler积分

$$1 = g(0)V \ln \left[\left(\frac{2e\gamma}{\pi} \right) \left(\frac{\hbar\omega_p}{k_B T_c} \right) \right] \quad \gamma = 0.5772$$

$$k_B T_c \simeq 1.13 \hbar\omega_p \exp \left[-\frac{1}{g(0)V} \right]$$

$$\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} \simeq \pi e^{-\gamma} = 1.76 \quad (\text{与材料特性无关})$$

抗磁电流

$$\begin{aligned} \vec{J}_2(\vec{r}) &= -\frac{e^2}{mc} \Psi^\dagger \vec{A} \Psi \\ &= -\frac{e^2}{mc} \vec{A}(\vec{r}) \sum_{kq} e^{-iq \cdot \vec{r}} (C_{k+q}^\dagger C_k + C_{-k}^\dagger C_{-k-q}) \end{aligned}$$

费米面模糊化

零温超导基态平均值

$$\vec{J}_2(\vec{r}) = \langle \hat{\vec{J}}_2(\vec{r}) \rangle_0 = -\frac{e^2}{mc} A(r) \sum_{kq} \langle 0 | C_{k+q}^\dagger C_k + C_{-k}^\dagger C_{-k-q} | 0 \rangle$$

只有 $q = 0$ 项有贡献

$$\langle 0 | C_k^\dagger C_k | 0 \rangle = v_k^2 = \langle 0 | C_k^\dagger C_{-k} | 0 \rangle$$

$$\vec{J}_2(\vec{r}) = -\frac{e^2}{mc} \vec{A}(\vec{r}) \sum_k 2v_k^2 = -\frac{e^2}{mc} A(r) \sum_k \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\xi_k}\right)$$

$$= -\frac{me^2}{mc} \vec{A}(\vec{r}) = -\frac{c}{2\pi} \lambda_c^{-2}(0) A(r)$$

(满足伦敦方程)

费米面模糊化

证明

$\hat{J}_1$ 也满足 L 方程

$$\vec{J}_1(\vec{r}) = \frac{e\hbar}{2m} \sum_{k,q} (2\vec{k} + \vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \{ (u_{k+q}v_k - u_kv_{k+q})$$

$$(\alpha_{k+q}^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_k \alpha_{-k-q}) + (u_{k+q}u_k + v_{k+q}v_k)(\alpha_{k+q}^\dagger \alpha_k - \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k-q}) \}$$

$$|0\rangle_1 = |0\rangle_0 + \sum_l' |l\rangle_0 \frac{{}_0\langle l|H_1|0\rangle}{E_0 - E_l}$$

$$\dot{J}_1(\vec{r}) = {}_0\langle 0|\hat{j}|0\rangle_0 + \sum_l' \left\{ \frac{{}_0\langle 0|\vec{J}_1|l\rangle_0 {}_0\langle l|H_1|0\rangle}{E_0 - E_l} + \frac{{}_0\langle 0|H_1|l\rangle_0 \langle l|\hat{j}_1|0\rangle_0}{E_0 - E_l} \right\}$$

$$|l\rangle_0 = a_{k+q}^\dagger a_{-k}^\dagger, \quad E_l = \xi_{k+l} + \xi_k$$

费米面模糊化

$$\left\{ \begin{array}{l} {}_0\langle l|H_1|0\rangle_0 = -\frac{e\hbar}{mc}[\vec{k} \cdot \vec{A}(q)](u_{k+q}v_k - u_kv_{k+q}) \\ {}_0\langle l|j_1|0\rangle_0 = \frac{e\hbar}{mc}\left[(2k+q)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right](u_{k+q}v_k - u_kv_{k+q}) \\ {}_0\langle 0|\vec{j}_1|l\rangle_0 = \frac{e\hbar}{2m}\left[(2k+q)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right](u_{k+q}v_k - u_kv_{k+q}) \\ {}_0\langle 0|H_1|l\rangle_0 = -\frac{e\hbar}{mc}[\vec{k} \cdot \vec{A}(-\vec{q})](u_{k+q}v_k - u_kv_{k+q}) \\ {}_0\langle 0|j_1|0\rangle_0 = 0 \end{array} \right.$$