

第六章 半导体器件中的量子物理(14学时)

- 6.1 全同粒子的统计分布
- 6.2 开放体系与跃迁

6.1 全同粒子的统计分布

1. 全同粒子

- ① 若干个粒子之间没有任何区别，称它们为全同粒子，例如若干个电子
- ② 在经典世界里，全同粒子是可以分辨的
- ③ 在量子世界中，全同粒子不可以分辨：因为粒子的状态由波函数描述，我们只能知道一个粒子出现在某个位置的几率幅，而不可能确切地跟踪粒子；如果我们有多多个全同粒子，由于我们不能确切跟踪每一个粒子，我们也无法给区分出每个粒子一开始是哪一个
- ④ 多粒子的波函数及其意义 $\psi(r_1, r_2, r_3 \dots)$ ：第一个粒子位于 r_1 ，第二个粒子位于 r_2 ，第三个粒子位于 $r_3 \dots$ 的几率幅；这个定义似乎与全同粒子的不可分辨性矛盾
- ⑤ 然而：存在某些波函数，这些波函数对于粒子的交换（定义交换算符 \hat{P}_{ij} ）不发生变化（或者只是乘以一个常数因子）：
$$\hat{P}_{ij}\psi(\dots, r_i, \dots r_j \dots) = \psi(\dots, r_j, \dots r_i \dots) = c\psi(\dots, r_i, \dots r_j \dots)$$

6.1 全同粒子的统计分布

1. 全同粒子

- ⑥ 全同粒子的波函数一定应该是这种形式的波函数
- ⑦ 交换算符如果作用两次，相当于什么都没做，所以波函数应该完全回到原先的形式（连常数因子都不应该有），即 $\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij} = I$
- ⑧ 这要求 $c^2 = 1$ ，即 $c = \pm 1$
- ⑨ c 取+1的粒子称为玻色子， c 取-1的粒子称为费米子
- ⑩ 根据相对论量子力学的结论，自旋为整数的粒子为玻色子，自旋为半整数的粒子为费米子。声子、光子、磁振子、等离激元等都是玻色子，电子、空穴、质子、中子等都是费米子
- ⑪ 对于任意的多粒子波函数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)$ ，我们可以构造完全对称波函数，它满足 $c = +1$ ：
$$\phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) = C \sum_P P\{\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)\},$$
其中 C 是归一化因子， P 是 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots$ 的各种重新排列操作

6.1 全同粒子的统计分布

1. 全同粒子

- ⑫ 对于任意的多粒子波函数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)$,
我们也可以构造完全反对称波函数, 它满足 $c=-1$:
 $\phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) = C \sum_P (-1)^P P\{\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)\}$,
其中 C 是归一化因子, P 是 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots$ 的各种重新排列操作

- ⑬ 两个粒子举例:

$$\begin{aligned}\phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &\sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \\ \phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &\sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)\end{aligned}$$

- ⑭ 三个粒子:

$$\begin{aligned}\phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &\sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1) + \psi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &\quad + \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) + \psi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) \\ \phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &\sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1) + \psi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &\quad - \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) - \psi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) - \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2)\end{aligned}$$

6.1 全同粒子的统计分布

2. 近独立全同粒子

- ① N个全同粒子之间如果没有相互作用，它们的哈密顿量一定可以写成每个粒子哈密顿量的和；当每个粒子的哈密顿量具有相同的形式时，有

$\hat{H} = \hat{H} = \sum_i \hat{H}^{(0)}(\nabla_i, \mathbf{r}_i)$ ，其中 \mathbf{r}_i 是第i个粒子的位置

- ② 这时，我们可以用单粒子的波函数去组成多粒子的波函数

- ③ 首先对角化 $\hat{H}^{(0)}$ ： $\hat{H}^s \psi_j(\mathbf{r}) = E_j^s \psi_j(\mathbf{r})$ ， $j=1,2,\dots,M$

- ④ 然后写出分离变量形式的多粒子波函数

$$\psi_{\{j_1, j_2, \dots, j_N\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_{j_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{j_2}(\mathbf{r}_2) \dots = \prod_i \psi_{j_i}(\mathbf{r}_i)$$

其中 $i=1,2,\dots,N$ ， j_i 在 $1,2,\dots,M$ 中取值，并且互相之间可以相等也可以不相等

- ⑤ 代回多粒子的薛定谔方程，显然这个波函数对应的本征能量是 $E_{j_1}^s + E_{j_2}^s + \dots + E_{j_N}^s$

- ⑥ 最后，根据粒子是玻色子还是费米子，把 $\psi_{\{j_1, j_2, \dots, j_N\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ 对称化或者反对称化

6.1 全同粒子的统计分布

2. 近独立全同粒子

- ⑦ 由于对称化和反对称化的过程不改变波函数分离变量的形式，只是重新排列了顺序，所以对称化或反对称化后的本征能量仍然是 $E_{j_1}^S + E_{j_2}^S + \cdots E_{j_N}^S$ ，即每个单电子波函数能量之和
- ⑧ 注意选定了集合 $\{j_1, j_2, \dots, j_N\}$ ，多粒子波函数也就确定了；每一个不同的 $\{j_1, j_2, \dots, j_N\}$ 集合都分别给出一个不同的多粒子波函数；所以有时候也直接把 $\psi_{\{j_1, j_2, \dots, j_N\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ 记作态矢 $|j_1, j_2, \dots, j_N\rangle$ (这里不同顺序的 j_1, j_2, \dots, j_N 对应同一个态矢，因为在对称化和反对称化的过程中，波函数对所有可能的顺序做了求和)

6.1 全同粒子的统计分布

3. 例：两个全同玻色子

① 假设 \hat{H}^s 有三个本征函数： $\psi_1(\mathbf{r})$, $\psi_2(\mathbf{r})$, $\psi_3(\mathbf{r})$

② 态矢 $|1,1\rangle$ 对应的“种子”波函数为 $\psi_{\{1,1\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)$

由于是玻色子，对称化得到最终波函数

$$\begin{aligned}\phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &\sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \\ &= \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_1(\mathbf{r}_1) \sim \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)\end{aligned}$$

③ 态矢 $|1,2\rangle$ 对应的“种子”波函数为 $\psi_{\{1,2\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$

由于是玻色子，对称化得到最终波函数

$$\phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)$$

④ 依此类推

6.1 全同粒子的统计分布

4. 例：两个全同费米子

① 假设 \hat{H}^s 有三个本征函数： $\psi_1(\mathbf{r})$, $\psi_2(\mathbf{r})$, $\psi_3(\mathbf{r})$

② 态矢 $|1,1\rangle$ 对应的“种子”波函数为 $\psi_{\{1,1\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)$

由于是费米子，反对称化得到最终波函数

$$\phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_1(\mathbf{r}_1) = 0$$

③ 波函数为零，说明粒子存在的几率处处为零，即不存在。这说明两个费米子不可能同时占据一个相同的量子状态。这就是泡利不相容原理

④ 换句话说，对于费米子，集合 $\{j_1, j_2, \dots, j_N\}$ 中的元素必须两两不相同

6.1 全同粒子的统计分布

4. 例：两个全同费米子

- ① 例如，态矢 $|1,2\rangle$ 对应的“种子”波函数为 $\psi_{\{1,2\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$
由于是费米子，反对称化得到最终波函数

$$\begin{aligned}\phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &\sim \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \\ &= \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1) = \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_1(\mathbf{r}_2) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix}\end{aligned}$$

- ② 依此类推

- ⑦ 一般地，假设有N个全同费米子，它们的波函数应该写作

$$\phi_{A,\{j_1, j_2, \dots, j_N\}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{j_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{j_1}(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_{j_1}(\mathbf{r}_N) \\ \psi_{j_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{j_2}(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_{j_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{j_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{j_N}(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_{j_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

这也称为Slater行列式

6.1 全同粒子的统计分布

5. 应用：原子中的电子排布

- ① 原子序数大于1的原子，包含有多个电子。这些电子是全同费米子，并且在忽略电子-电子之间的库伦排斥作用时，这个多电子体系的哈密顿量是每个电子的哈密顿量的直接求和，从而它们的波函数可以写成单电子波函数的Slater行列式 $|j_1, j_2, \dots, j_N\rangle$ 。根据前面的结论， j_1, j_2, \dots, j_N 必须互不相等，即多电子原子的波函数可以看作电子往不同的单电子状态中去填充，并且每个单电子状态最多只能填充一个电子。
- ② 由于体系的基态是能量最低的状态，多电子原子基态下会选择一种能量最低的填充状态：按照能量从低到高给各个单电子量子态排序，依次填充，每个状态填充一个电子，填满所有电子为止

6.1 全同粒子的统计分布

6. 应用：能带的占据

- ① 根据第五章，单电子近似下，大量原子周期排列，简并的原子能级扩展成为一个个能带
- ② 固体中的电子状态同样是一个多电子体系，基态下能量最低，所以这个多电子体系的基态依然是通过把单电子状态按照能量从低到高的顺序依次占据实现的，这导致了能带的完全占据、部分占据、不占据等不同的情况，并且导致了导体、绝缘体的区别

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

① 统计物理回顾：

- a. 熵代表了一个宏观状态所包含的微观状态个数，熵越大，宏观状态出现的几率越大： $S = k_B \ln \Omega$
- b. 根据热力学的思想，熵是能量、粒子数等宏观状态参量的函数，知道了这个函数形式，就知道了各种宏观状态出现的几率
- c. 假设一个系统的能量为 E_1 ，粒子数为 N_1 ，熵为 S_1 ，并且它所处的外界环境能量为 E_2 ，粒子数为 N_2 ，熵为 S_2 ，那么系统和环境的总系统具有能量 $E = E_1 + E_2$ ，粒子数 $N = N_1 + N_2$ ，熵 $S = S_1 + S_2$
- d. 由于系统加上它的环境之后的总系统一定是一个孤立系统（否则我们可以一直扩大环境直到总系统孤立为止），那么平衡状态下，总系统的能量 E 、粒子数 N 、熵 S 都应该守恒

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

① 统计物理回顾：

- e. 因此当系统1的能量改变时，有关系 $0 = \frac{\partial S}{\partial E_1} = \frac{\partial S_1}{\partial E_1} + \frac{\partial S_2}{\partial E_1} = \frac{\partial S_1}{\partial E_1} - \frac{\partial S_2}{\partial E_2}$ ，即 $\frac{\partial S_1}{\partial E_1} = \frac{\partial S_2}{\partial E_2}$ ，
我们定义这个量为 $\frac{1}{T}$ ，即定义温度 $T = 1 / \frac{\partial S_1}{\partial E_1} = 1 / \frac{\partial S_2}{\partial E_2}$
- f. 同理，有 $\frac{\partial S_1}{\partial N_1} = \frac{\partial S_2}{\partial N_2}$ ，我们定义它为 $-\mu/T$ ，其中 μ 称为化学势
- g. 由于环境远大于子系统1，子系统各种宏观状态出现的几率取决于环境的微观状态个数： $p(E_1, N_1) \sim \Omega_2 = \exp(S_2/k_B)$
- h. 根据e和f，我们有对于固定温度和化学势的系统， $S_2 = -\frac{E_1 - \mu N_1}{T} + c$
- i. 从而 $p(E_1, N_1) \sim \exp\left(-\frac{E_1 - \mu N_1}{k_B T}\right)$ ，称为巨正则系综（粗略理解为粒子数不固定的宏观系统）

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

② 全同粒子的宏观状态与微观状态

- a. 假设有M个单粒子量子态（波函数）： $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_M\rangle$
- b. N个粒子填充这些状态，根据粒子是玻色子还是费米子，构成对称或者反对称波函数 $|j_1, j_2, \dots, j_N\rangle$
- c. 我们也可以把 $|j_1, j_2, \dots, j_N\rangle$ 改写为 $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ ，其中 n_1, n_2, \dots, n_M 分别代表单粒子量子态 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_M\rangle$ 被几个粒子占据
- d. 我们有系统的总能量为 $E = \sum_i n_i E_i$ ，总粒子数为 $N = \sum_i n_i$
- e. 根据巨正则系综的结果，系统处于能量为E，粒子数为N的相对几率为 $p(n_1, n_2, \dots, n_M) = p(E, N) \sim \exp\left(-\frac{E - \mu N}{k_B T}\right)$ ，由于E和N是可以任意取值的，我们如果想求绝对几率，需要对它归一化： $p(n_1, n_2, \dots, n_M) = p(E, N) = \exp\left(-\frac{E - \mu N}{k_B T}\right) / Z$ ，其中 $Z = \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_M\}} \exp\left(-\frac{E - \mu N}{k_B T}\right) = \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_M\}} \exp\left[-\sum_i \frac{n_i (E_i - \mu)}{k_B T}\right]$ ，称为配分函数

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

② 全同粒子的宏观状态与微观状态

f. 对于玻色子, $Z = \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_M\}} \prod_i \exp\left[-\frac{n_i(E_i - \mu)}{k_B T}\right] = \prod_i \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{n(E_i - \mu)}{k_B T}\right] =$

$$\prod_i \frac{1}{1 - \exp\left[-\frac{(E_i - \mu)}{k_B T}\right]}$$

g. 对于费米子, $Z = \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_M\}} \prod_i \exp\left[-\frac{n_i(E_i - \mu)}{k_B T}\right] = \prod_i \sum_{n=0}^1 \exp\left[-\frac{n(E_i - \mu)}{k_B T}\right] =$

$$\prod_i \{1 + \exp\left[-\frac{(E_i - \mu)}{k_B T}\right]\}$$

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

③ 全同粒子的统计分布

a. 任意一个单粒子量子态被占据的数目的期望值为

$$\begin{aligned}\langle n_i \rangle &= \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_M\}} n_i p(n_1, n_2, \dots, n_M) = \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_M\}} n_i \prod_j \exp\left[-\frac{n_j(E_j - \mu)}{k_B T}\right] / Z \\ &= -\frac{k_B T}{Z} \frac{\partial Z}{\partial E_i}\end{aligned}$$

b. 代入上一页的结果，对于玻色子，有 $\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) - 1}$ 这个分布函数称为玻色-爱因斯坦分布

c. 对于费米子，有 $\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) + 1}$ ，这个分布函数称为费米-狄拉克分布

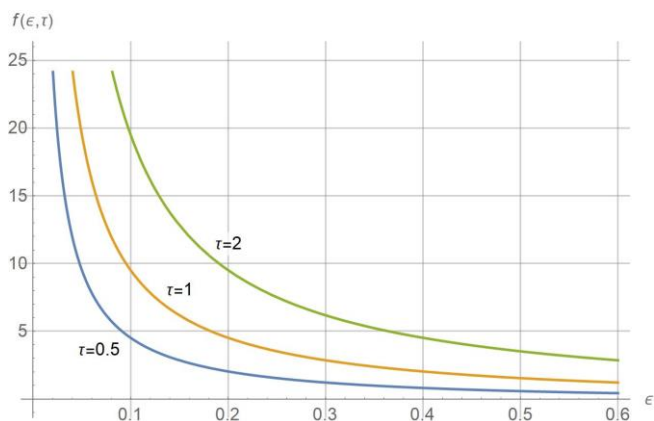
d. 统计分布的用法：已知粒子总数 N 和温度 T ，那么一定有 $\sum_i \langle n_i \rangle = N$ ，这是关于化学势的方程，从而解出化学势，也解出了不同单粒子状态的平均占据数

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

④ 玻色-爱因斯坦分布

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) - 1}$$



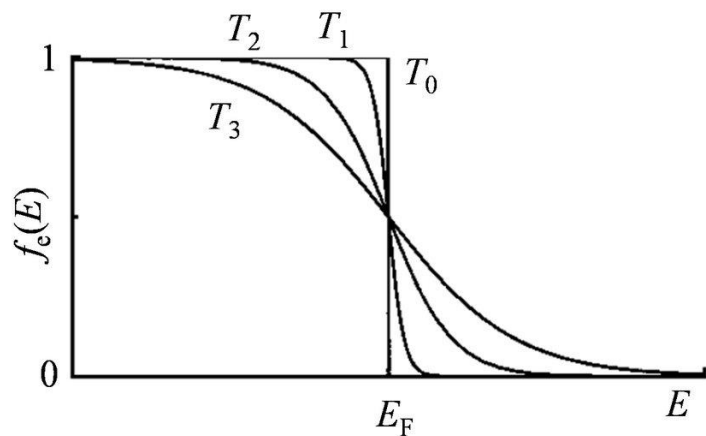
- 绝对零度下，所有玻色子都占据单粒子状态中能量最小的那个
- $T > 0$ ，能量越接近化学势的单粒子状态（即能量越低的状态），具有越大的平均占据数并且区域发散，所以化学势一定小于或等于单粒子状态的能量最小值
- 当 T 小于某个临界温度时，化学势非常接近单粒子状态的能量最小值，这时单粒子基态上占据了大量的粒子，称为玻色-爱因斯坦凝聚
- 例子：[He⁴超流与超导](#)

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

⑤ 费米-狄拉克分布

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$



- 所有单粒子状态的平均占据数都小于1，这与泡利不相容原理兼容
- 化学势 μ 就是费米能级 E_F
- 绝对零度下，能量小于 E_F 的单粒子状态占据数为1，能量大于 E_F 的单粒子状态占据数为0，即电子按照能量从低到高的顺序去占据单粒子状态
- $T > 0$ 时，上述图像基本正确，只不过在 E_F 附近量级为 $k_B T$ 的范围内，占据数连续从1过度到0

6.1 全同粒子的统计分布

7. 全同粒子的统计分布

⑥ 麦克斯韦分布

当温度很高的时候，费米分布和玻色分布都近似成为麦克斯韦分布

$$\langle n_i \rangle = \exp \left(-\frac{E_i - \mu}{k_B T} \right)$$

6.1 全同粒子的统计分布

8. 统计物理简介

- ① 配分函数是统计物理的核心量，计算出配分函数就可以知道系统的宏观状态及其几率
- ② 配分函数是对任意可能的微观状态进行指数求和
- ③ 配分函数从形式上与费曼路径积分非常相似：那里是对任意的粒子运动路径进行指数求和
- ④ 所以经典统计物理问题可以通过某种变换等价于一个量子（场论）问题
- ⑤ This is another example that condensed matter physics can use the language of quantum field theory

6.4 开放体系与跃迁

1. 含时微扰理论

- ① 我们前面的内容，都假设了哈密顿量不随时间变化。然而对于很多实际体系，哈密顿量是时间的函数
- ② 当哈密顿量随时间的变化幅度不大时，可以把不随时间变化的部分作为零级近似 H_0 ，把时间依赖部分作为微扰 $H'(t)$ ，这种微扰理论称为含时微扰理论
- ③ 含时微扰理论关注的不再是定态薛定谔方程的解，而是波函数随时间的变化
- ④ 设未微扰的哈密顿量为 \hat{H}_0 ，其本征态为 $\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ ，微扰项为 $\hat{H}'(t)$
- ⑤ 由于 $\{|n\rangle\}$ 是一组正交归一完备基矢，即使存在微扰，系统的状态依然可以用 $\{|n\rangle\}$ 展开： $|\psi\rangle = \sum_m c_m(t) \exp(-iE_m t/\hbar) |m\rangle$ ，注意与未微扰体系不同的是，由于微扰的存在，这里的 $c_m(t)$ 是时间的函数

6.4 开放体系与跃迁

1. 含时微扰理论

⑥ 代入薛定谔方程可以得到 $i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = \sum_m c_m(t) H'_{nm} \exp[-\frac{i(E_m - E_n)t}{\hbar}]$

⑦ 微扰展开得到

$$\frac{d}{dt} c_n^{(0)}(t) = 0$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n^{(1)}(t) = \sum_m c_m^{(0)}(t) H'_{nm} \exp[-\frac{i(E_m - E_n)t}{\hbar}]$$

⑧ 假如系统初始时刻处于未微扰体系的本征态 $|k\rangle$, 那么

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{nk}(\tau) \exp(-i\omega_{kn}\tau) d\tau$$

6.4 开放体系与跃迁

2. 情况举例 —

① 假设 $\hat{H}'(t)$ 不依赖于时间, 那么

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} H'_{nk} \int_0^t \exp(-i\omega_{kn}\tau) d\tau$$

② 从状态k到n的跃迁几率为

$$W = \left| c_n^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |H'_{nk}|^2 \frac{\sin^2(\omega_{kn}t/2)}{(\omega_{kn}/2)^2}$$

③ 周期性地增大、减小往复

6.4 开放体系与跃迁

3. 情况举例 二

- ① 假设末态不是一个分立能级，而是一系列连续的状态，那么总跃迁几率为

$$W = \frac{1}{\hbar^2} |H'_{nk}|^2 \int D(\varepsilon) \frac{\sin^2(\omega_{kn}t/2)}{(\omega_{kn}/2)^2} d\varepsilon = \frac{2\pi t}{\hbar} |H'_{nk}|^2 D(\varepsilon = E_k)$$

- ② 注意跃迁几率正比于时间，意味着系统不再周期振荡，而是按照一个稳定的速率发生跃迁，这是由大量能量接近的终态的效应互相叠加造成的
- ③ 这称为费米黄金规则
- ④ 指数衰减关系

6.4 开放体系与跃迁

4. 情况举例 三

① 假设 $\hat{H}'(t)$ 是一个余弦振荡的量： $\hat{H}'(t) = 2\hat{F} \cos(\omega t) = \hat{F}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$

$$\textcircled{2} \quad W_{nk} \cong \frac{1}{\hbar^2} |F'_{nk}|^2 \left\{ \frac{\sin^2 \left[\frac{(\omega_{kn} - \omega)t}{2} \right]}{\left(\frac{\omega_{kn} - \omega}{2} \right)^2} + \frac{\sin^2 \left[\frac{(\omega_{kn} + \omega)t}{2} \right]}{\left(\frac{\omega_{kn} + \omega}{2} \right)^2} \right\} \cong \frac{2\pi t}{\hbar^2} |F'_{nk}|^2 [\delta(\omega_{kn} - \omega) + \delta(\omega_{kn} + \omega)] = \frac{2\pi t}{\hbar} |F'_{nk}|^2 [\delta(E_k - E_n - \hbar\omega) + \delta(E_k - E_n + \hbar\omega)]$$

$$\textcircled{3} \quad W_{nk} = W_{kn}$$

④ 光子（声子）的概念复习，能量守恒

6.4 开放体系与跃迁

5. 普朗克公式

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu$$

6. 爱因斯坦发射和吸收系数

① 受激吸收、受激辐射

$$B_{mk} = B_{km},$$

② 自发辐射

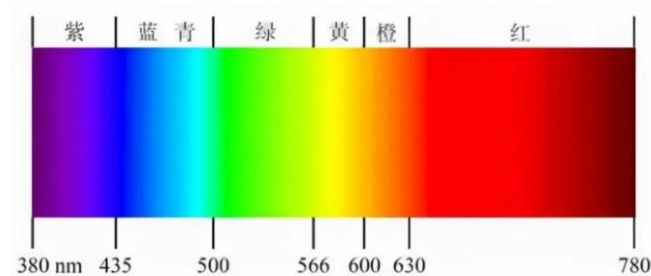
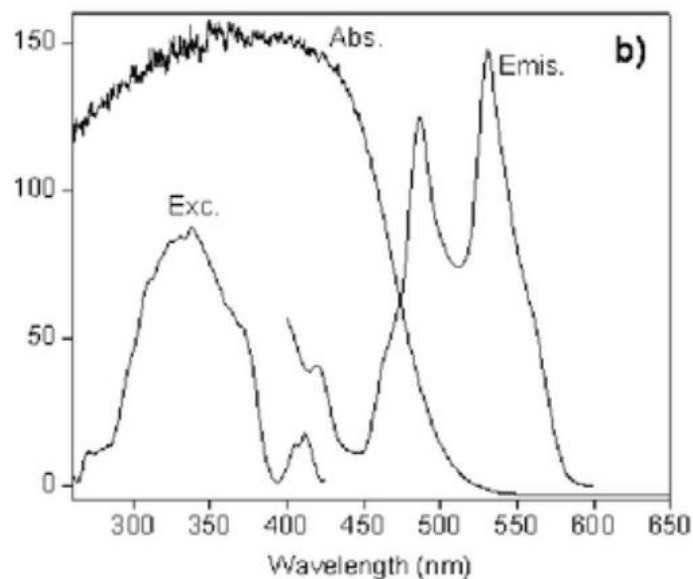
$$A_{mk} = \frac{4h\nu_{mk}^3}{c^3} B_{km} = \frac{\hbar\omega_{mk}^3}{c^3 \pi^2} B_{mk}.$$

6.4 开放体系与跃迁

8. 物体的吸收与发光

① 物体对光的吸收

例子：CdS 带隙2.48 eV， $\sim 500\text{nm}$ ，小于500nm的光可以被吸收

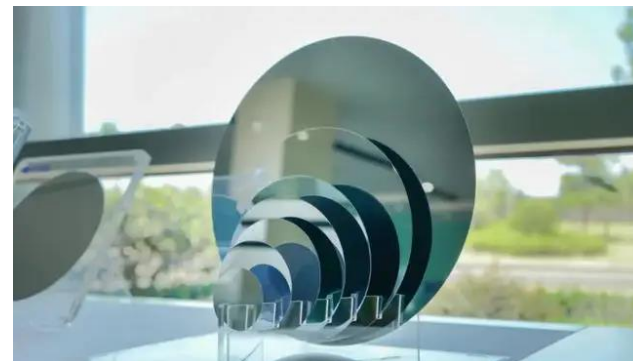
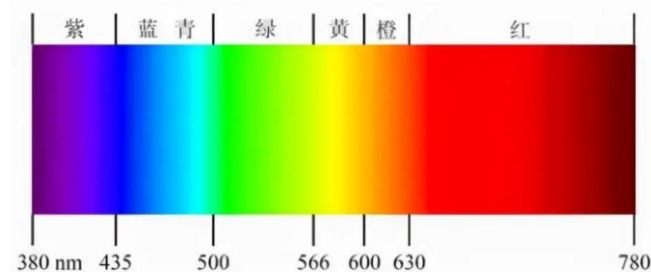
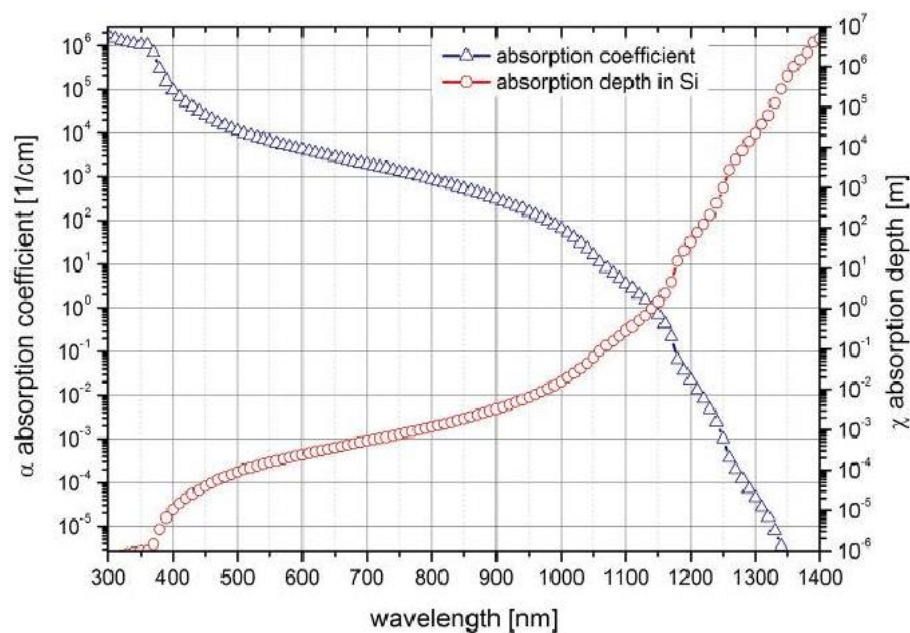


6.4 开放体系与跃迁

8. 物体的吸收与发光

① 物体对光的吸收

例子：Si 带隙1.12 eV, $\sim 1.1\mu\text{m}$, 小于 $1.1\mu\text{m}$ 的光可以被吸收:



6.4 开放体系与跃迁

8. 物体的吸收与发光

- ② 热平衡状态下, $\frac{A}{B_I} = e^{\hbar\omega/k_B T} - 1$, 300K下, 波长69um, 自发辐射几率=受激辐射几率
- ③ 灯泡、[萤火虫](#)、[太阳](#)
- ④ [激光](#) : 通过粒子数反转 (打破粒子数热平衡) , 使得受激辐射>受激吸收; 通过谐振腔 (打破光的热平衡) , 使得受激辐射>自发辐射

6.4 开放体系与跃迁

9. 量子体系与环境的作用：退相干

- ① 量子体系与环境作用可以发生能量的改变（跃迁）：非弹性相互作用
- ② 这使得我们需要考虑总系统的状态：

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle \quad \longrightarrow \quad \sum_i |i, \epsilon_i\rangle \langle i|\psi\rangle$$

- ③ 这导致量子相位的丢失——退相干
可以理解为相干性从系统传递到环境中，从而系统本身的相干性被环境“吸收”了