半经典理论框架

物理中的几何相位（专题3）

高阳

固体中的电子I

经典理论

- 单电子行为：经典运动方程

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\boldsymbol{p}}{m},$$

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -e\,\boldsymbol{E} - e\dot{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{B} - \frac{\boldsymbol{p}}{\tau}$$

- 多电子系综的统计行为：Maxwell—Boltzmann分布

$$f_{MB} = \lambda_0\, e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

- 物理量（多指某种密度）的测量值

$$\langle O \rangle = \int d\boldsymbol{p}\; O(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) f_{MB}\left(E(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\right)$$

比如能量，动量，角动量等

固体中的电子II

量子理论

- 单电子行为：布洛赫态与布洛赫能带（平均场意义下）

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}), \qquad U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = U(\boldsymbol{r})$$

$$\hat{H}\psi_{n\boldsymbol{k}} = E_n(\boldsymbol{k})\psi_{n\boldsymbol{k}} \qquad \psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_n(\boldsymbol{k};\boldsymbol{r})$$

k的取值范围有限，为布里渊区 $E_n(\boldsymbol{k}) = E_n(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})$

- 多电子系综的统计行为：Fermi—Dirac分布

$$f_{FD} = \frac{1}{1+\exp\left[\frac{E_{n\boldsymbol{k}}-\mu}{k_B T}\right]}$$

- 物理量的测量值

$$\langle O\rangle = \int_{BZ}\frac{d\boldsymbol{k}}{8\pi^3}\, O_n(\boldsymbol{k}) f_{FD}\,(E_{n\boldsymbol{k}}),\ O_n(\boldsymbol{k}) = \langle\psi_{n\boldsymbol{k}}|\hat{O}|\psi_{n\boldsymbol{k}}\rangle$$

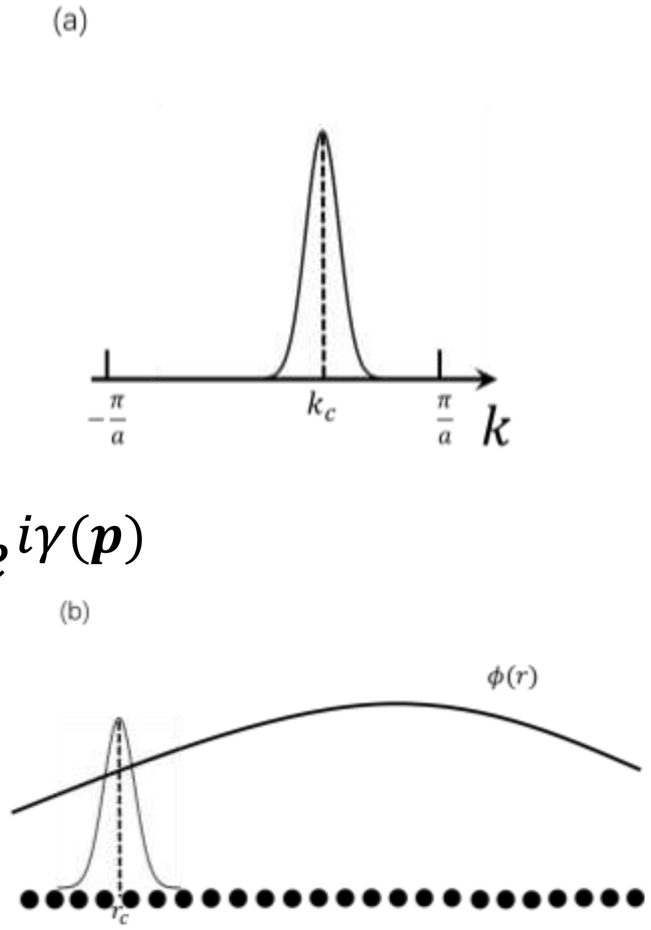
量子理论半经典化

- 目的：
  1. 以经典运动方程为模板，融合量子理论元素，理解电子的动力学行为；
  2. 保证对物理量预测的准确性；

- 难点：经典力学以相空间标记一个态，而量子力学有力学量完全集，位置与动量不能同时确定。

波包的构造

- 方法：构造波包
  $|W\rangle = \int d\boldsymbol{p}\, C(\boldsymbol{p})\, |\psi_{n\boldsymbol{p}}\rangle$
- 归一化
  $\langle W|W\rangle = 1 \Rightarrow \int d\boldsymbol{p}\, |C(\boldsymbol{p})|^2 = 1$
- 动量空间局域
  $|C(\boldsymbol{p})|^2 \approx \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p_c})$， $C(\boldsymbol{p}) = |C(\boldsymbol{p})| e^{i\gamma(\boldsymbol{p})}$
- 实空间局域
  $\boldsymbol{r_c} = \langle W|\boldsymbol{r}|W\rangle = \frac{\partial\gamma}{\partial \boldsymbol{p_c}} + A(\boldsymbol{p_c})$
  $A(\boldsymbol{p_c}) = \langle u_n(\boldsymbol{p_c})|i\boldsymbol{\partial}_{\boldsymbol{p_c}}|u_n(\boldsymbol{p_c})\rangle$
- 呈现粒子行为



波包的动力学演化

- 拉格朗日量
$$L = \langle W | i\partial_t - \hat{H} | W \rangle$$

- 对左矢变分可得完整的薛定谔方程

- 对波包的要求限制了解空间
$$L(\langle W|, |W\rangle) \to L(\boldsymbol{r_c}, \boldsymbol{p_c}, \dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}}, \dot{\boldsymbol{p}}_{\boldsymbol{c}}, t)$$

- 与经典动力学的拉氏量不同 $L(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t)$

半经典动力学方程（电场）

- 拉格朗日量（电场情形）：

$$L = -\big(\boldsymbol{r_c} - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{p_c})\big) \cdot \hbar \dot{\boldsymbol{p}}_c - E(\boldsymbol{p_c}) - \phi(\boldsymbol{r_c})$$

$$E(\boldsymbol{p_c}) = \left\langle W \middle| \widehat{H}_{kin} \middle| W \right\rangle \quad \phi(\boldsymbol{r_c}) = \langle W|\phi(r)|W\rangle$$

- 半经典运动方程

$$\dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial \boldsymbol{p_c}} - \dot{\boldsymbol{p}}_{\boldsymbol{c}} \times \boldsymbol{\Omega}\,,$$

$$\hbar\dot{\boldsymbol{p}}_{\boldsymbol{c}} = -\frac{\partial\phi}{\partial \boldsymbol{r}}$$

- 贝里曲率与反常速度

$$-\dot{\boldsymbol{p}}_{\boldsymbol{c}} \times \boldsymbol{\Omega}$$

磁场情形

- 量子行为：

$$\hat{H} = \frac{[\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})]^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) \qquad \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$$

- 失去平移对称性，特定情形下可定义磁平移对称性
- 半经典处理：局域哈密顿量

$$\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \cdots$$

$$\hat{H}_c = \frac{[\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r_c})]^2}{2m} + U(\boldsymbol{r})$$

$$\hat{H}_c\psi_{n\boldsymbol{k},r_c} = E_n(\boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r_c}))\psi_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r_c}} \qquad \psi_{n\boldsymbol{k},r_c} = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{n\boldsymbol{k}+e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_c)}(\boldsymbol{r})$$

- 波包构造

$$|W\rangle = \int d\boldsymbol{p}\, C(\boldsymbol{p})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left|u_{n\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_c)}\right\rangle$$

半经典动力学方程（电磁场）

- 拉格朗日量:

$$L = -\big(\boldsymbol{r_c} - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k_c})\big) \cdot \hbar\dot{\boldsymbol{k}}_c - \frac{1}{2} e\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}_c \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}} - E(\boldsymbol{k_c}) - \phi(\boldsymbol{r_c})$$

$$\boldsymbol{k_c} = \boldsymbol{p_c} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r_c})$$

- 半经典运动方程

$$\dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{k_c}} - \dot{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{c}} \times \boldsymbol{\Omega}\,,$$

$$\hbar\dot{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{c}} = -\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{r}} - e\dot{\boldsymbol{r}}_c \times \boldsymbol{B}$$

- 贝里曲率与磁场对应

- 能量修正: $\varepsilon = \langle W|\widehat{H}|W\rangle = \varepsilon_{n\boldsymbol{k_c}} - \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{m}(\boldsymbol{k_c})$

$$\boldsymbol{m}(\boldsymbol{k_c}) = -\frac{\boldsymbol{e}}{\boldsymbol{2}} \times \sum\nolimits_{\boldsymbol{n \neq 0}} \boldsymbol{A}_{0n} \times \boldsymbol{v}_{n0}$$

对称性

- 从运动方程判断：（时间反演与空间反演）

$$\dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{c}}} - \dot{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{c}} \times \boldsymbol{\Omega}\,,$$

$$\hbar \dot{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{c}} = -\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{r}} - e\dot{\boldsymbol{r}}_{c} \times \boldsymbol{B}$$

- 从定义式判断

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n\boldsymbol{k}} | i\partial_{\boldsymbol{k}} | u_{n\boldsymbol{k}} \rangle$$

非正则性：拉格朗日量

- 拉格朗日量（电磁场情形）：

$$L = -\big(\boldsymbol{r_c} - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k_c})\big) \cdot \hbar\dot{\boldsymbol{k}}_c - \frac{1}{2}e\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}_c \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}} - E(\boldsymbol{k_c}) - \phi(\boldsymbol{r_c})$$

- 拉格朗日量（经典情形）

$$L(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t) = -\frac{1}{2}m\,\dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}}^{\boldsymbol{2}} - \frac{1}{2}e\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}_c \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}} - \phi(\boldsymbol{r_c})$$

通过勒让德变换可得哈密顿方程

- 物理变量非正则

非正则性：刘维尔定理

- 相空间体积元：

$$\Delta V = \Delta \boldsymbol{r} \Delta \boldsymbol{p}$$

- 刘维尔定理

$$\frac{d\Delta V}{dt} = 0$$

- 体积元变化

$$\frac{d\Delta V}{dt} = \Delta V \left(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} \cdot \dot{\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}} \cdot \dot{\boldsymbol{p}} \right)$$

- 对于正则变量

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} \cdot \dot{\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}} \cdot \dot{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{0}$$

- 对于半经典变量

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} \cdot \dot{\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}} \cdot \dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\boldsymbol{e}}{\hbar} \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\Omega} \left(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} \cdot \dot{\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}} \cdot \dot{\boldsymbol{p}} \right) - \frac{\boldsymbol{e}}{\hbar} \frac{\boldsymbol{d}(\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\Omega})}{\boldsymbol{dt}},$$

相空间态密度的修正

- 相空间体积元：

$$\frac{1}{\Delta V}\frac{d\Delta V}{dt} = -\frac{1}{D}\frac{dD}{dt}\ , \qquad D = 1 + \frac{e}{\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\Omega}$$

- 刘维尔定理

$$D\Delta V = const$$

- 新积分体积元

$$\int_{Bz}\frac{dk_c}{8\pi^3}\ D\ \ \ldots\ldots$$

半经典理论框架：平衡态性质

- 物理量的测量值：

$$\langle O\rangle = \int_{BZ}\frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\, D\, O_n(\boldsymbol{k_c}) f_{FD}\,(E),\ \ O_n(\boldsymbol{k_c}) = \left\langle W\middle|\hat{O}\middle|W\right\rangle,\ E = \langle W|\hat{H}|W\rangle$$

- 响应函数

$$dF = -M\, dB - \rho d\mu - PdE - SdT\, - f\, dx$$

- 自由能的计算

$$F = \int_{BZ}\frac{dk_c}{8\pi^3} D\, g(E) \qquad\qquad g(E) = -k_B T ln\,(1 + \exp\left(\frac{\mu - E}{k_B T}\right))$$

平衡态性质举例：磁化强度

- 目标

$$\boldsymbol{M} = -\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{B}}$$

- 自由能

态密度修正$D = 1 + \frac{e}{\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\Omega}$

$$F = \int_{BZ} \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3} D\, g(E)$$

能量修正$\varepsilon = \varepsilon_{n\boldsymbol{k_c}} - \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{m}(\boldsymbol{k_c})$

- 结论

$$\boldsymbol{M} = \int_{BZ} \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\left[\boldsymbol{m}(\boldsymbol{k_c}) f\left(\varepsilon_{n\boldsymbol{k_c}}\right) - \frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\Omega}\, g\left(\varepsilon_{n\boldsymbol{k_c}}\right)\right]$$

半经典理论框架：稳态性质

- 物理量测量值：

$$\langle O \rangle = \int_{BZ} \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\ D\ O_n(\boldsymbol{k_c})\ f$$

- Boltzmann方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \dot{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{k}} = \frac{df}{dt}|_{col} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

- 非平衡修正与弛豫时间相关

稳态性质举例：反常霍尔效应

- 电流：

$$J = -e \int \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\, \dot{r}_c\, f$$

- 半经典运动方程

$$\dot{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{c}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{k_c}} - \dot{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{c}} \times \boldsymbol{\Omega}\,,$$

$$\hbar \dot{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{c}} = -\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{r}} - e\dot{\boldsymbol{r}}_c \times \boldsymbol{B}$$

- 纵向电导：波尔兹曼方程的解

$$f = f_0 + e\tau \boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \qquad J = -\frac{e^2}{\hbar}\tau \int \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\, \boldsymbol{v}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v})\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$$

- 横向电导：反常霍尔效应

$$J = -\frac{e^2}{\hbar}\boldsymbol{E} \times \int \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\, \boldsymbol{\Omega}\, f\left(\varepsilon_{n\boldsymbol{k_c}}\right)$$