

高等统计物理

王延颢

2017 年 2 月 24 日

17. 费米气体的特性

17.1. 超导

当非理想费米气体的粒子间存在吸引势时，费米面附近的一对动量、自旋相反的粒子能形成一种特殊的束缚态—库珀对（Cooper）对，使元激发能谱中出现能隙，形成超流相。最具有代表性的例子就是超导，即转变温度以下材料呈现零电阻和完全的抗磁性。超导体中的弱吸引力来自于电子—声子—电子相互作用。

当一个电子与晶格作用时，晶格会产生轻微的形变，使局部正电荷增多。此时接近的另一个自旋相反的电子受到形变晶格的作用，会与之前的电子形成有效吸引，结合成为库珀对。大量的库珀对形成玻色—爱因斯坦凝聚，集中到同一量子态，而其中的电子服从泡利不相容原理，所以要破坏一个电子或者一个库珀对，就需要抗衡整个体系的束缚能。因此在能隙之下，所有的库珀对以整体相干的方式进行传导运动，不出现电子的散射，因而形成零电阻。

17.1.1. BCS 理论

设 N 个自旋为 $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ 的费米子组成的体系满足与排斥势情形相同的条件，动能处于

费米面两侧 ΔE 范围内，自旋与动量均相反的一对粒子之间存在着弱吸引力，其它粒子的行为类似于理想气体。系统哈密顿量可以写为 Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 约化哈密顿量：

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma} + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (17.1)$$

其中

$$V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \langle \mathbf{p}'\uparrow, -\mathbf{p}'\downarrow | \hat{V} | \mathbf{p}\uparrow, -\mathbf{p}\downarrow \rangle = \begin{cases} -V_0 & \left| \frac{p^2}{2m} - \mu \right| \leq \Delta E, \left| \frac{p'^2}{2m} - \mu \right| \leq \Delta E \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (17.2)$$

这个哈密顿量给出的物理图像是：只有在费米面附近两个具有相反的动量和自旋的粒子之间才有相互作用形成 Cooper 对。当粒子能量超过费米面以上 ΔE 的范围就不再形成电子对，电子的激发成为单电子激发，系统不再呈现超导性。

在巨正则系综下，将算符写成平均值与涨落的形式：

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ &= \langle \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \rangle + \Delta (\hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+) \\
\hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow}^+ &= \langle \hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow}^+ \rangle + \Delta (\hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow}^+)
\end{aligned} \tag{17.3}$$

代入哈密顿量表达式(17.2)，并且认为两个涨落的乘积项为小量从而略去，得到

$$\begin{aligned}
\hat{H}_1 &\approx \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \langle \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \rangle \hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow} \\
&+ \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \langle \hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow}^+ \rangle \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \\
&- \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \langle \hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow}^+ \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \rangle \\
&= \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \left(\chi_{\mathbf{p}}^* \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow} + \chi_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \right) - \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \chi_{\mathbf{p}}^* \chi_{\mathbf{p}'}
\end{aligned} \tag{17.4}$$

其中

$$\begin{aligned}
\chi_{\mathbf{p}}^* &= \langle \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+) \\
\chi_{\mathbf{p}'} &= \langle \hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow}^+ \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{a}_{-\mathbf{p}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}'\uparrow}^+) \\
\hat{\rho} &= \frac{\exp(-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}))}{\text{tr}(\exp(-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})))} \\
\hat{N} &= \sum_{\mathbf{p}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}
\end{aligned} \tag{17.5}$$

因为 $\chi_{\mathbf{p}}^*$ 和 $\chi_{\mathbf{p}'}$ 的求解需要用到 $\hat{\rho}$ ，而 $\hat{\rho}$ 的表达式中包含 $\hat{H}$ ， $\hat{H}$ 的表达式中又包含 $\chi_{\mathbf{p}}^*$ 和 $\chi_{\mathbf{p}'}$ ，所以这些量需要自洽求解。

令

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\mathbf{p}} &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu \\
\Delta_{\mathbf{p}} &\equiv \sum_{\mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \chi_{\mathbf{p}'} \\
\Delta_{\mathbf{p}'}^* &\equiv \sum_{\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \chi_{\mathbf{p}}^*
\end{aligned} \tag{17.6}$$

则

$$\begin{aligned}
\hat{H}' &= \hat{H} - \mu \hat{N} = (\hat{H}_0 - \mu \hat{N}) + \hat{H}_1 \\
&= \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \left(\varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow} + \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow} + \Delta_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ + \Delta_{\mathbf{p}}^* \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow} \right) - \sum_{\mathbf{p}} \Delta_{\mathbf{p}}^* \chi_{\mathbf{p}} \\
&\equiv \sum_{\mathbf{p}} \hat{H}'_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}} \Delta_{\mathbf{p}}^* \chi_{\mathbf{p}}
\end{aligned} \tag{17.7}$$

其中第二项为常数。引入**博戈留波夫变换**对该哈密顿量进行对角化：

$$\begin{aligned}
\hat{\gamma}_{\mathbf{p}0} &= u_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow} - v_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ \\
\hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+ &= u_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ - v_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow} \\
\hat{\gamma}_{\mathbf{p}1} &= u_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow} + v_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \\
\hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ &= u_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ + v_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}
\end{aligned} \tag{17.8}$$

其中 $u_{\mathbf{p}}, v_{\mathbf{p}}$ 为实数，且 $u_{\mathbf{p}} = u_{-\mathbf{p}}$ ， $v_{\mathbf{p}} = v_{-\mathbf{p}}$ 。它们是准粒子的产生和消灭算符，因为每个动量有两个自旋态，所以每个 $\mathbf{p}$ 有两个产生算符及两个消灭算符。为了使新算符满足对易关系

$$\begin{aligned}
\{\hat{\gamma}_{\mathbf{p}\alpha}, \hat{\gamma}_{\mathbf{p}'\alpha'}^+\} &= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\alpha\alpha'} \\
\{\hat{\gamma}_{\mathbf{p}\alpha}^+, \hat{\gamma}_{\mathbf{p}'\alpha'}^+\} &= \{\hat{\gamma}_{\mathbf{p}\alpha}^+, \hat{\gamma}_{\mathbf{p}'\alpha'}\} = 0
\end{aligned} \tag{17.9}$$

其中 $\alpha = 0$ 或 1 ，必须有

$$u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{p}}^2 = 1 \tag{17.10}$$

把逆变换

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow} &= u_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0} + v_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ \\
\hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow}^+ &= u_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+ + v_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1} \\
\hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow} &= u_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1} - v_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+ \\
\hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ &= u_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ - v_{\mathbf{p}} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}
\end{aligned} \tag{17.11}$$

代入式(17.7)，得

$$\begin{aligned}
\hat{H}'_{\mathbf{p}} &= \left(\varepsilon_{\mathbf{p}} (u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2) - (\Delta_{\mathbf{p}}^* + \Delta_{\mathbf{p}}) u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \right) (\hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0} + \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}) \\
&+ \left(2\varepsilon_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} + (\Delta_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}}^2 - \Delta_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}}^2) \right) \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ \\
&+ \left(2\varepsilon_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} + (\Delta_{\mathbf{p}}^* u_{\mathbf{p}}^2 - \Delta_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}^2) \right) \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0} \\
&+ \left(2\varepsilon_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}^2 + (\Delta_{\mathbf{p}}^* + \Delta_{\mathbf{p}}) u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \right)
\end{aligned} \tag{17.12}$$

$\Delta_{\mathbf{p}}$ 一般是复数，但是讨论系统热力学性质时，位相因子不重要，虚部可舍去，所以可令其为实数，即 $\Delta_{\mathbf{p}}^* = \Delta_{\mathbf{p}}$ 。上式中第一项是对角化的，第四项为常数，使第二和第三项为零的条件是

$$2\varepsilon_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} + \Delta_{\mathbf{p}} (u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2) = 0 \tag{17.13}$$

和条件(17.10)联立并令

$$\begin{aligned}
u_{\mathbf{p}} &= \cos \alpha_{\mathbf{p}} \\
v_{\mathbf{p}} &= \sin \alpha_{\mathbf{p}}
\end{aligned} \tag{17.14}$$

可以解得

$$\begin{aligned}
\varepsilon_p \sin 2\alpha_p + \Delta_p \cos 2\alpha_p &= 0 \\
\tan 2\alpha_p &= -\Delta_p / \varepsilon_p \\
\cos 2\alpha_p &= \frac{\varepsilon_p}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta_p^2}} \\
\sin 2\alpha_p &= \frac{-\Delta_p}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta_p^2}}
\end{aligned} \tag{17.15}$$

由这些结果可以把式(17.12)写成

$$\hat{H}' = E_0 + \sum_{\mathbf{p}\sigma} E_p \hat{\gamma}_{\mathbf{p}\sigma}^+ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}\sigma} \tag{17.16}$$

其中

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}} (2\varepsilon_p v_p^2 + 2\Delta_p u_p v_p) - \sum_{\mathbf{p}} \Delta_p \chi_p \tag{17.17}$$

是基态能量，并且元激发能谱

$$E_p = \varepsilon_p \cos 2\alpha_p - \Delta_p \sin 2\alpha_p = \varepsilon_p (u_p^2 - v_p^2) - 2\Delta_p u_p v_p = \sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta_p^2} \tag{17.18}$$

当粒子处于基态时， $\varepsilon_p = 0$ ，但此时元激发的能隙 $\Delta_p \neq 0$ ，对应于破坏 Cooper 对的能量。

元激发的粒子数算符在无外场时与自旋无关，且服从费米统计，因此有

$$n_p = \langle \hat{\gamma}_{\mathbf{p}\sigma}^+ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}\sigma} \rangle = \frac{1}{\exp(\beta E_p) + 1} = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{\beta E_p}{2} \right) \tag{17.19}$$

17.1.2. 能隙方程

以下导出能隙函数 Δ_p 所满足的方程。元激发的占有数表象中有

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ \rangle &= 0 \\
\langle \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0} \rangle &= 0 \\
\{ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}, \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ \} &= 1
\end{aligned} \tag{17.20}$$

因此由式(17.5)有

$$\begin{aligned}
\chi_p &= \langle \hat{a}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle = \langle (u_p \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1} - v_p \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+) (u_p \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0} + v_p \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+) \rangle \\
&= u_p v_p \langle \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1} \hat{\gamma}_{\mathbf{p}1}^+ \rangle - u_p v_p \langle \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0}^+ \hat{\gamma}_{\mathbf{p}0} \rangle \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\Delta_p}{E_p} \tanh \frac{\beta E_p}{2}
\end{aligned} \tag{17.21}$$

从而能隙函数

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{p}} &= \sum_{\mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \chi_{\mathbf{p}'} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{\Delta_{\mathbf{p}'}}{E_{\mathbf{p}'}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{p}'}}{2} \\ &= \frac{V_0}{2} \sum_{\substack{\mathbf{p}' \\ \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu \right| \leq \Delta E}} \frac{\Delta_{\mathbf{p}'}}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}'}^2 + \Delta_{\mathbf{p}'}^2}} \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}'}^2 + \Delta_{\mathbf{p}'}^2}}{2k_{\text{B}}T}\end{aligned}\quad (17.22)$$

上式说明能隙函数除了求和条件外与 $\mathbf{p}$ 不相关，因此可以写成分段函数

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \begin{cases} \Delta(T) & \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu \right| \leq \Delta E \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (17.23)$$

把式(17.23)代入式(17.22)，得

$$\frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2(T)}} \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2(T)}}{2k_{\text{B}}T} = 1 \quad (17.24)$$

求和换成积分，得到

$$\frac{V_0}{2} \int_{\pm \Delta p} \frac{\tanh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2(T)} \right)}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2(T)}} g(\varepsilon) d\varepsilon = V_0 \int_0^{\Delta \varepsilon} \frac{\tanh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T)} \right)}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T)}} g(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (17.25)$$

其中 $g(\varepsilon)$ 为能态密度。因为积分区域限制在费米面附近，所以可以近似地用费米面上的态密度来代替 $g(\varepsilon)$ ：

$$g(\varepsilon) \approx g_0 = \frac{mp_{\text{F}}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (17.26)$$

从而得到 **BCS** 的能隙方程

$$g_0 V_0 \int_0^{\Delta \varepsilon} \frac{\tanh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T)} \right)}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T)}} d\varepsilon = 1 \quad (17.27)$$

当 $T \rightarrow 0 \text{ K}$ 时有

$$\tanh \frac{E_k}{2k_{\text{B}}T} \rightarrow 1 \quad (17.28)$$

则

$$\begin{aligned}
g_0 V_0 \int_0^{\Delta \varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(0)}} d\varepsilon &\approx g_0 V_0 \sinh^{-1} \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta(0)} = 1 \\
\Rightarrow \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta(0)} &= \sinh \left(\frac{1}{g_0 V_0} \right)
\end{aligned} \tag{17.29}$$

当相互作用很弱时， $g_0 V_0 \ll 1$ ，有

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta \varepsilon}{\Delta(0)} &\approx \frac{1}{2} \exp \left(\frac{1}{g_0 V_0} \right) \\
\Rightarrow \Delta(0) &= 2 \Delta \varepsilon \exp \left(-\frac{1}{g_0 V_0} \right)
\end{aligned} \tag{17.30}$$

这就是**绝对零度时的能隙**。

17.1.3. 临界温度与普适常数

由于在 $T > T_c$ 时能谱将从元激发谱回到正常能谱，所以转变温度 T_c 处

$$\Delta(T_c) = 0 \tag{17.31}$$

利用这一点可以求出**超导的临界温度**，由式(17.27)可得

$$\begin{aligned}
1 &= g_0 V_0 \int_0^{\Delta \varepsilon} \frac{\tanh \left(\frac{1}{2} \beta_c \varepsilon \right)}{\varepsilon} d\varepsilon = g_0 V_0 \int_0^{\frac{1}{2} \beta_c \Delta \varepsilon} \frac{\tanh x}{x} dx = g_0 V_0 \ln(1.13 \beta_c \Delta \varepsilon) \\
\Rightarrow T_c &= \frac{1.13}{k_B} \Delta \varepsilon \exp \left(-\frac{1}{g_0 V_0} \right)
\end{aligned} \tag{17.32}$$

超导体的 $\Delta \varepsilon \sim \hbar \omega_D$ ，其中 ω_D 是德拜频率，而 $\omega_D \sim 1/\sqrt{M}$ ，其中 M 是粒子质量，所

以有 $T_c \sim 1/\sqrt{M}$ 。由式(17.30)和(17.32)得到与材料无关的**普适常数**

$$\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = 1.77 \tag{17.33}$$

17.2. 朗道抗磁性

在外磁场中的物质磁性的体现来自于两方面：（1）电子自旋倾向于平行磁场方向排列，

因而产生顺磁性；(2) 磁场中电子受洛伦兹力作用而产生圆周轨道运动，其运动轨道是量子化的，从而导致抗磁性。

17.2.1. 朗道能级

外场中运动的单电子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \mu_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (17.34)$$

其中 e 是电子电量， c 是光速， m 是电子质量， $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$ 是玻尔磁子， $\boldsymbol{\sigma}$ 是泡利矩阵， $\mathbf{A}$ 是矢势。第一项与抗磁性有关，第二项与顺磁性有关。为了讨论抗磁性，只讨论第一项：

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (17.35)$$

设磁场 $\mathbf{B}$ 是均匀的且沿 z 轴，将矢势选为

$$A_x = -yB, \quad A_y = A_z = 0 \quad (17.36)$$

哈密顿量改写为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\left(p_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right) \quad (17.37)$$

则波函数应有如下形式：

$$\psi(x, y, z) = \exp(i(k_x x + k_z z)) f(y) \quad (17.38)$$

代入薛定谔方程

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = \varepsilon\psi(x, y, z) \quad (17.39)$$

得到 $f(y)$ 满足的方程

$$\left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} (y - y_0)^2 \right) f(y) = \varepsilon' f(y) \quad (17.40)$$

其中

$$\omega_0 = \frac{eB}{mc}, \quad y_0 = \frac{\hbar c}{eB} k_x, \quad \varepsilon' = \varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (17.41)$$

求解得到能量本征值为朗道能级

$$\varepsilon(p_z, j) = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_0 \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (17.42)$$

其中 $p_z = \hbar k_z$ 。因为上式与 k_x 无关，所以其简并度 g 应该等于 k_x 所有可能取值的数目。若系统处于边长为 L 的立方体内，则 k_x 的允许值为 $\frac{2\pi n_x}{L}$ ， $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 。为了保证 $y_0 \in [0, L]$ ， k_x 可能取值的数目为

$$g = \frac{eB}{hc} L^2 \quad (17.43)$$

两个能级的间距都是 $\hbar\omega_0 = \frac{\hbar eB}{mc}$ ，所以能级密度为

$$\frac{g}{\hbar\omega_0} = \frac{mL^2}{2\pi\hbar^2} \quad (17.44)$$

与无磁场的自由粒子能级密度相同，所以磁场并没有改变能级的密度，只是将准连续能级离散化（杨展如第 160 页图 5.3.1）。

17.2.2. 高温磁化率

此费米系统的巨配分函数为

$$\Xi = \prod_{\lambda} (1 + z \exp(-\beta\varepsilon_{\lambda})) \quad (17.45)$$

其中 λ 代表量子数的集合， $\lambda = \{p_z, j, \alpha\}$ $\alpha = 1, 2, \dots, g$ ，因此

$$\begin{aligned} \ln \Xi &= \sum_{\alpha=1}^g \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{p_z} \ln(1 + z \exp(-\beta\varepsilon(p_z, j))) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{L}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z g \ln(1 + z \exp(-\beta\varepsilon(p_z, j))) \end{aligned} \quad (17.46)$$

平均粒子数

$$\langle \hat{N} \rangle = \left(z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi \right)_{V, T, B} = \frac{gL}{h} \sum_{j=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon(p_z, j)) + 1} \quad (17.47)$$

高温极限下，为保证上式不发散，要求 $z \rightarrow 0$ 。因此可以对式(17.46)进行泰勒展开保留到 z 的一次项：

$$\begin{aligned}\ln \Xi &\approx \frac{zgL}{h} \sum_{j=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \exp \left(-\beta \left(\frac{p_z^2}{2m} + \hbar \omega_0 \left(j + \frac{1}{2} \right) \right) \right) \\ &= \frac{zgL}{\lambda} \frac{\exp(-x)}{1 - \exp(-2x)}\end{aligned}\quad (17.48)$$

其中 $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}}$, $x \equiv \frac{\hbar\omega_0\beta}{2}$ 。对 x 进行泰勒展开保留到三次项, 有

$$\begin{aligned}\frac{\exp(-x)}{1 - \exp(-2x)} &= \frac{1}{\exp(x) - \exp(-x)} \\ &\approx \frac{1}{1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} - \left(1 - x + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!} \right)} \\ &= \frac{1}{2x \left(1 + \frac{x^2}{6} \right)} \approx \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{6} \right)\end{aligned}\quad (17.49)$$

所以

$$\ln \Xi \approx \frac{zgL}{\lambda} \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{6} \right) = \frac{zV}{\lambda^3} \left(1 - \frac{1}{24} (\hbar\omega_0\beta)^2 \right) \quad (17.50)$$

磁化强度

$$M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \left(\frac{\ln \Xi}{V} \right) \Big|_{z,V,T} = - \frac{z\beta}{3\lambda^3} \left(\frac{\hbar e}{2mc} \right)^2 B \quad (17.51)$$

磁化率

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = - \frac{z\beta}{3\lambda^3} \left(\frac{\hbar e}{2mc} \right)^2 \quad (17.52)$$

为了替代掉 z , 式(17.50)中舍去 β 的高阶项, 得

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi \Big|_{V,T} = \frac{Vz}{\lambda^3} \quad (17.53)$$

最终得到**高温极限下的磁化率**为

$$\chi = - \frac{\beta}{3v} \left(\frac{\hbar e}{2mc} \right)^2 < 0 \quad (17.54)$$

因此系统呈现的是抗磁性。

17.2.3. 低温 de Haas—Van Alphen 效应

低温极限下，电子倾向于占据最低可能的能级。磁场减弱时，能级简并度 g 变小，每个朗道能级只能容纳较少的电子，迫使部分电子跳到更高能级，从而引起 de Haas—Van Alphen 效应，即随着磁场减弱，低温磁化率发生振荡。

令 $T \rightarrow 0 \text{ K}$ ，此时可以不考虑电子沿 z 方向的运动，问题变为在均匀磁场中处于面积为 L^2 的容器中的二维电子系统的基态能。此系统的朗道能级为

$$\varepsilon_j = \hbar \omega_0 \left(j + \frac{1}{2} \right) = 2\mu_0 B \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad (17.55)$$

其中 $\mu_0 \equiv \frac{\hbar e}{2mc}$ ，简并度为

$$g = L^2 \left(\frac{eH}{hc} \right) = \frac{N}{n} \left(\frac{eH}{hc} \right) = \frac{NB}{B_0} \quad (17.56)$$

其中 $n = \frac{N}{L^2}$ ， $B_0 \equiv \frac{nhc}{e}$ 。

当 $B > B_0$ 时， $g > N$ ，这时所有电子都占据最低能级，每个电子的能量为

$$\varepsilon_0 = 2\mu_0 B \left(\frac{1}{2} \right) = \mu_0 B \quad (17.57)$$

因而整个系统的基态能为

$$E_0 = N\varepsilon_0 = N\mu_0 B \quad (17.58)$$

当 $B < B_0$ 时， $g < N$ ，有些电子需要处于更高能级。设第 j 个能级以下被完全占据，

第 $j+1$ 个能级被部分占据，则有

$$g(j+1) < N < g(j+2) \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (17.59)$$

把式(17.56)代入上式，得到

$$\frac{1}{j+2} < \frac{B}{B_0} < \frac{1}{j+1} \quad (17.60)$$

系统能量为

$$\begin{aligned}
E_0 &= g \sum_{i=0}^j \varepsilon_i + (N - (j+1)g) \varepsilon_{j+1} \\
&= \mu_0 H \left[N(2j+3) - g(j+1)(j+2) \right] \\
&= N \mu_0 H \left[(2j+3) - (j+1)(j+2) \frac{H}{H_0} \right]
\end{aligned} \tag{17.61}$$

综合两种情况的结果，可以把基态能量写为

$$\frac{E_0}{N} = \begin{cases} \mu_0 B_0 x & x > 1 \\ \mu_0 H_0 x \left((2j+3) - (j+1)(j+2)x \right) & \frac{1}{j+2} < x < \frac{1}{j+1}, j = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \tag{17.62}$$

当 $T \rightarrow 0 \text{ K}$ 时, $E_0 \approx \Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi$, 由此可以求出单位体积的磁化强度和磁化率分别为

$$\begin{aligned}
M &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \frac{\ln \Xi}{L^2} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \frac{\beta E_0}{L^2} \\
&= \begin{cases} -\mu_0 n & x > 1 \\ \mu_0 n \left(2(j+1)(j+2)x - (2j+3) \right) & \frac{1}{j+2} < x < \frac{1}{j+1}, j = 0, 1, 2, \dots \end{cases}
\end{aligned} \tag{17.63}$$

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{\partial M}{\partial B} \\
&= \begin{cases} 0 & x > 1 \\ \frac{2\mu_0 n}{B_0} (j+1)(j+2) & \frac{1}{j+2} < x < \frac{1}{j+1}, j = 0, 1, 2, \dots \end{cases}
\end{aligned} \tag{17.64}$$

这两个函数的图形（杨展如第 163 页图 5.3.2）显示出 de Haas—Van Alphen 效应，即二维费米气体在强磁场和低温下出现磁化强度符号突然改变的振荡现象。

17.3. 泡利顺磁性

为了研究顺磁性，式(17.34)中取外磁场作用的第一项，得到哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \mu_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \frac{p^2}{2m} - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \tag{17.65}$$

单电子能量为

$$\varepsilon_{\mathbf{p}, \pm 1} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \mp \mu_0 B \tag{17.66}$$

其中 $\varepsilon_{\mathbf{p},+1}$ 是电子的 μ 与 B 平行时的能量, $\varepsilon_{\mathbf{p},-1}$ 是反平行时的能量。系统的能量本征值用单粒子能量表示为

$$\begin{aligned} E_n &= \sum_{\mathbf{p}} (\varepsilon_{\mathbf{p},+1} n_{\mathbf{p},+1} + \varepsilon_{\mathbf{p},-1} n_{\mathbf{p},-1}) \\ &= \sum_{\mathbf{p}} \left(\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu_0 B \right) n_{\mathbf{p},+1} + \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu_0 B \right) n_{\mathbf{p},-1} \right) \end{aligned} \quad (17.67)$$

其中 $n_{\mathbf{p},\pm 1} = 0, 1$, $\sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p},+1} + n_{\mathbf{p},-1}) = N$ 。引入符号

$$\begin{cases} n_{\mathbf{p}}^+ \equiv n_{\mathbf{p},+1} & N_+ \equiv \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},+1} \\ n_{\mathbf{p}}^- \equiv n_{\mathbf{p},-1} & N_- \equiv \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},-1} = N - N_+ \end{cases} \quad (17.68)$$

能量本征值式(17.67)表示为

$$E_n = \sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p}}^+ + n_{\mathbf{p}}^-) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu_0 B (N_+ - N_-) \quad (17.69)$$

正则系综的配分函数为

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\substack{\{n_{\mathbf{p}}^+\}, \{n_{\mathbf{p}}^-\} \\ N_+ + N_- = N}} \exp \left(-\beta \sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p}}^+ + n_{\mathbf{p}}^-) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \beta \mu_0 B (N_+ - N_-) \right) \\ &= \sum_{N_+=0}^N \exp(\beta \mu_0 B (2N_+ - N)) \sum_{\substack{\{n_{\mathbf{p}}^+\} \\ \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},+1} = N_+}} \exp \left(-\beta \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} n_{\mathbf{p}}^+ \right) \sum_{\substack{\{n_{\mathbf{p}}^-\} \\ \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},-1} = N_-}} \exp \left(-\beta \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} n_{\mathbf{p}}^- \right) \end{aligned} \quad (17.70)$$

相应的无自旋理想费米气体的配分函数为

$$Z_N^{(0)} = \sum_{\sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} = N} \exp \left(-\beta \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} n_{\mathbf{p}} \right) = \exp(-\beta F^{(0)}(N)) \quad (17.71)$$

其中 $F(N)$ 是无自旋理想费米气体的自由能。用式(17.71)可以把式(17.70)改写为

$$\ln Z_N = -\beta \mu_0 B N + \ln \left(\sum_{N_+=0}^N \exp(2\beta \mu_0 B N_+ - \beta F^{(0)}(N_+) - \beta F^{(0)}(N_-)) \right) \quad (17.72)$$

因为在平衡态, N_+ 的取值必须使得系统自由能最小, 即

$$\left. \frac{\partial F(N_+)}{\partial N_+} \right|_{N,V,T} = -\frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \ln Z_N}{\partial N_+} \right|_{N,V,T} = 0 \quad (17.73)$$

把式(17.72)代入式(17.73)，得到

$$2\mu_0 B - \frac{\partial F^{(0)}(N_+)}{\partial N_+} + \frac{\partial F^{(0)}(N_-)}{\partial N_-} = 0 \quad (17.74)$$

$$\Rightarrow 2\mu_0 B = \mu^{(0)}(N_+) - \mu^{(0)}(N - N_+)$$

其中 $\mu^{(0)}$ 是理想费米气体的化学势（注意不要和玻尔磁矩的符号 μ_0 混淆）。该公式反映的是系统内部自旋向上和向下的粒子数达到统计平衡的条件。

引入无量纲参数 $r \equiv \frac{2N_+}{N} - 1$ ，则上式改写为

$$\mu^{(0)}\left(N \frac{1+r}{2}\right) - \mu^{(0)}\left(N \frac{1-r}{2}\right) = 2\mu_0 B \quad (17.75)$$

当磁场很弱时， r 的值很小，此时可以在 $r = 0$ 附近作展开并保留至一次项，从而得到

$$r \approx \frac{2\mu_0 B}{\left. \frac{\partial \mu^{(0)}(xN)}{\partial x} \right|_{x=1/2}} \quad (17.76)$$

因为磁化强度为

$$M = \mu_0 (N_+ - N_-) \quad (17.77)$$

所以弱场下的磁化率

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{2\mu_0^2}{v \left. \frac{\partial \mu^{(0)}(xN)}{\partial x} \right|_{x=1/2}} \quad (17.78)$$

上一章已求得理想费米气体在有限低温下的化学势为

$$\mu^{(0)} \approx \varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} (\beta \varepsilon_F)^{-2} \right) \quad (17.79)$$

有限高温下的化学势为

$$\mu^{(0)} \approx \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{\lambda^3}{v} + 2^{-3/2} \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^2 \right) \quad (17.80)$$

利用以上二式对弱场下的磁化率分以下四种情况讨论：

(1) 当 $T \rightarrow 0 \text{ K}$ 时，由式(17.79)可知（没有自旋简并度）

$$\mu^{(0)} \approx \varepsilon_F^{(0)} = \left(\frac{6\pi^2}{v} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \quad (17.81)$$

因此

$$\mu^{(0)}(xN) = \left(\frac{6\pi^2 xN}{V} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \quad (17.82)$$

代入式(17.78)可得

$$\left. \frac{\partial \mu^{(0)}(xN)}{\partial x} \right|_{x=1/2} = \frac{2^{4/3}}{3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{v} \right)^{3/2} = \frac{4}{3} \varepsilon_F \quad (17.83)$$

其中 $\varepsilon_F = \left(\frac{3\pi^2}{v} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m}$ 是计入自旋简并度 $g = 2$ 的费米能。因此可以得到 $T \rightarrow 0 \text{ K}$ 时的磁化率

$$\chi_0 = \frac{3\mu_0^2}{2v\varepsilon_F} \quad (17.84)$$

是与温度无关的有限值，说明理想费米气体即使在极低温度下也不会出现磁饱和状态。

(2) 有限低温时，把式(17.79)代入计算可得

$$\chi = \chi_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} (\beta \varepsilon_F)^{-2} \right) \quad (17.85)$$

(3) 当 $T \rightarrow \infty$ 时，由式(17.80)可知

$$\mu^{(0)}(xN) = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{\lambda^3 xN}{V} \right) \quad (17.86)$$

因此

$$\chi_\infty = \frac{2\mu_0^2}{v \frac{2}{\beta}} = \frac{\mu_0^2 \beta}{v} \quad (17.87)$$

温度趋于无穷时，磁化率趋于 0。

(4) 有限高温时，把式(17.80)代入计算得到

$$\chi = \chi_\infty \left(1 - \frac{\lambda^3}{2^{5/2} v} \right) \quad (17.88)$$

17.4. 量子霍尔效应

电子在外磁场中产生的能级简并也可用来解释整数量子霍尔效应。分数量子霍尔效应需要考虑电子间的库仑作用，在此不予介绍。

17.4.1. 经典霍尔效应

考虑一个金属薄膜，可以视为二维电子系统，电子只能在 xy 平面内运动。设沿 x 方向存在电流 I_x ，沿 z 方向加一均匀外磁场会导致电子受洛伦兹力作用，电流发生偏转，形成沿 y 方向的电场。当电场与洛伦兹力达到平衡时，形成一个稳定的沿 y 方向电势差 V_y 和电场 E_y （示意图见杨展如第 164 页图 5.4.1）。电场由下式决定：

$$\mathbf{f}_{\text{洛}} = e\mathbf{E}_y = \frac{e}{c}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (17.89)$$

其中 $\mathbf{v}$ 是电子的平均速度。所以

$$\begin{aligned} E_y &= \frac{vB}{c} \\ V_y &= E_y L \end{aligned} \quad (17.90)$$

其中 L 是薄膜宽度。沿 x 方向的电流密度为

$$\mathbf{j}_x = nev_x = nev \quad (17.91)$$

电阻等于原有电阻率

$$R_x = \rho_{xx} \frac{L}{S} = \rho_{xx} \quad (17.92)$$

其中 $S = L$ 是垂直于电流方向的“面积”，在二维情形下等于 y 方向的宽度 L 。而霍尔电阻率为

$$\rho_{xy} \equiv \frac{V_y}{I_x} = \frac{E_y L}{j_x L} = \frac{B}{nec} \quad (17.93)$$

17.4.2. 整数量子霍尔效应

如前面所证明，对于电子能谱，略去 z 方向的运动，仅含 xy 方向运动的量子化能谱为

$$\varepsilon_j = \left(j + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (17.94)$$

简并度为

$$g = \frac{eB}{hc} L^2 \quad (17.95)$$

引入**填充比**（能级被电子占据的份额）：

$$\eta \equiv \frac{N}{g} = \frac{Nhc}{eBL^2} = \frac{hc}{veB} \quad (17.96)$$

其中 $\nu = \frac{L^2}{N}$ 是二维比容。代入式(17.93)可得

$$\rho_{xy} = \frac{h}{\eta e^2} \quad (17.97)$$

实验发现，霍尔电阻率 ρ_{xy} 在 $\eta=1$ （整数值）和 $\eta=\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \dots$ （分数值）等处出现一平台，

与此同时，原有电阻率 ρ_{xx} 降得非常低，这些现象称为整数量子霍尔效应（对 $\eta=1$ ）和分

数量子霍尔效应（对 $\eta=\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \dots$ ）（示意图见杨展如第 165 页图 5.4.2）。

整数量子霍尔效应可解释如下：当 $\eta=1$ 时，最低朗道能级完全被电子填满，该能级就是费米能级。在费米能级以上存在能隙，低温下电子难以跃迁至低激发态，所有处在朗道能级中的电子如同自由电子一样运动。此时

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \quad (17.98)$$

与实验结果一致。由于这些电子不能跃迁到激发态，它们不受散射地移动，因此电阻几乎为零，电流 I_x 保持稳定，几乎没有电压降。而平台的出现时因为系统中有杂质，使得（1）朗道能级变宽，成为朗道能带；（2）朗道能带之间由于局域杂质态的存在态密度不为零。（示意图见杨展如第 166 页图 5.4.3。）因此在很宽的外磁场 H 范围内都能保持整数量子霍尔效应。