



半导体激光器设计理论 III

半导体激光器

能带结构和光增益的量子理论

(下册)

郭长志 编著



科学出版社

国家科学技术学术著作出版基金资助出版

半导体激光器设计理论 III

半导体激光器能带结构 和光增益的量子理论

(下 册)

郭长志 编著

科学出版社

北京

内 容 简 介

量子理论是研究半导体激光器中: ①体半导体、量子阱、量子线、量子点等增益介质的电子能谱结构, 及其②电子与辐射光场的相互作用, 包括光的产生、吸收、放大和散射等涉及不同能带之间、能带以内不同子带或各种晶格缺陷和杂质能级之间的光跃迁和非光跃迁、带内散射和弛豫等决定半导体激光器涉及光电性能的重要量子行为。其中①和②分别用单电子近似理论和半经典理论处理。任务是研究对半导体激光器的激射阈值、激光功率、调制速率、器件结构和激光波段等的设计都有根本意义的激光材料光增益谱结构和激光量子效率等。全书论述既重基础又涉前沿, 既重物理概念又重推导编程演算, 最后对全量子理论也有简要的介绍。

本书适合有关专业的研究人员和教师、研究生、大学高年级本科生、作为专业课本、参考书或自修提高的读物。

图书在版编目(CIP)数据

半导体激光器能带结构和光增益的量子理论. 下册/郭长志编著. —北京: 科学出版社, 2016

(半导体激光器设计理论)

ISBN 978-7-03-047380-6

I. ①半… II. ①郭… III. ①半导体激光器-能带结构-量子论 ②半导体激光器-激光-增益-量子论 IV. ①TN248.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016) 第 031964 号

责任编辑: 钱 俊 鲁永芳 / 责任校对: 邹慧卿

责任印制: 肖 兴 / 封面设计: 耕者设计

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京通州皇家印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016 年 3 月第 一 版 开本: 720×1000 1/16

2016 年 3 月第一次印刷 印张: 25 1/2

字数: 510 000

定价: 168.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

总 序

任何激光器都由三个主要部分组成,一是增益材料、二是波导光腔、三是激发机制. 半导体激光器的增益材料主要是直接带隙半导体,包括高折射率的体半导体和低维半导体(量子阱、量子线、量子点),或低折射率的掺饵(Er) SiO₂、掺饵 Si₃N₄等;其波导光腔可由介电波导或等离子体波导构成,其激发机制可为光注入、pn 结注入、或量子隧穿注入等.

1948 年提出半导体激光器的设想,1961 年在理论上肯定了在半导体中实现粒子数反转的可能性,并于 1962 年在发光二极管中偶然观测到激光发射现象之后,制成同质结激光器. 从此不断为其提高工作寿命、降低阈值(首先是为了实现室温连续工作)、控制激光模式、提高出光功率、提高调制速率、提高工作温度、拓宽激光波长范围、微型化和集成化、以及某些特殊用途等的目标而迅速发展.

在半导体激光器的发展过程中,理论和实验之间,或先或后、互相促进、共同得到重大发展. 其中富有活力的设计理论,往往因其开创性和前瞻性,在思想上起着开路先锋的作用. 半导体激光器的设计理论大体可分为:工艺理论、速率方程理论、模式理论、和量子理论四个方面:

(1) 工艺理论在继承传统半导体工艺理论,例如,熔体拉晶、杂质扩散、离子注入、掩膜刻蚀、熔焊烧结等的基础上,着重发展了液相外延、分子束外延、金属有机气相沉积外延生长、和自组织生长等化学热力学和晶体生长动力学的设计理论. 其任务是根据半导体激光器件的结构和性能要求,设计出合理可行的制作工艺方法、条件和流程.

(2) 速率方程理论是从微观唯象观点,以唯象参数为工具,以粒子数守恒为依据的速率方程为分析手段的半导体激光器件物理理论,从全局上揭示了半导体激光器的激射阈值相变、多模之间的模式竞争、模式谱系结构等静态行为,延迟、过冲、振荡过渡等瞬态行为、调制方式方法及其速率、动态频谱结构、动态单模化、光模注入锁定、激光的双稳态、自脉动、分叉、混沌、量子噪声和谱线展宽、载流子在量子阱、量子线、量子点等低维结构中的捕获和逃逸等动力学行为及其物理机制. 所涉及的有关唯象参数的数值大小则由实验估测,而其物理机制、内涵、导出、和理论估算等,则由下述宏观和微观理论分别解决和提供. 其任务是挖掘器件的潜能,发现和提出可能的器件或新性能、提出优化器件现有性能等的器件设计方案.

(3) 模式理论是研究激光在波导光腔中的传播规律,各种波导结构中可能存在的各种光模类型和模式结构特点、揭示激光模式结构与波导结构的内在联系,从而

发现控制波导结构和模式结构的途径。由于光在传播过程中主要突出其波动性,因而量子场论和经典场论导出基本上相同的结果,因此完全可以从麦克斯韦方程组出发进行分析。其任务是找出器件性能所需的最佳激光模式结构和设计出其合理的波导光腔结构方案。

(4) 量子理论是研究半导体激光器中体半导体、量子阱、量子线、量子点等增益介质的电子能谱结构及其电子与辐射光场的相互作用,包括光的产生、吸收、放大和散射等涉及不同能带之间、能带以内不同子带或各种晶格缺陷和杂质能级之间的光跃迁和非光跃迁、带内散射和弛豫等决定半导体激光器涉及光电性能的重要量子行为。其处理所涉及的电子系统与光子系统相互作用的理论基础或出发点,有经典理论、半经典理论、全量子理论三个层次。经典理论是将电子的运动服从牛顿力学,光波及其与电子的相互作用服从经典场论,即麦克斯韦方程组。这对众多的电子与光波之间弱相互作用的折射率现象和自发发射因子现象都可得出相当成功的理论结果。半经典理论是将电子的运动服从量子力学,但对光波采用经典场论近似,即近似服从麦克斯韦方程组。这在受激辐射和散射问题都获得非常成功,但无法直接处理自发辐射问题。全量子理论是将电子和光子的运动皆统一服从量子力学,即将电磁辐射场量子化,这样的量子场论与量子电动力学或量子电子学或光力学的差别只在一般可忽略相对论效应。至于光和非光跃迁所涉的增益介质中的电子能级则由半导体能带的量子理论得出。因此,现行的半导体激光器发光过程的理论大多是以半导体能带结构理论和半经典光跃迁的量子理论为基础。其任务是研究半导体激光材料的光增益和激光的量子效率,及其光增益谱结构,如增益谱的峰值增益及其相应的峰值能量和增益谱宽与半导体能带结构的关系,以及影响增益的可能因素,提出拓宽激光波段和提高激光增益的新材料及其受到增益介质的尺寸和维数的影响。这对半导体激光器的激励阈值、激光功率、调制速率、器件结构和激光波段等都有根本性的意义。

这部《半导体激光器设计理论》丛书或系列书是作者上世纪六、七十年代迄今的几十几年间,在北京大学物理系和国内有关院校和研究所以及加拿大多伦多大学和美国亚利桑那州立大学的研究生和研究人员、部分教师和大学高年级本科生讲授这方面由《半导体激光器工艺理论》《半导体激光器速率方程理论》《半导体激光器激光波导模式理论》和《半导体激光器能带结构和光增益的量子理论》的四个学期研究生系列课程的自编讲义,并在教学和科研实践过程中不断修改、更新、补充的后三部分整理成相对独立但密切联系的三卷集组成。第 I 卷(LT1)《半导体激光器速率方程理论》分三章,先在第 1 章中详细讨论半导体异质结构的注入(激发)及其电流的机制、能带图表述及其绘制、并着重探讨与新近垂直腔面发射激光器(VCSEL)的发展密切相关的多层同型异质结理论。同时也为速率方程理论的建立提供坚实的物理和理论背景,并打好编程计算的基础。第 2 章中建立光子和电子

相互作用所应服从的微观唯象粒子数速率方程组, 并讨论其静态解, 即电子和光子相互作用动平衡时的静态现象. 第 3 章则深入探讨半导体激光器的瞬态行为、小信号和大信号简谐调制和脉码调制的行为、自脉动忽然分岔等不稳定现象和双稳态现象、随机过程等动力学行为及其设计应用.

第 II 卷 (LT2) 《半导体激光器激光波导模式理论》分上下册各分两章. 上册在开始的引言中总结了光波导腔在激光形成中的作用之后, 第 1 章从经典场论和经典电子论的观点系统分析光与半导体和金属介质相互作用产生的介质光学性质及其形成的各种光波导和相应的各种模式. 第 2 章深入探讨作为波导理论“基元”的突变三层平板波导腔内外模式的空间结构和频谱结构. 在此基础上进而推广讨论多层平板、圆柱、圆盘和矩形直柱等突变波导及其模式结构, 并建立三层平板波导和微盘自发发射因子的经典场论. 下册在第 3 章中详细分析由于注入非平衡载流子和非平面外延晶体层形成的非自建和自建缓变波导及其腔内外的模式结构. 至此主要讨论的都是各种横截面直柱波导的横模 (x 方向) 和侧模 (y 方向) 的形成和控制问题. 第 4 章集中系统分析光波近平行光腔层面的端面发射激光器和光波近垂直光腔层面的表面发射直柱激光器纵模 (z 方向) 的形成和控制问题.

第 III 卷 (LT3) 《半导体激光器能带结构和光增益的量子理论》系统论述激光产生和控制过程的量子性质及其量子理论, 共分三章. 第 1 章系统论述半导体由单电子近似算出的电子能带结构及其图谱, 即电子能量随电子波矢 \underline{k} 的变化, 特别是比较成功和比较精确计算 \underline{k} 空间极值点附近能带结构的 $\underline{k} \cdot \underline{p}$ 微扰论、处理应变对能带结构影响的皮库斯—毕耳哈密顿量、估算异质结界面能带阶量的模型固体理论、计算量子阱中电子态和子带结构的包络函数理论和有效质量方程. 第 2 章深入论述半导体中光跃迁过程的半经典理论及其费米黄金定则, 并在此基础上建立半导体及其量子阱光增益的半经典理论. 第 3 章系统论述半导体带内的子带间光跃迁的半经典理论和量子光学即辐射场的全量子理论一些基本概念的概述作为本分卷的结束.

本系列课程的开设是在半导体激光器的诞生和发展的初期, 为了助力我国迎头赶上, 争取与世界同步开拓这新领域而努力开展研究和培养提高这方面的人才, 因而教学对象不只是本校学生, 而是面对各个院校开始从事这新领域的学习和研究的朝气蓬勃负有重任的人员, 他们和她们多么渴望高效迅速获得这新领域的核心知识、技能、和设备.

郭长志

2014 年 11 月 16 日于北京

目 录

总序

第 2 章 半导体能带之间的跃迁	481
2.3 光跃迁的量子力学	481
2.3.3 连续能态在能级跃迁中的作用	481
2.3.4 带内弛豫及其谱线展宽	492
2.3.5 量子阱结构的带间光跃迁谱	497
2.3.6 光跃迁动量矩阵元的计算	501
2.3.7 间接带隙半导体的带间光跃迁	533
2.3.8 与杂质有关的光跃迁-无 k 选择定则	558
2.3.9 能带的非抛物性及其影响	567
2.3.10 多体相互作用的能带隙重整化	576
2.3.11 量子阱中的能带混合效应及其影响	584
2.3.12 大应变对增益的影响	589
2.3.13 应变程度的极限	597
2.3.14 量子阱微分增益及其作用	616
2.3.15 折射率 (势垒) 渐变分别限制量子阱的增益	628
2.3.16 量子阱激光器的激射阈值	634
2.4 温度对阈值的影响 —— T_0 问题	643
2.4.1 总论	643
2.4.2 俄歇复合过程的量子理论	656
2.4.3 价带间光吸收过程	673
2.4.4 温度对光增益谱的影响	675
2.4.5 数值结果与讨论	677
第 3 章 半导体带内能态之间的跃迁和量子光学	689
3.1 量子阱中的子带间光跃迁	689
3.1.1 子带间光吸收	689
3.1.2 子带间光发射	702
3.1.3 QCL 能谱和波函数设计	718
3.2 量子阱中电子子带能级的寿命时间	735
3.2.1 决定能级寿命的散射过程	735

3.2.2	量子阱结构中载流子的非平衡收集过程	775
3.3	辐射的全量子理论和半经典理论的极限	784
3.3.1	辐射及其波粒二重性	784
3.3.2	辐射场的量子化	796
3.3.3	辐射的吸收和发射	807
3.3.4	相干函数	822
3.3.5	相干态	830
3.3.6	半经典理论和量子电动力学	844
3.3.7	量子力学的基本公设、表象与图像	850
附录 A	数值计算分析的编程	862
A-1	函数值的计算分析和二维绘图	862
A-2	方程求解、函数计算和绘图	871
A-3	三维绘图	873
附录 B	基本物理常数的数值和单位量纲	877
索引	878

第 2 章 半导体能带之间的跃迁

2.3 光跃迁的量子力学

2.3.3 连续能态在能级跃迁中的作用

在 2.3.1, 1.6) 节中已证明一个常数 (恒定) 微扰将本征能量为 E_i 的初始分立态与连续末态 (其中有些态的能量等于 E_i) 相耦合, 导致系统从初始态跃迁到一些连续谱末态。更准确的表述是: 找到 t 时刻系统在清晰可辨的一组连续态的几率 $P_{i\alpha}(t)$ 随时间线性地增加 [$P_{i\alpha}(t) = \Gamma t$]。由于 $P_{i\alpha}(t) + P_{ii}(t) = 1$, 因此, 在 t 时刻找到系统在初始态 $|\varphi_i\rangle$ 的几率 $P_{ii}(t)$ 必将从 $P_{ii}(0) = 1$ 随时间作线性地减小 [$P_{ii}(t) = 1 - \Gamma t$]。但这结果只在短时间内才成立, 因为如果将 $P_{ii}(t)$ 的线性减小外推到更长时间, 则 $P_{ii}(t)$ 将为负值, 这是不可能的, 因为几率只能是不大于 1 的正数。这就要求确定系统在长时间后的行为。

在 2.3.1, 1.4) 节中研究正弦型微扰诱生两个分立态 $|\varphi_i\rangle$ 和 $|\varphi_f\rangle$ 之间的共振跃迁时, 曾遇到类似的问题。一阶微扰论推导出 $P_{ii}(t)$ 从初始值 $P_{ii}(0) = 1$ 的减小正比于 t^2 , 但这只代表在正弦型微扰作用的“开始”阶段。如果作用时间足够长, 则系统将在 $|\varphi_i\rangle$ 态和 $|\varphi_f\rangle$ 态之间振荡。

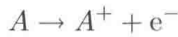
如果末态是连续态, 则系统是否也有可能 在分立态和连续态之间振荡呢? 以下的理论分析表明, 结果是完全相反的: 如果末态是连续态, 一开始系统将作线性衰减, 如果时间足够长, 则系统将不可逆地离开 $|\varphi_i\rangle$ 态。即初态随时间的演变 $P_{ii}(t)$ 最终将是指数衰减 $e^{-\Gamma t}$ (微扰处理只得出短时间内 $1 - \Gamma t$ 的行为)。因此, 末态的连续谱性质将使由分立末态得出的可逆性完全消失; 分立初态的指数衰减 (exponential decay) 表明如有连续末态, 则初始时占据一个分立能态的粒子一旦受到扰动, 例如在与其他粒子碰撞时, 则经过一个有限寿命时间之后将永远离开这个初态而消失到一定的连续末态中。

这种现象在物理中经常遇到。这种现象的特点是, 初始处于分立态的一个系统, 可以在内部耦合 (因此由一个与时间无关的哈密顿量 W 表述) 作用下, 分裂为两个不同的部分。在理论上其能量 (在实物粒子情况是动能, 在光子情况是电磁场能) 可为任何值, 因而表明其中必然存在有连续末态 (图 2.3-3A(a))。举例如下。

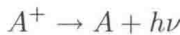
(1) 在 α 衰减, 初始处于分立态的原子核, 通过隧穿效应转换到由一个 α 粒子和另一个原子核组成的系统:



(2) 初始处于有许多激发电子态组的一个多电子原子 A ，在静电相互作用的影响下，将形成一个离子 A^+ 和一个自由电子的系统 (当然，初始态组的能量必须大于 A 的简单电离极限)，这是“自电离(autoionization)”现象：



(3) 一个受激原子 (或原子核) 自发发射一个光子：一个原子与量子化电磁场相互作用，而将分立的初态 (无光子的受激原子) 与连续末态相耦合 (在存在有任何方向、偏振和能量的光子的条件下，处于低态的原子)：



(4) 光电效应中一个正弦微扰将一个原子 A 的分立态与连续谱末态 (离子 A^+ 和光电子 e^-) 相耦合：



以上取自物理各种领域中不稳定态的这些例子，足以说明这种现象的普遍性和重要性。

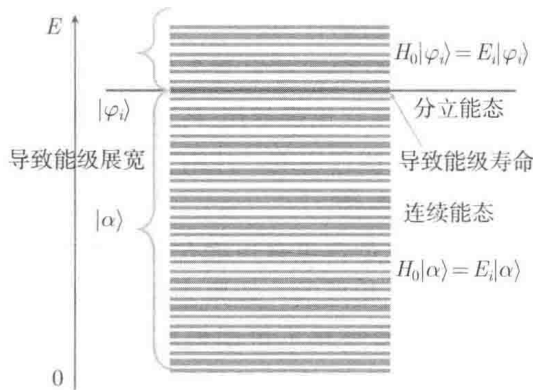


图 2.3-3A(a) 未受扰哈密顿量 H_0 的能谱

1. 模型及其积分微分方程

1) 对未受扰哈密顿量 H_0 能谱结构的假设
为简化计算，假设未受扰哈密顿量 H_0 的能谱包含：

(1) 能量为 E_i (非简并) 分立态 $|\varphi_i\rangle$ ：

$$H_0|\varphi_i\rangle = E_i|\varphi_i\rangle \tag{2.3-12a}$$

(2) 形成连续谱的一组态 $|\alpha\rangle$ ：

$$H_0|\alpha\rangle = E|\alpha\rangle \tag{2.3-12b}$$

本征能量 E 可取无穷多个连续值, 分布在包含 E_i 在内的实轴的一部分, 如图 2.3-3A(b) 所示。假设, 例如, E 从 0 变化到 $+\infty$:

$$E \geq 0 \quad (2.3-12c)$$

每个 $|\alpha\rangle$ 态由其能量 E 和一组其他参数 β 所表征。因此 $|\alpha\rangle$ 也可写成 $|\beta, E\rangle$ 。末态密度为 $\rho_f(\beta, E)$, [eV^{-1}], 则

$$d\alpha = \rho_f(\beta, E) d\beta dE, [1] \quad (2.3-12d)$$

H_0 的本征态满足正交归一性:

$$\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = 1, \quad \langle \varphi_i | \alpha \rangle = 0, \quad \langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha') \quad (2.3-12e)$$

和闭合关系(closure relation):

$$|\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| + \int d\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \quad (2.3-12f)$$

2) 对耦合量 W 的假设

(1) W 不显含时间。

(2) 无对角元:

$$\langle \varphi_i | W | \varphi_i \rangle = \langle \alpha | W | \alpha \rangle = 0 \quad (2.3-12g)$$

(如果这些对角元不为零, 总可将其加到 H_0 的对角元上, 结果只改变未受扰能量)。

(3) W 不能耦合两个连续态:

$$\langle \alpha | W | \alpha' \rangle = 0 \quad (2.3-12h)$$

(4) W 唯一不为零的矩阵元是作为对 $|\varphi_i\rangle$ 态衰变的响应的连接连续态 $|\alpha\rangle$ 和分立态 $|\varphi_i\rangle$ 的矩阵元:

$$\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle \neq 0 \quad (2.3-12h')$$

上述假设并不会有多局限制性。这模型的好处是不必用太多复杂计算就可以研究衰减现象。其主要物理结论也不会因采用更完善的模型而改变。

在采用求解薛定谔方程的新方法之前, 下节将简要说明一阶微扰论应用于这种模型而得出的结果。

3) 一阶微扰论的结果

2.3.1, 1.6), (3) 节的分析可以计算 (特别是用式 (2.3-4s)) 初始处于 $|\varphi_i\rangle$ 态的物理系统在 t 时刻处于围绕 β_f 区间以 $\delta\beta_f$ 为标志的任何能量末态的几率。

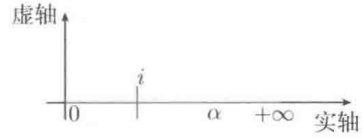


图 2.3-3A(b) 初末态的量子数在实轴上的分布

这里将求出系统在任何连续末态 $|\alpha\rangle$ 的几率, 不管 E 或 β 为何。因此必须将费米黄金定则:

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho_f(\beta_f, E_f = E_i), [s^{-1}] (\text{常数微扰}) \quad (2.3-4s)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) &= w(\varphi_i, \alpha_f) \delta\beta_f = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\beta |\langle \beta, E = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho_f(\beta, E = E_i) \\ &\equiv \Gamma \rightarrow \delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = P_{if}(t) = \Gamma t \end{aligned} \quad (2.3-12i')$$

其中引进常数:

$$\Gamma \equiv \frac{2\pi}{\hbar} \int d\beta |\langle \beta, E = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho_f(\beta, E = E_i) \quad (2.3-12i)$$

由 2.3.1, 1.1) 节的假设, 式 (2.3-12i') 是系统在 t 时刻离开 $|\varphi_i\rangle$ 态的几率。则 t 时刻系统仍在这 $|\varphi_i\rangle$ 态的几率为

$$P_{ii}(t) = 1 - \Gamma t \quad (2.3-12j)$$

其成立的条件为

(1) 由于式(2.3-12j)是由一阶微扰论得出的, 只当 $P_{ii}(t)$ 与其初始值 $P_{ii}(0)=1$ 差别微小时才成立。因此必须要求:

$$t \ll 1/\Gamma \quad (2.3-12k)$$

(2) 同时, 式 (2.3-12j) 只对足够长的时间 t 才成立。

为了更精确表述第二个条件 (2), 特别是要看清与式 (2.3-12k) 的相容性, 必须回到式 (2.3-4m)(β 和 E 不再限于只可在 $\delta\beta_f$ 和 δE_f 区间内变化):

$$\delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_E dE \int_\beta d\beta |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) \rho_f(\beta, E) \quad (2.3-4m)$$

现在不用以前得出这公式的做法, 而是首先对 β 进行积分, 然后再对 E 进行积分, 则

$$\begin{aligned} \delta P(\varphi_i, \alpha_f, t) &= \frac{1}{\hbar^2} \int_E dE F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) \int_\beta d\beta |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho_f(\beta, E) \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) K(E) \end{aligned} \quad (2.3-12l)$$

其中来自对 β 的第一次积分的 $K(E)$ 为

$$K(E) = \int d\beta |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho_f(\beta, E) \quad (2.3-12m)$$

由式 (2.3-2y) 定义, 中心在 $E = E_i$ 、宽度为 $4\pi\hbar/t$ 的衍射函数:

$$F\left[t, \frac{(E - E_i)}{\hbar}\right] = F(t, \omega_{fi}) = \left[\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2}\right]^2, [\text{s}^2]$$

令 $\hbar\Delta$ 为 $K(E)$ 的“宽度”, 即 $\hbar\Delta$ 具有 $K(E)$ 改变足够明显时的 E 变化范围如图 2.3-3B(a) 所示。当 t 足够大, 使

$$t \gg 1/\Delta \quad (2.3-12n)$$

时, $F[t, (E - E_i)/\hbar]$ 相对于 $K(E)$ 的行为如同“ δ 函数”。则由式 (2.3-4n),

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) = \pi t \delta\left(\frac{E - E_i}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar t \delta(E - E_i)$$

可将式 (2.3-12l) 表为

$$\delta P = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) K(E) \quad (2.3-12o)$$

$$\frac{2\pi}{\hbar} t \int dE \delta(E - E_i) K(E) = \frac{2\pi}{\hbar} K(E = E_i) t = \Gamma t$$

比较式 (2.3-12i) 和式 (2.3-12m), 可见

$$\frac{2\pi}{\hbar} K(E = E_i) = \Gamma \quad (2.3-12p)$$

这就再一次得出: 出现在式 (2.3-12j) 中的线性衰减只当 t 足够大得满足式 (2.3-12n), 即 $t \gg 1/\Delta \rightarrow 4\pi\hbar/t \ll 4\pi\hbar\Delta$ 时才成立。

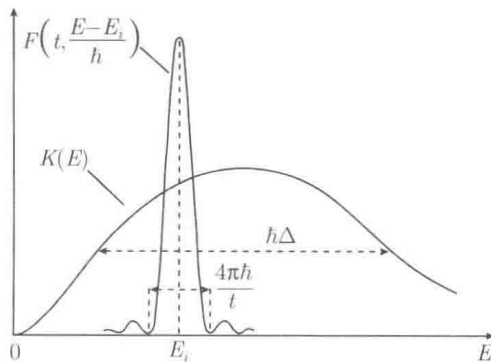


图 2.3-3B(a) 函数 $K(E)$ 和 $F[t, (E - E_i)/\hbar]$ 随 E 的变化。两曲线的相应“宽度”分别为 $\hbar\Delta$ 和 $4\pi\hbar/t$ 的量级。对足够大的 t , $F[t, (E - E_i)/\hbar]$ 的行为是相对于 $K(E)$ 的“ δ 函数”^[2.1]

因此, 条件式 (2.3-12k) 和式 (2.3-12n), 只有当

$$\Delta \gg \Gamma \quad (2.3-12q)$$

时才是相容的。这就是短作用时间近似式 (2.3-12j) 的成立条件。

4) 与薛定谔方程等价的积分微分方程

现在采用 2.3.1, 1.5) 节的微分方程:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t) b_k(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) b_k(t) \quad (2.3-3m)$$

该系统在 t 时刻的 $|\psi(t)\rangle$ 态在 $\{|\varphi_i\rangle, |\alpha\rangle\}$ 基矢系中可展开成

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + \int b(\alpha, t) e^{-iE_i t/\hbar} |\alpha\rangle d\alpha \quad (2.3-12r)$$

将其代入式 (2.3-3m) 中, 再由 2.3.3, 1.1), 2) 节的假设, 得出运动方程组:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} b_i(t) &= \int d\alpha e^{i(E_i - E)\alpha t/\hbar} \langle \varphi_i | W | \alpha \rangle b(\alpha, t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} b(\alpha, t) &= e^{i(E - E_i)\alpha t/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t) \end{aligned} \quad (2.3-12s, t)$$

现在要用这些严格方程组来推算系统在长作用时间之后的行为。考虑初始条件:

$$b_i(0) = 1, \quad b(\alpha, 0) = 0 \quad (2.3-12u)$$

对 W 所作的简化假设意味着 $\frac{d}{dt} b_i(t) g$ 只与 $b(\alpha, t)$ 有关, $\frac{d}{dt} b(\alpha, t)$ 只与 $b_i(t)$ 有关。则可取初始条件式 (2.3-12u), 积分式 (2.3-12t),

$$b(\alpha, t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i(E - E_i)\alpha t'/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t') dt'$$

再将如此得出 $b(\alpha, t)$ 的值代入式 (2.3-12s), 即得到表述 $b_i(t)$ 演变的方程为

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} b_i(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int d\alpha e^{i(E_i - E)\alpha t/\hbar} \langle \varphi_i | W | \alpha \rangle b(\alpha, t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int d\alpha e^{i(E_i - E)\alpha t/\hbar} \langle \varphi_i | W | \alpha \rangle \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i(E - E_i)\alpha t'/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t') dt' \\ \frac{d}{dt} b_i(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int d\alpha \int_0^t dt' e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 b_i(t') \end{aligned} \quad (2.3-12v)$$

由式 (2.3-12d) 并对 β 积分, 再由式 (2.3-12m) 得

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} b_i(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int \rho_f(\beta, E) d\beta dE \int_0^t dt' e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 b_i(t') \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \int dE \int_0^t \left\{ \int |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho_f(\beta, E) d\beta \right\} dt' e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} b_i(t') \rightarrow \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt}b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i-E)(t-t')/\hbar} b_i(t') \quad (2.3-12w)$$

因此, 已可得到一个只涉及 b_i 的方程。但是, 必须注意这方程不再是一个微分方程, 而是一个积分微分方程, 因此, $\frac{d}{dt}b_i(t)$ 与时间从 0 到 t 之间的整个“系统的历史”有关。

积分微分方程 (2.3-12w) 与薛定谔方程严格等价。但不知如何对其进行准确解。在以下各节中, 将描述求解这方程的两个近似方法。其中之一 (2.3.3, 2.1) 节(等于 2.3.3, 1.3) 节的一阶微扰论; 另一个 (2.3.3 节 2.2) 更适于研究系统的长时间行为。

2. 积分微分方程的求解

1) 短时间近似, 与一阶微扰论的关系

如果 t 不大, 即, 如果 $b_i(t)$ 与 $b_i(0) = 1$ 差别不太大, 则可在式 (2.3-12w) 的右边以 $b_i(0) = 1$ 代替 $b_i(t')$ 。因此这右边简化为不难进行积分的对 E 和 t' 的二重积分:

$$\frac{d}{dt}b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i-E)(t-t')/\hbar} \quad (2.3-12x)$$

为对其进行显式的计算, 可引进将在 2.3.3, 2.2) 节表述的更复杂方法中起重要作用的两个常数 (其中一个是在式 (2.3-12i) 所定义的 Γ)。

今用积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \theta(k) e^{ikx} dk = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty e^{ik(x+i\varepsilon)} dk = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{x+i\varepsilon} = i\wp \frac{1}{x} + \pi\delta(x) \quad (2.3-12y')$$

将式 (2.3-12x) 对 t' 积分。其积分限为 $t \rightarrow \infty$ 时是亥维赛阶跃函数 (Heaviside step function) 的傅里叶变换:

$$\hbar \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{i\frac{\tau}{\hbar}(E_i-E)} d\left(\frac{\tau}{\hbar}\right) = \hbar \left[i\wp \left(\frac{1}{E_i-E} \right) + \pi\delta(E_i-E) \right], \quad \tau = t-t' \quad (2.3-12y)$$

实际上, 在式 (2.3-12x) 的计算中, 为了利用式 (2.3-12y), 没有必要令 t 趋于无穷。只要 $\hbar\omega t$ 小于 $K(E)$ 的“宽度” $\hbar\Delta$, 即 t 比 $1/\Delta$ 大很多, 就足够了。再一次得出式 (2.3-12n) 成立的条件。如果这个条件得到满足, 则可用式 (2.3-12y) 将式 (2.3-12x) 写成

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}b_i(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i-E)(t-t')/\hbar} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \wp \int_0^\infty \frac{K(E)}{E_i-E} dE - \frac{\pi}{\hbar} K(E = E_i) \end{aligned} \quad (2.3-12z)$$

由式 (2.3-12p), 可见式 (2.3-12z) 的第二项正是 $-\Gamma/2$ 。令

$$\delta E = \wp \int_0^\infty \frac{K(E)}{E_i-E} dE \quad (2.3-13a)$$

则式 (2.3-12x) 右边的二重积分等于

$$-\Gamma/2 - i\delta E/\hbar \quad (2.3-13b)$$

因此, 当式 (2.3-12w) 中用 $b_i(0) = 1$ 代替 $b_i(t')$ 时, 如果式 (2.3-12n) 得到满足, 这方程将化为

$$\frac{d}{dt}b_i(t) = -\frac{\Gamma}{2} - i\frac{\delta E}{\hbar} \quad (2.3-13c)$$

由初始条件式 (2.3-12u), 则式 (2.3-13c) 的解非常简单, 是

$$b_i(t) = 1 - \left(\frac{\Gamma}{2} + i\frac{\delta E}{\hbar}\right)t \quad (2.3-13d)$$

显然, 只当 $|b_i(t)|$ 与 1 相差甚微, 即

$$t \ll \frac{1}{\Gamma}, \quad \frac{\hbar}{\delta E} \quad (2.3-13e)$$

这个结果才能成立。这是一阶微扰论成立条件式 (2.3-12k) 的推广。

由式 (2.3-13d), 即可算出 t 时刻系统仍在 $|\varphi_i\rangle$ 的几率: $P_{ii}(t) = |b_i(t)|^2$ 。如果忽略 Γ^2 和 δE^2 的项, 就得到

$$P_{ii}(t) = 1 - \Gamma t \quad (2.3-13f)$$

则 2.3.1, 1. 节得到的所有结果, 都可以由 $b_i(t')$ 用 $b_i(0)$ 代替的式 (2.3-12w) 得出。由这方程也可引进参数 δE , 其物理意义将在以后讨论 (注意 δE 不出现在 2.3.1, 1. 节的处理中, 因其只考虑几率 $|b_i(t)|^2$ 的计算, 而不涉及几率振幅 $b_i(t)$ 的计算)。

2) 求解薛定谔方程的另一个近似法

一个更好的近似是在式 (2.3-12w) 中不用 $b_i(0)$ 而用 $b_i(t)$ 代替 $b_i(t')$ 。为看清这点, 可再将严格方程 (2.3-12w) 的右边, 先对 E 积分:

$$\frac{d}{dt}b_i(t) = \int_0^t dt' b_i(t') \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dEK(E) e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} \right\} = \int_0^t dt' b_i(t') g(E_i, t - t')$$

从而得出 E_i 和 $t - t'$ 的一个函数:

$$g(E_i, t - t') = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dEK(E) e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} \quad (2.3-13g)$$

显然只当 $t - t'$ 非常小时才不为零。式 (2.3-13g) 中是将随 E 缓慢变化的 $K(E)$ 与一个相对于变量 E 周期为 $2\pi\hbar/(t - t')$ 的指数函数的乘积对 E 积分。如果选择 t 和 t' 的值, 使这个周期远小于 $K(E)$ 的宽度 $\hbar\Delta$, 则这两个函数的乘积将出现很多的振荡, 这时它对 E 的积分将小得可以忽略。因此, 对 $t - t' \cong 0$, $g(E_i, t - t')$ 的幅

值很大, 但当 $t - t' \gg 1/\Delta$ 时, 就变成小得可以忽略了。这性质意味着, 对于一切 t , $b_i(t')$ 得以明显进入式 (2.3-12w) 右边的只是那些相应于 t' 非常接近 t ($t - t' \leq 1/\Delta$) 的值。的确, 一旦已经对 E 进行过积分, 其右边化为

$$\int_0^t g(E_i, t - t') b_i(t') dt' \quad (2.3-13h)$$

可见一旦 $t - t' \gg 1/\Delta$, $g(E_i, t - t')$ 的存在基本上就消除了 $b_i(t')$ 的贡献。

因此, 导数 $\frac{d}{dt} b_i(t)$ 对 $b_i(t)$ 以前在 0 到 t 之间的值只有很短时间的记忆。实际上, 它只与 b_i 在贴近 t 之前时刻的值有关, 这对一切 t 都是正确的。这性质使得可以将积分微分方程 (2.3-12w) 转换为一个微分方程。如果时间在 $1/\Delta$ 量级的时间内, $b_i(t)$ 的改变非常小, 则式 (2.3-13h) 中用 $b_i(t)$ 代替 $b_i(t')$ 将只有小的误差。由式 (2.3-12z,p), 式 (2.3-13a), 可将式 (2.3-13g) 写成

$$\begin{aligned} g(E_i, t - t') &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE K(E) e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{K(E)}{E_i - E} dE - \frac{\pi}{\hbar} K(E = E_i) = -\left(\frac{\Gamma}{2} + i\frac{\delta E}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

故得

$$b_i(t) \int_0^t g(E_i, t - t') dt' = -\left(\frac{\Gamma}{2} + i\frac{\delta E}{\hbar}\right) b_i(t) \quad (2.3-13i)$$

以后将看到, 由 2.3.3, 2.1) 节的结果, $b_i(t)$ 随时间演变的特征时间是 $1/\Gamma$ 或 $\hbar/\delta E$ 量级。因此, 式 (2.3-13i) 成立的条件为

$$\Gamma, \frac{\delta E}{\hbar} \ll \Delta \quad (2.3-13j)$$

这假设是得到满足的 (见式 (2.3-12q))。

因此对一个好的近似和一切 t , 式 (2.3-12w) 可写成

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\left(\frac{\Gamma}{2} + i\frac{\delta E}{\hbar}\right) b_i(t) \quad (2.3-13k)$$

由式 (2.3-12u), 显然其解为

$$\frac{db_i(t)}{b_i(t)} = -\left(\frac{\Gamma}{2} + i\frac{\delta E}{\hbar}\right) dt \rightarrow b_i(t) = e^{-\Gamma t/2} e^{-i\delta E t/\hbar} \quad (2.3-13l)$$

可见式 (2.3-13l) 的有限展开式给出 Γ 和 δE 的一阶公式 (2.3-13d)。

如果现在将式 (2.3-13l) 的 $b_i(t)$ 代入方程 (2.3-12t), 即可得到可以确定与 $|\alpha\rangle$ 态相联系的几率振幅 $b(\alpha, t)$ 的一个非常简单的方程:

$$b(\alpha, t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle \int_0^t e^{-\Gamma t'/2} e^{-i(E - E_i - \delta E)t'/\hbar} dt' \quad (2.3-13m)$$