

$$1. \psi(x, t=0) = C_1 \psi_{n_1 k_1}(x) + C_2 \psi_{n_2 k_2}(x)$$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = C_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{E}_{n_1 k_1} t} \psi_{n_1 k_1}(x) + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{E}_{n_2 k_2} t} \psi_{n_2 k_2}(x)$$

$$2. \psi(x) = \sum_n C_n \phi(x - a_n)$$

但根据 Bloch 定理.

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

$$\begin{aligned} \text{即: } \psi(x+a) &= e^{ika} e^{ikx} u_k(x+a) \\ &= e^{ika} e^{ikx} u_k(x) = e^{ika} \psi(x) \end{aligned}$$

代入原式, 有:

其中 $a_n = na$

$$\psi(x+a) = \sum_n C_n \phi(x - a_n + a)$$

$$= \sum_n C_n \phi(x - a_{n-1})$$

$$= \sum_n C_{n+1} \phi(x - a_n)$$

$$= e^{ika} \psi(x) = \sum_n C_n e^{ika} \phi(x - a_n)$$

由于 $\phi(x-a_{n_1})$ 与 $\phi(x-a_{n_2})$ 是 (近似) 正交的, 所以上式中各项的系数应

相等, 即: $C_{n+1} = e^{ika} C_n$

$$\Rightarrow C_n = e^{ika} C_{n-1} = e^{2ika} C_{n-2} = \dots e^{in ka} C_0 \\ = e^{ik a_n} C_0$$

$$\text{即: } \psi(x) = C_0 \sum_n e^{ik a_n} \phi(x-a_n)$$

不失归一化, 可以省略 C_0 .

3. 这个周期结构的基元是两原子, 周期是 $2a$. 总周期数是 N .

$$\Rightarrow k \text{ 为 } \left(-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right).$$

每个能带包含 $2N$ 个不同的量子状态

由于每个电子提供 1 个电子, 总共有 $2N$ 个电子去填充这 $2N$ 个状态, 能带被填满, 所以该晶体是绝缘体.

