第八周作业答案

1. 假设势场是一系列狄拉克函数峰（狄拉克梳），

$$V(x)=Q\sum_{j=0}^{N-1}\delta(x-ja).$$

$0<x<a$内势能为零，薛定谔方程的一般解为

$$\psi(x)=A\sin(\alpha x)+B\cos(\alpha x),\qquad \alpha^2=\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

根据布洛赫定理，紧邻原点左侧晶胞的波函数为

$$\psi(x)=e^{-ika}[A\sin\alpha(x+a)+B\cos\alpha(x+a)],\qquad -a<x<0.$$

由$x=0$处波函数的连续条件可得

$$A\sin(\alpha a)=\left[e^{ika}-\cos(\alpha a)\right]B.$$

利用上式，证明处于周期性狄拉克函数势中的一个粒子的波函数可以写为

$$\psi(x)=C\left[\sin(\alpha x)+e^{-ika}\sin\alpha(a-x)\right],\qquad 0\le x\le a.$$

（不需要求出归一化常数C的具体值。）

证明　根据系数之间的关系可得

$$A\sin(\alpha a)\cos(\alpha x)=\left[e^{ika}-\cos(\alpha a)\right]B\cos(\alpha x),$$

$$A\sin\alpha(a-x)=e^{ika}B\cos(\alpha x)-\cos(\alpha a)\,[A\sin(\alpha x)+B\cos(\alpha x)],$$
$$A\sin\alpha(a-x)=e^{ika}\psi(x)-e^{ika}A\sin(\alpha x)-\cos(\alpha a)\,\psi(x),$$

$$\left[1-\cos(\alpha a)\,e^{-ik}\right]\psi(x)=A\left[\sin(\alpha x)+e^{-ik}\sin\alpha(a-x)\right],$$

因此波函数可以写为$\psi(x)=C\left[\sin(\alpha x)+e^{-ika}\sin\alpha(a-x)\right]$.

2. 确定上述周期性狄拉克函数势中粒子能量的方程为

$$\cos(ka)=\cos(\alpha a)+P\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a},$$

其中$P=mQa/\hbar^2$。常数P是表征狄拉克函数强度的一个无量纲的量。找出$P=10$时，第一允带底端的能量大小，精确到千分位。为了便于讨论，令$Q/a=1\mathrm{eV}$。

解　第一允带底端对应方程右边函数值进入允带的第一个点（绝对值$|\alpha a|$最小的解），即$\cos(ka)=1$，$k=0$，所以求解

$$\cos(\alpha a)+P\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a}=1,\ \ 0<\alpha a<\pi,$$

可得

$$E=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}=\frac{Q}{2Pa}(\alpha a)^2$$
$$=0.05\times 2.628^2\mathrm{eV}=0.345\mathrm{eV}.$$