# 习题与总结

# 目录

# 习题

## 经常用到的两道数学公式

（1）求和化积分

$$\sum_{\vec{q}\in BZ}\dots\approx\left(\frac{L}{2\pi}\right)^D\int_{BZ}d\vec{q}$$

上式表示的是：对第一布里渊区所有不等价的$\vec{q}$求和，可以近似成一个对积分范围为第一布里渊区的积分。究其根本，其实是利用了周期边界条件，求出了$k$可将中的量子态密度，从而可以将求和化成积分。

（2）周期晶格的傅里叶级数：

$$\sum_{\vec{R}_n}e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}=N\sum_{\vec{K}_l}\delta_{\vec{q},\vec{K}_l}$$

对于一维的，晶格常数为$a$的晶格来说就是：

$$\sum_{n}^{N}e^{iqna}=e^{iqna}\frac{1-e^{iqaN}}{1-e^{iqa}}=\begin{cases}0, & q\neq K_n\\ N, & q=K_n\end{cases}$$

如果$q$被限制在第一布里渊区内，则：

$$\sum_{\vec{R}_n}e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_n}=N\delta_{\vec{q},0}$$

# 第 1 题 ： 求自由电子气态密度

求一维、二维和三维自由电子气的(能量空间)态密度。

解：对于自由电子气，由周期边界条件可知在$k$空间的态密度为：

$$\frac{1}{\Delta k}=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^D \tag{1-1}$$

**对于三维的情况**：

$k$空间的等能面是**一个球面**，两等能面$E$和$E+\Delta E$之间的量子态数为：

$$\Omega=\int_E^{E+\Delta E} D(E)\,dE=2\int_{\Delta V}\frac{dk_x dk_y dk_z}{\Delta k} \tag{1-2}$$

上式中乘 2 是考虑自旋，$\Delta V$是$k$空间中两等能面$E$和$E+\Delta E$所包围的体积，上式化简为：

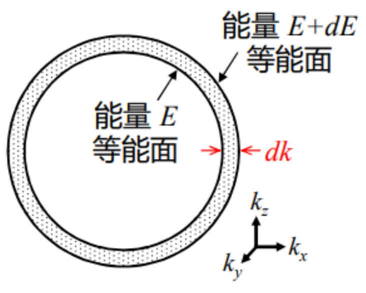
$$\begin{aligned}\Omega&=2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\iiint_{\Delta V}k^2\sin\theta\,dkd\theta\varphi=8\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\int_{k_E}^{k_{E+\Delta E}}k^2dk\\&=8\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\int_E^{E+\Delta E}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)d\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\\&=\frac{4\pi}{\hbar^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\int_E^{E+\Delta E}\sqrt{E}dE\\&=\int_E^{E+\Delta E}\left(\frac{mL^3}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2mE}\right)dE\end{aligned} \tag{1-3}$$

比较$(1-2)(1-3)$式得，三维的态密度$D(E)$为：

$$D(E)=\frac{mL^3}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2mE} \tag{1-4}$$

**对于二维的情况**：

$k$空间的等能面是**一个圆**，两等能面$E$和$E+\Delta E$之间的量子态数为：



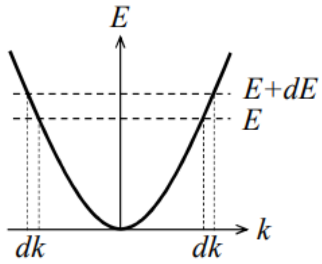

$$\begin{aligned}\Omega&=\int_E^{E+\Delta E}D(E)\,dE=2\int_{\Delta V}\frac{dk_x dk_y}{\Delta k}\\&=2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\iint_{\Delta V}kdkd\theta=4\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\int_{k_E}^{k_{E+\Delta E}}kdk\\&=4\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\int_E^{E+\Delta E}\sqrt{2mE/\hbar^2}\,d\sqrt{2mE/\hbar^2}\\&=\int_E^{E+\Delta E}\left(\frac{mL^2}{\pi\hbar^2}\right)dE\end{aligned} \tag{1-5}$$

因此，二维的态密度$D(E)$为：

$$D(E)=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2} \tag{1-6}$$

**对于一维的情况**:

$k$空间的等能面是**两个点**，两等能面$E$和$E+\Delta E$之间的量子态数为:




$$\Omega = 2\int_{E}^{E+\Delta E} D(E)\,dE = 4\int_{\Delta V}\frac{dk}{\Delta k}$$

$$= 4\left(\frac{L}{2\pi}\right)\int_{k_E}^{k_{E+\Delta E}} dk = 4\left(\frac{L}{2\pi}\right)\int_{E}^{E+\Delta E} d\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$= \int_{E}^{E+\Delta E}\left(\frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\right)dE \tag{1-7}$$

因此一维的态密度$D(E)$为:

$$D(E) = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}} \tag{1-8}$$

值得注意的是，一维情况的等势面是两个点！所以相比二维、三维要多乘个 2!

碎碎念：很经典的一道题。其实在大二的热力学与统计物理的课上面就有这道题了。当时我一直没有注意到一维的情况下等势面是两个点，所以要乘个 2。所以这道题我一直都是做错的，嗯~ o(*￣▽￣*)o，感觉自己蛮蠢的。

## 第 2 题：求电子密度和单电子平均内能

在一维和二维系统中，分别写出$T = 0K$时费米面位置$E_F$随电子密度$\rho$的变化函数，并计算电子气的单电子平均能量$U/N$。

解：系统中的电子数和能量可有态密度$D(E)$和费米分布函数$f_0(E)$求出：

$$N = \int_0^{+\infty} D(E) f_0(E)\, dE = \int_0^{E_F} D(E)\, dE \qquad (2-1)$$

$$U = \int_0^{+\infty} E D(E) f_0(E)\, dE = \int_0^{E_F} E D(E)\, dE \qquad (2-2)$$

这样，我们把第一题的态密度结果代入上式，便可求出电子数了。

但这样的计算复杂了一点，我们可以这样算，把积分从能量空间换到$k$空间：

$$N = 2\frac{1}{\Delta k}\int_{\text{全}k\text{空间}} f_0(E_k)\, dk = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^D \int_{K_D} dk \qquad (2-3)$$

$$U = 2\frac{1}{\Delta k}\int_{\text{全}k\text{空间}} E_k f_0(E_k)\, dk = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^D \int_{K_D} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) dk \qquad (2-4)$$

**对于一维的情况**：

其积分范围$K_1$应该是$-k_F \sim k_F$：

$$N = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^1 \int_{-k_F}^{k_F} dk = \frac{2Lk_F}{\pi} = \frac{2L}{\pi\hbar}\sqrt{2mE_F} \qquad (2-5)$$

$$U = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^1 \int_{-k_F}^{k_F} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) dk = \frac{\hbar^2 L}{3\pi m} k_F^3 = \frac{2LE_F}{3\pi\hbar}\sqrt{2mE_F} \qquad (2-6)$$

因此：

$$\text{一维电子密度：}\ \rho = \frac{N}{L} = \frac{2}{\pi\hbar}\sqrt{2mE_F} \qquad (2-7)$$

$$\text{一维单电子平均能量：}\ \frac{U}{N} = \frac{E_F}{3} \qquad (2-8)$$

**对于二维的情况**：

其积分范围$K_2$应该是半径为$k_F$的圆面积：

$$N = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \iint_{K_2} dk_x dk_y = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 2\pi \int_0^{k_F} k dk = \frac{L^2}{2\pi} k_F^2 = \frac{mL^2 E_F}{\pi\hbar^2} \qquad (2-9)$$

$$U = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \iint_{K_2} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) dk_x dk_y = \frac{2\pi}{m}\left(\frac{L\hbar}{2\pi}\right)^2 \int_0^{k_F} k^3 dk = \frac{\pi k_F^4}{2m}\left(\frac{L\hbar}{2\pi}\right)^2 = \frac{mL^2}{2\pi\hbar^2} E_F^2 \qquad (2-10)$$

因此：

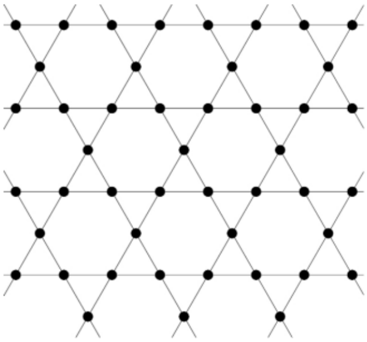
$$\text{二维电子密度：}\ \rho = \frac{N}{L^2} = \frac{mE_F}{\pi\hbar^2} \qquad (2-11)$$

$$\text{二维单电子平均能量：}\ \frac{U}{N} = \frac{E_F}{2} \qquad (2-12)$$

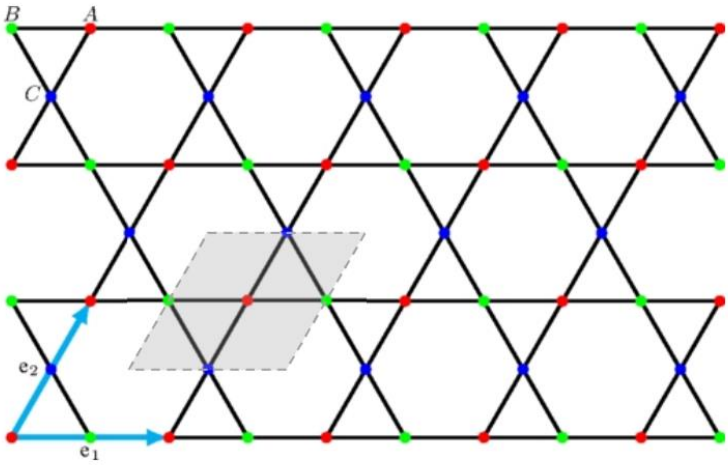
碎碎念：同样很经典。涉及到了能量空间的积分转换为$k$空间，以及利用费米分布函数的阶梯型把积分范围缩小到费米能级（费米波矢）内的积分。

## 第 3 题：找布拉维格子的基矢与不等价原子

下图为二维$kagome$晶格，每一个点代表一个原子。试给出其原胞和布拉维格子类型，并标记每一原胞内不等价的原子。



解：下图中$\vec{e_1}$和$\vec{e_2}$为原胞的两个基矢，对应是**简单六角晶格**。每个原胞内包含三个不等价原子$A,B,C$，分别用不同颜色表示出来了：

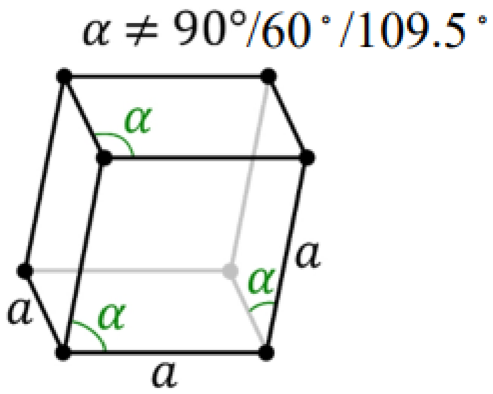



在笔记中，我只给出了三维的晶格的晶系，和对应的布拉维格子类型，这里要了解一下二维的情况：

| 晶系 | 基矢特性 | 布拉维格子 |
|---|---|---|
| 斜方 | $a \neq b\ ,\gamma \neq 90°$ | 简单斜方 |
| 长方 | $a \neq b\ ,\gamma = 90°$ | 简单长方 |
| | | 中心长方 |
| 正方 | $a = b\ ,\gamma = 90°$ | 简单正方 |
| 六角 | $a = b\ ,\gamma = 120°(\text{or}60°)$ | 简单六角 |

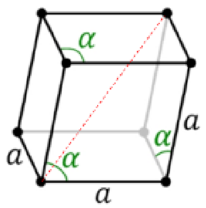
## 第 4 题：找旋转轴和转角

图中的三角晶格，给出使其中心点保持不变的对称操作。



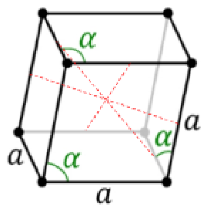

解：有 6 个旋转操作（包括不动）+中心反演操作。所以一共有 12 个其中心点保持不变的对称操作。(具体点说是 6 个旋转操作，加上 6 个旋转并反演操作，所以一共有 12 个)。

转轴如下图：




1个三重转轴

2个操作




3个二重转轴

3个操作

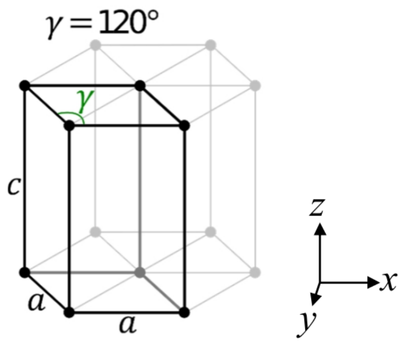
转角分别为$\frac{2\pi}{3}$和$\pi$。

碎碎念：这转轴和转角怎么找啊？就硬找？靠想象的话我实在找不出来。(；´д｀）ゞ

## 第 5 题：诺埃曼法则的一道应用题

用对称性证明下图中六角晶格的介电常数张量有一下形式：

$$\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz}\\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz}\\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varepsilon_{\perp} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel}\end{pmatrix}$$




解：对这个六角晶体来说，它的旋转对称操作有：绕$x$轴旋转$\pi$，或绕$z$轴旋转$\frac{\pi}{3}$。这种旋转的坐标变化矩阵分别为：

$$\text{绕}x\text{轴旋转 }180°: A_1=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\tag{5-1}$$

$$\text{绕}z\text{轴旋转 }60°: A_2=\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\tag{5-2}$$

由诺埃曼(Neumann)法则：晶体的宏观物理性质必定具有晶体结构的一切对称性。因此晶体的介电常数张量也应该由在上面两个旋转矩阵作用下不变的性质：

$$\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz}\\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz}\\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz}\\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz}\\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz}\\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz}\\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}\tag{5-3}$$

因此：

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}&=\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}\\ &=\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}\frac{1}{4}\varepsilon_{xx}+\frac{3}{4}\varepsilon_{yy} & \frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{xx}-\frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{yy} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{xx}+\frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{yy} & \frac{3}{4}\varepsilon_{xx}+\frac{1}{4}\varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\perp} \\ \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\parallel} \end{cases} \tag{5-4}$$

将(5 − 4)代入(5 − 3)得：

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix} \tag{5-5}$$

证毕。

值得回顾的知识：

①空间旋转矩阵的转置等于它的逆，也就是旋转矩阵是一个正交矩阵。

②一个空间中，基底的旋转如果用一个旋转矩阵来表示：

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_1' \\ \vec{e}_2' \\ \vec{e}_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{e}_1' \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_1' \cdot \vec{e}_2 & \vec{e}_1' \cdot \vec{e}_3 \\ \vec{e}_2' \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_2' \cdot \vec{e}_2 & \vec{e}_2' \cdot \vec{e}_3 \\ \vec{e}_3' \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_3' \cdot \vec{e}_2 & \vec{e}_3' \cdot \vec{e}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \\ \vec{e}_3 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \\ \vec{e}_3 \end{pmatrix}$$

那么这个空间中的向量坐标对应的旋转变化为：

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

矩阵对应的旋转变化为：

$$A = TAT^{-1}$$

（详细请看《量子力学笔记-第三章-第四节》

碎碎念：诺埃曼(Neumann)法则感觉好厉害。

# 第 6 题：布洛赫函数的两道证明

当$\vec{k}$和$\vec{k}'$均位于第一布里渊区内，且$\vec{k} \neq \vec{k}'$时，证明：

（1）布洛赫函数$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$和$\psi_{\vec{k}'}(\vec{r})$正交，即：

$$\int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\,d\vec{r} = 0$$

（2）布洛赫函数的周期部分$u_{\vec{k}}(\vec{r})$和$u_{\vec{k}'}(\vec{r})$一般不正交，即：

$$\int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r})\,d\vec{r} \neq 0$$

证明：

（1）由布洛赫定理可知：

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \qquad (6-1)$$

因此：

$$\int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\,d\vec{r} = \int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}+\vec{R}_n)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_n)\,d\vec{r} = e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_n}\int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\,d\vec{r} \qquad (6-2)$$

由上式可得：

$$\left(1-e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_n}\right)\int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\,d\vec{r} = 0 \qquad (6-3)$$

上式对于所有的$\vec{R}_n$都成立，但不可能$e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_n} = 1$都成立，因此只能有：

$$\int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\,d\vec{r} = 0 \qquad (6-4)$$

证毕。

（2）由布洛赫定理的推论可知：

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{\vec{k}}(\vec{r})\ ;\ u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_n) \qquad (6-5)$$

由$(6-6)$可知，$u_{\vec{k}}(\vec{r})$是一个周期函数，因此可将他做傅里叶级数展开：

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n A_{\vec{k}}(\vec{K}_n)e^{i\vec{K}_n\cdot\vec{r}}$$

因此：

$$\int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n\sum_{n'} A_{\vec{k}}(\vec{K}_n)A_{\vec{k}'}^*(\vec{K}_{n'})\int e^{i(\vec{K}_n-\vec{K}_{n'})\cdot\vec{r}}\,d\vec{r} \qquad (6-7)$$

且利用：

$$\int e^{i(\vec{K}_n-\vec{K}_{n'})\cdot\vec{r}}\,d\vec{r} = L^3\delta(\vec{K}_n-\vec{K}_{n'}) \qquad (6-8)$$

结合$(6-7)(6-8)$得：

$$\int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r}) = L^3\sum_n A_{\vec{k}}(\vec{K}_n)A_{\vec{k}'}^*(\vec{K}_n) \neq 0 \qquad (6-9)$$

一般情况下$L^3\sum_n A_{\vec{k}}(\vec{K}_n)A_{\vec{k}'}^*(\vec{K}_n) \neq 0$，因此$\int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r}) \neq 0$。证毕。

# 第 7 题：周期性势场的傅里叶展开

对于以下一维周期势场$V(x)$的形式，$V(x)=\sum_n V(K_n)e^{iK_nx}$的傅里叶系数$V(K_n)$的表达式：

（1）$V(x)=-\beta(x-na)^2$，当$\left(n-\frac{1}{2}\right)a\le x\le\left(n+\frac{1}{2}\right)a$，这里$n$为任意整数；

（2）$V(x)=-\beta\sum_n\delta(x-na)$，$n$为任意整数。

解：以上两个势函数都是周期为$a$的函数。其实也就是一维晶格常数为$a$，倒格矢$K_n=\frac{2n\pi}{a}$。我们可以用傅里叶级数的正交归一性来确定傅里叶系数：

$$\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2}V(x)e^{-iK_nx}\,dx=\frac{1}{a}\sum_{n'}V(K_{n'})\int_{-a/2}^{a/2}e^{i(K_{n'}-K_n)x}\,dx=\sum_{n'}V(K_{n'})\delta(K_{n'}-K_n)=V(K_n)$$

$$\Longrightarrow\ V(K_n)=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}V(x)e^{-iK_nx}\,dx \qquad (7-1)$$

因此对于（1）：

$$V(K_n)=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}-\beta x^2e^{-iK_nx}\,dx \qquad (7-2)$$

若$n=0$，则：

$$V(0)=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}-\beta x^2\,dx=-\frac{\beta a^2}{12} \qquad (7-3)$$

若$n\ne0$，则：

$$V(K_n)=V\left(\frac{2n\pi}{a}\right)=-\frac{\beta}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}x^2e^{-i\frac{2n\pi}{a}x}\,dx=(-1)^{n+1}\frac{2\beta a^2}{(2n\pi)^2} \qquad (7-4)$$

对于（2）：

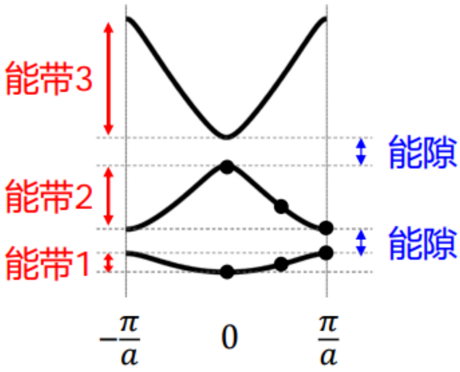
$$V(K_n)=V\left(\frac{2n\pi}{a}\right)=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}-\beta\sum_n\delta(x-na)\,e^{-iK_nx}\,dx$$

$$=-\frac{\beta}{a}\sum_n\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\delta(x-na)e^{-i\frac{2n\pi}{a}x}\,dx$$

$$=-\frac{\beta}{a} \qquad (7-5)$$

# 第 8 题：计算一维布洛赫电子的能带和能隙

设电子感受到的一维晶体势场为$V(x)=V_0\left(\cos\frac{2\pi x}{a}+\frac{1}{2}\cos\frac{4\pi x}{a}\right)$，其中$V_0\ll\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$。利用简并或非简并微扰方法，计算能带 1 和 2 在$k=0,k=\frac{\pi}{a},k=\frac{\pi}{2a}$处的能量大小，并给出图中两个能隙的大小。




解：利用简约波矢$\tilde{k}$表示的自由布洛赫电子的波函数为：

$$\psi_k^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{i\tilde{k}x}e^{i\frac{2\pi}{a}mx}\ ;\ \tilde{k}\in\left(-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right] \tag{8-1}$$

其中非简约波矢$k$取值为：

$$k=\tilde{k}+\frac{2\pi}{a}m\ ;\ m\text{取整数} \tag{8-2}$$

弱周期势能$V(x)$作为微扰，为了方便，我们把它写成：

$$V(x)=\frac{V_0}{2}\left(e^{i\frac{2\pi x}{a}}+e^{-i\frac{2\pi x}{a}}+\frac{1}{2}e^{i\frac{4\pi x}{a}}+\frac{1}{2}e^{-i\frac{4\pi x}{a}}\right) \tag{8-3}$$

对于能带 1 的$\tilde{k}=0$处，$m=0$，能量的零级修正为：

$$E_{n,\tilde{k}}^{(0)}=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{8-4}$$

能量的一级修正：

$$E_{n,\tilde{k}}^{(1)}=\left\langle\psi_k^{(0)}\middle|V(x)\middle|\psi_k^{(0)}\right\rangle=0 \tag{8-5}$$

能量的二级修正：

$$\begin{aligned}E_{n,\tilde{k}}^{(2)}=E_k^{(2)}&=-\sum_{k'\neq k}\frac{\left|\left\langle\psi_{k'}^{(0)}\middle|V(x)\middle|\psi_k^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_{k'}^{(0)}-E_k^{(0)}}\\&=-\sum_{k'\neq k}\frac{1}{E_{k'}^{(0)}-E_k^{(0)}}\left\{\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'-k-\frac{2\pi}{a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'-k+\frac{2\pi}{a}\right)\right]^2\right.\\&\qquad\left.+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'-k-\frac{4\pi}{a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'-k+\frac{4\pi}{a}\right)\right]^2\right\}\end{aligned} \tag{8-6}$$

对于能带 1 的$\tilde{k}=0$的位置，$k=0$，因此：

$$E_{1,0}^{(0)}=0 \tag{8-7}$$

$$E_{1,0}^{(2)}=-\sum_{k'\neq 0}\frac{1}{E_{k'}^{(0)}-E_k^{(0)}}\left\{\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'-\frac{2\pi}{a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'+\frac{2\pi}{a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'-\frac{4\pi}{a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'+\frac{4\pi}{a}\right)\right]^2\right\}$$

$$=-\left[\frac{2m}{\hbar^2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2}\frac{V_0^2}{4}+\frac{2m}{\hbar^2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2}\frac{V_0^2}{4}+\frac{2m}{\hbar^2\left(\frac{4\pi}{a}\right)^2}\frac{V_0^2}{16}+\frac{2m}{\hbar^2\left(\frac{4\pi}{a}\right)^2}\frac{V_0^2}{16}\right]$$

$$=-\frac{mV_0^2a^2}{4\hbar^2\pi^2}-\frac{mV_0a^2}{64\hbar^2\pi^2}=-\frac{17mV_0a^2}{64\hbar^2\pi^2} \tag{8-8}$$

因此：

$$E_{1,0}=-\frac{17mV_0a^2}{64\hbar^2\pi^2} \tag{8-9}$$

对于能带 1 的$\tilde{k}=\frac{\pi}{2a}$的位置，$k=\frac{\pi}{2a}$，因此：

$$E_{1,\frac{\pi}{2a}}^{(0)}=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2} \tag{8-10}$$

$$E_{1,0}^{(2)}=-\sum_{k'\neq\frac{\pi}{2a}}\frac{1}{E_{k'}^{(0)}-E_k^{(0)}}\left\{\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'-\frac{5\pi}{2a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'+\frac{3\pi}{2a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'-\frac{9\pi}{2a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'+\frac{7\pi}{2a}\right)\right]^2\right\}$$

$$=-\left[\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{5\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{4}+\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{3\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{4}+\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{9\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{16}+\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{7\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{16}\right]$$

$$=-\frac{mV_0^2a^2}{\hbar^2\pi^2}\left(\frac{1}{12}+\frac{1}{4}+\frac{1}{160}+\frac{1}{96}\right)=-\frac{7mV_0^2a^2}{20\hbar^2\pi^2} \tag{8-11}$$

因此：

$$E_{1,\frac{\pi}{2a}}=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}-\frac{7mV_0^2a^2}{20\hbar^2\pi^2} \tag{8-12}$$

对于能带 2 的$\tilde{k}=\frac{\pi}{2a}$的位置，$k=\frac{\pi}{2a}-\frac{2\pi}{a}=-\frac{3\pi}{2a}$，因此：

$$E_{2,\frac{\pi}{2a}}^{(0)}=\frac{9\hbar^2\pi^2}{8ma^2} \tag{8-13}$$

$$E_{2,\frac{\pi}{2a}}^{(2)}=-\sum_{k'\neq-\frac{3\pi}{2a}}\frac{1}{E_{k'}^{(0)}-E_k^{(0)}}\left\{\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'-\frac{7\pi}{2a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{2}\delta\left(k'+\frac{\pi}{2a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'-\frac{11\pi}{2a}\right)\right]^2+\left[\frac{V_0}{4}\delta\left(k'+\frac{5\pi}{2a}\right)\right]^2\right\}$$

$$=-\left[\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{7\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{3\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{4}+\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{3\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{4}+\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{11\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{3\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{16}+\frac{2m}{\hbar^2\left[\left(\frac{5\pi}{2a}\right)^2-\left(\frac{3\pi}{2a}\right)^2\right]}\frac{V_0^2}{16}\right]$$

$$=-\frac{mV_0^2a^2}{\hbar^2\pi^2}\left(\frac{1}{20}-\frac{1}{4}+\frac{1}{224}+\frac{1}{32}\right)=-\frac{23}{140}\frac{mV_0^2a^2}{\hbar^2\pi^2} \tag{8-14}$$

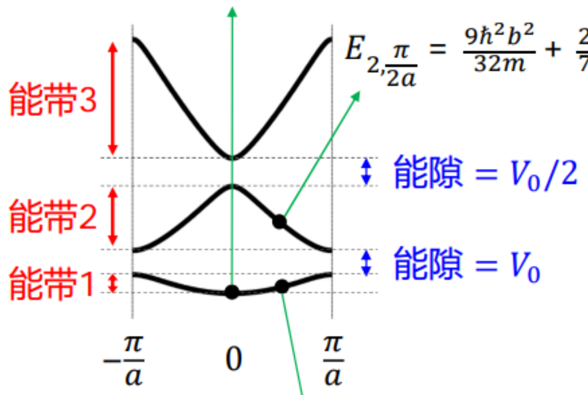
因此：

$$E_{2,\frac{\pi}{2a}}=\frac{9\hbar^2\pi^2}{8ma^2}-\frac{23}{140}\frac{mV_0^2a^2}{\hbar^2\pi^2} \tag{8-15}$$

以上三个点都是用到非简并微扰法计算，总结下来如下图：

$$E_{1,0}=-2\frac{|V(b)|^2}{\hbar^2b^2/2m}-2\frac{|V(2b)|^2}{4\hbar^2b^2/2m}=-\frac{17}{32}\frac{2m}{\hbar^2b^2}V_0^2=-\frac{17}{64}\frac{ma^2}{\hbar^2\pi^2}V_0^2$$

$$E_{2,\frac{\pi}{2a}}=\frac{9\hbar^2b^2}{32m}+\frac{23}{70}\frac{2m}{\hbar^2b^2}V_0^2=\frac{9\hbar^2\pi^2}{8ma^2}+\frac{23}{140}\frac{ma^2}{\hbar^2\pi^2}V_0^2$$




$$E_{1,\frac{\pi}{2a}}=\frac{\hbar^2b^2}{32m}-\frac{7}{10}\frac{2m}{\hbar^2b^2}V_0^2=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}-\frac{7}{20}\frac{ma^2}{\hbar^2\pi^2}V_0^2$$

对于能带 1 的$\tilde{k}=\frac{\pi}{a}$位置，是出现在第一布里渊区边界的简并，由简并微扰论可得：

$$E_{1,\frac{\pi}{a}}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}-|V_1|=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}-\frac{V_0}{2} \tag{8-16}$$

对于能带 2 的$\tilde{k}=\frac{\pi}{a}$位置，是出现在第一布里渊区边界的简并，由简并微扰论可得：

$$E_{1,\frac{\pi}{a}}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+|V_1|=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+\frac{V_0}{2} \tag{8-17}$$

对于能带 2 的$\tilde{k}=0$位置，是出现在第二布里渊区边界的简并，由简并微扰论可得：

$$E_{1,\frac{\pi}{a}}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+|V_2|=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}-\frac{V_0}{4} \tag{8-18}$$

对于能带 3 的$\tilde{k}=0$位置，是出现在第二布里渊区边界的简并，由简并微扰论可得：

$$E_{1,\frac{\pi}{a}}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+|V_2|=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+\frac{V_0}{4} \tag{8-19}$$

提醒以下，千万别忘了$|V_1|,|V_2|,\ldots$是什么东西，它是势函数的傅里叶展开系数：

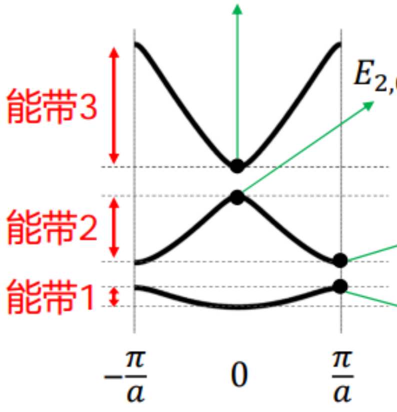
$$V(x)=\sum_n V_ne^{i\frac{2\pi n}{a}x} \tag{8-20}$$

且势能函数一般对称，有：

$$V_n=-V_{-n} \tag{8-21}$$

简并情况总结如下：

$$E_{3,0}=\frac{\hbar^2b^2}{2m}+|V(2b)|=\frac{2\hbar^2\pi^2}{ma^2}+\frac{V_0}{4}$$




$$E_{2,0}=\frac{\hbar^2b^2}{2m}-|V(2b)|=\frac{2\hbar^2\pi^2}{ma^2}-\frac{V_0}{4}$$

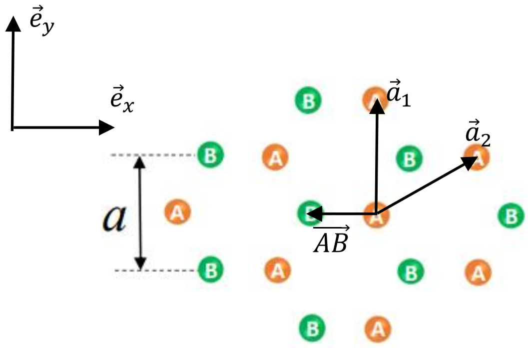
$$E_{2,\frac{\pi}{a}}=\frac{\hbar^2b^2}{8m}+|V(b)|=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+\frac{V_0}{2}$$

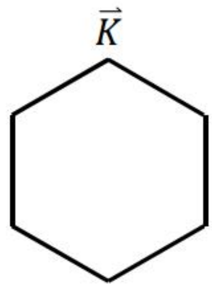
$$E_{1,\frac{\pi}{a}}=\frac{\hbar^2b^2}{8m}-|V(b)|=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}-\frac{V_0}{2}$$

碎碎念：这道题计算好复杂啊，对着答案我都算了好久。但如果只是应付考试的话，记住一下可以得到最终结果的计算公式就可以啦。不过细细品尝这道题，我意识到了之前一直没有理解清楚的一点：描述上述的一个量子态，还是要用$n,\tilde{k}$两个指标来区分，其中$\tilde{k}$是简约波矢。这一点要细细品味。如果你不用简约波矢，而是用$k=\tilde{k}+\frac{2\pi m}{a}$的话，你要明白例如$k=\frac{3\pi}{2}$，其实可以是能带 1 的，也可以是能带 2，3，4…的。而如果你用$n,\tilde{k}$来区分，$n$首先就表明了是那个能带，这就不会有表述上的问题。

## 第 9 题：二维石墨烯晶格的简并微扰计算

下左图为二维石墨烯晶格，不等价的两种碳原子分别用$A$和$B$指代。下右图为其布里渊区，其中一个顶点为$\vec{K}$。




（1）已知所有$A$格点的吸引势可以写为$V_A(\vec{r})=\sum_{\vec{K}_n}U(|\vec{K}_n|)e^{i\vec{K}_n\cdot\vec{r}}$（$U(|\vec{K}_n|)$为实数），求碳原子总吸引势$V_A(\vec{r})+V_B(\vec{r})$的傅里叶展开式。

（2）在弱周期势近似下，求最底下的 3 个能带在$\vec{K}$点的能量（保留到$U(|\vec{K}_n|)$的最低阶）。

解：(1) $A,B$不等价是因为它们感受到的周围原子排布方式不一样，但它两属于同种原子，因此它两产生的势能应该是一样的，只是在空间分布出现了一个位置偏差 $\overrightarrow{AB}$：

$$V_B(\vec{r})=V_A(\vec{r}-\overrightarrow{AB})=\sum_{\vec{K}_n}U(|\vec{K}_n|)e^{i\vec{K}_n\cdot(\vec{r}-\overrightarrow{AB})} \tag{9-1}$$

不难求得：

$$\overrightarrow{AB}=\left(-\frac{a}{\sqrt{3}},0\right) \tag{9-2}$$

因此：

$$V_A(\vec{r})+V_B(\vec{r})=\sum_{\vec{K}_n}U(|\vec{K}_n|)\left(1+e^{-i\vec{K}_n\cdot\overrightarrow{AB}}\right)e^{i\vec{K}_n\cdot\vec{r}} \tag{9-3}$$

（2）以$A$位置代表格点的位置，建立布拉维格子的基矢$\vec{a}_1,\vec{a}_2$：

$$\vec{a}_1=(0,a)\ ;\ \vec{a}_2=\left(\frac{\sqrt{3}a}{2},\frac{a}{2}\right) \tag{9-4}$$

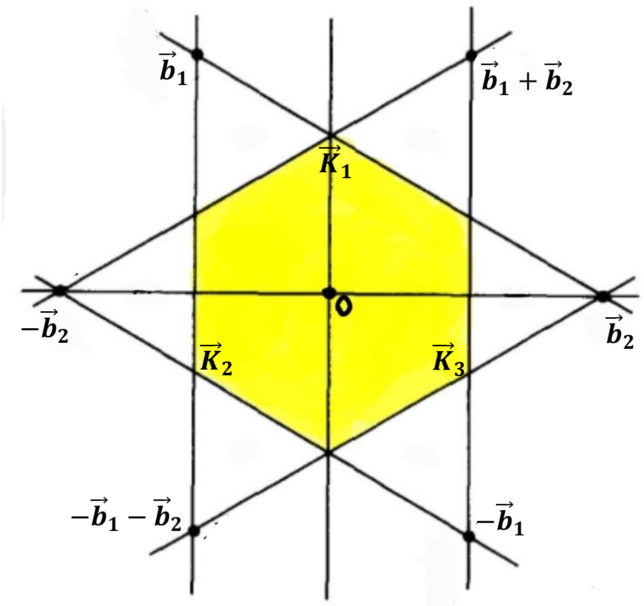
则对应的倒格基矢为满足：

$$\vec{a}_i\cdot\vec{b}_j=\delta_{ij} \tag{9-5}$$

可求得：

$$\vec{b}_1=\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a},\frac{2\pi}{a}\right)\ ;\ \vec{b}_2=\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a},0\right) \tag{9-6}$$

画出倒格点和其第一布里渊区如下：




如上图的第一布里渊区的其中一个顶点为：

$$\vec{K}_1=\left(0,\frac{4\pi}{3a}\right) \tag{9-7}$$

且不难发现它与其中其它两个顶点恰好相差一倒格矢：

$$\vec{K}_2=\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a},-\frac{2\pi}{3a}\right)=\vec{K}_1-\vec{b}_1-\vec{b}_2 \tag{9-8}$$

$$\vec{K}_3=\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a},-\frac{2\pi}{3a}\right)=\vec{K}_1-\vec{b}_1 \tag{9-9}$$

我们由布洛赫定理推论可知$E(\vec{k}+\vec{K}_n)=E(\vec{k})$，相差一个倒格矢位置的能量相等。因此在空晶格模型$\vec{K}_1,\vec{K}_2,\vec{K}_3$三点的位置的能量是相等的，这是一个三重简并能级。其实这一点应该很直观地感受到，因为这三点位置感受都周围倒格点的分布是完全一样的，所以理所应当地它们的能量应该是相同的。但它们处于布里渊区边界，在弱周期近似下，简并会被打开，能级发生分裂。这就要用到简并微扰理论了。

空晶格模型下，它们的能量都为：

$$E^{(0)}=\frac{\hbar^2\left|\vec{K}_1\right|^2}{2m}=\frac{8\pi^2\hbar^2}{9m} \tag{9-10}$$

其(零级)波函数分别为：

$$\begin{cases}\psi_{\vec{K}_1}=\dfrac{1}{\sqrt{L^2}}e^{i\vec{K}_1\cdot\vec{r}}\\ \psi_{\vec{K}_2}=\dfrac{1}{\sqrt{L^2}}e^{i\vec{K}_2\cdot\vec{r}}\\ \psi_{\vec{K}_3}=\dfrac{1}{\sqrt{L^2}}e^{i\vec{K}_3\cdot\vec{r}}\end{cases} \tag{9-11}$$

那么在$\psi_{\vec{K}_1},\psi_{\vec{K}_2},\psi_{\vec{K}_3}$所张成的子空间中，微扰项$V(\vec{r})=V_A(\vec{r})+V_B(\vec{r})$的矩阵表示为：

$$V(\vec{r})=\begin{pmatrix}\left\langle\psi_{\vec{K}_1}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_1}\right\rangle & \left\langle\psi_{\vec{K}_1}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_2}\right\rangle & \left\langle\psi_{\vec{K}_1}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_3}\right\rangle\\ \left\langle\psi_{\vec{K}_2}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_1}\right\rangle & \left\langle\psi_{\vec{K}_2}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_2}\right\rangle & \left\langle\psi_{\vec{K}_2}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_3}\right\rangle\\ \left\langle\psi_{\vec{K}_3}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_1}\right\rangle & \left\langle\psi_{\vec{K}_3}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_2}\right\rangle & \left\langle\psi_{\vec{K}_3}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_3}\right\rangle\end{pmatrix} \tag{9-12}$$

其中：

$$\begin{aligned}&\left\langle\psi_{\vec{K}_1}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_1}\right\rangle=\left\langle\psi_{\vec{K}_2}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_2}\right\rangle=\left\langle\psi_{\vec{K}_3}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_3}\right\rangle\\ &=\frac{1}{L^2}\int\sum_{\vec{K}_n}U\left(\left|\vec{K}_n\right|\right)\left(1+e^{-i\vec{K}_n\cdot\overrightarrow{AB}}\right)e^{i\vec{K}_n\cdot\vec{r}}\,d\vec{r}\\ &=2U\left(\left|\vec{K}_n\right|=0\right)=0\end{aligned} \tag{9-13}$$

$$\begin{aligned}&\left\langle\psi_{\vec{K}_1}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_2}\right\rangle=\left\langle\psi_{\vec{K}_2}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_1}\right\rangle^*\\ &=\frac{1}{L^2}\int\sum_{\vec{K}_n}U\left(\left|\vec{K}_n\right|\right)\left(1+e^{-i\vec{K}_n\cdot\overrightarrow{AB}}\right)e^{i(\vec{K}_n-\vec{b}_1-\vec{b}_2)\cdot\vec{r}}\,d\vec{r}\\ &=\int\sum_{\vec{K}_n}U\left(\left|\vec{K}_n\right|\right)\left(1+e^{-i\vec{K}_n\cdot\overrightarrow{AB}}\right)\delta\left(\vec{K}_n-\vec{b}_1-\vec{b}_2\right)d\vec{r}\\ &=\ U\left(\left|\vec{b}_1+\vec{b}_2\right|\right)e^{i\frac{\pi}{3}}=U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}}\end{aligned} \tag{9-14}$$

$$\left\langle\psi_{\vec{K}_1}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_3}\right\rangle=\left\langle\psi_{\vec{K}_3}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_1}\right\rangle^*=U\left(\left|\vec{b}_1\right|\right)e^{-i\frac{\pi}{3}}=U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{-i\frac{\pi}{3}} \tag{9-15}$$

$$\left\langle\psi_{\vec{K}_2}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_3}\right\rangle=\left\langle\psi_{\vec{K}_3}\middle|V(\vec{r})\middle|\psi_{\vec{K}_2}\right\rangle^*=U\left(\left|\vec{b}_2\right|\right)e^{i\frac{\pi}{3}}=\ U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}} \tag{9-16}$$

因此$(9-12)$式化为：

$$V(\vec{r})=\begin{pmatrix}0 & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}} & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{-i\frac{\pi}{3}}\\ U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{-i\frac{\pi}{3}} & 0 & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}}\\ U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}} & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{-i\frac{\pi}{3}} & 0\end{pmatrix} \tag{9-17}$$

其对应的本征值$E^{(1)}$：

$$\begin{vmatrix}-E^{(1)} & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}} & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{-i\frac{\pi}{3}}\\ U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{-i\frac{\pi}{3}} & -E^{(1)} & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}}\\ U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{i\frac{\pi}{3}} & U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)e^{-i\frac{\pi}{3}} & -E^{(1)}\end{vmatrix}=-\left(E^{(1)}\right)^3-2U^3+3U^2E^{(1)}$$

$$=-\left(E^{(1)}-U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)\right)^2\left(E^{(1)}+2U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)\right)=0$$

$$\Longrightarrow E^{(1)} = U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right) \text{ 或 } 2U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right) \tag{9-18}$$

其中$U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)$是二重根

因此三重能级分裂成两个能级：

一个二重简并：

$$E = \frac{8\pi^2\hbar^2}{9m} + U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right) \tag{9-19}$$

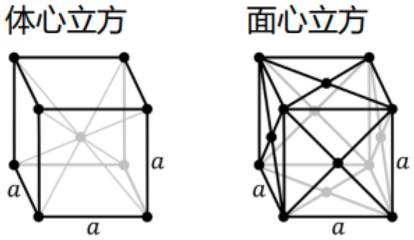
一个非简并：

$$E = \frac{8\pi^2\hbar^2}{9m} - 2\,U\left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right) \tag{9-20}$$

碎碎念：这道题感觉蛮难的，第一次做时做了好久也没做出了，做不明白。但如果发现了$\vec{K}_1, \vec{K}_2, \vec{K}_3$三点是等价的，就会好理解多了。如果只是埋头计算是不行的，如果稍微抬起头看看，是不难发现$\vec{K}_1, \vec{K}_2, \vec{K}_3$三点的能量在空晶格模型中是相等的，也就不难想到会用简并微扰论来处理它。

# 第 10 题：面心和体心立方晶格的紧束缚近似

对于面心立方和体心立方晶格，分别给出$1s$原子轨道形成的能带的能量$E_{\vec{k}}$与波矢$\vec{k}$的关系（用交叠积分$J_0$和$J_1$表示）。




解：考虑最近邻原子的紧束缚近似的公式为：

$$E_{\vec{k}} = \varepsilon - J_0 - J_1 \sum_{\text{最近邻}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_l} \tag{10-1}$$

对于体心立方晶格，每个格点有 8 个最近邻，对应的相对位移为：

$$\vec{R}_l = \pm\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right),\pm\left(-\frac{a}{2},\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right),\pm\left(\frac{a}{2},-\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right),\pm\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},-\frac{a}{2}\right) \tag{10-2}$$

因此：

$$\begin{aligned}E_{\vec{k}} = \varepsilon - J_0 - 2J_1 \bigg(&\cos\frac{k_xa+k_ya+k_za}{2} + \cos\frac{-k_xa+k_ya+k_za}{2} + \cos\frac{k_xa-k_ya+k_za}{2} \\ &+ \cos\frac{k_xa+k_ya-k_za}{2}\bigg) \\ = \ \varepsilon - J_0 - 4J_1 &\left(\cos\frac{k_xa+k_ya}{2}\cos\frac{k_za}{2} + \cos\frac{k_xa-k_ya}{2}\cos\frac{k_za}{2}\right) \\ = \ \varepsilon - J_0 - 8J_1 &\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}\cos\frac{k_za}{2}\end{aligned} \tag{10-3}$$

对于面心立方晶格，每个格点有 12 个最近邻，对应的相对位移为：

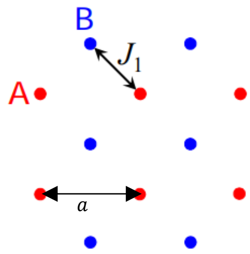
$$\begin{aligned}\vec{R}_l = &\pm\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},0\right),\pm\left(\frac{a}{2},-\frac{a}{2},0\right),\pm\left(\frac{a}{2},0,\frac{a}{2}\right), \\ &\pm\left(\frac{a}{2},0,-\frac{a}{2}\right),\pm\left(0,\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right),\pm\left(0,\frac{a}{2},-\frac{a}{2}\right)\end{aligned} \tag{10-4}$$

因此：

$$\begin{aligned}E_{\vec{k}} = \varepsilon - J_0 - 2J_1 \bigg(&\cos\frac{k_xa+k_ya}{2} + \cos\frac{k_xa-k_ya}{2} + \cos\frac{k_xa+k_za}{2} + \cos\frac{k_xa-k_za}{2} \\ &+ \cos\frac{k_ya+k_za}{2} + + \cos\frac{k_ya-k_za}{2}\bigg) \\ = \ \varepsilon - J_0 - 4J_1 &\left(\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2} + \cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_za}{2} + \cos\frac{k_ya}{2}\cos\frac{k_za}{2}\right)\end{aligned} \tag{10-5}$$

## 第 11 题：二维双原子正方晶格的紧束缚近似

下图为二维双原子正方晶格，设$A$和$B$原子$1s$原子轨道的能量分别为$\varepsilon_A$和$\varepsilon_B$，求能带的能量$E_{\pm,\vec{k}}$与波矢$\vec{k}$的关系。（只考虑最近交叠积分$J_1$和同一格点上的交叠积分$J_A(0),J_B(0)$）




解：设$A,B$孤立原子的$1s$原子轨道波函数分别为

$$\varphi_A=\varphi_A\left(\vec{r}-\vec{R}_n\right) \tag{11-1}$$

$$\varphi_B=\varphi_B\left(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB}\right) \tag{11-2}$$

则$A,B$原子$1s$轨道的布洛赫和分别为：

$$\psi_{\vec{k}}^A=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}_n}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\,\varphi_A\left(\vec{r}-\vec{R}_n\right) \tag{11-3}$$

$$\psi_{\vec{k}}^B=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}_n}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n+\overrightarrow{AB})}\,\varphi_B\left(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB}\right) \tag{11-4}$$

晶体布洛赫电子波函数应是上两式的线性叠加：

$$\psi_{\vec{k}}=a\psi_{\vec{k}}^A+b\psi_{\vec{k}}^B \tag{11-5}$$

代入薛定谔方程：

$$\hat{H}\psi_{\vec{k}}=E_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}} \tag{11-6}$$

对上式分别左乘$\psi_{\vec{k}}^A$和$\psi_{\vec{k}}^B$：

$$\begin{cases}\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^A|\psi_{\vec{k}}\rangle E_{\vec{k}}=0\\\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^B|\psi_{\vec{k}}\rangle E_{\vec{k}}=0\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle a+\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle b-\langle\psi_{\vec{k}}^A|\psi_{\vec{k}}^A\rangle E_{\vec{k}}a-\langle\psi_{\vec{k}}^A|\psi_{\vec{k}}^B\rangle E_{\vec{k}}b=0\\\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle a+\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle b-\langle\psi_{\vec{k}}^B|\psi_{\vec{k}}^A\rangle E_{\vec{k}}a-\langle\psi_{\vec{k}}^B|\psi_{\vec{k}}^B\rangle E_{\vec{k}}b=0\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\left(\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle-E_{\vec{k}}\right)a+\left(\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^A|\psi_{\vec{k}}^B\rangle E_{\vec{k}}\right)b=0\\\left(\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^B|\psi_{\vec{k}}^A\rangle E_{\vec{k}}\right)a+\left(\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle-E_{\vec{k}}\right)b=0\end{cases} \tag{11-7}$$

（$\psi_{\vec{k}}^A,\psi_{\vec{k}}^B$已经归一化）

上式有非零解的条件是：

$$\begin{vmatrix}\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle-E_{\vec{k}} & \langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^A|\psi_{\vec{k}}^B\rangle E_{\vec{k}}\\\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^B|\psi_{\vec{k}}^A\rangle E_{\vec{k}} & \langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle-E_{\vec{k}}\end{vmatrix}=0 \tag{11-8}$$

上式中：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle=\frac{1}{N}\sum_{n,n'}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n-\vec{R}_{n'})}\langle\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)|\hat{H}|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle$$

$$=\sum_{n}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\langle\varphi_A(\vec{r})|\hat{H}|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle$$

$$=\sum_{n}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\langle\varphi_A(\vec{r})|\hat{T}+\hat{V}_{all}-\hat{V}_A(\vec{r}-\vec{R}_n)+\hat{V}_A(\vec{r}-\vec{R}_n)|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle$$

$$=\sum_{n}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}[\langle\varphi_A(\vec{r})|\Delta\hat{V}_A(\vec{r}-\vec{R}_n)|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle+\langle\varphi_A(\vec{r})|\hat{T}+\hat{V}_A(\vec{r}-\vec{R}_n)|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle$$

$$=\sum_{n}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}[\langle\varphi_A(\vec{r})|\Delta\hat{V}_A(\vec{r}-\vec{R}_n)|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle+\varepsilon_A\langle\varphi_A(\vec{r})|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle]\qquad(11-9)$$

若只考虑同一格点上的交叠积分，且认为不同格点的波函数内积近似为零，则：

$$\langle\varphi_A(\vec{r})|\Delta\hat{V}_A(\vec{r}-\vec{R}_n)|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle=-J_A(0)\delta_{\vec{R}_n,0}\qquad(11-10)$$

$$\langle\varphi_A(\vec{r})|\varphi_A(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle=\delta_{\vec{R}_n,0}\qquad(11-11)$$

因此$(11-9)$式化为：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle=\varepsilon_A-J_A(0)\qquad(11-12)$$

同理：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle=\varepsilon_B-J_B(0)\qquad(11-13)$$

由于认为不同格点的波函数内积近似为零，则：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle=\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle=0\qquad(11-14)$$

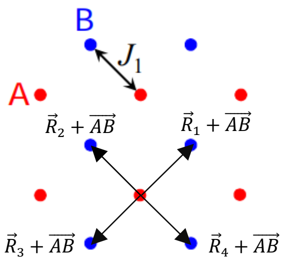
而利用$(11-9)$式的方法，同样可得：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle=\sum_{n}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n+\overrightarrow{AB})}[\langle\varphi_A(\vec{r})|\Delta\hat{V}_B(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})|\varphi_B(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})\rangle$$

$$+\varepsilon_B\langle\varphi_A(\vec{r})|\varphi_B(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})\rangle]$$

$$=\sum_{n}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n+\overrightarrow{AB})}\langle\varphi_A(\vec{r})|\Delta\hat{V}_B(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})|\varphi_B(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})\rangle\qquad(11-15)$$

若只考虑最近邻交叠积分$J_1$，则上式中能取的$\vec{R}_n$只有 4 个：




$$\vec{R}_1+\overrightarrow{AB}=\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right);\vec{R}_2+\overrightarrow{AB}=\left(-\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right)$$

$$\vec{R}_3+\overrightarrow{AB}=\left(-\frac{a}{2},-\frac{a}{2}\right);\vec{R}_4+\overrightarrow{AB}=\left(\frac{a}{2},-\frac{a}{2}\right)$$

因此$(11-14)$可化为：

$$\begin{aligned}\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle &= -2J_1\left(\cos\frac{k_xa+k_ya}{2}+\cos\frac{k_xa-k_ya}{2}\right)\\ &= -4J_1\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}\end{aligned} \tag{11-16}$$

同理可得：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle = -4J_1\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2} \tag{11-17}$$

将$(11-12)(11-13)(11-14)(11-16)(11-17)$代入$(11-8)$中得：

$$\begin{vmatrix}\varepsilon_A-J_A(0)-E_{\vec{k}} & -4J_1\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}\\ -4J_1\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2} & \varepsilon_B-J_B(0)-E_{\vec{k}}\end{vmatrix}=0 \tag{11-18}$$

设：

$$E_A=\varepsilon_A-J_A(0) \tag{11-19}$$

$$E_B=\varepsilon_B-J_B(0) \tag{11-20}$$

可得：

$$\begin{vmatrix}E_A-E_{\vec{k}} & -4J_1\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}\\ -4J_1\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2} & E_B-E_{\vec{k}}\end{vmatrix}=0$$

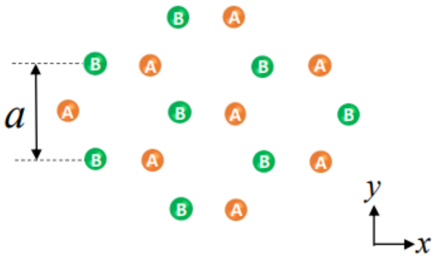
$$\Longrightarrow E_{\vec{k}}^2-(E_A+E_B)E_{\vec{k}}+E_AE_B+16J_1^2\cos^2\frac{k_xa}{2}\cos^2\frac{k_ya}{2}=0$$

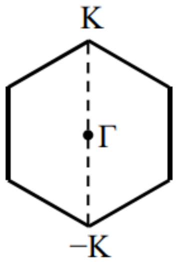
$$\Longrightarrow E_{\pm,\vec{k}}=\frac{E_A+E_B}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{E_A-E_B}{2}\right)^2+16J_1^2\cos^2\frac{k_xa}{2}\cos^2\frac{k_ya}{2}} \tag{11-21}$$

这道题还行吧，中规中矩，不算太难，如果首先紧束缚近似的思想和方法的话，思路还是笔记清晰的。关键是要把$(11-8)$式推出了，并且计算出每一个矩阵元的具体表达式。

## 第 12 题：二维石墨烯晶格的紧束缚近似

左下图为二维石墨烯晶格，不等价的两种碳原子分别用$A$和$B$指代。右下图为其布里渊区，其中两个顶点为$K$和$-K$。




石墨烯中参与导电的电子能带由所有碳原子的$2p_z$轨道组成，该轨道在$xy$平面内具有和$s$轨道类似的各向同性，其能量为$\varepsilon$。在紧束缚近似下，只考虑同一格点上的$-J_0$和最近邻格点间的$-J_1$轨道交叠积分，写成碳原子$2p_z$轨道组成的能带的能量色散关系，并画出$-K$到$\Gamma$到$K$连线的能带曲线图。

解：$A, B$原子的$2p_z$轨道的布洛赫和分别为：

$$\psi_{\vec{k}}^{A}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}_n}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\varphi\left(\vec{r}-\vec{R}_n\right) \tag{12-1}$$

$$\psi_{\vec{k}}^{B}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}_n}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n+\overrightarrow{AB})}\varphi\left(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB}\right) \tag{12-2}$$

晶体的布洛赫电子的波函数应该是上式的线性叠加：

$$\psi_{\vec{k}}=a\psi_{\vec{k}}^{A}+b\psi_{\vec{k}}^{B} \tag{12-3}$$

代入薛定谔方程：

$$\hat{H}\psi_{\vec{k}}=E_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}} \tag{12-6}$$

对上式分别左乘$\psi_{\vec{k}}^{A}$和$\psi_{\vec{k}}^{B}$：

$$\begin{cases}\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\psi_{\vec{k}}\rangle E_{\vec{k}}=0\\ \langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\psi_{\vec{k}}\rangle E_{\vec{k}}=0\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\left(\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle-E_{\vec{k}}\right)a+\left(\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle E_{\vec{k}}\right)b=0\\ \left(\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle E_{\vec{k}}\right)a+\left(\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle-E_{\vec{k}}\right)b=0\end{cases} \tag{12-7}$$

上式有非零解的条件为：

$$\begin{vmatrix}\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle-E_{\vec{k}} & \langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle E_{\vec{k}}\\ \langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle-\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle E_{\vec{k}} & \langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle-E_{\vec{k}}\end{vmatrix}=0 \tag{12-8}$$

其中：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^{A}|\psi_{\vec{k}}^{B}\rangle=\langle\psi_{\vec{k}}^{B}|\psi_{\vec{k}}^{A}\rangle=0 \tag{12-9}$$

而：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle = \frac{1}{N}\sum_{n,n'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n-\vec{R}_{n'})}\langle\varphi(\vec{r}-\vec{R}_{n'})|\hat{H}|\varphi(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle$$

$$= \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}[\langle\varphi(\vec{r})|\Delta\hat{V}(r-\vec{R}_n)|\varphi(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle + \langle\varphi(\vec{r})|\hat{V}(r-\vec{R}_n)|\varphi(\vec{r}-\vec{R}_n)\rangle]$$

$$= \varepsilon - J_0 \tag{12-10}$$

同理：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle = \varepsilon - J_0 \tag{12-11}$$

再看：

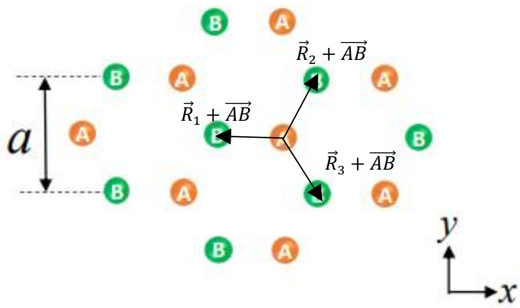
$$\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle = \frac{1}{N}\sum_{n,n'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n-\vec{R}_{n'}+\overrightarrow{AB})}\langle\varphi(\vec{r}-\vec{R}_{n'})|\hat{H}|\varphi(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})\rangle$$

$$= \sum_n e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n+\overrightarrow{AB})}[\langle\varphi(\vec{r})|\Delta\hat{V}(r-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})|\varphi(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})\rangle$$

$$+ \langle\varphi(\vec{r})|\hat{V}(r-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})|\varphi(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})\rangle]$$

$$= \sum_n e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n+\overrightarrow{AB})}\langle\varphi(\vec{r})|\Delta\hat{V}(r-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})|\varphi(\vec{r}-\vec{R}_n-\overrightarrow{AB})\rangle \tag{12-12}$$

若只考虑最近邻格点间的交叠积分，那么上式有效果的只有 3 个$\vec{R}_n$，如下：




$$\vec{R}_1+\overrightarrow{AB} = -\frac{a}{\sqrt{3}}\vec{e}_x \tag{12-13}$$

$$\vec{R}_2+\overrightarrow{AB} = \frac{a}{2\sqrt{3}}\vec{e}_x + \frac{a}{2}\vec{e}_y \tag{12-14}$$

$$\vec{R}_3+\overrightarrow{AB} = \frac{a}{2\sqrt{3}}\vec{e}_x - \frac{a}{2}\vec{e}_y \tag{12-15}$$

因此：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^A|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^B\rangle = -J_1\left[e^{i\frac{1}{\sqrt{3}}k_x a} + e^{i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x+k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x-k_y\right)\frac{a}{2}}\right] \tag{12-16}$$

由于$\hat{H}$是厄密算符，因此：

$$\langle\psi_{\vec{k}}^B|\hat{H}|\psi_{\vec{k}}^A\rangle = -J_1\left[e^{-i\frac{1}{\sqrt{3}}k_x a} + e^{-i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x+k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{-i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x-k_y\right)\frac{a}{2}}\right] \tag{12-17}$$

将(12−9)(12−10)(12−11)(12−16)(12−17)带入(12−8)得：

$$\begin{vmatrix} \varepsilon - J_0 - E_{\vec{k}} & -J_1\left[e^{i\frac{1}{\sqrt{3}}k_x a} + e^{i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x+k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x-k_y\right)\frac{a}{2}}\right] \\ -J_1\left[e^{-i\frac{1}{\sqrt{3}}k_x a} + e^{-i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x+k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{-i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x-k_y\right)\frac{a}{2}}\right] & \varepsilon - J_0 - E_{\vec{k}} \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow (\varepsilon - J_0 - E_{\vec{k}})^2 - J_1^2\left(3 + e^{i\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}k_x + k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{-i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x + k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x - k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{-ik_y} + e^{i\left(\frac{1}{\sqrt{3}}k_x + k_y\right)\frac{a}{2}} + e^{ik_y a}\right) = 0$$

$$\Rightarrow (\varepsilon - J_0 - E_{\vec{k}})^2 - J_1^2\left[3 + 2\cos\left(\frac{k_x a}{2\sqrt{3}} - \frac{k_y a}{2}\right) + 2\cos\left(\frac{k_x a}{2\sqrt{3}} + \frac{k_y a}{2}\right) + 2\cos(k_y a)\right] = 0$$

$$\Rightarrow E_{\pm,\vec{k}} = \varepsilon - J_0 \pm J_1\sqrt{3 + 2\cos\left(\frac{k_x a}{2\sqrt{3}} - \frac{k_y a}{2}\right) + 2\cos\left(\frac{k_x a}{2\sqrt{3}} + \frac{k_y a}{2}\right) + 2\cos(k_y a)} \quad (12-18)$$

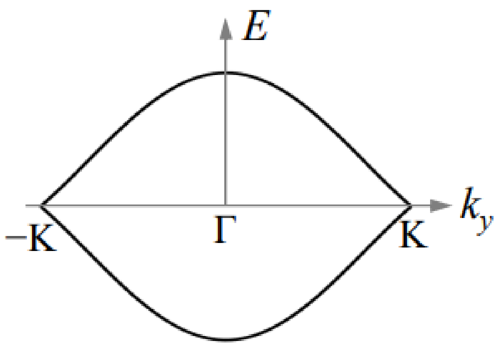
从$-K$到$\Gamma$到$K$连线上：

$$k_x = 0\,; k_y \in \frac{4\pi}{3a}[-1,1] \quad (12-19)$$

因此：

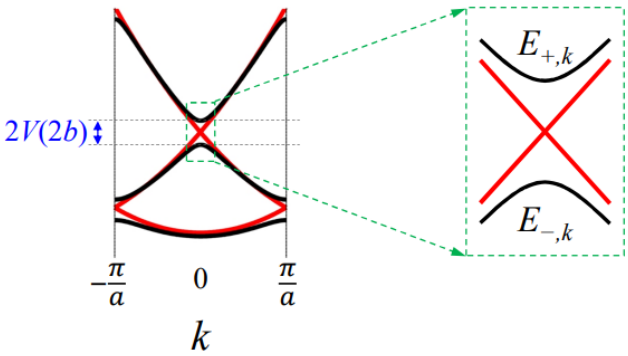
$$\begin{aligned} E_{\pm,\vec{k}} &= \varepsilon - J_0 \pm J_1\sqrt{3 + 4\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 2\cos(k_y a)} \\ &= \varepsilon - J_0 \pm J_1\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \\ &= \varepsilon - J_0 \pm J_1\left|1 + 2\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right)\right| \end{aligned} \quad (12-20)$$

绘制出图来如下：



# 第 13 题：求能带某处的有效质量

考虑一维近自由电子近似（弱周期势场近似），求第二、第三能带在$k = 0$处的有效质量。




解：用简约波矢$\tilde{k}$描述自由电子：

$$\psi_k = \psi_{n,\tilde{k}} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} e^{i\frac{2\pi m}{a}x} \tag{13-1}$$

$$E_k = E_{n,\tilde{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\tilde{k} + \frac{2\pi m}{a}\right)^2 \tag{13-2}$$

其中非简约波矢：

$$k = \tilde{k} + \frac{2\pi m}{a} \tag{13-3}$$

在能带 2 的$\tilde{k} = 0$处，$m = 1$，它的自由电子波函数和能量为：

$$\psi_{2,0}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\left(\tilde{k}+\frac{2\pi}{a}\right)x} \tag{13-4}$$

$$E_{2,0}^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\tilde{k} + \frac{2\pi}{a}\right)^2 \tag{13-5}$$

在能带 3 的$\tilde{k} = 0$处，$m = -1$，它的自由电子波函数和能量为：：

$$\psi_{3,0}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\left(\tilde{k}-\frac{2\pi}{a}\right)x} \tag{13-6}$$

$$E_{3,0}^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\tilde{k} - \frac{2\pi}{a}\right)^2 \tag{13-7}$$

若是在空晶格模型中，它俩是一对简并态。若有周期性势场的影响，导致他俩的简并打开，那简并打开后的在第二、第三能带$\tilde{k} = 0$处的波函数应该是$(13-4)(13-5)$的线性组合：

$$\psi = A\psi_{2,0}^{(0)} + B\psi_{3,0}^{(0)} \tag{13-8}$$

那么我们想要求出在第二、第三能带$\tilde{k} = 0$处的$E \sim \tilde{k}$关系，只要在$\psi_{2,0}^{(0)}$和$\psi_{3,0}^{(0)}$张成的子空间中，求出哈密顿量的本征值即可。哈密顿量$\hat{H}$在$\psi_{2,0}^{(0)}$和$\psi_{3,0}^{(0)}$张成的子空间中的矩阵表示为：

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{H}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{H}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle\\ \left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{H}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{H}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{T}+\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{T}+\hat{V}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle\\ \left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{T}+\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{T}+V\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}E_{2,0}^{(0)}+\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle & E_{2,0}^{(0)}\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle+\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle\\ E_{3,0}^{(0)}\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle+\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle & E_{3,0}^{(0)}+\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle\end{pmatrix}\quad(13-9)$$

由于$\psi_{2,0}^{(0)}$和$\psi_{3,0}^{(0)}$正交,因此：

$$\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle=\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle=0\quad(13-10)$$

我们由势场$V(x)$作傅里叶展开：

$$\hat{V}=V(x)=\sum_n V_n e^{i\frac{2\pi n}{a}x}\quad(13-11)$$

因此：

$$\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle=\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle=\frac{1}{L}\int\sum_n V_n e^{i\frac{2\pi n}{a}x}\,dx=V_0\quad(13-12)$$

$$\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle=\frac{1}{L}\int\sum_n V_n e^{i\frac{2\pi n}{a}x}e^{-i\frac{4\pi}{a}x}\,dx=V_2\quad(13-13)$$

$$\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle=\frac{1}{L}\int\sum_n V_n e^{i\frac{2\pi n}{a}x}e^{i\frac{4\pi}{a}x}\,dx=V_{-2}\quad(13-14)$$

一般认为势场的平均值为零，且势场对称所以：

$$\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle=\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle=V_0=0\quad(13-15)$$

$$\left\langle\psi_{3,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{2,0}^{(0)}\right\rangle=\left\langle\psi_{2,0}^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_{3,0}^{(0)}\right\rangle=V_{-2}=V_2\quad(13-16)$$

将$(13-10)(13-15)(13-16)$代入$(13-9)$得：

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}E_{2,0}^{(0)} & V_2\\ V_2 & E_{3,0}^{(0)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\tilde{k}+\frac{2\pi}{a}\right)^2 & V_2\\ V_2 & \frac{\hbar^2}{2m}\left(\tilde{k}-\frac{2\pi}{a}\right)^2\end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\tilde{k}^2+\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\right]+\begin{pmatrix}\frac{2\pi\hbar^2\tilde{k}}{ma} & V_2\\ V_2 & -\frac{2\pi\hbar^2\tilde{k}}{ma}\end{pmatrix}\quad(13-17)$$

求$\hat{H}$矩阵的本征值，代入久期方程：

$$\begin{vmatrix}\frac{2\pi\hbar^2\tilde{k}}{ma}-\lambda & V_2\\ V_2 & -\frac{2\pi\hbar^2\tilde{k}}{ma}-\lambda\end{vmatrix}=0$$

$$\Rightarrow-\left(\frac{2\pi\hbar^2\tilde{k}}{ma}\right)^2+\lambda^2-|V_2|^2=0$$

$$\Rightarrow \lambda_{\pm} = \pm\sqrt{|V_2|^2 + \frac{4\pi^2\hbar^4}{m^2a^2}\tilde{k}} \qquad (13-18)$$

因此哈密顿矩阵的本征值为：

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\tilde{k}^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\right] \pm \sqrt{|V_2|^2 + \frac{4\pi^2\hbar^4}{m^2a^2}\tilde{k}^2} \qquad (13-19)$$

上式就是在第二、第三能带$\tilde{k} = 0$处（或附近）的$E\sim\tilde{k}$关系，用它我们就可以求有效质量了。但为了简化，由于$\tilde{k} \approx 0$，因此：

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar^2\tilde{k}^2}{2m} \pm \sqrt{|V_2|^2 + \frac{4\pi^2\hbar^4}{m^2a^2}\tilde{k}^2} \\ &\approx \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar^2\tilde{k}^2}{2m} \pm |V_2|\left(1 + \frac{2\pi^2\hbar^4}{m^2a^2|V_2|^2}\tilde{k}^2\right) \end{aligned} \qquad (13-20)$$

因此，第二、第三能带$\tilde{k} = 0$处的有效质量为：

$$\begin{aligned} m_{\pm}^{*} &= \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E_{\pm}}{d\tilde{k}^2}\right)^{-1} = \left[\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{m} \pm \frac{4\pi^2\hbar^4}{m^2a^2|V_2|^2}\right)\right]^{-1} \\ &= \left(\frac{ma^2|V_2|^2 \pm 4\pi^2\hbar^2}{m^2a^2|V_2|^2}\right)^{-1} = \frac{m^2a^2|V_2|^2}{ma^2|V_2|^2 \pm 4\pi^2\hbar^2} \end{aligned} \qquad (13-21)$$

碎碎念：这道题我个人觉得蛮难的。难在这题是要求有效质量，所以关键是要把$E\sim k$关系求出来。不同于之前的那几道，这不是用微扰法求出具体某一个点的能量修正值，而是要求出某一点的$E\sim k$关系。

# 第 14 题：求有效质量张量

二维空间中电子的色散关系为$E_{\vec{k}} = \alpha\left(k_x^2 + k_x k_y + \frac{1}{2}k_y^2\right)$，旋转合适$xy$坐标方向，写成$\vec{k} = 0$附近对角化的有效质量张量。

解：有效质量张量为：

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} \\ \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_y} \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} 2\alpha & \alpha \\ \alpha & \alpha \end{pmatrix} \tag{14-1}$$

由线性代数知识，想要旋转合适$xy$坐标方向，将上述的有效质量矩阵对角化，也就是要找到上述矩阵的相似对角化。也就是求它的特征值，它的特征值就是它对角化的矩阵元。该矩阵的久期方程为：

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - \lambda & \alpha \\ \alpha & \alpha - \lambda \end{vmatrix} = \alpha^2 - 3\alpha\lambda + \lambda^2 = 0 \tag{14-2}$$

解得：

$$\lambda = \frac{(3 \pm \sqrt{5})\alpha}{2}$$

因此对角化的有效质量张量为：

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \dfrac{(3+\sqrt{5})\alpha}{2} & 0 \\ 0 & \dfrac{(3-\sqrt{5})\alpha}{2} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow m^* = \hbar^2\begin{pmatrix} \dfrac{2}{(3+\sqrt{5})\alpha} & 0 \\ 0 & \dfrac{2}{(3-\sqrt{5})\alpha} \end{pmatrix} \tag{14-3}$$

碎碎念：要复习复习线性代数和量子力学的表象理论了。。。

# 第 15 题：格波运动方程过渡到连续介质波动方程

从晶体中格波连续介质中弹性波的过渡。证明：在长波近似极限下，格波运动方程：

$$\frac{d^2u_n}{dt^2}=-\frac{\beta}{m}(2u_n-u_{n-1}-u_{n+1})$$

与连续介质的波动方程$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\frac{E}{\rho}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$等价。其中$E=\beta a$为弹性模量，$\rho$为质量密度。并给出连续介质波动方程的解。

证明：该格波运动方程的解可写为：

$$u_n=Ae^{i(qna-\omega t)} \tag{15-1}$$

在长波近似下，$q\to 0$，因此对于$u_{n+1}$和$u_{n-1}$都可以在$kna$的位置作泰勒展开：

$$u_{n+1}\approx u_n+\frac{\partial u_n}{\partial(qna)}ka+\frac{\partial^2 u_n}{\partial(qna)^2}(ka)^2=u_n+\frac{\partial u_n}{\partial na}a+\frac{\partial^2 u_n}{\partial(na)^2}a^2 \tag{15-2}$$

$$u_{n-1}\approx u_n-\frac{\partial u_n}{\partial(qna)}ka+\frac{\partial^2 u_n}{\partial(qna)^2}(-kna)^2=u_n-\frac{\partial u_n}{\partial na}a+\frac{\partial^2 u_n}{\partial(na)^2}(-a)^2 \tag{15-3}$$

将$(15-2)(15-3)$代入该格波方程得：

$$\frac{d^2u_n}{dt^2}=\frac{\beta}{m}\frac{\partial^2 u_n}{\partial(na)^2}a^2 \tag{15-4}$$

令：

$$x=na\,;u_n=u(x)=u \tag{15-5}$$

可得：

$$\frac{d^2u}{dt^2}=\frac{\beta a^2}{m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{15-6}$$

其中：

$$\text{弹性模量：}E=\beta a \tag{15-7}$$

$$\text{质量密度：}\rho=\frac{m}{a} \tag{15-8}$$

因此最终可以过渡到连续介质的波动方程：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\frac{E}{\rho}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{15-9}$$

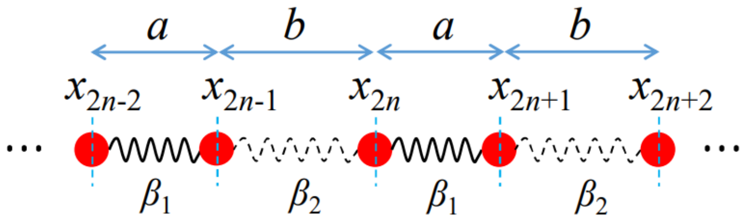
其通解可写成：

$$u=\sum_q A_q e^{i(qx-\omega_q t)}$$

证毕。

## 第 16 题：求一维双弹性系数原子链的色散关系

如下的一维原子链，各个原子具有相同的质量$m$，然而最近邻原子间相互作用力的弹性系数交替等于$\beta_1$和$\beta_2$，同时最近邻原子间距交替等于$a$和$b$，求晶格振动格波的色散关系。




解：格波的运动方程如下：

$$\frac{d^2u_{2n}}{dt^2}=\frac{\beta_1}{m}(u_{2n+1}-u_{2n})-\frac{\beta_2}{m}(u_{2n}-u_{2n-1}) \tag{16-1}$$

$$\frac{d^2u_{2n+1}}{dt^2}=\frac{\beta_2}{m}(u_{2n+2}-u_{2n+1})-\frac{\beta_1}{m}(u_{2n+1}-u_{2n}) \tag{16-2}$$

猜测它们有以下形成的特解：

$$u_{2n}=A_q e^{i[q(a+b)n-\omega_q t]} \tag{16-3}$$

$$u_{2n+1}=B_q e^{i[q(a+b)n+qb-\omega_q t]} \tag{16-4}$$

将$(16-3)(16-4)$代入$(16-1)(16-2)$得：

$$\begin{cases}-\omega_q^2 A_q=\dfrac{\beta_1}{m}\left(B_q e^{iqb}-A_q\right)-\dfrac{\beta_2}{m}\left(A_q-B_q e^{-iqa}\right)\\ -\omega_q^2 B_q=\dfrac{\beta_2}{m}\left(A_q e^{iqa}-B_q\right)-\dfrac{\beta_1}{m}\left(B_q-A_q e^{-iqb}\right)\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\left(\omega_q^2-\dfrac{\beta_1+\beta_2}{m}\right)A_q+\left(\dfrac{\beta_1}{m}e^{iqb}+\dfrac{\beta_2}{m}e^{-iqa}\right)B_q=0\\ \left(\dfrac{\beta_2}{m}e^{iqa}+\dfrac{\beta_1}{m}e^{-iqb}\right)A_q+\left(\omega_q^2-\dfrac{\beta_1+\beta_2}{m}\right)B_q=0\end{cases} \tag{16-5}$$

上述有非零解的条件为

$$\begin{vmatrix}\omega_q^2-\dfrac{\beta_1+\beta_2}{m} & \dfrac{\beta_1}{m}e^{iqb}+\dfrac{\beta_2}{m}e^{-iqa}\\ \dfrac{\beta_2}{m}e^{iqa}+\dfrac{\beta_1}{m}e^{-iqb} & \omega_q^2-\dfrac{\beta_1+\beta_2}{m}\end{vmatrix}=0 \tag{16-6}$$

上式解得：

$$\left(\omega_q^2-\frac{\beta_1+\beta_2}{m}\right)^2-\left[\frac{\beta_1\beta_2}{m^2}e^{iq(a+b)}+\frac{\beta_1\beta_2}{m^2}e^{-iq(a+b)}+\frac{\beta_1^2+\beta_2^2}{m}\right]=0$$

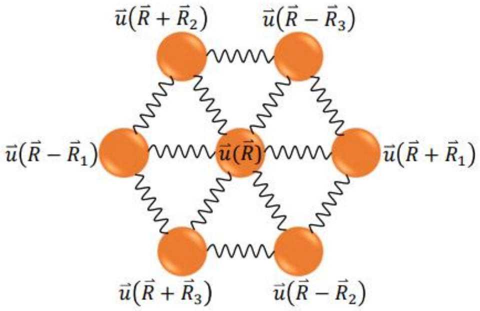
$$\Rightarrow\left(\omega_q^2-\frac{\beta_1+\beta_2}{m}\right)^2-\left[\frac{2\beta_1\beta_2}{m^2}\cos[q(a+b)]+\frac{\beta_1^2+\beta_2^2}{m}\right]=0$$

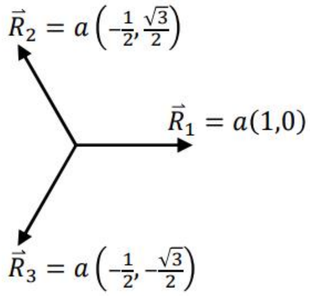
$$\Rightarrow\omega_q^2=\frac{\beta_2+\beta_1}{m}\pm\sqrt{\frac{2\beta_1\beta_2}{m^2}\cos[q(a+b)]+\frac{\beta_1^2+\beta_2^2}{m}} \tag{16-7}$$

上式就是该格波的两支色散关系。

## 第 17 题：求二维简单六角晶格的色散关系与声速

下图为二维简单六角晶格，原子质量为$m$，最近邻原子间的弹簧弹性系数为$\beta$，晶格常数为$a$。(1) 只考虑最近邻原子间相互作用，求格波色散关系。(2) 求长波极限下纵波(LA)支和横波(TA)支的声速。




解：(1) 该格波的运动方程为：

$$\begin{aligned}\frac{d^2\vec{u}(\vec{R})}{dt^2} &= \frac{\beta}{m}\left[\left(\vec{u}(\vec{R}-\vec{R}_3)-\vec{u}(\vec{R})\right)\cdot\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\right]\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}+\frac{\beta}{m}\left[\left(\vec{u}(\vec{R}+\vec{R}_3)-\vec{u}(\vec{R})\right)\cdot\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\right]\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\\ &+\frac{\beta}{m}\left[\left(\vec{u}(\vec{R}-\vec{R}_2)-\vec{u}(\vec{R})\right)\cdot\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\right]\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}+\frac{\beta}{m}\left[\left(\vec{u}(\vec{R}+\vec{R}_2)-\vec{u}(\vec{R})\right)\cdot\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\right]\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\\ &+\frac{\beta}{m}\left[\left(\vec{u}(\vec{R}-\vec{R}_1)-\vec{u}(\vec{R})\right)\cdot\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\right]\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}+\frac{\beta}{m}\left[\left(\vec{u}(\vec{R}+\vec{R}_1)-\vec{u}(\vec{R})\right)\cdot\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\right]\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\end{aligned} \tag{17-1}$$

设有特解：

$$\vec{u}(\vec{R}) = \vec{A}e^{i(\vec{q}\cdot\vec{R}-\omega t)} \tag{17-2}$$

将$(17-2)$代入$(17-1)$得：

$$\begin{aligned}-\omega^2\vec{A} &= \frac{\beta}{m}\left[\left(e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_3}-1\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\right]\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}+\frac{\beta}{m}\left[\left(e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_3}-1\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\right]\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\\ &+\frac{\beta}{m}\left[\left(e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_2}-1\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\right]\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}+\frac{\beta}{m}\left[\left(e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_2}-1\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\right]\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\\ &+\frac{\beta}{m}\left[\left(e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_1}-1\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\right]\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}+\frac{\beta}{m}\left[\left(e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_1}-1\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\right]\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow -\frac{m\omega^2\vec{A}}{\beta} &= \left[\left(e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_3}+e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_3}-2\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\right]\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}+\left[\left(e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_2}+e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_2}-2\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\right]\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\\ &+\left[\left(e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_1}+e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_1}-2\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\right]\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\end{aligned}$$

$$\Rightarrow -\frac{m\omega^2\vec{A}}{2\beta}=\left[(\cos\vec{q}\cdot\vec{R}_3-1)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\right]\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}+\left[(\cos\vec{q}\cdot\vec{R}_2-1)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\right]\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}$$

$$+\left[(\cos\vec{q}\cdot\vec{R}_1-1)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\right]\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}$$

$$\Rightarrow \frac{m\omega^2\vec{A}}{4\beta}=\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}\right]\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}+\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}\right]\frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}$$

$$+\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)\vec{A}\cdot\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}\right]\frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}$$

$$(17-3)$$

由于：

$$\frac{\vec{R}_3}{|\vec{R}_3|}=\left(-\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\ ;\ \frac{\vec{R}_2}{|\vec{R}_2|}=\left(-\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\ ;\ \frac{\vec{R}_1}{|\vec{R}_1|}=(1,0)\qquad(17-4)$$

因此：

$$\frac{m\omega^2\vec{A}}{4\beta}=\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)\left(\frac{1}{2}A_x+\frac{\sqrt{3}}{2}A_y\right)\left(\frac{1}{2}\vec{e}_x+\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_y\right)$$
$$+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\left(\frac{1}{2}A_x-\frac{\sqrt{3}}{2}A_y\right)\left(\frac{1}{2}\vec{e}_x-\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_y\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)A_x\vec{e}_x$$

$$(17-5)$$

将上式分为$x,y$两个方向上写出来：

$$\begin{cases}\dfrac{m\omega^2A_x}{4\beta}=\sin^2\left(\dfrac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)\left(\dfrac{1}{4}A_x+\dfrac{\sqrt{3}}{4}A_y\right)+\sin^2\left(\dfrac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\left(\dfrac{1}{4}A_x-\dfrac{\sqrt{3}}{4}A_y\right)+\sin^2\left(\dfrac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)A_x\\ \dfrac{m\omega^2A_y}{4\beta}=\sin^2\left(\dfrac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)\left(\dfrac{\sqrt{3}}{4}A_x+\dfrac{3}{4}A_y\right)+\sin^2\left(\dfrac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\left(-\dfrac{\sqrt{3}}{4}A_x+\dfrac{3}{4}A_y\right)\end{cases}$$

$$\Rightarrow$$

$$\begin{cases}\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)+4\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)-\frac{m\omega^2}{\beta}\right]A_x+\sqrt{3}\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]A_y=0\\ \sqrt{3}\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]A_x+3\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]A_y=0\end{cases}$$

$$(17-6)$$

上式有非零解的条件为：

$$\begin{vmatrix}\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)+4\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)-\frac{m\omega^2}{\beta} & \sqrt{3}\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]\\ \sqrt{3}\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right] & 3\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]-\frac{m\omega^2}{\beta}\end{vmatrix}=0$$

$$(17-7)$$

设：

$$\begin{cases} \sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)=C_1 \\ 4\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)=C_2 \\ \sqrt{3}\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]=C_3 \end{cases} \tag{17-8}$$

可将$(17-7)$式化为：

$$\left(C_1+C_2-\frac{m\omega^2}{\beta}\right)\left(3C_1-\frac{m\omega^2}{\beta}\right)-C_3^2=0$$

$$\Longrightarrow \frac{m\omega_\pm^2}{\beta}=\frac{4C_1+C_2\pm\sqrt{(2C_1-C_2)^2+4C_3^2}}{2}$$

$$\Longrightarrow \frac{m\omega_\pm^2}{\beta}=2\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)\right]$$

$$\pm\frac{1}{2}\sqrt{\left[2\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+2\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)-4\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)\right]^2+12\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]^2}$$

$$\Longrightarrow \omega_\pm^2=\frac{2\beta}{m}\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)\right]$$

$$\pm\frac{\beta}{m}\sqrt{\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)-2\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)\right]^2+3\left[\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\right]^2} \tag{17-9}$$

上式就是该晶格的两支色散关系。

（2）长波近似下，$\vec{q}\to 0$，可作以下近似：

$$\sin\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}\right)\approx\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_3}{2}=-\frac{q_x}{4}-\frac{\sqrt{3}q_y}{4} \tag{17-10}$$

$$\sin\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}\right)\approx\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_2}{2}=-\frac{q_x}{4}+\frac{\sqrt{3}q_y}{4} \tag{17-11}$$

$$\sin\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}\right)\approx\frac{\vec{q}\cdot\vec{R}_1}{2}=\frac{q_x}{2} \tag{17-12}$$

因此色散关系近似为：

$$\omega_\pm^2\approx\frac{2\beta}{m}\left[\left(-\frac{q_x}{4}-\frac{\sqrt{3}q_y}{4}\right)^2+\left(-\frac{q_x}{4}+\frac{\sqrt{3}q_y}{4}\right)^2+\left(\frac{q_x}{2}\right)^2\right]$$

$$\pm\frac{\beta}{m}\sqrt{\left[\left(-\frac{q_x}{4}-\frac{\sqrt{3}q_y}{4}\right)^2+\left(-\frac{q_x}{4}+\frac{\sqrt{3}q_y}{4}\right)^2-2\left(\frac{q_x}{2}\right)^2\right]^2+3\left[\left(-\frac{q_x}{4}-\frac{\sqrt{3}q_y}{4}\right)^2-\left(-\frac{q_x}{4}+\frac{\sqrt{3}q_y}{4}\right)^2\right]^2}$$

$$=\frac{2\beta}{m}\left(\frac{3q_x^2}{8}+\frac{3q_y^2}{8}\right)\pm\frac{\beta}{m}\sqrt{\left(-\frac{3q_x^2}{8}+\frac{3q_y^2}{8}\right)^2+\left(\frac{3\sqrt{3}q_xq_y}{4}\right)^2}=\frac{3\beta}{4m}q^2\pm\frac{3\beta}{8m}q^2$$

$$\Longrightarrow\omega_\pm^2\approx\frac{3\beta}{4m}q^2\pm\frac{3\beta}{8m}q^2\qquad(17-13)$$

而$(17-6)$的振幅方程近似为：

$$\begin{cases}\left[\frac{9q_x^2}{8}+\frac{3q_y^2}{8}-\left(\frac{3}{4}q^2\pm\frac{3}{8}q^2\right)\right]A_x+\frac{3q_xq_y}{4}A_y=0\\ \frac{3q_xq_y}{4}A_x+\left[3\left(\frac{q_x^2}{8}+\frac{3q_y^2}{8}\right)-\left(\frac{3}{4}q^2\pm\frac{3}{8}q^2\right)\right]A_y=0\end{cases}\qquad(17-14)$$

对于$\omega_+=\sqrt{\frac{9\beta}{8m}}q$支，上式化为：

$$\begin{cases}-\frac{3q_y^2}{4}A_x+\frac{3q_xq_y}{4}A_y=0\\ \frac{3q_xq_y}{4}A_x-\frac{3q_x^2}{4}A_y=0\end{cases}\Longrightarrow\frac{A_x}{A_y}=\frac{q_x}{q_y}\qquad(17-15)$$

因此$\omega_+$支有关系$\frac{A_x}{A_y}=\frac{q_x}{q_y}$，即振动方向与传播方向平行，为纵波，$LA$支，声速为$\sqrt{\frac{9\beta}{8m}}$。

对于$\omega_-=\sqrt{\frac{3\beta}{8m}}q$支，上式化为：

$$\begin{cases}\frac{3q_x^2}{4}A_x+\frac{3q_xq_y}{4}A_y=0\\ \frac{3q_xq_y}{4}A_x+\frac{3q_y^2}{4}A_y=0\end{cases}\Longrightarrow\frac{A_x}{A_y}=-\frac{q_y}{q_x}$$

因此$\omega_-$支有关系$\frac{A_x}{A_y}=-\frac{q_y}{q_x}$，即振动方向与传播方向垂直，为横波，$TA$支，声速为$\sqrt{\frac{3\beta}{8m}}$。

碎碎念：太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)太难算啦！太难算啦！(;´༎ຶД༎ຶ`)

## 第 18 题：产生和湮灭算符

（1）写出一维谐振子的哈密顿量，以及它的湮灭算符和产生算符。

（2）利用一维单原子链的哈密顿量：

$$\hat{H}=\sum_n\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial u_n^2}+\frac{1}{2}\beta(u_n-u_{n+1})^2\right)$$

写出它的湮灭算符和产生算符。

（3）一维单原子链的非简谐势具有以下形式：

$$\hat{H}_1=\gamma\sum_n(u_n-u_{n+1})^3$$

将上面的非简谐势写成声子的产生和湮灭算符形式。

解：（1）一维谐振子的哈密顿量为：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\beta x^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{18-1}$$

利用坐标和动量算符的对易关系：

$$[\hat{x},\hat{p}]=\left[x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]=i\hbar \tag{18-2}$$

可以将哈密顿量写为：

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\hbar\omega\left(\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}+\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$ 使得括号里无量纲化

$$=\hbar\omega\left[\left(\sqrt{\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right)\left(\sqrt{\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right)-i\left(-\sqrt{\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}+\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\sqrt{\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}}\right)\right]$$

$$=\hbar\omega\left[\left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right)\left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right)-\frac{i}{2\hbar}(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})\right]$$

$$=\hbar\omega\left[\left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right)\left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right)+\frac{1}{2}\right] \tag{18-3}$$

定义产生和湮灭算符：

$$\hat{a}_+=\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} \tag{18-4}$$

$$\hat{a}_-=\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} \tag{18-5}$$

且可以验证产生和湮灭算符满足以下对易关系（一定要满足）：

$$[\hat{a}_-,\hat{a}_+]=1 \tag{18-6}$$

哈密顿量可写为产生和湮灭算符的形式：

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_-+\frac{1}{2}\right) \tag{18-7}$$

（2）一维单原子链的哈密顿量为：

$$\hat{H}=\sum_n\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial u_n^2}+\frac{1}{2}\beta(u_n-u_{n+1})^2\right) \tag{18-8}$$

周期边界条件下，简正坐标是位移的傅里叶展开级数$Q_q$。$u_n$的傅里叶展开写出：

$$u_n=\frac{1}{\sqrt{Nm}}\sum_q Q_q e^{iqna} \tag{18-9}$$

将(19 − 9)式代入哈密顿量的势能项得：

$$\begin{aligned}\frac{\beta}{2}\sum_n(u_n-u_{n+1})^2&=\frac{\beta}{2mN}\sum_n\left(\sum_q\left(Q_q e^{iqna}-Q_q e^{iq(n+1)a}\right)\right)^2\\&=\frac{\beta}{2mN}\sum_{n,q,q'}\left(Q_q e^{iqna}-Q_q e^{iq(n+1)a}\right)\left(Q_{q'}e^{iq'na}-Q_{q'}e^{iq'(n+1)a}\right)\\&=\frac{\beta}{2mN}\sum_{n,q,q'}Q_qQ_{q'}\left[e^{i(q+q')na}+e^{i(q+q')(n+1)a}-e^{i(q+q')na}\left(e^{iq'a}+e^{iqa}\right)\right]\\&=\frac{\beta}{2m}\sum_{q,q'}Q_qQ_{q'}\delta_{q,-q'}\left(1+e^{i(q+q')a}-e^{iq'a}-e^{iqa}\right)\\&=\frac{\beta}{m}\sum_q Q_qQ_{-q}(1-\cos qa)=\frac{2\beta}{m}\sum_q Q_qQ_{-q}\sin^2\frac{qa}{2}\end{aligned} \tag{18-10}$$

将(19 − 9)式代入哈密顿量的动能项得：

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_n\frac{\partial^2}{\partial u_n^2}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_n\left(\frac{\partial}{\partial u_n}\right)\left(\frac{\partial}{\partial u_n}\right)\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_n\left(\sum_q\frac{\partial Q_q}{\partial u_n}\frac{\partial}{\partial Q_q}\right)\left(\sum_{q'}\frac{\partial Q_{q'}}{\partial u_n}\frac{\partial}{\partial Q_{q'}}\right)\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_n\left(\sum_q\sqrt{\frac{m}{N}}e^{-iqna}\frac{\partial}{\partial Q_q}\right)\left(\sum_{q'}\sqrt{\frac{m}{N}}e^{-iq'na}\frac{\partial}{\partial Q_{q'}}\right)\\&=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{q,q'}\frac{\partial^2}{\partial Q_q\partial Q_{q'}}\sum_n\frac{1}{N}e^{-i(q+q')na}\\&=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{q,q'}\frac{\partial^2}{\partial Q_q\partial Q_{q'}}\delta_{q,-q'}=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_q\frac{\partial^2}{\partial Q_q\partial Q_{-q}}\end{aligned} \tag{18-11}$$

因此哈密顿量可以写为：

$$\widehat{H}=\sum_{q}\left(-\frac{\hbar^{2}}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial Q_{q}\partial Q_{-q}}+\frac{2\beta}{m}Q_{q}Q_{-q}\sin^{2}\frac{qa}{2}\right)\qquad(18-12)$$

利用一维单原子链的色散关系：

$$\omega_{q}=\sqrt{\frac{4\beta}{m}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|\qquad(18-13)$$

可将$(19-12)$写为：

$$\widehat{H}=\sum_{q}\left(-\frac{\hbar^{2}}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial Q_{q}\partial Q_{-q}}+\frac{1}{2}\omega_{q}^{2}Q_{q}Q_{-q}\right)\qquad(18-14)$$

我们像(1)题那样把上式进行处理：

$$\widehat{H}=\sum_{q}\hbar\omega_{q}\left[\left(-\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{q}}}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}+\sqrt{\frac{\omega_{q}}{2\hbar}}Q_{-q}\right)\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{q}}}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}+\sqrt{\frac{\omega_{q}}{2\hbar}}Q_{q}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}Q_{q}-\frac{1}{2}Q_{-q}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}\right]\qquad(18-15)$$

其中利用到$\omega_{q}=-\omega_{-q}$可得：

$$\sum_{q}\frac{\hbar\omega_{q}}{2}\left(\frac{\partial}{\partial Q_{q}}Q_{q}-Q_{-q}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}\right)=\sum_{q}\frac{\hbar\omega_{q}}{2}\left(Q_{q}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}+1-Q_{-q}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}\right)=\sum_{q}\frac{\hbar\omega_{q}}{2}\qquad(18-16)$$

注意上式利用到了算符的计算方法：

$$\frac{\partial}{\partial Q_{q}}Q_{q}=Q_{q}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}+1\qquad(18-17)$$

将$(19-16)$代入$(19-15)$得：

$$\widehat{H}=\sum_{q}\hbar\omega_{q}\left[\left(-\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{q}}}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}+\sqrt{\frac{\omega_{q}}{2\hbar}}Q_{-q}\right)\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{q}}}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}+\sqrt{\frac{\omega_{q}}{2\hbar}}Q_{q}\right)+\frac{1}{2}\right]\qquad(18-18)$$

再定义产生和湮灭算符：

$$\hat{a}_{q}^{+}=-\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{q}}}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}+\sqrt{\frac{\omega_{q}}{2\hbar}}Q_{-q}\qquad(18-19)$$

$$\hat{a}_{q}^{-}=\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{q}}}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}+\sqrt{\frac{\omega_{q}}{2\hbar}}Q_{q}\qquad(18-20)$$

可以验证它们的对易关系：

$$\begin{aligned}&\left[\hat{a}_{q}^{-},\hat{a}_{q}^{+}\right]=\hat{a}_{q}^{-}\hat{a}_{q}^{+}-\hat{a}_{q}^{+}\hat{a}_{q}^{-}\\&=\left(-\frac{\hbar^{2}}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial Q_{-q}\partial Q_{q}}+\frac{1}{2}\omega_{q}^{2}Q_{q}Q_{-q}+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}Q_{-q}-\frac{1}{2}Q_{q}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}\right)\\&\qquad-\left(-\frac{\hbar^{2}}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial Q_{q}\partial Q_{-q}}+\frac{1}{2}\omega_{q}^{2}Q_{-q}Q_{q}-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}Q_{q}+\frac{1}{2}Q_{-q}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}\right)\\&=\frac{1}{2}Q_{-q}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}Q_{q}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}+\frac{1}{2}Q_{q}\frac{\partial}{\partial Q_{q}}+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}Q_{-q}\frac{\partial}{\partial Q_{-q}}=1\end{aligned}$$

$$\Longrightarrow\left[\hat{a}_{q}^{-},\hat{a}_{q}^{+}\right]=1\qquad(18-21)$$

因此哈密顿量可写出产生和湮灭算符的形式如下：

$$\widehat{H}=\sum_{q}\hbar\omega_q\left(\hat{a}_q^{+}\hat{a}_q^{-}+\frac{1}{2}\right) \tag{18-22}$$

（3）非简谐势和原子位移的傅里叶展开如下：

$$\widehat{H}_1=\gamma\sum_{n}(u_n-u_{n+1})^3 \tag{18-23}$$

$$u_n=\frac{1}{\sqrt{Nm}}\sum_{q}Q_q e^{iqna} \tag{18-24}$$

联立上两式得：

$$\begin{aligned}\widehat{H}_1&=\gamma\sum_{n}\left[\frac{1}{\sqrt{Nm}}\sum_{q}Q_q\left(e^{iqna}-e^{iq(n+1)a}\right)\right]^3=\gamma\sum_{n}\left[\frac{1}{\sqrt{Nm}}\sum_{q}Q_q\left(e^{-i\frac{qa}{2}}-e^{i\frac{qa}{2}}\right)e^{iq\left(n+\frac{1}{2}\right)a}\right]^3\\
&=\sum_{n}\left[\frac{1}{\sqrt{Nm}}\sum_{q}Q_q\left(-2i\sin\frac{qa}{2}\right)e^{iq\left(n+\frac{1}{2}\right)a}\right]^3=\left(\frac{-2i}{\sqrt{Nm}}\right)^3\sum_{n}\left(\sum_{q}Q_q\sin\frac{qa}{2}e^{iq\left(n+\frac{1}{2}\right)a}\right)^3\\
&=\left(\frac{-2i}{\sqrt{Nm}}\right)^3\sum_{n,q,q',q''}Q_qQ_{q'}Q_{q''}\sin\frac{qa}{2}\sin\frac{q'a}{2}\sin\frac{q''a}{2}e^{i(q+q'+q'')\left(n+\frac{1}{2}\right)a}\\
&=\left(\frac{-2i}{\sqrt{Nm}}\right)^3N\sum_{q,q',q''}Q_qQ_{q'}Q_{q''}\sin\frac{qa}{2}\sin\frac{q'a}{2}\sin\frac{q''a}{2}\sum_{n}\frac{e^{i(q+q'+q'')\left(n+\frac{1}{2}\right)a}}{N}\\
&=\left(\frac{-2i}{\sqrt{Nm}}\right)^3N\sum_{q,q',q''}Q_qQ_{q'}Q_{q''}\sin\frac{qa}{2}\sin\frac{q'a}{2}\sin\frac{q''a}{2}e^{i(q+q'+q'')\frac{a}{2}}\delta_{q+q'+q'',K_n}\\
&=\left(\frac{2i}{\sqrt{Nm}}\right)^3N\sum_{q,q',K_n}Q_qQ_{q'}Q_{K_n-q-q'}\sin\frac{qa}{2}\sin\frac{q'a}{2}\sin\frac{(q+q')a}{2}\end{aligned} \tag{18-25}$$

上式利用了，当$q$不是限制在第一布里渊区时，有公式（其中$K_n$为倒格矢）：

$$\sum_{n}e^{inaq}=N\sum_{K_n}\delta_{q,K_n} \tag{18-26}$$

利用$(19-19)(19-20)$，可见简正坐标$Q_q$写出算符的形式：

$$Q_q=\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_q}}\left(\hat{a}_{-q}^{+}+\hat{a}_q^{-}\right) \tag{18-26}$$

因此$\widehat{H}$可写出以下的产生和湮灭算符形式：

$$\widehat{H}=\left(i\sqrt{\frac{2\hbar}{Nm}}\right)^3N\sum_{q,q,K_n}\frac{\sin\frac{qa}{2}\sin\frac{q'a}{2}\sin\frac{(q+q')a}{2}}{\sqrt{\omega_q\omega_{q'}\omega_{q+q'}}}\left(\hat{a}_{-q}^{+}+\hat{a}_q^{-}\right)\left(\hat{a}_{-q'}^{+}+\hat{a}_{q'}^{-}\right)\left(\hat{a}_{-K_n+q+q'}^{+}+\hat{a}_{K_n-q-q'}^{-}\right) \tag{18-27}$$

这道题更应该说是对笔记的补充，所以我尽量地写得详细了些。

在笔记里，我们推导出简谐近似下的用简正坐标表示的拉式量，然后利用欧拉拉格朗日方程推导出了简正坐标是满足一个谐振子的方程的。然后用正则量子化重新写出了它的哈密顿量，然后（用二次量子化）解出了它的能量本征值。而在这道题中，我们发现了它同样可以写出产生和湮灭算符的形式。这给了我们一个新的角度去计算这一问题。虽然我还是终究不知道用产生和湮灭算符描述的意义是什么。但据说在量子场论中会这回是十分有用的。不过我不知道我这辈子有没有机会学到那个地步。ʊ ㅂ ʊ,,

产生和湮灭算符的导出似乎很重要的一个不做就是要从它的哈密顿量中“猜出来”。所以要十分注意$(18-3)(18-15)$这两个式子。（其实关键就是要抓住产生和湮灭算符是无量纲化的）

# 第 19 题：德拜近似

考虑一个二维晶格，利用德拜模型$\omega_{\vec{q}} = C|\vec{q}|$，写出：

（1）德拜频率$\omega_D$和德拜温度$\Theta_D$的表达式。

(2) 内能$\bar{U} = \sum_q \hbar\omega_{\vec{q}}\left(\bar{n}_{\vec{q}}(T) + \frac{1}{2}\right)$和热容$C_V = \partial\bar{U}/\partial T$的表达式，并求出内能中包含的总零点内能$U_0$。

解：（1）理解一：

在德拜近似下，等角频率面是一个“圆面”，假设原胞内只有一个原子，考虑到二维介质有两支格波，一纵一横，因此格波总的模式密度为：

$$\rho(\omega) = \sum_s^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \int \frac{dS}{|\nabla_{\vec{q}}\omega_{s,\vec{q}}|} = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{2\pi q}{C} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{4\pi\omega}{C^2} \qquad (19-1)$$

不同类的格波总数为$2N$，德拜截止偏离可通过下式来定：

$$\int_0^{\omega_D} \rho(\omega) d\omega = 2N \qquad (19-2)$$

因此得：

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{2\pi\omega_D^2}{C^2} = 2N$$

$$\Rightarrow \omega_D = \sqrt{\frac{4\pi N C^2}{L^2}} = C\sqrt{\frac{4\pi N}{L^2}} \qquad (19-3)$$

由定义$\hbar\omega_D = k_B\Theta_D$，可得到德拜温度为：

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar C}{k_B}\sqrt{\frac{4\pi N}{L^2}} \qquad (19-4)$$

理解二：

德拜近似是将二维的第一布里渊区近似成半径为$\omega_D/C$的圆，要求圆的面积等于不同类的格波总数个的量子态(在$k$空间中的)体积和。一个量子态在$k$空间中的体积为$(2\pi/L)^2$，而不同类的格波总数为$2N$，因此：

$$\pi\left(\frac{\omega_D}{C}\right)^2 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 2N$$

$$\Rightarrow \omega_D = C\sqrt{\frac{4\pi N}{L^2}} \qquad (19-5)$$

两种方法是等价的，只是理解上有些不同。

（2）声子服从玻色分布：

$$\bar{n}_{\vec{q}}(T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{k_B T}\right) - 1} \qquad (19-6)$$

这平均内能为：

$$\bar{U}=\sum_{q}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\bar{n}_{\vec{q}}(T)+\frac{1}{2}\right)=\int_{0}^{\omega_D}\hbar\omega\left(\bar{n}_{\vec{q}}(T)+\frac{1}{2}\right)\rho(\omega)d\omega$$

$$=\int_{0}^{\omega_D}\hbar\omega\left(\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\frac{4\pi\omega}{C^2}d\omega=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\frac{4\pi}{C^2}\left[\int_{0}^{\omega_D}\frac{\hbar\omega^2}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1}d\omega+\int_{0}^{\omega_D}\frac{\hbar\omega^2}{2}d\omega\right]$$

$$=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\frac{4\pi}{C^2}\left[\frac{k_B^3T^3}{\hbar^2}\int_{0}^{\frac{\hbar\omega_D}{k_BT}}\frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1}d\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)+\frac{\hbar\omega_D^3}{6}\right]=\frac{L^2\hbar\omega_D^3}{6\pi C^2}+\frac{L^2k_B^3T^3}{\hbar^2\pi C^2}\int_{0}^{\frac{\Theta_D}{T}}\frac{x^2}{e^x-1}dx$$

$$(19-7)$$

由于$(19-5)$式得：

$$\omega_D=C\sqrt{\frac{4\pi N}{L^2}}\ \Rightarrow\ \frac{L^2}{C^2}=\frac{4\pi N}{\omega_D^2}\qquad(19-8)$$

将$(19-8)$代入$(19-7)$得：

$$\bar{U}=\frac{2N\hbar\omega_D}{3}+\frac{4Nk_B^3T^3}{\hbar^2\omega_D^2C^2}\int_{0}^{\frac{\Theta_D}{T}}\frac{x^2}{e^x-1}dx$$

$$=\frac{2}{3}Nk_B\Theta_D+4Nk_BT\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^2\int_{0}^{\frac{\Theta_D}{T}}\frac{x^2}{e^x-1}dx\qquad(19-9)$$

热容为：

$$C_V=\frac{\partial\bar{U}}{\partial T}=\frac{\partial}{\partial T}\int_{0}^{\omega_D}\hbar\omega\left(\bar{n}_{\vec{q}}(T)+\frac{1}{2}\right)\rho(\omega)d\omega$$

$$=\int_{0}^{\omega_D}\hbar\omega\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\frac{4\pi\omega}{C^2}d\omega$$

$$=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\frac{4\pi\hbar}{C^2}\int_{0}^{\omega_D}\frac{\frac{\hbar\omega^3}{k_BT^2}\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1\right]^2}d\omega=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\frac{4\pi\hbar}{C^2}\frac{k_B^3T^2}{\hbar^3}\int_{0}^{\omega_D}\frac{\frac{\hbar^3\omega^3}{k_B^3T^3}\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1\right]^2}d\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)$$

$$=4Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^2\int_{0}^{\frac{\Theta_D}{T}}\frac{x^3e^x}{(e^x-1)^2}dx$$

$$(19-20)$$

这道题的第一问提供了两种理解方法，第一种就是笔记中用的理解方法，第二中是换了一个角度的理解方法，其实它两是等价的，在实际中看看它两那种计算简单就用那种，都是可以的。

## 第 20 题：一维、二维电导率推导

已知电导率的表达式为：

$$\sigma = \frac{2e^2\hbar^2\tau}{Dm^{*2}}\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^D}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^2$$

推导一维($D = 1$)和二维($D = 2$)自由空间中，电导率$\sigma$与电子密度$\rho$的函数关系。

解： **一维情况时**，电子数$N$有以下关系：

$$2\times\left(\frac{L}{2\pi}\right)\times 2k_F = N \tag{20-1}$$

因此电子密度$\rho$为：

$$\rho = \frac{N}{L} = \frac{2k_F}{\pi} \tag{20-2}$$

对应电导率的近似计算，可将$\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)$近似为$\delta\left(E_{\vec{k}} - E_F\right)$，因此有：

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{2e^2\hbar^2\tau}{m^{*2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{2\pi}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^2dk = \frac{2e^2\hbar^2\tau}{m^{*2}}\int_0^{+\infty}\frac{1}{\pi}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^2dk \\ &\approx \frac{2e^2\hbar^2\tau}{m^{*2}}\int_0^{+\infty}\delta\left(E_{\vec{k}} - E_F\right)k^2dk = \frac{2e^2\tau}{\pi m^*}\int_0^{+\infty}\delta\left(E_{\vec{k}} - E_F\right)k\,dE_{\vec{k}} \\ &= \frac{2e^2\tau}{\pi m^*}k_F = \frac{e^2\tau\rho}{m^*}\end{aligned} \tag{20-3}$$

**二维情况时**，电子数$N$有以下关系：

$$2\times\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\times\pi k_F^2 = N \tag{20-4}$$

因此电子密度$\rho$为：

$$\rho = \frac{N}{L^2} = \frac{k_F^2}{2\pi} \tag{20-5}$$

电导率的近似计算为：

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{2e^2\hbar^2\tau}{2m^{*2}}\int_0^{+\infty}\int_0^{2\pi}\frac{1}{(2\pi)^2}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^2kdkd\theta = \frac{e^2\hbar^2\tau}{2\pi m^{*2}}\int_0^{+\infty}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^3dk \\ &\approx \frac{e^2\hbar^2\tau}{2\pi m^{*2}}\int_0^{+\infty}\delta\left(E_{\vec{k}} - E_F\right)k^3dk = \frac{e^2\tau}{2\pi m^*}\int_0^{+\infty}\delta\left(E_{\vec{k}} - E_F\right)k^2dk \\ &= \frac{e^2\tau}{2\pi m^*}k_F^2 = \frac{e^2\tau\rho}{m^*}\end{aligned} \tag{20-6}$$

可见，引入费米波矢使得计算变得简便很多，如$(20-1)(20-4)$这样，可以很快地计算出电子密度。同时在$(20-3)(20-6)$中也可以很容易计算：$\int_0^{+\infty}\delta\left(E_{\vec{k}} - E_F\right)k^n dk = k_F^n$。这就不需要像笔记中那样又把波矢化成能量再计算……当时我还有疑惑为什么有了费米能量了，还要引入费米温度、费米波矢、费米速度之类的，其实现在看来引入它们是为了简化很懂运算罢了，或许真正有实际意义的，其实一个费米能量就足够了。

# 第 21 题：热电导率和热导率的具体表达式

在各向同性色散关系下 $E_{\vec{k}}=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}$ ,$\vec{v}_{\vec{k}}=\frac{\hbar}{m^*}\vec{k}$ 求电子热电导率 $\sigma_T=\frac{2e\tau\hbar^2}{3m^{*2}}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{E_{\vec{k}}-\mu}{T}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^2$和热导率$\sigma_Q=-\frac{2\tau\hbar^2}{3m^{*2}}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2}{T}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^2$的具体表达式，保留到$T$的最低阶。

利用到常见费米积分的近似：将$\sigma_{T/Q}$写出$\sigma_{T/Q}\approx\tau\int_{-\infty}^{+\infty}dE_{\vec{k}}Q\left(E_{\vec{k}}\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)$并作泰勒展开$Q(E)\approx Q(\mu)+Q'(\mu)(E-\mu)+\frac{1}{2}Q''(\mu)(E-\mu)^2$。

解：**对于电子的热电导率**，可以写成：

$$
\begin{aligned}
\sigma_T&=\frac{2e\tau\hbar^2}{3m^{*2}}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{E_{\vec{k}}-\mu}{T}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^2=\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\frac{2e\tau\hbar^2}{3m^{*2}T}\int\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)k^4dk\\
&=\frac{e\tau\hbar^2}{3\pi^2m^{*2}T}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{5}{2}}\int\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\right)^2d\sqrt{\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}}\\
&=\frac{4e\tau\sqrt{2m^*}}{3\pi^2T\hbar^3}\int_0^{+\infty}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)E_{\vec{k}}^2\,d\sqrt{E_{\vec{k}}}\\
&=\frac{2e\tau\sqrt{2m^*}}{3\pi^2T\hbar^3}\int_0^{+\infty}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}dE_{\vec{k}}\\
&\approx\frac{2e\tau\sqrt{2m^*}}{3\pi^2T\hbar^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}dE_{\vec{k}}
\end{aligned}
\tag{21-1}
$$

注意，最后一步的近似是因为该积分其实只有在$E_{\vec{k}}=\mu$附近才有主要贡献，因此可以将积分范围近似为$(-\infty,+\infty)$。

设：

$$Q\left(E_{\vec{k}}\right)=\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}\tag{21-2}$$

$$Q'\left(E_{\vec{k}}\right)=\left(\frac{5}{2}E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}-\frac{3}{2}\mu E_{\vec{k}}^{\frac{1}{2}}\right)\tag{21-3}$$

$$Q''\left(E_{\vec{k}}\right)=\left(\frac{15}{4}E_{\vec{k}}^{\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\mu E_{\vec{k}}^{-\frac{1}{2}}\right)\tag{21-4}$$

因此泰勒展开近似为：

$$
\begin{aligned}
Q\left(E_{\vec{k}}\right)&\approx Q(\mu)+Q'(\mu)\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)+\frac{1}{2}Q''(\mu)\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2\\
&=\mu^{\frac{3}{2}}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)+\frac{3}{2}\mu^{\frac{1}{2}}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2
\end{aligned}
\tag{21-5}
$$

因此：

$$
\begin{aligned}
\sigma_T&\approx\frac{2e\tau\sqrt{2m^*}}{3\pi^2T\hbar^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\mu^{\frac{3}{2}}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)+\frac{3}{2}\mu^{\frac{1}{2}}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2\right]\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)dE_{\vec{k}}\\
&=\frac{e\tau\sqrt{2m^*\mu}}{\pi^2T\hbar^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)dE_{\vec{k}}
\end{aligned}
\tag{21-6}
$$

注意，上式利用到了$\left(-\partial f_0/\partial E_{\vec{k}}\right)$是关于$E_{\vec{k}}=\mu$的偶函数的性质。

其中：

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}=-\frac{\partial}{\partial E_{\vec{k}}}\left(\frac{1}{\exp\left(\frac{E_{\vec{k}}-\mu}{k_BT}\right)+1}\right)=\frac{\exp\left(\frac{E_{\vec{k}}-\mu}{k_BT}\right)\frac{1}{k_BT}}{\left(\exp\left(\frac{E_{\vec{k}}-\mu}{k_BT}\right)+1\right)^2}\tag{21-7}$$

将(21 − 7)代入(21 − 6)得：

$$\begin{aligned}\sigma_T&\approx\frac{e\tau\sqrt{2m^*\mu}}{\pi^2T\hbar^3}\int_0^{+\infty}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2\frac{\exp\left(\frac{E_{\vec{k}}-\mu}{k_BT}\right)\frac{1}{k_BT}}{\left(\exp\left(\frac{E_{\vec{k}}-\mu}{k_BT}\right)+1\right)^2}dE_{\vec{k}}\\&=\frac{e\tau\sqrt{2m^*\mu}}{\pi^2T\hbar^3}(k_BT)^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{x^2e^x}{(e^x+1)^2}dx\end{aligned}\tag{21-8}$$

利用到：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{x^2e^x}{(e^x+1)^2}dx=\frac{\pi^2}{3}\ ;\ k_F\approx\frac{\sqrt{2m^*\mu}}{\hbar}\tag{21-9}$$

可将(21 − 8)式化为：

$$\sigma_T\approx\frac{e\tau k_F}{3\hbar^2}k_B^2T\tag{21-10}$$

**对于热导率**，同样处理有：

$$\sigma_Q\approx-\frac{2\tau\sqrt{2m^*}}{3\pi^2T\hbar^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}dE_{\vec{k}}\tag{21-11}$$

设：

$$Q\left(E_{\vec{k}}\right)=\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}\tag{21-12}$$

$$Q'\left(E_{\vec{k}}\right)=2\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}+\frac{3}{2}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2E_{\vec{k}}^{\frac{1}{2}}\tag{21-13}$$

$$Q''\left(E_{\vec{k}}\right)=2E_{\vec{k}}^{\frac{3}{2}}+3\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)E_{\vec{k}}^{\frac{1}{2}}+\frac{3}{2}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2E_{\vec{k}}^{-\frac{1}{2}}\tag{21-14}$$

作泰勒展开近似为：

$$Q\left(E_{\vec{k}}\right)\approx Q(\mu)+Q'(\mu)\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)+\frac{1}{2}Q''(\mu)\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2=\mu^{\frac{3}{2}}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2\tag{21-15}$$

因此：

$$\begin{aligned}\sigma_Q&\approx-\frac{2\tau\sqrt{2m^*}}{3\pi^2T\hbar^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\mu^{\frac{3}{2}}\left(E_{\vec{k}}-\mu\right)^2\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{\vec{k}}}\right)dE_{\vec{k}}\\&=-\frac{2\tau\mu\sqrt{2m^*\mu}}{3\pi^2T\hbar^3}(k_BT)^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{x^2e^x}{(e^x+1)^2}dx\end{aligned}\tag{21-16}$$

同样利用到(21 − 9)可得：

$$\sigma_Q\approx-\frac{\tau k_F^3}{9m^*}k_B^2T\tag{21-17}$$

相比第六章笔记中的附录，这道题的做法没有那么赘余。

# 后记

至此，这门课程的所有笔记，我想，应该也要完结了。再来回顾一下这门课程的一条主线：

在第一章，我们首先探讨了首个试图在微观层次上研究金属电导率的模型——$Drude$模型。它是一个完全用经典物理构建处理的物理模型，虽然它似乎“看起来”很成功地解释了维德曼-夫兰兹定理，但其实也是歪打正着的。后来在$sommerfeld$引入量子力学后，“成功地”修正了$Drude$模型的错误：并不是所有电子都对热容有贡献，只有费米面附近的电子才有贡献！但无论是$Drude$模型，还是$sommerfeld$模型，它们都有一个无法解释的问题，那就是电子实际的平均自由程比它们所估计的都要长很多很多。

在第二章中，探讨了晶体的结构，对晶体的结构引入了许多数学上的描述：比如说原胞、布拉维格子、倒格子之类的。这为我们的下面的章节去奠定了基础。

在第三章中，我们想要去解释第一章没能解释的问题。那两个老模型的问题出在了哪里呢？其实它们都有一个共同的做法，那就是把弛豫时间（平均自由程）的引入是作为一个待定系数来引入的。他们电子近似类似成了一种自由电子气，同时为了考虑电子与离子实的相互作用，强行引入了一种碰撞机制，就是电子完成碰撞后，距离下一次碰撞所经历的时间作为弛豫时间。这可以说是一种完全为了解释而引入的假设，自然没有更加底层的原理来解释，自能是实验测得多少就是多少了。

于是在第三章中，利用了更加合理的三个近似——绝热近似、单电子近似、周期场近似，从量子力学的薛定谔方程出发，推导出了这门课程的一个核心定理—布洛赫定理。它说明了晶体当中的布洛赫电子的波函数是一个周期起伏的函数，它出现在整个晶体中。这是由于电子受到的是周期性势场的散射，并不是无规则的散射，而是一种相干散射，受周期性势场的散射仅使电子波函数产生一个相因子，而不会衰减！这就解释了第一章中为什么电子的平均自由程很大的原因，因为如果是完美的晶体的话，理论上它的平均自由程可以是无限大的。同时在第三章中，我们也讨论了近似求解布洛赫电子薛定谔方程的两种近似方法—弱周期近似和紧束缚近似，从而引入了能带理论的概念。

在第四章中，我们又利用了半经典的方法讨论了布洛赫电子的动力学。解释了外加电场情况下理论上会出现的布洛赫振荡现象，也解释了这世界上为什么会有绝缘体、半导体、导体的区别。当然，其中引入的有效质量和准动量也是很有趣的概念。

在第五章中，我们又学习了以上章节都近似掉的一个问题——晶格振动。这是内容很丰富的一个章节。

在第六章，我们想到了一个问题，如果用前四章的内容来预测：那么加上一个外电场产生电流，然后撤去外电场，这个电流会一直存在！也就是会有零电阻的现象。但实际上我们也知道，电阻是存在的。这是因为我们在前四章我们都忽略了晶格振动的影响！结合晶格振动，也就是考虑到电子和声子的相互作用，我们最终才有一个完整的体系来解释输运现象。

可以说，这门课的主线是围绕着解释固体电导率来展开的。

好了，随着上面这个想到哪写到哪的总结写完，这门课程的内容也算告一段落了。来讲点课程内容以外的东西吧！

固体物理这门课我们是开在大三下学期的，我在大三下开学的暑假前就提前开始学了，直到后天要期末考试，我也学了刚好 6 个月。作为大学本科最后一门专业课程，我可以说我是认真地、尽力地去学了。所花费的时间和精力，比起以往任何一门课程都要多。首先是笔记，从大三上学期开始我就以作电子笔记为主要的学习方法。大三上做了两门课的笔记——广义相对论和量子力学。其中广义相对论这门课本来就是抱着不学白不学、学了能炫耀炫耀的态度去学到，所以本身就没学太好，笔记也做得不成体系、不完善，比较随便；而量子力学的笔记，我是基于田光善先生的讲义来写得，因为讲义的内容和推导都很齐全，所以稍微用自己的话对着抄一遍就好了，做得也比较轻松。但固体物理这门课，网上的网课都没有像田光善先生那种详细的讲义。我是听车静光先生的网课，以他将的内容作为主线，参考了阎守胜和黄昆的教材，也结合了不少网络上找到的一些质料和回答，看看哪种解释让我感觉最舒服便以它做笔记。

由于是边学边做，所以在这个过程中，我尽量地把推导过程写得详细，把概念都弄得能让自己清楚，虽然这样是好的，但当学完了回过头再看，自己写得的确有点赘余了。但这，我想是不可避免的，至少做完这一份笔记至少令我感觉是充实的，知识是成体系的。

另外，这份笔记我有很多地方都采用了比较诙谐的语句来小吐槽一下（蓝色字体部分），也加入了一些可爱的表情包。因为，我想啊，反正除了我自己也不会有人看到，把笔记的风格弄懂轻松可爱一点，其实蛮好的(❁´◡`❁)。很多时候在学的过程中，一些知识点令我该到难以理解，十分不舒服时，写两句吐槽的话，然后放下它。再过一段时间的学习之后，再回过头来看，发现可以理解了，再把它写清楚。这时再看以前吐槽的话，回想起自己之前是因为什么才不能理解，这个过程蛮有意思的。以及这份笔记我采用了六灵使作为封面，其实也没有什么特殊含义，只是单纯感觉着 6 个属性不同的角色蛮可爱的，而且这门课的章节也刚好是六章。

最后，再来说一下这段日子自己的一些状况吧。

上周考六级，准备了蛮长时间的，结果忘记填涂听力的答案了，哈哈。。。六级没过是不能保研的，虽然我的成绩保研本来就没什么机会，但闹这么一出没填卡的戏剧，着实有些搞心态。

也到了大三下也基本结束了，考研，怎么备考，考哪个方向，一堆东西要考

虑。而我却不知如何行动，浑浑噩噩的。有时候我真的想，我这么认真地学这些知识，做这些笔记真的有用吗？有时候这真的感觉很像“孔乙己”，只是给一些自我满足罢了。或许我这种学习方法放到大一、大二是正确的，但现在我本应该有更重要的事情去行动。我还是太胆小了。

只能说还是太不成熟了吧。。。

其实，至今，我感觉我还是喜欢物理这门学科的，我喜欢学习这种能够给我带来刺激感、成就感的新知识，喜欢在自己脑子里面学会了一套新物理体系的感觉。但，本科的课程内容也结束了，如果备考考研的话，大四时我大概率也不会再选新的课程了，而即使读研，也应该不会也没有机会再想学固体物理这样认真、花心思了吧。

虽然有时候真的想一拍桌子，说，我就要读理论物理，我就要去干我感觉喜欢的事。但现实不得不让我考虑，我没有读理论的这个能量，我应该去读一个偏工科的，毕业能够找工作的方向。哈哈。。。人生好像就是这样，一点点地冷却你心中的热血，让你去面对现实。

哈哈~ o(*￣▽￣*)o，说了这么多好没条理的话，其实还好吧，我也没有太悲观吧。虽然回顾我这大学三年，都没能干成功过某件事，都没能干出什么在他人看来有意义的事，但是啊，或许对于我这种平庸的人来说，失败才是常态吧。成功这东西，一生中能有个一次两次就很好啦！ヾ(•ω•`)o 关键的是在失败常伴的、长时间的沉寂而枯燥的日子里，保持一颗还算热忱的心，去反思而不是否认自己，这才是我这种平庸的人应该要有的心态，不是吗？

我也许还是太害怕走出自己的舒适区了。但很多东西，保有一颗平常心去对待，或许会发现其实它也不是那么让我感到不适呢？

不说啦，后天还有期末考试，复习去了。

Hundred Three

2023 年 6 月 24 日

于中山大学珠海校区主教学楼 F301