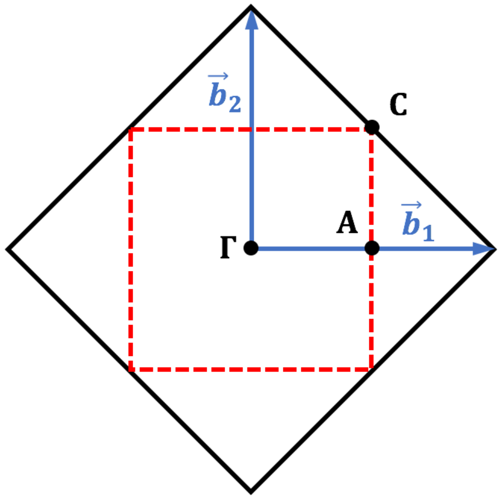
Chapter 4.1: 课后作业

1. 对于边长为a的二维正方晶格，证明：
自由电子在第一布里渊区边界（如右图所示）C点处的动能是A点处动能的2倍。



2. 对于一维近自由电子模型，$k = \pm\frac{2\pi}{a}$状态简并微扰的能量为E_+和E_-，求出对应的波函数ψ_+和ψ_-，并说明它们都代表驻波。（假设$V_n = V_n^*$）

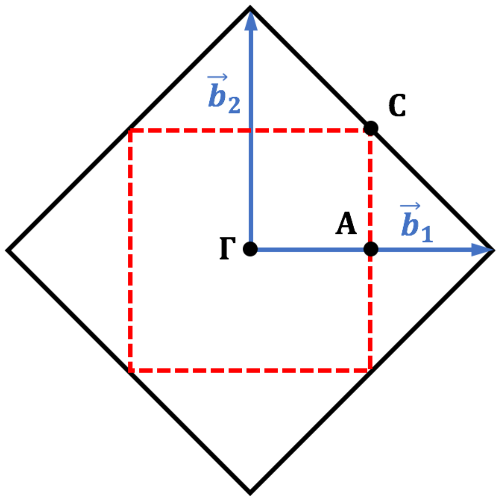
提交时间：4月10日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

Chapter 4.1: 课后作业-答案

1. 对于边长为a的二维正方晶格，证明：

自由电子在第一布里渊区边界（如右图所示）C点处的动能是A点处动能的2倍。



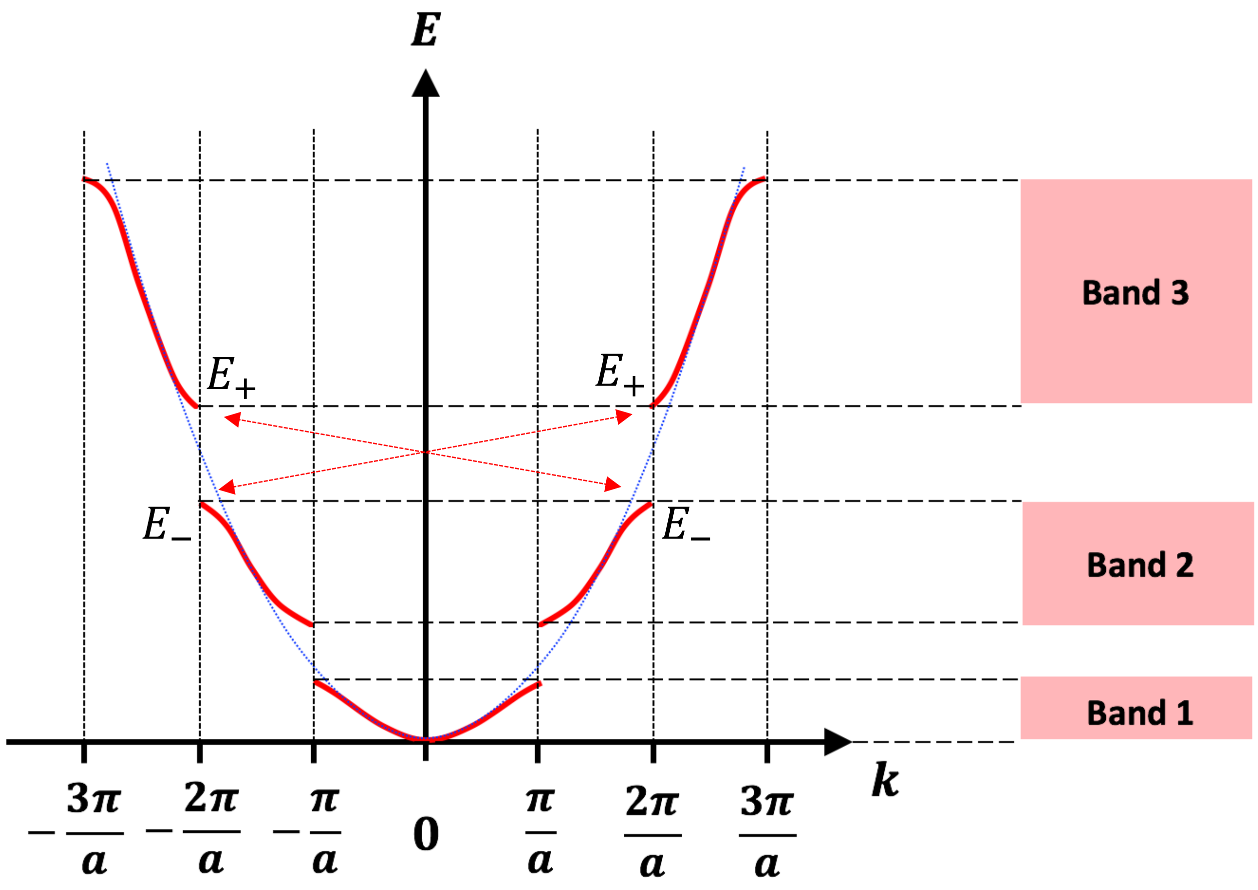
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \left(k_x^2 + k_y^2\right)}{2m}$$

$$A\left(\frac{\pi}{a}, 0\right) \longrightarrow E(A) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

$$C\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right) \longrightarrow E(C) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$

$$\longrightarrow E(C) = 2E(A)$$

2. 对于一维近自由电子模型，$k=\pm\frac{2\pi}{a}$状态简并微扰的能量为E_+和E_-，求出对应的波函数ψ_+和ψ_-，并说明它们都代表驻波。（假设$V_n=V_n^*$）



2. 对于一维近自由电子模型，$k=\pm\frac{2\pi}{a}$ 状态简并微扰的能量为E_+和E_-，求出对应的波函数ψ_+和ψ_-，并说明它们都代表驻波。（假设$V_n=V_n^*$）

$$|\psi\rangle=\alpha|\varphi_k\rangle+\beta|\varphi_{k'}\rangle$$

$$\hat{H}_0|\varphi_k\rangle=\varepsilon_k|\varphi_k\rangle \qquad \hat{H}_0|\varphi_{k'}\rangle=\varepsilon_{k'}|\varphi_{k'}\rangle$$

$$|\varphi_k\rangle=\frac{1}{\sqrt{Na}}\mathrm{e}^{i\frac{2\pi}{a}x} \qquad |\varphi_{k'}\rangle=\frac{1}{\sqrt{Na}}\mathrm{e}^{-i\frac{2\pi}{a}x}$$

把$|\psi\rangle$带入$(\hat{H}_0+\hat{H}')|\psi\rangle=E|\psi\rangle$: $\longrightarrow$

$$\begin{cases}(\varepsilon_k-E)\alpha+V_2^*\beta=0 & (1)\\ V_2\alpha+(\varepsilon_{k'}-E)\beta=0 & (2)\end{cases}$$

$$V_2=\langle\varphi_{k'}|\hat{H}'|\varphi_k\rangle \qquad V_2^*=\langle\varphi_k|\hat{H}'|\varphi_{k'}\rangle$$

$$\longrightarrow \begin{vmatrix}\varepsilon_k-E & V_2^*\\ V_2 & \varepsilon_{k'}-E\end{vmatrix}=0 \longrightarrow \begin{cases}E_+=\varepsilon_k+|V_2|\\ E_-=\varepsilon_k-|V_2|\end{cases}$$

Chapter 4.1: 课后作业-答案

把$E_+ = \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}} + |V_2|$带回(1)(2)可得:
$$\begin{cases} -|V_2|\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{V}_2^*\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{0} & (3) \\ \boldsymbol{V}_2\boldsymbol{\alpha} - |V_2|\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{0} & (4) \end{cases}$$

由$\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{4}) - \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{3})$可得 $\boldsymbol{V}_2\boldsymbol{\alpha}^2 - \boldsymbol{V}_2^*\boldsymbol{\beta}^2 = \boldsymbol{0}$

由$\boldsymbol{V}_2 = \boldsymbol{V}_2^*$可得 $\boldsymbol{\alpha}^2 - \boldsymbol{\beta}^2 = \boldsymbol{0}$

利用 $\boldsymbol{\alpha}^2 + \boldsymbol{\beta}^2 = \boldsymbol{1}$

可得 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta} = \dfrac{\boldsymbol{1}}{\sqrt{\boldsymbol{2}}}$ 或 $\boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\beta} = \dfrac{\boldsymbol{1}}{\sqrt{\boldsymbol{2}}}$

分别代入(3)和(4)验证可得: 如果$\boldsymbol{V}_2$为实数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta} = \frac{\boldsymbol{1}}{\sqrt{\boldsymbol{2}}}$

如果$\boldsymbol{V}_2$为虚数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\beta} = \frac{\boldsymbol{1}}{\sqrt{\boldsymbol{2}}}$ （应舍掉）

Chapter 4.1: 课后作业-答案

把$E_- = \boldsymbol{\varepsilon_k} - |V_2|$带回(1)(2)可得:

$$\begin{cases} |V_2|\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{V_2^*\beta} = \mathbf{0} & (5) \\ \boldsymbol{V_2\alpha} + |V_2|\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} & (6) \end{cases}$$

由$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{6}) - \boldsymbol{\beta}(\mathbf{5})$可得 $\boldsymbol{V_2\alpha^2} - \boldsymbol{V_2^*\beta^2} = \mathbf{0}$

由$\boldsymbol{V_2} = \boldsymbol{V_2^*}$可得 $\boldsymbol{\alpha^2} - \boldsymbol{\beta^2} = \mathbf{0}$

利用 $\boldsymbol{\alpha^2} + \boldsymbol{\beta^2} = \mathbf{1}$

可得 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta} = \dfrac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$ 或 $\boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\beta} = \dfrac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$

分别代入(5)和(6)验证可得： 如果$\boldsymbol{V_2}$为实数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\beta} = \dfrac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$

如果$\boldsymbol{V_2}$为虚数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta} = \dfrac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$ （应舍掉）

Chapter 4.1: 课后作业-答案

$$\rightarrow \begin{cases} |\psi_+\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_k\rangle + |\varphi_{k'}\rangle) = \dfrac{2}{\sqrt{2Na}}\cos\left(\dfrac{2\pi}{a}x\right) \\ |\psi_-\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_k\rangle - |\varphi_{k'}\rangle) = \dfrac{2i}{\sqrt{2Na}}\sin\left(\dfrac{2\pi}{a}x\right) \end{cases}$$

Chapter 4.2: 课后作业

考虑一维单原子链（原子间距为a, 链长为Na），对于原子的s能级, 利用紧束缚模型, 求:

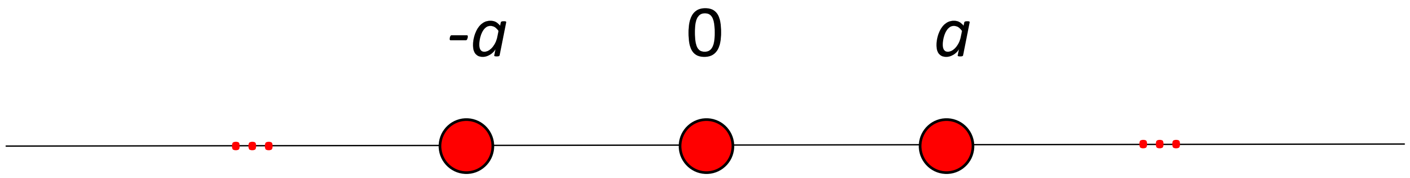
1. 原子链能带的色散关系$E(k)$;
2. 能带的态密度$g(E)$;
3. 能带的宽度.

提交时间： 4月10日之前

提交方式： 手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

Chapter 4.2: 课后作业-答案

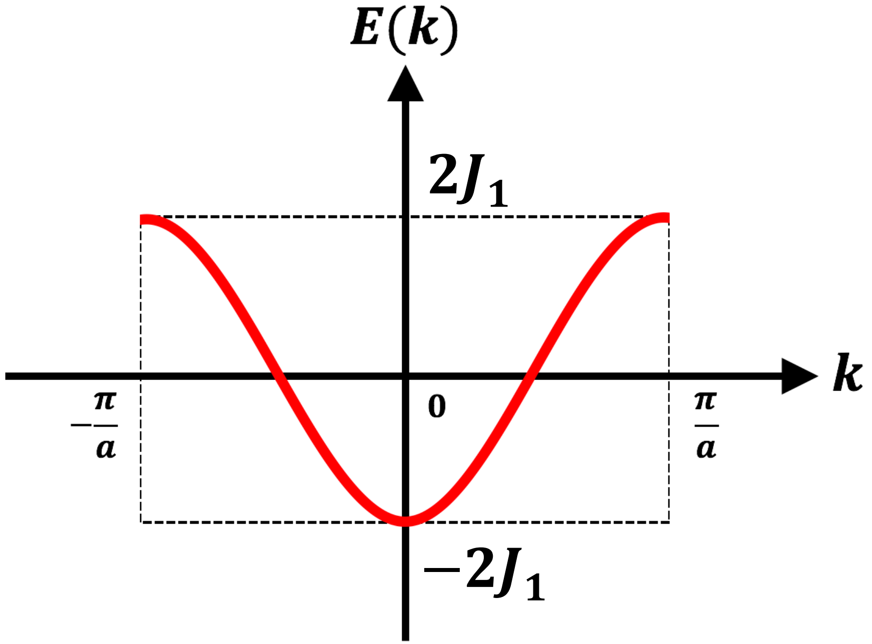
1. $$E_k = \varepsilon - J_0 - \sum_{j=\text{nbs}} J_1(\vec{a}_j)e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_j} = \varepsilon - J_0 - J_1\left(e^{-ika} + e^{ika}\right) = \varepsilon - J_0 - 2J_1\cos(ka)$$



Chapter 4.2: 课后作业-答案

2. 波矢密度: $\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}k}=\frac{Na}{2\pi}$ $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}=2aJ_1\sin(ka)$

(不计自旋) $g(E)=\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}E}=2\times\frac{dn}{dk}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}=2\times\frac{dn}{dk}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}\right)^{-1}=\frac{N}{2\pi J_1\sin(ka)}=\frac{N}{\pi\sqrt{4J_1^2-(E_k-\varepsilon+J_0)^2}}$



3. 带宽: $E_{\pi/a}-E_0=4J_1$

Chapter 4.4: 课后作业

考虑原胞数为N的一维晶格, 电子能带为

$$E(k)=\frac{\hbar^2}{ma^2}\left[\frac{7}{8}-\cos(ka)+\frac{1}{8}\cos(2ka)\right]$$

求:

1. 能带宽度;
2. 电子在波矢k状态时的速度;
3. 电子在带底和带顶时的有效质量。

提交时间：4月10日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

Chapter 4.4: 课后作业-答案

1. 先求能量极值点位置: $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}=0 \longrightarrow \sin(ka)=0 \longrightarrow k=0,\frac{\pi}{a}(\text{或}-\frac{\pi}{a})$

带宽: $\boldsymbol{E_{\pi/a}-E_0=\frac{2\hbar^2}{ma^2}}$

2. $v_k=\frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}=\frac{\hbar}{ma}\left[\sin(ka)-\frac{1}{4}\sin(2ka)\right]$

3. $m^*=\hbar^2\left(\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\right)^{-1} \longrightarrow$

带顶($k=\frac{\pi}{a}$): $m^*=-\frac{2}{3}m$

带底($k=0$): $m^*=2m$