介观物理第十三次作业

董建宇 202328000807038

电子在周期势场 $V(\mathbf{r})$ 中运动，满足薛定谔方程为:

$$H\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle=\varepsilon\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle,$$

其中

$$H=\frac{1}{2m}[-i\hbar\nabla+e\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2+V(\mathbf{r}),$$

其中 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ 为电磁矢势。假设 $\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle$ 满足:

$$\hbar\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle=\varepsilon_{n\mathbf{k}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle.$$

(1) 请证明:

$$\hbar=\frac{1}{2m}[-i\hbar\nabla+\hbar\mathbf{k}+e\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2+V(\mathbf{r}),$$

Proof. 将哈密顿量展开，写作:

$$H=\frac{1}{2m}[-i\hbar\nabla+e\mathbf{A}]^2+V=\frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2+e^2\mathbf{A}^2-2ie\hbar\mathbf{A}\cdot\nabla)+V.$$

分别作用在 $\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle$ 可得:

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\nabla(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle)=&\nabla\cdot\left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle+i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle\right)\\=&e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla^2\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle+2i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\cdot\nabla\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle-\mathbf{k}^2e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle\\=&e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(\nabla+i\mathbf{k})^2\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle;\\\nabla\left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle\right)=&e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(\nabla+i\mathbf{k})\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle.\end{aligned}$$

从而可以计算:

$$\begin{aligned}H\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle=&e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left[\frac{1}{2m}((-i\hbar\nabla+\hbar\mathbf{k})^2+2e\mathbf{A}\cdot(-i\hbar\nabla+\hbar\mathbf{k})+e^2\mathbf{A}^2)+V\right]\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle\\=&e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla+\hbar\mathbf{k}+e\mathbf{A})^2+V\right]\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle\\=&e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\varepsilon_{n\mathbf{k}}\left|u_{\mathbf{k}}\right\rangle.\end{aligned}$$

即有:

$$\hbar=\frac{1}{2m}[-i\hbar\nabla+\hbar\mathbf{k}+e\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2+V(\mathbf{r}).$$

□

(2) 速度算符可以写成:

$$\mathbf{v}=\frac{1}{m}[-i\hbar\nabla+e\mathbf{A}(\mathbf{r})+\hbar\mathbf{k}]=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\hbar}{\partial\mathbf{k}}.$$

Proof. 注意到：$\hbar$ 可以写成动能项和势能项的和，即：

$$\hbar = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + V(\mathbf{r}).$$

从而不难得到：

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m}[-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) + \hbar\mathbf{k}] = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\hbar}{\partial\mathbf{k}}.$$

□

(3) 证明：

$$\langle u_{n'\mathbf{k}}| [\mathbf{r}, \hbar] |u_{n\mathbf{k}}\rangle = -i\hbar \langle u_{n'\mathbf{k}}| \mathbf{v} |u_{n\mathbf{k}}\rangle .$$

Proof. 要证明上式，只需计算 $\mathbf{r}$ 和 $\hbar$ 的对易关系，具体计算如下：

$$\begin{aligned}
[\mathbf{r}, \hbar] =& \frac{1}{2m}[\mathbf{r}, (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})^2] \\
=& \frac{1}{2m}[\mathbf{r}, -\hbar^2\nabla^2 + (\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})^2 - 2i\hbar(\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})\cdot\nabla] \\
=& \frac{1}{2m}[\mathbf{r}, \mathbf{p}^2] + \frac{1}{m}[\mathbf{r}, (\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})\cdot\mathbf{p}] \\
=& \frac{i\hbar}{m}\mathbf{p} + \frac{1}{m}(\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})i\hbar \\
=& i\hbar\frac{1}{m}(-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}) \\
=& i\hbar\mathbf{v}.
\end{aligned}$$

其中，$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$，此外利用了基本对易关系：

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

即有：

$$\langle u_{n'\mathbf{k}}| [\mathbf{r}, \hbar] |u_{n\mathbf{k}}\rangle = i\hbar \langle u_{n'\mathbf{k}}| \mathbf{v} |u_{n\mathbf{k}}\rangle .$$

□