Chapter 4.1: 课后作业-答案

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。

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

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

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

把$|\psi\rangle$带入$(\hat{H}_0+\hat{H}')|\psi\rangle=E|\psi\rangle$: $\longrightarrow$
$$\begin{cases}(\varepsilon_k-E)\alpha+V_2^*\beta=0 & (1)\\ V_2\alpha+(\varepsilon_{k'}-E)\beta=0 & (2)\end{cases}$$

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

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

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

Chapter 4.1: 课后作业-答案

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

$$\begin{cases} -|V_2|\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{V_2^*\beta} = \mathbf{0} & (3) \\ \boldsymbol{V_2\alpha} - |V_2|\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} & (4) \end{cases}$$

由$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{4}) - \boldsymbol{\beta}(\mathbf{3})$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(3)和(4)验证可得： 如果$\boldsymbol{V_2}$为实数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$ （但波函数分布不符合实际，应舍掉）

如果$\boldsymbol{V_2}$为虚数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$

Chapter 4.1: 课后作业-答案

把$E_- = \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}} - |V_2|$带回(1)(2)可得: $\begin{cases} |V_2|\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{V}_2^*\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} & (5) \\ \boldsymbol{V}_2\boldsymbol{\alpha} + |V_2|\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} & (6) \end{cases}$

由$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{6}) - \boldsymbol{\beta}(\mathbf{5})$可得 $\boldsymbol{V}_2\boldsymbol{\alpha}^2 - \boldsymbol{V}_2^*\boldsymbol{\beta}^2 = \mathbf{0}$

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

分别代入(5)和(6)验证可得： 如果$\boldsymbol{V}_2$为实数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$ （但波函数分布不符合实际，应舍掉）

如果$\boldsymbol{V}_2$为虚数，则取值$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$

Chapter 4.1: 课后作业-答案

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

Chapter 4.1: 课后作业-答案

注释：

所谓“波函数分布不符合实际，应舍掉”是指需满足如下条件：

1) 能量较高的态 $|\psi_+\rangle$的波函数应尽量分布在格点间，因为这里电子的势能较高；

2) 能量较低的态 $|\psi_-\rangle$的波函数应尽量分布在格点上，因为这里电子的势能较低。

如下图所示：