Chap.3.

自由粒子 $\hat H=\frac{\hat p^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$，本征定态薛定谔方程 $\hat H\psi_E(x)=E\psi_E(x)$

通解 $$\psi_E(x)=\begin{cases}A\exp(\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x)+B\exp(\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x) & E>0\\ Ax+B & E=0\\ A\exp(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x)+B\exp(-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x) & E<0\quad 舍\end{cases}$$

$\psi_k(x)=e^{ikx}$ 任意平面波都是自由电子本征波函数，其相应本征值 $E(k)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

把 $\psi_k(x)$ 作为初始 $\psi(x,t=0)$ 代入到含时薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat H\psi(x,t)$

解得 $\psi(x,t)=\exp\{i(kx-w(k)t)\}$，色散关系：$\omega(k)=\frac{E}{\hbar}=\frac{\hbar k^2}{2m}$

若初始波函数任意 $\psi(x,t=0)$ ⇒ 平面波展开 $\psi(x,t=0)=\int c(k)e^{ikx}dk$

⇒ 代入求解 $\psi(k,x)=\int c(k)\exp(i(kx-w(k)t))dk$

群速度 & 波包.

群速度 $V_g=\omega'(k_0)=\frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0}$，$\psi(x)=g(x)e^{ikx}\Rightarrow|\psi(x,t)|^2=|g[x-\omega'(k_0)t]|^2$

粒子出现几率分布也以 V_g 运动

三维：

$\psi_k(r)=e^{ikr}=e^{i(k_xx+k_yy+k_zz)}$，$k_x,k_y,k_z$ 任意实数

$E(k)=\hbar\omega(k)=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)$，$\psi(x,t)=\int c(k)\exp[i[kr-\omega(k)t]]d^3k$

群速度：$V_g=\frac{\partial\omega}{\partial k_x}e_x+\frac{\partial\omega}{\partial k_y}e_y+\frac{\partial\omega}{\partial k_z}e_z$

周期性边界条件 $\psi(x=0)=\psi(x=L)$，$k_n=\frac{2\pi}{L}\cdot n$，n取任意整数

每个不同本征态占据 Δk 的长度，三维：$k_{nx}=\frac{2\pi}{L_x}m$，$k_{ny}=\frac{2\pi}{L_y}n$，$k_{nz}=\frac{2\pi}{L_z}l$

费米波矢与费米能

三个电子体系状态原理：①自旋 ②泡利不相容 ③能量最低原理

k_F 费米波矢：取决于自由电子气浓度，定义费米波矢处的电子能量 E_F 为费米能

$E_F=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}$ 绝对0度时，$E<E_F$ 全部占据，$E>E_F$ 也全部占据

一维 $k_F=\frac12\pi n$　二维 $k_F=\sqrt{2\pi n}$　三维 $k_F=\sqrt[3]{3\pi^2n}$

n为电子气浓度 $=N/V$，N = 2×体积/每个状态占据体积

态密度 一维：$N(\varepsilon)=\frac{2L\sqrt{2mE}}{\pi\hbar}$，$N(\varepsilon)=\int_{-\infty}^{E}g(E)dE$，$g(E)=\frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}$

定义态密度为能量在E到E+dE之间的状态的个数，若进一步定义单位长度内态密度

$D(E)\equiv g(E)/L$，有 $D(E)=\frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}$，二维：$N(\varepsilon)=\frac{2mES}{2\pi\hbar^2}$，$g(E)=\frac{mS}{\pi\hbar^2}$

二维自由电子气态密度与能量无关 ⇒ 旋转抛物面，能量增高，抛物线斜率越大，dE投影到k平面同心环宽变窄，但直径变大，进一步定义单位面积内态密度 $D(E)\equiv g(E)/S$，三维：$N(\varepsilon)=\frac{(2mE)^{3/2}\cdot V}{3\pi^2\hbar^3}$，$g(E)=\frac{mV}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2mE}$

能量越高，三维自由电子气态密度越高

一维无限深势阱 $V(x)=\begin{cases}0 & 0\le x\le W\\ +\infty & \text{otherwise}\end{cases}$ ⇒ 从而要求波函数 $\psi(x)=0$　$x<0$ 或 $x>W$

现在阱内波函数满足边界条件：$\psi(x=0)=0$，$\psi(x=W)=0$

由通解代边界条件知 $\psi_n(x)=\sqrt{\frac2W}\sin(k_nx)$ 其中 $k_n=\frac{\pi}{W}n$，$E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mW^2}$

n为任意正整数 $(n>0)$

则随时间演化：$\psi_n(x,t)=\sqrt{\frac2W}\sin(k_nx)\exp(-i\frac{E_nt}{\hbar})$ 称作驻波，每个点都在以 $E_n/\hbar$ 为圆频率振动，但振幅与位置有关，每当 $k_nx=m\pi$，振动幅度为0 称为波节，n=1：无波节 n=2：有一个波节 n=3：有两个波节

量子阱. 三维导体中，把一个方向尺寸限制到微米量级，另外两个方向宏观有限，这时称体系为量子阱 $\hat H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)$，其中 $V(r)=\begin{cases}0 & 0\le x\le W\\ \infty & \text{otherwise}\end{cases}$

易知体系波函数：$\psi_{n,k_y,k_z}(r)=\left[\sqrt{\frac2W}\sin(\frac{n\pi}{W}x)\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ik_y\cdot y}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ik_z\cdot z}$

其中n取任意正整数

代入得相应本征能量：$E_{n,k_y,k_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mW^2}n^2+\frac{\hbar^2(k_y^2+k_z^2)}{2m}$

对于给定n，能量对 k_y,k_z 是旋转抛物面：每个不同的n给出起点高度不同的抛物面

当 $E_1<E_F<E_2$ 时，所有被占据的态位于第一个能带中，电子波函数方向在x方向的自由度被限定为n=1 ⇒ 二维电子气，$D(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2}$

$E_2<E_F<E_3$ ⇒ 位于1与2能带中，每个贡献 $\frac{m}{\pi\hbar^2}$ 态密度 $D(E)=\frac{2m}{\pi\hbar^2}$

量子线

$\psi_{n_x,n_y,k}(r)=\sqrt{\frac2W}\sin(\frac{n_x\pi}{W_x}x)\sqrt{\frac2W}\sin(\frac{n_y\pi}{W_y}y)\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(ik_z\cdot z)$，$n_x,n_y>0$

$E_{n_x,n_y,k_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mW_x^2}n_x^2+\frac{\hbar^2\pi^2}{2mW_y^2}n_y^2+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}$ 每个 n_x,n_y 组合给出一个能带 每个能带

可视作一维自由电子气，贡献 $D(E)=\frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}$ 的态密度

自旋与二能级体系

$[\hat L_x,\hat L_y]=i\hbar\hat L_z$　$[\hat L_y,\hat L_z]=i\hbar\hat L_x$　$[\hat L_z,\hat L_x]=i\hbar\hat L_y$　$[\hat L^2,\hat L_x]=[\hat L^2,\hat L_y]=[\hat L^2,\hat L_z]=0$

$\hat L^2$ 与 $\hat L_z$ 共同本征态：$\begin{cases}\hat L^2|l,m\rangle=l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle & \text{l为取值为正的整数或半整数}\\ \hat L_z|l,m\rangle=m\hbar|l,m\rangle & m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l\end{cases}$

电子自旋：

$[\hat S_x,\hat S_y]=i\hbar\hat S_z$　$[\hat S_y,\hat S_z]=i\hbar\hat S_x$　$[\hat S_z,\hat S_x]=i\hbar\hat S_y$　$[\hat S^2,\hat S_x]=[\hat S^2,\hat S_y]=[\hat S^2,\hat S_z]=0$

S^2 和 S_z 可以有共同本征态 $|s,m\rangle$　$\begin{cases}\hat S^2|s,m\rangle=s(s+1)\hbar^2|s,m\rangle\\ \hat S_z|s,m\rangle=m\hbar|s,m\rangle\end{cases}$ $m=-s,-s+1,\cdots s-1,s$

电子自旋：$S=\frac12$，$m=\pm\frac12$

$|\uparrow_z\rangle=|s=\frac12,m=\frac12\rangle$　$\hat S^2=\frac34\hbar^2\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}=\frac34\hbar^2$　$\hat S_x=\frac\hbar2\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}=\frac\hbar2\sigma_x$

$|\downarrow_z\rangle=|s=\frac12,m=-\frac12\rangle$　$\hat S_z=\frac\hbar2\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}=\frac\hbar2\sigma_z$　$\hat S_y=\frac\hbar2\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}=\frac\hbar2\sigma_y$

$\sigma_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$，$\sigma_y=\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}$　$\sigma_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$ 统称泡利矩阵

有：$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=-i\sigma_x\sigma_y\sigma_z=I$，$[\sigma_x,\sigma_y]=2i\sigma_z$，$[\sigma_y,\sigma_z]=2i\sigma_x$

$[\sigma_z,\sigma_x]=2i\sigma_y$，$\{\sigma_x,\sigma_y\}=\{\sigma_y,\sigma_z\}=\{\sigma_z,\sigma_x\}=0$　$|\uparrow_x\rangle=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$

三个本征值都是±1 ⇒ $\hat S_x,\hat S_y,\hat S_z$ 本征值都是 $\pm\frac\hbar2$ 相应本征态 $|\downarrow_x\rangle=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$

在 $\hat S_z$ 或 σ_z 表象中 ← $|\uparrow_y\rangle=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\i\end{bmatrix}$　$|\uparrow_z\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$　$|\downarrow_y\rangle=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\-i\end{bmatrix}$　$|\downarrow_z\rangle=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$

仅考虑两个本征状态：二能级体系，这个体系中任意可观测的力学量一定对应于某个2×2厄米矩阵 $A=bI+a_x\sigma_x+a_y\sigma_y+a_z\sigma_z$

可写作单位矩阵和泡利矩阵实系数线性叠加 $A=b+|a|\cdot\hat a\cdot\vec\sigma=b+|a|\cdot\sigma_a$

σ_a 代表 $\vec\sigma$ 在 $\vec a$ 方向投影 $\hat a=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$ 则 $\sigma_a=\begin{bmatrix}\cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\frac\theta2\\ e^{i\varphi}\sin\theta, & -\cos\theta\end{bmatrix}$

σ_a 本征值±1、相应本征态 $|\uparrow_a\rangle=\begin{bmatrix}e^{-i\frac\varphi2}\cos\frac\theta2\\ e^{i\frac\varphi2}\sin\frac\theta2\end{bmatrix}$　$|\downarrow_a\rangle=\begin{bmatrix}-e^{-i\frac\varphi2}\sin\frac\theta2\\ e^{i\frac\varphi2}\cos\frac\theta2\end{bmatrix}$

$|\uparrow_a\rangle|\downarrow_a\rangle$ 也是算符A的本征态

相应本征值分别为 $b\pm|a|$　任意2×1列矢量可写成 $|\uparrow_a\rangle$ 的形式与 (θ,φ) 一一对应

二能级任意态矢可由球面上一个点表示 $|\uparrow_{\theta,\varphi}\rangle$ 球面称 Bloch 球面

能量表象下：哈密顿量为对角阵.

$\hat H=\begin{bmatrix}H_{11}&0\\0&H_{22}\end{bmatrix}=\frac{H_{11}+H_{22}}{2}+\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\sigma_z=\hbar\Omega+\hbar\omega\sigma_z$

则初态 $|\psi(t=0)\rangle=|\uparrow_{\theta,\varphi}\rangle$，即Bloch球面上 (θ,φ) 点则演化：$|\psi(t)\rangle=e^{-i\Omega t}|\uparrow_{\theta,\varphi+\omega t}\rangle$

$(\theta,\varphi+\omega t)$ 处的点，在 Bloch 球面上绕 z 轴转动 拉莫进动

一维谐振子： ① $\hat H=\hat T+\hat V=\frac{1}{2m}\hat p^2+\frac12m\omega^2\hat x^2$

② 定态薛定谔方程：$\hat H\psi(x)=E\psi(x)\Longleftrightarrow\psi''(x)+(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m\omega^2}{\hbar^2}x^2)\psi(x)=0$

③ 渐近解：$x\to0$，$\psi(x)\sim A\cos(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x)+B\sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x)$

$x\to\pm\infty$，$\psi(x)\sim\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$　$E_n=(n+\frac12)\hbar\omega=\langle H\rangle$

④ 严格解：$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac14}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$

$H_n(\xi)=(-1)^n\exp(\xi^2)\frac{d^n}{d\xi^n}\exp(-\xi^2)$ 称为厄米多项式

能谱特点：a.能谱离散　b.能级等间距：不同于无限深方势阱和原子

c.零点能

氢原子简介： $V(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0|r|}=-\frac{Ze_s^2}{r}$，Z表示原子核电荷数，$e_s=\frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0}}$

$\hat H=\frac{1}{2m_e}\hat p^2+V(r)$，可证明 $\hat H$ 与 $\hat L^2$ 和 $\hat L_z$ 均对易，于是氢原子定态波函数是 $\hat H$、$\hat L^2$、和 $\hat L_z$ 的共同本征函数 ⇒ $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$n=1,2,3,\cdots$　$l=0,1,2,\cdots,n-1$　$m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$

$E_{nlm}=-\frac{mZ^2e_s^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$，能量由n,m共同确定　电子按从能量低→高顺序填充各个能级(本征波函数)

n：主量子数，l：角量子数，m：磁量子数　1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d ⋯

Chap.4. 势垒散射与隧穿

考虑阶跃型势能函数：$V(x)=\begin{cases}0 & x<0\\ U & x\ge0\end{cases}$ ⇒ $[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)]\psi(x)=E\psi(x)$

按本征能量E的大小分别求解ψ

$\psi''(x)+k_1^2\psi(x)=0$　$x<0$　$k_1=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$　$k_2=\frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}$

$\psi''(x)+k_2^2\psi(x)=0$　$x>0$　$\lambda_2=\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$

⇒ $x<0$ 处：$\psi_1(x)=A_1\exp(ik_1x)+A_1'\exp(ik_1x)$，

$x>0$ 区域：$E>U$：$\psi_2(x)=B_1\exp(ik_2x)+B_1'\exp(-ik_2x)$

$0<E<U$：$\psi_2(x)=B_1\exp(-\lambda_2x)+B_1'\exp(\lambda_2x)$

连续性边界条件： $\psi(x=0_-)=\psi(x=0^+)$，$\psi'(x=0_-)=\psi'(x=0^+)$ ⇒ $A_1+A_1'=B_1+B_1'$，$k_1(A_1-A_1')=k_2(B_1-B_1')$

$E>U$ 时 $A_1'=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}A_1$，$B_1=\frac{2k_1}{k_1+k_2}A_1$　几率流密度 $j=\frac{\hbar k}{m}|A|^2$

几率流密度之比 反/入≡R 反射系数 $R=\frac{|A_1'|^2}{|A_1|^2}$ ⟶ $T=\frac{|B_1|^2k_2}{|A_1|^2k_1}$

透/入≡T 反射系数

⇒ $R=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$　$T=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$　$R+T=1$

$0<E<U$：$A_1'=\frac{k_1-i\lambda_2}{k_1+i\lambda_2}A_1$　$B_1=\frac{2k_1}{k_1+i\lambda_2}A_1$　反射系数=1 全反射

虽然全反射，但 $x>0$ 区域内，波函数并不为0，而是以 $B_1\exp(-\lambda_2x)$ 指数衰减

称倏逝波

隧穿与共振隧穿 取 $V(x)=\begin{cases}U & 0<x<a\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases}$

$$\begin{cases}\psi_1(x)=A\exp(ikx)+A'\exp(-ikx) & x<0\\ \psi_2(x)=B\exp(-\lambda x)+B'\exp(\lambda x) & 0<x<a\\ \psi_3(x)=C\exp(ikx)+C'\exp(-ikx) & x>a\end{cases}$$

边界条件(由连续性知)

$x=0$ 处：

$A+A'=B+B'$，$ik(A-A')=-\lambda(B-B')$

$x=a$ 处：

$B\exp(-\lambda a)+B'\exp(\lambda a)=C\exp(ika)$

$-\lambda[B\exp(-\lambda a)-B'\exp(\lambda a)]=ikC\exp(ika)$

解得

$A'=\frac{(\lambda^2+k^2)(e^{\lambda a}-e^{-\lambda a})}{(\lambda+ik)e^{-\lambda a}-(\lambda-ik)^2e^{\lambda a}}A$，$B=\frac{(\lambda-ik)A+(\lambda+ik)A'}{2\lambda}$　$B'=\frac{(\lambda-ik)A'+(\lambda+ik)A}{2\lambda}$

$C=\frac{4i\lambda e^{-ika}}{(\lambda+ik)^2e^{-\lambda a}-(\lambda-ik)^2e^{\lambda a}}A$　发现透射系数 $T=\frac{|C|^2}{|A|^2}\sim\frac{16E}{V}e^{-2\lambda a}$

随势垒厚度a↑而↓

Chap.5. 简并微扰

通过适当近似，把复杂哈密顿量近似为一个有解析解的简单哈密顿量

$\hat H=\hat H^{(0)}+\hat H^{(1)}$　$\hat H^{(0)}$：主要部分　$\hat H^{(1)}$：次要部分，假设 $\hat H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

可严格求解 $|\psi_n^{(0)}\rangle$ 已归一化，在此基础上考虑 $\hat H$ 的本征方程

零级：$\hat H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$　一级展开 $\hat H^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle+\hat H^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

二级展开：$\hat H^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+\hat H^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle=E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

$(\hat H^{(0)}+\hat H^{(1)})(|\psi_n^{(0)}\rangle+|\psi_n^{(1)}\rangle+\cdots)$ 左右两侧在各级小量上均相等

1.非简并微扰

本征能量一阶修正 $E_n^{(1)}=\langle\psi_n^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle$ 是 $\hat H^{(1)}$ 在态 $|\psi_n^{(0)}\rangle$ 的期望值

波函数一阶修正 $|\psi_n^{(1)}\rangle=\sum_{m\ne n}\frac{\langle\psi_m^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}|\psi_m^{(0)}\rangle$

本征能量二阶修正：$E_n^{(2)}=\sum_{m\ne n}\frac{|\langle\psi_m^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$　} 前提 $\hat H^{(0)}$ 不存在简并

a. E_n 的一阶微扰是 $\hat H^{(1)}$ 在未微扰状态 $|\psi_n\rangle^{(0)}$ 中的期望值

b. 只要和 $\hat H^{(1)}|\psi_n\rangle^{(0)}$ 有重叠状态 $|\psi_m\rangle^{(0)}$ 会出现在 $|\psi_n\rangle$ 一阶微扰中

c. 能量与 $E_n^{(0)}$ 越接近本征态 $|\psi_m\rangle^{(0)}$ 倾向于在 $|\psi_n\rangle$ 的一阶微扰中占的比重越大

d. 上述思路可一直进行直到满足所需精度

2.简并微扰

先进行态矢0级修正，再一阶微扰：对角化 $\tilde H^{(1)}_{M\times M}$ 的过程

example $H^{(0)}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&2\end{bmatrix}$　$H^{(1)}=\begin{bmatrix}0&\alpha&0\\ \alpha&0&\beta\\ 0&\beta&\gamma\end{bmatrix}$ 其中α,β,γ都是远小于1的实数

$E_{11}^{(0)}=E_{12}^{(0)}=E_1^{(0)}=1$　$E_2^{(0)}=2$

有简并的对角化子矩阵 $\tilde H^{(1)}_{2\times2}=\begin{bmatrix}0&\alpha\\ \alpha&0\end{bmatrix}$　解本征方程 $\tilde H^{(1)}_{M\times M}|\phi^{(0)}_{nm}\rangle=E^{(1)}_{nm}|\phi^{(0)}_{nm}\rangle$

⇒ $E_{11}^{(1)}=\alpha$，$E_{12}^{(1)}=-\alpha$ 能量一级修正　$|\phi^{(0)}_{nm}\rangle$ 可写作本征列向量 (C_m)

进一步计算 $E_{11}^{(1)}$ 与 $E_{12}^{(1)}$ 相对应的本征态

$(C_1)=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\Rightarrow|\phi_1^{(0)}\rangle=\frac1{\sqrt2}\{|\psi_1^{(0)}\rangle+|\psi_2^{(0)}\rangle\}=\frac1{\sqrt2}\left\{\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}\right\}=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$

$(C_2)=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}\Rightarrow|\phi_1^{(0)}\rangle=\frac1{\sqrt2}\{|\psi_1^{(0)}\rangle-|\psi_2^{(0)}\rangle\}=\frac1{\sqrt2}\left\{\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}\right\}=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\-1\\0\end{bmatrix}$

用 $|\phi_{11}^{(0)}\rangle=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$　$|\phi_{12}^{(0)}\rangle=\frac1{\sqrt2}\begin{bmatrix}1\\-1\\0\end{bmatrix}$ 和 $|\psi_2^{(0)}\rangle=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$ 作为新基矢展开哈密顿量为 $H'^{(0)}$　$H^{(1)}$

⇒ $H'^{(0)}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&2\end{bmatrix}$　$H'^{(1)}=\begin{bmatrix}\alpha&0&\frac{\beta}{\sqrt2}\\ 0&-\alpha&-\frac{\beta}{\sqrt2}\\ \frac{\beta}{\sqrt2}&-\frac{\beta}{\sqrt2}&\gamma\end{bmatrix}$ ⇒ 能量一阶修正为 $H'^{(1)}$ 对角元 $E_{11}^{(1)}=\alpha$. $E_{12}^{(1)}=-\alpha$. $E_2^{(1)}=\gamma$

进而利用 $H'^{(1)}$ 非对角元得态矢一级修正

求态矢一阶修正：重新分割 $\hat H$

$\tilde H^{(0)}=\begin{bmatrix}1+\alpha&&\\&1-\alpha&\\&&2\end{bmatrix}$，$\tilde H^{(1)}=\begin{bmatrix}0&0&\beta/\sqrt2\\0&0&-\beta/\sqrt2\\ \beta/\sqrt2&-\beta/\sqrt2&\gamma\end{bmatrix}$　消除简并 做微扰展开

在 100, 010, 001 表象下做微扰

确定一个周期的布拉维格子

即确定这个结构在哪些矢量下平移不变

n维周期结构 就是一个基本单元在n个不同方向上周期重复　a_1 θ a_2 倾斜，非下述情况

二维布拉维格子：　六角：$a_1=a_2$. $\theta=120$　矩形 $a_1\ne a_2$　$\theta=90°$

a_1 a_2 正方 $a_1=a_2$　$\theta=90°$　有心矩形：$2a_2\cos\theta=a_1$. $\theta\ne60°$

但对称性是指布拉维格子的对称性，因为每个布拉维格点对应于基本周期单元，即使布拉维格点有某种对称性，但若周期单元形状无对称性，整个周期结构也不对称

元胞与晶胞 三维晶体：$\{a_1,a_2,a_3\}$ 所张成的平行六面体称作晶体元胞

二维晶体：$\{a_1,a_2\}$ 所张成的平行四边形是元胞. 一维：a_1 线段(区间)是元胞

元胞是晶体最小重复单元

用 $[a_1,a_2,a_3]$ 表示晶向　用 $(h_1\ h_2\ h_3)$ 表示晶面　$|h_1|=\frac{1}{|a_1|}$　$|h_2|=\frac{1}{|a_2|}$　$|h_3|=\frac{1}{|a_3|}$

简单立方晶格中一个晶面密勒指数是和晶面法线的晶向指数完全相同的

倒易点阵： $\vec b_1=2\pi\cdot\frac{\vec a_2\times\vec a_3}{\vec a_1\cdot(\vec a_2\times\vec a_3)}$　$\vec b_2=2\pi\frac{\vec a_3\times\vec a_1}{\vec a_1\cdot(\vec a_2\times\vec a_3)}$　$\vec b_3=2\pi\frac{\vec a_1\times\vec a_2}{\vec a_1\cdot(\vec a_2\times\vec a_3)}$

原子在理想状态下倾向于形成周期排列

①、原子的电子云(波函数)总有一定对称性. ∪完全对称性 ∪ 离散对称性

②、周期性排列的固体物质叫做晶体

近似： ①、绝热近似：电子和离子的运动分开考虑，电子运动比离子更快，以离子坐标作为电子系统参数　②、先不考虑离子体系运动，认为离子固定在周期格点上

③ 平均场近似：认为电子-电子相互作用为一种平均势场，合并到离子-电子相互作用中

④ 电子波函数直接分离变量 $\psi_e(r_1,r_2,\cdots)=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\cdots$ 多电子薛定谔方程转化为一个个独立单电子薛定谔方程 $\hat H=(-\frac{\hbar^2}{2m})\nabla^2+V(r)$，$\hat H\psi(\vec r)=E\psi(\vec r)$

⑤ 由于电子是费米子，多电子波函数写成反对称形式 不影响薛定谔方程分离变量

一维周期势场的解

①、方程 $\hat H=(-\frac{\hbar^2}{2m})\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$，$\hat H\psi(x)=E\psi(x)$. 其中 $V(x+a)=V(x)$

②、V是周期函数：$V(x)=\sum_nV_n\exp(iG_nx)$，其中 $G_n=nG=\frac{2\pi n}{a}$，n取所有整数

③、将代求波函数写成平面波叠加形式 $\psi(x)=\int c(k')\exp(ik'x)dk'$

④、将②③代入方程：并与平面波 $\exp(-ik'x)$ 内积，

得 $\frac{\hbar^2k^2}{2m}c(k)+\sum_nV_nc(k-G_n)=E\cdot c(k)$ 解出c(k)即求解薛定谔方程

⑤、对于任意k，c(k)只与 $c(k-G_n)$ 产生联系，则给定k，把波矢 $k-G_n$ 这一组平面波适当叠加，一定是系统的波函数，叠加系数由④求

⑥、波函数：$\psi_k(x)=\sum_nC_{k,n}\exp\{i(k-G_n)x\}=\exp(ikx)\sum_nC_{k,n}\exp(-iG_nx)$

$=U_k(x)\exp(ikx)$　其中 $U_k(x)=U_k(x+a)$ 是周期函数

⑦、即一维定态波函数是受周期调制的平面波：$U_k(x)$ 体现离子对电子束缚

$\exp(ikx)$ 体现电子离开离子自由运动的趋势　称布洛赫定理

本征波函数 $\psi_{n,k}(x)=U_{n,k}(x)\exp(ikx)$　本征能量 $E_{n,k}$ 或写成 $E_n(k)$

同时存在离散&连续 ⇒ 有一个个能带　发现 $\{(n,k+G_n)\}$ 与 $\{(n,k)\}$ 完全相同

为避免重复考虑 波矢需限制在宽度为G的区间内：(第一)布里渊区 $(-\frac G2,\frac G2)$

一般周期格点的Fourier展开：倒易点阵

a. 一维周期结构的空间频谱是离散的，这些离散波矢 $G_n=nG=\frac{2\pi n}{a}$

满足 $R_nG_{n'}=2\pi nn'$，其中 $R_n=na$ 是周期格点的位置

b. 三维下，$R_{l,m,n}=l\vec a+m\vec b+n\vec c$　同样有 $R_{lmn}\cdot G_{l'm'n'}=2\pi(ll'+mm'+nn')$

现有 $G_{l'm'n'}=l'\vec k_a+m'\vec k_b+n'\vec k_c$　其中：$\vec k_a=\frac{2\pi\,\vec b\times\vec c}{\vec a\cdot(\vec b\times\vec c)}$　$\vec k_b=\frac{2\pi\,\vec c\times\vec a}{\vec a\cdot(\vec b\times\vec c)}$

$\vec k_c=\frac{2\pi\,\vec a\times\vec b}{\vec a\cdot(\vec b\times\vec c)}$　这些离散 $G_{l'm'n'}$ 组成周期点阵 称为原来周期点阵 R_{lmn} 的倒易点阵　c. 三维情况 布洛赫定理依然成立，并且波矢应当被限制在(第一)布里渊区内，只不过三维的(第一)布里渊区一般是个多面体

d. 二维点阵：$R_{lm}=l\vec a+m\vec b$　倒易点阵 $G_{l'm'}=l'\vec k_a+m'\vec k_b$，其中

$\vec k_a=\frac{2\pi\,\vec b\times\vec n}{\vec n\cdot(\vec a\times\vec b)}$　$\vec k_b=\frac{2\pi\,\vec n\times\vec a}{\vec n\cdot(\vec a\times\vec b)}$　n为二维平面法向

电子能带 由Bloch定理，周期势场中电子波函数 $\psi_{n,k}(x)=U_{n,k}(x)\exp(ikx)$

电子波函数需要一个离散下标n和一个连续下标k，电子状态形成一个个能带

离散的n代表第n个能带，对给定的n，不同的k表示第n个能带内不同电子状态

① 对于给定的能带（布洛赫函数中的下标n给定），每个电子状态由k标识，这个k称为布洛赫波矢

② 实际的晶体尺寸是有限的，从而k的取值并不是连续的

③ 由于晶体尺寸虽然有限，但是依然比原子的尺度大很多，我们可以用周期性边界条件，从而$\exp(ikL)=1$，即k只能取离散值$k_m=\frac{2\pi}{L}m$

④ 又根据5.2节，k的取值限定在区间（-G/2,G/2）以内，所以一个能带内包含的k的个数是有限的，为$G/\frac{2\pi}{L}=\frac{2\pi}{a}/\frac{2\pi}{L}=L/a=N$，即平均每个元胞提供一个不同的k状态

⑤ 考虑到电子具有自旋，状态个数需要翻倍，所以对于具有N个元胞的晶体，每个能带具有2N个不同的量子状态

⑥ 根据泡利不相容原理，电子按照能量从低到高的顺序填充这些能带，直到填满，再填充更高的能带

⑦ 全满的能带无法导电、部分填充的才可以.

⑧ 能带部分填充：导体　**带隙的产生：准平面波近似**

① 假设V(x)非常小，以至于系统的本征波函数几乎就是平面波

② 系统色散关系E(k)也应该接近于平面波的色散关系：$E\cong\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

③ 但是V毕竟不完全等于零，所以Bloch定理应该成立，电子的状态应该是由两个下标(n,k)标示，其中k位于第一布里渊区(-π/a, π/a)范围内。这说明我们需要把自由电子的色散关系“折叠”到第一布里渊区内，即原本波矢为k+mG的平面波，应该看作波矢为k，且取某个n的布洛赫函数。

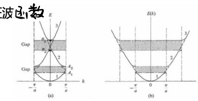
④ 在布里渊区边界处，k=π/a的平面波与k=-π/a的平面波相差G，所以这两个平面波分量在同一个基本方程里。由于它们的零级（平面波）能量相同，在用微扰方法求解基本方程的时候，需要做简并微扰，即先对这两个简并波函数组成的子空间进行对角化

⑤ 定义k=π/a的平面波为态矢$|+\rangle$，k=-π/a的平面波为态矢$|-\rangle$，在这个（二维）子空间内，

$$M=\begin{bmatrix}\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+V_0 & V_{-1}\\ V_1 & \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+V_0\end{bmatrix}=\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+V_0\right)I+Re(V_1)\sigma_x+Im(V_1)\sigma_y$$

⑥ 对角化M，可以得到两个本征值为$\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}+|V_1|$和$\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}-|V_1|$，即微扰的结果是两个状态的简并消除，产生了一个大小为$2|\langle+|V|-\rangle|$的能量差，在原本没有间隙的能带中打开间隙

势能为$V(x)=V_0\cos(\frac{2\pi}{a}x)$，$M=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}I+\frac{V_0}{2}\sigma_x$，修正后的本征波函数为$\psi_1(x)\sim\cos(\frac{\pi}{a}x)$，$\psi_2(x)\sim\sin(\frac{\pi}{a}x)$，带隙为$V_0$



① 准平面波近似是假设电子自由运动的趋势非常强，从而离子实对它的束缚称为微扰项。另外一种极端情况是与之相反，离子实对电子的束缚作用非常强，而电子自由运动的趋势称为微扰项　**带隙的产生：紧束缚近似**

② 当离子实对电子的束缚作用非常强时，我们在零级近似中，可以把电子受到每个离子实的束缚态（就是原子波函数）作为电子的零级波函数，即单原子哈密顿量作为零级哈密顿量$\hat H_0$，所有其余项$\hat H-\hat H_0$作为微扰

③ 由于每个原子是相同的，并且具有一个个分立的能级，这些能级是高度简并的。由简并态微扰的内容可知，波函数和能量的最低阶修正是做简并微扰，即将这些简并的状态进行线性组合。

④ 记离子实位于中心点时，某个能级的单原子波函数为$\Phi(x)$，那么不同原子的单原子波函数为$\Phi(x-a_n)$，其中a_n为离子实的位置。它们是简并的，都具有能量E_0

⑤ 根据简并微扰方法，我们把波函数的零级修正写作：

$$\psi(x)=\sum_n c_n\Phi(x-a_n)$$

根据布洛赫定理，$\psi(x+a_m)=\exp(ika_m)\psi(x)$，有$c_n=\exp(ika_n)$，即$\psi(x)=\sum_n\exp(ika_n)\Phi(x-a_n)$ (作业)

⑥ 下一步是要把哈密顿量对$\Phi(x-a_n)$展开，然后对角化求得c_n及本征能量。我们假设离子实对电子的束缚很紧密，从而只有相邻的两个波函数才会发生交叠，即哈密顿量只对于相邻的两个$\Phi(x-a_n)$才具有非零的矩阵元，并且由于哈密顿量的周期性，这个矩阵元不依赖于n

⑦ 于是我们有

$$\hat H=\begin{bmatrix}\ddots&\ddots&0&0&0\\ \ddots&\ddots&\ddots&0&0\\ 0&t&E_0&t&0\\ 0&0&\ddots&\ddots&\ddots\\ 0&0&0&\ddots&\ddots\end{bmatrix}$$

⑧ 把本征波函数代入，得到$E=E_0+2t\cos(ka)$

即原本高度简并的能级，被扩展为连续的能带，能带的宽度为4t

⑨ 能带宽度体现了单电子波函数的交叠程度，交叠越多，能带越宽

有效质量

e. 有效质量对应于色散关系的曲率，它反映了晶格对电子的作用。我们可以想象电子的波函数（布洛赫函数）是一个包含了多个平面波分量的“平面波”，这些多个平面波分量是由于电子与晶格的周期结构之间散射造成的（注意不是与晶格振动之间的散射）。

f. 有效质量越小，说明能带色散得越厉害，从而能带宽度也越宽。根据紧束缚模型，能带宽度取决于t，即相邻原子波函数的交叠（电子离开离子实的趋势），t越大，能带宽度越宽，电子越倾向于自由运动，从而有效质量也越小；根据自由电子近似，能带的宽度与V的大小负相关，能带宽度越宽，说明V越小，也同样得出电子越倾向于自由运动。这些从不同角度得到的定性结论是相互一致的。

g. 有效质量的引入使得我们在能带的底部或者顶部（色散关系的一阶导数为零），可以回归到自由电子模型，把周期势场的作用完全体现在电子质量的重新定义上

h. 注意能带顶部，有效质量是负数

布洛赫波包：①、每个布洛赫函数相当于携带一组平面波，这些平面波随时间演化并不由自由电子能量 $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ 给出 而是由布洛赫函数本征能量 E(k) 给出

②、每个平面波分量给出同样速度 $V_g=\frac1\hbar\nabla_kE(k)$ 布洛赫包的群速度

③、外力作用下状态变化 外力F作用在波包上Δt，它做的功 $\Delta W=F\cdot\Delta r=F\cdot V_g\Delta t$

④、电子能量变化等于外力做功 $\Delta W=\Delta E=V_g\cdot\Delta(\hbar k)$

从而 $F=\frac{d}{dt}(\hbar k)$ 称 $\hbar k$ 为准动量

外力改变k，从而改变群速度　$a=\frac{d}{dt}V_g=(\nabla_kV_g)\frac{dk}{dt}=\frac1\hbar(\nabla_kV_g)\cdot F$

简写 $a=[\frac1m]\cdot F$　$[\frac1m]$ 对应于~~经典粒子~~质量倒数 ⇒ 倒有效质量

$\frac1{m^*}=\frac1{\hbar^2}\frac{\partial^2E}{\partial k^2}$　$m_x^*\cdot a_x=F_x$，$m_y^*a_y=F_y$　$m_z^*a_z=F_z$

能带底or顶部色散关系 $E(k)=E(k_0)+\frac{\hbar^2}{2m_x^*}k_x^2+\frac{\hbar^2}{2m_y^*}k_y^2+\frac{\hbar^2}{2m_z^*}k_z^2$

恒定电场下，群速度是色散曲线导数

电子群速度周期性地从正→负，对应实空间中波包来回周期振荡

空穴： ① 空穴速度=电子速度，② 空穴动量=负的电子动量，③ 空穴有效质量=负的 m_n^*

因带顶电子 $m_n^*<0\Rightarrow m_p^*>0$

声子： 离子实体系哈密顿量二次项可对角化为一个个独立谐振子，每个谐振子对应于一种独立的晶格振动模式　一种模式看作一种声子　声子数目取决于振动幅度

温度越高，振幅越大，声子越多

Chap.6.

全同粒子. 无法区别的粒子，不可分辨：$\hat P_{ij}\psi=C\psi$ $\begin{cases}C=1 & \text{玻色子}\to\text{自旋为整数}\\ C=-1 & \text{费米子}\to\text{自旋为半整数}\end{cases}$

交换算符 $\hat P_{ij}$：$\hat P_{ij}\psi(\cdots r_i,\cdots,r_j\cdots)=\psi(\cdots r_j,\cdots,r_i\cdots)$，$\hat P_{ij}\hat P_{ij}=I$

对于任意多粒子函数，可构造完全对称波函数它满足C=+1：$\phi_S=C\cdot\sum_PP\{\psi(r_1,r_2\cdots)\}$

C是归一化因子，P是各种重排操作，同理构造C=-1：$\phi_A=C\cdot\sum_P(-1)^PP\{\psi(r_1,r_2\cdots)\}$

两个粒子：$\phi_S(r_1,r_2)\sim\psi(r_1,r_2)+\psi(r_2,r_1)$　$\phi_A(r_1,r_2)\sim\psi(r_1,r_2)-\psi(r_2,r_1)$

三个粒子：$\phi_S(r_1,r_2,r_3)=\sum\{\psi(r_1,r_2,r_3)\}P$　$\phi_A=\psi(r_1,r_2,r_3)+\psi(r_2,r_3,r_1)+\psi(r_3,r_1,r_2)-\psi(r_2,r_1,r_3)-\psi(r_3,r_2,r_1)-\psi(r_1,r_3,r_2)$

① N个全同粒子之间如果没有相互作用，它们的哈密顿量一定可以写成每个粒子哈密顿量的和；当每个粒子的哈密顿量具有相同的形式时，有
$\hat H=\hat H=\sum_i\hat H^{(0)}(\nabla_i,\boldsymbol r_i)$，其中$\boldsymbol r_i$是第i个粒子的位置

② 这时，我们可以用单粒子的波函数去组成多粒子的波函数

③ 首先对角化$\hat H^{(0)}$：$\hat H^s\psi_j(\boldsymbol r)=E_j^s\psi_j(\boldsymbol r)$，　j=1,2,…M

④ 然后写出分离变量形式的多粒子波函数

$$\psi_{\{j_1,j_2,\dots j_N\}}(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2,\dots\boldsymbol r_N)=\psi_{j_1}(\boldsymbol r_1)\psi_{j_2}(\boldsymbol r_2)\dots=\prod_i\psi_{j_i}(\boldsymbol r_i)$$

其中i=1,2,…,N，j_i在1,2,…M中取值，并且互相之间可以相等也可以不相等

⑤ 代回多粒子的薛定谔方程，显然这个波函数对应的本征能量是$E_{j_1}^s+E_{j_2}^s+\cdots E_{j_N}^s$

⑥ 最后，根据粒子是玻色子还是费米子，把$\psi_{\{j_1,j_2,\dots j_N\}}(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2,\dots\boldsymbol r_N)$对称化或者反对称化

⑦ 由于对称化和反对称化的过程不改变波函数分离变量的形式，只是重新排列了顺序，所以对称化或反对称化后的本征能量仍然是$E_{j_1}^s+E_{j_2}^s+\cdots E_{j_N}^s$，即每个单电子波函数能量之和　对称：C=1　反对称 C=-1

⑧ 注意选定了集合$\{j_1,j_2\dots j_N\}$，多粒子波函数也就确定了；每一个不同的$\{j_1,j_2\dots j_N\}$集合都分别给出一个不同的多粒子波函数；所以有时候也直接把$\psi_{\{j_1,j_2\dots j_N\}}(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2\dots\boldsymbol r_N)$记作态矢$|j_1,j_2\dots j_N\rangle$ (这里不同顺序的$j_1,j_2\dots j_N$对应同一个态矢，因为在对称化和反对称化的过程中，波函数对所有可能的顺序做了求和)　两个全同玻色子

① 假设$\hat H^s$有三个本征函数：$\psi_1(\boldsymbol r)$，$\psi_2(\boldsymbol r)$，$\psi_3(\boldsymbol r)$

② 态矢$|1,1\rangle$对应的“种子”波函数为$\psi_{\{1,1\}}(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2)=\psi_1(\boldsymbol r_1)\psi_1(\boldsymbol r_2)$
由于是玻色子，对称化得到最终波函数
$\phi_S(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2)\sim\psi(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2)+\psi(\boldsymbol r_2,\boldsymbol r_1)$
$=\psi_1(\boldsymbol r_1)\psi_1(\boldsymbol r_2)+\psi_1(\boldsymbol r_2)\psi_1(\boldsymbol r_1)\sim\psi_1(\boldsymbol r_1)\psi_1(\boldsymbol r_2)$

③ 态矢$|1,2\rangle$对应的“种子”波函数为$\psi_{\{1,2\}}(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2)=\psi_1(\boldsymbol r_1)\psi_2(\boldsymbol r_2)$
由于是玻色子，对称化得到最终波函数
$\phi_S(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2)\sim\psi(\boldsymbol r_1,\boldsymbol r_2)+\psi(\boldsymbol r_2,\boldsymbol r_1)=\psi_1(\boldsymbol r_1)\psi_2(\boldsymbol r_2)+\psi_1(\boldsymbol r_2)\psi_2(\boldsymbol r_1)$

① 假设$\hat{H}^s$有三个本征函数：$\psi_1(\boldsymbol{r})$，$\psi_2(\boldsymbol{r})$，$\psi_3(\boldsymbol{r})$

② 态矢|1,1⟩对应的“种子”波函数为$\psi_{\{1,1\}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)$
由于是费米子，反对称化得到最终波函数
$$\phi_A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\sim\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)-\psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)=\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)-\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\psi_1(\boldsymbol{r}_1)=0$$

③ 波函数为零，说明粒子存在的几率处处为零，即不存在。这说明两个费米子不可能同时占据一个相同的量子状态。这就是泡利不相容原理

④ 换句话说，对于费米子，集合$\{j_1,j_2,\dots j_N\}$中的元素必须两两不相同

① 例如，态矢|1,2⟩对应的“种子”波函数为$\psi_{\{1,2\}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_2(\boldsymbol{r}_2)$
由于是费米子，反对称化得到最终波函数
$$\phi_A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\sim\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)-\psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)$$
$$=\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_2(\boldsymbol{r}_2)-\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\psi_2(\boldsymbol{r}_1)=\begin{vmatrix}\psi_1(\boldsymbol{r}_1)&\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\\\psi_2(\boldsymbol{r}_1)&\psi_2(\boldsymbol{r}_2)\end{vmatrix}$$

两全同费米子

② 依此类推

⑦ 一般地，假设有N个全同费米子，它们的波函数应该写作
$$\phi_{A,\{j_1,j_2,\dots j_N\}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\dots\boldsymbol{r}_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_{j_1}(\boldsymbol{r}_1)&\psi_{j_1}(\boldsymbol{r}_2)&\dots&\psi_{j_1}(\boldsymbol{r}_N)\\\psi_{j_2}(\boldsymbol{r}_1)&\psi_{j_2}(\boldsymbol{r}_2)&\dots&\psi_{j_2}(\boldsymbol{r}_N)\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\\psi_N(\boldsymbol{r}_{j_N})&\psi_N(\boldsymbol{r}_{j_N})&\dots&\psi_N(\boldsymbol{r}_{j_N})\end{vmatrix}$$
这也称为Slater行列式

①统计物理回顾
熵：代表一个宏观状态所包含的微观状态个数 越大，宏观状态出现几率越大
玻色子：声子，光子，磁振子，等离激元 ，费米子：电子，空穴，质子，中子

①、玻色－爱因斯坦分布 $\langle n_i\rangle=\frac{1}{\exp(\frac{E_i-\mu}{kT})-1}$ He⁴流与超导．绝对0度下，所有玻色子占据单粒子状态最小那个
当T小于某临界温度时 化学势非常接近单粒子状态能量最小值．这时单粒子基态占据大量粒子：玻色－爱因斯坦凝聚

②费米－狄拉克分布 $\langle n_i\rangle=\frac{1}{\exp(\frac{E_i-\mu}{kT})+1}$ 所有单粒子状态平均占据数都小于一 与泡利不相容原理兼容
化学势μ：费米能级

③.麦克斯韦分布：$\langle n_i\rangle=\exp(-\frac{E_i-\mu}{kT})$ 温度很高时①②的近似

含时微扰：
$\{|n\rangle\}$ 正交归一完备基矢 $|\psi\rangle=\sum_m C_m(t)\exp(-\frac{iE_mt}{\hbar})\cdot|m\rangle$
代入方程：$i\hbar\frac{d}{dt}C_n(t)=\sum_m C_m(t)\,H'_{nm}\exp(-\frac{i(E_m-E_n)t}{\hbar})$
展开：$\frac{d}{dt}C_n^{(0)}(t)=0$ $\quad i\hbar\frac{d}{dt}C_n^{(1)}(t)=\sum_m C_m^{(0)}(t)\,H'_{nm}\exp(-\frac{i(E_m-E_n)t}{\hbar})$
假如初始位于未微扰本征态k ⇒ $C_n^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{nk}(\tau)\exp(-i\omega_{kn}\tau)d\tau$

①. $H'(t)$不依赖于时间 　从状态k->n 几率：
$C_n^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}H'_{nk}\int_0^t\exp(-i\omega_{kn}\tau)d\tau$ $\quad W=|C_n^{(1)}(t)|^2=\frac{1}{\hbar^2}|H'_{nk}|^2\frac{\sin^2(\omega_{kn}t/2)}{(\omega_{kn}/2)^2}$
周期性增大，减小，往复 $\quad\omega_{kn}=(E_k-E_n)/\hbar$

②末态不是分立能级，而是连续状态，总跃迁几率
$W=\frac{1}{\hbar^2}|H'_{nk}|^2\int D(\varepsilon)\frac{\sin^2(\omega_{kn}t/2)}{(\omega_{kn}/2)^2}d\varepsilon=\frac{2\pi t}{\hbar}|H'_{nk}|^2D(\varepsilon=E_k)$ ∝ t
不再周期振荡，而是按照一个稳定速率发生跃迁，大量能量接近 终态效应互相叠加造成的，指数衰减关系

③ $\hat H(t)$是余弦振荡的． $\hat H'(t)=2\hat F\cos(\omega t)=\hat F(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$
$W_{nk}\cong\frac{1}{\hbar^2}|F'_{nk}|^2[\delta(\omega_{kn}-\omega)+\delta(\omega_{kn}+\omega)]=\frac{2\pi t}{\hbar}|F_{nk}|^2[\delta(E_k-E_n-\hbar\omega)+\delta(E_k-E_n+\hbar\omega)]$
$W_{nk}=W_{kn}$ 　吸收发射：受激吸收，发射，受激辐射

作业．从0426开始：

0426:
①证明 $\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=-i\sigma_x\sigma_y\sigma_z=1$， $[\sigma_x,\sigma_y]=2i\sigma_z$，$[\sigma_y,\sigma_z]=2i\sigma_x$，
$[\sigma_z,\sigma_x]=2i\sigma_y$ ，$\{\sigma_x,\sigma_y\}=\{\sigma_y,\sigma_z\}=\{\sigma_z,\sigma_x\}=0$
②、证明 $(\vec\sigma\cdot\vec a)(\vec\sigma\cdot\vec b)=\vec a\cdot\vec b+i\vec\sigma\cdot(\vec a\times\vec b)=a_xb_x+a_yb_y+a_zb_z+i\sigma_z(a_xb_y-a_yb_x)$
$=(a_x\sigma_x+a_y\sigma_y+a_z\sigma_z)(b_x\sigma_x+b_y\sigma_y+b_z\sigma_z)$，又知$[\sigma_x,\sigma_y]=2i\sigma_z$， $\{\sigma_x,\sigma_y\}=0$
$\Rightarrow\sigma_x\sigma_y=\frac{[\ ]+\{\ \}}{2}=i\sigma_z$ 代入计算即可

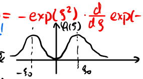
0508.
把二能级体系任意量子态对应到Bloch球面上 $(\theta,\varphi)\sim\begin{bmatrix}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\\e^{i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}$
验证．①、(θ,φ)和$(\theta,\varphi+2\pi)$代表同一点&量子状态
②.$(\pi+\theta,\varphi)$和$(\pi-\theta,\pi+\varphi)$ …③.(θ,φ)对面的点 $|\pi+\theta,\varphi\rangle$．证明这两点分别对应于力学量 $\sigma_n=\sin\theta\cos\varphi\,\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\,\sigma_y+\cos\theta\,\sigma_z$ 的本征值为+1和−1本征态
①. $|\theta,\varphi\rangle=\begin{bmatrix}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\\e^{i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}$ $\quad|\theta,\varphi+2\pi\rangle=\begin{bmatrix}e^{-i(\frac{\varphi}{2}+\pi)}\cos\frac{\theta}{2}\\e^{i(\frac{\varphi}{2}+\pi)}\sin\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}=-|\theta,\varphi\rangle$
②.同理可证 　③. $\sigma_n=\begin{bmatrix}\cos\theta&\sin\theta\,e^{-i\varphi}\\\sin\theta\,e^{i\varphi}&-\cos\theta\end{bmatrix}$ 与本征值对应本征矢设为$\binom{a}{b}$
$\sigma_n\cdot\binom{a}{b}=\binom{a}{b}\Rightarrow\frac{a}{b}=\frac{e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}}{e^{i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}}$ ↳取作 $|\theta,\varphi\rangle$
与本征值−1对应的$\binom{a'}{b'}$满足 $\frac{a'}{b'}=-\frac{e^{-i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}}{e^{i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}}=|\pi+\theta,\varphi\rangle$

0510
质量为m的单个粒子在一维恒定势场$V(x)=V_0$中运动
a、该粒子定态薛定谔方程的解是什么？ b、假如粒子在t=0时刻波函数为ψ(x) 则任意时刻波函数是什么？
a. $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+V_0\psi(x)=E\psi(x)\Rightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)=(E-V_0)\psi(x)$，与自由电子定态波方程没有本质区别 本征波函数 $\psi_k(x)=e^{ikx}$ k取实数
对应本征能量 $E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V_0$
b. 对ψ(x)做平面波展开 Fourier变换．$\psi(x)=\int c(k)e^{ikx}dk$
则 $\psi(x,t)=\int c(k)e^{ikx}e^{-\frac{i}{\hbar}E_kt}dk=\int c(k)e^{ikx}e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}e^{-\frac{i}{\hbar}V_0t}dk$

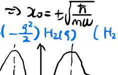
0513
已知金属Li在T=78K时自由电子浓度为$4.7\times10^{22}cm^{-3}$，求其费米波矢 k_F和费米能 ε_F
$k_F=(3\pi^2n)^{\frac13}$ ，$E_F=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}$

0515.
电子在不同能级间跃迁可伴随光的发射或吸收，而发射或吸收的光的波长λ和两个能级间能量差值ΔE关系：$\Delta E=hc/\lambda$ 假设一个量子点是边长3nm的正方体盒子．计算其中电子在基态(m=n=l=1)的能量和第一激发态(m=1, n=1, l=2)的能量．并计算这两个能量差值对应多少波长的光
m,n,l 取正整数
本征能量公式：边长为a 正方体量子点能级为 $E_{m,n,l}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(m^2+n^2+l^2)$
代入计算即可

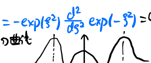
0517. ①分别求谐振子处在第一和第二激发态时概率最大的位置
②.分别计算一维谐振子处于基态时动能和势能的期望值
谐振子波函数见上．$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac14}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$
令 $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ ，$A=\frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}$ $\quad H_1(\xi)=-\exp(\xi^2)\cdot\frac{d}{d\xi}\exp(-\xi^2)=2\xi$
第一激发态：$\psi_1(x)=A_1\exp(-\frac{\xi^2}{2})H_1(\xi)$ ←
⇒ $\rho_1(\xi)=|\psi_1|^2\sim\xi^2\exp(-\xi^2)$ 定性画出曲线



几率最大处应满足 $\frac{d\rho_1(\xi)}{d\xi}=0$．即 $2\xi\exp(-\xi^2)-2\xi^3\exp(-\xi^2)=0$
解得 $\xi_0^2=1$．即 $\xi_0=\pm1$ ⇒ $x_0=\pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$
第二激发态$\psi_2(x)=A_2\exp(-\frac{\xi^2}{2})H_2(\xi)$ $\quad(H_2(\xi)=-\exp(\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2}\exp(-\xi^2)=4\xi^2-2)$
$P_2(\xi)=|\psi_2|^2\sim[\psi_2(\xi)]^2$



$P_2(\xi)$曲线



定性画出$\psi_2(\xi)$曲线．
ξ_0点应满足 $\frac{d\psi}{d\xi}=0$
解得 $\xi_0^2=\frac52$．即 $\xi_0=\pm\sqrt{\frac52}$ notice：须验证 $\psi_2(\pm\xi_0)$与$\psi_2(0)$二者之间大小
得出结论 $x_0=\pm\sqrt{\frac{5\hbar}{2m\omega}}$ 处几率max
②. 基态 $\psi_0(x)=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$ (已归一化)． $V=\frac12m\omega^2x^2$
$\langle V\rangle=\frac12m\omega^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^2|\psi_0(x)|^2dx=\frac12m\omega^2(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac12}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\exp(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2)dx$
$=\frac12m\omega^2\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}[\frac{\partial}{\partial\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha x^2}dx]_\alpha=\frac14\hbar\omega$
$\langle T\rangle=\langle H\rangle-\langle V\rangle=\frac12\hbar\omega-\frac14\hbar\omega=\frac14\hbar\omega$

0524.
证明氢原子的哈密顿量与$\hat L^2$和$\hat L_z$均对易
$\hat H=\frac{\hat p^2}{2m}+\hat V(r)$ 其中 $V(r)\sim-\frac1r$ 与θ,φ无关 而$\hat L_z$和$\hat L^2$均是对θ,φ的微分算符
因此 $[\hat V(r),\hat L_z]=0$ ，$[\hat V(r),\hat L^2]=0$ 运用 $[\hat A\hat B,\hat C]=\hat A[\hat B,\hat C]+[\hat A,\hat C]\hat B$
而 $[\hat p^2,\hat L_z]=[P_xP_x+P_yP_y+P_zP_z,\ xP_y-yP_x]=[P_xP_x+P_yP_y,\ xP_y-yP_x]$
$=\hat P_x[\hat P_x,x\hat P_y-y\hat P_x]+[\hat P_x,x\hat P_y-y\hat P_x]P_x+\hat P_y[\hat P_y,x\hat P_y-y\hat P_x]+[\hat P_y,x\hat P_y-y\hat P_x]\hat P_y$
$=P_x[P_x,x]P_y+[P_x,x]P_yP_x-P_y[P_y,y]P_x-[P_y,y]P_xP_y$
$=-i\hbar P_xP_y-i\hbar P_yP_x+i\hbar P_yP_x+i\hbar P_xP_y=0$ ⇒由于等价性 同理易知 $[\hat p^2,\hat L_x]=[\hat p^2,\hat L_y]=0$
$\Rightarrow[\hat p^2,\hat L^2]=[\hat p^2,\hat L_x\hat L_x+\hat L_y\hat L_y+\hat L_z\hat L_z]=0\Rightarrow[\hat H,\hat L^2]=0$ ，$[\hat H,\hat L_z]=0$

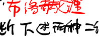
0529.
证明E<U，势垒求解隧穿波．根据FTIR原理，x<0区域入射平面波 可在x>a区域透射出 (一些计算)：
由e有 $Be^{-\lambda a}=\frac12(1-\frac{ik}{\lambda})e^{ika}\cdot C$ ，$B'\cdot e^{\lambda a}=\frac12(1+\frac{ik}{\lambda})e^{ika}\cdot C$
代入d：$ik(A+A')+ik(A-A')=2ikA=ik(B+B')-\lambda(B-B')=(ik-\lambda)B+(ik+\lambda)B'$
$=\frac12(ik-\lambda)(1-\frac{ik}{\lambda})e^{\lambda a}e^{ika}\cdot C+\frac12(ik+\lambda)(1+\frac{ik}{\lambda})e^{-\lambda a}e^{ika}\cdot C$
$=[(\lambda+ik)^2e^{-\lambda a}-(\lambda-ik)^2e^{\lambda a}]\frac{e^{ika}}{2\lambda}C\Rightarrow C=(\cdots)\cdot A$
进一步求得B与B′与A关系，再求A′．代入为B和B′与A,A′关系

0531. 定态微扰法．
①、一维谐振子的哈密顿量为 $\hat H^{(0)}=\hat T+\hat U=\frac1{2m}\hat p^2+\frac12m\omega^2\hat x^2$ 在其基础上加高阶势能项 $H^{(1)}=\hat V'=\lambda\hat x^4$ 得新哈密顿量为 $\hat H=\frac1{2m}\hat p^2+\frac12m\omega^2\hat x^2+\lambda\hat x^2$．其中λ很小
计算加入$H^{(1)}$后，谐振子基态能量一阶微扰修正
基态波函数 $\psi_0(x)=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$ (已归一化)
$\Rightarrow E_0^{(1)}=\langle\psi_0|\hat H^{(1)}|\psi_0\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x)\hat H^{(1)}\psi_0(x)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x)\lambda x^4\psi_0(x)dx$
$=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\lambda\int_{-\infty}^{+\infty}x^4\exp(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2)dx=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\lambda\cdot\frac{d^2}{d\alpha^2}\Big|_{\alpha=\frac{m\omega}{\hbar}}\int e^{-\alpha x^2}dx=\frac{3\hbar^2\lambda}{4m^2\omega^2}$
②、一维谐振子哈密顿量 $\hat H^{(0)}=\hat T+\hat U=\frac1{2m}\hat p^2+\frac12m\omega^2\hat x^2$，现把ω稍微改变为ω+δω．计算谐振子基态能量的一阶微扰修正
$\psi_0(x)=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac14}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$ ，$H^{(1)}=\frac12[(\omega+\delta\omega)^2-\omega^2]x^2=\frac12m[2m\delta\omega+(\delta\omega)^2]x^2$
$E_0^{(1)}=\int\psi_0^*(x)\hat H^{(1)}\psi_0(x)dx=\frac12m[2m\delta\omega+(\delta\omega)^2]\cdot\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\int x^2\exp(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2)dx$
$=\frac{\hbar}{4\omega}[2\omega\delta\omega+(\delta\omega)^2]\cong\frac{\hbar}{4\omega}\cdot2\omega\delta\omega=\frac12\hbar\delta\omega$
③、证明二阶微扰能量表达式 $E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{|\langle\psi_m^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$
$\hat H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$
$(\hat H^{(0)}+\hat H^{(1)})=(|\psi_n^{(0)}\rangle+|\psi_n^{(1)}\rangle+|\psi_n^{(2)}\rangle\cdots)=(E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+\cdots)(|\psi_n^{(0)}\rangle+|\psi_n^{(1)}\rangle+\cdots)$
考虑二阶项 $\hat H^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+\hat H^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle=E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$
左右两边同时作用$\langle\psi_n^{(0)}|$，则：左边$=\langle\psi_n^{(0)}|\hat H^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+\langle\psi_n^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$
$=E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+\langle\psi_n^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$，右边$=\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$
$+\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle+E_n^{(1)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(2)}$
$\Rightarrow E_n^{(2)}=\langle\psi_n^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle-E_n^{(1)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$．因 $|\psi_n^{(1)}\rangle=\sum_{m\neq n}\frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}|\psi_m^{(0)}\rangle$
$\Rightarrow\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle=0\Rightarrow E_n^{(2)}=\langle\psi_n^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle=\sum_{m\neq n}\frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\langle\psi_n^{(0)}|\hat H^{(1)}|\psi_m^{(0)}\rangle$
$=\sum_{m\neq n}\frac{|H_{mn}^{(1)}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$

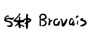
①若一个粒子在空间 0<x<L范围内自由运动，且受到周期性边界条件的限制
且它的两个归一化定态波函数为 $\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt L}\exp(i\frac{2\pi}{L}x)$，$\psi_{-1}(x)=\frac{1}{\sqrt L}\exp(-i\frac{2\pi}{L}x)$
是简并的，对应本征能量 $E_1=\frac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2}$ (注意这是该体系无数定态波函数中的两个)
现假如粒子在0<x<L范围内并非自由运动，而是受到一个弱势场V(x)
$V(x)=V_0\cos(\frac{4\pi}{L}x)$的作用($V_0$很小)．利用简并态微扰方法 消除$\psi_1(x)$和$\psi_{-1}(x)$的简并(即计算波函数的零级修正)并计算$E_1$的一阶修正
取 $\hat H^{(0)}=\hat T+\hat V^{(0)}$，其中 $V^{(0)}(x)=0$ $(0<x<L)$ ．$\hat H=\hat T+\hat V$
其中 $V(x)=V_0\cos(\frac{4\pi}{L}x)$ $(0<x<L)$，则 $\hat H^{(1)}=\hat H-\hat H^{(0)}=\hat V=V_0\cos(\frac{4\pi}{L}x)$
简并态ψ_1,ψ_{-1}的零级修正需要对角化矩阵 $\begin{bmatrix}H_{11}^{(1)}&H_{12}^{(1)}\\H_{21}^{(1)}&H_{22}^{(1)}\end{bmatrix}$
其中 $H_{11}^{(1)}=\langle\psi_1|\hat H^{(1)}|\psi_1\rangle=\frac1L\cdot\int_0^LV_0\cos\frac{4\pi}{L}x\,dx=0$
$H_{22}^{(1)}=\langle\psi_{-1}|\hat H^{(1)}|\psi_{-1}\rangle=\frac1L\int_0^LV_0\cos\frac{4\pi}{L}x\,dx=0$
$H_{12}^{(1)}=\langle\psi_1|\hat H^{(1)}|\psi_{-1}\rangle=\frac1L\int_0^LV_0\cos(\frac{4\pi}{L}x)\exp(-i\frac{4\pi}{L}x)dx=\frac{V_0}{2L}\int_0^L(1+e^{-\frac{8\pi}{L}x})dx=\frac{V_0}{2}$
$H_{21}^{(1)}=\langle\psi_{-1}|\hat H^{(1)}|\psi_1\rangle=\langle\psi_1|\hat H^{(1)}|\psi_{-1}\rangle^*=\frac12V_0$
⇒$\hat H^{(1)}$与ψ_1,ψ_{-1}对应子矩阵为
$\hat H^{(1)}=\frac{V_0}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=\frac{V_0}{2}\sigma_x$ ；对角化$\hat H^{(1)}$，即求其本征值和本征矢量

利用σ_x结论．有$\hat H^{(1)}$有两个本征值
$\lambda_1=+\frac{V_0}{2}$．对应本征态 $|\tilde\varphi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt2}\binom{1}{1}$，把基矢$|\psi_1\rangle,|\psi_{-1}\rangle$代入，有
$|\tilde\varphi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt2}(|\psi_1\rangle+|\psi_{-1}\rangle)$ (或 $\tilde\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt2}(\psi_1(x)+\psi_{-1}(x))=\sqrt{\frac2L}\cos\frac{2\pi x}{L}$
$\lambda_2=-\frac{V_0}{2}$ 对应本征态为 $|\tilde\varphi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt2}\binom{1}{-1}$ 把基矢$|\psi_1\rangle,|\psi_{-1}\rangle$代入，有
$|\tilde\varphi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt2}(|\psi_1\rangle-|\psi_{-1}\rangle)$ (或 $\tilde\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt2}(\psi_1(x)-\psi_{-1}(x))=i\sqrt{\frac2L}\sin\frac{2\pi x}{L}$
修正后零级波函数为：
$\phi_1^{(0)}(x)=\tilde\psi_1(x)=\sqrt{\frac2L}\cos\frac{2\pi x}{L}$ $\qquad\phi_{-1}^{(0)}(x)=\tilde\psi_2(x)=i\sqrt{\frac2L}\sin\frac{2\pi x}{L}$
一级修正后能量
$E_1=\frac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2}+\frac12V_0$ $\qquad E_{-1}=\frac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2}-\frac12V_0$

0605. 布洛赫定理
①判断下述两种二维晶体分别属于5种 Bravais lattice中哪一种？

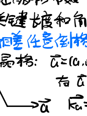


矩形

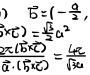


有心矩形

②假设存在一种金属"二维铜" 是正方结构．晶格常数为2.54Å，假设每个铜原子贡献一个"自由电子"，请计算这种"二维铜"的"自由电子浓度"及其费米波矢
$a=2.54Å=2.54\times10^{-10}\,m$ ，一个晶胞中有一个铜原子，提供一个电子
故自由电子浓度：$n=\frac{1}{a^2}=1.55\times10^{19}m^{-2}$，费米波矢 $k_F=\sqrt{2\pi n}=9.87\times10^9m^{-1}$
③.画出晶格常数为a的六角晶格对应的倒格子，画出第一布里渊区，并标注出其中关键长度和角度．(这里布里渊区要求为：倒空间中，在包含k=0点，并且其中任意两个不相差任意倒格矢的前提下 能画出的最大区域)
六角晶格：$\vec a=(a,0,0)$ $\quad\vec b=(-\frac a2,\frac{\sqrt3}{2}a,0)$ 定义 $\vec c=(0,0,1)$

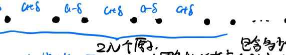


有 $\vec a\cdot(\vec b\times\vec c)=\frac{\sqrt3}{2}a^2$
$\vec{k_a}=\frac{2\pi(\vec b\times\vec c)}{\vec a\cdot(\vec b\times\vec c)}=\frac{4\pi}{\sqrt3a}(\frac{\sqrt3}{2},\frac12,0)$ $\qquad\vec{k_b}=\frac{2\pi(\vec c\times\vec a)}{\vec a\cdot(\vec b\times\vec c)}=\frac{4\pi}{\sqrt3a}(0,1,0)$
倒格点为：⟶



也是六角格子
以k=0为中心，作其相邻格点连线的垂线，这些垂线围成的区域满足：区域任意两个点不会相差任意倒格矢，而且只要再多加一点，这个要求就不成立

0607.
①.假如在一维周期势场中运动的电子，在t=0时刻的波函数是与这个周期势场相对应的两个布洛赫函数叠加，即 $\psi(x,t=0)=C_1\psi_{n_1,k_1}(x)+C_2\psi_{n_2,k_2}(x)$，请写出任意时刻电子的波函数ψ(x) (假设能带关系$E_n(k)$是已知的函数)
$\psi(x,t=0)=C_1\psi_{n_1,k_1}(x)+C_2\psi_{n_2,k_2}(x)\Rightarrow\psi(x,t)=C_1\exp(-\frac{i}{\hbar}E_{n_1,k_1}t)\cdot\psi_{n_1,k_1}(x)+C_2\exp(-\frac{i}{\hbar}E_{n_2,k_2}t)\psi_{n_2,k_2}(x)$
②、证明紧束缚近似中 $\psi(x)=\sum_n\exp(ika_n)\Phi(x-a_n)$ (不考虑归一化)
$\psi(x)=\sum_nC_n\phi(x-a_n)$ 　但由Bloch定理：$\psi(x)=e^{ikx}u_k(x)$
即 $\psi(x+a)=e^{ika}e^{ikx}u_k(x+a)=e^{ika}\cdot e^{ikx}u_k(x)=e^{ika}\psi(x)$
代入原式有： 　→其中 $a_n=na$
$\psi(x+a)=\sum_nC_n\phi(x-a_n+a)=\sum_nC_n\phi(x-a_{n-1})=\sum_nC_{n+1}\phi(x-a_n)$
$=e^{ika}\psi(x)=\sum_nC_ne^{ika}\phi(x-a_n)$ ，由于$\phi(x-a_{n_1})$和$\phi(x-a_{n_2})$是近似正交
所以上式各项的系数应相等．即 $C_{n+1}=e^{ika}C_n$
$\Rightarrow C_n=e^{ika}C_{n-1}=e^{2ika}C_{n-2}=\cdots=e^{inka}\cdot C_0=e^{ika_n}\cdot C_0$
即 $\psi(x)=C_0\sum_n\exp(ika_n)\phi(x-a_n)$ ．不考虑归一化，可去掉C_0
③.已知某一维晶体，由相同原子构成．晶体结构如下图所示



2N个原子
请写出其第一布里渊区范围 并说明该晶体每个能带最多包含多少个不同的量子状态(采用周期边界条件并考虑自旋)．假设每个原子仅提供一个电子用于形成能带，并且每个能带之间不存在交叠，请说明晶体是导体还是绝缘体。
这个周期结构基本单元是两个原子 周期是2a．总周期数是N
⇒1布里渊区 $(-\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{2a})$ $\quad G=\frac{2\pi}{a'}$ → $a'=2a$ 　a′是周期
每个能带包括 2N个不同的量子状态
由于每个原子提供一个电子．共有2N个电子去填充这2N个状态，能带被填满，所以该晶体是绝缘体

0619. 开放体系与跃迁
一维无限势阱 $V(x)=\begin{cases}0&|x|<a\\+\infty&\text{otherwise}\end{cases}$ 中有一个质量为m的粒子．t=0时刻处于基态
假设在t时刻使势阱左半边势能抬升小量V_0 并维持一段时间T再恢复原状，用一阶含时微扰求解此后粒子处于第一激发态几率
势阱内本征波函数(未归一化)
$\psi_n(x)=\sin[k_n(x+a)]$ ，
其中 $k_n\cdot2a=n\cdot\pi$ ，即 $k_n=\frac{n\pi}{2a}$ ，n=1,2,…
求归一化因子：$\int_{-a}^{a}|\psi_n(x)|^2dx=\int_{-a}^{a}\sin^2[k_n(x+a)]dx=\int_{-a}^{a}\{\frac12-\frac12\cos[2k_n(x+a)]\}dx=a$
归一化后波函数为：
$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt a}\sin[k_n(x+a)]$ ，微扰哈密顿量为：$\hat H'=\begin{cases}V_0&-a<x<0\quad0<t<T\\0&\text{otherwise}\end{cases}$
故 $H'_{21}=\langle\psi_2|\hat H'|\psi_1\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\hat H'\psi_1(x)dx$
$=\frac{V_0}{a}\cdot\int_{-a}^{0}\sin[\frac{\pi}{a}(x+a)]\sin[\frac{\pi}{2a}(x+a)]dx=\frac{2V_0}{a}\int_{-a}^{0}\sin^2[\frac{\pi}{2a}(x+a)]\cos[\frac{\pi}{2a}(x+a)]dx$
$=\frac{2a}{\pi}\cdot\frac{2V_0}{a}\int_{-a}^{0}\sin^2[\frac{\pi}{2a}(x+a)]\,d(\sin[\frac{\pi}{2a}(x+a)])=\frac{4V_0}{3\pi}$
故t<T时．从$|\psi_1\rangle$到$|\psi_2\rangle$的跃迁几率为 $W_{1\to2}^{(t)}=\frac{1}{\hbar^2}|H'_{21}|^2\frac{\sin^2(\omega_{12}t/2)}{(\omega_{12}/2)^2}$
其中 $\omega_{12}=\frac{E_1-E_2}{\hbar}=\frac{\hbar^2(k_1^2-k_2^2)}{2m\hbar}=-\frac{\hbar}{2m}\frac{3\pi^2}{4a^2}$
故 T时刻
$W_{1\to2}(T)=\frac{1}{\hbar^2}(\frac{4V_0}{3\pi})^2\frac{\sin^2(\frac{\hbar}{4m}\cdot\frac{3\pi^2}{4a^2}T)}{(\frac{\hbar}{4m}\cdot\frac{3\pi^2}{4a^2})^2}=[\frac{64V_0ma^2}{9\hbar^2\pi^3}\sin(\frac{3\hbar\pi^2}{16ma^2}T)]^2$
T时刻以后，微扰为0
$|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle$又成为系统本征态(定态波函数)
故处于$|\psi_2\rangle$的几率不再变化，为$W_{1\to2}(T)$

积分公式补充：
$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}dx=\sqrt\pi$ $\qquad\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac12ax^2+bx}dx=\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\exp(\frac{b^2}{2a})$
$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac12ax^2+ibx}dx=\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\exp(-\frac{b^2}{2a})$
$I=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac12ax^2+bx}dx=\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\exp(\frac{b^2}{2a})$
$\frac{\partial I}{\partial b}=\int_{-\infty}^{+\infty}x\,e^{-\frac12ax^2+bx}dx=\frac ba\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\exp(\frac{b^2}{2a})$
$\frac{\partial^2I}{\partial b^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\frac12ax^2+bx}dx=\frac1a(1+\frac{b^2}{a})\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\exp(\frac{b^2}{2a})$
$\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\frac12ax^2}dx=\frac1a\sqrt{\frac{2\pi}{a}}$
$\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-\frac12ax^2}dx=\frac{3}{a^2}\sqrt{\frac{2\pi}{a}}$
$\int_{-\infty}^{+\infty}x^{2n}e^{-\frac12ax^2}dx=\frac{(2n-1)!!}{a^n}\sqrt{\frac{2\pi}{a}}$
$\int_0^{+\infty}x^{2n+1}e^{-ax^2}dx=\frac{n!}{2\cdot a^{n+1}}$

补充知识：
量子点： $V(r)=\begin{cases}0&0\le x<W_x,\ 0\le y\le W_y,\ 0\le z\le W_z\\\infty&\text{otherwise}\end{cases}$
写出这个体系定态波函数
$\psi_{n_x,n_y,n_z}(r)=[\sqrt{\frac2W}\sin(\frac{n_x\pi}{W_x})][\sqrt{\frac2W}\sin(\frac{n_y\pi}{W_y})][\sqrt{\frac2W}\sin(\frac{n_z\pi}{W_z})]$
n_x,n_y,n_z 取任意正整数
相应本征能量： 　应用：实现不同颜色的发光
$E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mW_x^2}n_x^2+\frac{\hbar^2\pi^2}{2mW_y^2}n_y^2+\frac{\hbar^2\pi^2}{2mW_z^2}n_z^2$
5种 Bravais lattice：二维周期格点
六角，正方，矩形，有心矩形 　倾斜

0612.
①根据三维紧束缚近似，简立方晶体s能带的色散关系为
$E(k)=E_0+2t[\cos(k_xa)+\cos(k_ya)+\cos(k_za)]$ 其中 $-\frac\pi a\le k_{x,y,z}\le\frac\pi a$
计算不同k处布洛赫电子群速度v_g 和有效质量矩阵$[m]$
$\vec{v_g}=\frac1\hbar\nabla_kE(\vec k)$ ，故 $\vec k=(k_x,k_y,k_z)$状态下，电子群速度为
$\vec{v_g}=-\frac{2at}{\hbar}[\sin(k_xa)\vec{e_x}+\sin(k_ya)\vec{e_y}+\sin(k_za)\vec{e_z}]$
$[\frac{1}{m^*}]=\frac{1}{\hbar^2}[\frac{\partial^2E}{\partial k\partial k}]=-\frac{2a^2t}{\hbar}\begin{bmatrix}\cos(k_xa)&&\\&\cos(k_ya)&\\&&\cos(k_za)\end{bmatrix}$
$[m^*]=[\frac{1}{m^*}]^{-1}=-\frac{\hbar^2}{2a^2t}\begin{bmatrix}\frac{1}{\cos(k_xa)}&&\\&\frac{1}{\cos(k_ya)}&\\&&\frac{1}{\cos(k_za)}\end{bmatrix}$

0614.
考虑一个由三个近独立全同粒子组成的体系，并且已知该体系的单粒子本征函数仅三个 ψ_1,ψ_2,ψ_3，分别针对该粒子的玻色子和费米子两种情况．写出三粒子体系所有可能本征函数．
玻色子：$\psi_{111}=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3)$
$\psi_{112}=\psi_1(r_1)\psi_1(r_2)\psi_3(r_3)+\psi_1(r_2)\psi_1(r_3)\psi_2(r_1)+\psi_1(r_3)\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)$
$\psi_{113}=\psi_1(r_1)\psi_1(r_2)\psi_3(r_3)+\psi_1(r_2)\psi_1(r_3)\psi_3(r_1)+\psi_1(r_3)\psi_1(r_1)\psi_3(r_2)$
$\psi_{122}=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_2(r_3)+\psi_1(r_2)\psi_2(r_3)\psi_2(r_1)+\psi_1(r_3)\psi_2(r_1)\psi_2(r_2)$
$\psi_{123}=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3)+\psi_1(r_3)\psi_2(r_2)\psi_3(r_1)+\psi_1(r_3)+\psi_2(r_2)+\psi_1(r_1)$
$\quad+\psi_1(r_1)\psi_2(r_3)\psi_3(r_2)+\psi_1(r_2)\psi_2(r_1)\psi_3(r_3)+$ ——
$\psi_{133}=\psi_1(r_1)\psi_3(r_2)\psi_3(r_3)+\psi_1(r_2)\psi_3(r_3)\psi_3(r_1)+\psi_1(r_3)\psi_3(r_1)\psi_3(r_2)$
$\psi_{222}=\psi_2(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3)$
ψ_{223},
ψ_{233} 同理
ψ_{333}
费米子：$\psi_{123}=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\psi_3(r_3)+\psi_1(r_2)\psi_2(r_3)\psi_3(r_1)+\psi_1(r_3)\psi_2(r_1)\psi_3(r_2)$
$\quad-\psi_1(r_1)\psi_2(r_3)\psi_3(r_2)-\psi_1(r_2)\psi_2(r_1)\psi_3(r_3)-\psi_1(r_3)\psi_2(r_2)\psi_3(r_1)$

布里渊区内电子状态数 $N_{状态}=2\cdot N_{周期}$
一个能带中电子状态总数等于晶体周期数目的两倍 or 晶胞数目两倍