课程信息

- 第四次作业：

1. 阅读黄昆《固体物理》第四章4-1至4-7小结，胡老师讲义3-1，并解释以下重要概念：单电子近似、近自由电子近似、紧束缚近似、共有化电子、布洛赫波、简约波失。

2. 画出1）真空中一维自由电子的E，k关系图；2）晶体中一维近自由电子的E，k关系图并表面能带序号；3）晶体中一维近自由电子的E与简约波数k关系图；

3. 写出1）真空中一维自由电子的薛定谔方程及其波函数；2）晶体中一维近自由电子的薛定谔方程及其波函数；

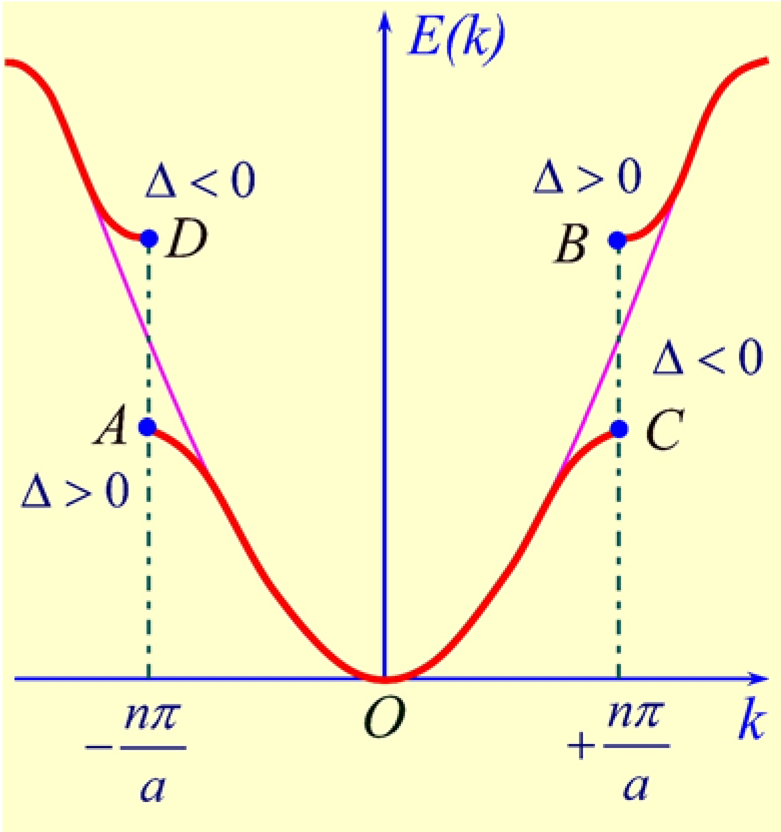
4. 书后习题4.2，4.8（其中4.8只需完成前两小题）

$$E_{\pm} = \begin{cases} \bar{V} + T_n + |V_n| + \Delta^2 T_n \left(\dfrac{2T_n}{|V_n|} + 1\right) \\ \bar{V} + T_n - |V_n| - \Delta^2 T_n \left(\dfrac{2T_n}{|V_n|} - 1\right) \end{cases}$$

能量本征值在 $k = \pm \dfrac{\pi}{a} n$ 断开

两个态的能量间隔 $E_g = 2|V_n|$

—— 禁带宽度



电子波矢取值 $k = l\dfrac{2\pi}{Na}$ —— 对于一个**l**，有一个量子态**k**

能量本征值 $E_k = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V}$

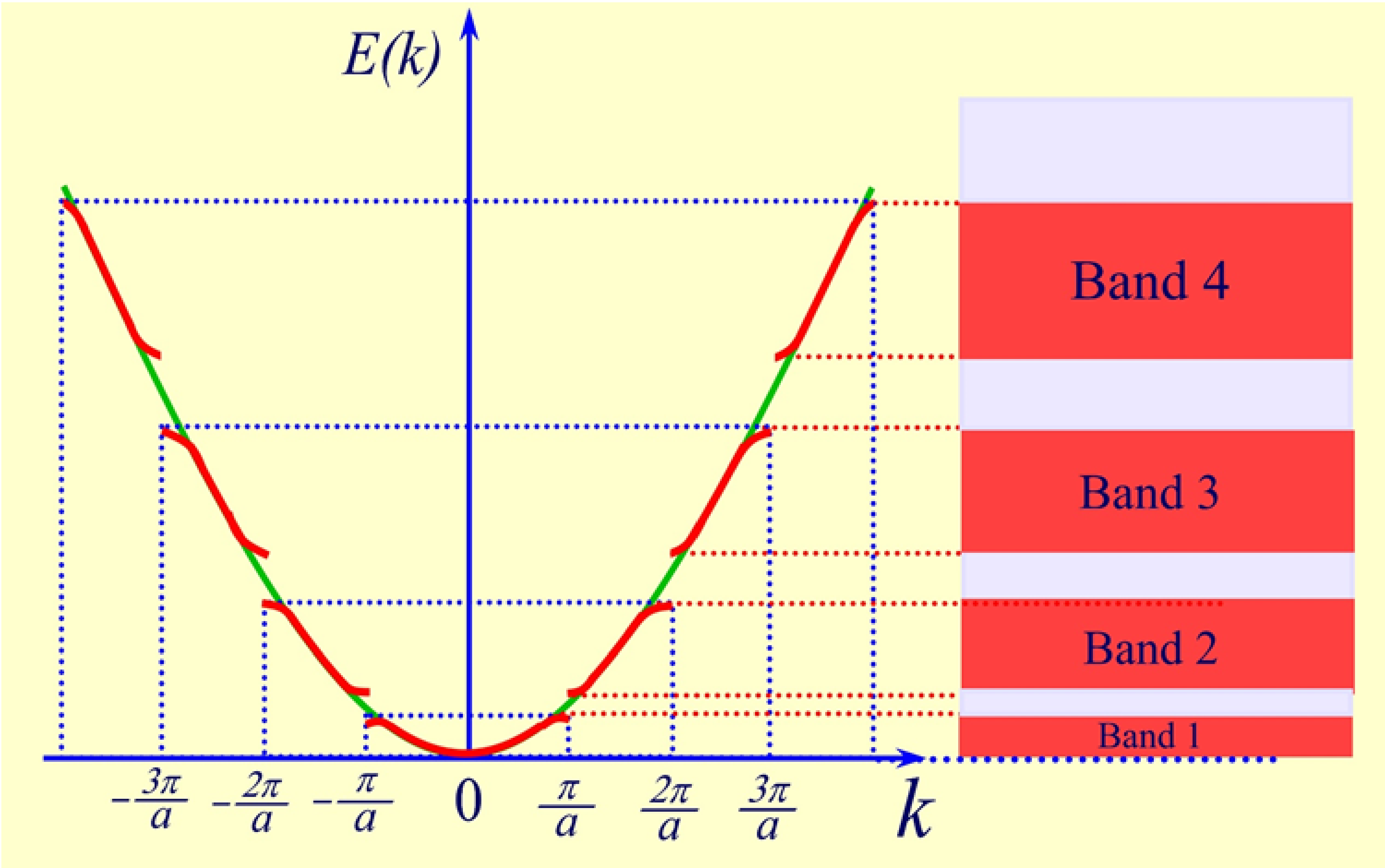
—— 当**N**很大时，$\mathbf{E_k}$视为准连续

能量本征值在 $k = \pm\dfrac{\pi}{a}n$ 处断开

—— 由于晶格周期性势场的影响，晶体中电子准连续的能级分裂为一系列的能带

☒ 结果分析讨论

1) 能带底部，能量向上弯曲；能带顶部，能量向下弯曲



2) 禁带出现在波矢空间倒格矢的中点处

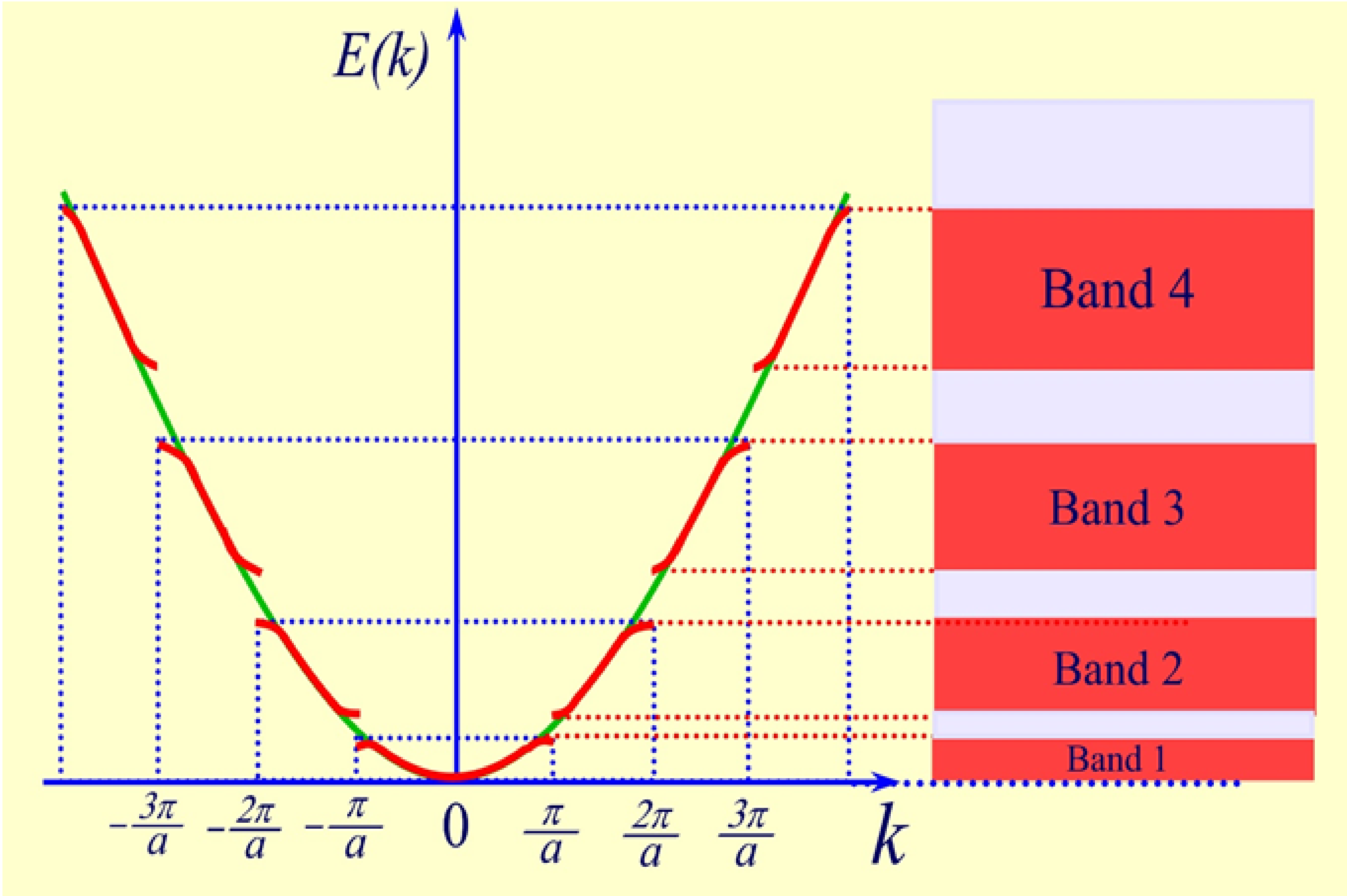
$$k = \pm\frac{1}{2}\frac{2\pi}{a};$$

$$\pm\frac{1}{2}\frac{4\pi}{a};$$

$$\pm\frac{1}{2}\frac{6\pi}{a};$$

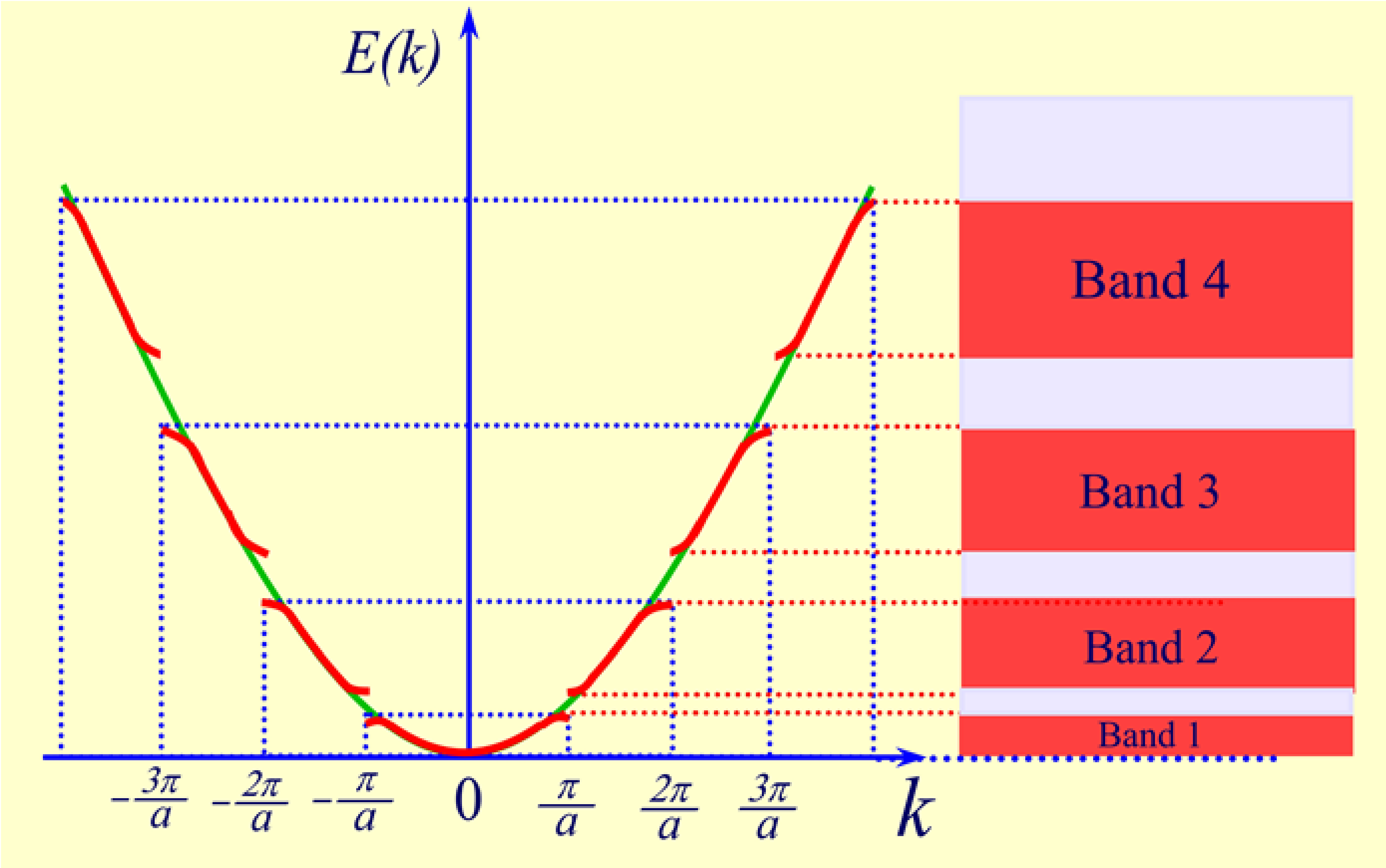
$$\pm\frac{1}{2}\frac{8\pi}{a};$$

$$\cdots$$



3) 禁带的宽度 $E_g = 2|V_1|,\ 2|V_2|,\ 2|V_3|,\cdots 2|V_n|$

—— 取决于金属中势场的形式



☒ 能带及一般性质

自由电子的能谱是抛物线型 $E_k = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

—— 晶体弱周期性势场的微扰，电子能谱在布里渊边界

$(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}),\ (-\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}),\ (-\frac{3\pi}{a}, \frac{3\pi}{a}), \cdots$ —— 发生能量跃变

产生了宽度 $E_g = 2|V_1|,\ 2|V_2|,\ 2|V_3|, \cdots$ 的禁带

—— 在远离布里渊区边界，近自由电子的能谱和自由电子的能谱相近

—— 每个波矢**k**有一个量子态，当晶体中原胞的数目趋于无限大时，波矢**k**变得非常密集，这时能级的准连续分布形成了一系列的能带

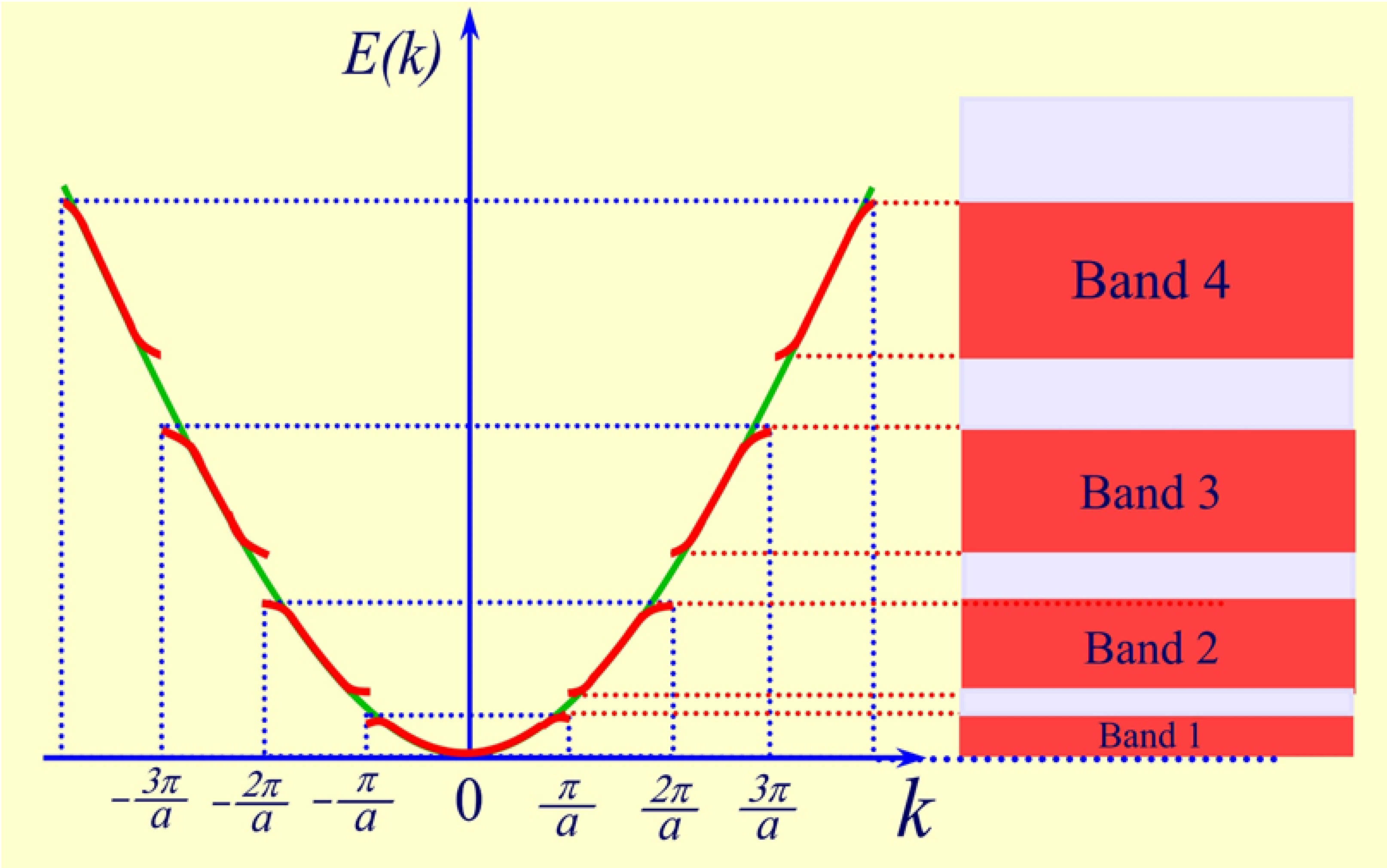
$$E_1(k),\ E_2(k),\ E_3(k),\ \cdots$$

—— 各能带之间是禁带, 在完整的晶体中，禁带内没有允许的能级

—— 一维布拉法格子，能带序号、能带所涉及波矢**k**的范围和布里渊区的对应关系

能带序号	$\boldsymbol{k}$的范围	$\boldsymbol{k}$的长度	布里渊区
$E_1(k)$	$-\frac{\pi}{a} \sim \frac{\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}$	第一布里渊区
$E_2(k)$	$-\frac{2\pi}{a} \sim -\frac{\pi}{a}$ $\frac{\pi}{a} \sim \frac{2\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}$	第二布里渊区
$E_3(k)$	$-\frac{3\pi}{a} \sim -\frac{2\pi}{a}$ $\frac{2\pi}{a} \sim \frac{3\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}$	第三布里渊区

一维布拉法格子，能带序号、波矢k和布里渊区对应关系



—— 每个能带中包含的量子态数目

波矢**k**的取值 $k = l\frac{2\pi}{Na}$ $\Delta k = \Delta l\frac{2\pi}{Na}$

$k \to k + \Delta k$ — **k**的数目 $\Delta l = \frac{Na}{2\pi}\Delta k$

每个能带对应**k**的取值范围 $\Delta k = \frac{2\pi}{a}$

各个能带**k**的取值数目 $\frac{Na}{2\pi} \times \frac{2\pi}{a} = N$ —— 原胞的数目

—— 计入自旋，**每个能带中包含2N个量子态**

⌧ 电子波矢和量子数—简约波矢的关系

平移算符本征值量子数**k**（简约波矢，计为 $\bar{k}$）和电子波矢**k**之间的关系

简约波矢 $\bar{k}$ 的取值范围 $-\dfrac{\pi}{a} \sim \dfrac{\pi}{a}$ —— 第一布里渊区

近自由电子中电子的波矢 $k = l\dfrac{2\pi}{Na}$ —— ***l*** 为整数

在一维情形中 $k = \dfrac{2\pi}{a}m + \bar{k}$ —— **m**为整数

电子的波函数

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}+\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}\sum_n\frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2-(k+\frac{n}{a}2\pi)^2]}e^{i2\pi\frac{n}{a}x}$$

可以表示为 $\psi_k(x)=e^{ikx}\times v(x)$

$$v(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}(1+\sum_n\frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2-(k+\frac{n}{a}2\pi)^2]}e^{i2\pi\frac{n}{a}x})$$

—— 晶格周期性函数

将 $k=\frac{2\pi}{a}m+\bar{k}$ 代入 $\psi_k(x)=e^{ikx}\times v(x)$

$$\psi_k(x)=e^{i(\frac{2\pi}{a}m+\bar{k})x}\left(\frac{1}{\sqrt{L}}+\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_n \frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2-(k+\frac{n}{a}2\pi)^2]}e^{i2\pi\frac{n}{a}x}\right)$$

$$\psi_k(x)=e^{i\bar{k}x}[e^{i\frac{2\pi}{a}mx}\times\left(\frac{1}{\sqrt{L}}+\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_n \frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2-(k+\frac{n}{a}2\pi)^2]}e^{i2\pi\frac{n}{a}x}\right)]$$

$$u(x)=e^{i\frac{2\pi}{a}mx}\times\left(\frac{1}{\sqrt{L}}+\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_n \frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2-(k+\frac{n}{a}2\pi)^2]}e^{i2\pi\frac{n}{a}x}\right)$$

$$u(x)=e^{i\frac{2\pi}{a}mx}\times\left(\frac{1}{\sqrt{L}}+\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{n}\frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2-(k+\frac{n}{a}2\pi)^2]}e^{i2\pi\frac{n}{a}x}\right)$$

—— 晶格周期性函数

晶体中电子的波函数 $\psi_k(x)=e^{i\bar{k}x}u(x)$

—— 利用电子波矢和简约波矢的关系，电子在周期性势场中的波函数为布洛赫函数

☒ 用简约波矢来表示能级

—— 电子的能级

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \overline{V} + \sum_n{}' \frac{|V_n|^2}{\frac{\hbar^2}{2m_e}[k^2 - (k + \frac{n}{a}2\pi)^2}$$

$$k = \frac{2\pi}{a} m + \overline{k}$$

—— **m**为整数，对应于不同的能带

—— 简约波矢的取值被限制在简约布里渊区，要标志一个状态需要表明：

1) 它属于哪一个能带（能带标号）

2) 它的简约波矢 $\bar{k}$ 是什么？

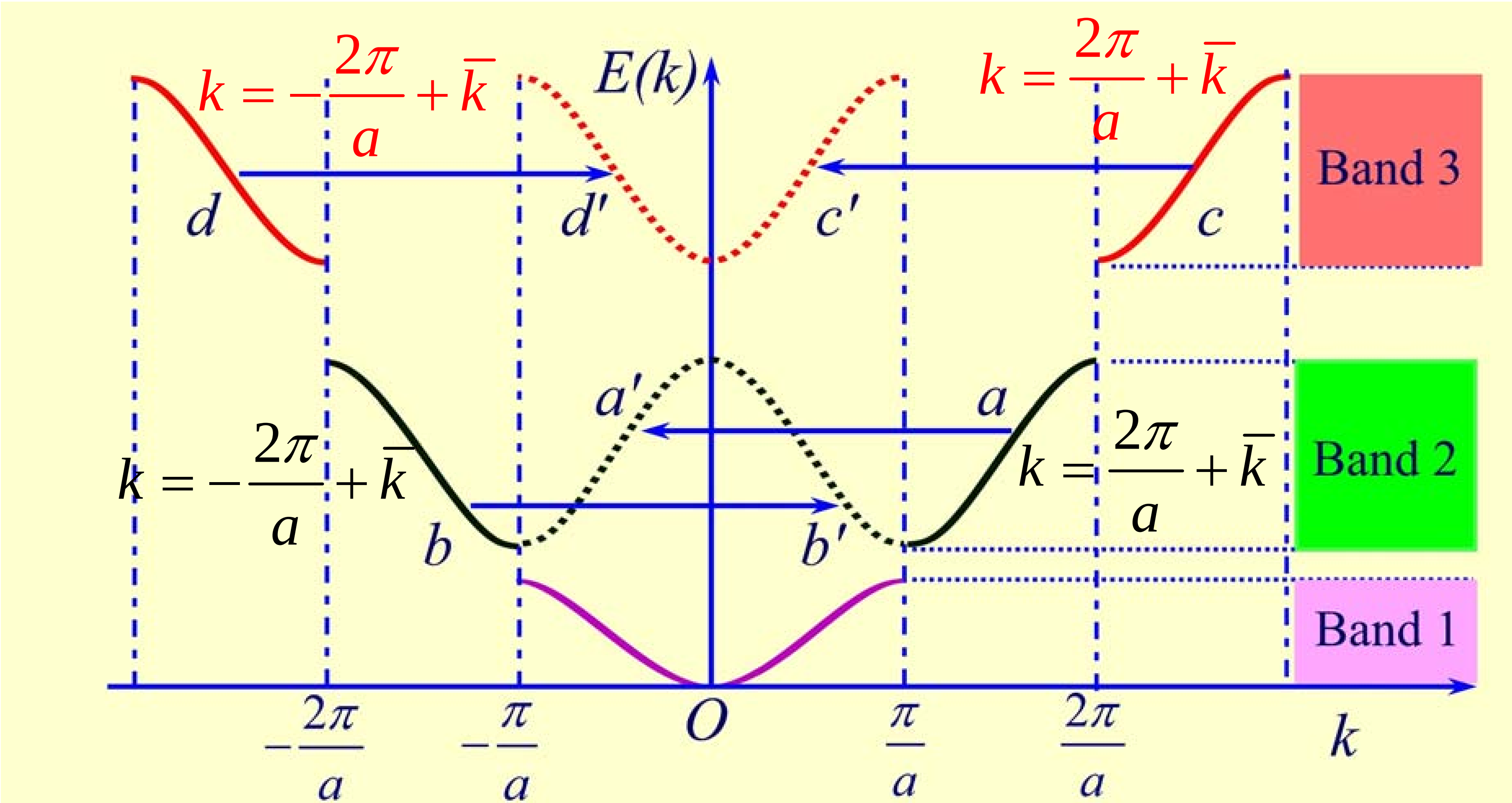
第一能带位于简约布里渊区，其它能带可以通过倒格矢

$$k = \frac{2\pi}{a} m + \bar{k} \qquad G_h = h\frac{2\pi}{a}$$

移到简约布里渊区

—— 每一个能带在简约布里渊区都有各自的图像，得到所有能带在简约布里渊区的图像

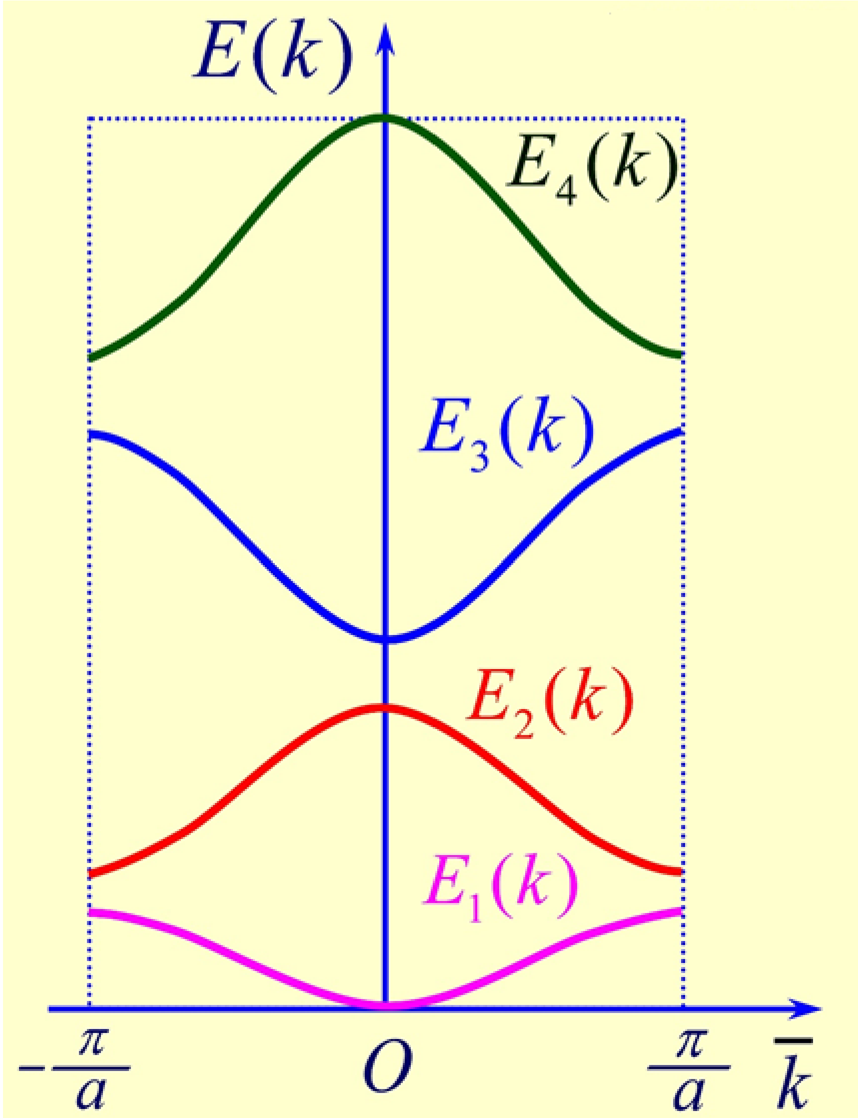
电子波矢**k**和简约波矢 $\bar{k}$ 的关系



—— 周期性势场的起伏只使得不同能带相同简约波矢 $\bar{k}$ 的状态之间的相互影响

$$k = \bar{k} + m\frac{2\pi}{a}$$

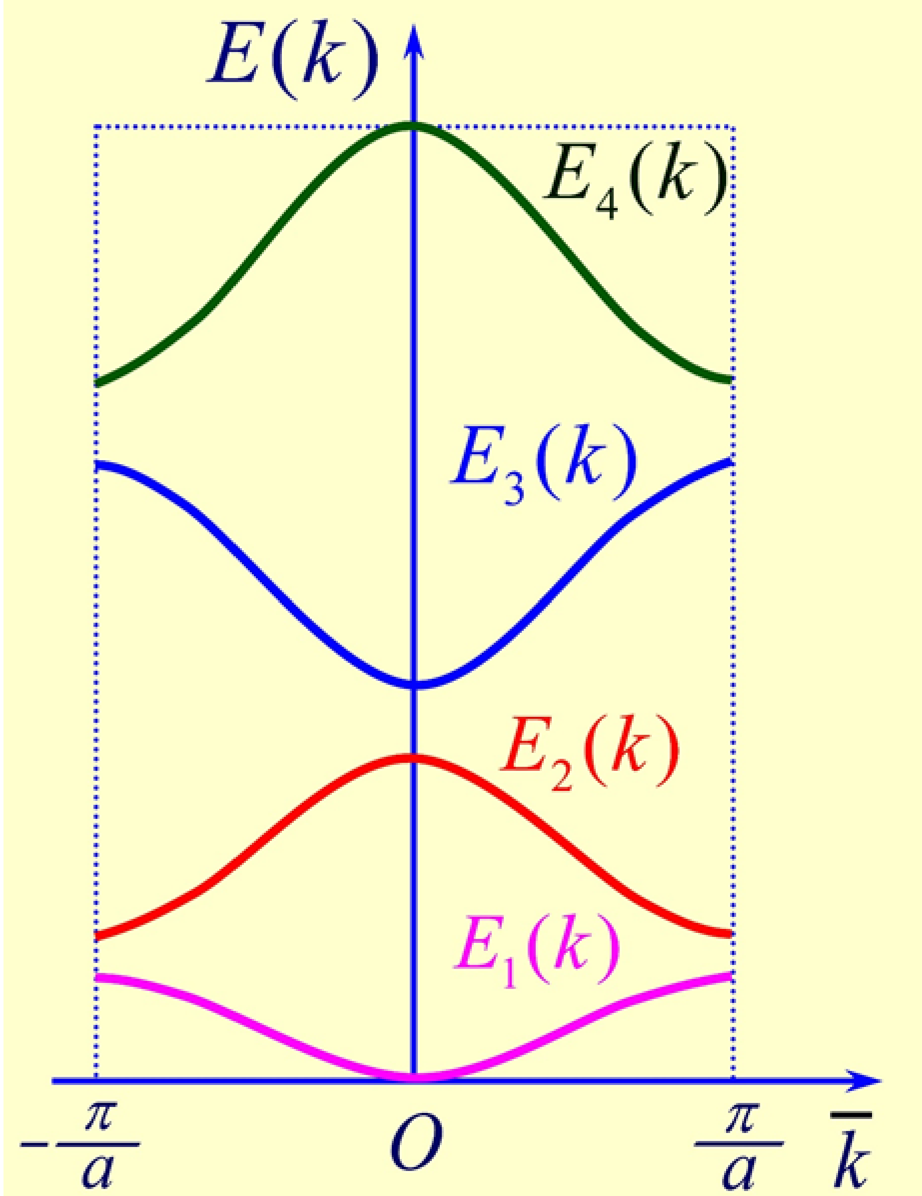
—— 对于一般的 $\bar{k}$（远离布里渊边界）这些状态间的能量相差较大，在近自由电子近似的微扰计算中，采用非简并微扰



简约波矢 $\bar{k}=0$

及其 $\bar{k}=\pm\pi/a$ 附近，存在两个能量相同或能量相近的态，需要简并微扰理论来计算

结果表明在 $\bar{k}=0$ 和 $\bar{k}=\pm\pi/a$ 不同能带之间出现带隙— 禁带



⌧ 用简约波矢来表示零级波函数

零级波函数 $\psi_k^0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$

将 $k = \frac{2\pi}{a} m + \bar{k}$ 代入得到

$$\psi_{nk}^0(x) = e^{i\bar{k}x}\left[\frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi}{a}mx}\right]$$

—— 与用简约波矢表示能带一样，必须指明波函数属于哪一个能带

§ 4.3 三维周期场中电子运动的近自由电子近似

1. 模型和微扰计算

—— 电子受到粒子周期性势场的作用，势场的起伏较小, 零级近似，用势场的平均值代替离子产生的势场

势场的平均值 $\bar{V} = V(\vec{r})$

周期性势场起伏量 $V(\vec{r}) - \bar{V} = \Delta V$ —— 微扰来处理

电子的波动方程 $[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

晶格周期性势场函数 $V(\vec{r} + \vec{R}_m) = V(\vec{r})$

⌧ 零级近似下电子的能量和波函数

—— 空格子中电子的能量和波函数

金属 —— $N = N_1 N_2 N_3$ 个原胞构成，体积 $V = N v_0$

零级哈密顿量 $H_0 = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \bar{V}$

薛定谔方程 $$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^0(\vec{r}) + \bar{V}\psi^0(\vec{r}) = E^0\psi^0(\vec{r})$$

电子的波函数 $$\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

能量本征值 $$E_{\vec{k}}^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V}$$

—— 周期性边界条件

电子的波矢 $\vec{k} = l_1 \frac{\vec{b}_1}{N_1} + l_2 \frac{\vec{b}_2}{N_2} + l_3 \frac{\vec{b}_3}{N_3}$

电子的零级本征波函数 $\psi_{\vec{k}}^{0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

满足正交归一化条件

$$\int_0^L \psi_{\vec{k}'}^{0} {}^* \psi_{\vec{k}}^{0} d\vec{r} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

☒ 微扰时电子的能量和波函数 —— 近自由电子近似模型

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \bar{V}$$

微扰的情形 $H = H_0 + H'$

$$H' = V(\vec{r}) - \bar{V} = \Delta V$$

微扰后电子的能量 $E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}}^0 + E_{\vec{k}}^{(1)} + E_{\vec{k}}^{(2)} + \cdots.$

电子的波函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) + \psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}) + \cdots.$

电子的能量 $E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}}^{0} + E_{\vec{k}}^{(1)} + E_{\vec{k}}^{(2)} + \cdots.$

一级能量修正 $E_{\vec{k}}^{(1)} = < k \,|\, H' \,|\, k > = < k \,|\, V(\vec{r}) - \overline{V} \,|\, k >$

$$E_{\vec{k}}^{(1)} = 0$$

二级能量修正 $E_{\vec{k}}^{(2)} = \sum_{k'}{}' \frac{\left| < k' \,|\, H' \,|\, k > \right|^2}{E_{\vec{k}}^{0} - E_{\vec{k}'}^{0}} \qquad \vec{k}' \neq \vec{k}$

$$< k' \,|\, H' \,|\, k > = < k' \,|\, V(\vec{r}) - \overline{V} \,|\, k > = < k' \,|\, V(\vec{r}) \,|\, k >$$

$$< k' \,|\, V(\vec{r}) \,|\, k > = \frac{1}{V} \int_0^V e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d\vec{r}$$

电子的波函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}^{0}(\vec{r}) + \psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}) + \cdots.$

一级修正 $\psi_{\vec{k}}^{(1)} = \sum_{k'}{}' \frac{<k'|H'|k>}{E_{\vec{k}}^{0} - E_{\vec{k}'}^{0}} \psi_{\vec{k}'}^{0}$

矩阵元 $<k'|H'|k> = <k'|V(\vec{r})|k>$ 的计算

$$<k'|V(\vec{r})|k> = \frac{1}{V}\int_{0}^{V} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) d\vec{r}$$

引入积分变量 $\vec{\xi}$ $\quad \vec{r} = \vec{\xi} + \vec{R}_m$

$$<k'|V(\vec{r})|k> = [\frac{1}{v_0}\int_0^{v_0} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{\xi}} V(\vec{\xi})d\vec{\xi}]\cdot\frac{1}{N}\sum_m e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}_m}$$

应用 $\vec{k} = l_1\frac{\vec{b}_1}{N_1} + l_2\frac{\vec{b}_2}{N_2} + l_3\frac{\vec{b}_3}{N_3}$ $\quad\vec{k}' = l'_1\frac{\vec{b}_1}{N_1} + l'_2\frac{\vec{b}_2}{N_2} + l'_3\frac{\vec{b}_3}{N_3}$

$$\vec{R}_m = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3$$

$$\sum_m e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}_m}$$

$$= (\sum_{m_1=0}^{N_1-1} e^{-2\pi i\frac{l'_1-l_1}{N_1}m_1})(\sum_{m_2=0}^{N_2-1} e^{-2\pi i\frac{l'_2-l_2}{N_2}m_2})(\sum_{m_3=0}^{N_3-1} e^{-2\pi i\frac{l'_3-l_3}{N_3}m_3})$$

当上式中 $\dfrac{l'_1-l_1}{N_1}=n_1,\quad \dfrac{l'_2-l_2}{N_2}=n_2,\quad \dfrac{l'_3-l_3}{N_3}=n_3$

n_1，n_2，n_3 —— 为整数

则有 $$\sum_m e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}_m}=N_1N_2N_3=N$$

任意一项不满足 $\dfrac{l'_1-l_1}{N_1}=n_1,\quad \dfrac{l'_2-l_2}{N_2}=n_2,\quad \dfrac{l'_3-l_3}{N_3}=n_3$

则有 $$\sum_m e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}_m}=0$$

$$< k'|V(\vec{r})|k >=[\frac{1}{v_0}\int_0^{v_0} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{\xi}} V(\vec{\xi})d\vec{\xi}]\cdot\frac{1}{N}\sum_m e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}_m}$$

$$\vec{k}'-\vec{k}=\frac{l'_1-l_1}{N_1}\vec{b}_1+\frac{l'_2-l_2}{N_2}\vec{b}_2+\frac{l'_3-l_3}{N_3}\vec{b}_3$$

$$\vec{k}'-\vec{k}=n_1\vec{b}_1+n_2\vec{b}_2+n_3\vec{b}_3=\vec{G}_n$$

$$\sum_m e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}_m}=N_1N_2N_3=N$$

$$< k'|V(\vec{r})|k >=\frac{1}{v_0}\int_0^{v_0} e^{-i\vec{G}_n\cdot\vec{\xi}} V(\vec{\xi})d\vec{\xi}=V_n$$

波函数一级修正

$$\psi_{\vec{k}}^{(1)}=\sum_{k'}{}'\frac{<k'|H'|k>}{E_{\vec{k}}^{0}-E_{\vec{k}'}^{0}}\psi_{\vec{k}'}^{0}$$

$$\psi_{\vec{k}'}^{0}(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}}$$

$$\psi_{\vec{k}}^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\left(\sum_{n}{}'\frac{V_n}{E_{\vec{k}}^{0}-E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^{0}}e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}}\right)$$

电子的波函数

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\psi_{\vec{k}}^{0}(\vec{r})+\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r})+\cdots.$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\left[1+\left(\sum_{n}{}'\frac{V_n}{E_{\vec{k}}^{0}-E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^{0}}e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}}\right)\right]$$

波函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}[1 + (\sum_n{}' \frac{V_n}{E_{\vec{k}}^0 - E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^0} e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}})]$

因为 $\vec{R}_m \cdot \vec{G}_n = 2\pi(n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)$

波函数 $\vec{r} \Rightarrow \vec{r} + \vec{R}_m$ $\sum_n{}' \frac{V_n}{E_{\vec{k}}^0 - E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^0} e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}}$ —— 不变

波函数可以写成自由电子波函数和晶格周期性函数乘积

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = 1 + (\sum_n{}' \frac{V_n}{E_{\vec{k}}^0 - E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^0} e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}})$$

微扰后电子的能量 $E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}}^{0} + E_{\vec{k}}^{(1)} + E_{\vec{k}}^{(2)} + \cdots.$

$$E_{\vec{k}}^{0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} \qquad E_k^{(1)} = 0$$

$$E_{\vec{k}}^{(2)} = \sum_{k'}{}' \frac{\left|V_n\right|^2}{E_{\vec{k}}^{0} - E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^{0}}$$

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} + \sum_{k'}{}' \frac{\left|V_n\right|^2}{E_{\vec{k}}^{0} - E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^{0}}$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}[1+(\sum_{n}{}'\frac{V_n}{E_{\vec{k}}^0-E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^0}e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}})]$$

$$E_{\vec{k}}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\bar{V}+\sum_{k'}{}'\frac{|V_n|^2}{E_{\vec{k}}^0-E_{\vec{k}+\vec{G}_n}^0}$$

当 $\vec{k}$ 和 $\vec{k}'=\vec{k}+\vec{G}_n$ 的零级能量相等 $|\vec{k}|^2=|\vec{k}+\vec{G}_n|^2$

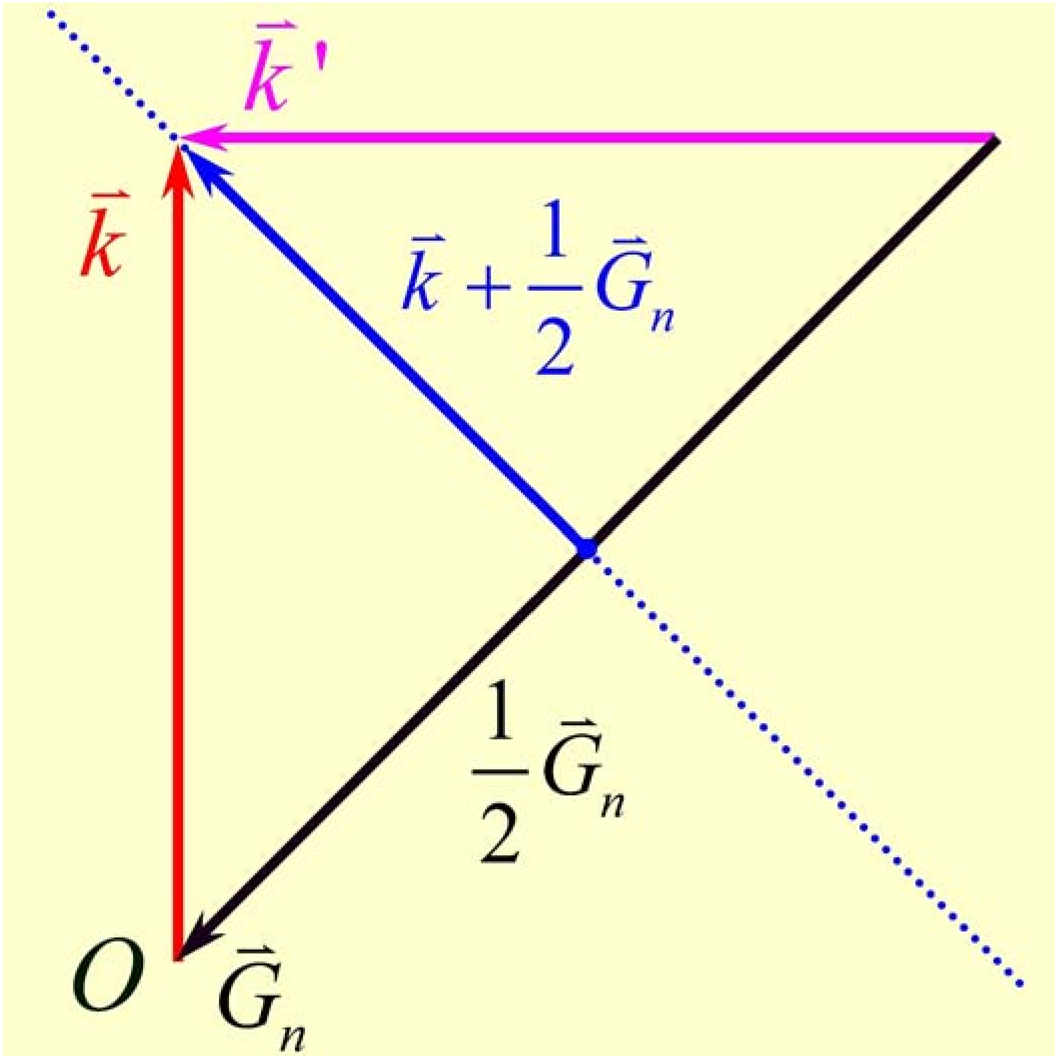
$$\vec{G}_n\cdot(\vec{k}+\frac{1}{2}\vec{G}_n)=0$$

—— 一级修正波函数和二级能量修正趋于无穷大

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}_n$$

$$\vec{G}_n \cdot (\vec{k} + \frac{1}{2}\vec{G}_n) = 0$$

—— 三维晶格，波矢在倒格矢垂直平分面上以及附近的值，非简并微扰不再适用



简单立方晶格中的倒格子空间 $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}_n$

A和**A'**两点相差倒格矢

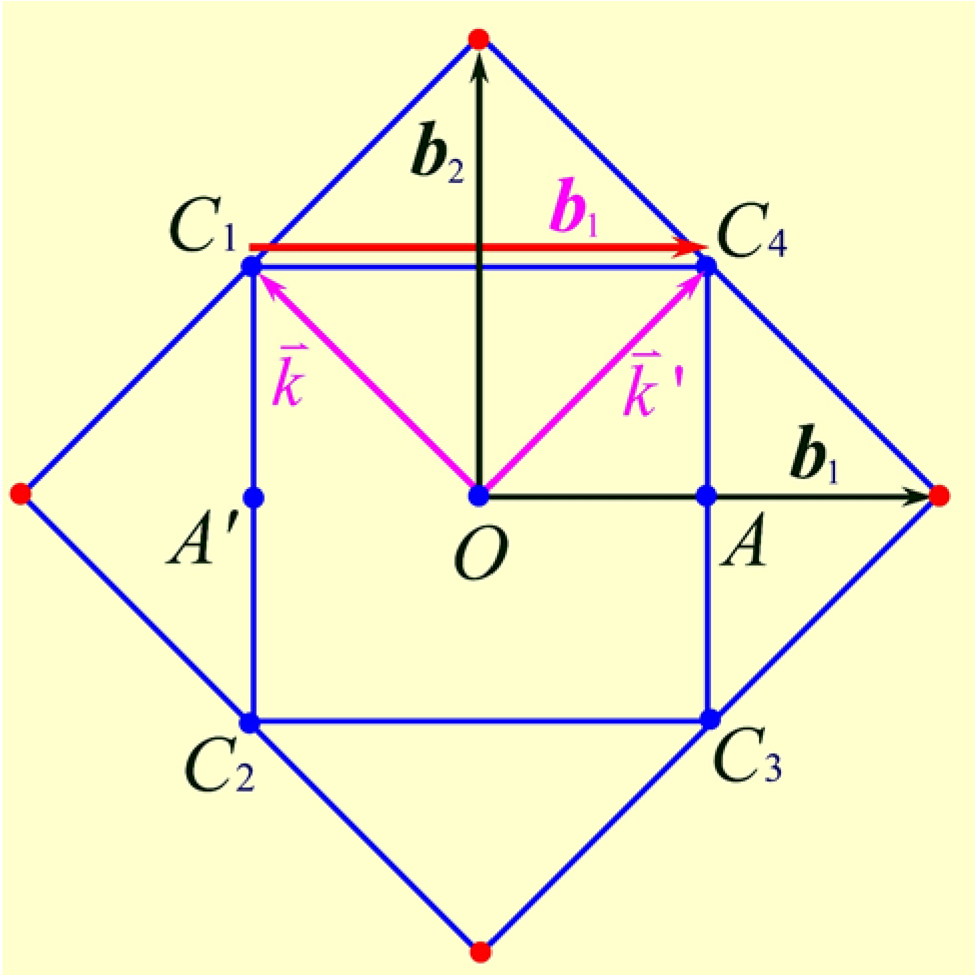
$$\vec{G}_n = \vec{b}_1$$

—— 两点零级能量相同

$$C_1, C_2, C_3, C_4$$

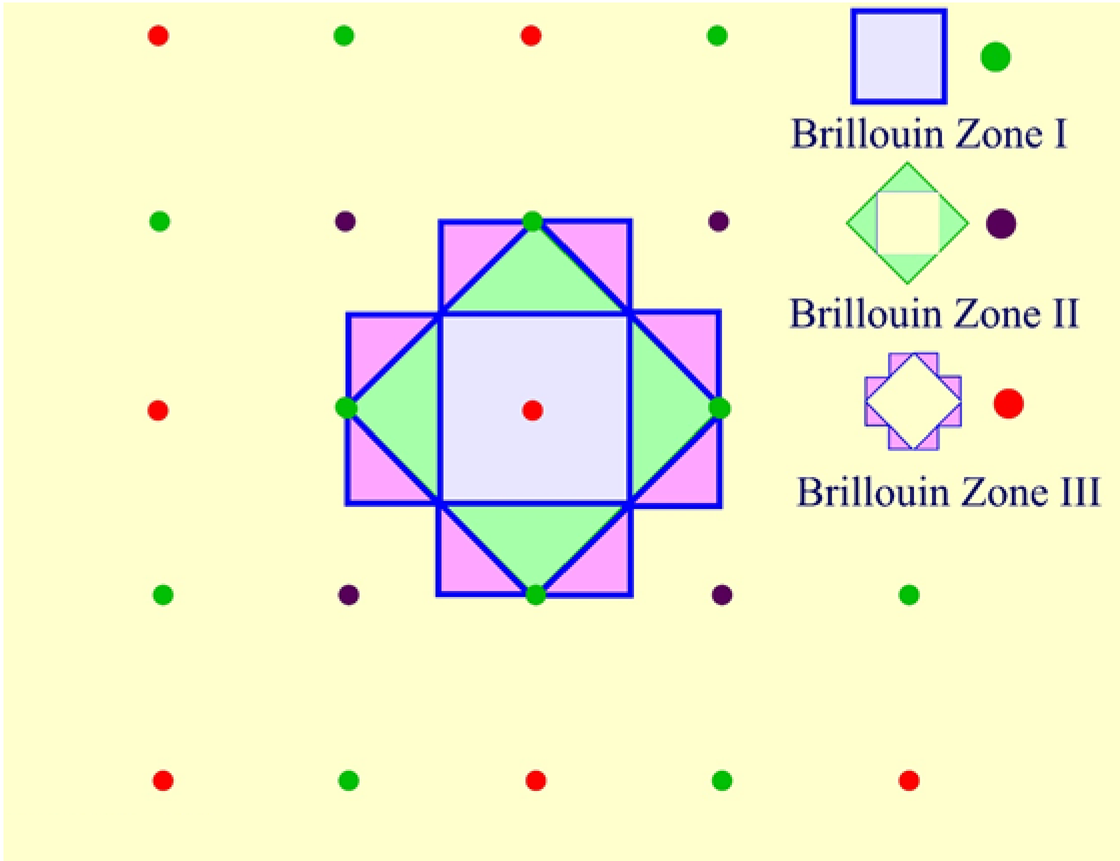
—— 四点相差一个倒格矢，零级能量相同

—— 三维情形中，简并态的数目可能多于两个



2. 布里渊区和能带

简单立方晶格k空间的二维示意图



—— 在k空间把原点和所有倒格矢中点的垂直平分面画出，k空间分割为许多区域

—— 每个区域内E~k是连续变化的，而在这些区域的边界上能量E(k)发生突变，这些区域称为布里渊区

—— 属于同一个布里渊区的能级构成一个能带

—— 不同的布里渊区对应不同的能带

—— 每一个布里渊区的体积相同，为倒格子原胞的体积

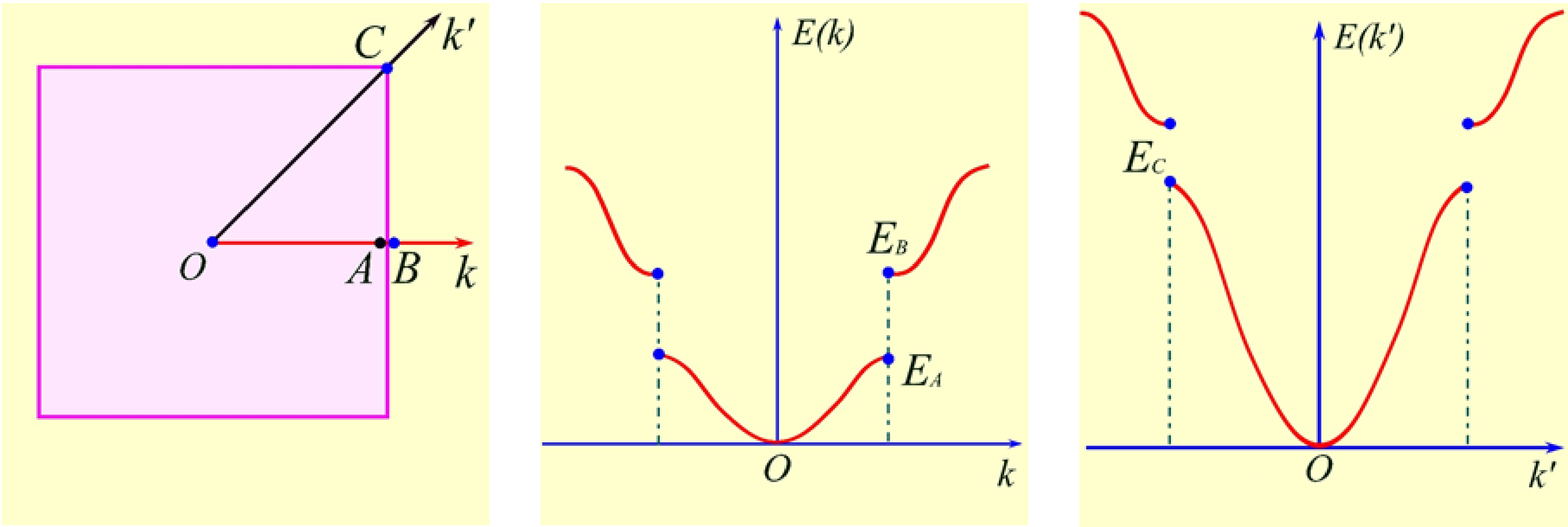
—— 每个能带的量子态数目：**2N**（计入自旋）

—— 三维晶格中，不同方向上能量断开的取值不同，使得不同的能带发生重叠

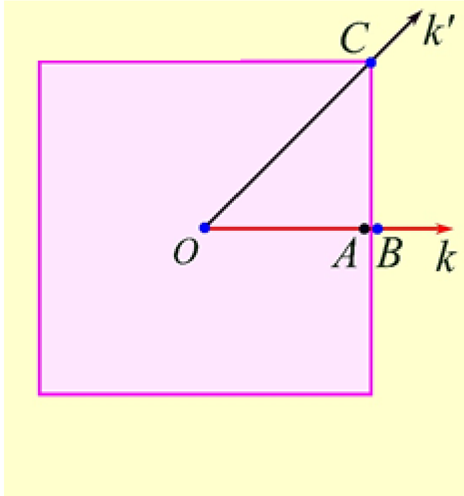
二维正方格子

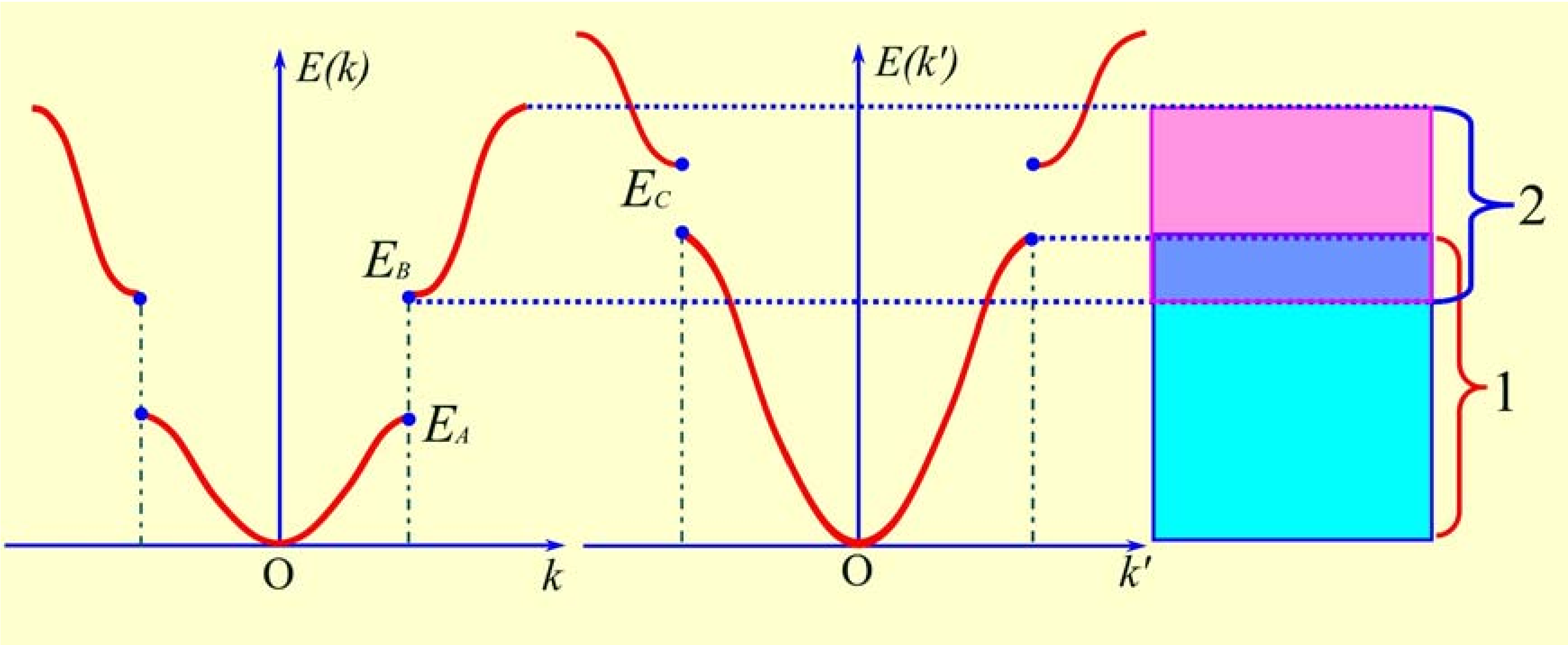
—— 第一布里渊区在**k**方向上能量最高点**A**，**k'**方向上能量最高点**C**

—— **C**点的能量比第二布里渊区**B**点高



—— 第一布里渊区和第二布里渊区能带的重叠





用简约波矢 $\bar{k}$ 表示能量和波函数

$$\vec{k} = \bar{k} + \vec{G}_m$$

能量和波函数 $E_n(\bar{k})$ $\psi_{n\bar{k}}(\vec{r})$

$$\psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{G}_m\cdot\vec{r}} [1 + (\sum_n{}' \frac{V_n}{E^0_{\vec{k}} - E^0_{\vec{k}+\vec{G}_n}} e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{r}})]$$

$$E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} + \sum_{k'}{}' \frac{|V_n|^2}{E^0_{\vec{k}} - E^0_{\vec{k}+\vec{G}_n}}$$

—— 必须同时指明它们属于哪一个能带

3. 几种晶格的布里渊区

1) 简单立方格子

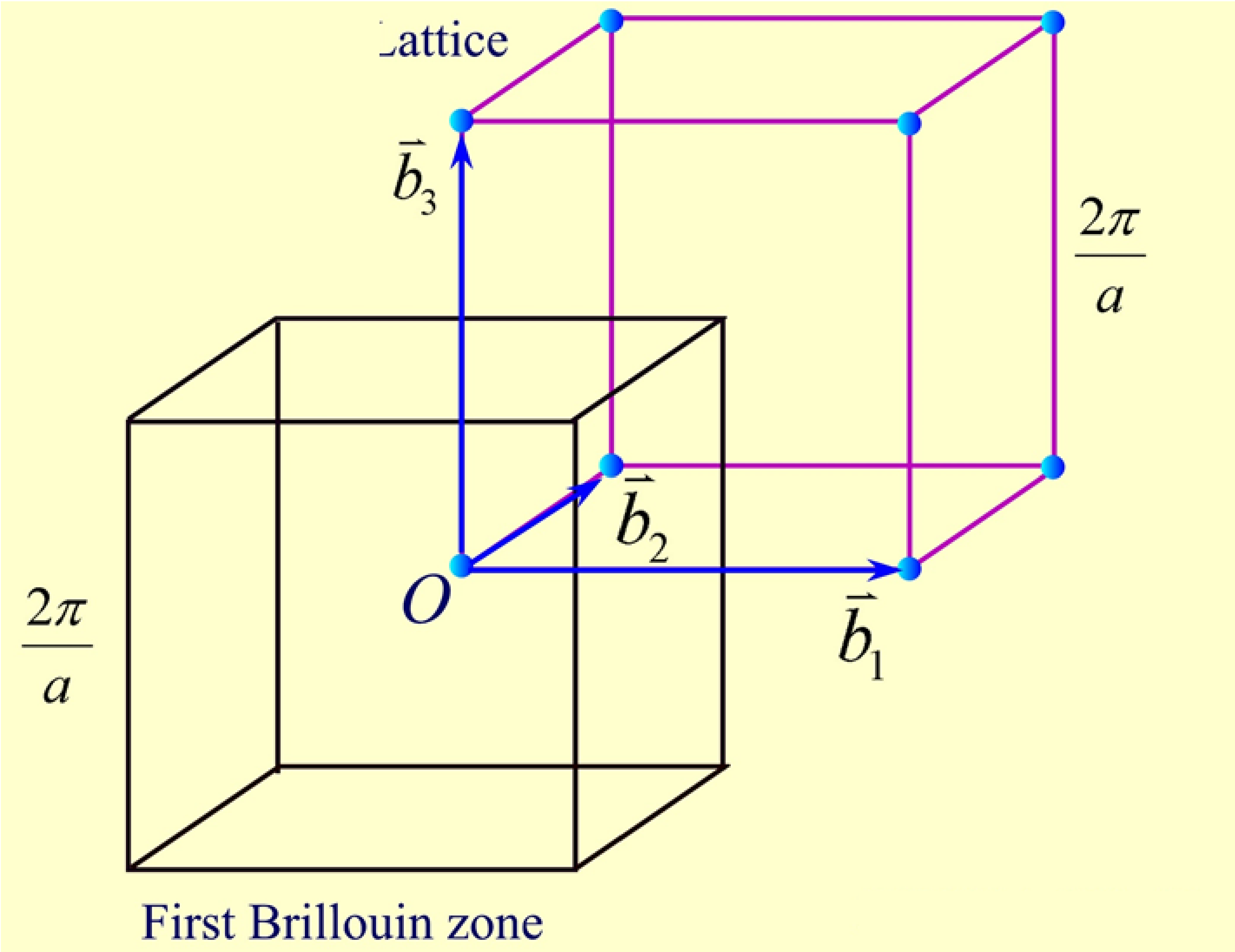
正格子基矢 $\vec{a}_1 = a\vec{i}\,, \vec{a}_2 = a\vec{j}\,, \vec{a}_3 = a\vec{k}$

倒格子基矢 $\vec{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{i}\,,\ \vec{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{j}\,,\ \vec{b}_3 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{k}$

—— 简单立方格子

—— 第一布里渊区为原点和**6**个近邻格点的垂直平分面围成的立方体

—— 第一布里渊区


Lattice
$\vec{b}_3$
$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$
O
$\frac{2\pi}{a}$
$\frac{2\pi}{a}$
First Brillouin zone

2) 体心立方格子

—— 正格子基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}),\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}),\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

—— 倒格子基矢

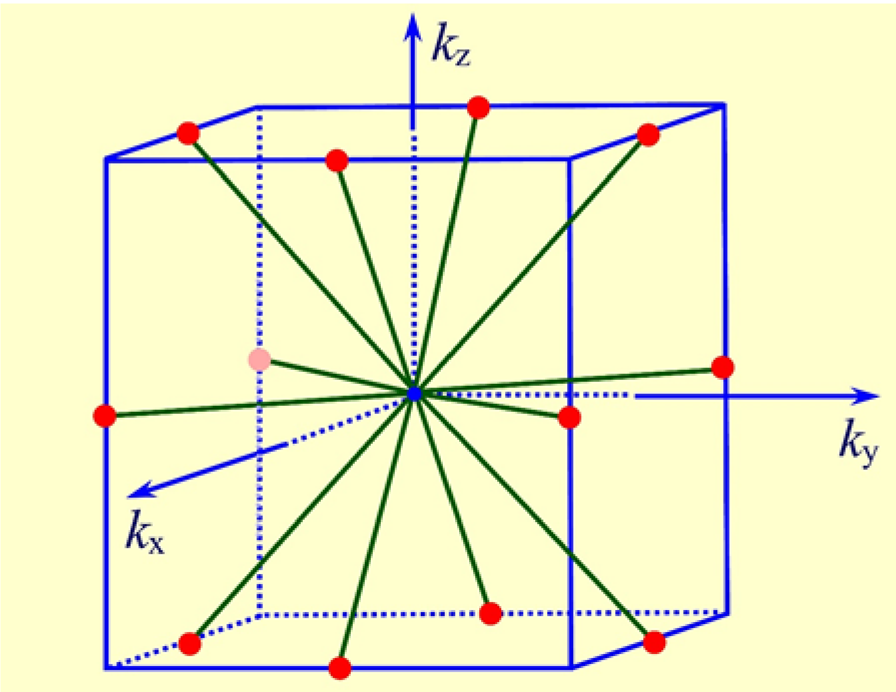
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k}) \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k}) \qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$$

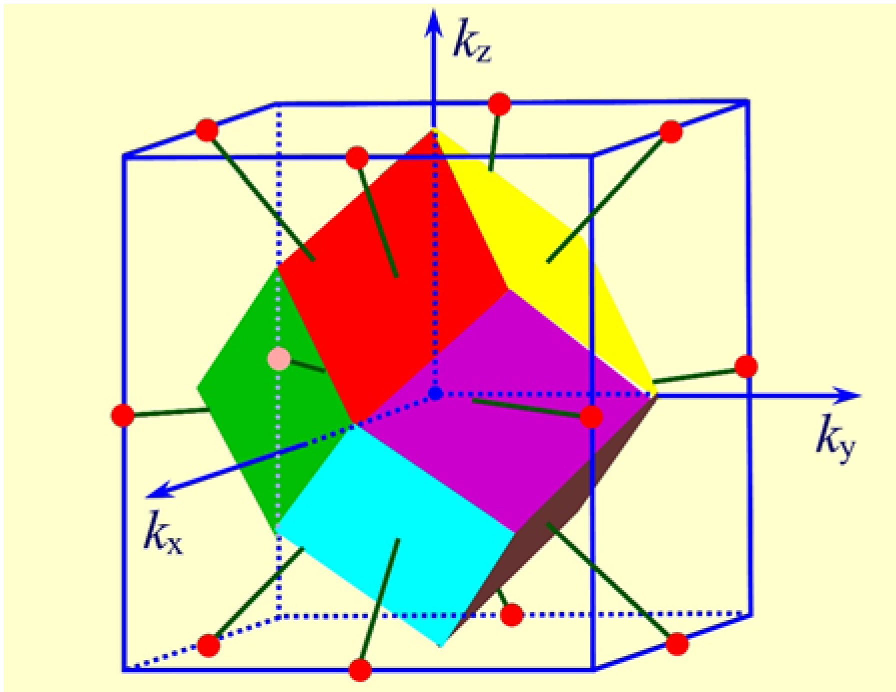
— 边长 $\dfrac{4\pi}{a}$ 的面心立方格子

—— 第一布里渊区为原点和**12**个近邻格点连线的垂直平分面围成的正十二面体

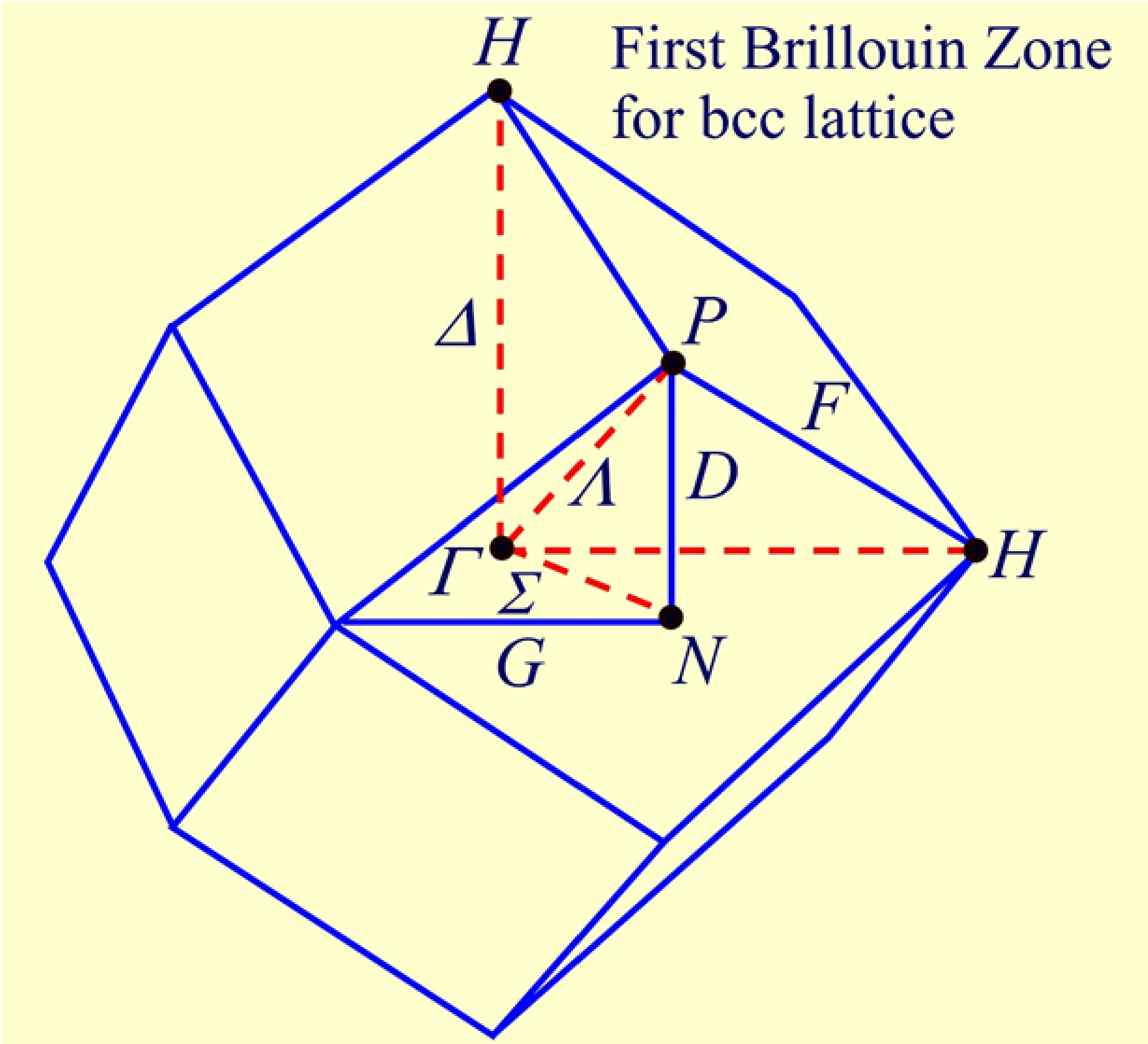
—— 第一布里渊区

原点和12个近邻格点连线的垂直平分面围成的正十二面体





体心立方格子第一布里渊区各点的标记



3) 面心立方格子

—— 正格子基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}),\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k} + \vec{i}),\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$$

—— 倒格子基矢

— 边长 $\frac{4\pi}{a}$ 的体心立方格子

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

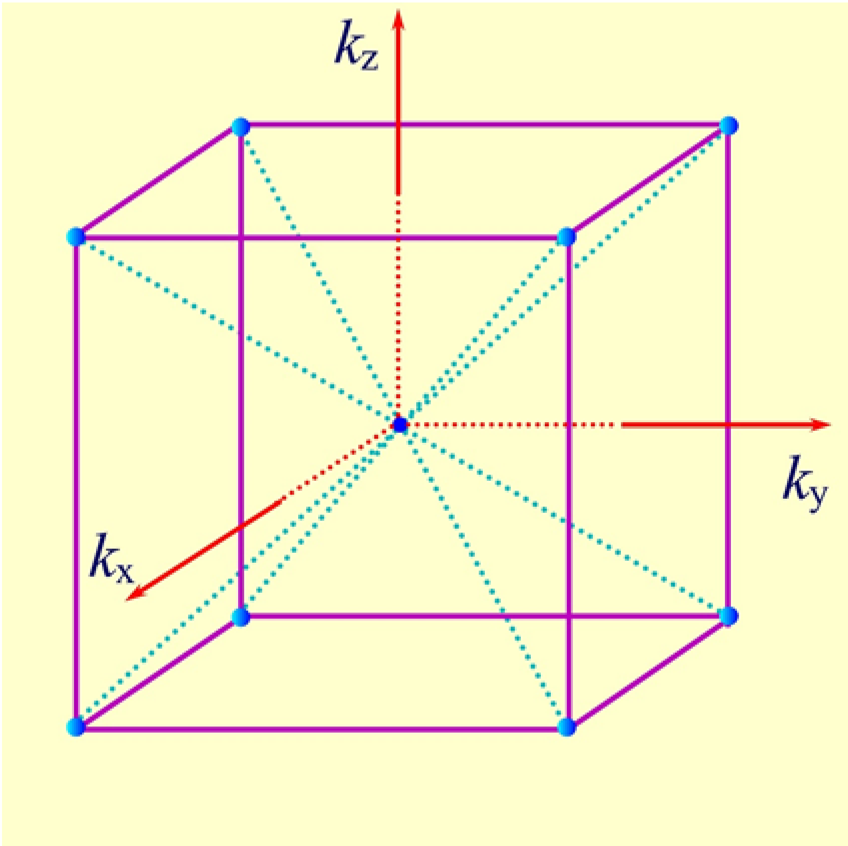
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

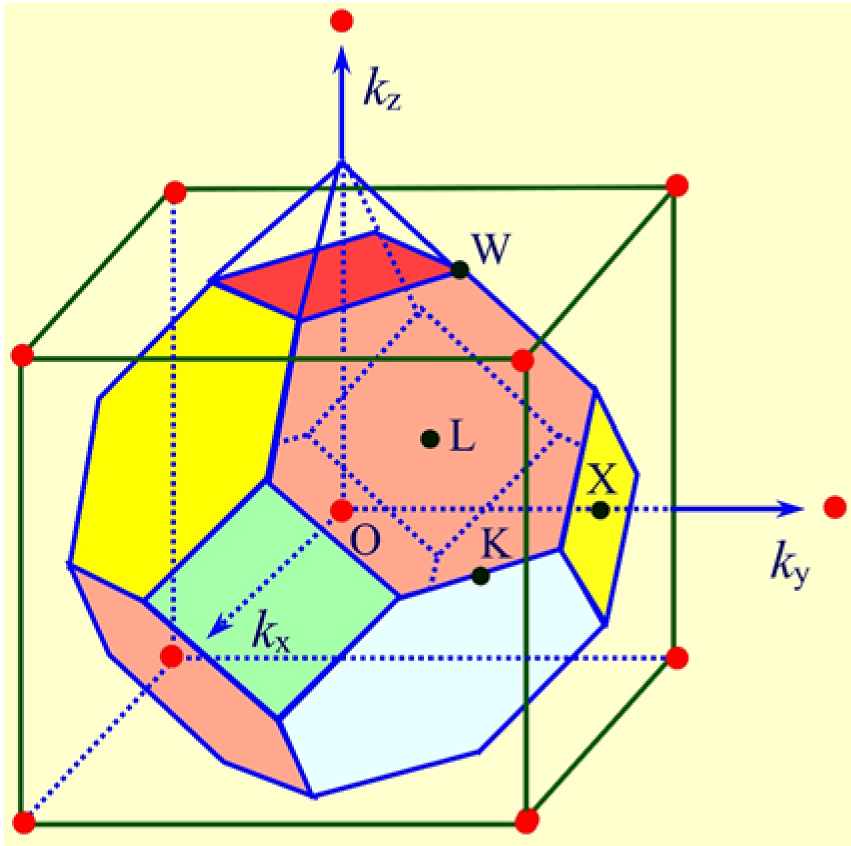
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

—— 第一布里渊区为原点和**8**个近邻格点连线的垂直平分面围成的正八面体，和沿立方轴的**6**个次近邻格点连线的垂直平分面割去八面体的六个角，形成的**14**面体

—— 第一布里渊区

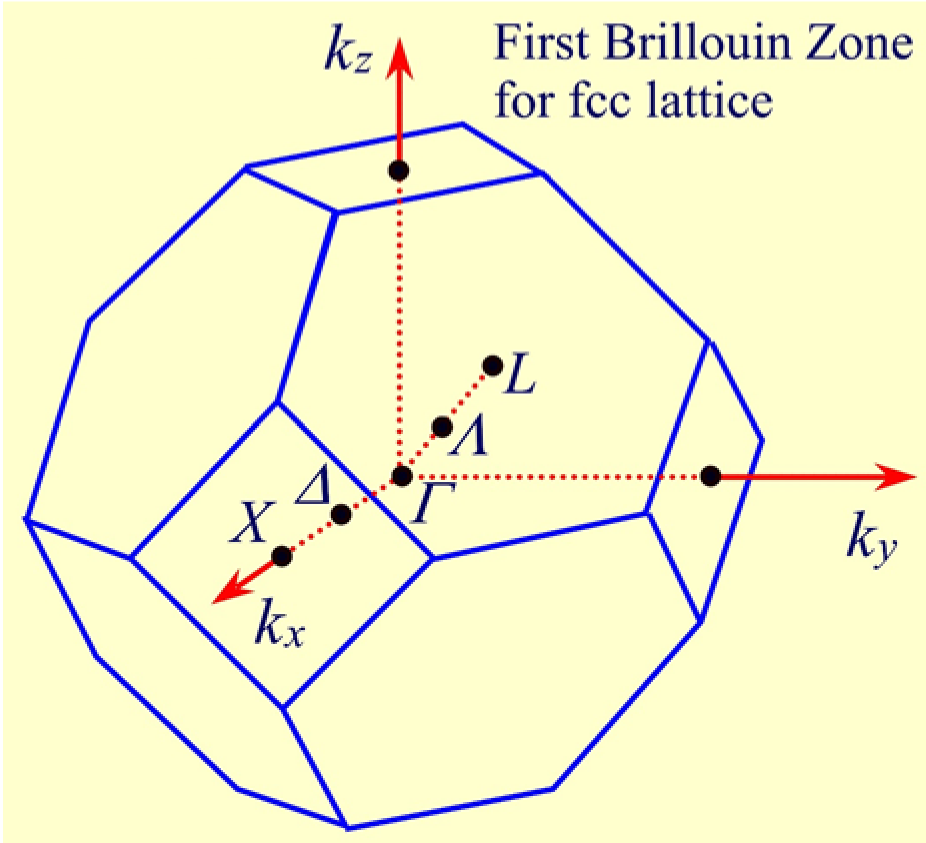
—— 八个面是正六边形 —— 六个面是正四边形





—— 第一布里渊区为十四面体

—— 布里渊区中某些对称点和若干对称轴上的点能量较为容易计算，这些点的标记符号



布里渊区原点 Γ [000]

六方面的中心 $L\ (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$　　ΓX 计为 Δ 轴 —— (100) 方向

四方面的中心 $X\ (\frac{2\pi}{a}, 0, 0)$　　ΓL 计为 Λ 轴 —— (111) 方向

—— 将零级近似下的波矢**k**移入简约布里渊区，能量变化的图像，图中定性画出了沿Δ轴的结果