课程信息

• 第五次作业:

- 1. 阅读黄昆《固体物理》第五章5-1至5-6小结,并总结其主要知识结构或知识点(不超过半页A4纸)
- 2. 理想条件下,当无外场时,晶体中的电子在实空间与k空间分别做怎样的运动?
- 3.理想条件下,存在恒定外场时,晶体中的电子在 实空间与k空间分别做怎样的运动?
- 3. 书后习题4.7, 5.1

§ 5.2 恒定电场作用下电子的运动

—— 一维紧束缚近似下,电子在恒定电场作用下的运动规律

电子的能量
$$E^{i}(k) = \varepsilon_{i} - J_{0} - 2J_{1}\cos ka$$

电子的速度
$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$$
 $v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin ka$

$$v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin ka$$

有效质量

$$m*(k) = \hbar^2 / \frac{d^2E}{dk^2}$$

$$m*(k) = \hbar^2 / 2J_1 a^2 \cos ka$$

简约布里渊区能带、电子的速度和有效质量

能带底部 k=0

$$v(k) = 0$$

$$m*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1a^2}$$

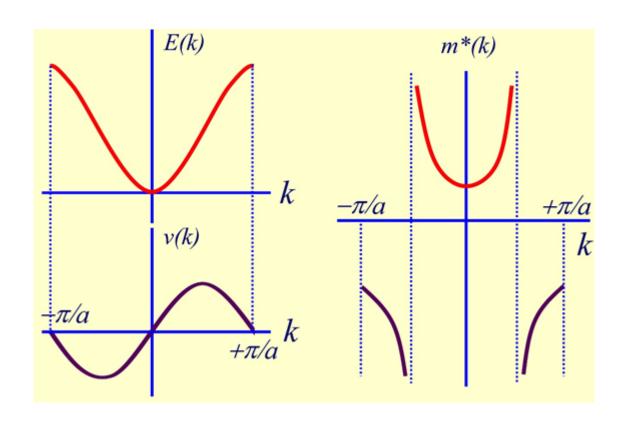
能带顶部 $k = \pm \pi / a$

$$v(k) = 0$$

$$m*(k) = -\frac{\hbar^2}{2J_1 a^2}$$

$$v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin ka$$

$$m^*(k) = \hbar^2 / 2J_1 a^2 \cos ka$$



—— 在外加电场作用下电子的运动

电场力 $\vec{F} = -q\vec{E}$ —— 沿k轴的正方向(E沿k的负方向)

$$\frac{\hbar dk}{dt} = F$$
 —— 电子在k空间做匀速运动

$$E^{i}(k) = \varepsilon_{i} - J_{0} - 2J_{1}\cos ka$$

电子的速度

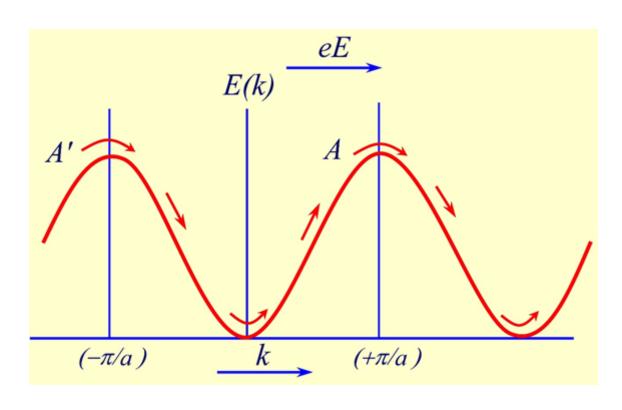
$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} \qquad v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin ka$$

$$v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin(a \frac{1}{\hbar} Ft)$$

电子的速度
$$v(k) = \frac{2J_1a}{\hbar}\sin(a\frac{1}{\hbar}Ft)$$
 $\frac{\hbar dk}{dt} = F$

—— 电子的运动保持在同一个能带内,能量周期性变化

- —— k空间布里渊区
- —— 电子从 **k**=π/**a** 移动出去
- —— 同时从 k= **-**π/a 移动进来



电子速度振荡
$$v(k) = \frac{2J_1a}{\hbar}\sin a\frac{1}{\hbar}Ft$$
 $m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1a^2\cos ka}$

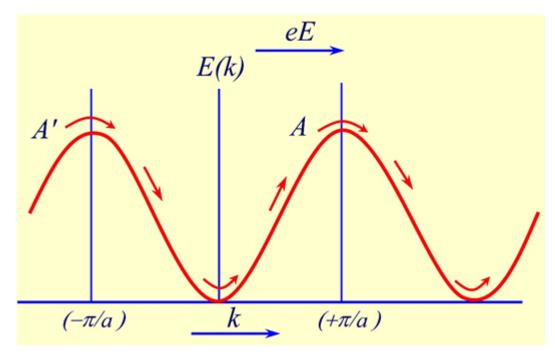
 $t=0: k=0, m^*>0$ —— 外力作用使电子加速, v(k) 增大

$$\mathbf{k} = \pi/2\mathbf{a}$$
 $v(k) = 2J_1 a/\hbar$ $m^*(k) \Rightarrow \infty$

 $k > \pi/2a$, $m^* < 0$

—— 电子做减速运动

$$\mathbf{k} = \pi/\mathbf{a}$$
 $v(k) = 0$



$$m^*(k) = -\hbar^2 / 2J_1a^2$$
—— 电子到达能带顶部

电子速度振荡
$$v(k) = \frac{2J_1a}{\hbar}\sin a\frac{1}{\hbar}Ft$$
 $m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1a^2\cos ka}$

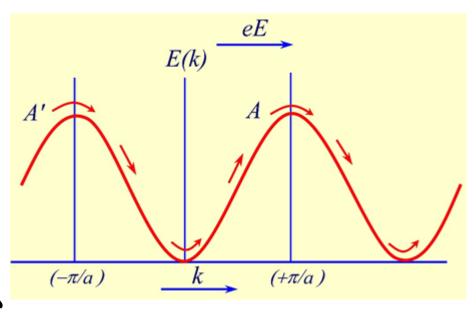
 $k = -\pi/a \sim -\pi/2a$ 范围内, |v(k)| 不断增大

$$\mathbf{k} = -\pi/2\mathbf{a} \quad v(k) = -\frac{2J_1a}{\hbar}$$

$$m^*(k) \Rightarrow \infty$$

 $\mathbf{k} = -\pi/2\mathbf{a} \sim \mathbf{0}$

—— m*(k)>0, | v(k) | 不断减小



$$k = 0$$
 $v(k) = 0$ $m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1a^2}$ —— 电子到达能带底部

电子运动在实空间中的描述

$$v(k) = \frac{2J_1a}{\hbar} \sin a \frac{1}{\hbar} Ft - ---$$
电子在实空间中运动的振荡

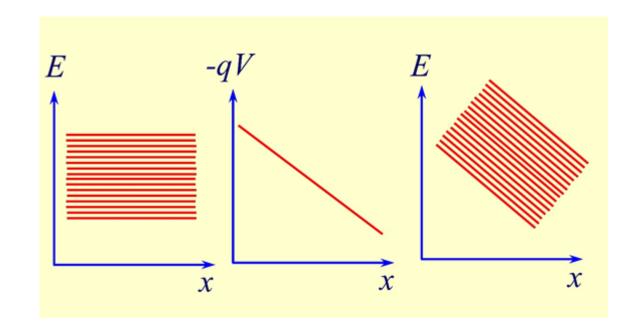
能带的倾斜

外电场对电子能量本征值附加的能量 —— E沿-x方向

$$\Delta E = -qV$$

$$V = Ex$$

$$\Delta E = -qEx$$



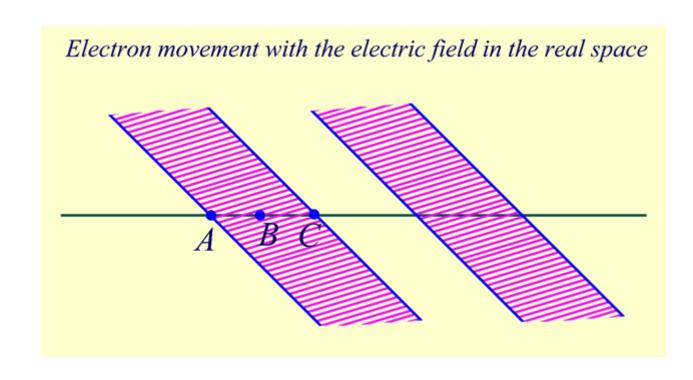
电子运动的振荡

t=0电子由带底A点经过B点到达C点 —— k=0 到 $k=\pi/a$ 的运动

—— 在C点电子遇到带隙,相对于存在一个位垒,电子将被全部反射回来,电子由C点经过B点回到A点

—— k=-π/a 到 k=0 的运动

—— 两个能带的情形中,电子在实空间的运动振荡



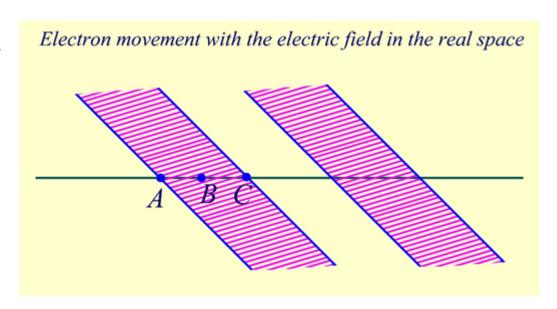
—— 电子在运动的过程中,由于受到声子、杂质和缺陷的散射(碰撞),相邻两次散射之间的平均时间间隔为电子的平均自由运动时间: τ

—— 如果τ很小, 电子来不及完成振荡运动就被散射破坏了

观察电子运动振荡的条件

 $---\omega \tau >> 1$

—— ω振荡圆频率



振荡圆频率
$$\omega = \frac{2\pi}{T}$$

$$T = \frac{2\pi / a}{v(k)} \quad \blacksquare$$

$$\frac{\hbar dk}{dt} = F$$

$$v(k) = \frac{dk}{dt} = \frac{qE}{\hbar}$$

$$\omega = 2\pi \left(\frac{2\pi / a}{qE/\hbar}\right)^{-1} \qquad \omega\tau >> 1$$

如果 $a \approx 0.3 \text{ nm}, \tau \approx 10^{-13} \text{ s}, \quad \text{则 } E > 2 \times 10^7 \text{ V/m}$

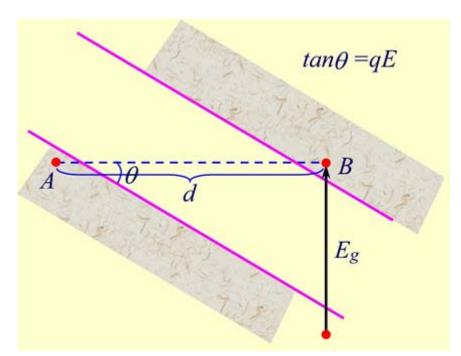
- ——在金属中无法实现,对于绝缘体早已被击穿
- —— 很难观察到电子的振荡,在一般电场下,在k空间电子只是发生了一个小位移,无法实现振荡

——根据量子理论,电子可以发生势垒贯穿效应

穿透位垒的几率

$$\propto E \exp[-\frac{\pi^2}{\hbar} \frac{2mE_g}{qE} (\frac{E_g}{qE})]$$

$$d = \frac{E_g}{qE} - --- 位垒长度$$



—— 当电场足够强时,若下面的能带被电子填充满,或者接近填充满,上面能带是空带可以接纳电子,此时电子有一定的几率从价带穿透带隙进入导带

—— 隧道效应

§ 5.3 导体、绝缘体和半导体的能带论解释

——问题的提出

—— 所有固体都包含大量的电子,但电子的导电性却相差 非常大

导体的电阻率 $\rho \sim 10^{-6} \Omega \cdot cm$

半导体的电阻率 $\rho \sim 10^{-2} - 10^9 \Omega \cdot cm$

绝缘体的电阻率 $\rho \sim 10^{14} - 10^{22} \Omega \cdot cm$

—— 特鲁特关于一些金属导电电子数等于原子的价电子数的假设是相当成功

—— 其它一些固体却不是这样

—— 导体、半导体和绝缘体的区别在哪里?

—— 电子的能带理论解释了导体与绝缘体

1. 满带中的电子对导电的贡献

电子能量是波矢的偶函数 $E_n(k) = E_n(-k)$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$$

波矢为
$$\vec{k}$$
的电子的速度 $\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E = -\frac{1}{\hbar} \nabla_{-k} E$

波矢为
$$-\vec{k}$$
 的电子的速度 $\vec{v}(-\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_{-k}E$

$$\vec{v}(\vec{k}) = -\vec{v}(-\vec{k})$$

---- k 状态和 -k 状态中电子的速度大小相等、方向相反

1) 在无外场时

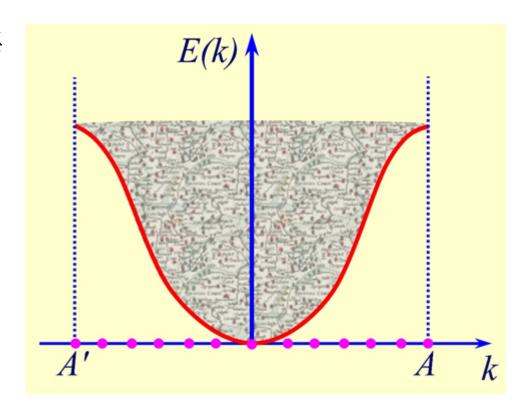
—— \vec{k} 状态和 $-\vec{k}$ 状态中电子的速度大小相等、方向相反

每个电子产生的电流 $-q\overline{v}$

热平衡状态下,电子占据波矢为 \bar{k} 的状态和占据波矢为 \bar{k} 的状态的几率相等

—— 晶体中的满带在无 外场时,不产生电流

—— 对电流的贡献相互抵消

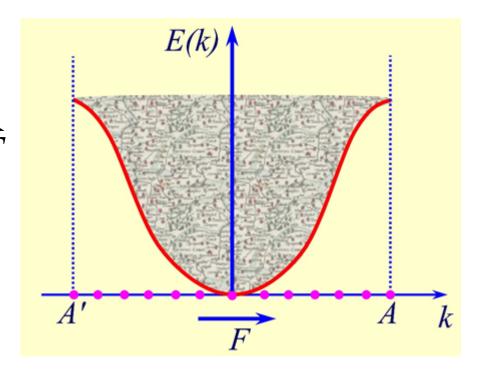


2) 在有外场 \vec{E} 作用时

电子受到的作用力 $\vec{F} = -q\vec{E}$

电子动量的变化
$$\frac{d(\hbar \vec{k})}{dt} = \vec{F}$$

—— 所有电子状态以相同的速 度沿着电场的反方向运动



$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{1}{\hbar}q\vec{E}$$

—— 满带的情形中,电子的运动不改变布里渊区中电子的 分布,满带中的电子不产生宏观的电流

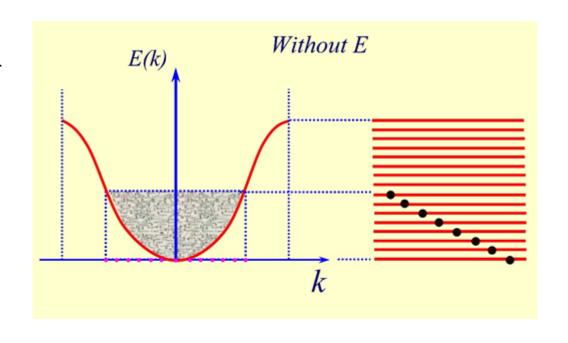
2. 导带中的电子对导电的贡献

1) 无外场存在时

—— 虽然只有部分状态被电子填充,但波矢为 k 的状态和波矢为 -k 的状态中电子的速度大小相等、方向相反,对电流的贡献相互抵消

—— 热平衡状态下,电子 占据两个状态的几率相等

—— 晶体中的导带在无 外场作用时,不产生电流



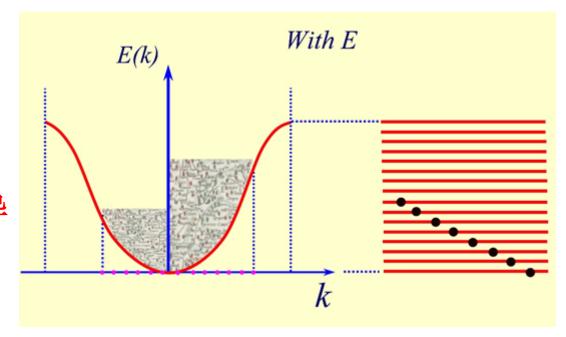
2) 在有外场作用时

—— 导带中只有部分状态被电子填充,外场的作用会使布 里渊区的状态分布发生变化

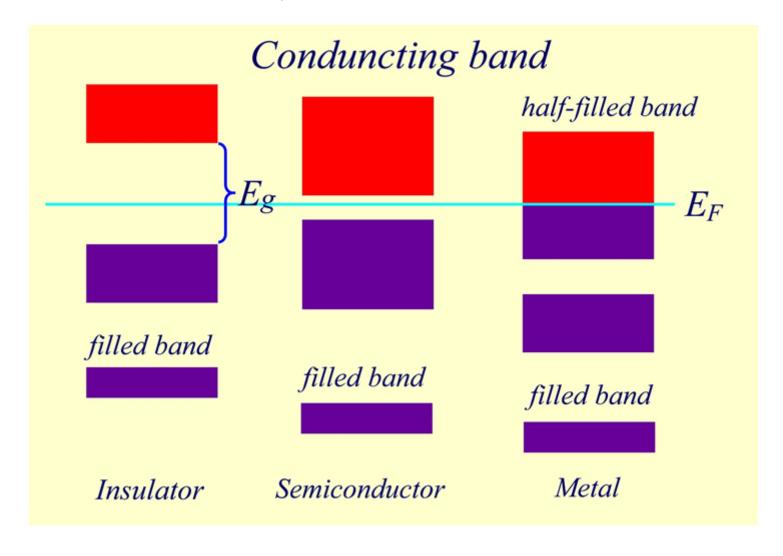
—— 所有的电子状态以相同的速度沿着电场的反方向运动, 但由于能带是不满带,逆电场方向上运动的电子较多

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{1}{\hbar}q\vec{E}$$

——在外场作用下,导 带中的电子产生电流



导体、半导体、绝缘体模型



绝缘体 —— 原子中的电子是满壳层分布的,价电子刚好填满了许可的能带,形成满带,导带和价带之间存在一个很宽的禁带,在一般情况下,价带之上的能带没有电子

—— 在电场的作用下没有电流产生

导体 —— 在一系列能带中除了电子填充满的能带以外,还有部分被电子填充的能带 — 导带,后者起着导电作用

—— 为原胞数目的二倍

原胞中只有一个价电子的固体 Li(3)、Na(11)、K(19)、Cu(29)、Ag(47) 它们只填充半条能带 —— 导体

原胞中含有偶数个价电子,可以填满一个能带

——绝缘体

二价金属: Be(4)、Mg(12)、Zn(30),原胞中有2个价电子

—— 绝缘体???

—— 它们却是导体

—— 能带存在交叠

半导体(Si:	14、	Ge:	32):	禁带宽度	度较窄,	约~2 e	V以下	
•		激发电能		以将	满带中的	J电子激	发到导	带中,	因而
					子数目随 的升高接		•		<u>;</u> , ¥

半金属

V族元素Bi、Sb、As: 三角晶格结构,原胞有偶数个电子

- —— 金属的导电性,能带的交叠
- —— 导电能力远小于金属,<mark>能带交叠较小</mark>,对导电有贡献的 载流子数远远小于普通的金属

3. 近满带和空穴

近满带 —— 满带中的少数电子受热或光激发从满带跃迁到 空带中去,使原来的满带变为近满带

空穴 —— 描述近满带的导电性

设想近满带中只有一个 \bar{k} 态没有电子

在电场的作用下,近满带产生的电流为近满带中所有电子对电流的贡献,总电流 $I(\bar{k})$

如果在空的 \vec{k} 中放入一个电子,近满带变为满带,总的电流为零

$$I(\vec{k}) + [-q\vec{v}(\vec{k})] = 0$$

$$I(\vec{k}) = q\vec{v}(\vec{k})$$

近满带的总电流相当于一个带正电q的粒子,以空状态 k中电子的速度 $\bar{v}(\bar{k})$ 所引起的

在电磁场作用下,满带不产生电流 $I(k) + [-q\bar{v}(k)] = 0$

两边对时间微分得到
$$\frac{dI(\vec{k})}{dt} = q \frac{d}{dt} \vec{v}(\vec{k})$$

作用于空状态中电子的洛伦兹力 $-q\{\vec{E}+[\vec{v}(\vec{k})\times\vec{B}]\}$

电子加速度
$$m*\frac{d}{dt}\vec{v}(\vec{k}) = -q\{\vec{E} + [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]\}$$
 $m*<0$

$$\frac{dI(\vec{k})}{dt} = -\frac{q^2}{m^*} \{ \vec{E} + [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \}$$

$$\frac{dI(\bar{k})}{dt} = -\frac{q}{m^*} \{ q\bar{E} + [q\bar{v}(\bar{k}) \times \bar{B}] \} \qquad m^* < 0$$

$$\frac{dI(\vec{k})}{dt} = \frac{q}{|m^*|} \{ q\vec{E} + [q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \}$$

$$q\vec{E} + [q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]$$
 —— 正电荷q在电磁场中受到的力

—— 外电磁场中,近满带电流的变化等同于一个带正电q,具有正质量 $|m^*|$ 的粒子

结论

当满带顶附近有空状态 \bar{k} 时,整个能带中的电流以及电流在外电磁场中的变化相当于一个带正电 \mathbf{q} ,具有正质量 $|\mathbf{m}^*|$ 、速度 $\bar{v}(\bar{k})$ 的粒子,这样一个假想的粒子——空穴

固体中导带底部少量电子引起的导电 —— 电子导电性

固体中满带顶部缺少一些电子引起的导电 —— 空穴导电性

——满带中的少量电子激发到导带中,产生的本征导电是由相同数目的电子和空穴构成的——混合导电性

- § 5.4 在恒定磁场中电子的运动
- 1. 恒定磁场中的准经典运动

恒定磁场中电子运动的基本方程

$$\vec{\nabla} (\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k})$$

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{E}$$

- 1) 沿磁场方向 k 的分量不发生变化
- 2) 洛伦兹力不做功,能量 E(k) 不随时间变化,电子在k空间的等能面上运动
- —— 电子在k空间的运动轨迹是垂直于磁场的平面与等能面的交线

2. 自由电子的准经典运动

自由电子的能量 $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

电子的运动

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k}) \longrightarrow \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B} \longrightarrow \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{q}{m} (\vec{k} \times \vec{B})$$

$$\vec{B} = (0, 0, B)$$

$$\frac{dk_x}{dt} = -\frac{qB}{m}k_y, \quad \frac{dk_y}{dt} = \frac{qB}{m}k_x, \quad \frac{dk_z}{dt} = 0$$

$$\begin{cases} \frac{d^2 k_x}{dt^2} = -(\frac{qB}{m})^2 k_x & \begin{cases} \frac{d^2 k_x}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2 k_x = 0\\ \frac{d^2 k_y}{dt^2} = -(\frac{qB}{m})^2 k_y & \begin{cases} \frac{d^2 k_x}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2 k_x = 0\\ \frac{d^2 k_y}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2 k_y = 0 \end{cases}$$

回转频率
$$\omega_0 = \frac{qB}{m}$$

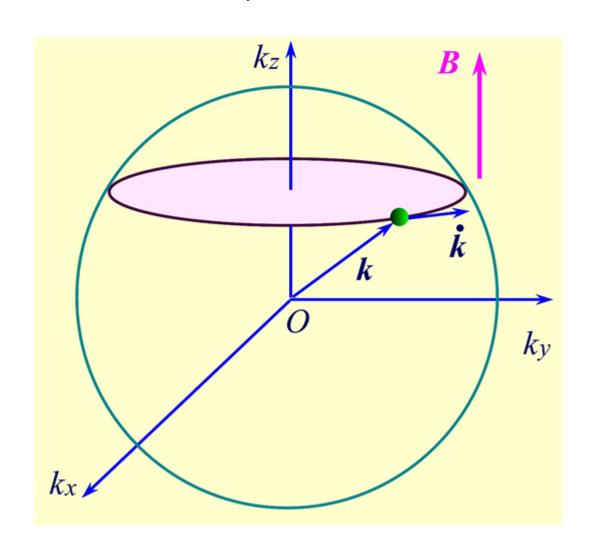
----k空间电子在 (k_x, k_y) 面上做圆周运动

----k空间电子在 (k_x, k_y) 面上做圆周运动

$$\frac{dk_{x}}{dt} = -\frac{qB}{m}k_{y}$$

$$\frac{dk_{y}}{dt} = \frac{qB}{m}k_{x}$$

$$\frac{dk_{z}}{dt} = 0$$



—— 实空间电子的运动

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} \longrightarrow \frac{\vec{v}(\vec{k})}{dt} = \frac{\hbar}{m} \frac{d\vec{k}}{dt}$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{q}{m} (\vec{k} \times \vec{B})$$

$$\frac{\vec{v}(\vec{k})}{dt} = \frac{1}{m} [-q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]$$

$$\begin{cases} \frac{dv_{x}}{dt} = -\frac{qB}{m}v_{x} \\ \frac{dv_{y}}{dt} = \frac{qB}{m}v_{x} \\ \frac{dv_{z}}{dt} = 0 \end{cases}$$

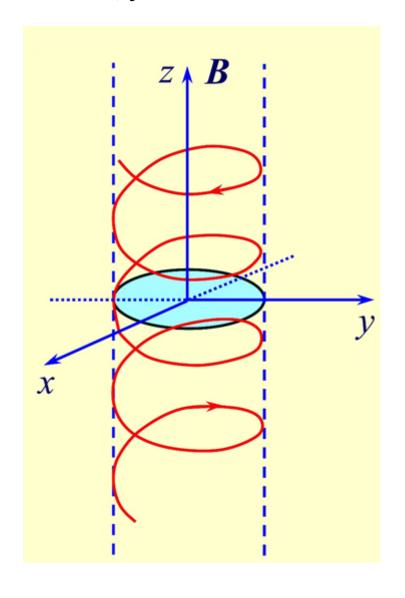
$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\frac{qB}{m}v_y & \Rightarrow \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{qB}{m}v_x & \Rightarrow \\ \frac{d^2v_x}{dt^2} = -\frac{qB}{m}\frac{dv_y}{dt} \\ \frac{d^2v_y}{dt^2} = \frac{qB}{m}\frac{dv_x}{dt} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{d^2 v_x}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2 v_x = 0 \\ \frac{d^2 v_y}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2 v_y = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \frac{d^2 x}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2 x = 0 \\ \frac{d^2 y}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2 v_y = 0 \end{cases}$$

在(x,y)平面做匀速圆周运动 回转频率 $\omega_0 = \frac{qB}{}$

—— 电子在z方向做匀速运动,在(x,y)平面做匀速圆周运动

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\frac{qB}{m}v_y \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{qB}{m}v_x \\ \frac{dv_z}{dt} = 0 \\ \frac{d^2x}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2x = 0 \\ \frac{d^2y}{dt^2} + (\frac{qB}{m})^2y = 0 \end{cases}$$



3. 自由电子情况的量子理论(不作要求)

无磁场时自由电子哈密顿量
$$\mathcal{H} = \frac{\bar{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

有磁场时
$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\vec{p} + q\vec{A})^2$$

$$\hat{p}_{x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \ \hat{p}_{y} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \ \hat{p}_{z} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} [(\hat{p}_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} [(\hat{p}_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]$$

因为哈密顿量不含x, z $\begin{cases} [\mathcal{H} \ \hat{p}_x] = 0 \\ [\mathcal{H} \ \hat{p}_z] = 0 \end{cases}$

选波函数为 (\hat{p}_x, \hat{p}_z) 本征态 $\begin{cases} \hat{p}_x \psi = \hbar k_x \psi \\ \hat{p}_z \psi = \hbar k_z \psi \end{cases}$

波函数
$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} \phi(y)$$

$$\frac{1}{2m}[(\hat{p}_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]\psi = E\psi$$

得到
$$\frac{1}{2m}[(\hbar k_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hbar^2 k_z^2]\phi(y) = E\phi(y)$$

$$\hat{p}_{y} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \longrightarrow \hat{p}_{y}^{2} = -\hbar^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m}{2} (\frac{qB}{m})^2 (\frac{\hbar}{qB} k_x - y)^2 \right] \phi(y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \phi(y)$$

$$\Rightarrow \omega_0 = \frac{qB}{m}, \quad y_0 = \frac{\hbar}{qB} k_x, \quad \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m}{2}\omega_0^2(y - y_0)^2\right]\phi(y) = \varepsilon\phi(y)$$

——简谐振子方程

简谐振子波函数
$$\phi(y-y_0) \cong e^{-\frac{1}{2}\omega_0(y-y_0)^2} H_n[\omega_0(y-y_0)]$$

能量本征值
$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$$

在磁场中自由电子的波函数

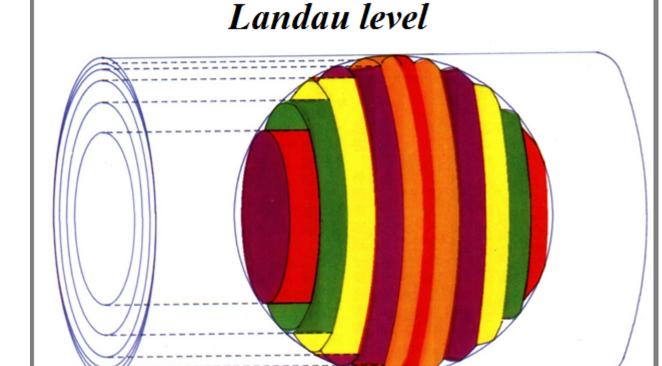
$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{1}{2}\omega_0(y - y_0)^2} H_n[\omega_0(y - y_0)]$$

能量本征值

$$E = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = (n + \frac{1}{2})\hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

- —— 在(x, y)平面内的圆周运动对应一种简谐振荡,能量是 量子化的
- —— 这些量子化的能级称为朗道能级

能量本征值
$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$



朗道能级

- 4. 晶体中电子的有效质量近似
- —— 晶体中电子在磁场中的运动时,其哈密顿量

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} + q\vec{A})^2 + V(\vec{r})$$

- ——将周期性势场的影响概括为有效质量的变化
- ——有效质量近似方法

哈密顿量
$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} + q\vec{A})^2$$

- —— 半导体中能带底和能带顶附近采用有效质量近似处理
- —— 碱金属也可以采用有效质量近似

—— 采用有效质量近似后,晶体中电子在磁场中的运动变为自由电子在磁场中的运动,前面的结果中将电子的质量m用有效质量m*代替

磁场中自由电子的波函数

$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{1}{2}\omega_0(y - y_0)^2} H_n[\omega_0(y - y_0)]$$

能量本征值
$$E = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

回转频率
$$\omega_0 = \frac{qB}{m^*}$$

§ 5.5 回旋共振

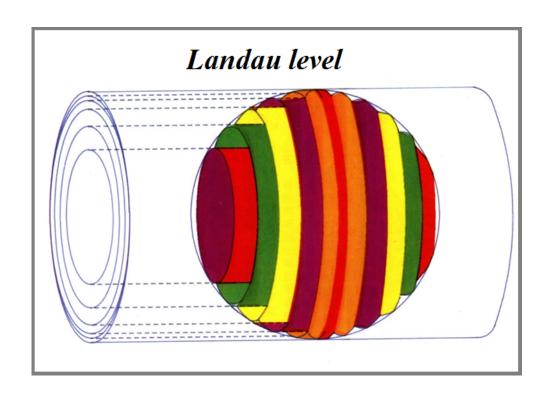
—— 晶体中电子在磁场中的运动时,采用有效质量近似后电子做螺旋运动

—— 回转频率
$$\omega_0 = \frac{qB}{m^*}$$

—— 能量本征值

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

—— 朗道能级



—— 在垂直于磁场的方向施加一个交变电场,当

$$\omega = \omega_0 = \frac{qB}{m^*}$$
 电子将吸收交变电场的能量

- —— 电子发生共振吸收,称为回旋共振
- —— 电子吸收电场的能量,电子实现了从一个朗道能级跃 迁到更高能量的朗道能级上
- —— 半导体材料中能带底和能带顶附近,电子的有效质量不同,具有不同的回旋共振频率
- —— 通过测量回旋共振频率,可以确定电子的有效质量