使用能带理论解释导体、半导体和绝缘体的导电性差异。

怎么理解空穴概念？

在恒定磁场中，晶体中电子在k空间怎么运动？

在恒定磁场中，晶体中电子在实空间怎么运动？

什么是回旋共振，使用回旋共振能够测量固定的什么参数？

第六章

金属电子论

问题1：经典的电子论：假设金属中存在着自由电子，服从玻尔兹曼统计，电子对热容的贡献可以和晶格振动对热容贡献相比拟。
但是：实验测试不能获得电子的这部分对热容的贡献。

量子力学和费米统计规律的确立解决了这个问题。——费米统计和电子热容量

问题2：经典电子论：不能解释电子具有很长“自由程”。
量子理论：能带理论，在严格周期性势场中，电子可以保持在一个本征态，具有一定的平均速度，没有外力时，电子速度不随时间改变，这相当于无限的自由程。实际晶体，由于受到晶格振动或其他因素是晶体势场偏离周期场，这样其自由程是有限的。

在外力作用下，电子的具体的输运过程的怎么处理？？？——电导问题

§ 6.1 费米统计和电子热容量

—— 能带理论是一种单电子近似，每一个电子的运动近似看作是独立的，具有一系列确定的本征态

—— 一般金属特性只涉及导带中的电子

1. 费米分布函数

电子气体服从泡利不相容原理和费米 — 狄拉克统计

—— 热平衡下时，能量为E的本征态被电子占据的几率

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$$

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}+1}$$ —— 费米分布函数

物理意义：能量为E的本征态上电子的数目

——平均占有数

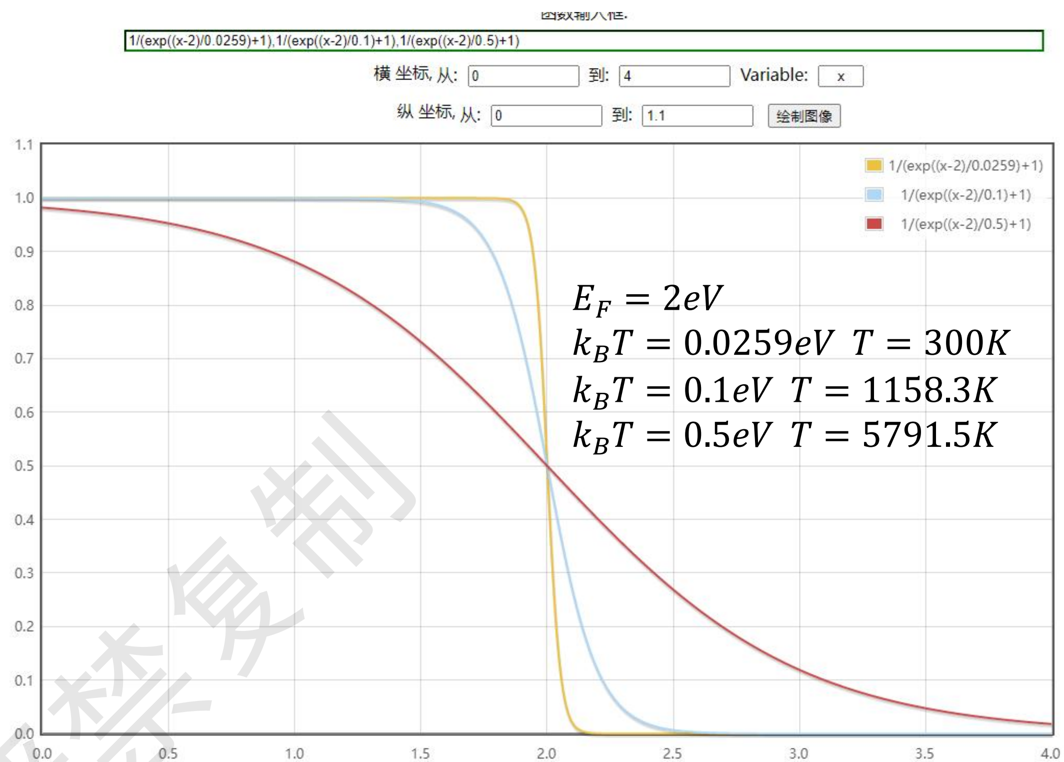
E_F 费米能量或化学势

—— 体积不变时，系统增加一个电子所需的自由能

电子的总数 $N=\sum_i f(E_i)$ —— 对所有的本征态求和

费米分布函数

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$$



1） $T = 0K$

$E < E_F \qquad f(E)=1$

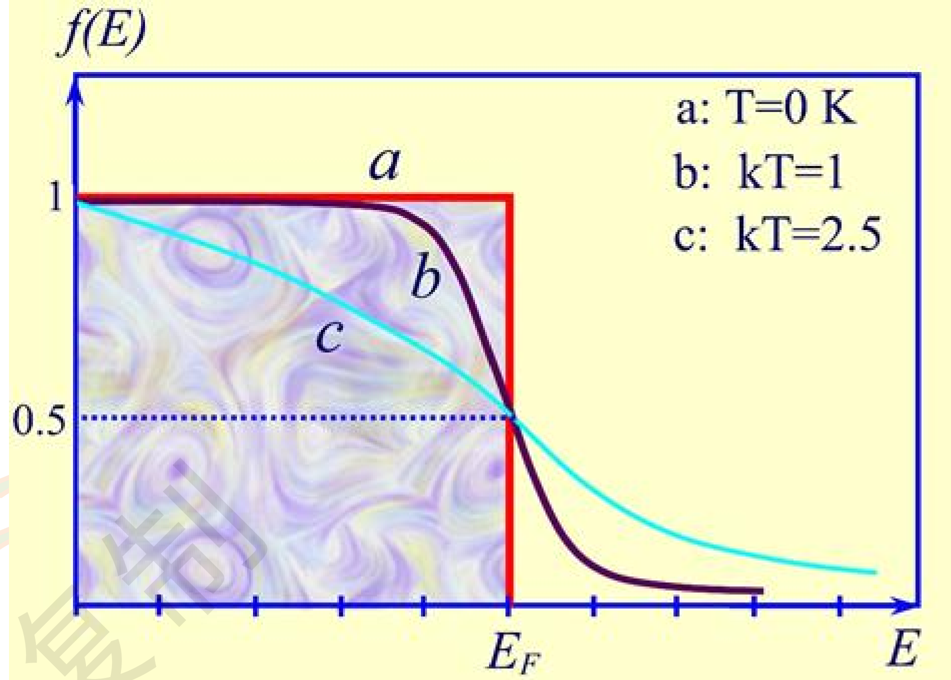
$E > E_F \qquad f(E)=0$

费米能级是量子态是否被电子占据的界限,0K时E_F就是电子填充的最高能级E_F^0

2) 在较低温度时，分布函数在 $E=E_F$ 处发生很大变化

费米分布函数

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$$



$3)T>0K$

电子填充能量 $E=E_F$ 几率

$$f(E_F)=1/2$$

$$E-E_F>several\ k_BT \quad e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}>>1 \quad f(E)\approx 0$$

当 $E\text{-}E_F>5k_0T$ 时，$f(E)<0.007$；

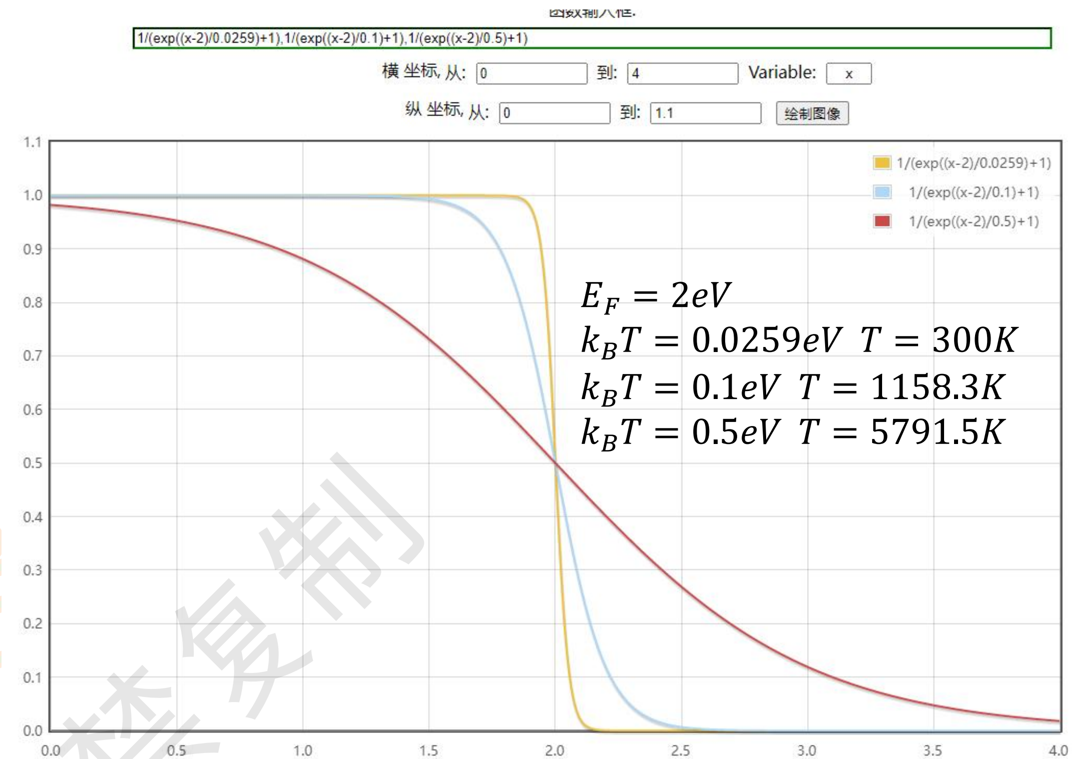
$$E-E_F<several\ k_BT \quad e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}<<1 \quad f(E)\approx 1$$

当 $E\text{-}E_F<\text{-}5k_0T$ 时，$f(\mathrm{E})>0.993$

费米能级的位置比较直观地标志了电子占据量子态的情况.

费米分布函数

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$$



能量变化范围

$$f(E<<E_F)=1 \longrightarrow f(E>>E_F)=0$$

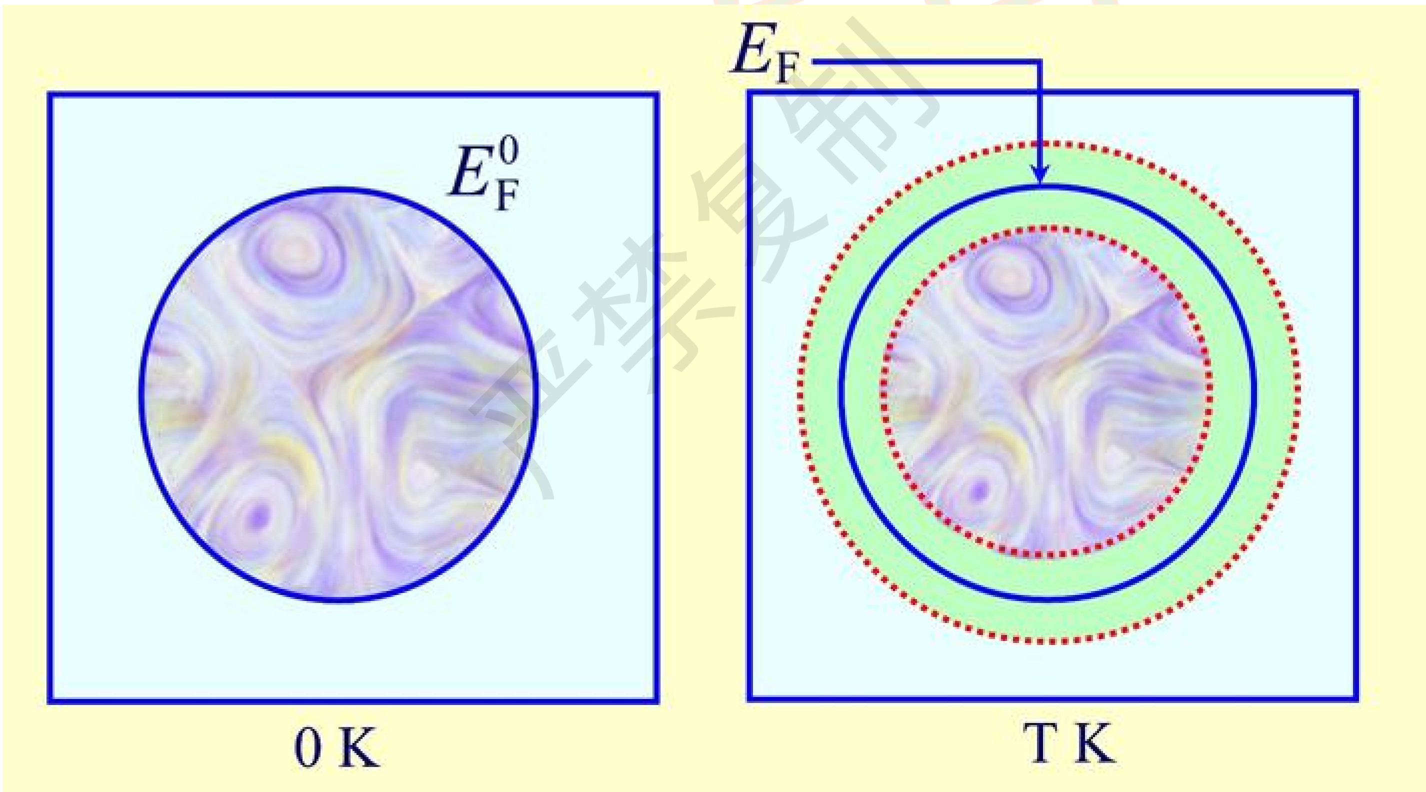
任何温度下，该能量范围约为 $\pm k_BT$ $f(k_BT) = 26.9\%$

—— 温度上升，能量变化范围变宽

k空间的费米面 $E=E_F$

$T=0\,K$ 的费米面内所有状态均被电子占有

$T\neq 0\,K$ 费米能量降低，一部分电子被激发到费米面外附近



k空间的费米分布

2. E_F 的确定

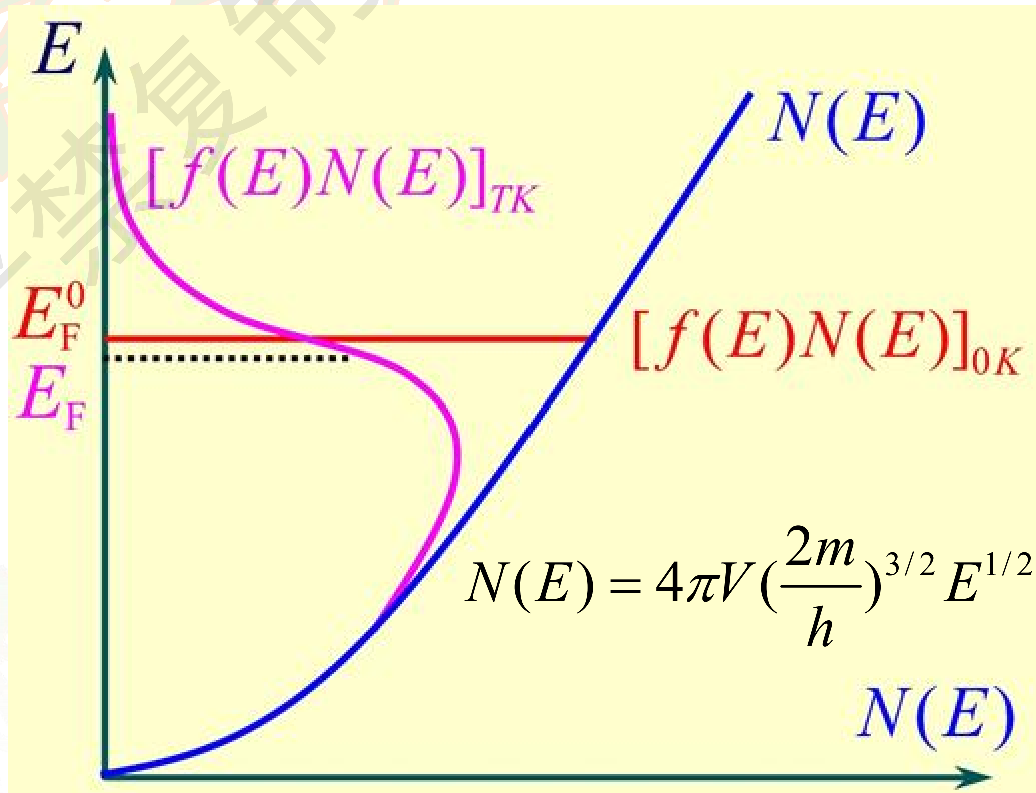
E 到 $E+dE$ 之间状态数 $dZ = N(E)dE$

E 到 $E+dE$ 之间的电子数 $dN = f(E)N(E)dE$

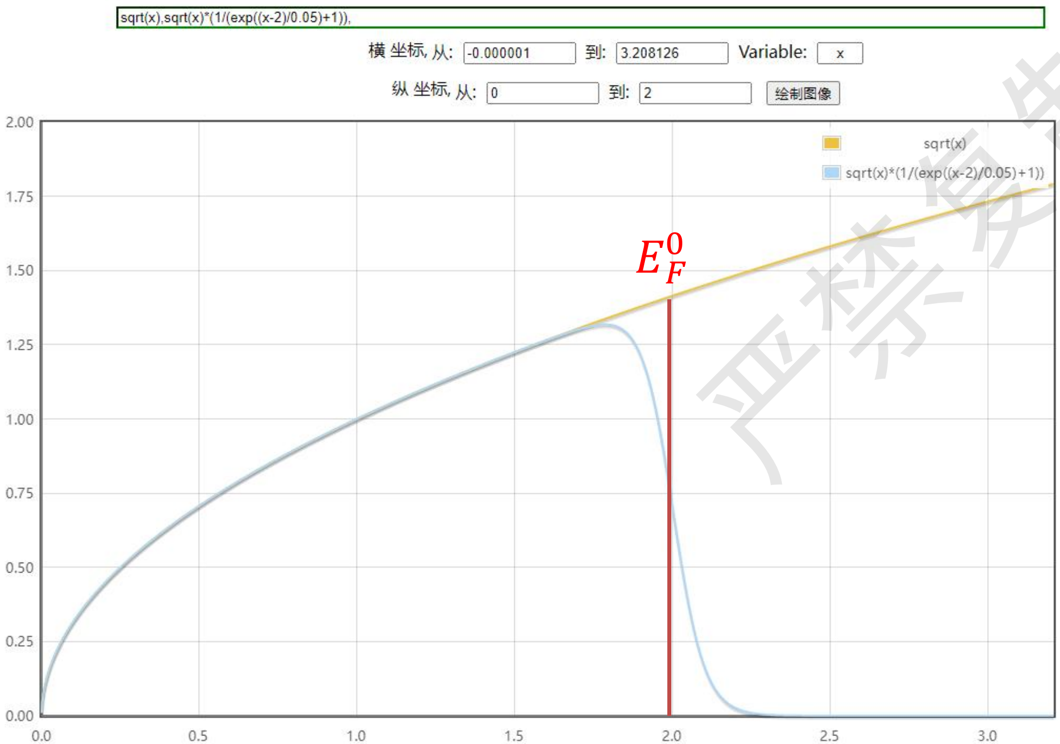
金属中总的电子数

$$N = \int_0^\infty f(E)N(E)dE$$

—— 取决于费米统计分布函数和电子的能态密度函数



定性地说明E_F随温度变化趋势。假设E_F不随温度变化，保持等于E_F^0。有限温度的$f(E)$表示在E_F^0以下的几率将减少，E_F^0以上的几率将增加，而且，上下的增加和减少对E_F^0是对称的。对于金属，按照近自由电子的情形，$N(E)$随E增加，在E_F^0以上的比E_F^0以下稍大，这就意味着电子总数将有所增加。无外界作用下，金属中电子将保持不变， 所以实际上E_F略为降低以补偿上述效果，保持电子总数N不变。



$$N=\int_0^{\infty} f(E)N(E)dE$$

$$N(E)=4\pi V\left(\frac{2m}{h}\right)^{3/2}E^{1/2}$$

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$$

sqrt(x),sqrt(x)*(1/(exp((x-2)/0.2)+1)),

$T = 0\,K$ 费米能级 E_F^0

$$\begin{cases} f(E) = 1, & E < E_F^0 \\ f(E) = 0, & E > E_F^0 \end{cases}$$

金属中总的电子数 $N = \int_0^{\infty} f(E)N(E)dE = \int_0^{E_F^0} N(E)dE$

自由电子的能态密度 $N(E) = \boxed{4\pi V(\frac{2m}{h^2})^{3/2}} E^{1/2}$

$$C = 4\pi V(\frac{2m}{h^2})^{3/2} \qquad N(E) = CE^{\frac{1}{2}} \qquad N = \frac{2}{3}C(E_F^0)^{3/2}$$

自由电子的费密能级 $E_F^0 = \frac{h^2}{2m}(3n\pi^2)^{2/3} \qquad n = \frac{N}{V}$

$T=0\,K$ 电子的平均能量 —— 平均动能

$$dN = N(E)dE \qquad dN = CE^{1/2}dE$$

$$E_{Kin} = \frac{\int EdN}{N} = [C\int_0^{E_F^0} E^{3/2}dE]/[C\int_0^{E_F^0} E^{1/2}dE] \qquad E_{Kin} = \frac{3}{5}E_F^0$$

结论：在绝对零度下，电子仍具有相当大的平均能量

—— 电子满足泡利不相容原理，每个能量状态上只能容许两个自旋相反的电子

—— 所有的电子不可能都填充在最低能量状态

$T \neq 0\,K$ 电子的费米能量 E_F

总的电子数 $N = \int_0^{\infty} f(E) N(E) dE$

引入函数 $Q(E) = \int_0^{E} N(E) dE$

—— 能量E以下的量子态总数

能态密度 $N(E) = Q'(E)$

应用分部积分 $N = f(E)Q(E)\Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} Q(E)\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE$

$$N = f(E)Q(E)\Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} Q(E)\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)dE$$

$$Q(E) = \int_0^{E} N(E)\,dE$$

$$N(E) = Q'(E)$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$

因为

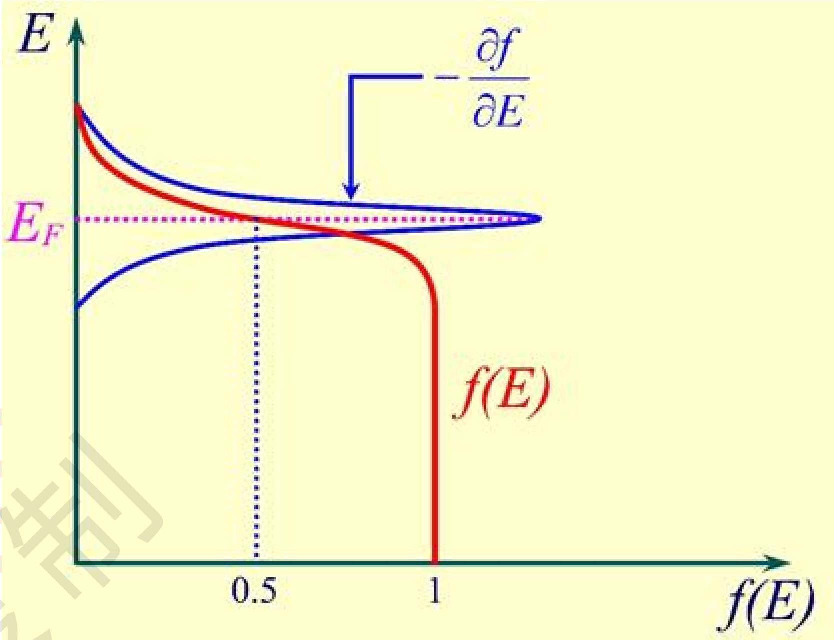
$$E \Rightarrow 0,\ \ Q(E) \Rightarrow 0$$

$$E \Rightarrow \infty,\ \ f(E) \Rightarrow 0$$

$$f(E)Q(E)\Big|_0^{\infty} = 0$$

$$N = \int_0^{\infty} Q(E)\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)dE$$

$$N=\int_{0}^{\infty}Q(E)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$



分布函数 $f(E)=\dfrac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$

$$-\frac{\partial f}{\partial E}=\frac{1}{k_BT}\cdot\frac{1}{(e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1)(e^{-\frac{E-E_F}{k_BT}}+1)}$$

—— $E-E_F$ 的偶函数

$$N=\int_{-\infty}^{\infty}Q(E)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

—— 只在 $E-E_F$ 附近有显著的值，具有δ函数特点

$$N=\int_{-\infty}^{\infty}Q(E)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE \qquad Q(E)=\int_{0}^{E}N(E)dE$$

—— 将 $Q(E)$ 在 E_F 附近按泰勒级数展开

$$Q(E)=Q(E_F)+Q'(E_F)(E-E_F)+\frac{1}{2}Q''(E_F)(E-E_F)^2+\cdots$$

—— 保留到二次项

$$N=Q(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(-\frac{\partial f}{\partial E})dE+Q'(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$+\frac{1}{2}Q''(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)^2(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$N = Q(E_F)\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}(-\frac{\partial f}{\partial E})dE} + Q'(E_F)\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE}$$

$$+\frac{1}{2}Q''(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)^2(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

第一项 $-[f(\infty)-f(-\infty)] = -[0-1] = 1$

第二项$(-\frac{\partial f}{\partial E})$是 $E-E_F$ 的偶函数 $\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE = 0$

$$N = Q(E_F) + \frac{1}{2}Q''(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)^2(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$N = Q(E_F) + \frac{1}{2} Q''(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} (E - E_F)^2 (-\frac{\partial f}{\partial E}) dE$$

$$-\frac{\partial f}{\partial E} = \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{1}{(e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1)(e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1)}$$

引入积分变数 $\xi = \frac{E - E_F}{k_B T} \quad d\xi = \frac{1}{k_B T} dE$

$$N = Q(E_F) + \frac{(k_B T)^2}{2} Q''(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi^2 d\xi}{(e^{\xi} + 1)(e^{-\xi} + 1)}$$

$$N = Q(E_F) + \frac{(k_B T)^2}{2} Q''(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi^2 d\xi}{(e^{\xi}+1)(e^{-\xi}+1)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi^2 d\xi}{(e^{\xi}+1)(e^{-\xi}+1)} = \frac{\pi^2}{3}$$

$$N = Q(E_F) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F)(k_B T)^2 \qquad E_F^0 = \frac{h^2}{2m}(3n\pi^2)^{2/3}$$

令 $T \to 0K \quad N = Q(E_F^0) \qquad N = Q(E_F^0) = \int_0^{E_F^0} N(E)dE$

对于一般温度 $T = 300\ K \qquad k_B T = 2.6 \times 10^{-2}\mathrm{eV}$

将 $Q(E_F)$ 按泰勒级数在 E_F^0 附近展开，只保留到第二项

$$N = Q(E_F) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F)(k_B T)^2$$

$$N = Q(E_F^0) + Q'(E_F^0)(E_F - E_F^0) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F)(k_B T)^2$$

将Q”(E$_F$)按泰勒级数展开，只保留 $Q''(E_F) \approx Q''(E_F^0)$

$$N = Q(E_F^0) + Q'(E_F^0)(E_F - E_F^0) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F^0)(k_B T)^2$$

$$N = Q(E_F^0)$$

$$E_F = E_F^0 - \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{Q''}{Q'}\right)_{E_F^0}(k_B T)^2$$

$$E_F = E_F^0\{1 - \frac{\pi^2}{6E_F^0}[\frac{d}{dE}\ln Q'(E)]_{E_F^0}(k_B T)^2\}$$

$$E_F = E_F^0\{1-\frac{\pi^2}{6E_F^0}[\frac{d}{dE}\ln Q'(E)]_{E_F^0}(k_BT)^2\}$$

因为 $Q(E)=\int_0^E N(E)dE$ $\qquad Q'(E)=N(E)$

$$E_F = E_F^0\{1-\frac{\pi^2}{6E_F^0}[\frac{d}{dE}\ln N(E)]_{E_F^0}(k_BT)^2\}$$

对于近自由电子 $N(E)\propto E^{1/2}$

$$E_F = E_F^0[1-\frac{\pi^2}{12}(\frac{k_BT}{E_F^0})^2]$$ —— 温度升高费米能级下降

$$E_F = E_F^0[1 - \frac{\pi^2}{12}(\frac{k_B T}{E_F^0})^2]$$ —— 温度升高费米能级下降

$$T = 300\ K \qquad k_B T = 2.6\times10^{-2}\ \text{eV}$$

$$E_F^0 \sim several\ eV$$

$$\frac{k_B T}{E_F^0} << 1 \qquad E_F \approx E_F^0$$