课程信息

- 第五次作业：

  1. 阅读黄昆《固体物理》第四章4-5至4-8小节、第五章5-1至5-5小结，并解释以下重要概念：能态密度、费米面、满带、空带、导带、价带、禁带、准经典运动、有效质量；

  2. 推导三维、二维、一维下自由电子气的能态密度与能量关系式；

  3. 画出金属、半导体、绝缘体的能带简图；

  4. 书后习题4.7，5.1

2. 费米面

—— 固体中有**N**个自由电子，按照泡利原理它们基态是由**N**个电子由低到高填充的**N**个量子态

电子的能级 $E(\vec{k}) = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

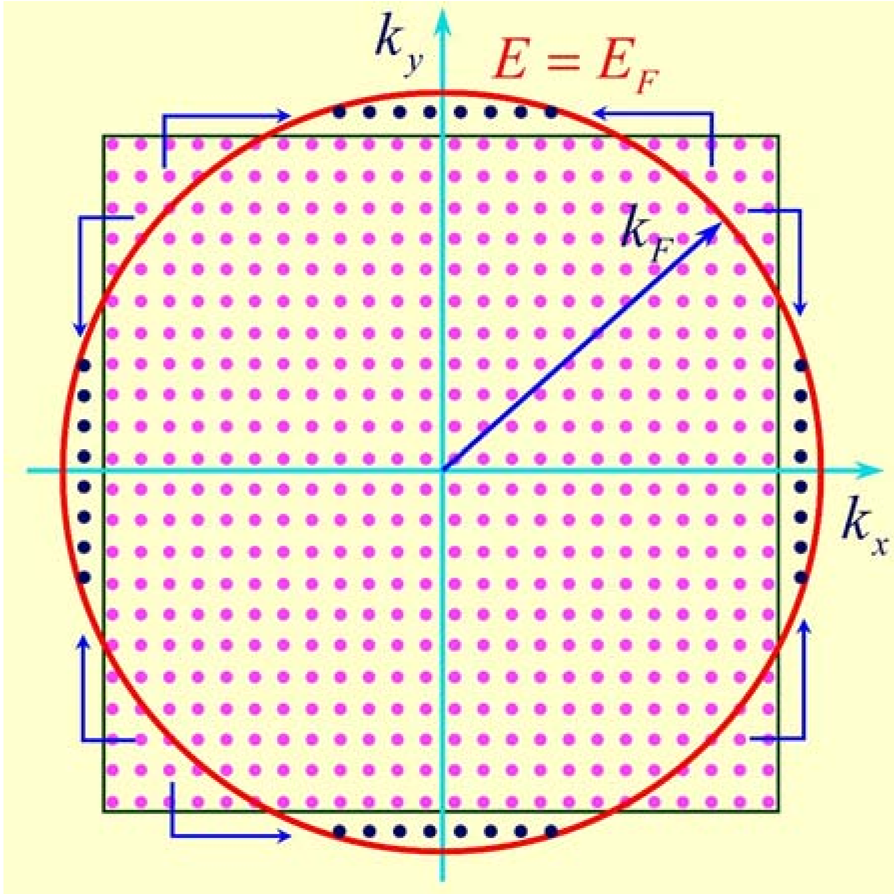
N个电子在**k**空间填充一个半径为$\mathbf{k_F}$的球，球内包含**N**个状态数

$$N = 2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

球的半径 $k_F = 2\pi(\dfrac{3}{8\pi})^{1/3}(\dfrac{N}{V})^{1/3}$ $k_F = 2\pi(\dfrac{3n}{8\pi})^{1/3}$

☒ 费米波矢、费米动量、费米速度和费米温度

费米球半径 $k_F = \dfrac{\sqrt{2mE_F}}{\hbar}$



费米能量 $E_F = \dfrac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$

费米动量 $p_F = \sqrt{2mE_F}$

$$\vec{p}_F = \hbar \vec{k}_F$$

费米速度 $\vec{v}_F = \dfrac{\vec{p}_F}{m}$

费米温度 $T_F = \dfrac{E_F}{k_B}$

自由电子球半径$\mathbf{r_s}$ $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4}{3}\pi r_s^3$ $r_s = (\frac{3}{4\pi n})^{1/3}$

$$n = \frac{3}{4\pi r_s^3}$$

$$k_F = 2\pi(\frac{3n}{8\pi})^{1/3} = \frac{1.92}{r_s}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \qquad E_F = \frac{51.1\, eV}{(r_s / a_0)^2}$$

$$a_0 = 0.529 \times 10^{-10}\ m$$

$$n \sim 10^{23}\ / cm^3$$

$$r_s / a_0 = 2 \sim 6$$

$$v_F = \frac{p_F}{m} = \frac{4.20}{r_s / a_0} \times 10^6\ m/s$$

$$E_F : 1.5\, eV \sim 15\, eV$$

—— 晶体中的电子

满带 —— 电子占据了一个能带中所有的状态

空带 —— 没有任何电子占据（填充）的能带

导带 —— 一个能带中所有的状态没有被电子占满
即不满带，或说最下面的一个空带

价带 —— 导带以下的第一个满带，或最上面的一个满带

禁带 —— 两个能带之间，不允许存在的能级宽度，或带隙

—— 单电子的能级由于周期性势场的影响而形成一系列的准连续的能带，**N**个电子填充这些能带中最低的**N**个状态

半导体和绝缘体

—— 电子刚好填满最低的一系列能带，形成满带，导带中没有电子

—— 半导体带隙宽度较小 ~ **1 eV**

—— 绝缘体带隙宽度较宽 ~ **10 eV**

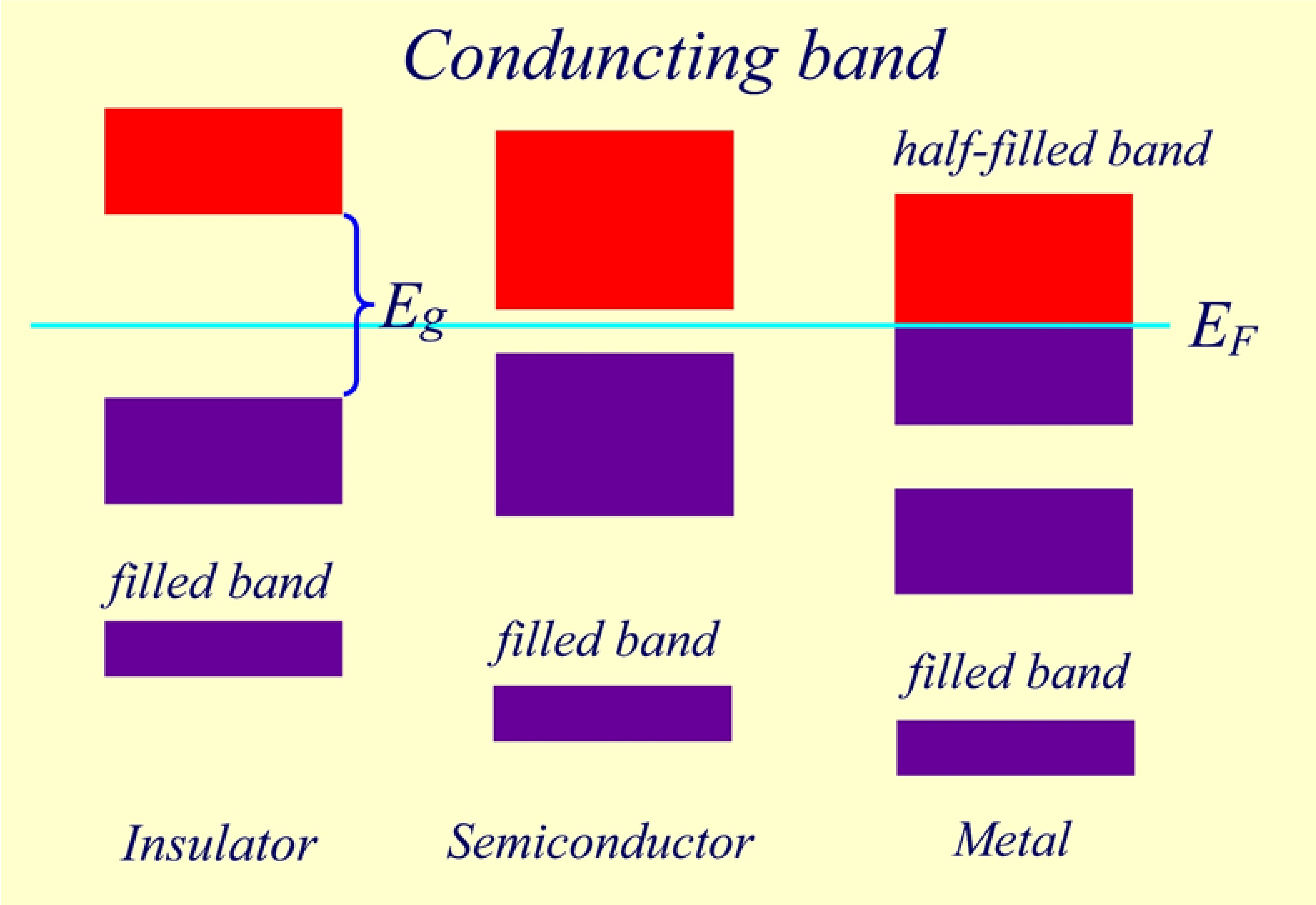
金属

—— 电子除了填满一系列的能带形成满带，还部分填充了其它能带形成导带

—— 电子填充的最高能级为费米能级，位于一个或几个能带范围内

—— 在不同能带中形成一个占有电子与不占有电子区域的分界面

—— 面的集合称为费米面


Conduncting band
half-filled band
E_g
E_F
filled band
filled band
filled band
Insulator
Semiconductor
Metal

碱金属 —— 具有体心立方格子，每个原胞内有一个原子，由N个原子构成的晶体，各满层电子的能级相应地分成2N个量子态的能带，内层电子刚好填满了相应的能带

n＝2的能级

—— 原子的量子态数为8，电子填充数为8个

—— 形成晶体后相应的能带2s（1个）、2p（3个），共4个能带，每个能带所容许的量子态2N，共有8N个量子态，可以填充8N个电子

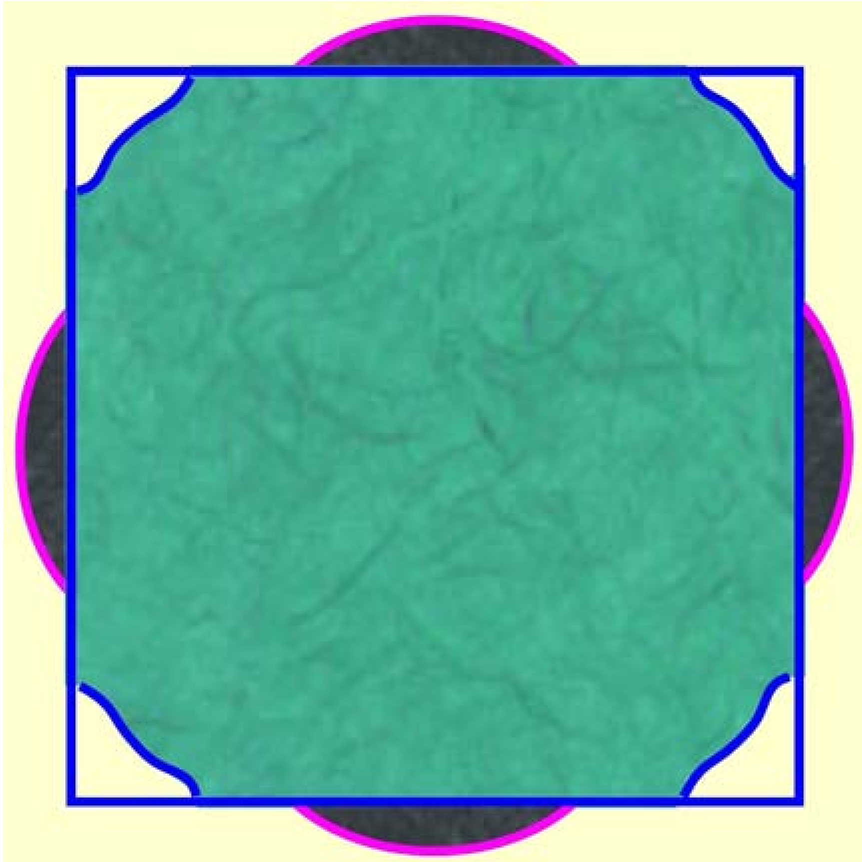
—— ns态所对应的能带可以填充2N电子，N个原子只有N个自由电子，只填充了半个能带而形成导带

—— 碱金属中的N个电子只填充了半个布里渊区，费米球与布里渊区边界不相交，费米面接近球面

二价碱土金属 —— 最外层2个s态电子，似乎刚好填充满和s相应的能带。由于与s对应的能带和上面的能带发生重叠，2N个尚未填充满s态能带，就开始填充上面的能带，形成两个能带都是部分填充

—— 碱土金属为金属导体

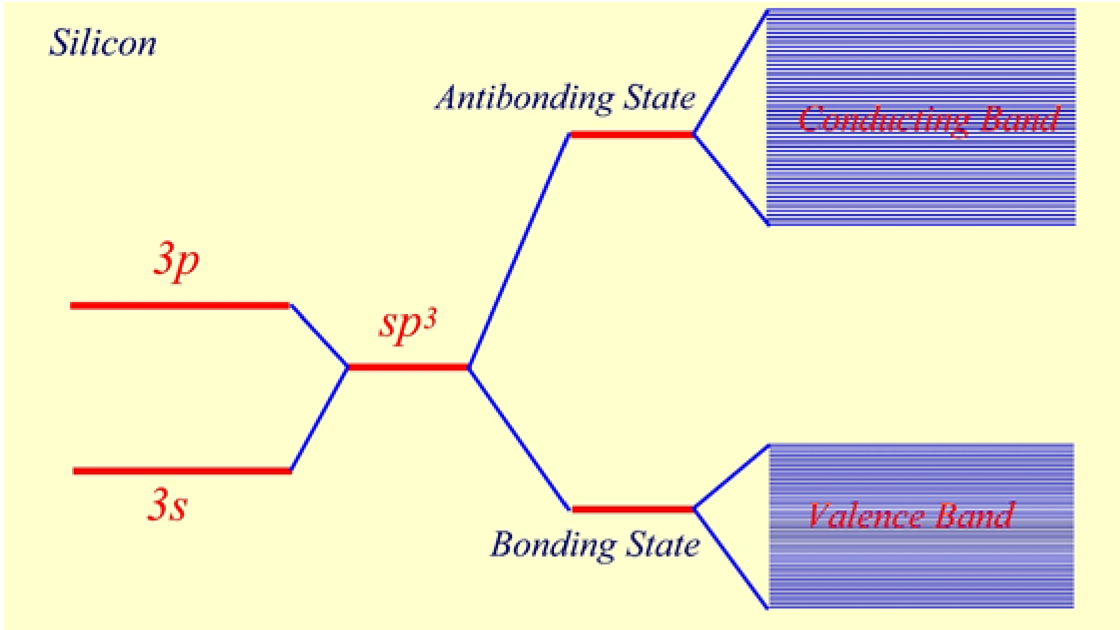
—— 第一布里渊区中的状态尚未填满，第二布里渊区已填充电子，此时的费米面由两部分构成



金刚石结构的IVA族元素C、Si和Ge电子的填充

—— IVA族原子外层有4个电子，形成晶体后成键态对应4个能带在下面，反键态对应4个能带在上面。每个能带可容纳2N个电子，成键态的4个能带刚好可以容纳8N电子

—— 金刚石结构晶体中每个原胞有两个原子，共8个电子。晶体中的8N个电子全部填充在成键态的4个能带中形成满带，反键态则是空带，金刚石为绝缘体



—— Si和Ge为半导体

—— 能态密度的实验结果

X射线可以将原子内层电子激发，产生空的内层能级，当外层电子**(**导带中的电子**)**跃迁填充内层能级时发射**X**射线光子

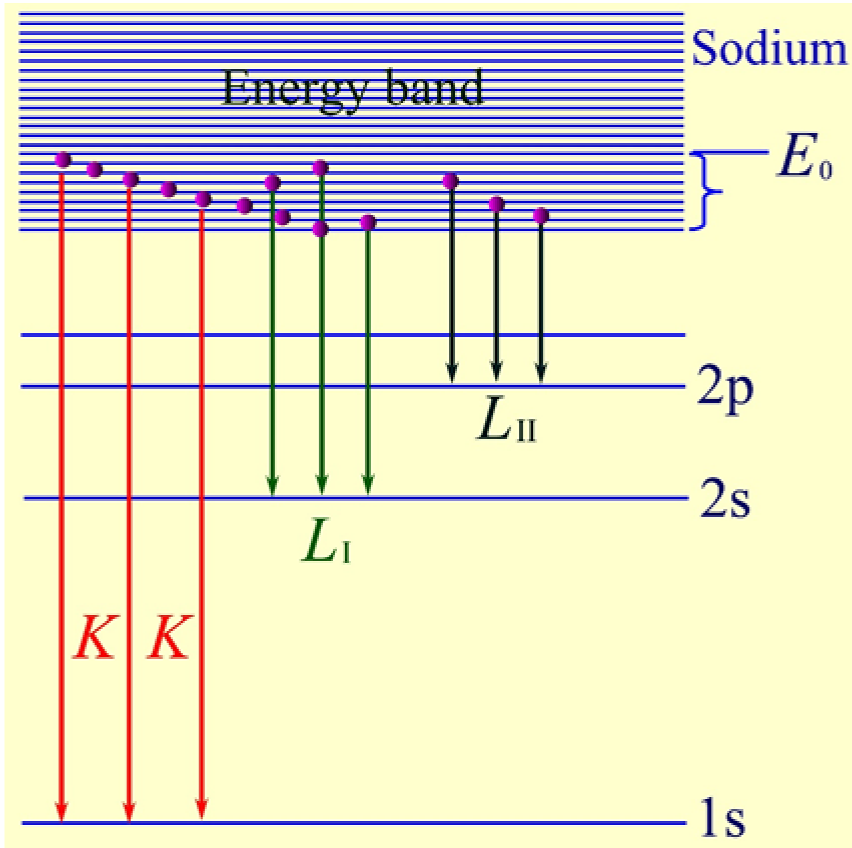
用**X**射线将**Na**原子的内层电子激发产生诸如**1s**、**2s**和**3p**等空的内层能级

—— **K:** 电子到**1s**能级的跃迁

—— **L_I:**电子到**2s**能级的跃迁

—— **L_{II}:**电子到**2p**能级的跃迁

—— **L_{III}:**电子到**3s**能级的跃迁



—— 导带中电子能量从带底能量到最高能量E_0，各种能量的电子均可发生跃迁产生不同能量的X光子

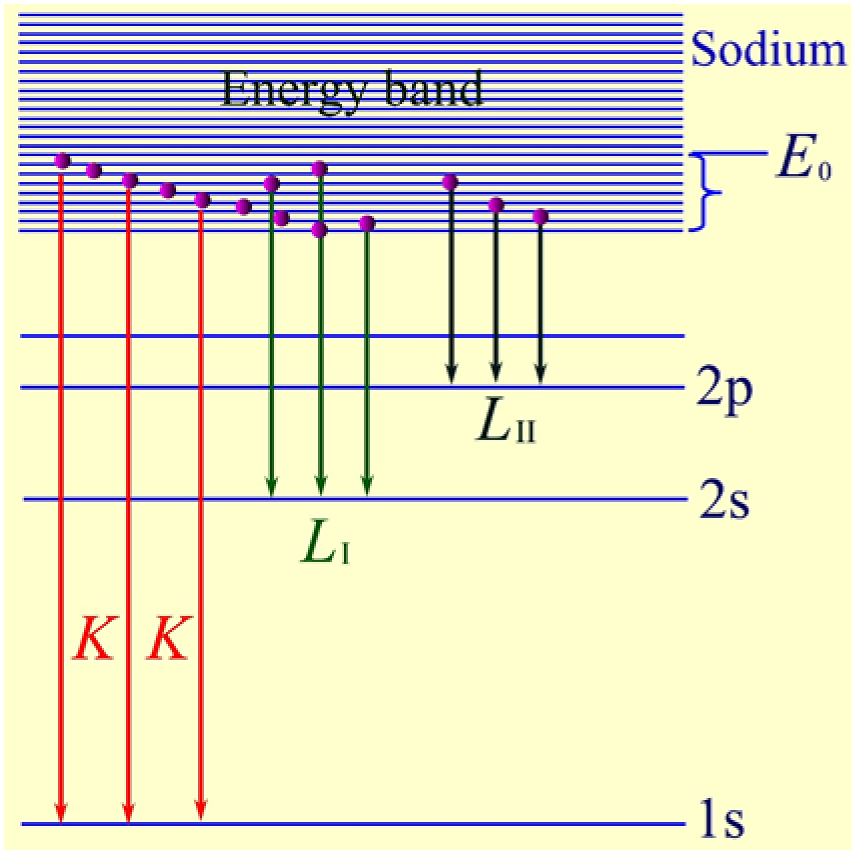
—— 发射出X光子能量形成一个连续能量谱

—— 发射的X光子能量可以通过实验测得

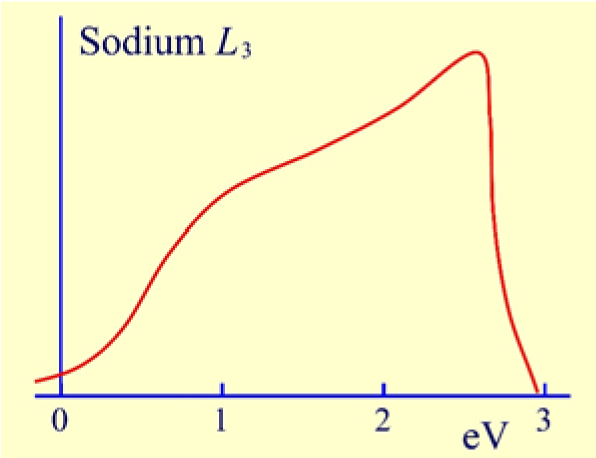
X光子发射强度决定于

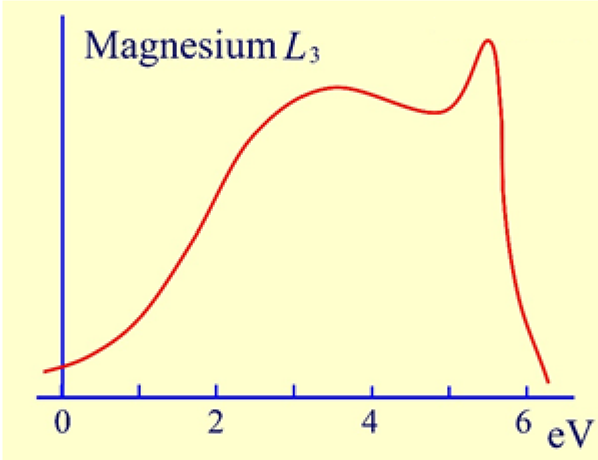
（能态密度）×（发射几率）

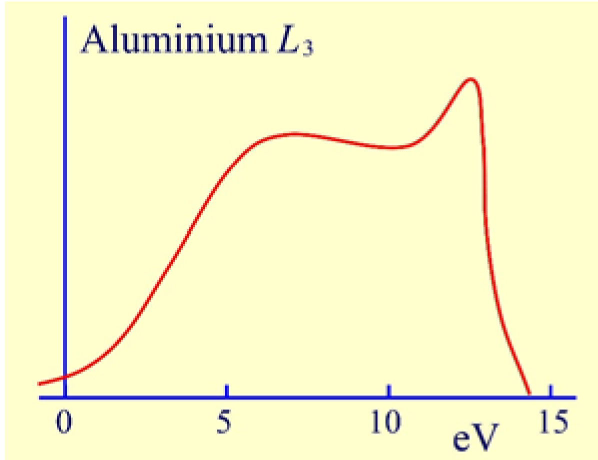
—— 根据不同固体的X光子发射谱可以获知能态密度的信息

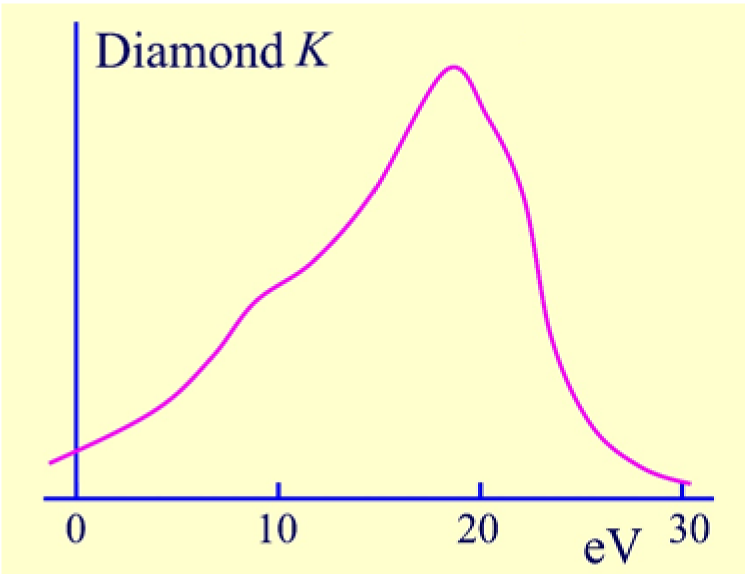


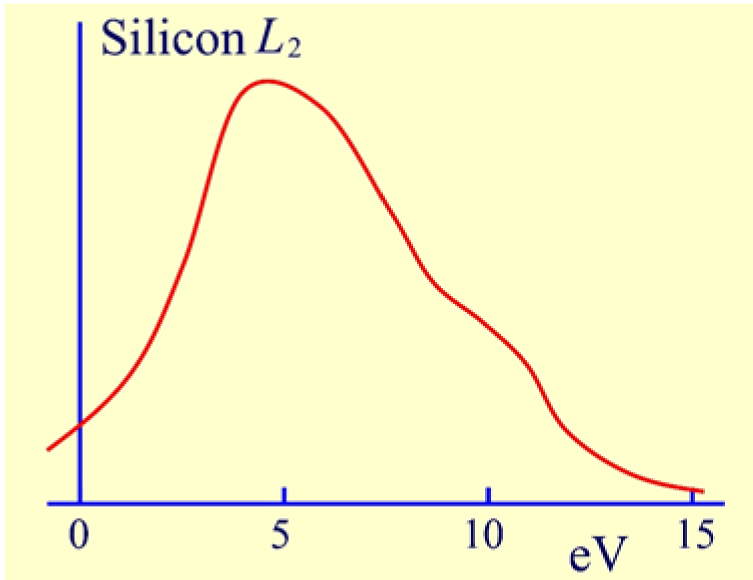
金属Na、Mg、Al和非金属金刚石、硅的实验结果



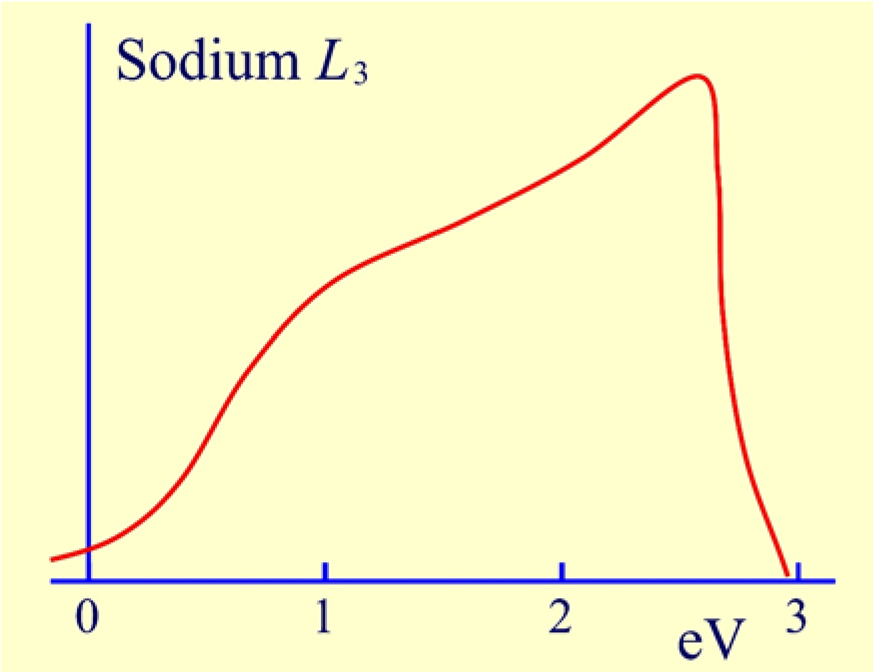


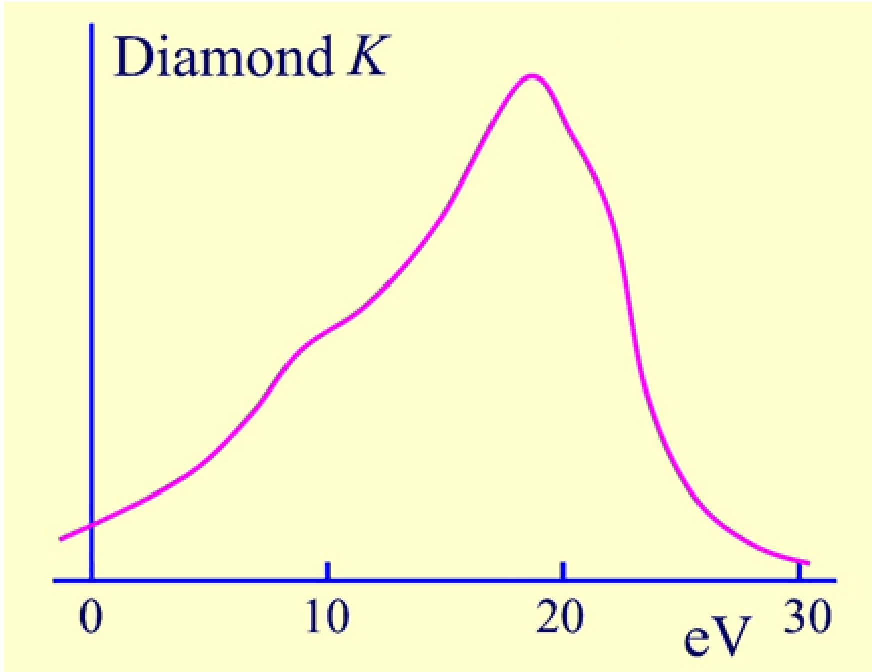






—— 在低能量区域





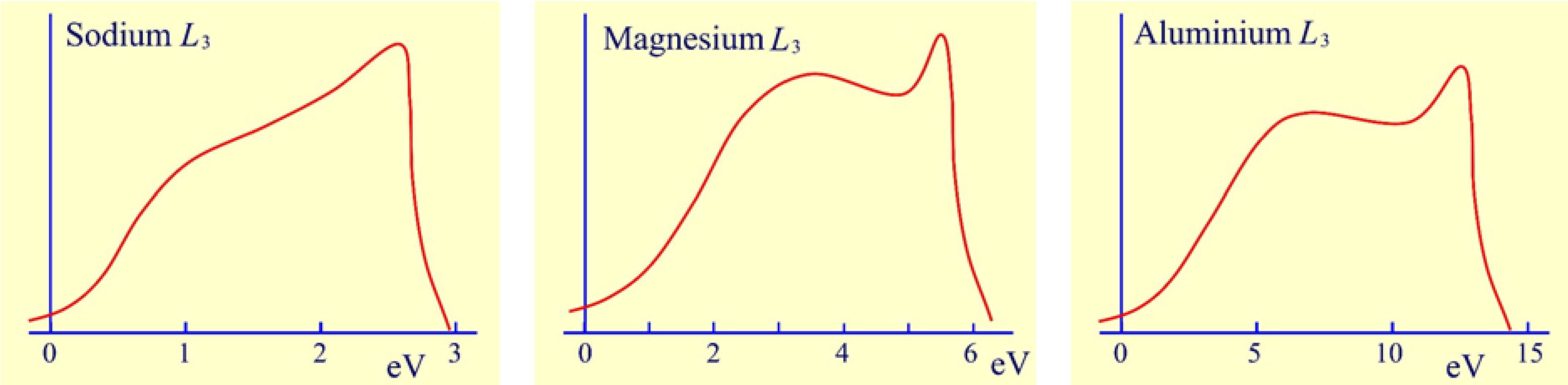
Na、**Mg**、**Al**和金刚石、硅的**X**光子发射能量逐渐上升的

—— 反映了电子的能量从带底逐渐增大，其能态密度逐渐增大的规律

—— 在高能量的一端

金属**Na**、**Mg**、**Al**的**X**光子发射谱陡然下降

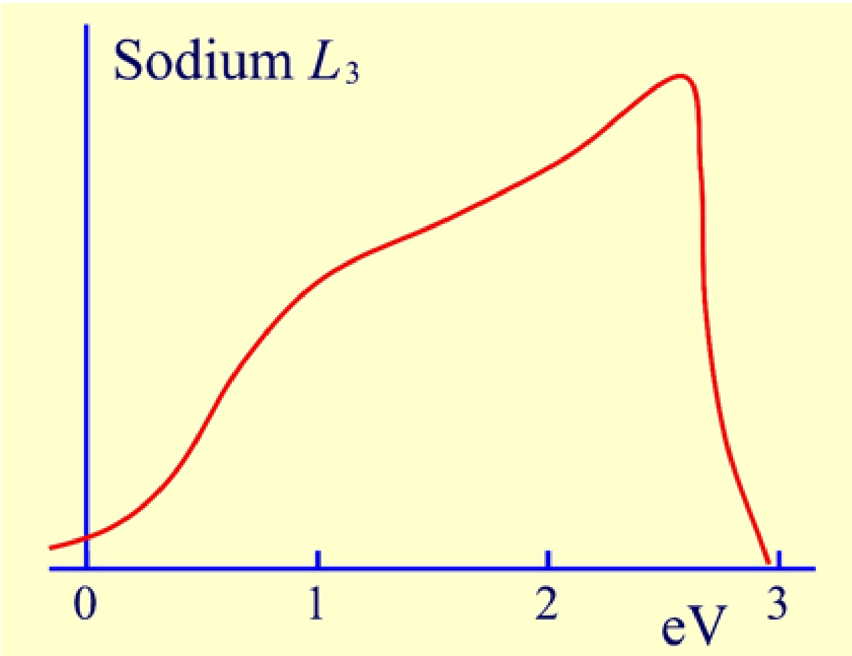
—— 反映了导带未被电子填充满，最高能量的电子对应的能态密度最大

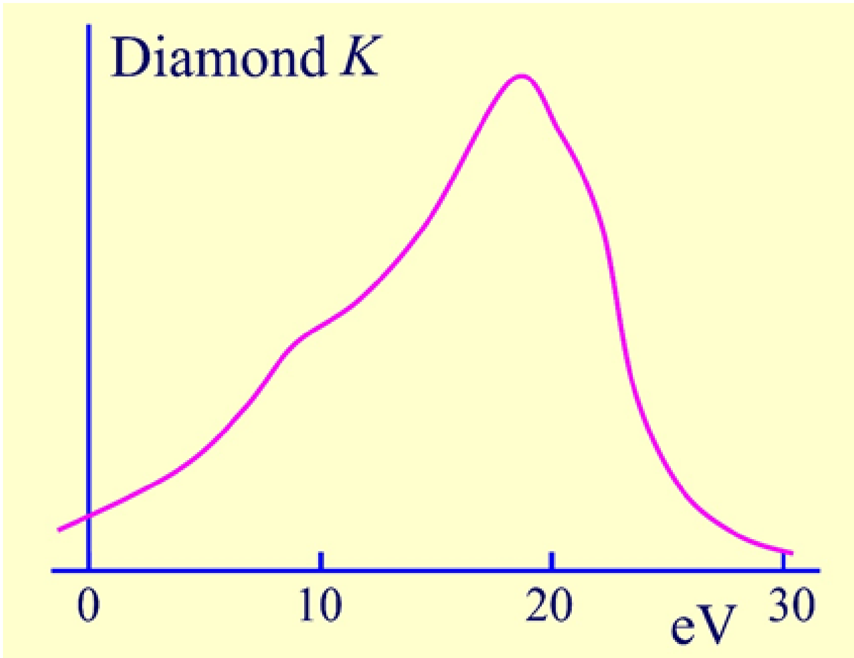


—— 在高能量的一端

金刚石、硅的X光子发射谱逐渐下降

—— 反映了电子填充了导带中所有的状态，即满带。而在满带顶对应的布里渊区附近，电子的能态密度逐渐降为零





第五章 晶体中电子在电场和磁场中的运动

问题的提出

晶体中的电子在外加场的作用下—— 电场、磁场、掺入杂质势场等，如何描述电子的运动？

—— 外场与晶体的势场相比弱许多，可用电子在晶体周期性势场中的本征态为基础进行讨论

方法一 —— 求解在外加势场 **U** 时电子的薛定谔方程

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})+U]\psi=E\psi$$

方法二 —— 满足一定条件下将电子的运动近似当作经典粒子的运动来处理

—— 讨论均匀电磁场中晶体中电磁输运问题

§ 5.1 准经典运动

1. 波包和电子速度

—— 量子力学中，对任意有经典类比的力学系统，如果对一个态的经典描述近似成立，用一个波包来描述这个态

—— 粒子的坐标和动量满足量子力学测不准关系

粒子的波包构成

粒子在空间分布在 $\vec{r}_0$ 附近的 $\Delta\vec{r}$ 范围内，动量取值为 $\hbar\vec{k}_0$附近的 $\hbar\Delta\vec{k}$ 范围内

波包中心 $\vec{r}_0$ — 粒子中心，中心的动量 $\hbar\vec{k}_0$ — 粒子的动量

波包的波函数

晶体中的波包由布洛赫波组成

$$\psi_{k'}(\vec{r},t) = e^{i[\vec{k}'\cdot\vec{r} - \frac{E(k')}{\hbar}t]} u_{k'}(\vec{r})$$

以量子态 $\vec{k}_0$ 为中心的波包

令 $\vec{k}' = \vec{k}_0 + \vec{k}$ $\qquad \vec{k}$ —— 很小

势场周期性函数近似表示 $u_{k'}(\vec{r}) \approx u_{k_0}(\vec{r})$

将能量 $E(\vec{k}')$ 按泰勒级数展开

$$E(\vec{k}') \cong E(\vec{k}_0) + \vec{k}\cdot(\nabla_k E)_{k_0}$$

$$E(\vec{k}') \cong E(\vec{k}_0) + \vec{k}\cdot(\nabla_k E)_{k_0}$$

$\vec{k}$ 的取值范围 $-\dfrac{\Delta}{2} \le \begin{Bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{Bmatrix} \le \dfrac{\Delta}{2}$ Δ —— 小量

—— 波包函数

$$\psi(\vec{r},t) = \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_x \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_y \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_z e^{i[(\vec{k}_0+\vec{k})\cdot\vec{r} - \frac{E(\vec{k}_0+\vec{k})}{\hbar}t]} u_{\vec{k}_0+\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r},t) \cong u_{\vec{k}_0}(\vec{r}) e^{i[\vec{k}_0\cdot\vec{r} - \frac{E(\vec{k}_0)}{\hbar}t]} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_x \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_y \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_z e^{i\vec{k}\cdot[\vec{r} - \frac{(\nabla_k E)_{k_0}}{\hbar}t]}$$

—— 电子的概率密度分布函数

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})\right|^2 \left|\int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_x \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_y \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_z e^{i\vec{k}\cdot[\vec{r}-\frac{(\nabla_k E)_{k_0}}{\hbar}t]}\right|^2$$

$$i\vec{k}\cdot[\vec{r}-\frac{(\nabla_k E)_{k_0}}{\hbar}t] = i[k_x(x-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_x})_{k_0}t]$$

$$+i[k_y(y-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_y})_{k_0}t]+i[k_z(z-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_z})_{k_0}t]$$

$$u = x-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_x})_{k_0}t,\ \ v = y-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_y})_{k_0}t,\ \ w = z-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_z})_{k_0}t$$

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})\right|^2 \left| \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} e^{ik_x u} dk_x \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} e^{ik_y v} dk_y \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_z e^{ik_z w} \right|^2$$

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta u/2}{\Delta u/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta v/2}{\Delta v/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta w/2}{\Delta w/2}\right|^2 \Delta^6$$

其中

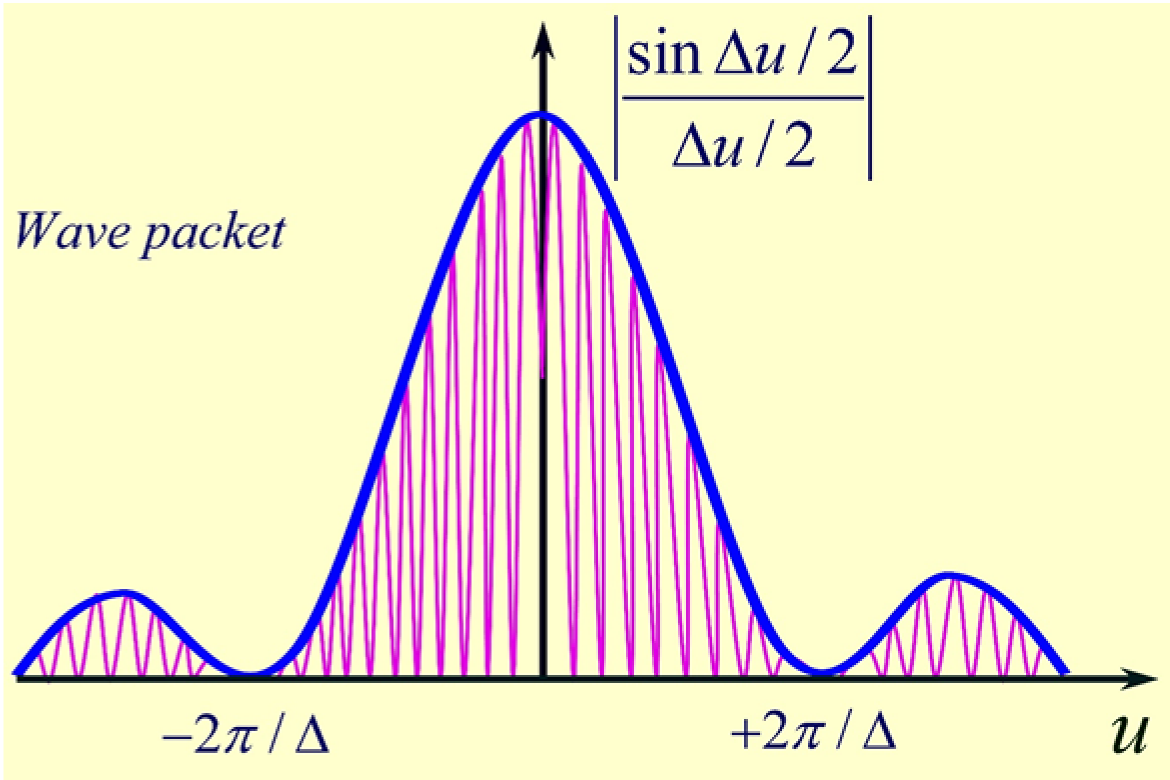
$$u = x - \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0} t,\quad v = y - \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0} t,\quad w = z - \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0} t$$

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta u/2}{\Delta u/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta v/2}{\Delta v/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta w/2}{\Delta w/2}\right|^2 \Delta^6$$

$\left|\frac{\sin \Delta u/2}{\Delta u/2}\right| \sim u$的曲线

波包的限度

$$u = \frac{2\pi}{\Delta}$$



$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta u/2}{\Delta u/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta v/2}{\Delta v/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta w/2}{\Delta w/2}\right|^2 \Delta^6$$

$\mathbf{u = v = w = 0}$ $$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})\right|^2 \Delta^6$$

$$\begin{cases} u = x_0 - \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0} t \\ v = y_0 - \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0} t \\ w = z_0 - \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0} t \end{cases} \qquad \begin{cases} x_0 = \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0} t \\ y_0 = \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0} t \\ z_0 = \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0} t \end{cases}$$

粒子中心位置

$$\vec{r}_0 = \frac{1}{\hbar}\cdot(\nabla_k E)_{k_0} t$$

粒子的中心 $\vec{r}_0 = \frac{1}{\hbar} \cdot (\nabla_k E)_{k_0} t$

粒子的速度 $\vec{v}_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar}(\nabla_k E)_{k_0}$

$$-\frac{\Delta}{2} \le \begin{Bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{Bmatrix} \le \frac{\Delta}{2}$$ **k**很小

第一布里渊区 $(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ 要求 $\Delta << \frac{2\pi}{a}$ $\frac{2\pi}{\Delta} >> a$

$u = \frac{2\pi}{\Delta}$ —— 波包的限度 $u >> a$

—— 波包远远大于原胞, 在这一个限度里才能将电子看做是准经典粒子

—— 一维紧束缚模型

粒子的速度 $\vec{v}_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar}(\nabla_k E)_{k_0}$ $v_k = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$

$E(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - 2J_1 \cos ka$ $v_k = \frac{2J_1 a}{\hbar}\sin ka$

$\frac{dE}{dk} = 0$ $k = 0, \frac{\pi}{a}$ $v_k = 0$ —— 能带底和能带顶

$\frac{d^2E}{dk^2} = 2J_1 a^2 \cos ka = 0$ $k = \frac{\pi}{2a}$ $v_k = \frac{2J_1 a}{\hbar}$

—— 速度最大

在一维紧束缚模型下

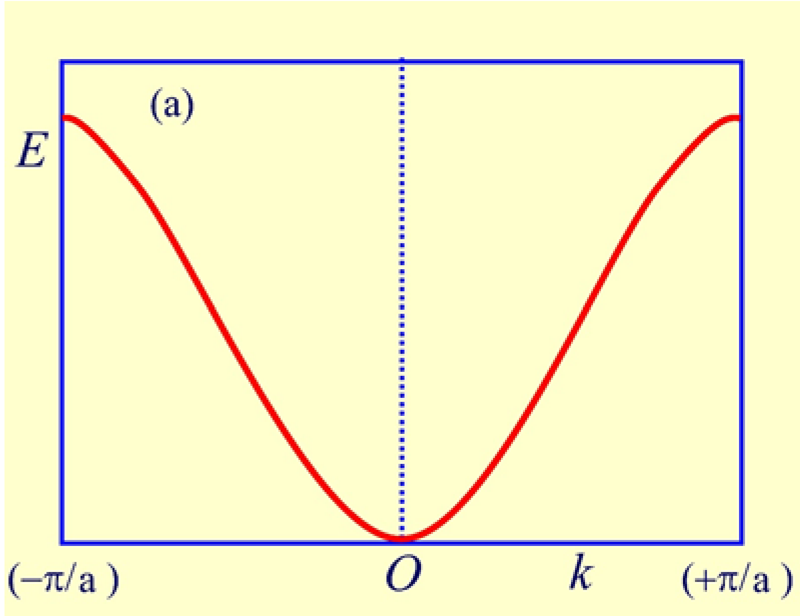
电子的速度 $v_k = \dfrac{2J_1 a}{\hbar}\sin ka$

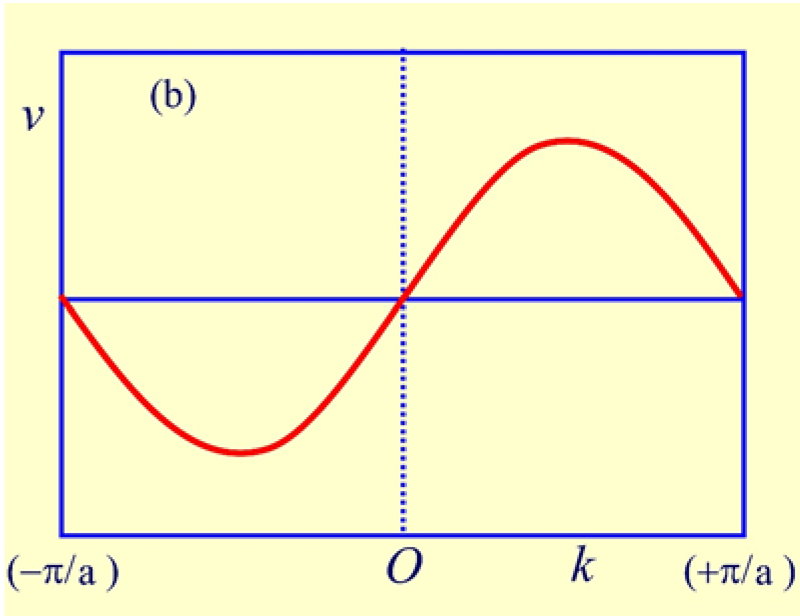
$$\frac{dE}{dk}=0 \qquad k=0,\ \frac{\pi}{a}$$

—— 速度为零

$$\frac{d^2E}{dk^2}=0 \quad k=\frac{\pi}{2a}$$

—— 速度最大





2. 在外力作用下状态的变化和准动量

外场力 $\vec{F}$ 对电子作功 $\vec{F}\cdot\vec{v}_k dt$

电子能量的增量 $dE = d\vec{k}\cdot\nabla_k E$ $\qquad \vec{v}_k = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E$

$$dE = d\vec{k}\cdot\hbar\vec{v}_k$$

根据功能原理 $\vec{F}\cdot\vec{v}_k dt = d\vec{k}\cdot\hbar\vec{v}_k = d(\hbar\vec{k})\cdot\vec{v}_k$

$$\left[\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} - \vec{F}\right]\cdot\vec{v}_k = 0$$

$\hbar\vec{k}$ 具有动量的性质 —— 准动量

3. 加速度和有效质量

$$[\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt}-\vec{F}]\cdot\vec{v}_k=0$$

电子状态变化基本公式

$$\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt}=\vec{F} \qquad \frac{d(\hbar k_\alpha)}{dt}=F_\alpha$$

电子的速度

$$\vec{v}_k=\frac{1}{\hbar}\nabla_k E$$

电子的速度分量

$$v_\alpha=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha}$$

电子的加速度分量

$$\frac{dv_\alpha}{dt}=\frac{d}{dt}(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha})$$

电子的加速度分量 $$\frac{dv_\alpha}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha}\right)$$

$$\frac{dv_\alpha}{dt} = \frac{1}{\hbar}\sum_\beta \frac{dk_\beta}{dt}\frac{\partial}{\partial k_\beta}\left(\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha}\right)$$

将 $\frac{d(\hbar k_\beta)}{dt} = F_\beta$ 代入

$$\frac{dv_\alpha}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_\beta F_\beta \frac{\partial^2}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} E(\vec{k})$$

$$\frac{dv_\alpha}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_\beta F_\beta \frac{\partial^2}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} E(\vec{k})$$

加速度分量的矩阵表示

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}$$

电子的倒有效质量

与牛顿定律 $\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m}\vec{F}$ 比较

电子的倒有效质量 $$\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

k_x, k_y, k_z选在张量主轴方向上 $$\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

有效质量张量

$$\begin{pmatrix} m_x^* & 0 & 0 \\ 0 & m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & m_z^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar^2 / \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 / \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2 / \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{m^*_x} & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{m^*_y} & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{m^*_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{cases} m_x^* \dot{v}_x = F_x \\ m_y^* \dot{v}_y = F_y \\ m_z^* \dot{v}_z = F_z \end{cases}$$

有效张量 m_x^*, m_y^*, m_z^* 是一个张量，一般不相等

$$\begin{cases} m_x^* \dot{v}_x = F_x \\ m_y^* \dot{v}_y = F_y \\ m_z^* \dot{v}_z = F_z \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} \dot{v}_x = F_x / m_x^* \\ \dot{v}_y = F_y / m_y^* \\ \dot{v}_z = F_z / m_z^* \end{cases}$$

—— 加速度和外力方向可以不同

—— 有效质量的特点

紧束缚近似下，简单立方格子s能带的有效质量

$$E^s(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

k_x, k_y, k_z在张量主轴方向上

可以验证

$$m_x^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_x a}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \begin{cases} \neq 0, & \alpha = \beta \\ = 0, & \alpha \neq \beta \end{cases}$$

$$m_y^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_y a}$$

$$m_z^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_z a}$$

$$m_x^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_x a}$$

$$m_y^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_y a}$$ —— 波矢的函数

$$m_z^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_z a}$$

能带底部 $\vec{k} = (0, 0, 0)$

$$m_x^* = m_y^* = m_z^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1} \begin{pmatrix} m_x^* & 0 & 0 \\ 0 & m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & m_z^* \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

能带底部 $\vec{k} = (0, 0, 0)$ $\qquad m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1} > 0$

能带顶部 $\vec{k} = (\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a})$

有效质量 $m_x^* = m_y^* = m_z^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 J_1} < 0$

布里渊区侧面中心的**X**点 $\vec{k} = (\frac{\pi}{a}, 0, 0)$

有效质量 $m_x^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 J_1}, \ m_y^* = m_z^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1}$

有效质量张量
$$\begin{pmatrix} m_x^* & 0 & 0 \\ 0 & m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & m_z^* \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2aJ_1}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

—— 晶体中的共有化电子的有效质量 m^* 一般是一个张量

—— 波矢的函数

—— 一个能带底部附近，电子的有效质量总是正的，能带顶部附近，有效质量总是负的

—— 一个能带的顶部有一个质量为负的电子

—— 有效质量为什么为负

晶体中电子运动同时受外力和晶体周期性势场力的作用

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 J_1} \quad J_1 = -\int \phi_i^*(\vec{\xi} - \vec{R}_s)[U(\vec{\xi}) - V(\vec{\xi})]\phi_i(\vec{\xi})\}d\vec{\xi} > 0$$

将周期性势场力的作用归并到晶体中电子的质量中 $m^* \neq m$

—— 电子通过与原子散射而交换动量

—— 电子从晶格获得的动量大于付出给晶格的动量 $m^* > 0$

—— 电子从晶格获得的动量小于付出给晶格的动量 $m^* < 0$

—— 晶体中电子的动量

$$[\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt}-\vec{F}]\cdot\vec{v}_k=0$$

晶体中电子的动量形式 $\hbar\vec{k}$

—— 布洛赫波不是动量的本征态， $\hbar\vec{k}$ 不是动量算符的本征值

$\hbar\vec{k}$ 赝动量 —— 准动量

—— 在处理晶体中电子的输运问题，引入电子的有效质量和赝动量对于处理问题会带来很大方便

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

有效质量

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

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