

——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

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

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

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

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

简约布里渊区能带、电子的速度和有效质量

能带底部 $k = 0$

$$v(k) = 0$$

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

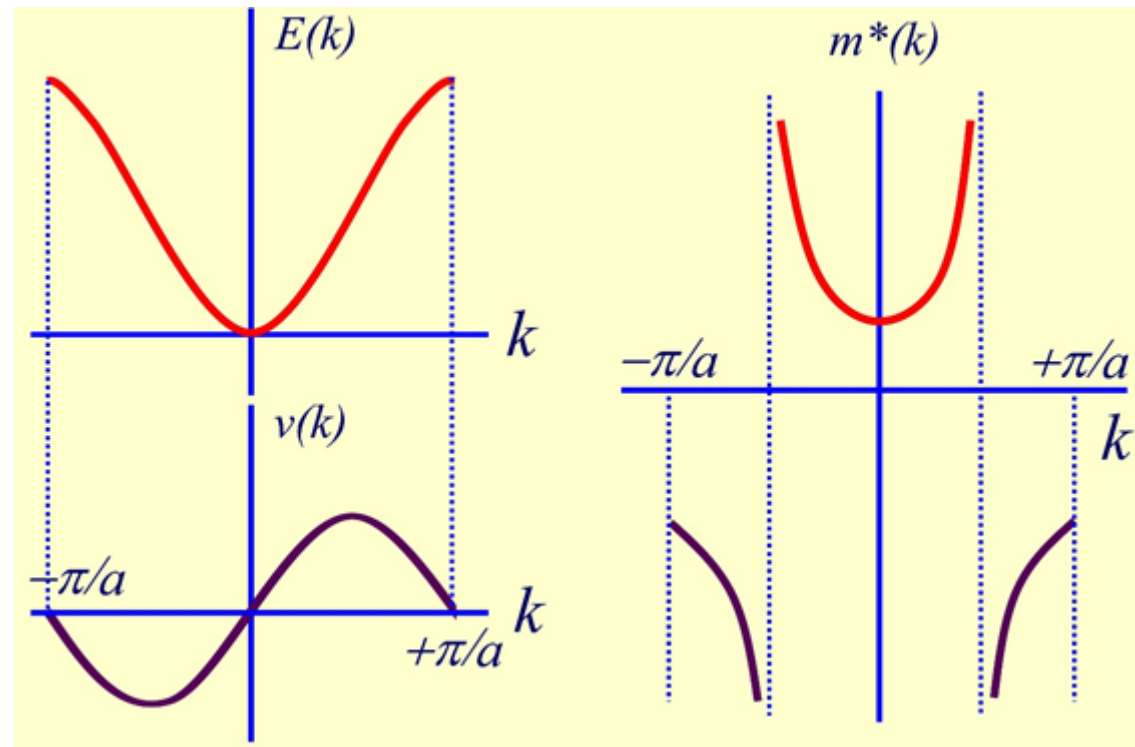
能带顶部 $k = \pm\pi / a$

$$v(k) = 0$$

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

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

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



—— 在外加电场作用下电子的运动

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

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

$$E^i(k) = \varepsilon_i - J_0 - 2J_1 \cos ka$$

电子的速度

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

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

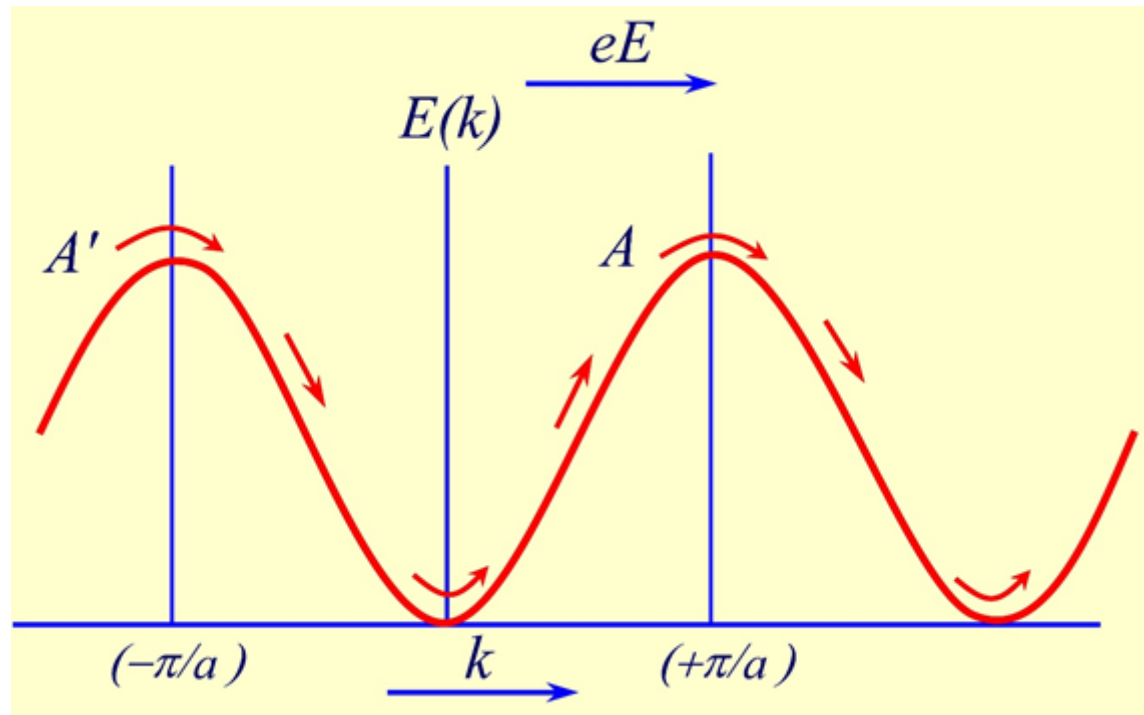
电子的速度 $v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin(a \frac{1}{\hbar} Ft) \quad \frac{\hbar dk}{dt} = F$

—— 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 $k=\pi/a$
移动出去

—— 同时从 $k=-\pi/a$
移动进来



$$\text{电子速度振荡 } v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin a \frac{1}{\hbar} F t \quad m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1 a^2 \cos ka}$$

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

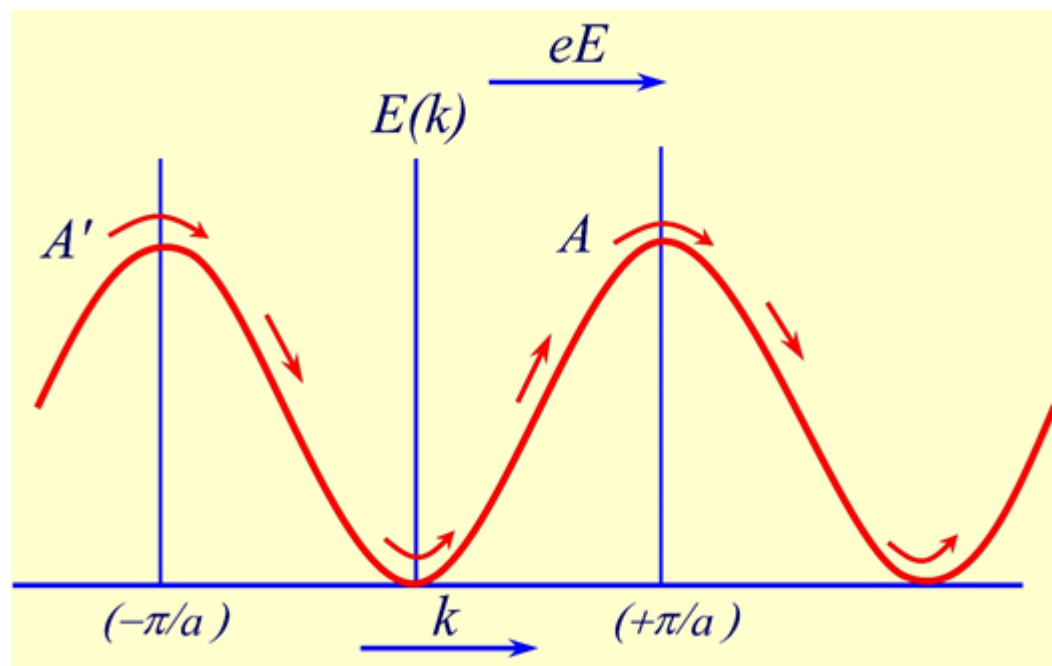
$$k = \pi/2a \quad v(k) = 2J_1 a / \hbar$$

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

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

—— 电子做减速运动

$$k = \pi/a \quad v(k) = 0$$



$$m^*(k) = -\hbar^2 / 2J_1 a^2 \text{ —— 电子到达能带顶部}$$

电子速度振荡 $v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin a \frac{1}{\hbar} F t$ $m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1 a^2 \cos ka}$

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

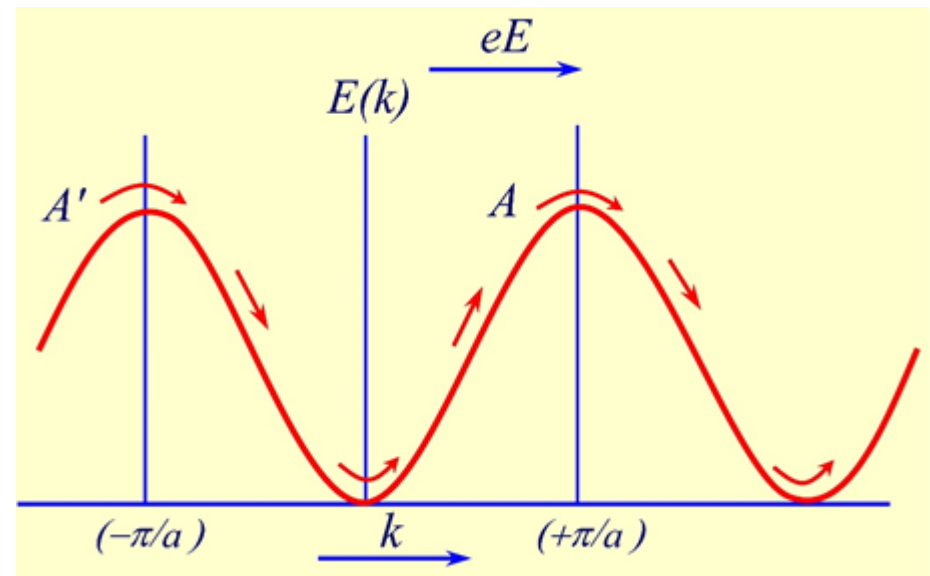
$k = -\pi/2a$ $v(k) = -\frac{2J_1 a}{\hbar}$

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

$k = -\pi/2a \sim 0$

—— $m^*(k) > 0$, $|v(k)|$ 不断减小

$k = 0$ $v(k) = 0$ $m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1 a^2}$ —— 电子到达能带底部



电子运动在实空间中的描述

$$v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin a \frac{1}{\hbar} Ft \text{ —— 电子在实空间中运动的振荡}$$

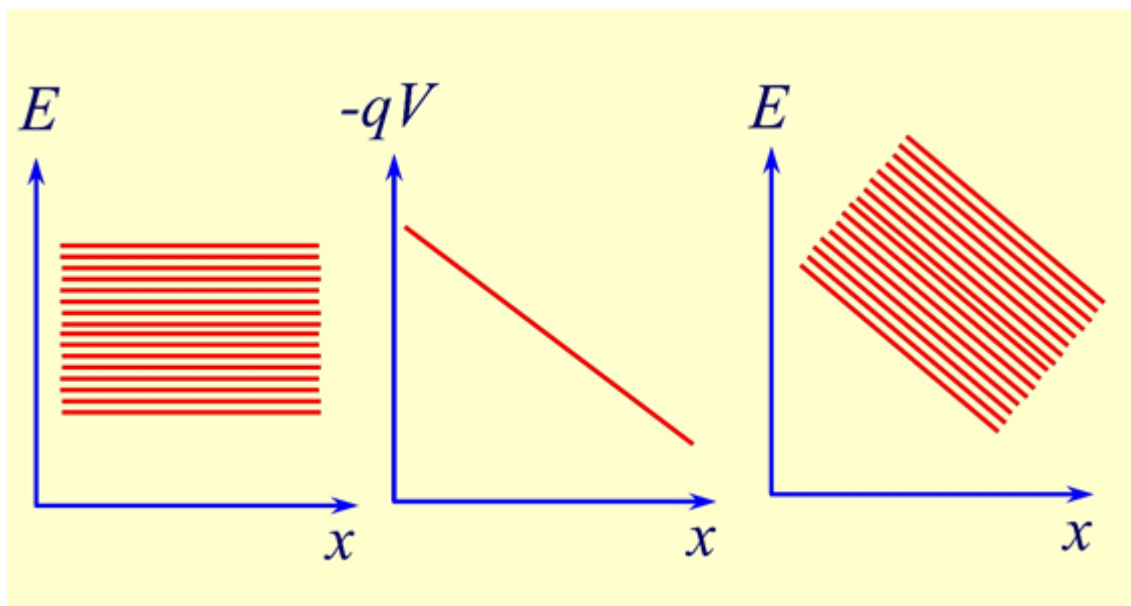
能带的倾斜

外电场对电子能量本征值附加的能量 —— \mathbf{E} 沿 $-\mathbf{x}$ 方向

$$\Delta E = -qV$$

$$V = Ex$$

$$\Delta E = -qEx$$



电子运动的振荡

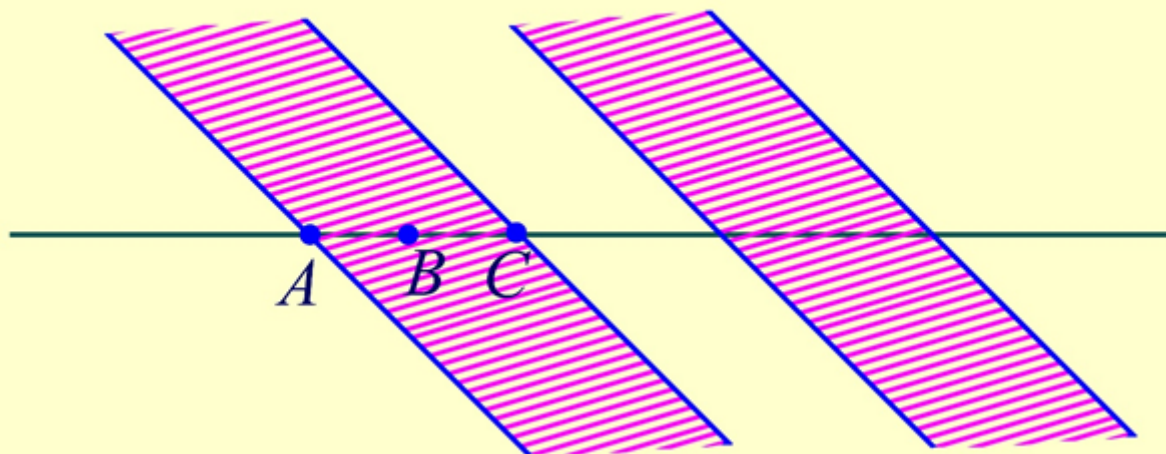
$t=0$ 电子由带底A点经过B点到达C点 —— $k=0$ 到 $k=\pi/a$ 的运动

—— 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

—— $k=-\pi/a$ 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

Electron movement with the electric field in the real space



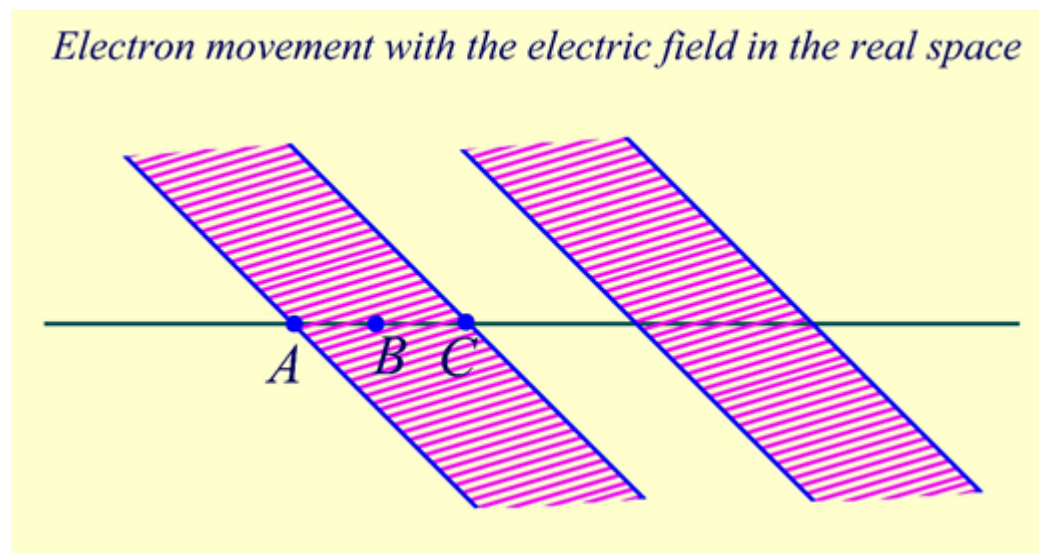
—— 电子在运动的过程中，由于受到声子、杂质和缺陷的散射（碰撞），相邻两次散射之间的平均时间间隔为电子的平均自由运动时间： τ

—— 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

—— $\omega\tau \gg 1$

—— ω 振荡圆频率



振荡圆频率 $\omega = \frac{2\pi}{T}$

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

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

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

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

如果 $a \approx 0.3 \text{ nm}$, $\tau \approx 10^{-13} \text{ s}$, 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

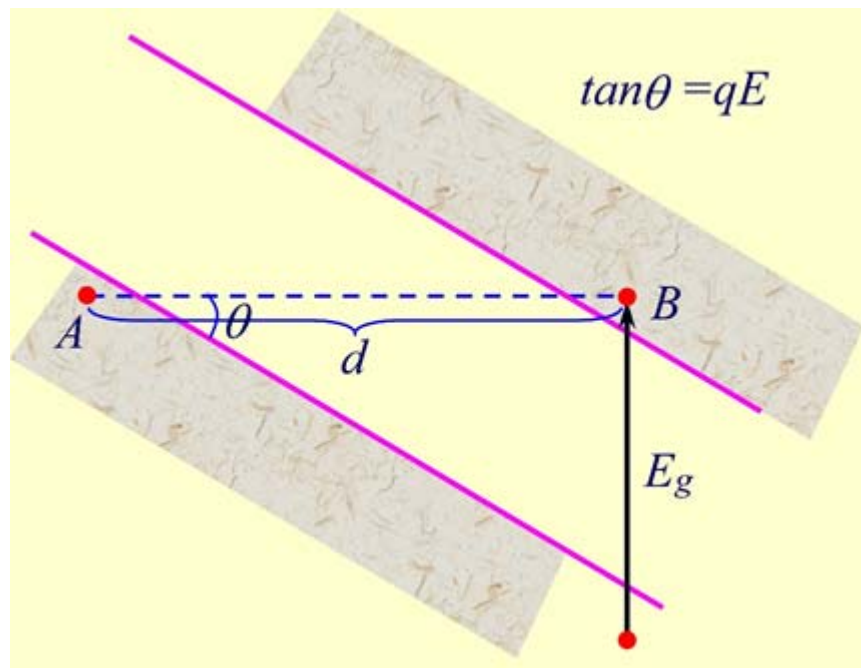
—— 很难观察到电子的振荡, 在一般电场下, 在 \mathbf{k} 空间电子只是发生了一个小位移, 无法实现振荡

—— 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

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

$$d = \frac{E_g}{qE} \text{ —— 位垒长度}$$



—— 当电场足够强时，若下面的能带被电子填满，或者接近填满，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 $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$

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

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

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

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

1) 在无外场时

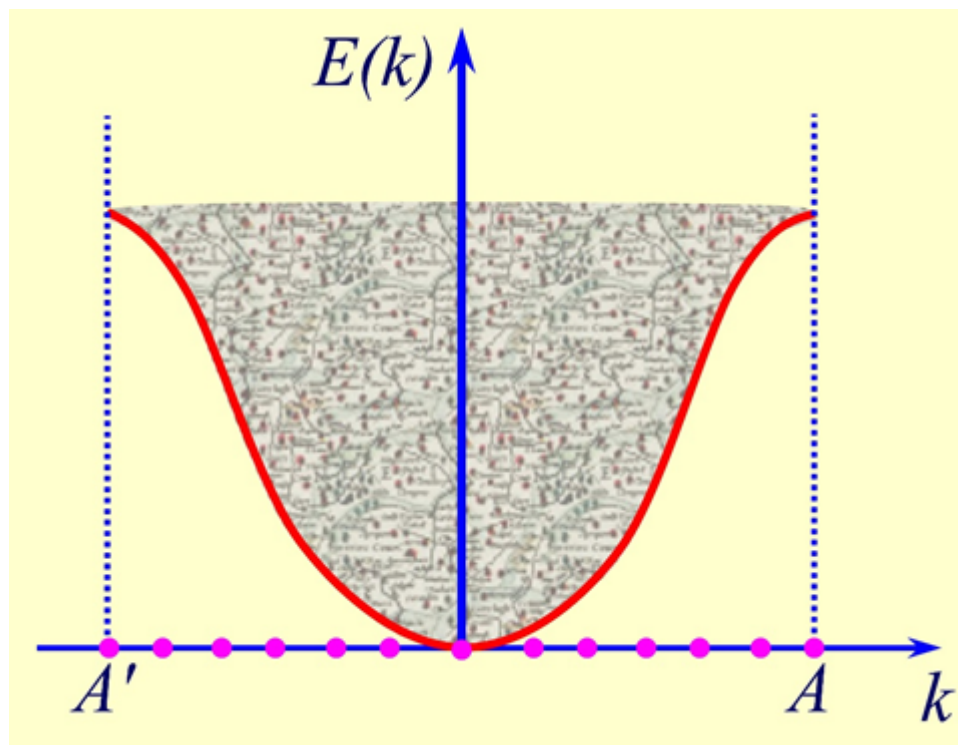
—— \vec{k} 状态和 $-\vec{k}$ 状态中电子的速度大小相等、方向相反

每个电子产生的电流 $-q\vec{v}$

—— 对电流的贡献相互抵消

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

—— 晶体中的满带在无外场时，不产生电流



2) 在有外场 \vec{E} 作用时

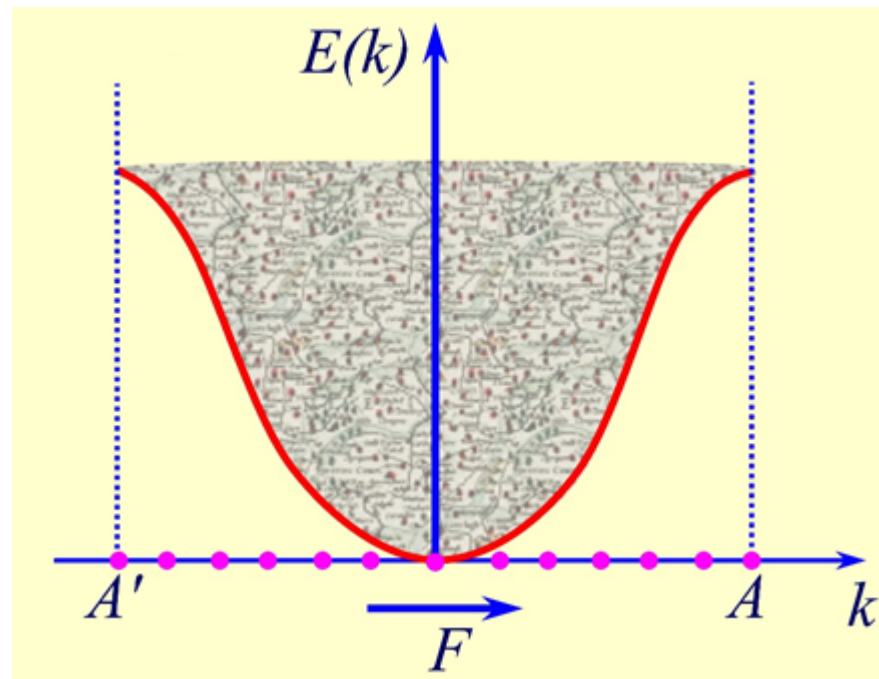
电子受到的作用力 $\vec{F} = -q\vec{E}$

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



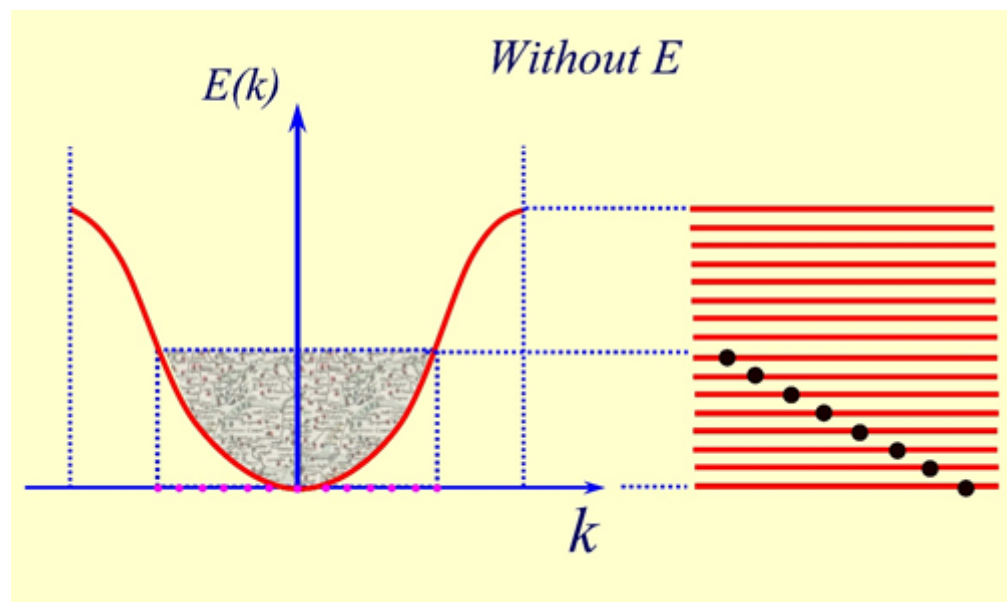
2. 导带中的电子对导电的贡献

1) 无外场存在时

—— 虽然只有部分状态被电子填充，但波矢为 \vec{k} 的状态和波矢为 $-\vec{k}$ 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

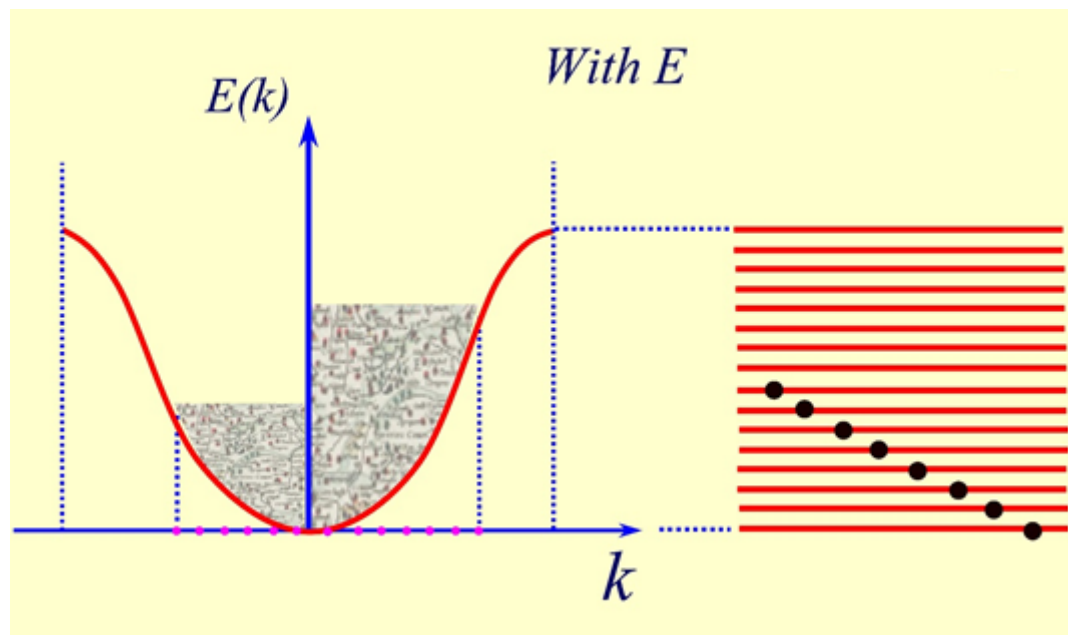


2) 在有外场作用时

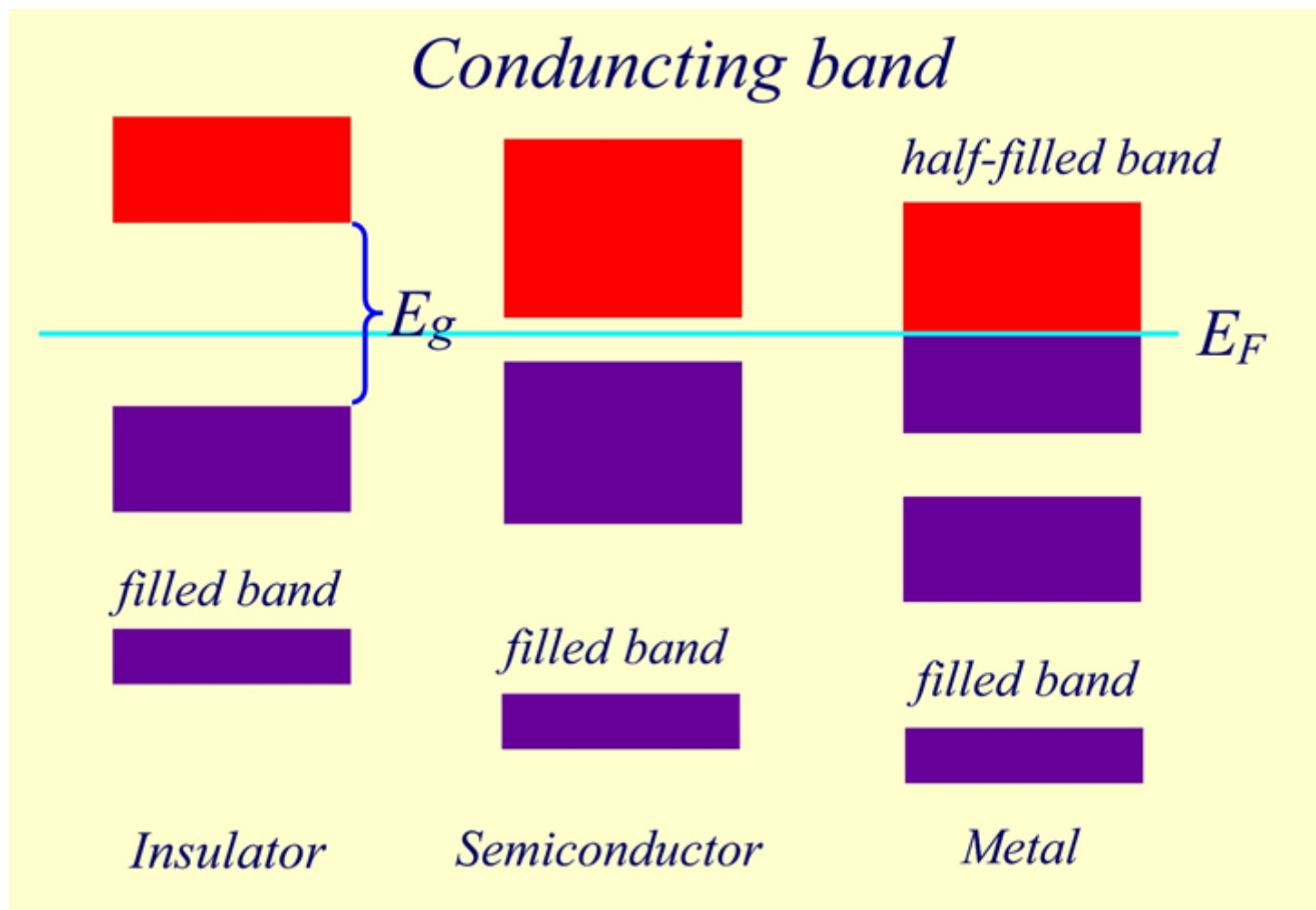
- 导带中只有部分状态被电子填充，外场的作用会使布里渊区的状态分布发生变化
- 所有的电子状态以相同的速度沿着电场的反方向运动，但由于能带是不满带，逆电场方向上运动的电子较多

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

- 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

—— N 个原胞构成的晶体，**每一条能带能容纳的电子数为 $2N$**

—— 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): 禁带宽度较窄, 约~2 eV以下

- 依靠热激发即可以将满带中的电子激发到导带中, 因而具有导电能力
- 热激发到导带中的电子数目随温度按指数规律变化, 半导体的电导率随温度的升高按指数形式增大

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, **能带交叠较小**, 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 \vec{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 $I(\vec{k})$

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 \vec{k} 中电子的速度 $\vec{v}(\vec{k})$ 所引起的

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

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

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

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

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

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

$q\vec{E} + [q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]$ —— 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 \vec{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 q ，具有正质量 $|m^*|$ 、速度 $\vec{v}(\vec{k})$ 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

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \\ \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B} \end{array} \right.$$

1) 沿磁场方向 \vec{k} 的分量不发生变化

2) 洛伦兹力不做功, 能量 $E(\vec{k})$ 不随时间变化, 电子在 \mathbf{k} 空间的等能面上运动

—— 电子在 \mathbf{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

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

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

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


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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2k_x}{dt^2} = -\left(\frac{qB}{m}\right)^2 k_x \\ \frac{d^2k_y}{dt^2} = -\left(\frac{qB}{m}\right)^2 k_y \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2k_x}{dt^2} + \left(\frac{qB}{m}\right)^2 k_x = 0 \\ \frac{d^2k_y}{dt^2} + \left(\frac{qB}{m}\right)^2 k_y = 0 \end{array} \right.$$

回转频率 $\omega_0 = \frac{qB}{m}$

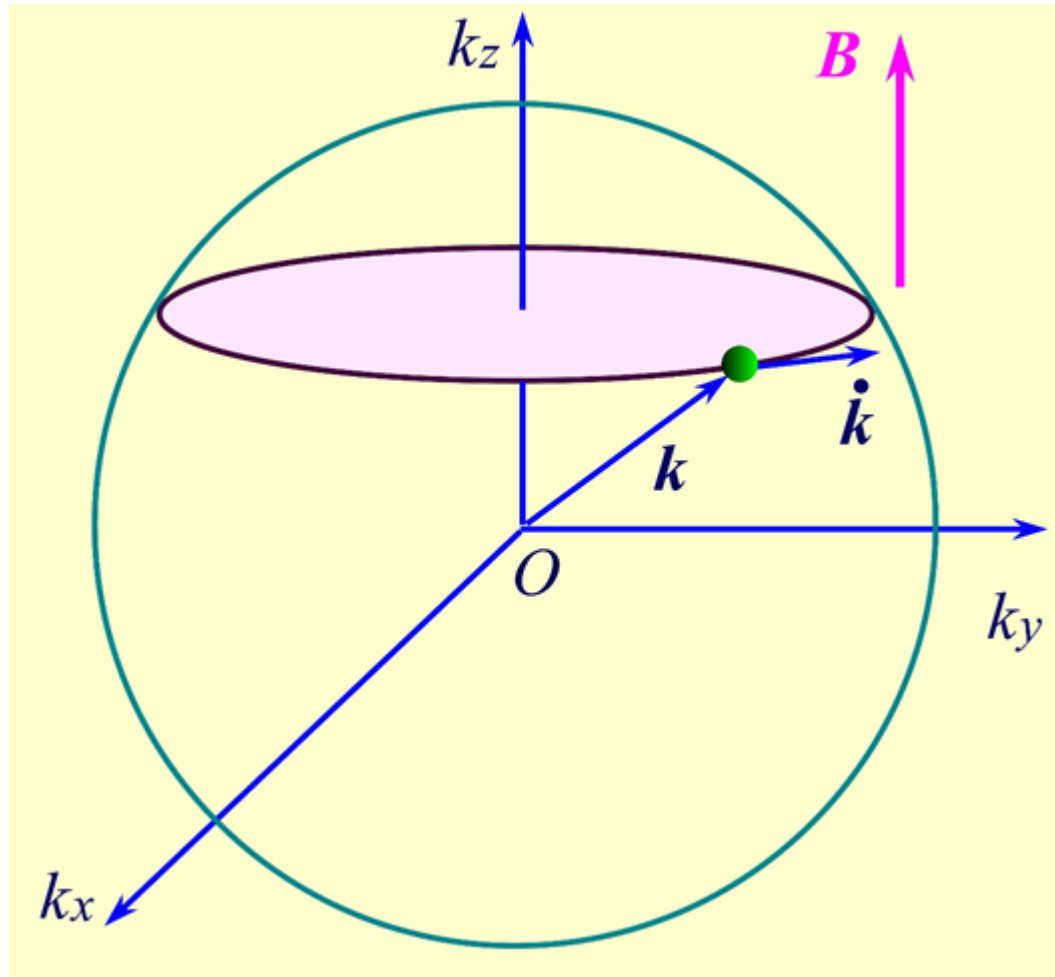
—— k 空间电子在 (k_x, k_y) 面上做圆周运动

—— 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

$$\bar{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} \xrightarrow{\text{red arrow}} \frac{d\bar{v}(\vec{k})}{dt} = \frac{\hbar}{m} \frac{d\vec{k}}{dt}$$

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

$$\frac{d\bar{v}(\vec{k})}{dt} = \frac{1}{m} [-q \bar{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \xrightarrow{\text{red arrow}}$$

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\frac{qB}{m} v_y \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{qB}{m} v_x \\ \frac{dv_z}{dt} = 0 \end{cases}$$

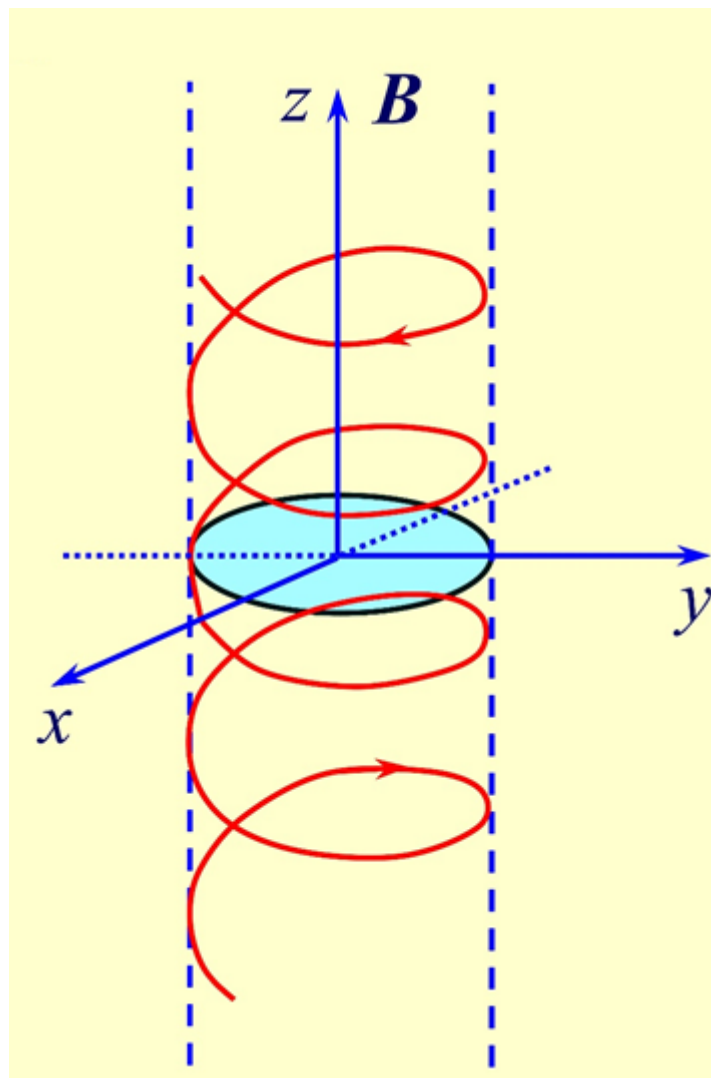
$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_x}{dt} = -\frac{qB}{m} v_y \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{qB}{m} v_x \end{array} \right. \xrightarrow{\text{对时间求导}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 v_x}{dt^2} = -\frac{qB}{m} \frac{dv_y}{dt} \\ \frac{d^2 v_y}{dt^2} = \frac{qB}{m} \frac{dv_x}{dt} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 v_x}{dt^2} + \left(\frac{qB}{m}\right)^2 v_x = 0 \\ \frac{d^2 v_y}{dt^2} + \left(\frac{qB}{m}\right)^2 v_y = 0 \end{array} \right. \xrightarrow{\hspace{1cm}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 x}{dt^2} + \left(\frac{qB}{m}\right)^2 x = 0 \\ \frac{d^2 y}{dt^2} + \left(\frac{qB}{m}\right)^2 y = 0 \end{array} \right.$$

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

—— 电子在 z 方向做匀速运动，在 (x, y) 平面做匀速圆周运动

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



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 $\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$

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

磁场沿z轴 $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ $\vec{A} = (-By, 0, 0)$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

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