课程信息

- **第四次作业（截止日期3月24日23:59）：**

  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、布洛赫定理、布洛赫波近自由电子近似、微扰论、简并微扰论、共有化电子、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）

$$\psi(\vec{r}+\vec{R}_m)=e^{i\vec{k}\cdot(m_1\vec{a}_1+m_2\vec{a}_2+m_3\vec{a}_3)}\psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}+\vec{R}_m)=e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m}\psi(\vec{r})$$ —— 布洛赫定理

电子的波函数 $\boxed{\psi(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r})}$ —— 布洛赫函数

$u_k(\vec{r})$ —— 晶格周期性函数

满足布洛赫定理 $\psi(\vec{r}+\vec{R}_m)=e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m}[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r}+\vec{R}_m)]$

$$=e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m}[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r})]=e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m}\psi(\vec{r})$$

☒ 平移算符本征值的物理意义

1）$\lambda_1 = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1}$，$\lambda_2 = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}$，$\lambda_3 = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_3}$

$$T_1\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}+\vec{a}_1) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1}\psi(\vec{r})$$ —— 原胞之间电子波函数位相的变化

2）平移算符本征值量子数 $\vec{k}$

—— 简约波矢，不同的简约波矢，原胞之间的位相差不同

3）简约波矢改变一个倒格子矢量 $\vec{G}_n = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$

平移算符的本征值 $$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} = e^{i(\vec{k}+\vec{G}_n)\cdot\vec{R}_m}$$

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m}e^{i\vec{G}_n\cdot\vec{R}_m} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m}$$

为了使简约波矢 $\vec{k}$ 的取值和平移算符的本征值一一对应，将简约波矢的取值限制第一布里渊区

$$-\frac{b_j}{2} < k_j \le \frac{b_j}{2}$$

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

简约波矢的取值 $\vec{k}_j = \frac{l_1}{N_1}\vec{b}_j \qquad -\frac{N_j}{2} < l_j \le \frac{N_j}{2}$

第一布里渊区体积 $\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$

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

—— 在 $\vec{k}$ 空间中第一布里渊区均匀分布的点

每个代表点的体积 $\frac{1}{N_1}\vec{b}_1 \cdot (\frac{1}{N_2}\vec{b}_2 \times \frac{1}{N_3}\vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{V_c}$

状态密度 $\frac{V_c}{(2\pi)^3}$

简约布里渊区的波矢数目 $\frac{(2\pi)^3}{\Omega} \cdot \frac{N\Omega}{(2\pi)^3} = N$

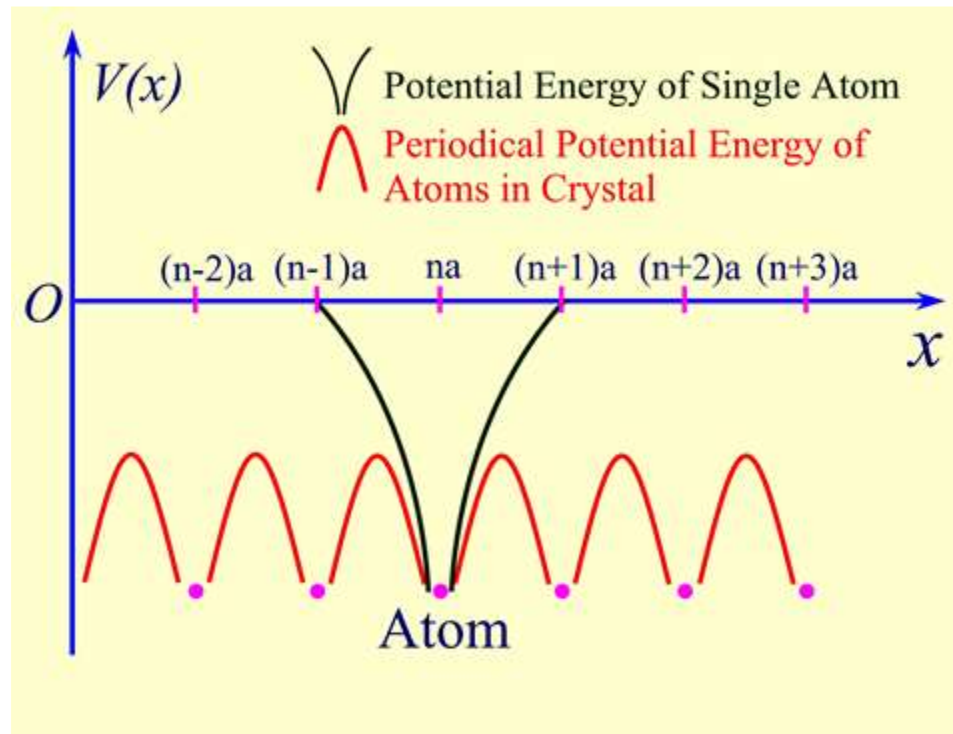
§ 4.2 一维周期场中电子运动的近自由电子近似

1. 模型和微扰计算

近自由电子近似模型

—— 金属中电子受到原子实周期性势场的作用

—— 假定势场的起伏较小



零级近似 —— 用势场平均值代替原子实产生的势场

$$\bar{V} = \overline{V(x)}$$

周期性势场的起伏量作为微扰来处理 $V(x) - \bar{V} = \Delta V$

1）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

一维N个原子组成的金属，金属的线度 $L = Na$

零级近似下 $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \bar{V}$

薛定谔方程 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi^0}{dx^2} + \bar{V}\psi^0 = E^0\psi^0$

波函数和能量本征值 $\psi_k^0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$ $E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V}$

满足周期边界条件

$$\psi_k^0(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ik(x+Na)}$$

$$kNa=l2\pi \qquad k=l\frac{2\pi}{Na} \qquad \text{—— } l \text{ 为整数}$$

波函数满足正交归一化

$$\int_0^L \psi_{k'}^0 {}^* \psi_k^0 dx=\delta_{kk'}$$

2）微扰下电子的能量本征值

哈密顿量 $H=H_0+H'$

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

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

根据微扰理论，电子的能量本征值

$$E_k = E_k^0 + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \cdots.$$

一级能量修正 $E_k^{(1)} = \langle k | H' | k \rangle = \langle k | V(x) - \bar{V} | k \rangle$

$$E_k^{(1)} = \int_0^L \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikx} [V(x) - \bar{V}] \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} dx$$

$$E_k^{(1)} = [\int_0^L \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikx} V(x) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} dx] - \bar{V}$$

$$E_k^{(1)} = 0$$

二级能量修正 $E_k^{(2)} = \sum_{k'} \frac{|<k'|H'|k>|^2}{E_k^0 - E_{k'}^0}$ —— $k \neq k'$

$$<k'|H'|k> = <k'|V(x) - \bar{V}|k> = <k'|V(x)|k>$$

$$<k'|V(x)|k> = \frac{1}{L}\int_0^L e^{-i(k'-k)x} V(x) dx$$ —— 按原胞划分写成

$$<k'|V(x)|k> = \frac{1}{Na}\sum_{n=0}^{N-1}\int_{na}^{(n+1)a} e^{-i(k'-k)x} V(x) dx$$

—— 引入积分变量ξ $x = \xi + na$

利用势场函数的周期性 $V(\xi)=V(\xi+na)$ $x=\xi+na$

$$<k'|V(x)|k>=\frac{1}{Na}\sum_{n=0}^{N-1}e^{-i(k'-k)na}\int_0^a e^{-i(k'-k)\xi}V(\xi)d\xi$$

$$<k'|V(x)|k>=[\frac{1}{a}\int_0^a e^{-i(k'-k)\xi}V(\xi)d\xi]\cdot\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}[e^{-i(k'-k)a}]^n$$

i) $k'-k=n\frac{2\pi}{a}$ $\quad\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}[e^{-i(k'-k)a}]^n=1$

ii) $k'-k\neq n\frac{2\pi}{a}$ $\quad\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}[e^{-i(k'-k)a}]^n=\frac{1}{N}\frac{1-e^{-i(k'-k)Na}}{1-e^{-i(k'-k)a}}$

将 $k=\frac{l}{Na}(2\pi)$ 和 $k'=\frac{l'}{Na}(2\pi)$ 代入 $\frac{1}{N}\frac{1-e^{-i(k'-k)Na}}{1-e^{-i(k'-k)a}}=0$

$$<k'|V(x)|k>=[\frac{1}{a}\int_0^a e^{-i(k'-k)\xi}V(\xi)d\xi]\cdot\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}[e^{-i(k'-k)a}]^n$$

$$k'-k=n\frac{2\pi}{a} \qquad <k'|V(x)|k>=V(n)=\frac{1}{a}\int_0^a e^{-i(k'-k)\xi}V(\xi)d\xi$$

$$k'-k\neq n\frac{2\pi}{a} \qquad <k'|V(x)|k>=0$$

—— **周期场V(x)的第n个傅里叶系数**

$$k'-k=n2\pi/a \qquad <k'|H'|k>=V(n)$$

$$k'-k\neq n2\pi/a \qquad <k'|H'|k>=0$$

二级能量修正式 $E_k^{(2)} = \sum_{k'} \frac{|\langle k'|H'|k\rangle|^2}{E_k^0 - E_{k'}^0}$

$$E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} \qquad k' - k = n\frac{2\pi}{a} \qquad \langle k'|H'|k\rangle = V(n)$$

$$E_{k'}^0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \bar{V} \qquad k' - k \neq n\frac{2\pi}{a} \qquad \langle k'|H'|k\rangle = 0$$

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

计入微扰后电子的能量

$$E_k = E_k^0 + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \cdots . \qquad E_k^{(1)} = 0$$

$$E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} \qquad E_k^{(2)} = \sum_n{}' \frac{|V_n|^2}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2 - (k + \frac{n}{a}2\pi)^2]}$$

$$V(n) = \frac{1}{a}\int_0^a e^{-i(k'-k)\xi} V(\xi) d\xi$$

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

3）微扰下电子的波函数

电子的波函数 $\psi_k(x)=\psi_k^0(x)+\psi_k^{(1)}(x)+\cdots$.

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

波函数的一级修正 $$\psi_k^{(1)}=\sum_{k'}\frac{<k'|H'|k>}{E_k^0-E_{k'}^0}\psi_{k'}^0$$

$$E_k^0=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\bar{V} \qquad k'-k=n\frac{2\pi}{a} \qquad <k'|H'|k>=V(n)$$

$$E_{k'}^0=\frac{\hbar^2k'^2}{2m}+\bar{V} \qquad k'-k\neq n\frac{2\pi}{a} \qquad <k'|H'|k>=0$$

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

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

计入微扰电子的波函数

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

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

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

可以证明 $u_k(x+ma)=u_k(x)$

电子波函数 $$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}u_k(x)$$

——具有布洛赫函数形式

⌧电子波函数的意义

i) 电子波函数和散射波

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

— 波矢为**k**的前进的平面波

— 平面波受到周期性势场作用产生的散射波

散射波的波矢 $k' = k + \frac{n}{a} 2\pi$

相关散射波成份的振幅 $\dfrac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2 - (k + \frac{n}{a}2\pi)^2]}$

入射波波矢 $k=-\frac{n\pi}{a}$

散射波成份的振幅 $$\frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2-(k+\frac{n}{a}2\pi)^2]}\Rightarrow\infty$$

波函数一级修正项

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

—— 微扰法不再适用了

ii) 电子波函数和不同态之间的相互作用

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

在原来的零级波函数 $\psi_k^0(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$ 中

掺入与它有微扰矩阵元的其它零级波函数

$$\psi_{k'}^0(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{i(k+\frac{n}{a}2\pi)x}$$

—— 它们的能量差越小

掺入的部分就越大

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

当 $k = -\frac{n\pi}{a}$ 时 $\quad k' = k + \frac{n}{a}2\pi = \frac{n\pi}{a}$

—— 两个状态具有相同的能量

$$E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} \qquad E_{k'}^0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \bar{V} \qquad E_k^0 = E_{k'}^0$$

—— 导致了波函数的发散

⌧电子能量的意义

二级能量修正 $$E_k^{(2)} = \sum_n{}' \frac{|V_n|^2}{\frac{\hbar^2}{2m}[k^2 - (k + \frac{n}{a}2\pi)^2]}$$

当 $$k^2 = (k + \frac{n}{a}2\pi)^2 \qquad k = -\frac{n\pi}{a}$$

$$k' = k + \frac{2n\pi}{a} = \frac{n\pi}{a} \qquad E_k^{(2)} \Rightarrow \pm\infty$$

—— 电子的能量是发散的

—— **k**和**k'**两个状态具有相同的能量，**k**和**k'**态是简并的

4）电子波矢在 $k=-\frac{n\pi}{a}$ 附近的能量和波函数

—— 简并微扰问题中，波函数由简并波函数线性组合构成

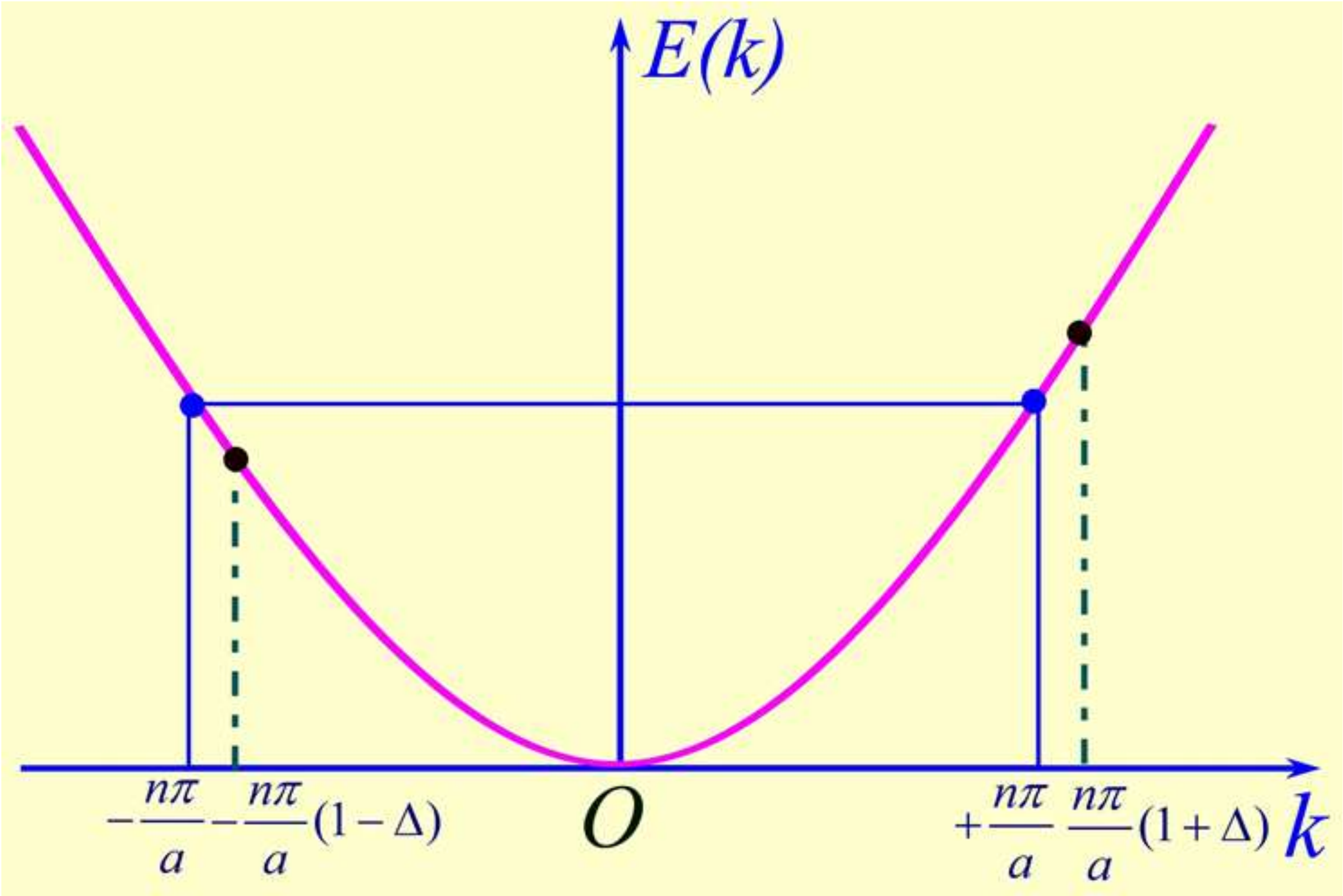
状态 $k=-\frac{n\pi}{a}(1-\Delta)$ —— Δ是一个小量 $\Delta>0$

周期性势场中，对其有主要影响的状态

$$k'=k+\frac{2n\pi}{a} \qquad k'=\frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$$

—— 只考虑影响最大的状态，忽略其它状态的影响

状态 $k'=\frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$ 对状态 $k=-\frac{n\pi}{a}(1-\Delta)$ 的影响



简并波函数 $\psi(x) = a\psi_k^0 + b\psi_{k'}^0$

$$\psi_k^0 = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \qquad \psi_{k'}^0 = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik'x}$$

薛定谔方程 $H_0\psi(x) + H'\psi(x) = E\psi(x)$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \bar{V} \qquad H' = V(x) - \bar{V} = \Delta V$$

考虑到 $H_0\psi_k^0 = E_k^0\psi_k^0$ and $H_0\psi_{k'}^0 = E_{k'}^0\psi_{k'}^0$

得到 $a(E_k^0 - E + \Delta V)\psi_k^0 + b(E_{k'}^0 - E + \Delta V)\psi_{k'}^0 = 0$

$$a(E_k^0 - E + \Delta V)\psi_k^0 + b(E_{k'}^0 - E + \Delta V)\psi_{k'}^0 = 0$$

分别以 $\psi_k^0 *$ 或 $\psi_{k'}^0 *$ 从左边乘方程，对 x 积分

利用 $<k|\Delta V|k> = <k'|\Delta V|k'> = 0$

线性代数方程

$$(E_k^0 - E)a + V_n^* b = 0 \ \ \& \ \ V_n a + (E_{k'}^0 - E)b = 0$$

a, b有非零解 $\begin{vmatrix} E_k^0 - E & V_n^* \\ V_n & E_{k'}^0 - E \end{vmatrix} = 0$ $\quad V_n = <k'|V|k>$

$V_n^* = <k|V|k'>$

能量本征值 $E_\pm = \frac{1}{2}\{E_k^0 + E_{k'}^0 \pm \sqrt{(E_k^0 - E_{k'}^0)^2 + 4|V_n|^2}\}$

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}\{E_k^0 + E_{k'}^0 \pm \sqrt{(E_k^0 - E_{k'}^0)^2 + 4|V_n|^2}\}$$

i) $\left|E_k^0 - E_{k'}^0\right| >> |V_n|$ $\quad k = -\frac{n\pi}{a}(1-\Delta) \quad k' = \frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$

波矢k离 $-\frac{n\pi}{a}$ **较远，k状态的能量和状态k'差别较大**

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}\{E_k^0 + E_{k'}^0 \pm (E_{k'}^0 - E_k^0)\sqrt{1 + \frac{4|V_n|^2}{(E_{k'}^0 - E_k^0)^2}}\}$$

将 $\sqrt{1 + \frac{4|V_n|^2}{(E_{k'}^0 - E_k^0)^2}}$ **按** $\frac{4|V_n|^2}{(E_{k'}^0 - E_k^0)^2}$ **泰勒级数展开**

$$\sqrt{1+\frac{4|V_n|^2}{(E_{k'}^0-E_k^0)^2}}\approx 1+\frac{2|V_n|^2}{(E_{k'}^0-E_k^0)^2}$$

$$E_{\pm}=\frac{1}{2}\{E_k^0+E_{k'}^0\pm(E_{k'}^0-E_k^0)[1+\frac{2|V_n|^2}{(E_{k'}^0-E_k^0)^2}]\}$$

$$E_{\pm}=\begin{cases} E_{k'}^0+\dfrac{|V_n|^2}{E_{k'}^0-E_k^0} \\ E_k^0-\dfrac{|V_n|^2}{E_{k'}^0-E_k^0} \end{cases}$$

$$k=-\frac{n\pi}{a}(1-\Delta)$$

$$k'=\frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$$

$$\Delta>0 \qquad E_{k'}^0>E_k^0$$

$$E_{\pm} = \begin{cases} E_{k'}^0 + \dfrac{|V_n|^2}{E_{k'}^0 - E_k^0} \\ E_k^0 - \dfrac{|V_n|^2}{E_{k'}^0 - E_k^0} \end{cases} \qquad E_{k'}^0 > E_k^0$$

—— **k**和**k'**能级相互作用的结果是原来能级较高的**k'**提高
原来能级较低的**k**下压

—— 量子力学中微扰作用下，两个相互影响的能级，总是原来较高的能量提高了，原来较低的能量降低了

—— 能级间"排斥作用"

$$E_{\pm}=\frac{1}{2}\{E_k^0+E_{k'}^0\pm\sqrt{(E_k^0-E_{k'}^0)^2+4|V_n|^2}\}$$

ii) $\left|E_k^0-E_{k'}^0\right|<<|V_n| \quad k=-\frac{n\pi}{a}(1-\Delta) \quad k'=\frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$

波矢k非常接近 $-\frac{n\pi}{a}$ **，k状态的能量和k'能量差别很小**

$$E_{\pm}=\frac{1}{2}\{E_k^0+E_{k'}^0\pm 2|V_n|\sqrt{1+\frac{(E_k^0-E_{k'}^0)^2}{4|V_n|^2}}\}$$

将 $\sqrt{1+\frac{(E_k^0-E_{k'}^0)^2}{4|V_n|^2}}$ **按** $\frac{(E_k^0-E_{k'}^0)^2}{4|V_n|^2}$ **泰勒级数展开**

$$\sqrt{1+\frac{(E_k^0-E_{k'}^0)^2}{4|V_n|^2}} \approx 1+\frac{1}{2}\frac{(E_k^0-E_{k'}^0)^2}{4|V_n|^2}$$

$$k=-\frac{n\pi}{a}(1-\Delta)$$

$$k'=\frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$$

$$E_\pm=\frac{1}{2}\{E_k^0+E_{k'}^0\pm 2|V_n|+\frac{(E_k^0-E_{k'}^0)^2}{4|V_n|}\}$$

$$E_k^0=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}+\bar{V}$$

$$E_{k'}^0=\frac{\hbar^2 k'^2}{2m}+\bar{V}$$

$$E_{k'}^0=\bar{V}+\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{a})^2(1+\Delta)^2=\bar{V}+T_n(1+\Delta)^2$$

$$E_k^0=\bar{V}+\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{a})^2(1-\Delta)^2=\bar{V}+T_n(1-\Delta)^2$$

$$T_n=\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{a})^2$$

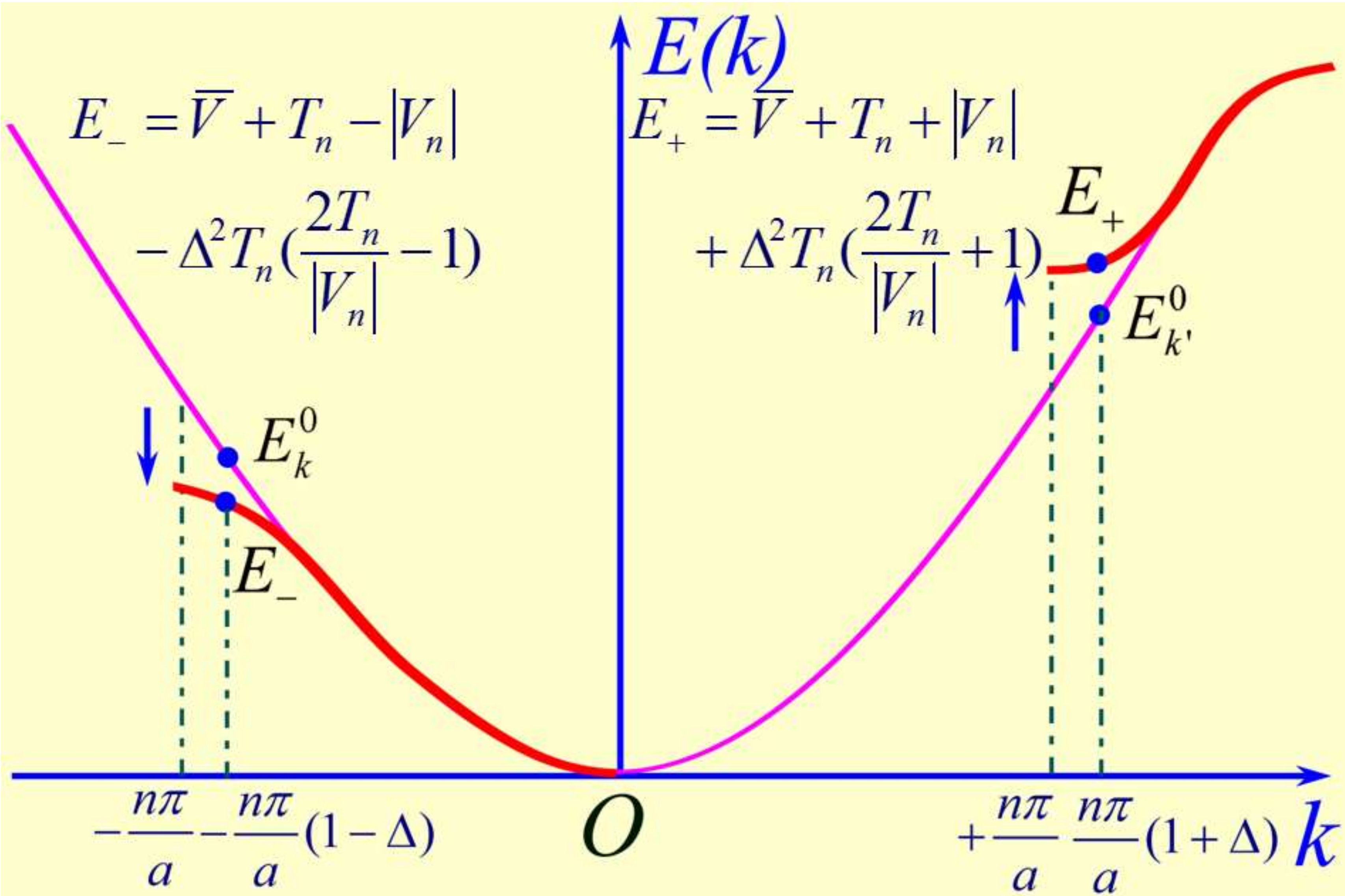
$$\left|E_k^0 - E_{k'}^0\right| << \left|V_n\right| \qquad k = -\frac{n\pi}{a}(1-\Delta) \quad k' = \frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$$

$$E_\pm = \begin{cases} \bar{V} + T_n + \left|V_n\right| + \Delta^2 T_n\left(\dfrac{2T_n}{\left|V_n\right|} + 1\right) \\ \bar{V} + T_n - \left|V_n\right| - \Delta^2 T_n\left(\dfrac{2T_n}{\left|V_n\right|} - 1\right) \end{cases} \qquad \Delta << 1 \qquad T_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

结果分析

i) 两个相互影响的状态k和k'微扰后，能量变为E$_+$和E$_-$，原来能量高的状态 $\psi_{k'}^0$，能量提高；原来能量低的状态 ψ_k^0 能量降低

两个相互影响的状态k和k’微扰后，能量变为E_+和E_-



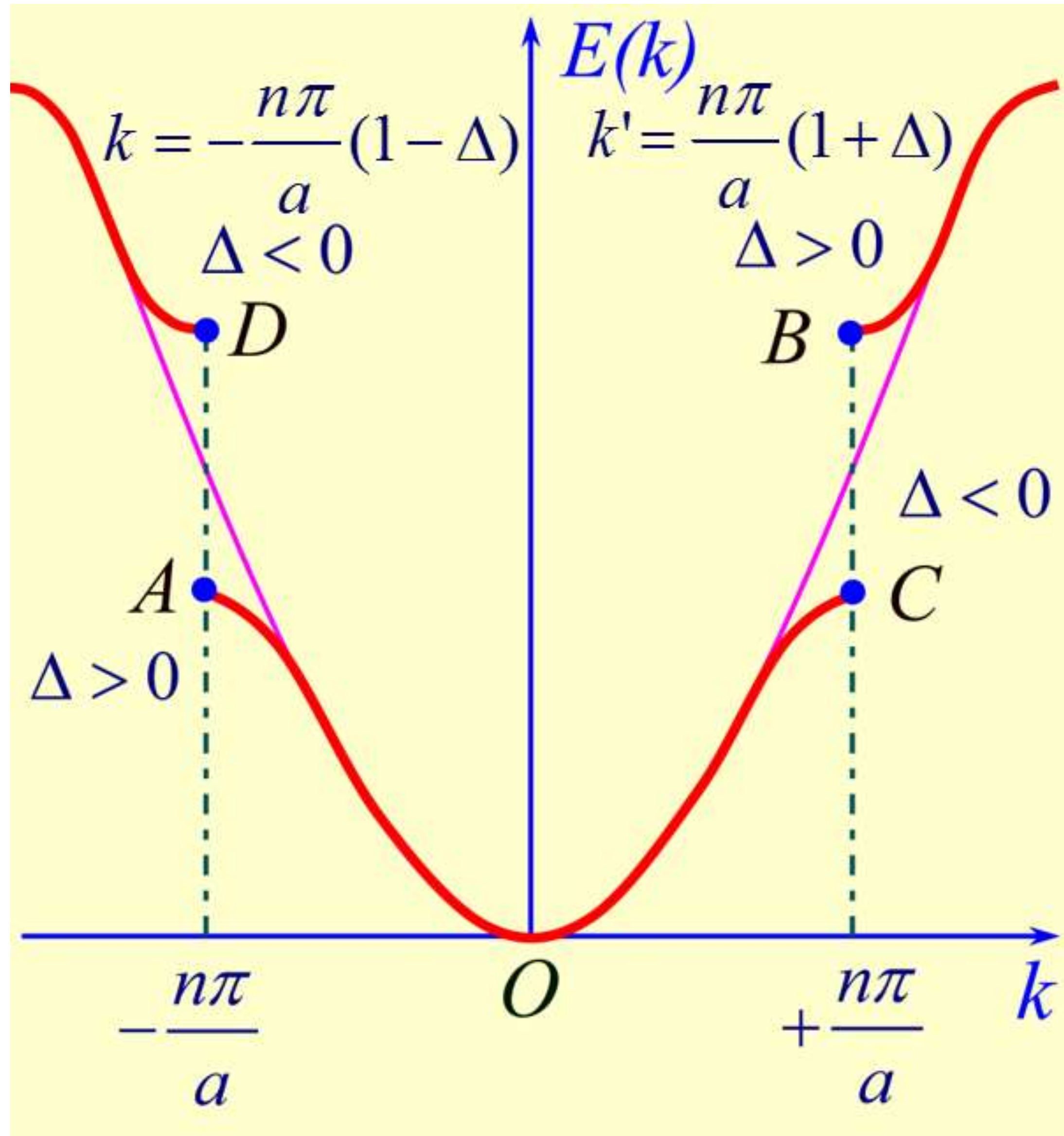
ii) 当 $\Delta \Rightarrow 0$ 时

$$E_{\pm} \Rightarrow \bar{V} + T_n \pm |V_n|$$

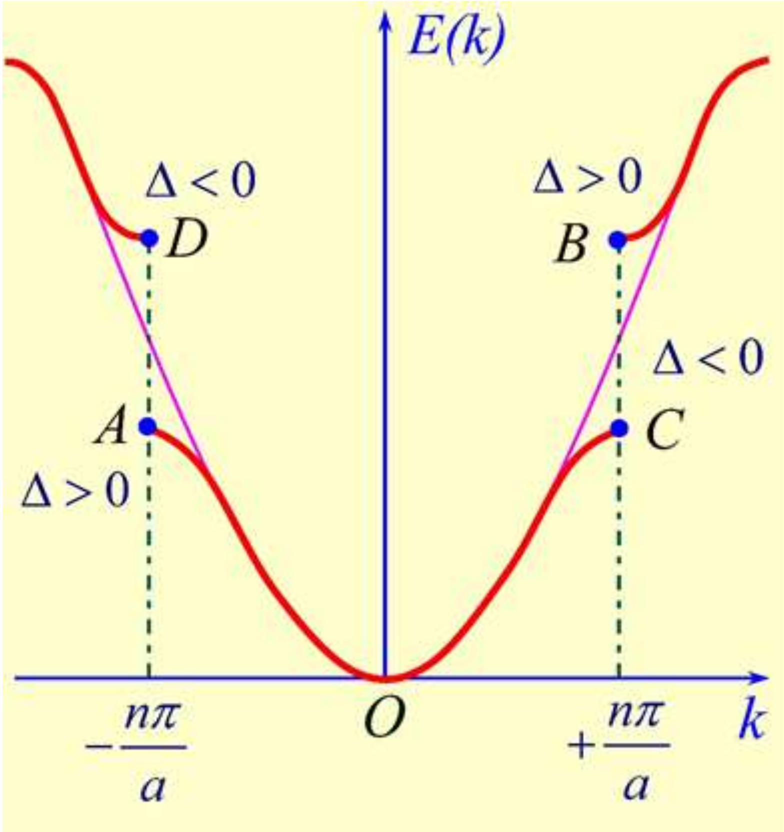
—— $\Delta > 0$, $\Delta < 0$ 两种情形下完全对称的能级图

—— A和C、B和D代表同一状态

—— 它们从Δ>0，Δ<0两个方向当Δ⇒0的共同极限



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



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 $E_k = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V}$

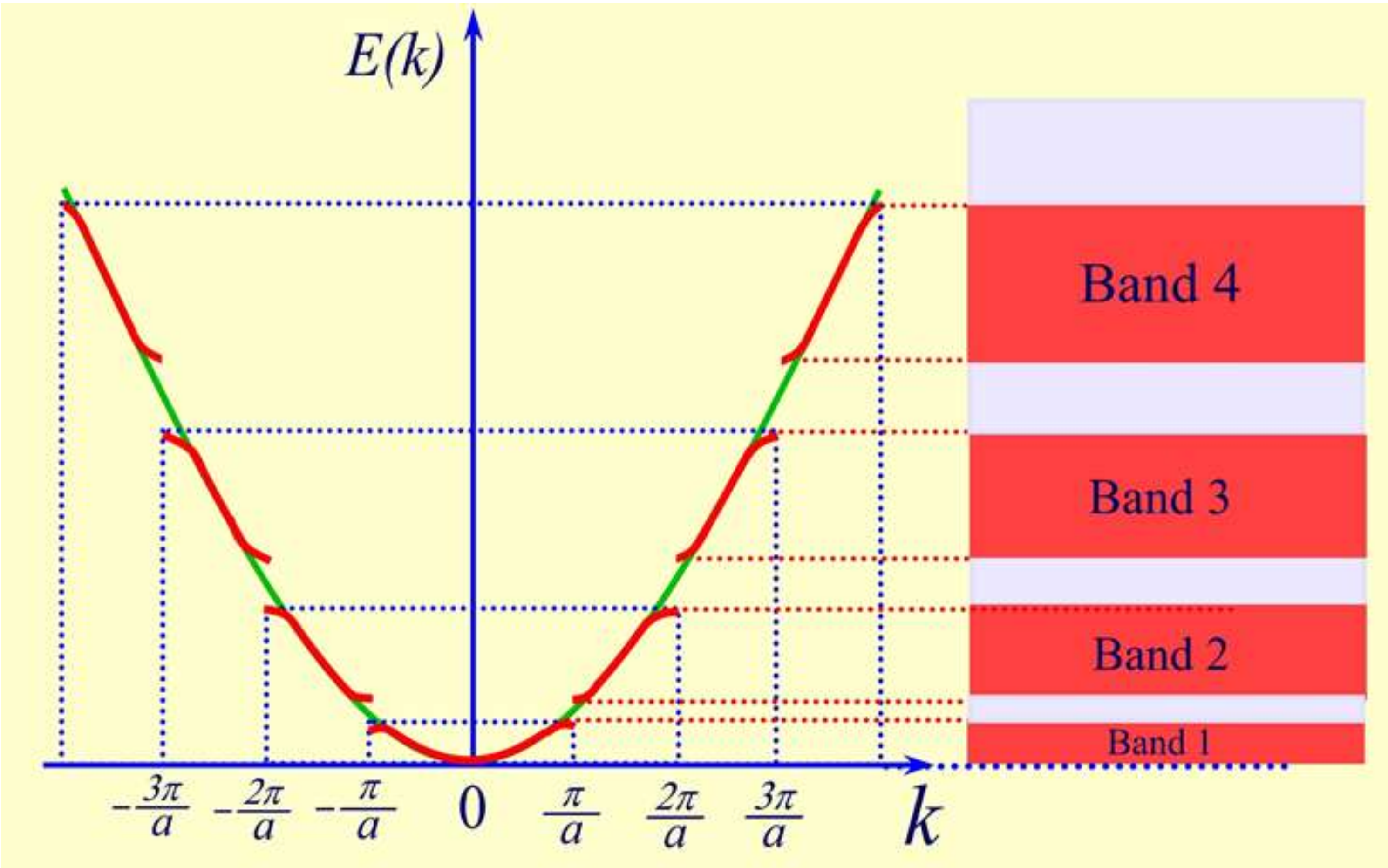
—— 当**N**很大时，$\mathbf{E_k}$视为准连续

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

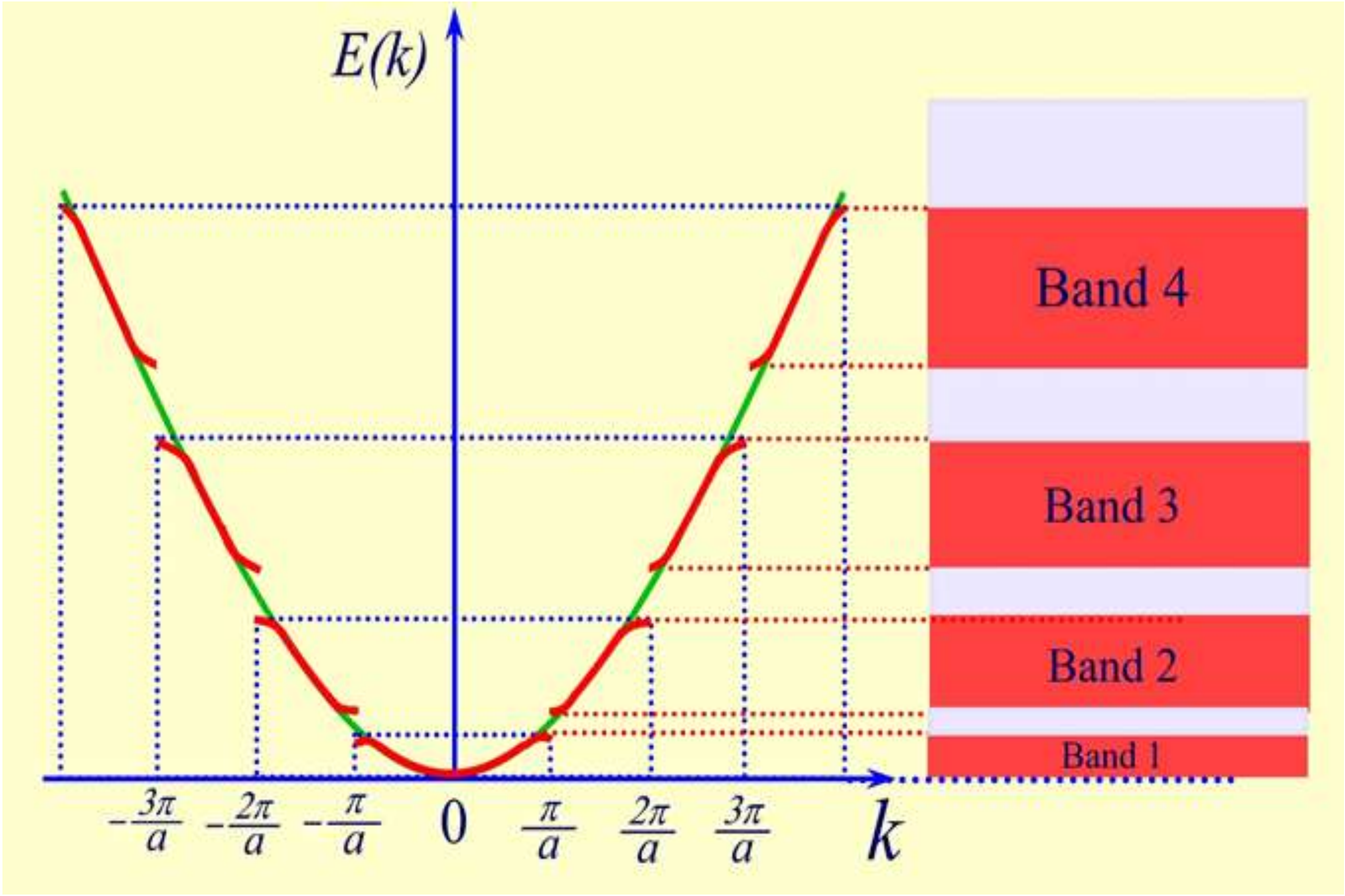
☒ 结果分析讨论

1) 能带底部，能量向上弯曲；能带顶部，能量向下弯曲



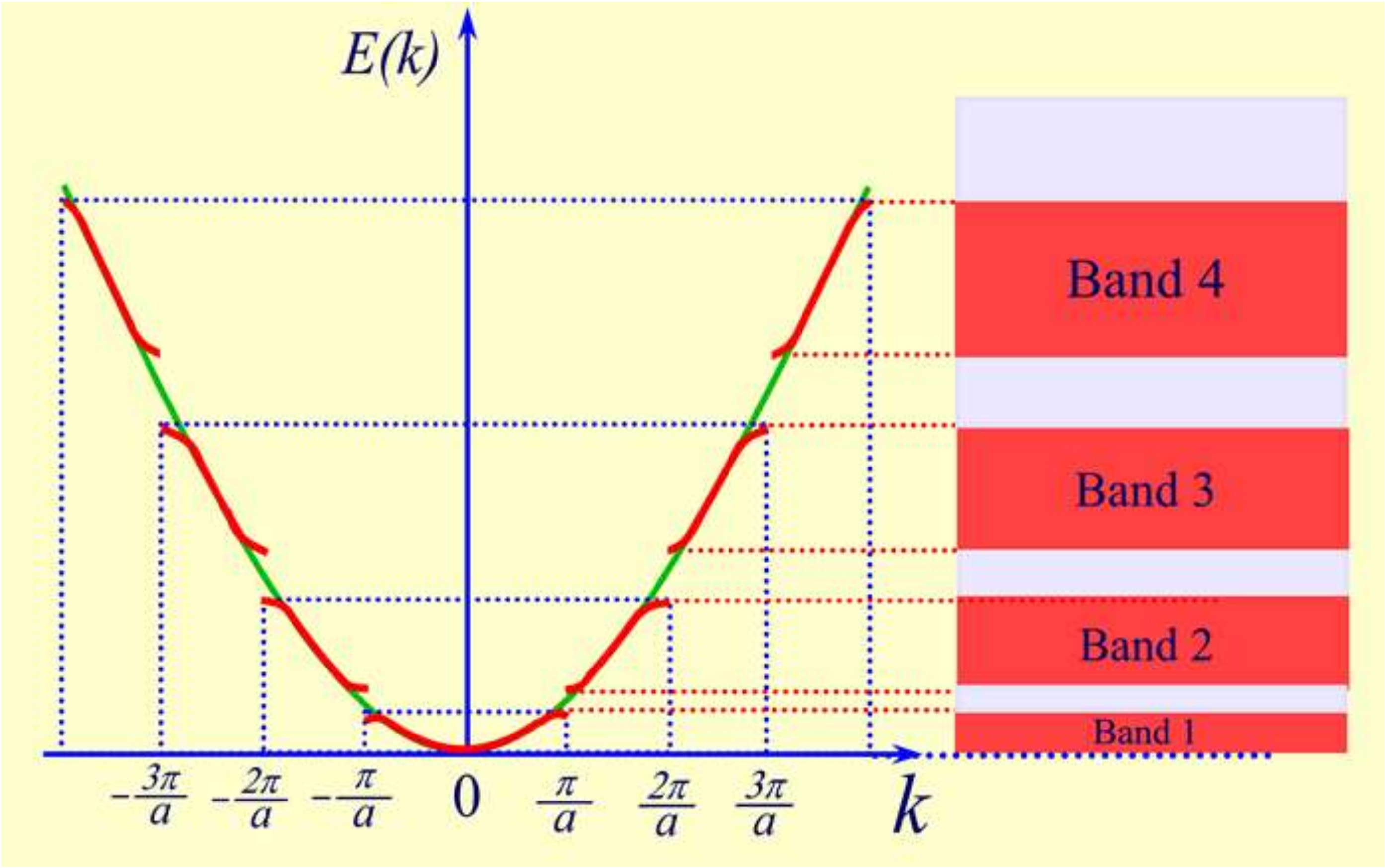
2) 禁带出现在波矢空间倒格矢的中点处

$$k = \pm\frac{1}{2}\frac{2\pi}{a};\quad \pm\frac{1}{2}\frac{4\pi}{a};\quad \pm\frac{1}{2}\frac{6\pi}{a};\quad \pm\frac{1}{2}\frac{8\pi}{a};\quad \ldots$$



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

—— 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 $E_k = \dfrac{h^2 k^2}{2m}$

—— 晶体弱周期性势场的微扰，电子能谱在布里渊边界

$(-\dfrac{\pi}{a}, \dfrac{\pi}{a}), (-\dfrac{2\pi}{a}, \dfrac{2\pi}{a}), (-\dfrac{3\pi}{a}, \dfrac{3\pi}{a}), \mathrm{L}$ —— 发生能量跃变

产生了宽度 $E_g = 2|V_1|, 2|V_2|, 2|V_3|, \mathrm{L}$ 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