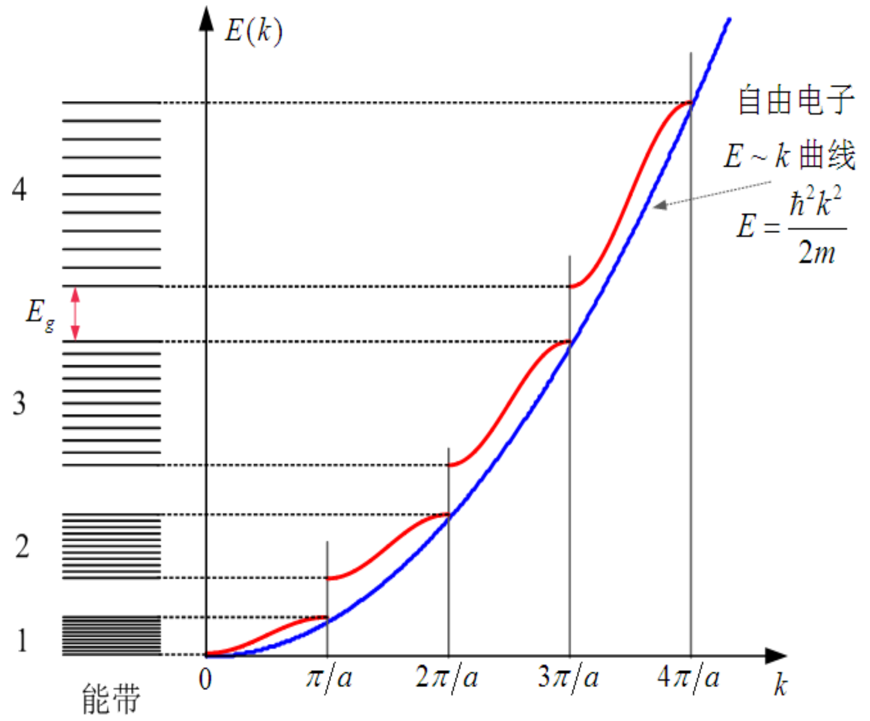
C3-3 费米能级和能态密度

课程回顾

周期性势阱中能带的形成：

- 在周期性方型势阱中应用布洛赫定理，建立了晶体中近自由电子的克龙尼格-朋奈模型。
- 晶体中电子的能量出现了允许和禁止的范围，即能量的允带和禁带。其色散关系具有分段连续的特点，每个允带定义的k值范围，对应于晶体的布里渊区。
- k的物理意义是电子晶格动量（布洛赫解不是动量算符本征函数）。晶格动量对时间的导数等于外力。



用波包概念理解晶体中电子的运动

外场施加到晶体上时，晶体中的电子不只是感受到外场的作用，而且还同时感受着晶体周期场（ 10^8 V/cm ）的作用。通常情况下，外场要比晶体周期势场弱得多。晶体中的电子在外场中的运动必须在周期场本征态的基础上进行讨论。采用的方法有两种：

- 求解含外场的单电子波动方程。
- 或者是在一定条件下，把晶体中电子在外场中的运动当作准经典粒子（波包）来处理。
- 所谓波包是指该粒子（例如电子）空间分布在 v 附近的△r 范围内，动量取值在k_0附近的△k范围内， 满足测不准关系。

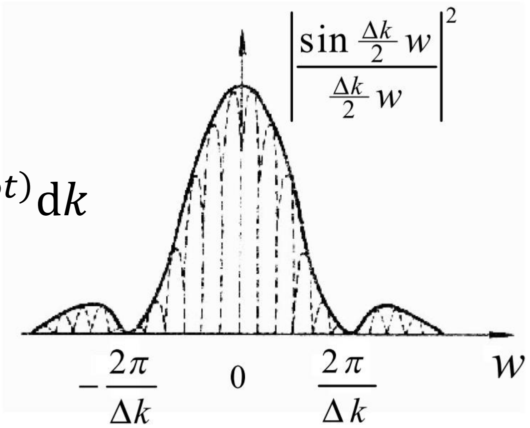
$$\psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}u_k(x) \qquad \omega(k) = E(k)/\hbar$$

波包的运动速度

$$\psi_k(x,t)=e^{i(kx-\omega t)}u_k(x) \qquad \omega(k)=E(k)/\hbar$$

假设△k很小，近似认为在这段区域内$u_k(x)$不随k变化

$$\Psi_{k_0}(x,t)=\int_{k_0-\Delta k/2}^{k_0+\Delta k/2} e^{i(kx-\omega t)}u_k(x)\mathrm{d}k \approx u_{k_0}(x)\int_{k_0-\frac{\Delta k}{2}}^{k_0+\frac{\Delta k}{2}} e^{i(kx-\omega t)}\mathrm{d}k$$



泰勒展开 $\omega(k)=\omega_0+\left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0}\Delta k$

$$\Psi_{k_0}(x,t)\approx u_{k_0}(x)e^{i(k_0x-\omega_0 t)}\int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{\frac{\Delta k}{2}} e^{i\left(k'x-\left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0}k't\right)}\mathrm{d}k'=u_{k_0}(x)e^{i(k_0x-\omega_0 t)} * \frac{2\sin\left(\frac{\Delta k}{2}\left(x-\left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0}t\right)\right)}{x-\left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0}t}$$

$$v(k_0)=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0}=\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0}$$

能带论基础

波包的加速度-有效质量

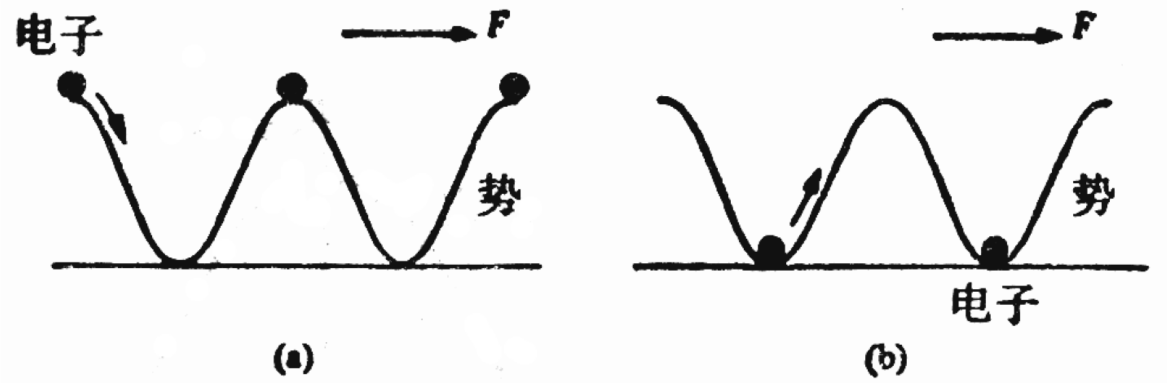
$$\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}t=\mathrm{d}E=\nabla_k E\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

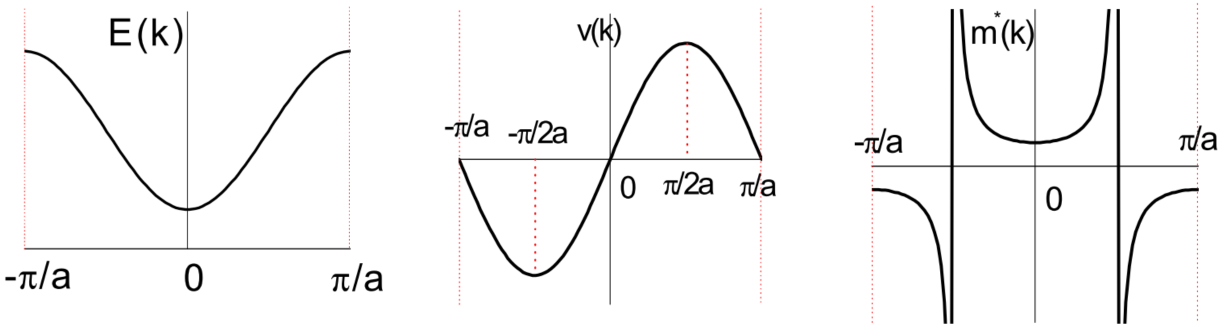
$$\left(\boldsymbol{F}-\hbar\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\mathrm{d}t}\right)\cdot\boldsymbol{v}=0 \quad\Rightarrow\quad \boldsymbol{F}=\hbar\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\mathrm{d}t}$$

$$v(k_0)=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0}=\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}\right)_{k_0} \quad\Rightarrow\quad \boldsymbol{a}=\frac{\mathrm{d}v_g}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\Delta E}{\Delta k\hbar}=\frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\frac{\Delta E}{\Delta k}\frac{\mathrm{d}k\hbar}{\mathrm{d}t}=\frac{\boldsymbol{F}}{m^*}$$

- 有效质量m^*可以比m_0大，也可以比m0小，取决于晶格力的作用。

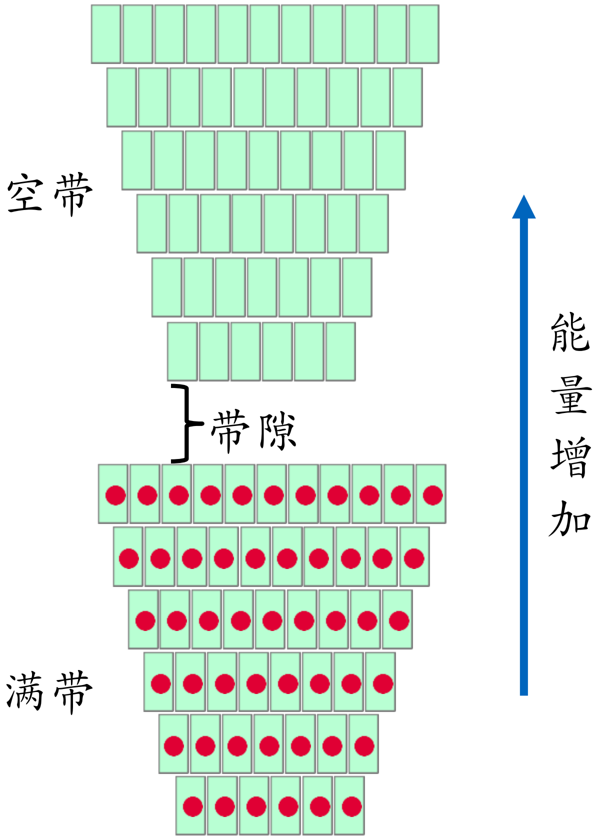
$$\frac{1}{m^*}=\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}$$





浙江大学

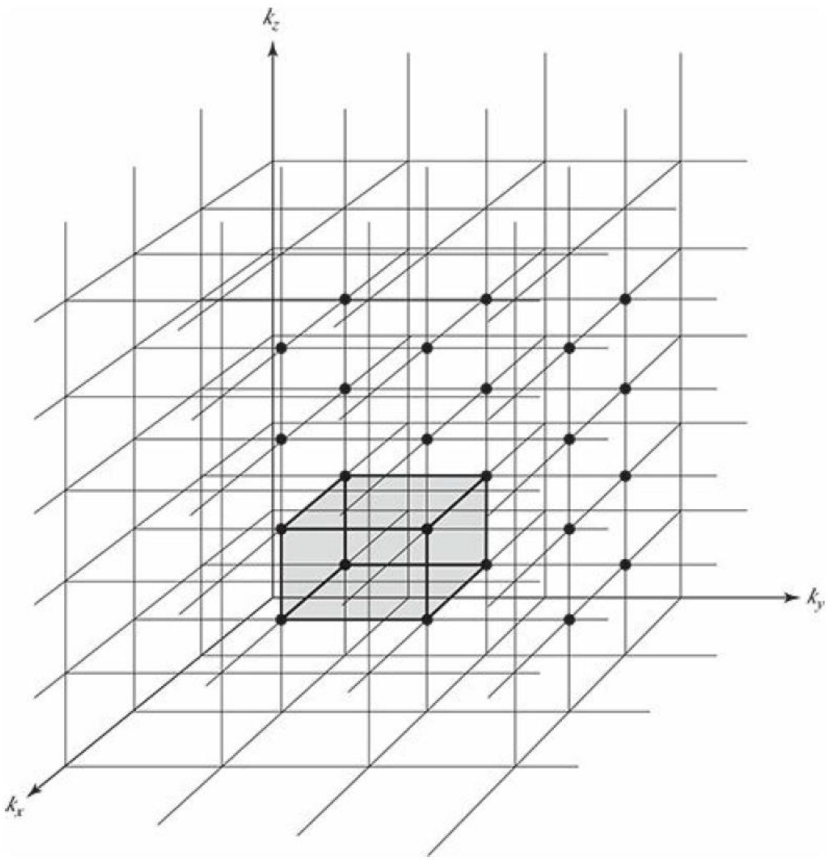
能带中可容纳的不同状态数



类比于体育场

- 晶体里的电子遵循能量最小原理，从能带内最低能量的能级填起，每个能级可以填充自旋相反的两个电子。
- 能带内每个能级都为两个电子填满的，称为满带。能带内每个能级都没有电子的，称为空带。
- 半导体是电子正好能够填充整个能带的晶体，并且半导体的带隙较小，价带的少数电子可以获得足够的能量，从而跃迁到导带，形成宏观电流。在价带留下的空位带有一个正电荷，称为空穴。电子和空穴统称载流子。
- 某个能量上能够填充载流子的多少，需要引入能态密度的概念，即载流子在单位体积内某个能量上能够存在的密度。

动量空间(相格)



系统的波函数和量子化的能量

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = \sqrt{\frac{8}{l_x l_y l_z}} \sin\left(\frac{n_x\pi}{l_x}x\right) \sin\left(\frac{n_y\pi}{l_y}y\right) \sin\left(\frac{n_z\pi}{l_z}z\right)$$

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{l_x^2}+\frac{n_y^2}{l_y^2}+\frac{n_z^2}{l_z^2}\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

其中

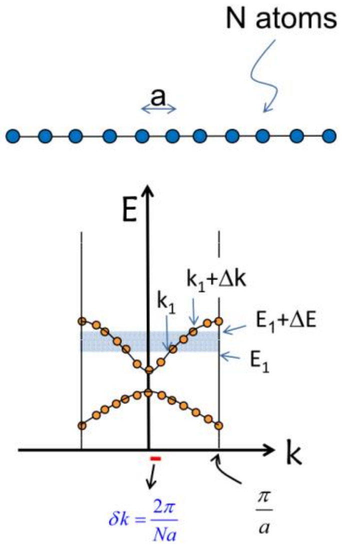
$$\boldsymbol{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$$

想象三维动量空间中所允许的态，都处在离散的格点上

$$k_x = \frac{\pi}{l_x}, \frac{2\pi}{l_x}, \frac{3\pi}{l_x}\cdots, \qquad k_y = \frac{\pi}{l_y}, \frac{2\pi}{l_y}, \frac{3\pi}{l_y}\cdots, \qquad k_z = \frac{\pi}{l_z}, \frac{2\pi}{l_z}, \frac{3\pi}{l_z}\cdots$$

能（量）态密度

单位能量区间内能容纳的电子数目

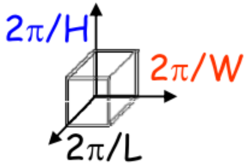


一维情况

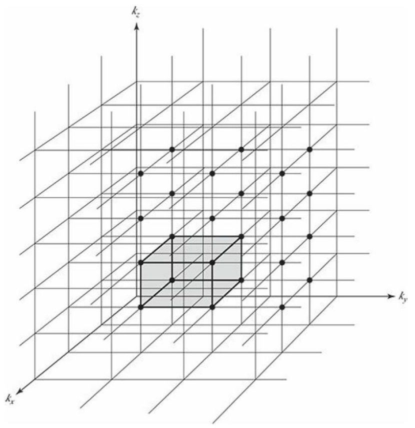
$$\text{状态数@E}_1 = 2 * \frac{\Delta k}{\delta k} = 2 * \frac{\Delta k}{2\pi/Na}$$

$$\text{能态密度@ E}_1 = \frac{Na}{\pi} * \frac{\Delta k}{\Delta E} = \frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^2(E-E_0)}}$$

$$E = E_0 + \frac{k^2\hbar^2}{2m^*}$$

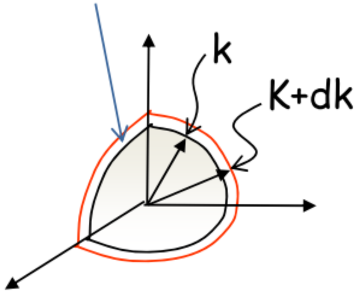


三维情况



$$\text{状态数@E}_1 = \frac{\frac{4}{3}\pi\left((k+\Delta k)^3 - k^3\right)}{\delta k_1 \delta k_2 \delta k_3} = 4\pi * \frac{k^2 \Delta k}{\frac{2\pi}{L} * \frac{2\pi}{H} * \frac{2\pi}{W}} = \frac{LHW}{2\pi^2} k^2 \Delta \mathrm{k}$$

$$\text{能态密度@ E}_1 = \frac{LHW}{2\pi^2} k^2 * \frac{\Delta k}{\Delta E} = \frac{V}{2\pi^2}\sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^2(E-E_0)}} * \frac{2m^*(E-E_0)}{\hbar^2} = \frac{Vm^*}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m^*(E-E_0)}$$



费米能级

假设在绝对零度下，存在一个能量 E_F，所有的电子能量都小于E_F，称为**费米能级**。费米能级代表的是在动量空间中，电子占据的和不占据的格点之间的能量面，称为费米面（球形近似）：

$$k_F \leq \frac{\sqrt{2mE_F}}{\hbar}$$

费米面以下的能量状态数为

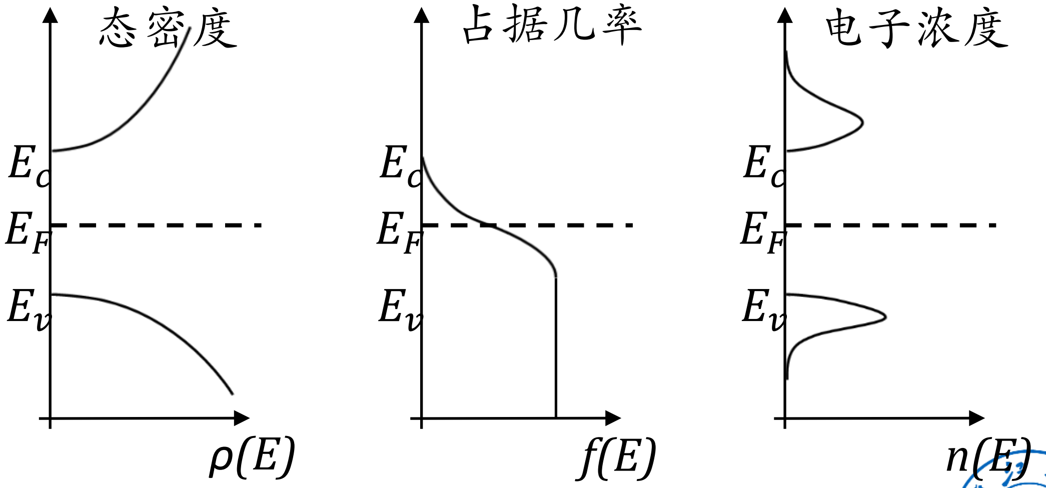
$$n(E_F) = N = 2 * \frac{4}{3}\pi k_F^3 \cdot \frac{V}{8\pi^3} = \frac{V}{6\pi^2}\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

考虑自旋

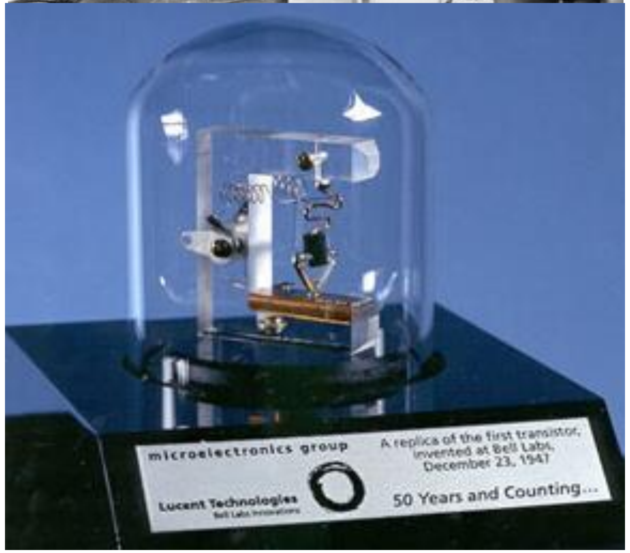
所以

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3}$$



晶体管



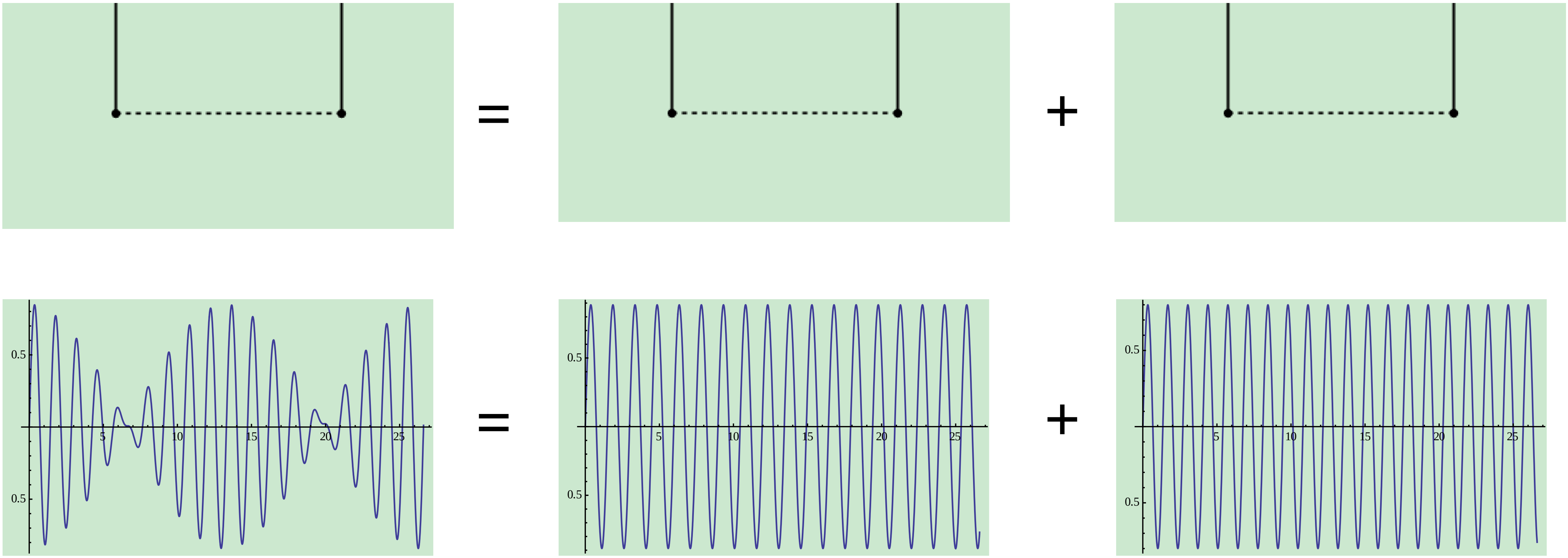
- 1947年12月，美国贝尔实验室的肖克利、巴丁和布拉顿组成的研究小组，研制出一种点接触型的锗晶体管。
- 晶体管的问世是微电子革命的先声。体积小、功耗低的微电子器件开始全面替代体积大、功耗高的电子管。
- 这种器件从“低电阻输入”到“高电阻输出”的转移电流工作，于是被取名为trans-resistor(转换电阻)，后来缩写为transistor，中文译名就是晶体管。
- 肖克莱提出了用一种“整流结”来代替金属半导体接点的大胆设想。1950年，第一只“PN结型晶体管”问世了。
- 1956年，肖克利、巴丁、布拉顿三人，因发明晶体管同时荣获诺贝尔物理学奖。

参考文献

- 自由电子气模型的费米能级和能态密度的引出主要参考：
  - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第5.3.1小节。
  - Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloe, 量子力学II, 高等教育出版社 (2015). 补充材料的C_{XIV}电子气的物理性质/在固体中的应用。

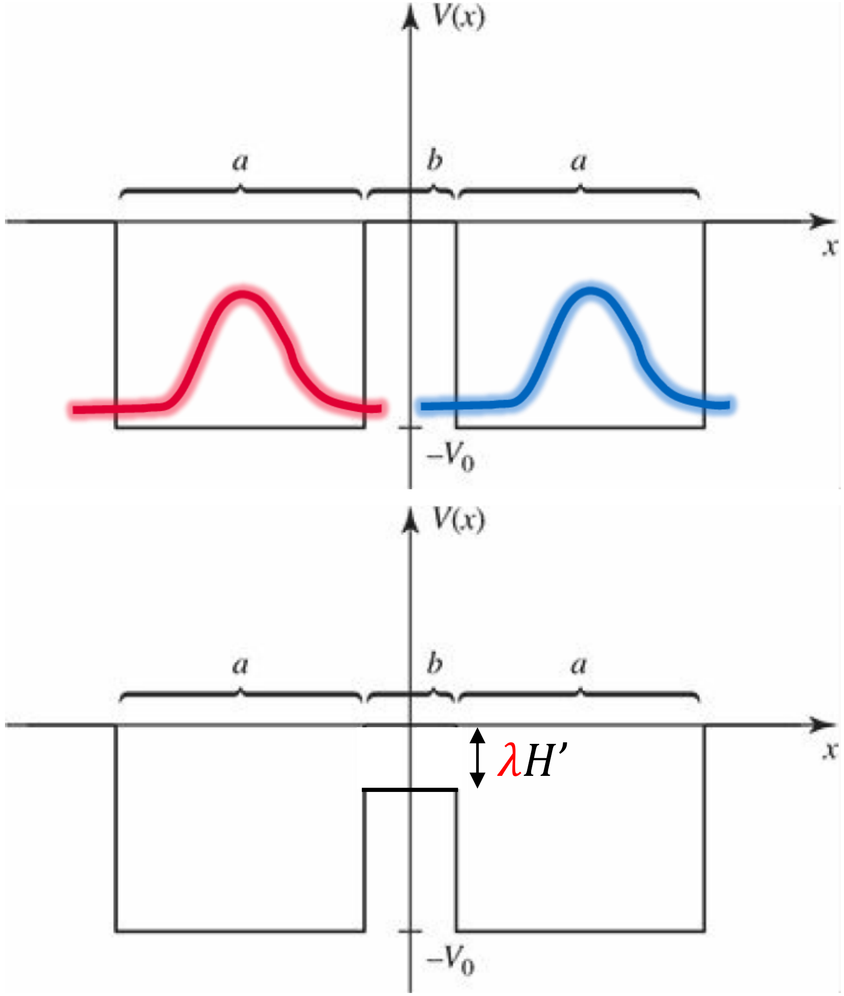
C3-4 耦合系统与能带的起源

并联耦合摆（经典）



- 两个能量一致的谐振子，引入耦合后将拥有两个新的简谐运动模式。

耦合势阱1（简并定态微扰论）



$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_{left} + V_{right}$$

$$H_0\psi_a^0 = E^0\psi_a^0 \qquad H_0\psi_b^0 = E^0\psi_b^0$$

$$\boldsymbol{\psi^0 = \alpha\psi_a^0 + \beta\psi_b^0}$$

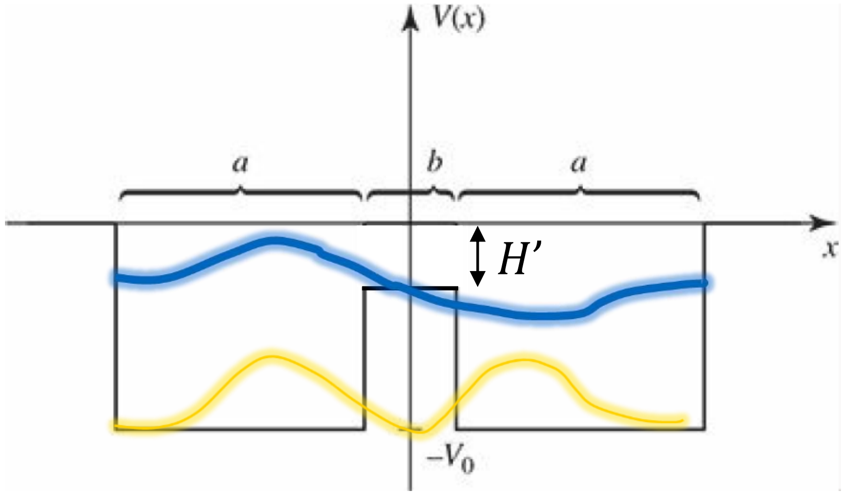
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_{left} + V_{right} - V' = H_0 + \lambda H'$$

$$H\psi = E\psi$$

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \cdots \qquad \psi = \psi^0 + \lambda\psi^1 + \lambda^2\psi^2 + \cdots$$

$$H_0\psi^0 + \lambda(H_0\psi^1 + H'\psi^0) + \cdots = E^0\psi^0 + \lambda(E^0\psi^1 + E^1\psi^0) + \cdots$$

耦合势阱2（简并定态微扰论）



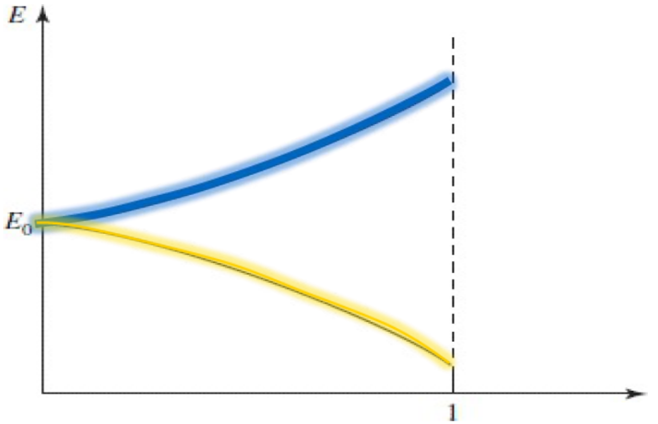
$$H = H_0 + H' \qquad H\psi = E\psi \qquad \boldsymbol{\psi^0 = \alpha\psi_a^0 + \beta\psi_b^0}$$

$$H_0\psi^0 + \lambda(H_0\psi^1 + H'\psi^0) + \cdots = E^0\psi^0 + \lambda(E^0\psi^1 + E^1\psi^0) + \cdots$$

$$\therefore\ H^0\psi^1 + H'\psi^0 = E^0\psi^1 + E^1\psi^0$$

$$\langle\psi_a^0|H^0\psi^1\rangle + \langle\psi_a^0|H'\psi^0\rangle = E^0\langle\psi_a^0|\psi^1\rangle + E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

$$\langle\psi_a^0|H'\psi^0\rangle = E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$



$$\therefore\ \alpha\langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = \alpha E^1$$

$$\therefore\ \alpha\langle\psi_b^0|H'|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_b^0|H'|\psi_b^0\rangle = \beta E^1$$

$$\begin{bmatrix} H'_{aa} & H'_{ab} \\ H'_{ba} & H'_{bb} \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = E^1\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}$$

$$E_\pm^1 = \frac{1}{2}\left[H'_{aa} + H'_{bb} \pm \sqrt{\left(H'_{aa} - H'_{bb}\right)^2 + 4|H_{ab}|^2}\right]$$

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a \pm \psi_b)$$

$|H_{ab}|$

参考文献

- 耦合势阱和定态微扰论主要参考：
  - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第7.1-7.2小节。
  - 仲顺安等，理论物理导论（第3版），北京理工大学出版社。第5.1-5.3小节的内容。