



4.5 晶体能带的对称性

晶体具有对称性，因而晶体中电子的运动状态也会具有对称性，所以表述运动状态的本征能量和本征态也具有对称性，了解了这种对称性，对于我们理解能带性质、简化要处理的问题会很有帮助。比如在计算和绘制 k 空间的能带图时，就可以充分利用其对称性质简化计算。

晶体的对称性包括点对称操作和平移对称性，它们都会反映到本征能量的对称性上。

晶体能带的对称性和晶格振动色散关系所具有的对称性相同，我们可以参照理解。



一、平移对称性 $E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}_h)$

Bloch定理一节中曾指出简约波矢 \mathbf{k} 表示原胞之间电子波函数位相的变化。如果 \mathbf{k} 改变一个倒格矢量，它们所标志的原胞之间波函数位相的变化是相同的，也就是说 \mathbf{k} 和 $\mathbf{k} + \mathbf{G}_h$ 是等价的。从这点出发我们也可认为 $E_n(\mathbf{k})$ 是 \mathbf{k} 空间的周期函数，其周期等于倒格矢。简约波矢的取值范围就是倒易空间的Wigner-Seitz原胞，即第一布里渊区内。我们利用这种平移对称性可以将第二Brillouin区的每一块各自平移一个倒格矢而与第一Brillouin区重合。同理，更高的Brillouin区也可通过适当的平移与第一区重合，因此我们可以把注意力仅限制在第一区内，它包含了晶体能带的所有必要信息。

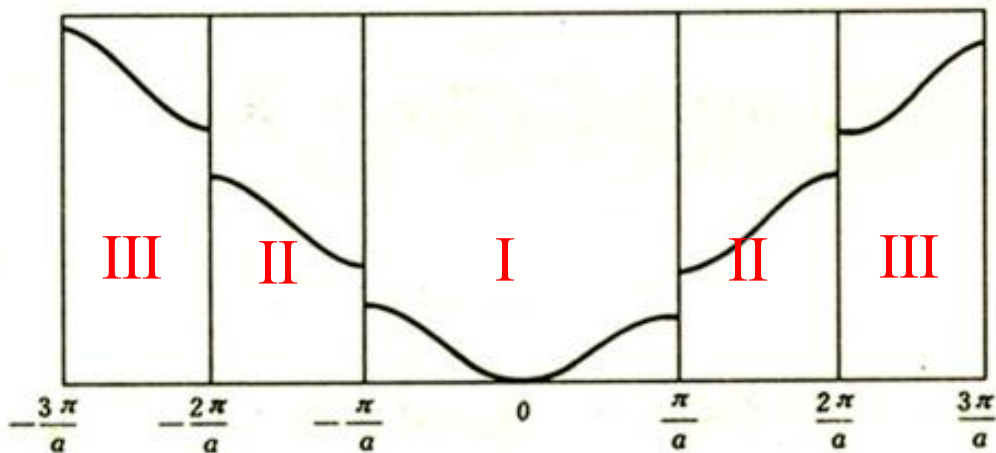
应特别注意，这个表达式只是对同一能带才正确。



$E_n(k)$ 函数的三种图象

在 k 空间中，电子能量 $E_n(k)$ 函数有三种不同的表示方式，称为三种布里渊区图象。这三种表示方法是等价的，可根据所考虑问题的方便选择不同的表示方法。

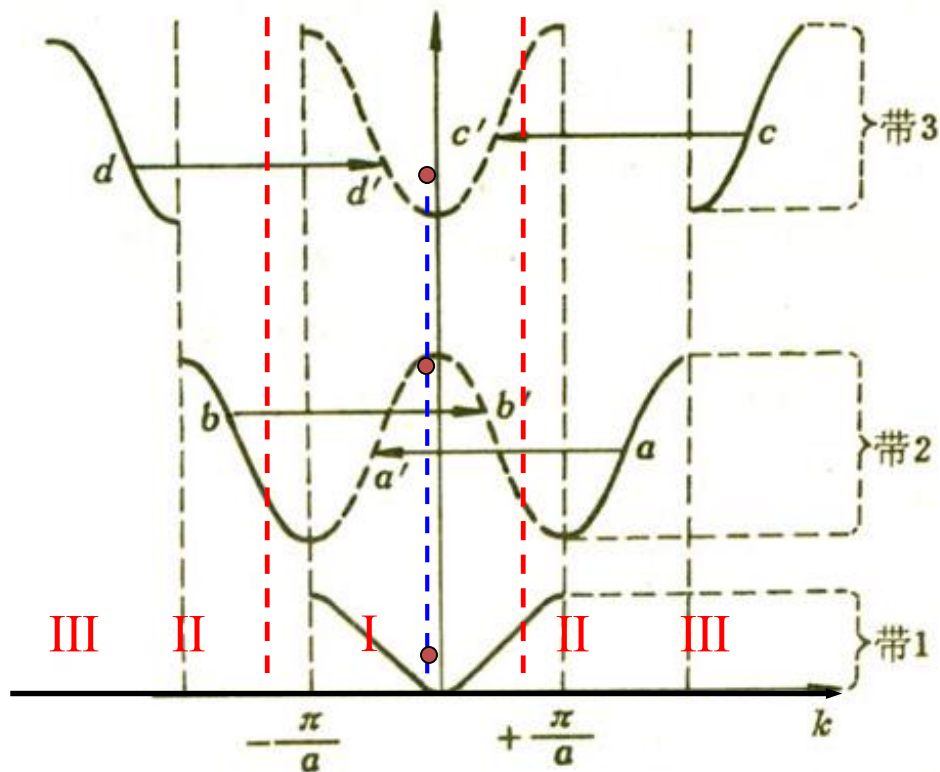
若波矢量 k 在整个 k 空间中取值，这时每一个布里渊区中有一个能带，第 n 个能带在第 n 个布里渊区中，这种表示法称为**扩展的布里渊区**图象。





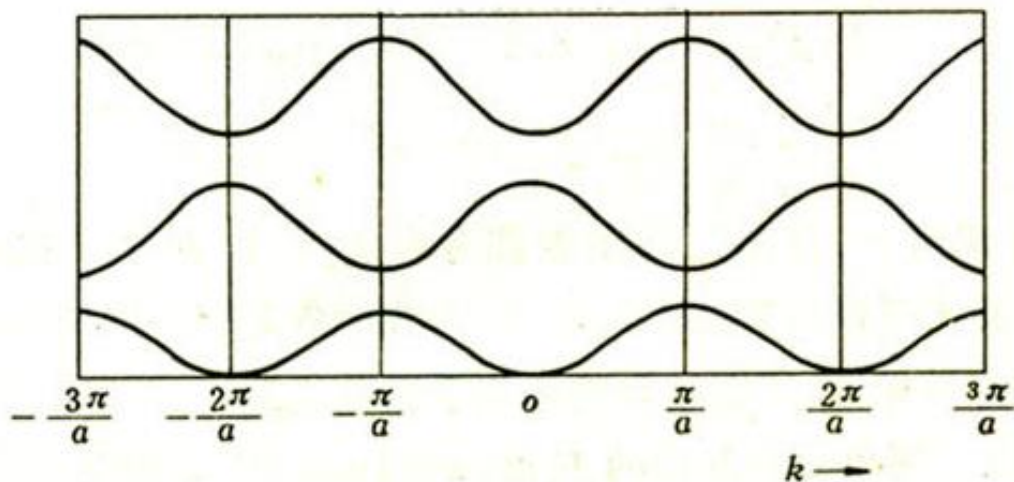
若将波矢量 k 限制在简约区中，由于 k 和 $k+G$ 所对应的平移算符本征值相同，也就是说， k 和 $k+G$ 标志的原胞间电子波函数的位相变化相同。在这个意义上，可以认为 k 和 $k+G$ 是等价的。因此，可以将 k 限制在简约区中。但是

由于电子的能量分为若干个能带，如将所有能带都表示在简约区中，那么，对于一个简约波矢 k ，就有若干个分立的能量值与之对应。我们用 n 来区分不同的能带 $E_n(k)$ 。对于给定的能带 n ， $E_n(k)$ 是 k 的连续函数。 $E_n(k)$ 的这种表示法称为**简约布里渊区**图象。





实际上, 由于我们认为 k 和 $k+G_l$ 等价, 因而, $E_n(k)$ 的简约布里渊区图象中的第 n 个能带, 实际上是由扩展布里渊区图象中从第 n 个布里渊区中平移一个倒格矢 G_l 而得来的。由于认为 k 和 $k+G_l$ 等价, 因而可以认为 $E_n(k)$ 是 k 空间中以倒格矢 G_l 为周期的周期函数, 即 $E_n(k) = E_n(k + G_l)$ 。而简约布里渊区是倒易空间的原胞, 以此原胞为重复单元进行平移操作可以得到整个 k 空间, 这些单元都是等价的。因此, 对于同一能带有: $E_n(k) = E_n(k + G_l)$ 。 $E_n(k)$ 的这种表示法称为周期布里渊区图象。



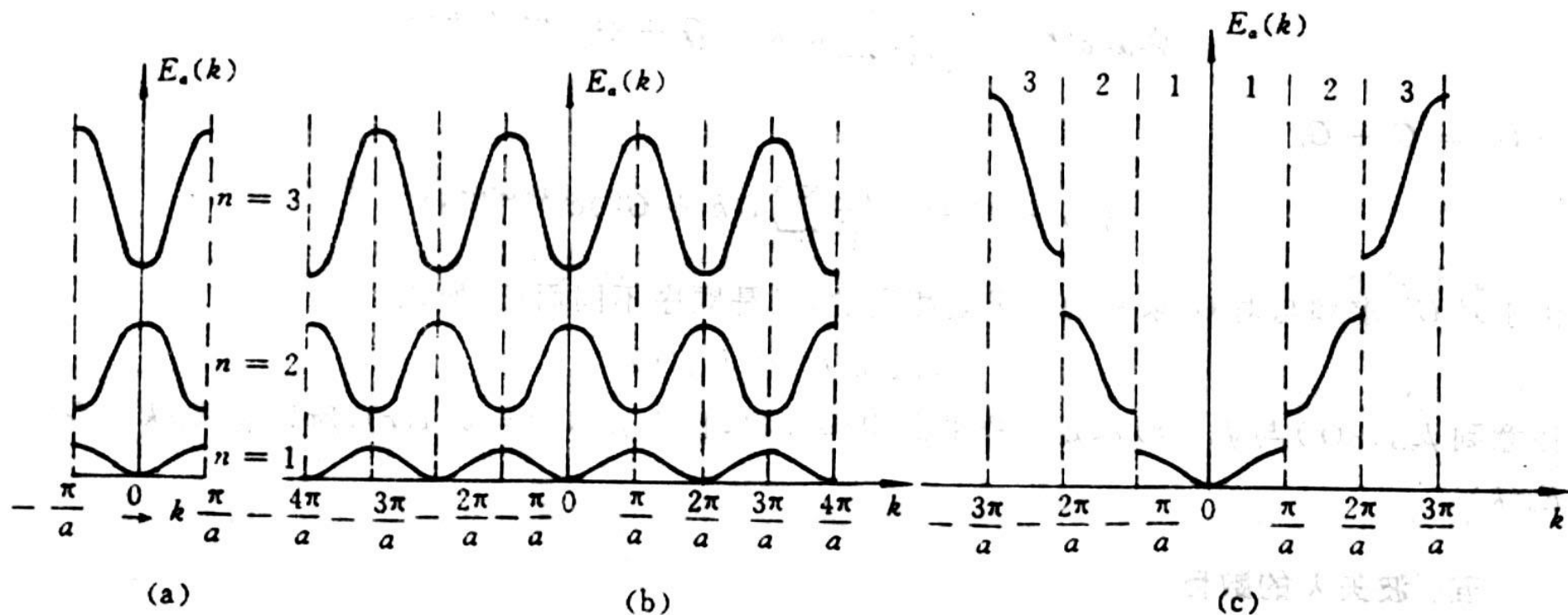
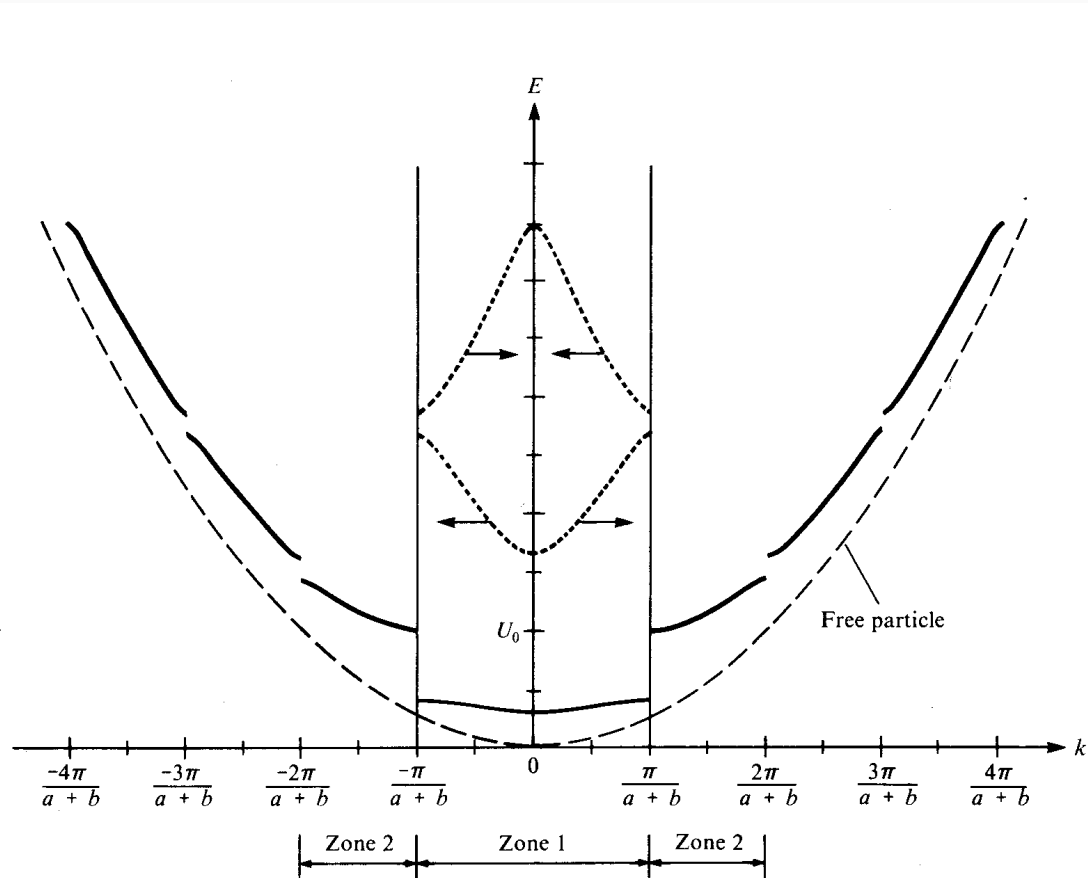
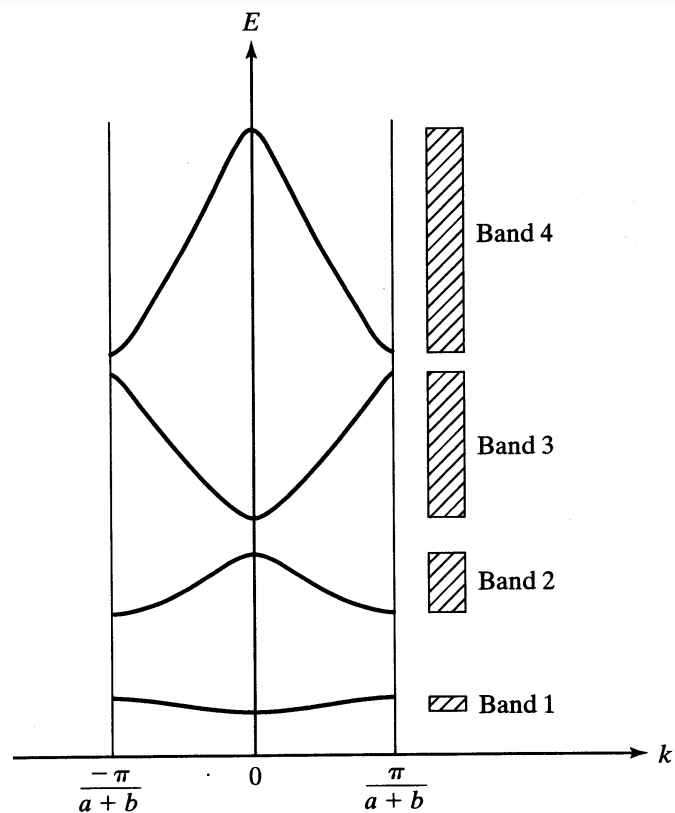


图 4.2-1 一维能带结构的 3 种不同表示

(a) 能带的简约布里渊区表示 (b) 能带的周期性表示 (c) 能带的扩展布里渊区表示



扩展布里渊区



简约布里渊区



二、晶格点群对称性

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\alpha\mathbf{k})$$

α 为晶体所属点群的任一点对称操作。该式表明能带与晶格有相同的对称性。

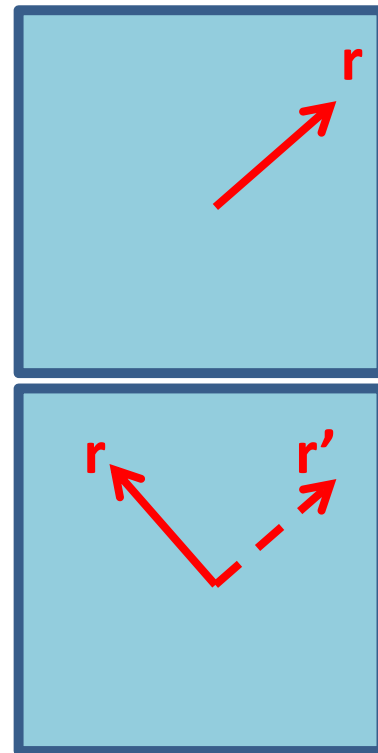
证明：设 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 为晶体哈密顿量的本征函数，本征值为 $E_n(\mathbf{k})$ ：

$$\hat{H}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

由于晶体在所属点群操作 $T(\alpha)$ 下保持不变。

引入点群对称操作 $T(\alpha)$ ，对任意函数 $f(\mathbf{r})$ 有：

$$T(\alpha)f(\mathbf{r}) = f(\alpha^{-1}\mathbf{r}) \quad \text{相当于改变了坐标系}$$

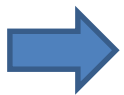




首先证明，点群对称操作与Hamiltonian 对易

$$H = -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned} T(\alpha)H\varphi(\mathbf{r}) &= \left[-\frac{1}{2m} \nabla_{\alpha^{-1}\mathbf{r}}^2 + V(\alpha^{-1}\mathbf{r}) \right] \varphi(\alpha^{-1}\mathbf{r}) \\ &= \left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] T(\alpha)\varphi(\mathbf{r}) \\ &= HT(\alpha)\varphi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$



$$T(\alpha)H = HT(\alpha)$$



因为 $T(\alpha)$ 与 H 对易，若 ψ 是晶体薛定谔方程的解，则 $T\psi$ 也是方程的解，并且与 ψ 有相同的能量本征值

证明：

$$H\psi = E\psi$$

$$T(\alpha)H\psi = T(\alpha)E\psi$$

$$\Rightarrow H[T(\alpha)\psi] = E[T(\alpha)\psi]$$



设 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 为晶体哈密顿量的本征函数，本征值为 $E_n(\mathbf{k})$ 。

$$\hat{H}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

由于晶体在所属点群操作下保持不变，则点群操作 α 作用于本征函数的结果，

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned} T(\alpha)\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\alpha^{-1}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\alpha^{-1}\mathbf{r}) & \mathbf{k}\cdot\alpha^{-1}\mathbf{r} &= \alpha\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \\ &= e^{i\alpha\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u'_{n,\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

α 是正交变换，不改变两个矢量的点积大小

$$\vec{A}\cdot\vec{B} = \alpha(\vec{A}\cdot\vec{B}) = \alpha\vec{A}\cdot\alpha\vec{B}$$

$$\alpha^{-1}\vec{A}\cdot\vec{B} = \alpha^{-1}\alpha\vec{A}\cdot\alpha\vec{B} = \vec{A}\cdot\alpha\vec{B}$$



$$\mathbf{k}\cdot\alpha^{-1}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$$



即 $T(\alpha)$ 作用于Bloch波函数的结果是把简约布里渊区的 k 点变换到了 αk 点。即 $\alpha^{-1}k$ 和 k 所对应的能量本征值相等，即有：

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\alpha\mathbf{k})$$

点群操作下，波函数的对称性

$$\text{一般情况下： } T(\alpha)\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\alpha\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u'_{n,\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

在布里渊区的对称点或对称轴上有 $\beta\mathbf{k} = \mathbf{k}$ 或 $\beta\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{G}_n$

$$T(\beta)\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u'_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

即波函数在 β 对称操作下，只有周期函数部分发生变化。



例子：简单立晶格的 Γ 点， $\mathbf{k}=(0,0,0)$ ， α 群和 β 群都是 O_h 群。
考察紧束缚近似下，s带和p带在 Γ 点的波函数。

$$\text{s 带: } \psi_{\mathbf{k}}^s(\mathbf{r}) = \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} \varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \longrightarrow \psi_{\Gamma}^s(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$$

$$\text{对称变化下: } T(\beta)\psi_{\Gamma}^s(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_s(\beta^{-1}\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$$

因为求和包含了所有的格点 $\beta^{-1}\mathbf{R}_m = \mathbf{R}_n$

$$T(\beta)\psi_{\Gamma}^s(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_s[\beta^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)]$$

由于s轨道在任何点群对称操作下都是不变的，所以

$$\sum_m \varphi_s[\beta^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)] = \sum_m \varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \longrightarrow T(\beta)\psi_{\Gamma}^s(\mathbf{r}) = \psi_{\Gamma}^s(\mathbf{r})$$

即在点群所有操作下，s带波函数变化到了自身，这种变化称为 Γ_1 表象。



p 带:

$$\begin{cases} \psi_{\Gamma}^{p_x}(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_{p_x}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \\ \psi_{\Gamma}^{p_y}(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_{p_y}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \\ \psi_{\Gamma}^{p_z}(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_{p_z}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \end{cases}$$

点群操作下:

$$\begin{cases} T(\beta)\psi_{\Gamma}^{p_x}(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_{p_x}[\beta^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)] \\ T(\beta)\psi_{\Gamma}^{p_y}(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_{p_y}[\beta^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)] \\ T(\beta)\psi_{\Gamma}^{p_z}(\mathbf{r}) = \sum_m \varphi_{p_z}[\beta^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)] \end{cases}$$

即在点群所有操作下, p 带波函数变化等效于 原子 p 轨道函数间的变化。这个变化表现称为 Γ_{15} 表象。



三、时间反演对称性 $E_n(\mathbf{k}) = E_n(-\mathbf{k})$

在晶体中电子运动的哈密顿算符

$$H = -\frac{1}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

是实算符，即 $H^* = H$ 。

如果 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 是方程的解，那么 $\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ 也是方程的解，
且这两个解具有相同的能量本征值。即有

$$\hat{H}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\hat{H}\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$$



同时按照Bloch定理有：

$$\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$$

$$\psi_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

因此， $\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ 和 $\psi_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 是相同的，因而 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 和 $\psi_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 能量简并：

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(-\mathbf{k})$$

这个结论不依赖于晶体的点群对称性，不管晶体中是否有对称中心，在 k 空间中 $E_n(k)$ 总是有反演对称的。这实际上是时间反演对称性的结果。

下面通过对具体对象的讨论来理解和应用能带的对称性



时间反演对称性 (Time reversal symmetry)

$$\hat{T} \mathbf{x} \hat{T}^{-1} = \mathbf{x} \quad \hat{T} \mathbf{k} \hat{T}^{-1} = -\mathbf{k}$$

$$\hat{T} \mathbf{L} \hat{T}^{-1} = -\mathbf{L} \quad \hat{T} \uparrow \hat{T}^{-1} = \downarrow$$



$$E_{n\uparrow}(\mathbf{k}) = E_{n\downarrow}(-\mathbf{k})$$

$$\hat{T} \psi_{n\mathbf{k},\uparrow}(\mathbf{r}) = \psi_{n-\mathbf{k},\downarrow}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k},\downarrow}^*(\mathbf{r})$$



Kramers 简并

时间反演对称性(Time reversal symmetry)

$$E_{n\uparrow}(\mathbf{k}) = E_{n\downarrow}(-\mathbf{k})$$

→ $E_{n\uparrow}(\mathbf{k} = 0) = E_{n\downarrow}(-\mathbf{k} = 0)$

$k=0$ 时，自旋向上和自旋向下能级简并。



空间反演对称性 (Inversion symmetry)

$$\hat{R} \mathbf{x} \hat{R}^{-1} = -\mathbf{x} \quad \hat{R} \mathbf{k} \hat{R}^{-1} = -\mathbf{k}$$

$$\hat{R} \mathbf{L} \hat{R}^{-1} = \mathbf{L} \quad \hat{R} \uparrow \hat{R}^{-1} = \uparrow$$



$$E_{n\uparrow}(\mathbf{k}) = E_{n\uparrow}(-\mathbf{k})$$

$$\hat{T} \psi_{n\mathbf{k},\uparrow}(\mathbf{r}) = \psi_{n-\mathbf{k},\uparrow}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k},\uparrow}^*(\mathbf{r})$$



不可约布里渊区 (Irreducible Brillouin-Zone)

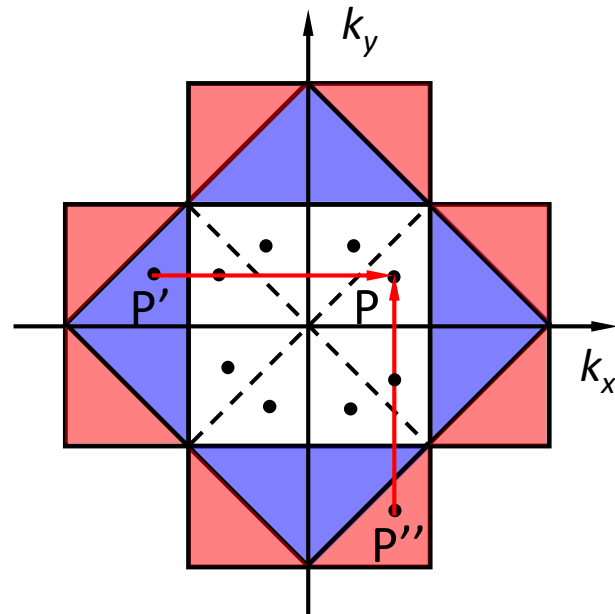
利用 k 空间中 $E_n(k)$ 具有与晶体点群完全相同的对称性，可以在晶体能带计算和表述中把第一布里渊区分成若干个等价的小区域，只取其中一个就足够了。区域大小为第一布里渊区的 $1/f$ ， f 为晶体点群对称操作元素数。如三维立方晶体 $f = 48$ 。

不可约布里渊区中的 k 点不能通过对称操作相互得到。布里渊区其它所有的 k 点都可以由不可约布里渊区的 k 点的通过对称操作得到。利用不可约布里渊区，可以大大简化能带计算。



以二维正方晶格为例，二维正方晶格的点群是 $C_{4v}(4mm)$ ，所以，对于一般位置 P ，在简约区中共有 8 个点与 P 点对称

相关。在这些点，电子都有相同的能量 $E_n(k)$ 。因此，我们只需研究清楚简约区中 $1/8$ 空间中电子的能量状态，就可以知道整个 k 空间中的能量状态了。我们将这部分体积称为简约区的不可约体积。依此类推，对于立方晶系的 $O_h(m3m)$ 点群，只需研究 $(1/48)\Omega_b$ 即可。大大简化了计算工作。



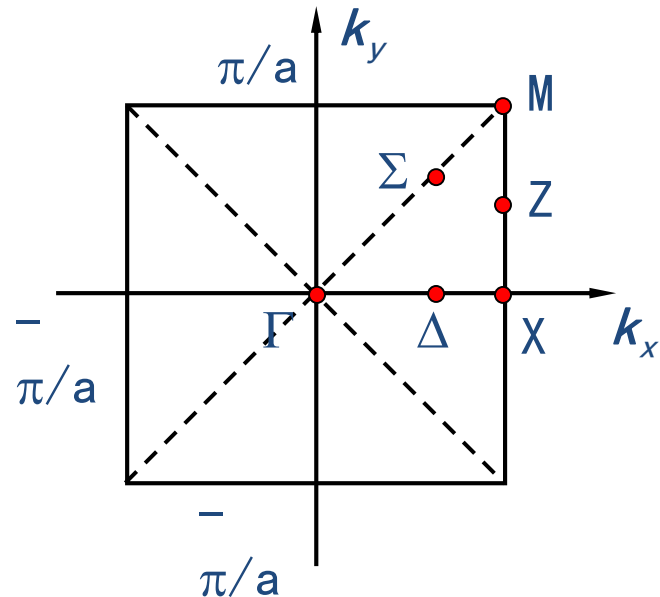


对于一般位置 k ，简约区中对称相关的波矢量数就等于点群的阶数。但若 k 在简约区中的某些特殊位置

（对称点、对称轴或对称面）上，即在晶体点群中，存在某些对称操作，使得

$$\beta k = k \text{ 或 } \beta k = k + G_i$$

$$\beta \in \alpha$$



这时，简约区中等价波矢量数就少于点群的阶数。在二维正方晶格的简约区中， k 有以下特殊位置：

Γ 点	$\mathbf{k} = (0,0)$	X 点	$\mathbf{k} = \left(\frac{\pi}{a}, 0\right)$	M 点	$\mathbf{k} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$
Δ 线	$\mathbf{k} = (k,0)$	Z 线	$\mathbf{k} = \left(\frac{\pi}{a}, k\right)$	Σ 线	$\mathbf{k} = (k, k)$



简单立方晶格的简约区中 k 的特殊位置：

Γ 点： $\mathbf{k} = (0,0,0)$

X点： $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, 0, 0)$

M点： $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0)$

R点： $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$

$\langle 100 \rangle$ Δ 线 $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$

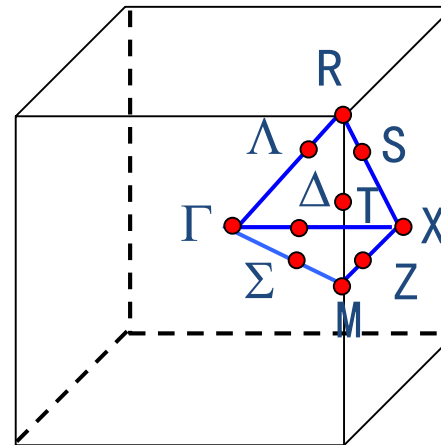
Z 线 $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, k, 0)$

$\langle 110 \rangle$ Σ 线： $\mathbf{k} = (k, k, 0)$

S 线 $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, k, k)$

T 线 $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, k)$

$\langle 111 \rangle$ Λ 线： $\mathbf{k} = (k, k, k)$





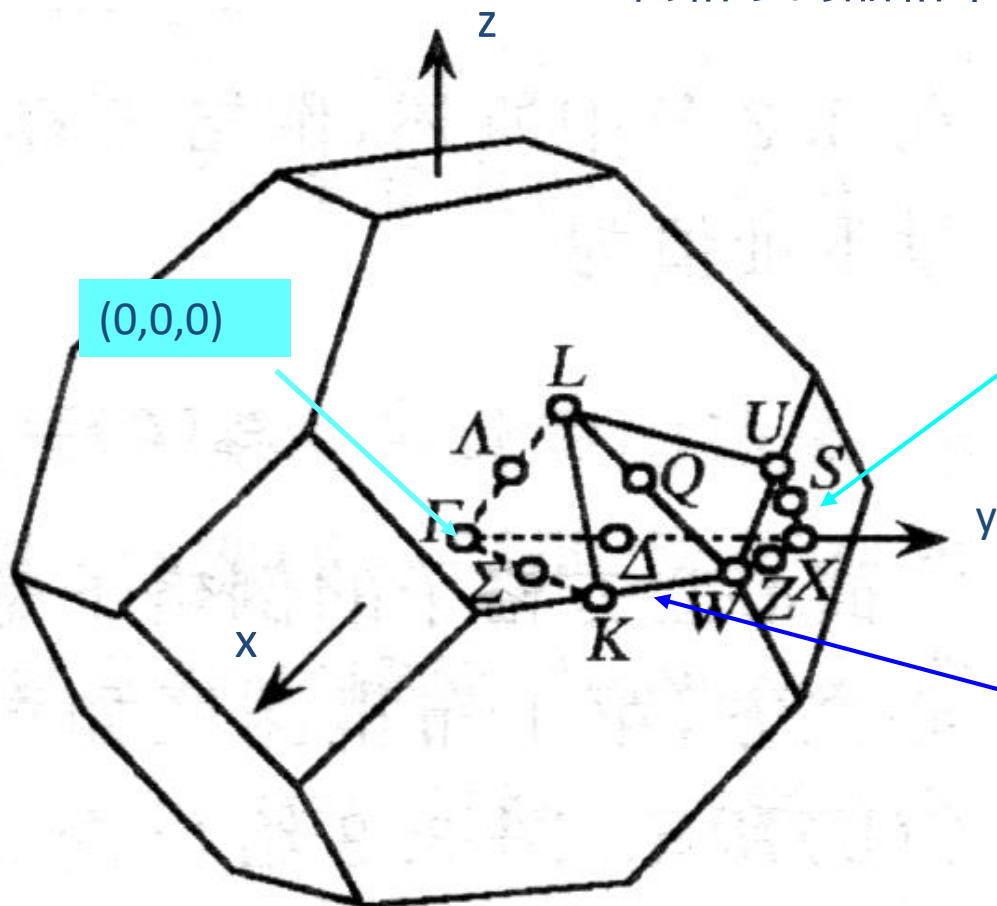
面心立方晶体的第一布里渊区: 如果 fcc 的晶格常数为 a , 则其

倒格子的晶格常数为 $\frac{4\pi}{a}$

$$X : \left(0, \frac{2\pi}{a}, 0 \right)$$

$$L : \left(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a} \right)$$

$$K : \left(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, 0 \right)$$



$$\Lambda : [111]$$

$$\Sigma : [110]$$

$$\Delta : [100]$$



4.6 能态密度和费米面：

与孤立原子中的本征能态形成一系列的分立能级不同，固体中电子的能级非常密集，形成准连续的分布。这时像孤立原子那样去标注每个能级是没有意义的。为了概括晶体中电子能级的状况，我们引入“能态密度”的概念。这个函数在讨论晶体电子的各种物理过程，如输运、发光等时非常重要。费米面是固体物理中最重要的概念之一。在自由电子论中费米面的重要性在于：只有费米面附近的电子才能参与热跃迁或输运过程，它们决定着晶体的各种物理性质。

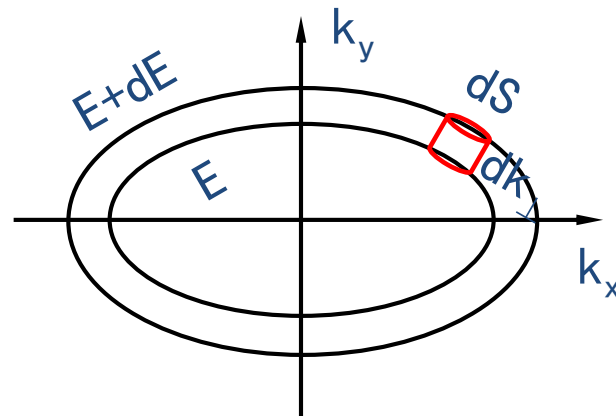


一、能态密度定义为单位能量间隔内的电子的状态数

$$N(E) = \lim \frac{\Delta Z}{\Delta E}$$

dZ 为能量在 $E - E + dE$ 两等能面间的能态数（考虑了电子自旋）。

单位体积能态密度：
$$n(E) = \frac{1}{V} \lim \frac{\Delta Z}{\Delta E}$$



如果在 \mathbf{k} 空间中，根据 $E(\mathbf{k}) = \text{常数}$ 做出等能面，在 E 和 $E + \Delta E$ 之间的状态数为 ΔZ 。由于状态数在 \mathbf{k} 空间是均匀的，密度为 $V/(2\pi)^3$ ，因此：

$$\Delta Z = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dS dk \quad \text{其中：} \quad dk |\nabla_{\mathbf{k}} E| = \Delta E$$



$$\Rightarrow \Delta Z = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|} \Delta E$$

我们得到了能态密度的一般表达式：

$$N(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|} \quad (\text{无自旋})$$

(与声子的态密度相似)

$$N(E) = \frac{V}{4\pi^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|} \quad (\text{考虑自旋})$$



1. 自由电子的能态密度

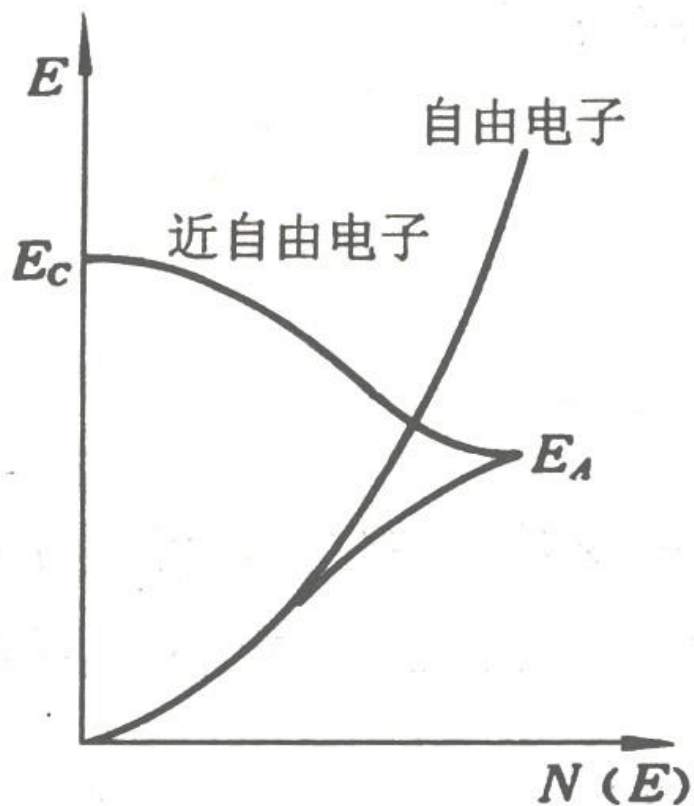
$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{能量色散关系}$$

在 k 空间中，能量为 E 的等能面是半径为 $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ 的球面，

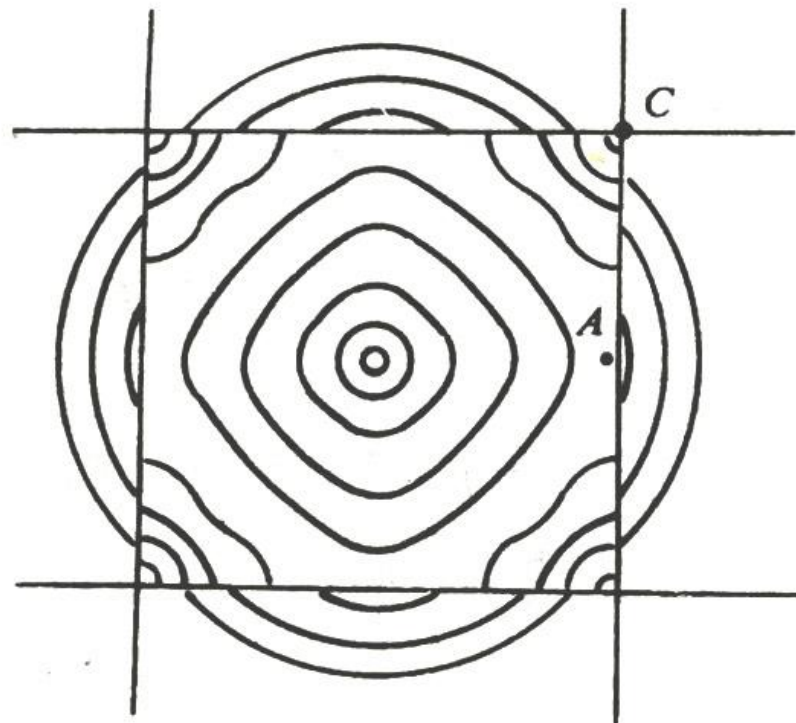
在球面上 $|\nabla_k E| = \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}$ (对给定 E 是常数)

$$N(E) = \frac{V}{4\pi^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|} = \frac{V}{4\pi^3} \frac{m}{\hbar^2 k} 4\pi k^2 = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

即： $N(E) \sim E^{1/2}$



和自由电子态密度相比近自由电子的能态密度发生了明显变化。

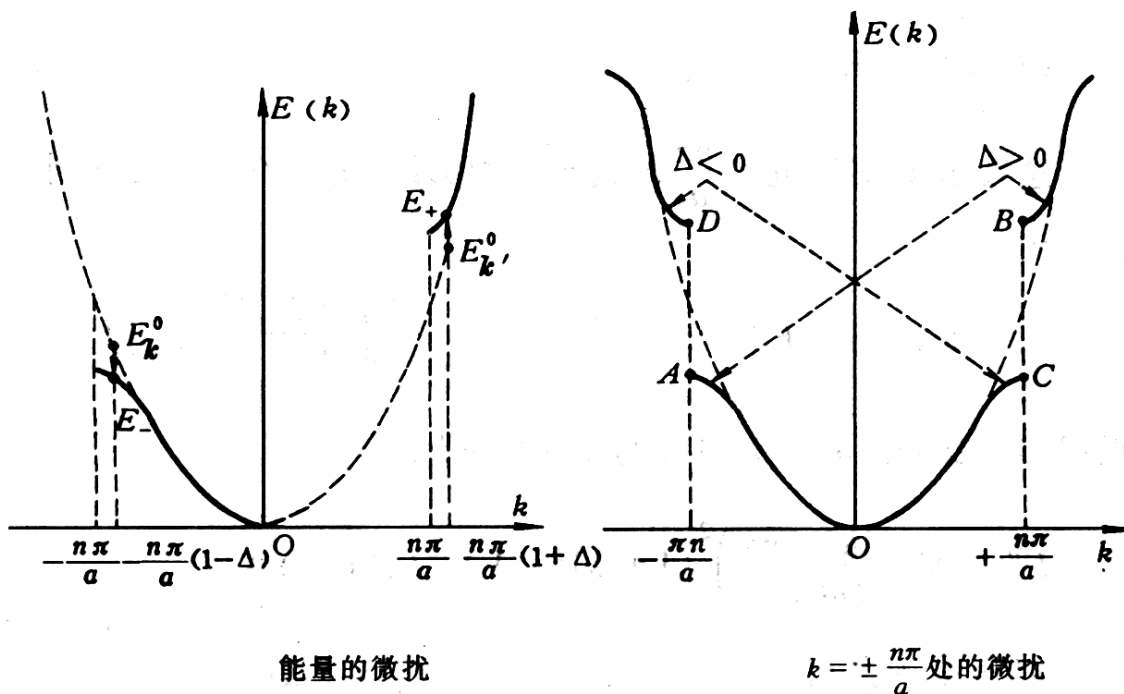


受周期场的微弱影响，近自由电子的等能面偏离自由电子的球形。并受到布里渊区界面影响

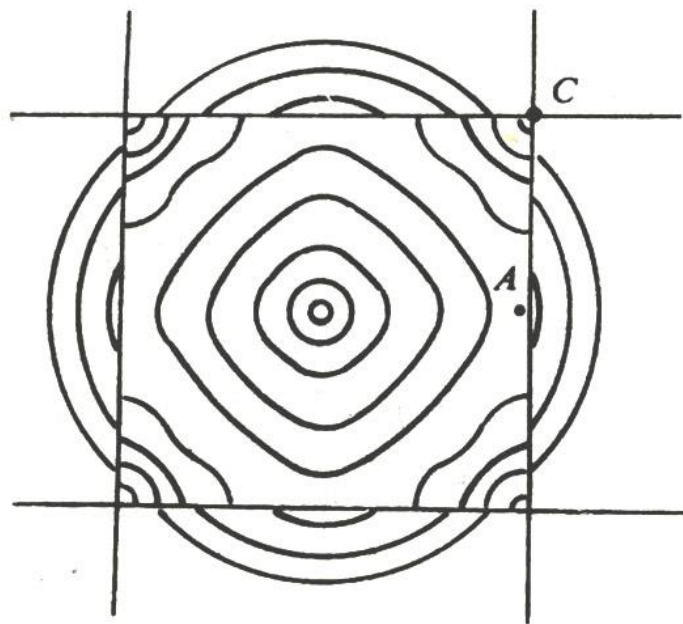
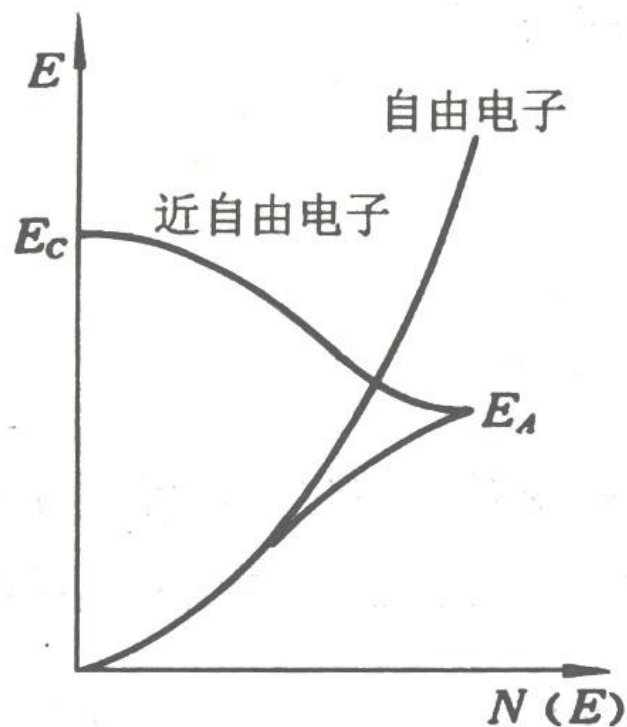


2. 近自由电子的能态密度

考虑周期场的影响，在近自由电子情况下，周期场的影响主要表现在布里渊区边界附近，而离布里渊区边界较远处，周期场对电子运动的影响很小。



从原点出发，等能面基本保持为球面，在接近布里渊区边界时，等能面开始向边界突出。



周期场的微扰使布里渊区附近界面内的能量下降，而等能面的凸出正意味着达到同样的能量 E ，需要更大的 k 值，当能量 E 超过边界上A点的能量 E_A ，一直到 E 接近于在顶角C点的能量 E_c （即达到第一能带的顶点）时，等能面将不再是完整的闭合面，而成为分割在各个顶角附近的曲面。



3. 多能带的影响

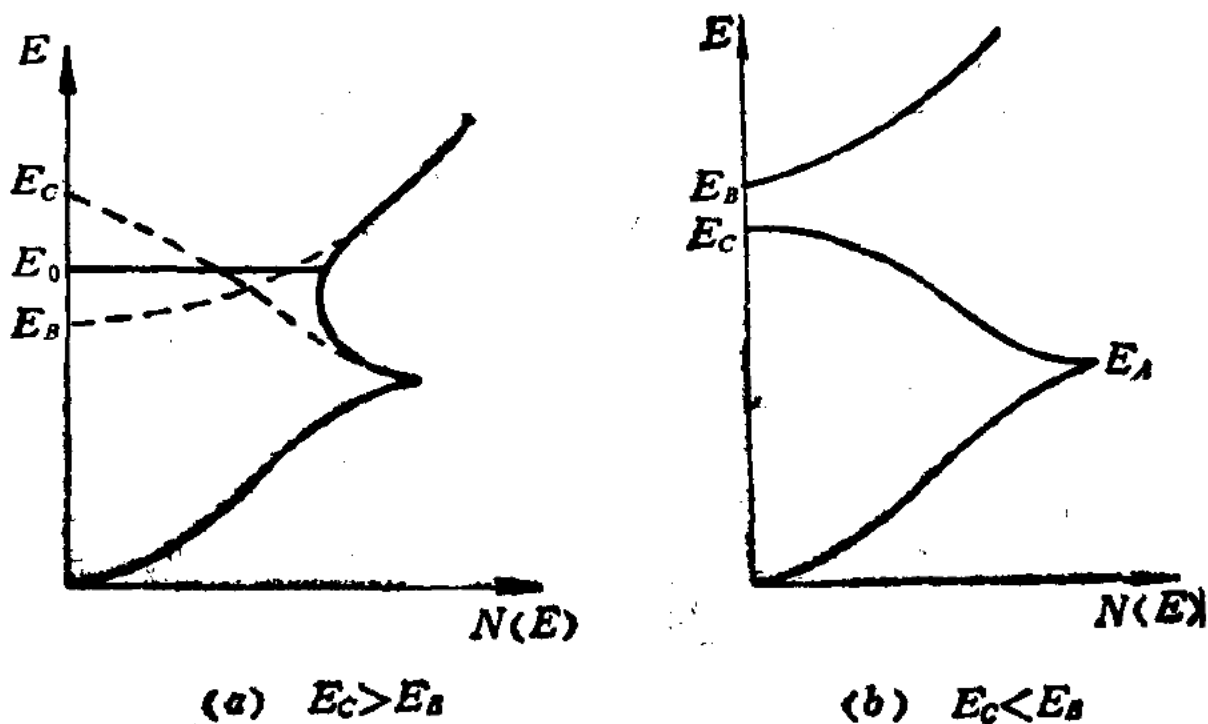


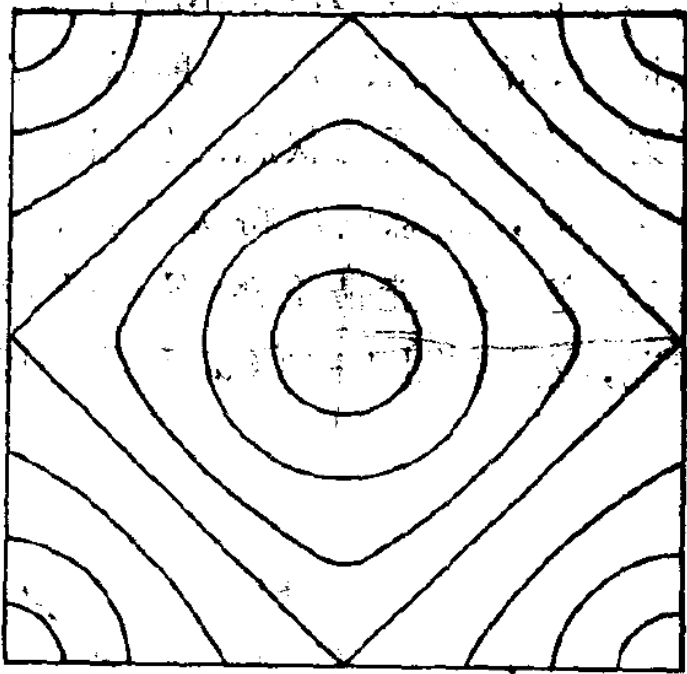
图 4-39 重叠和不重叠能带的能态密度



4. 紧束缚下的能态密度

考虑简单立方晶格的s 带，只考虑最近邻的影响：

$$E_{\mathbf{k}}^s = E_0 - 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$



带底：等能面为球型，
随E增大，偏离自由电子的情况。

图 4-40 紧束缚近似等能面示意图

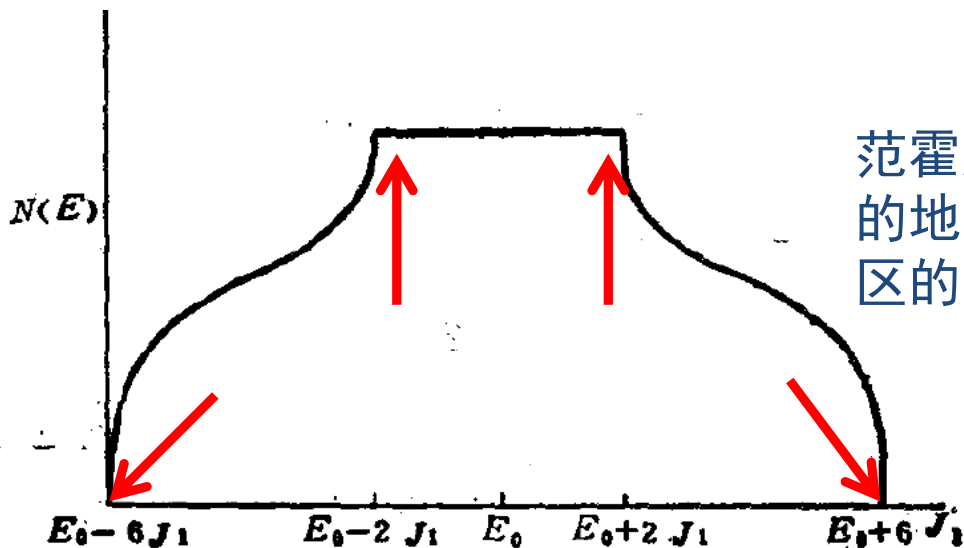


能量梯度

$$|\nabla_k E| = 2aJ_1 \sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a + \sin^2 k_z a}$$

能态密度:

$$N(E) = \frac{V}{8\pi^3 aJ_1} \int_{E=\text{const.}} \frac{dS}{\sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a + \sin^2 k_z a}}$$



范霍夫奇点，能量梯度为零的地方。一般出现在布里渊区的高对称点



二、费米面

电子是费米子，满足Pauli 不相容原理。在固体中，它们基态的填充方式是由低能级向高能级填充。

例：自由电子气：

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

N个电子在k空间填充半径为 k_F 的球，球内包含的状态数恰好为N，

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

$$\Rightarrow k_F = 2\pi \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} = 2\pi \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{1/3} n^{1/3}$$



几个重要概念：

费米球：自由电子在k 空间的填充方式

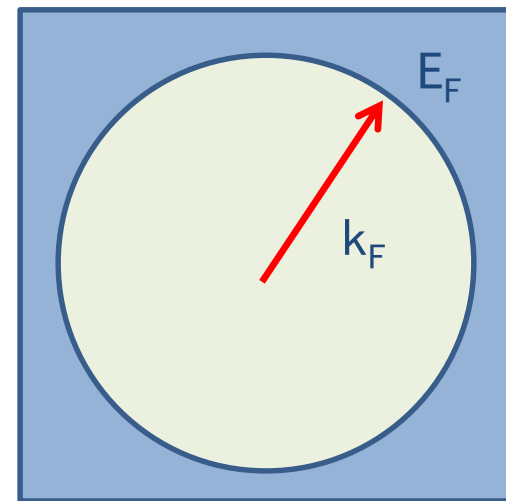
费米面：基态时k空间中电子占据与非占据的分界面。

费米能 E_F ：费米面对应的能量

费米动量：费米面对应的动量（费米球的半径）

费米动量 $\mathbf{p}_F = \hbar \mathbf{k}_F$ ← 费米波矢

费米速度量 $\mathbf{v}_F = \frac{\mathbf{p}_F}{m}$

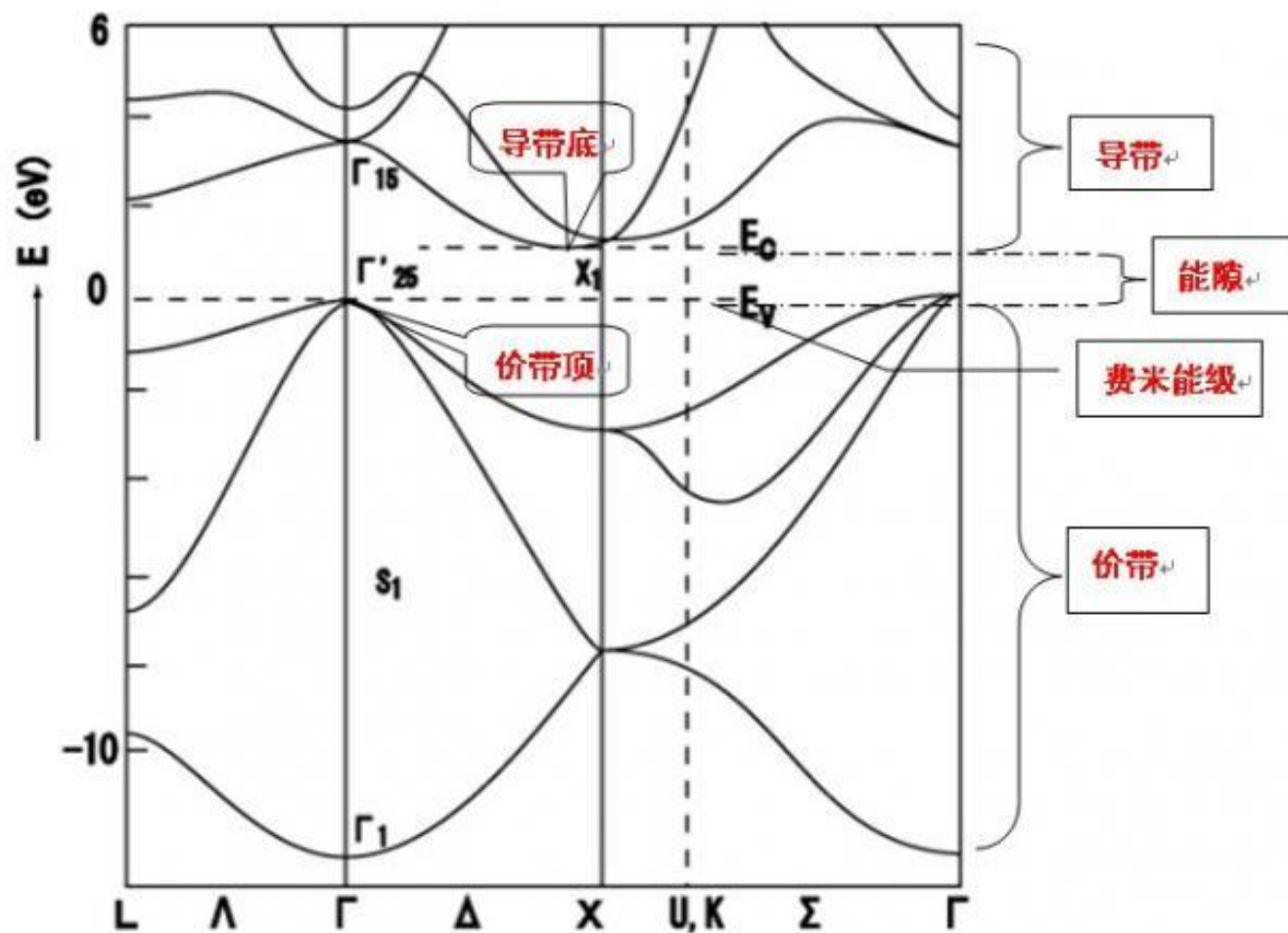


费米球

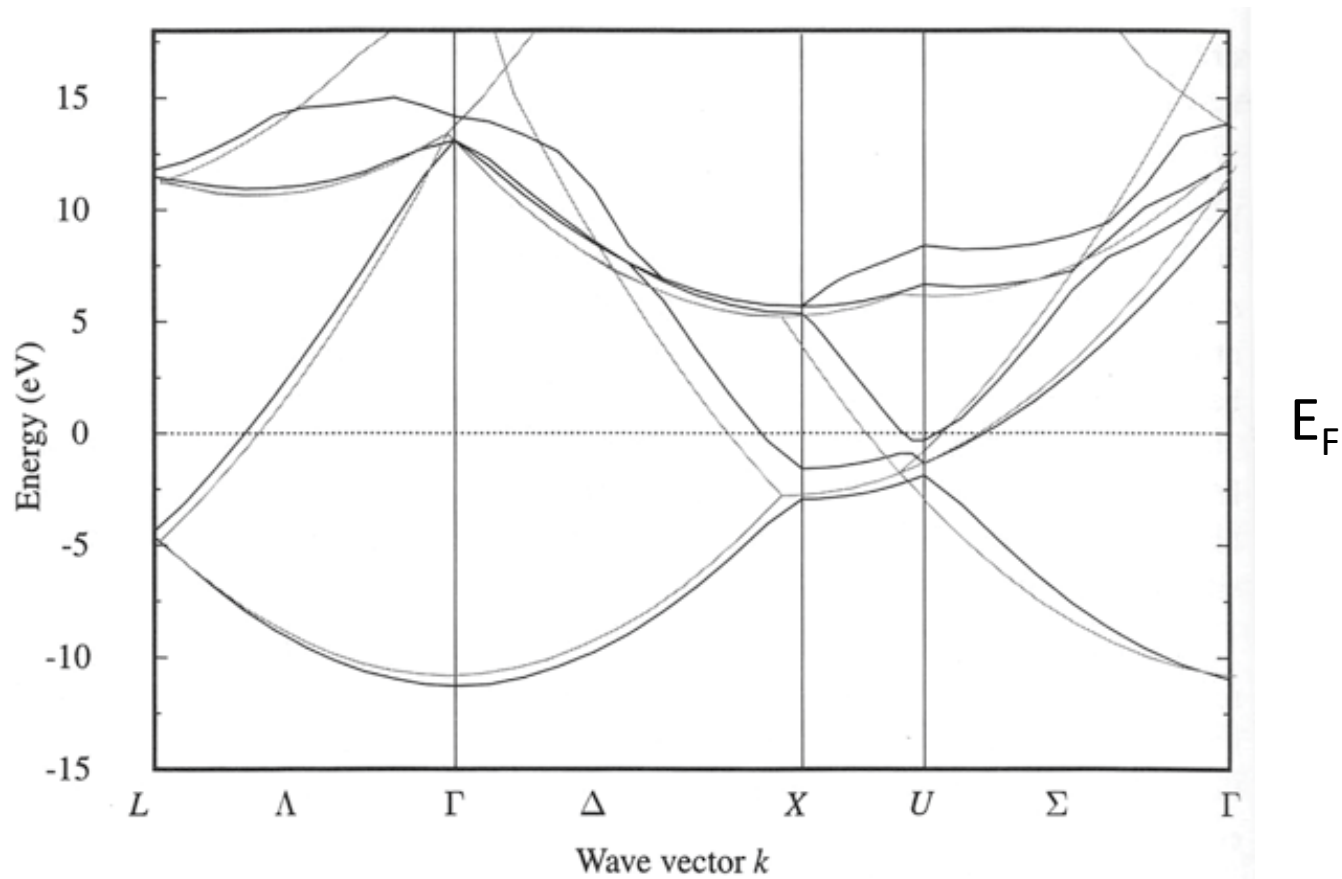


固体中的两种填充方式：

1. 电子恰好填满最低的一系列能带，更高的能带全部为空。最高的满带称为价带，最低的空带称为导带。价带与导带间的能量称为能隙—绝缘体。
2. 除去被完全填满的能带外，还有只被部分填充的能带。这个部分填充的带也称为导带。这时最高的占据能级被称为费米能级—金属。



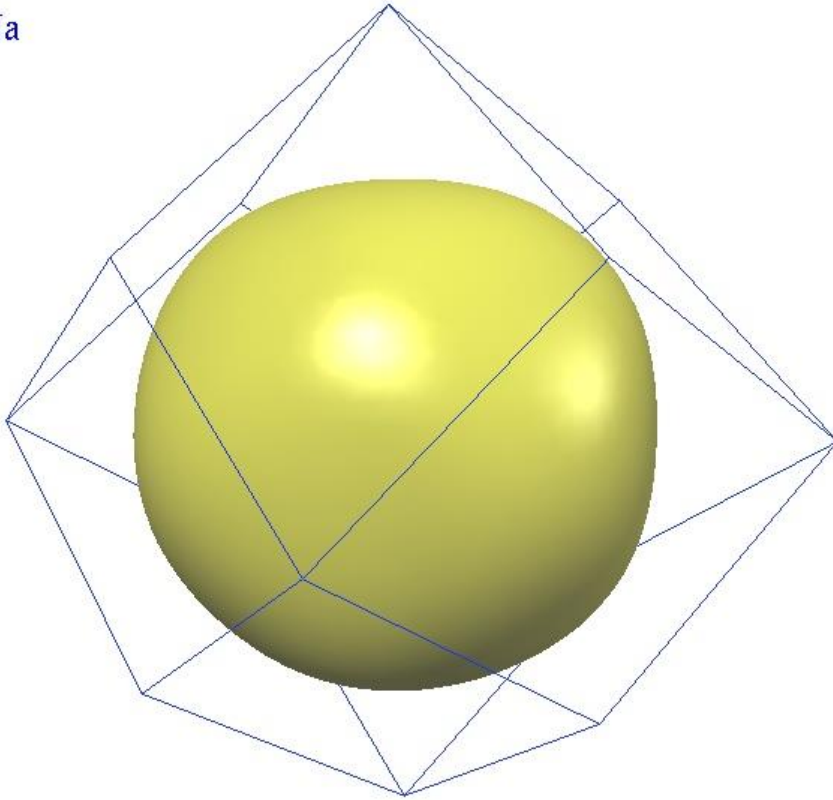
GaAs能带



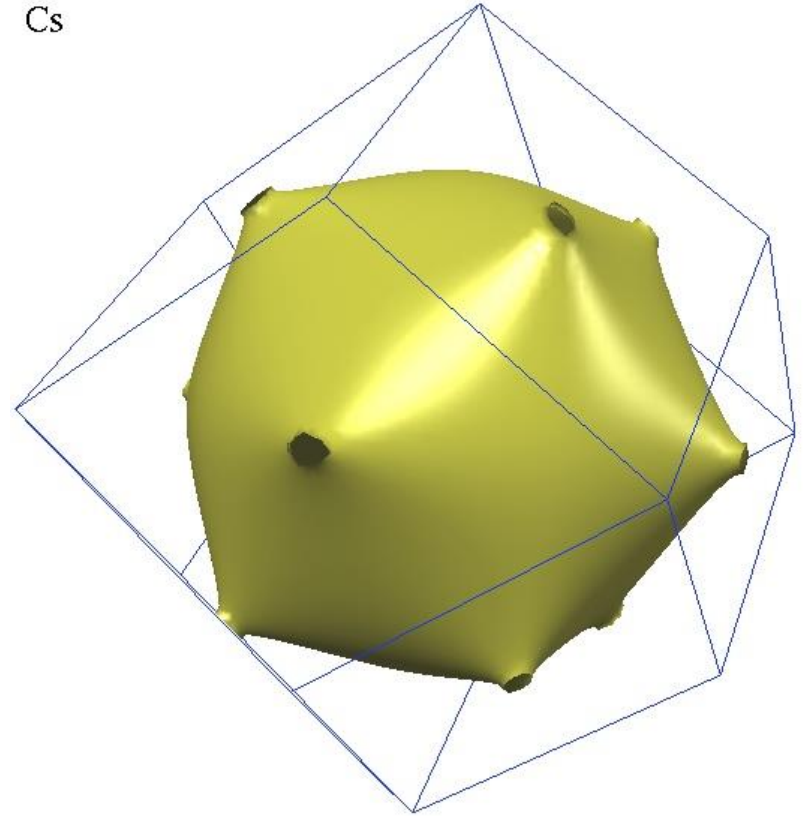
Aluminum 能带



Na



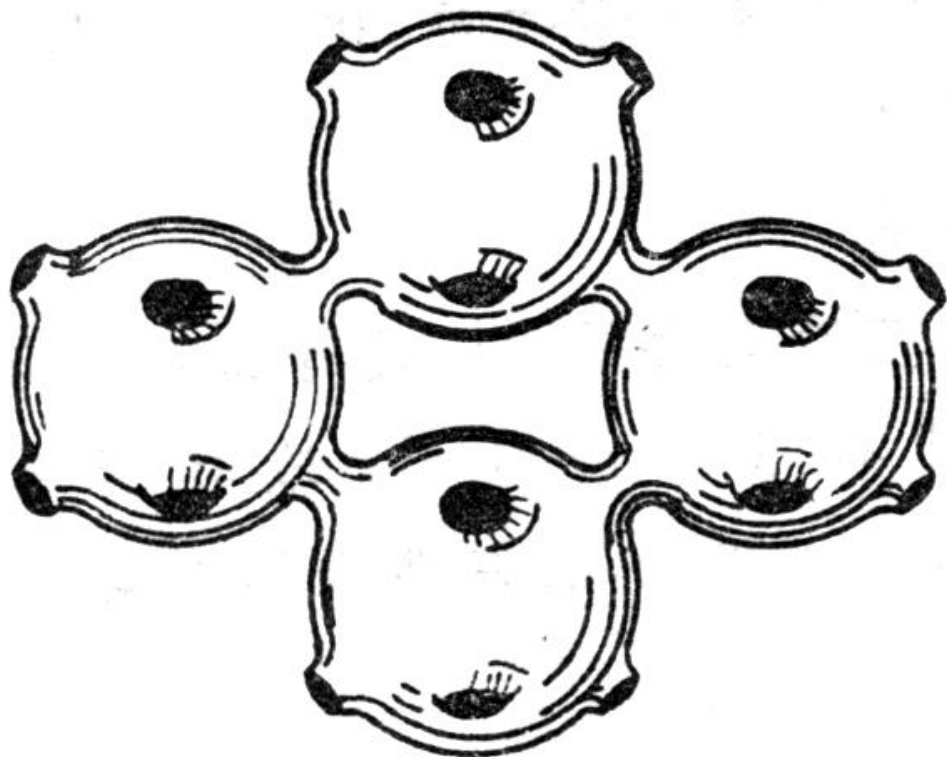
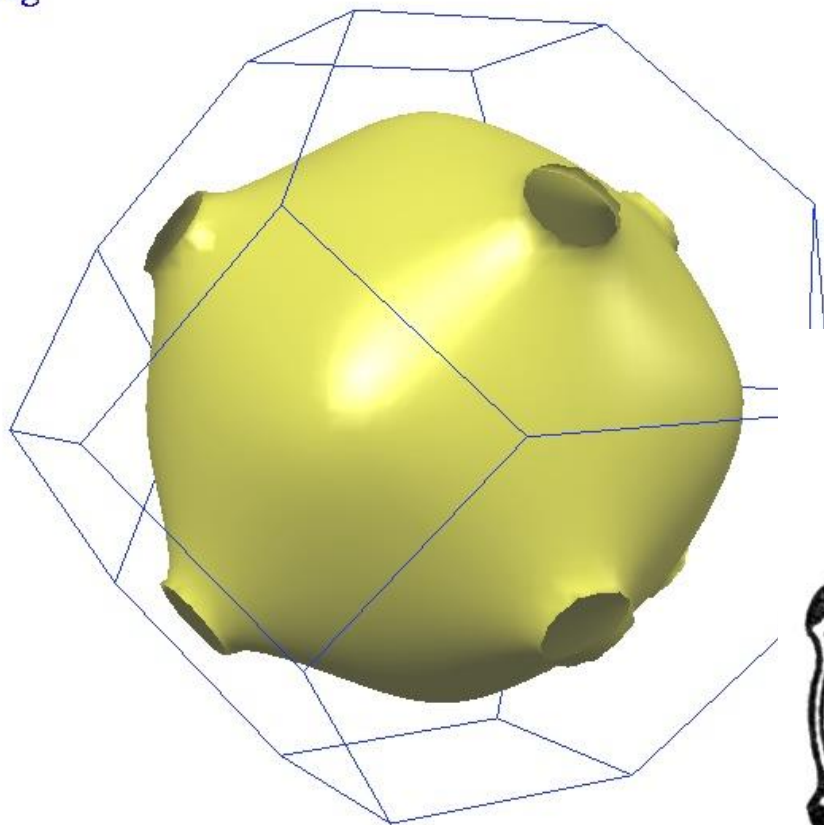
Cs



一价碱金属（半满填充）

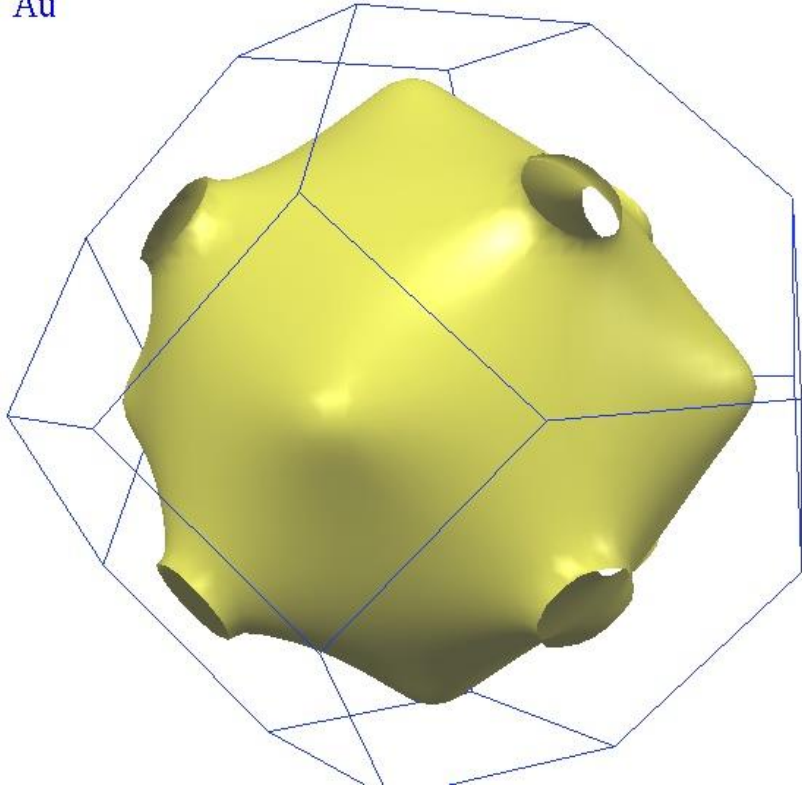


Ag





Au



Cu

