

2.2 晶体衍射和倒易点阵₁₂

2.2.2.3 衍射条件

— 弹性散射中，光子能量不变

$$\hbar\omega = \hbar\omega' \rightarrow \omega' = ck' = \omega = ck \rightarrow k' = k \rightarrow k'^2 = k^2$$

衍射条件

$$\Delta \vec{k} = \vec{G}$$

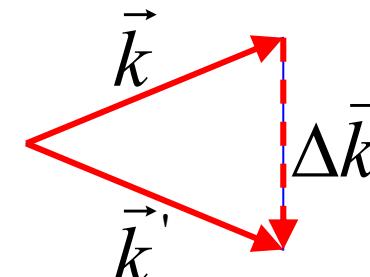
$$\vec{k} + \Delta k = \vec{k}'$$

$$\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}'$$

$$(\vec{k} + \vec{G})^2 = k^2$$

周期性点阵中弹性散射理论的最主要结果

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = 0$$



2.2 晶体衍射和倒易点阵₁₃

2.2.2.3 衍射条件

— 布喇格定律的另一种推导

— \vec{G} 是个倒易点阵矢量，那么 $-\vec{G}$ 也是一个倒易点阵矢量

— 可以证明：与方向
 $\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$ 垂直的诸平行点阵平面间的面间距是

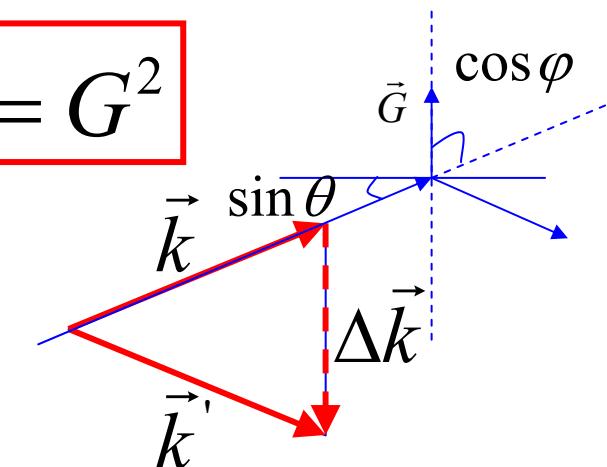
— 定义 \mathbf{G} 的 hkl 可以含有一个公因子 n

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = 0$$

$$\vec{G} \rightarrow -\vec{G}$$

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2$$

$$d(hkl) = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$



$$2(2\pi/\lambda)\sin\theta = 2\pi/d(hkl)$$

布喇格定律

$$2d(hkl)\sin\theta = n\lambda$$

2.2 晶体衍射和倒易点阵₁₄

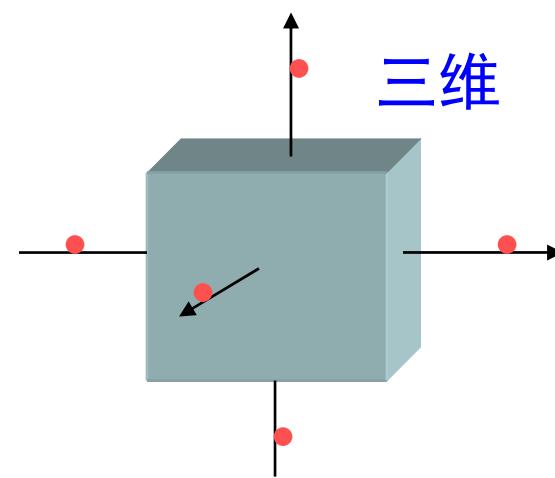
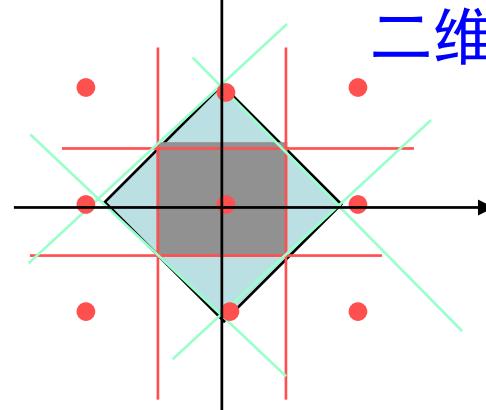
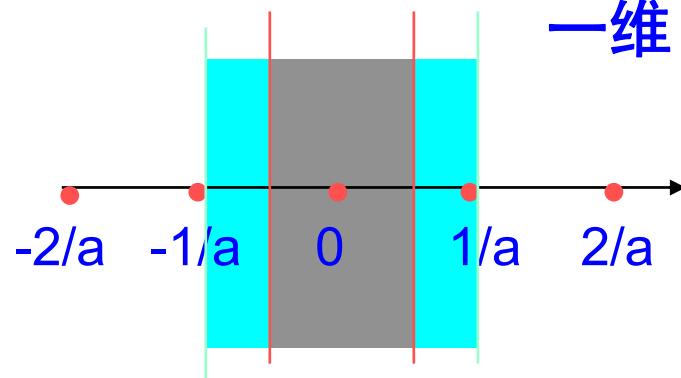
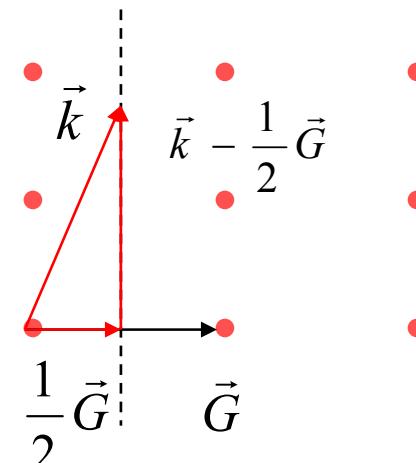
2.2.3 布里渊区

布里渊区定义为倒易点阵中的维格纳—赛茨晶胞

布里渊区边界方程

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2$$

$$\vec{k} \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{G} \right) = \left(\frac{1}{2} G \right)^2$$



2.2 晶体衍射和倒易点阵¹⁵

2.2.3 布里渊区

—布里渊区的特点

- 每个布里渊区只包含一个倒阵点
- 每个布里渊区都具有相同的体积
- 布里渊区的体积应等于倒易点阵初基晶胞的体积

—第一布里渊区

—在倒易点阵的中央晶胞称为第一布里渊区。

—作由原点出发的诸倒易点阵矢量的垂直平分面，为这些平面所完全封闭的最小体积就是第一布里渊区。

2.2 晶体衍射和倒易点阵₁₆

2.2.4 倒易点阵的范例

简单立方点阵的倒易点阵

$$\Omega = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = a^3$$

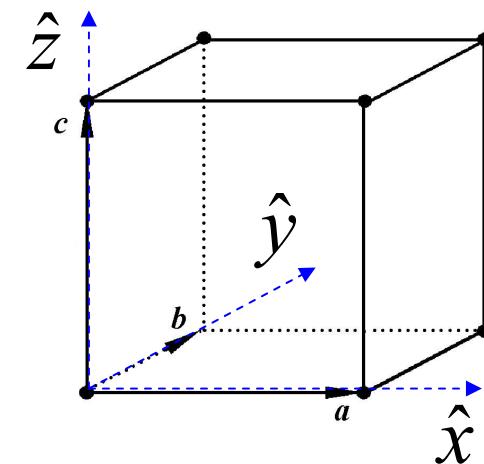
—仍是一个简立方点阵，点阵常数为 $2\pi/a$

—第一布里渊区是个以原点为体心，边长为 $2\pi/a$ 的立方体。

$$\vec{a} = a\hat{x}$$

$$\vec{b} = a\hat{y}$$

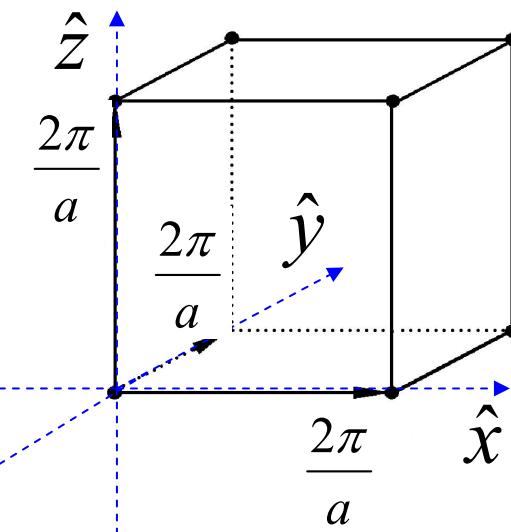
$$\vec{c} = a\hat{z}$$



$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\Omega} = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\Omega} = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\Omega} = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$$



2.2 晶体衍射和倒易点阵₁₇

2.2.4 倒易点阵的范例

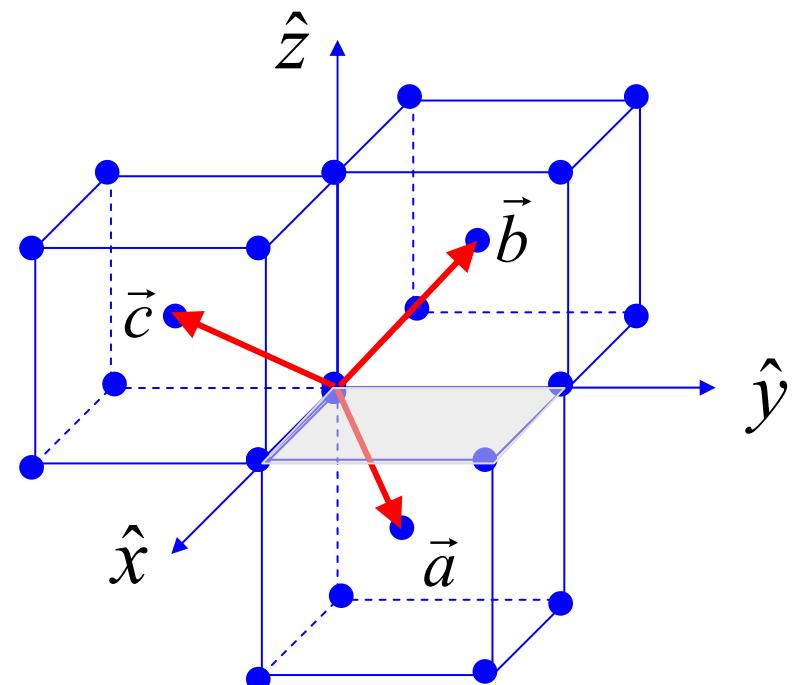
体心立方点阵的倒易点阵

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\Omega = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \frac{1}{2}a^3$$



2.2 晶体衍射和倒易点阵₁₈

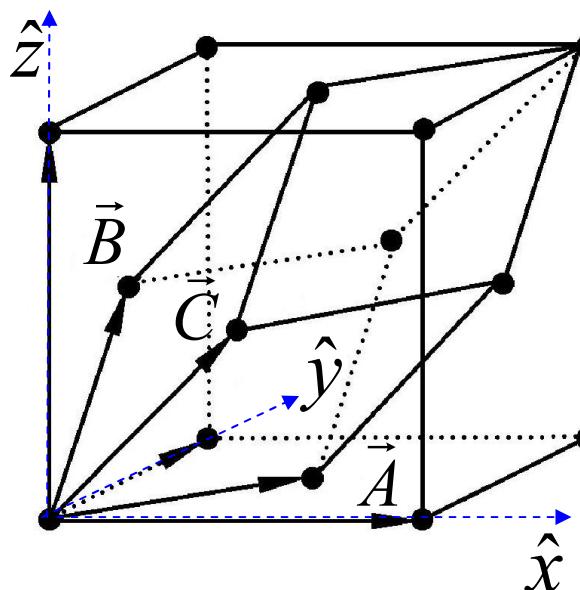
2.2.4 倒易点阵的范例

体心立方点阵的倒易点阵

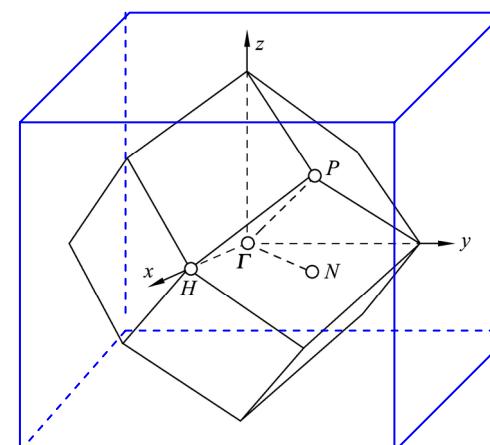
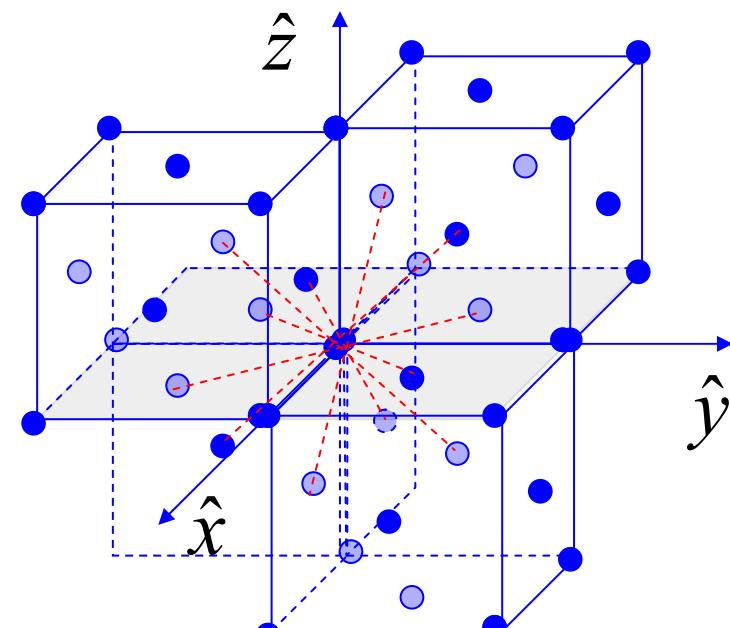
$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{C} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z})$$



- 倒易点阵是个面心立方点阵
- 第一布里渊区是个正菱形十二面体



2.2 晶体衍射和倒易点阵₁₉

2.2.4 倒易点阵的范例

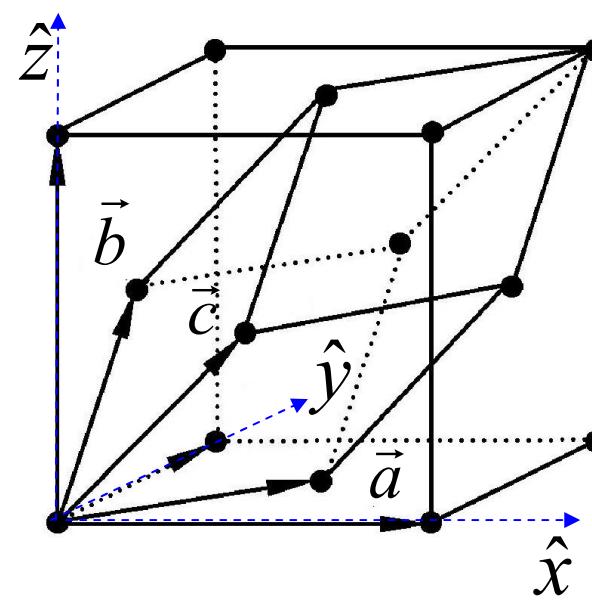
面心立方点阵的倒易点阵

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})$$

$$\Omega = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \frac{1}{4} a^3$$



2.2 晶体衍射和倒易点阵₂₀

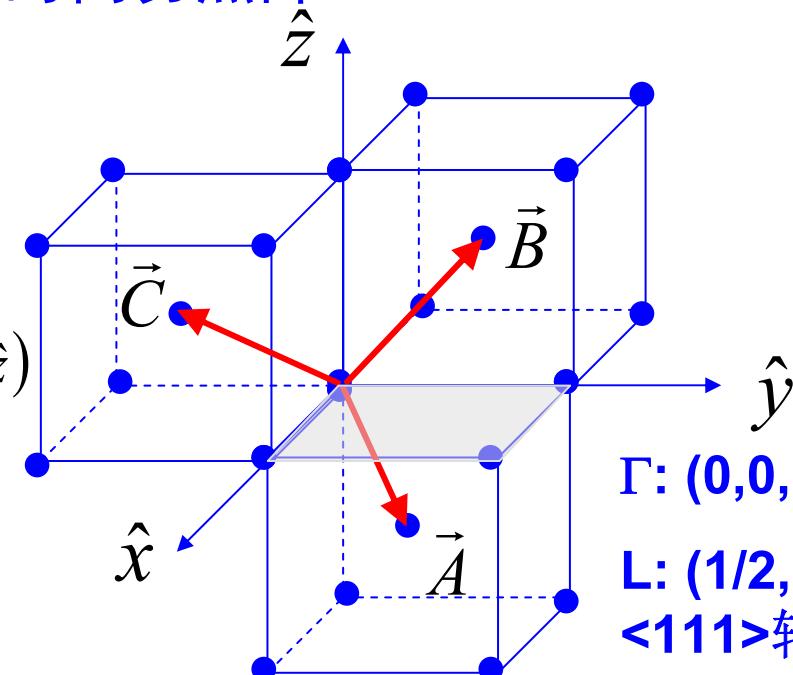
2.2.4 倒易点阵的范例

面心立方点阵的倒易点阵

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

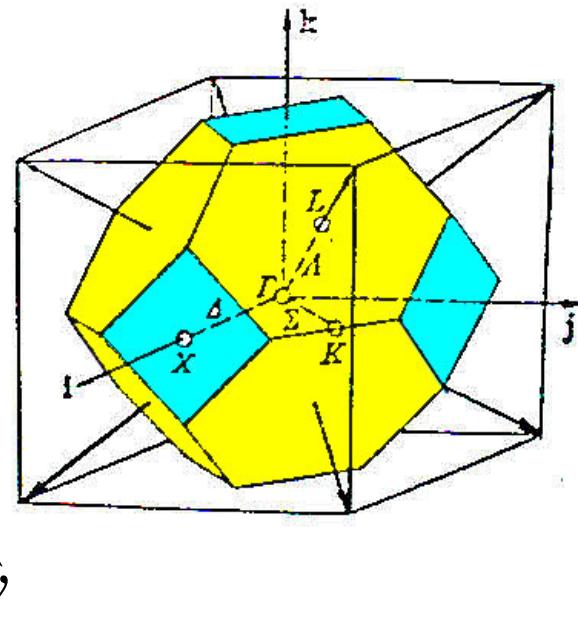
$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{C} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$



—倒易点阵是个体心立方点阵

—第一布里渊区是截角八面体



Γ: (0,0,0) 布里渊区中心

L: (1/2,1/2,1/2) 布里渊区边与
<111>轴的交点

X: (1,0,0) 布里渊区边与<100>轴的
交点

K: (3/4,3/4,0) 布里渊区边与<110>
轴的交点

第二章 固体物理导论

2.1 晶体结构

2.2 晶体衍射和倒易点阵

2.3 自由电子费米气体

2.4 能带

2.5 半导体晶体

2.3 自由电子费米气体₁

一个给出了这样一些结果的理论，肯定包含很多真理。

——H. A. Lorentz

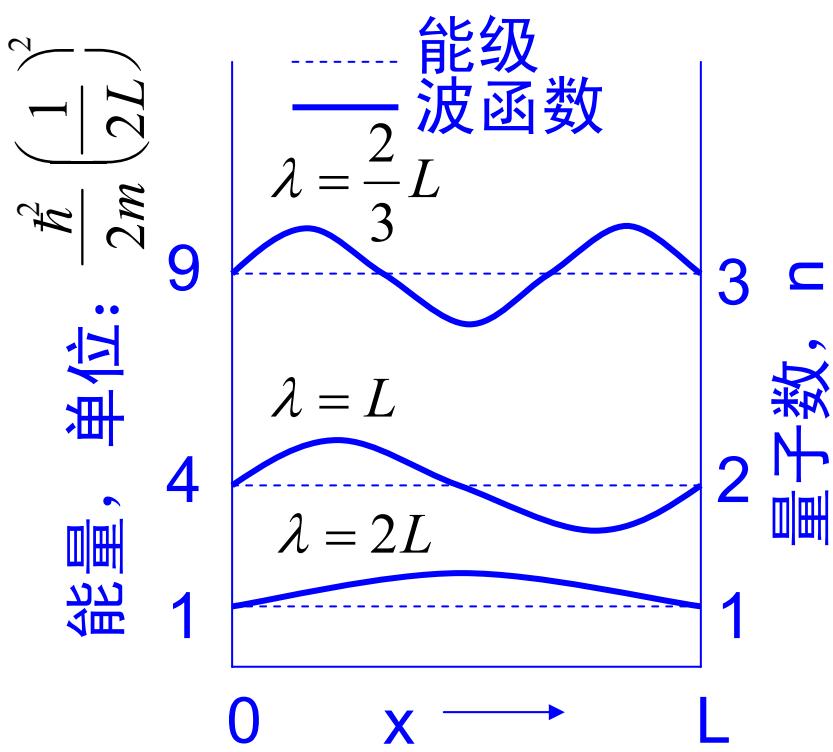
自由电子模型认为：组成晶体的原子中束缚得最弱的电子在金属体内自由运动。原子的价电子成为传导电子。在自由电子近似中略去传导电子和离子实之间的力；在进行所有计算时，仿佛传导电子在样品中可以各处自由运动。总能量全部是动能，势能被略去。

自由电子费米气体是指自由的、无相互作用的、遵从泡利不相容原理的电子气。

2.3 自由电子费米气体₂

2.3.1 一维情况下的能级和轨道密度

—引用量子理论和泡利原理，研究一维情况下的自由电子气。



—质量为m的电子被无限高势垒限制在长度为L的直线上

—引入薛定谔方程 $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$

—电子的波函数 $\psi_n(x)$ 是方程的解

—略去 \hat{H} 中的势能

—p是动量算子 $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

2.3 自由电子费米气体₃

2.3.1 一维情况下的能级和轨道密度

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

边界条件 $\psi_n(0) = 0$
 $\psi_n(L) = 0$

$$\hat{H} \psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = \varepsilon_n \psi_n(x)$$

解

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n} x\right)$$

$$L = \frac{1}{2} n \lambda_n \quad (\text{A是常数})$$

$-\varepsilon_n$ 称为电子在这个轨道中的能量

—轨道这个词用来表示单电子系统波动方程的解

—如果波函数是正弦形式，当0—L间的长度是半波长的整数倍n时，边界条件得到满足

2.3 自由电子费米气体₄

2.3.1 一维情况下的能级和轨道密度

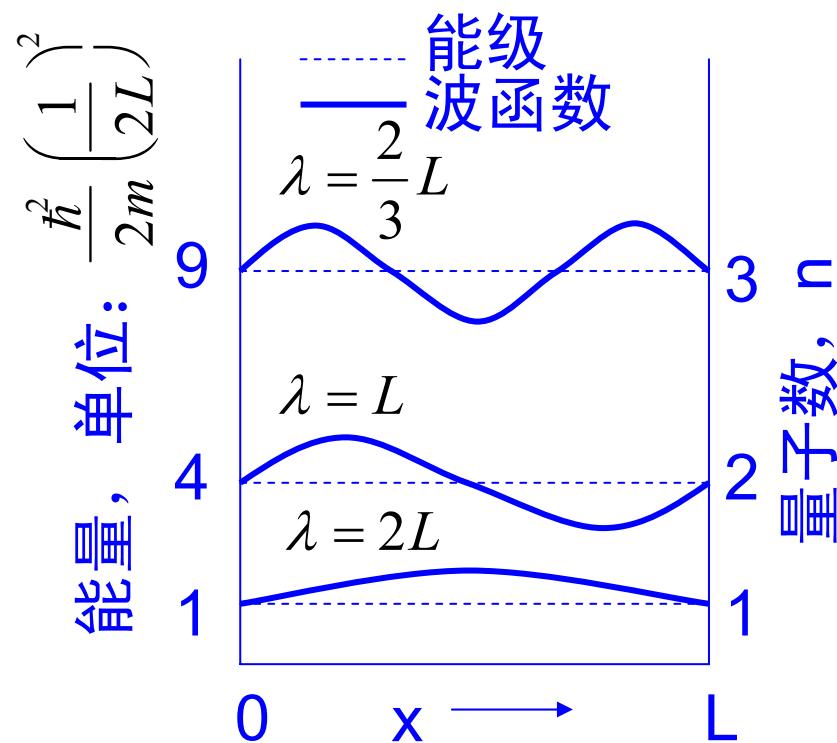
$$\hat{H} \psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = \varepsilon_n \psi_n(x)$$

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n} x\right)$$

$$L = \frac{1}{2} n \lambda_n \quad (\text{A是常数})$$



$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2$$



2.3 自由电子费米气体₅

2.3.1 一维情况下的能级和轨道密度

—如何把N个电子放在这条L长的直线上？

—泡利不相容原理指出两个电子的量子数组不能彼此全同，即，每个轨道最多只能被一个电子占据

—在线形固体中，传导电子轨道的量子数是n和 m_s ，n是任何正整数， m_s 是自旋取向值（1/2, -1/2）

—以量子数n标记的一对轨道可以容纳两个电子，一个自旋向上，一个自旋向下，但他们的能量是相同的。

—相同能量的轨道可以不止一个。具有相同能量的轨道的数目称为简并度。

把6个电子放在L线上

n	m_s	电子占据数
1	↑	1
1	↓	1
2	↑	1
2	↓	1
3	↑	1
3	↓	1
4	↑	0
4	↓	0

2.3 自由电子费米气体₆

2.3.1 一维情况下的能级和轨道密度

—N个电子放在这条L长的直线上，电子先从底层低能级轨道填充开始，填满低能级轨道后，再逐渐向高能级轨道填充，直至N个电子都找到了轨道

- 求解最高填充轨道的能级量子数 n_F
- 费米能 ϵ_F 定义：基态下最高被充满能级的能量

$$2n_F = N$$

$$n_F = \frac{N}{2}$$

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2$$



$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N\pi}{2L} \right)^2$$

电子密度

$$\frac{N}{L}$$

倒易点阵中的矢量
具有[长度]⁻¹的量纲



2.3 自由电子费米气体₇

2.3.2 温度对费米—狄喇克分布的影响

—基态：系统处在绝对零度的状态

—温度升高后，电子气的动能增加，某些在基态时本来空着的能级被占据，而某些基态时被占据着的能级空了出来

—费米—狄喇克分布函数给出了理想电子气处于热平衡时能量为 ε 的轨道被电子占据的几率：

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1}$$

化学势
 $\mu = \mu(T)$

— μ 的选择原则：总能正确计算出系统中粒子的总数，即等于N

2.3 自由电子费米气体。

2.3.2 温度对费米—狄喇克分布的影响

— 费米能 ε_F 定义：基态下最高被充满能级的能量

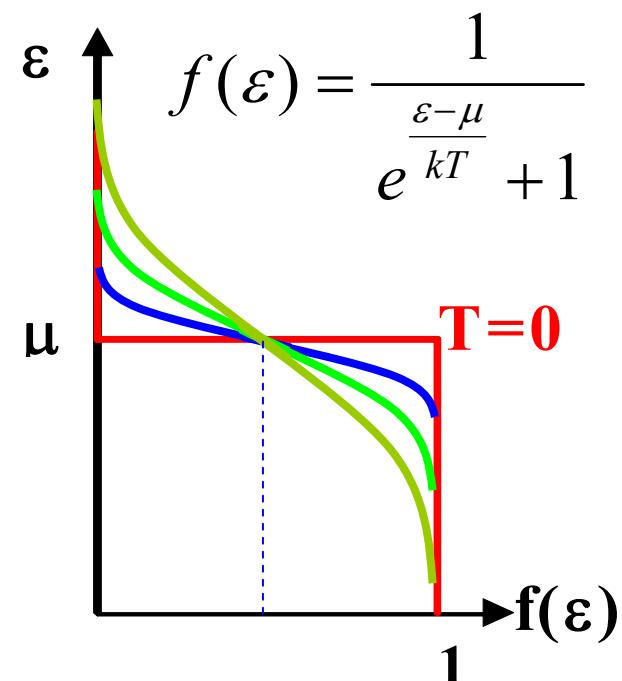
— 在 $T=0K$ 时， μ 以上占据几率为零，以下占据几率为1，是一个突变，所以 $\mu=\varepsilon_F$

$$(T = 0K, \varepsilon - \mu \rightarrow 0^+) e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \rightarrow +\infty, f(\varepsilon) \rightarrow 0$$

$$(T = 0K, \varepsilon - \mu \rightarrow 0^-) e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \rightarrow 0, f(\varepsilon) \rightarrow 1$$

— 在一切温度下，当 $\varepsilon=\mu$ 时， $f(\varepsilon)=1/2$

— 在F-D分布的高能尾部相应于 $\varepsilon-\mu \gg kT$ ，F-D分布简化成玻尔兹曼分布



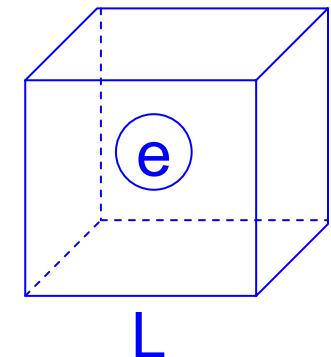
$$f(\varepsilon) \simeq e^{-\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}$$

2.3 自由电子费米气体₉

2.3.3 三维情况下的自由电子气

— 三维情况下自由粒子的描述遵守薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$



— 考虑在边长L立方体中的电子状态

— 要求波函数是x, y, z的周期函数，周期为L

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

$$k_x, k_y, k_z = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots; \pm \frac{2n\pi}{L}$$

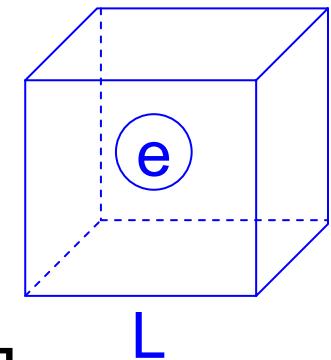
$$\exp[ik_x(x + L)] = \exp[i2n\pi(x + L)/L] = \exp(ik_x x)$$

— \mathbf{k} 的分量是这个问题的量子数；此外，还要考虑自旋方向的量子数 m_s 。

2.3 自由电子费米气体₁₀

2.3.3 三维情况下的自由电子气

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$



$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)]$$

色散关系: $\epsilon-k$



$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\vec{p} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = -i\hbar \nabla \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \vec{p} = -i\hbar \nabla$$

轨道 k 中粒子的速度 $\vec{v} = \hbar \vec{k} / m$