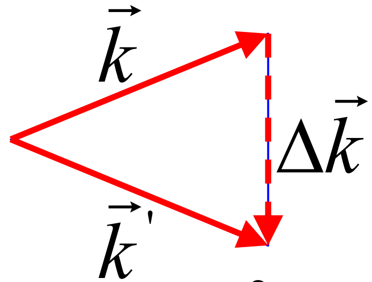
2.2 晶体衍射和倒易点阵12

2.2.2.3 衍射条件



—弹性散射中，光子能量不变

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

衍射条件 $\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{G}}$ $\xrightarrow{\vec{k} + \Delta\vec{k} = \vec{k}'}$ $\boxed{\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}'}$

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

$$\Updownarrow$$

周期性点阵中弹性散射理论的最主要结果 $\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} + G^2 = 0}$

2.2 晶体衍射和倒易点阵13

2.2.2.3 衍射条件

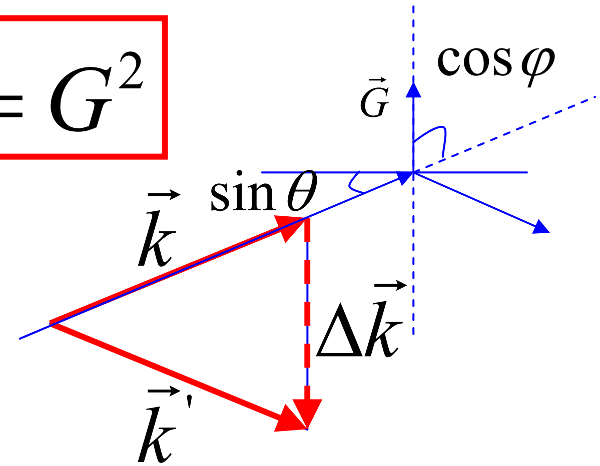
—布喇格定律的另一种推导

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

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

—***G***是个倒易点阵矢量，那么-***G***也是一个倒易点阵矢量

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



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

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

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

—定义***G***的hkl可以含有一个公因子n

布喇格定律

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

2.2 晶体衍射和倒易点阵14

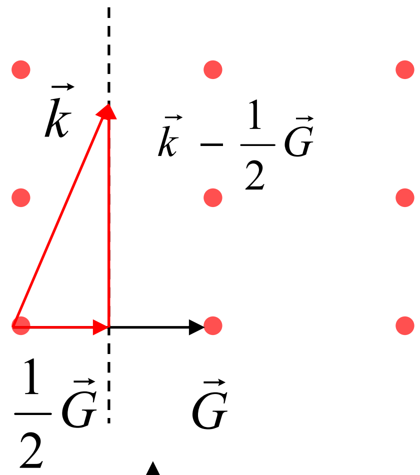
2.2.3 布里渊区

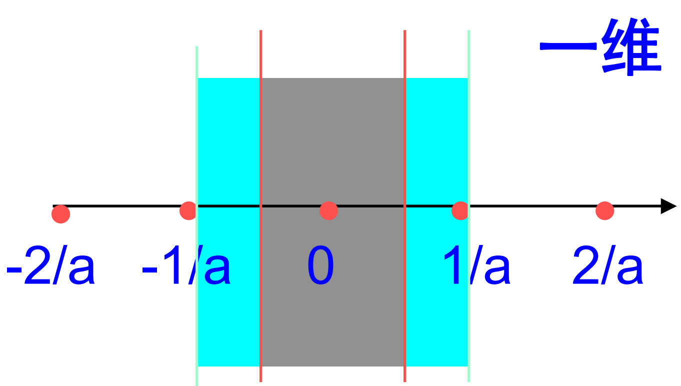
布里渊区定义为倒易点阵中的维格纳—赛茨晶胞

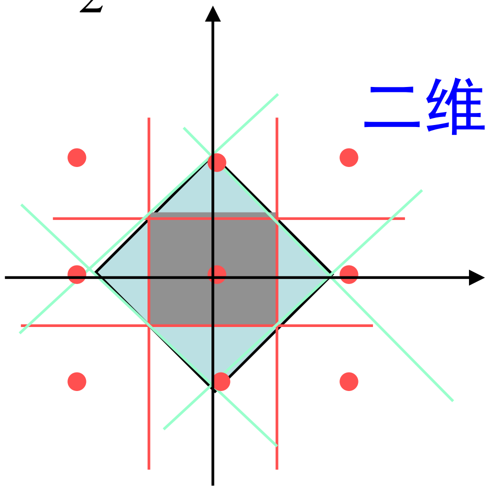
布里渊区边界方程

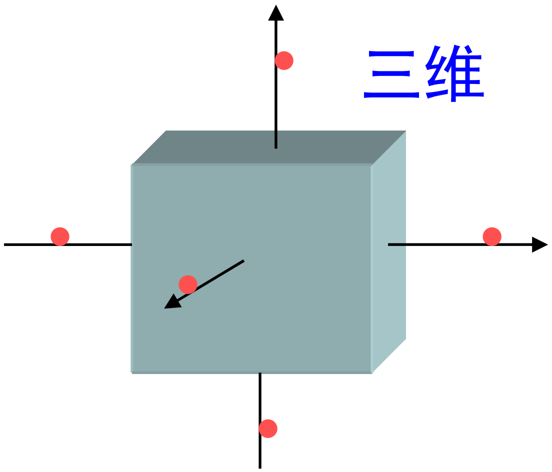
$$2\vec{k}\cdot\vec{G}=G^2$$

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









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

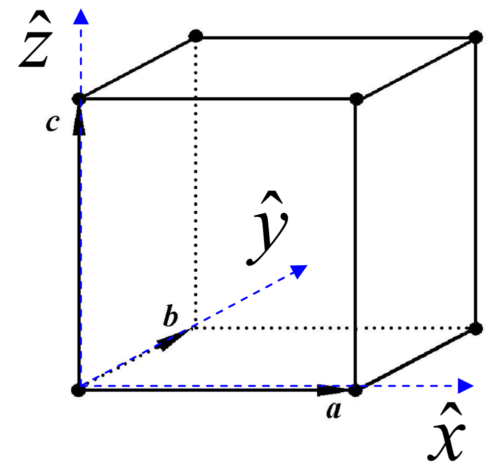
简单立方点阵的倒易点阵

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

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

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

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



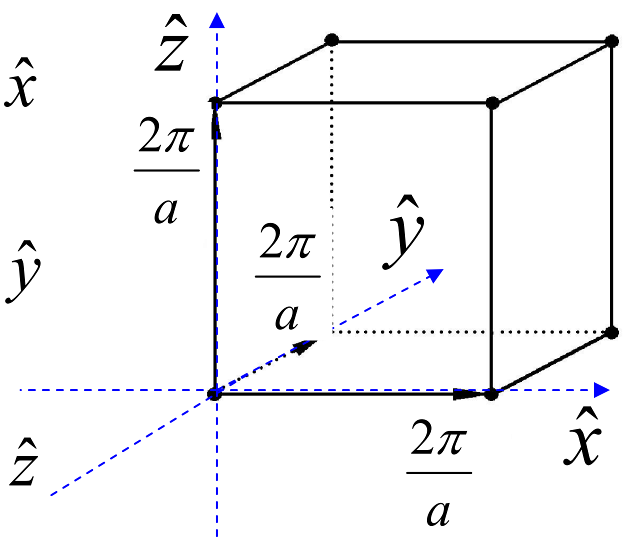
—仍是一个简立方点阵，点阵常数为2π/a

—第一布里渊区是个以原点为体心，边长为2π/a的立方体。

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

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

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



2.2 晶体衍射和倒易点阵

2.2.4 倒易点阵的范例

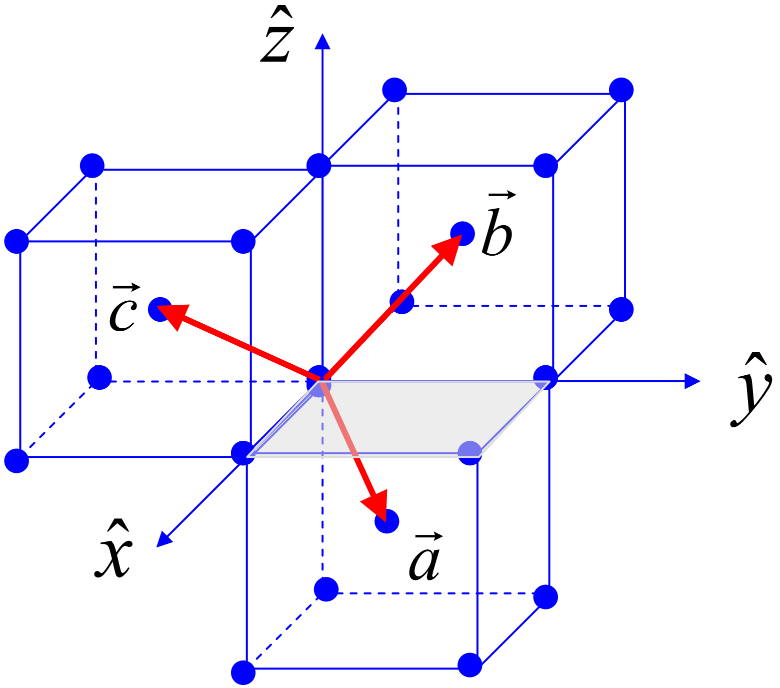
体心立方点阵的倒易点阵

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

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

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

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



2.2 晶体衍射和倒易点阵

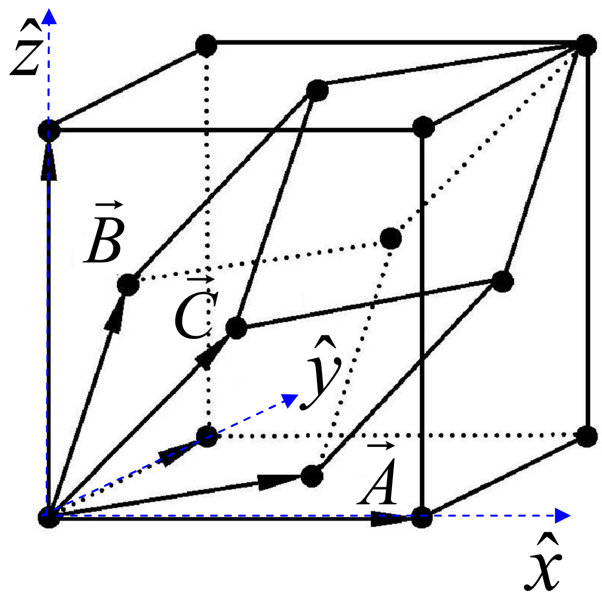
2.2.4 倒易点阵的范例

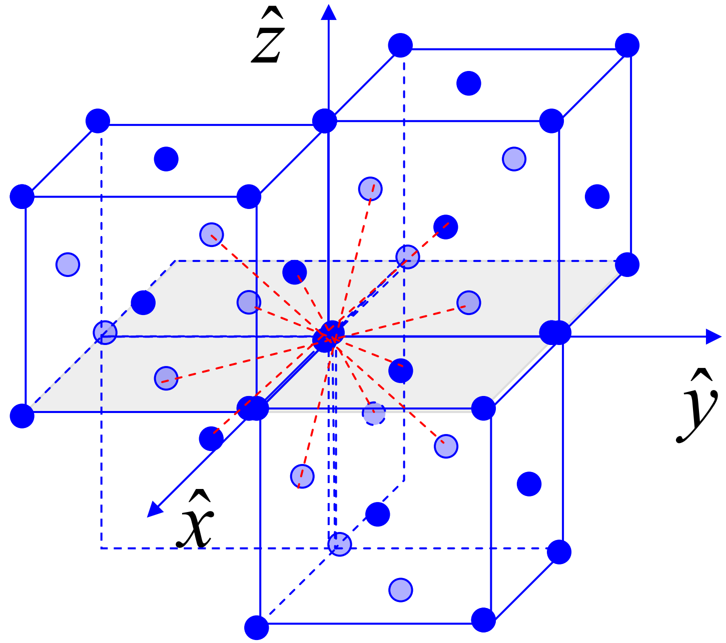
体心立方点阵的倒易点阵

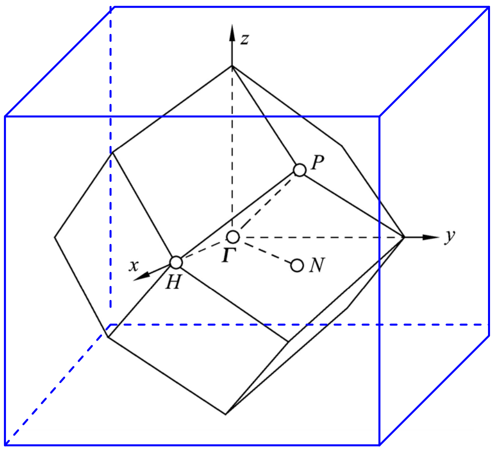
$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$$

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

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







—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

2.2.4 倒易点阵的范例

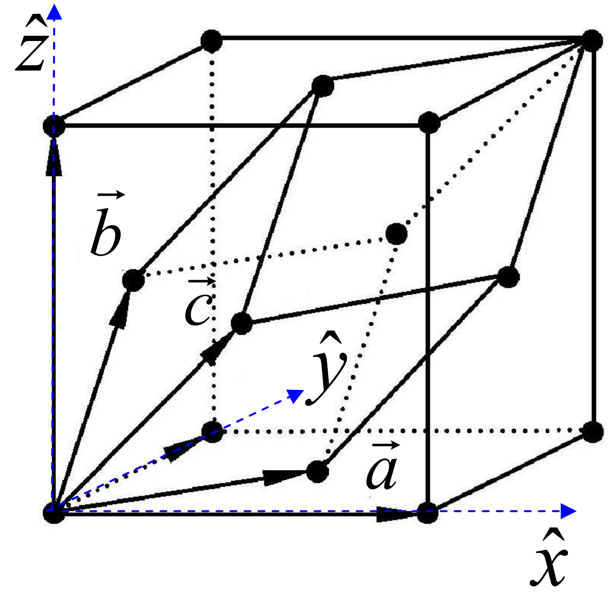
面心立方点阵的倒易点阵

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

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

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

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



2.2 晶体衍射和倒易点阵

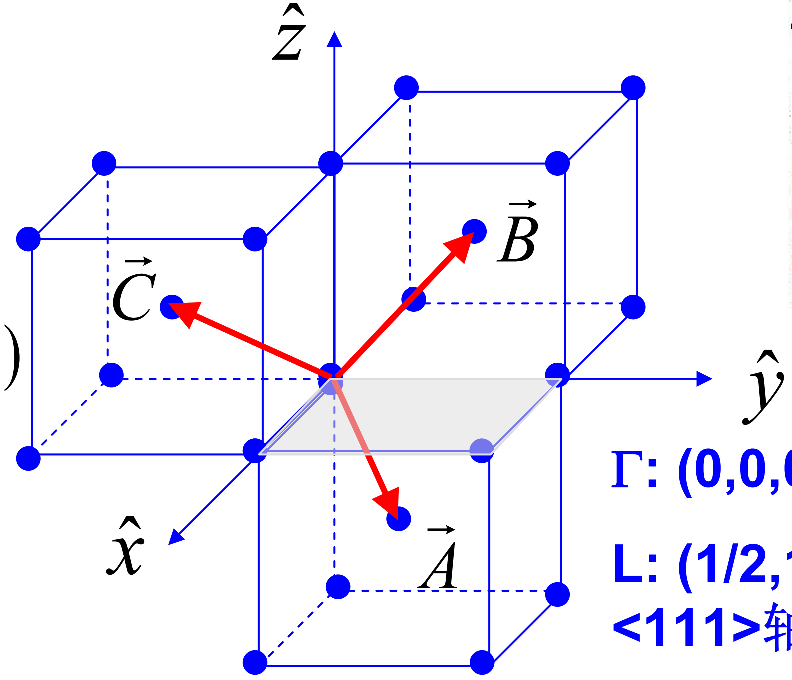
2.2.4 倒易点阵的范例

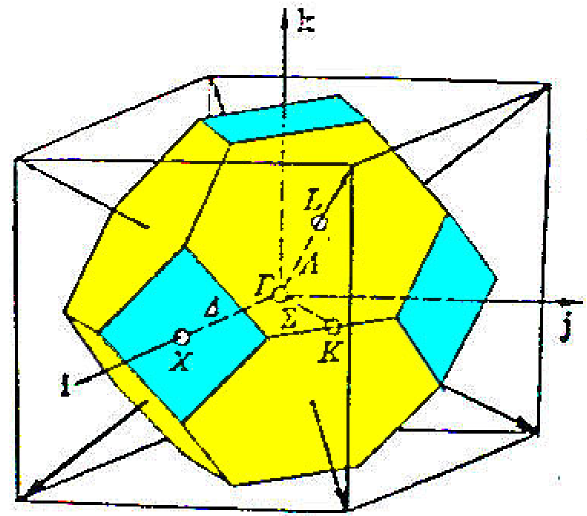
面心立方点阵的倒易点阵

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

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

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





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

—倒易点阵是个体心立方点阵

—第一布里渊区是截角八面体

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

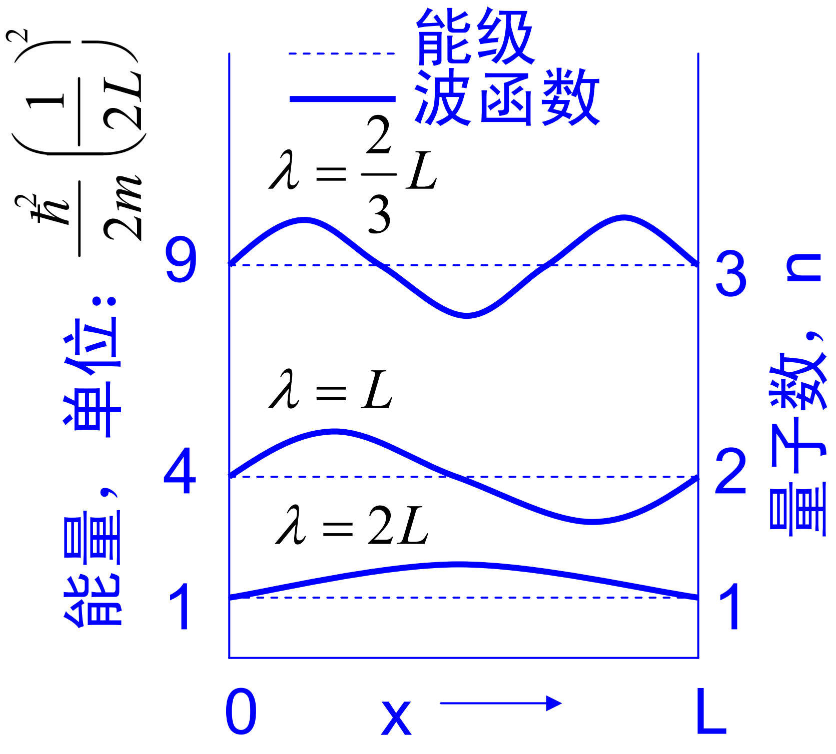
自由电子模型认为：组成晶体的原子中束缚得最弱的电子在金属体内自由运动。原子的价电子成为传导电子。在自由电子近似中略去传导电子和离子实之间的力；在进行所有计算时，仿佛传导电子在样品中可以各处自由运动。总能量全部是动能，势能被略去。

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 $p=-i\hbar\frac{d}{dx}$

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

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

$$\boxed{\begin{aligned}&\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n}x\right)\\&L = \frac{1}{2}n\lambda_n \quad \text{（A是常数）}\end{aligned}}$$

—ε_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

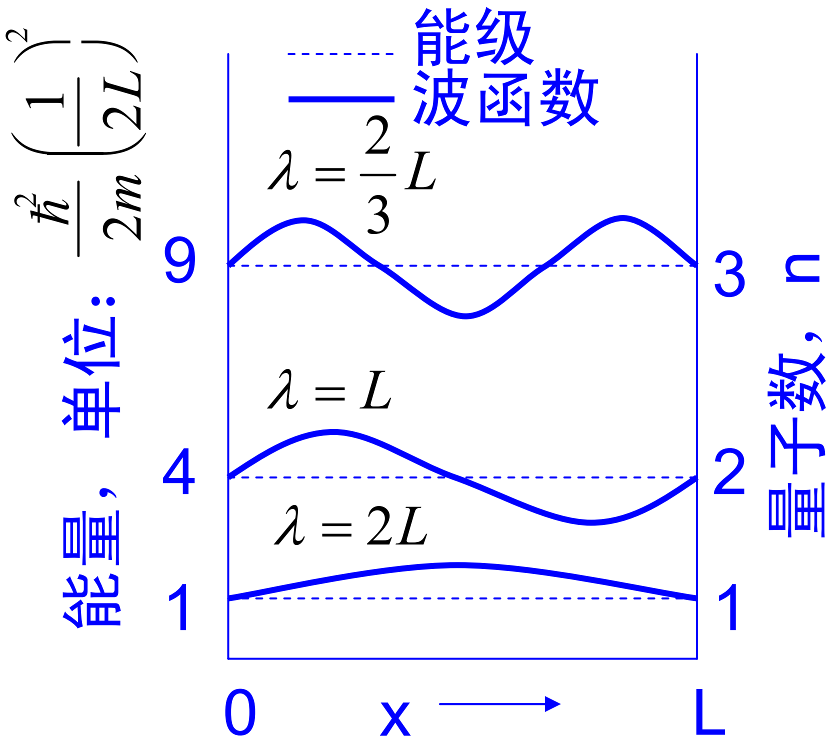
2.3.1 一维情况下的能级和轨道密度

$$\begin{cases} \hat{H}\psi_n(x) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_n}{dx^2} = \varepsilon_n\psi_n(x) \\ \psi_n(x) = A\sin\left(\dfrac{2\pi}{\lambda_n}x\right) \\ L = \dfrac{1}{2}n\lambda_n \end{cases}$$

（A是常数）

$$\downarrow$$

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



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

$$\boxed{2n_F = N} \longrightarrow \boxed{n_F = \frac{N}{2}} \qquad \boxed{\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2}$$

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

电子密度

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

倒易点阵中的矢量具有[长度]$^{-1}$的量纲 $\longleftrightarrow$

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：

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

化学势

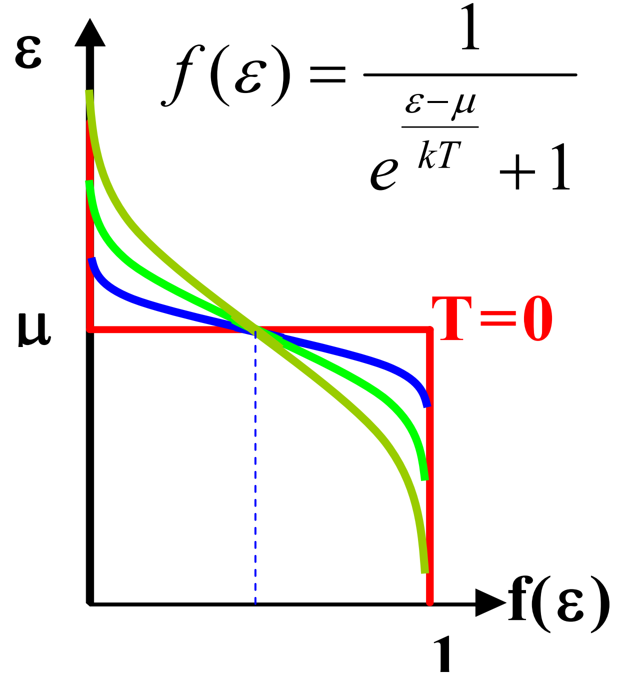
$$\mu=\mu(T)$$

—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8

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$\mu=\varepsilon_F$

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

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

—在一切温度下，当ε=μ时，f(ε)=1/2

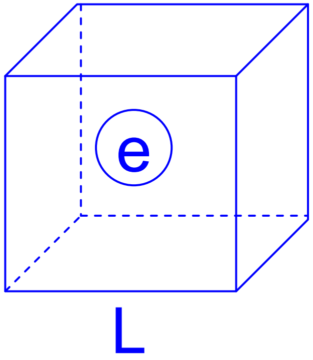
—在F—D分布的高能尾部相应于ε—μ>>kT，F—D分布简化成玻尔兹曼分布

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

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

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})}\qquad \boxed{k_x,k_y,k_z=0;\pm\frac{2\pi}{L};\pm\frac{4\pi}{L};\dots;\pm\frac{2n\pi}{L}}$$

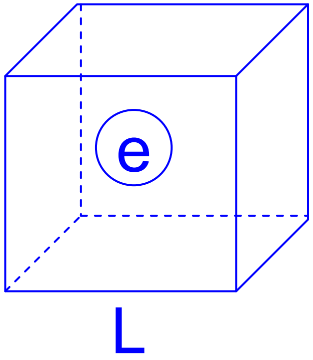
$$\exp[ik_x(x+L)]=\exp[i2n\pi(x+L)/L]=\exp(ik_x x)$$

—***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

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



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

色散关系：ε-k

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

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

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