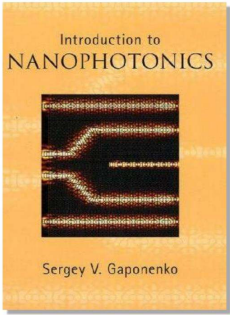


相速度与群速度 P5  
黑体辐射公式 波色爱因斯坦分布 P15  
微观粒子不同维度的态密度 P16  
玻尔半径、里德伯常数 P31  
布洛赫波 P34  
周期性势场中粒子的运动规律 P35  
倒空间 P36  
固体中的能带 P37  
固体中的量子限域效应 P42 量子阱、量子线、量子点

限域效应  
电子：几何尺度——电子德布罗意波长  
激子：几何尺度——激子波尔半径

本讲内容：波的基本属性和量子力学粒子

- 波与色散曲线 P5
- 态密度 P10
- 波函数与薛定谔方程 P18
- 势场中的量子力学粒子 P21
  - 无限势垒
  - 有限势垒
  - 量子谐振子
  - 球对称中的粒子
  - 库仑势中的电子
- 周期结构中的电子与量子限域效应 P33



详细讨论量子力学粒子特性

1. 自由电子色散曲线（自由空间）

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

2. 电子在无限深势阱

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

3. 电子在有限深势阱

4. 电子在位置平方函数势场

$$U(x) = U(x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dx^2} (x - x_0)^2 + \dots, \quad U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}), \quad \text{where } n = 0, 1, 2, \dots$  $\Delta E = \hbar \omega \quad E_0 = \hbar \omega / 2 \quad \text{Phonon;}$

5. 电子在球形势场（中心无电荷）

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \chi_{nl}^2}{2ma^2}$$

简并度:  $(2l + 1)$

6. 电子在库仑势场

$a^0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} \approx 5.292 \cdot 10^{-2} \text{ nm}$  $E^0 = \frac{e^2}{2a^0} \approx 13.60 \text{ eV}$ 

$M = m_0 + M_0, \quad \mu = \frac{m_0 M_0}{m_0 + M_0}$ 

$E_n = -\frac{Ry}{n^2} \text{ for } E < 0$  $Ry = \frac{e^2}{2a_B}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

7. 电子在周期性库仑势场

Bloch Wave, 准动量守恒, 能带, 有效质量

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

8. 电子在有限周期库仑势场; 固体中的量子限域效应; 量子阱, 量子线, 量子点

氢原子模型

总结

- 态密度：为某一能量（波矢）附近每单位能量（波矢）区间里微观状态的数目，又叫做能（波矢）态密度。在物理学中，具有同一能量的微观状态被称为简并的。
- 玻尔半径：粒子最可能被发现（最低占据态）的距离
- 有效质量：引入经典力学牛顿第二定律描述量子力学粒子的一种近似。它近似认为电子受到原子核的周期性势场（这个势场和晶格周期相同）以及其他电子势场综合作用的结果。在数学处理上采用在能带极值点处用泰勒展开，这样略去三阶及以上项。另外，有效质量与能带形状、位置有关。有效质量把晶体中电子准经典运动的加速度与外力直接联系起来。

课程内容

课程知识点

1. 研究内容

2. 研究方法

量子材料：电子的限域引起光学效应

表面等离子体光学：金属光学

光子晶体：周期性介质光学

亚波长共振：在远场影响光传播和偏振的周期性光学结构

超材料：人工设计电磁材料

纳米光子学基础

电子与光子异同

纳米尺度下光与物质相互作用

计算方法：电磁场数值模拟

特性描述：近场光学

制备方法：纳米加工

1. 波与色散曲线

经典力学中的波

周期： $T = \frac{1}{\nu} = \frac{2\pi}{\omega}$

波数： $k = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

相速度： $v = \frac{\lambda}{T} = \lambda \nu = \frac{\omega}{k}$

群速度： $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

一维： $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

色散关系：波长（波数）与频率的关系

色散曲线  $\omega(k)$

光（电子、声子、水波）的色散

相速与群速

Non-dispersive:

Frequency dispersion:

相速：振荡速度或等相位面速度（红点）

$$v_p = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0 \epsilon_r \mu_r}} = \frac{c}{n} = \frac{\omega}{k}$$

群速：波包络的速度或等幅面的速度（绿点）

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

色散曲线  $\omega(k)$

非色散介质中，相速度=群速度

## 相速与群速

以频率接近的两束平面光波构成的波包为例

$$E_1 = E_0 e^{i[(k_0 - \Delta k/2)x - (\omega_0 - \Delta\omega/2)t]}, E_2 = E_0 e^{i[(k_0 + \Delta k/2)x - (\omega_0 + \Delta\omega/2)t]},$$

$$\Delta k \ll k_0, \Delta\omega \ll \omega_0$$

$$E = E_1 + E_2 = E_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \left[ e^{-i(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t)} + e^{i(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t)} \right]$$

$$= 2E_0 \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

等振幅面

调制的平面波！

等相位面

$$\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t = C$$

$$k_0 x - \omega_0 t = C$$

两边对时间微分

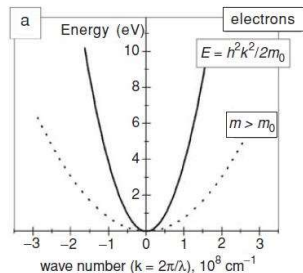
$$\frac{\Delta k}{2} \frac{dx}{dt} - \frac{\Delta\omega}{2} = 0 \Rightarrow v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$k_0 \frac{dx}{dt} - \omega_0 = 0 \Rightarrow v_p = \frac{\omega_0}{k_0}$$

07

## 1. 波与色散曲线

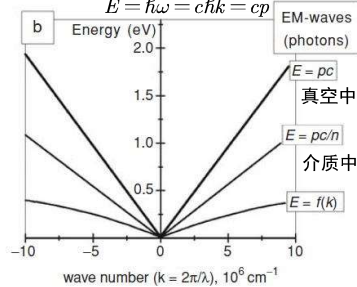
自由电子：



$$\text{色散曲线: } E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

光子：



$$\text{色散曲线: } \omega = ck \text{ 真空中}$$

$$\omega = ck/n(\omega) \text{ 介质中}$$

Dispersion curve

绝缘介质、金属 09

## 2. 态密度

同理，对于二维（边长为L的正方形）、三维（边长为L的立方体）有：

二维

三维

$$k \text{ 取值: } k_x = n_x \frac{\pi}{L}, k_y = n_y \frac{\pi}{L} \quad k_x = n_x \frac{\pi}{L}, k_y = n_y \frac{\pi}{L}, k_z = n_z \frac{\pi}{L}$$

k空间离散

单元长度

$$\Delta k_x = \Delta k_y = \frac{\pi}{L}$$

$$\Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = \frac{\pi}{L}$$

单个模式k

空间体积：

$$V_k = \frac{\pi^2}{L^2}$$

$$V_k = \frac{\pi^3}{L^3}$$

$$k - k + dk \text{ 的状态数 } \frac{1}{4} \cdot \frac{2\pi k dk}{V_k} = \frac{k L^2}{2\pi} dk \quad \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{V_k} = \frac{k^2 L^3}{2\pi^2} dk$$

极坐标

$k_i > 0$

球坐标

11

## 2. 态密度

对自由空间光， $\omega = ck$

考虑线偏振光的两种偏振方向，需要对态密度乘以2：

$$D(k) dk = \frac{k^2}{\pi^2} dk$$
$$\Rightarrow k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}, dk = \frac{1}{c} d\omega$$

光子态密度：

$$D(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$$

对自由空间电子，考虑电子自旋：

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, dk = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} dE, k = \frac{p}{\hbar}, dk = \frac{1}{\hbar} dp$$

电子态密度：

$$D^e(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2} E^{1/2}}{\hbar^3}, D^e(p) = \frac{8\pi p^2}{\hbar^3}$$

一般量子力学粒子：

$$D(E) = \frac{8\pi m^{3/2} E^{1/2}}{\sqrt{2}\hbar^3}, D(p) = \frac{4\pi p^2}{\hbar^3}$$

Density of state (DOS)

13

## 1. 波与色散曲线

电子、光子、声子、激子、表面等离激元极化子

经典力学中的波

量子力学中的粒子

德布罗意关系： $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \lambda = \frac{h}{p}$   $E = \hbar\omega$ , 波动性 粒子性

约化普朗克常数： $\hbar \equiv h/2\pi$

真空中的平面波

电磁波

德布罗意物质波

真空中： $\omega = ck$   
 $v = \frac{\omega}{k} = \frac{d\omega}{dk} = c$

真空中： $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$   
 $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$  注：低速牛顿力学

$$\text{相速度: } v = \frac{\lambda}{T} = \lambda \nu = \frac{\omega}{k}$$

$$\text{群速度: } v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\text{一维: } v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

介质中：???  
金属、介质、...  
 $\omega(k)$

介质中：半导体能带  
 $E(k)$

$$\text{相对论: } E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2$$

Mechanic Wave & Quantum particle

08

## 2. 态密度

量子物理学中基本概念之一

- 每一种波在有限空间或者有限范围（频率、波矢、波长）内模式数有限
- 量子力学粒子被看作一种波，在有限空间，粒子存在有限数目的态 (State)
- 这些态是能量、动量、波长、波数的函数  $D(k), D(E), D(p), D(\lambda)$

限制在有限空间中稳定存在的波满足驻波条件

一维：

$$L = \frac{1}{2} \lambda_n \quad (n=1, 2, 3, \dots) \Rightarrow \lambda_n = \frac{2L}{n}$$

对应离散的波矢  $k_n$ ：

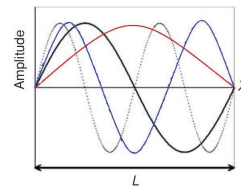
$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{\pi}{L} n \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

每一个  $k_n$  代表一种状态，在  $k$  空间占据的体积为：

$$V_k = \Delta k = \frac{\pi}{L}$$

因此， $k - k + dk$  区间的状态数为：

$$\frac{dk}{V_k} = \frac{L}{\pi} dk$$



Density of state (DOS), Reciprocal space

10

## 2. 态密度

单位体积、单位波数对应的态的数量称为态密度(k空间态密度)，记为  $D(k)$

$$\text{一维: } D(k) dk = \frac{1}{\pi} dk \quad D_{1D}(k) = \frac{1}{\pi}$$

令  $L=1$

$$\text{二维: } D(k) dk = \frac{k}{2\pi} dk \quad D_{2D}(k) = \frac{k}{2\pi}$$

$$\text{三维: } D(k) dk = \frac{k^2}{2\pi^2} dk \quad D_{3D}(k) = \frac{k^2}{2\pi^2}$$

态密度衍生：

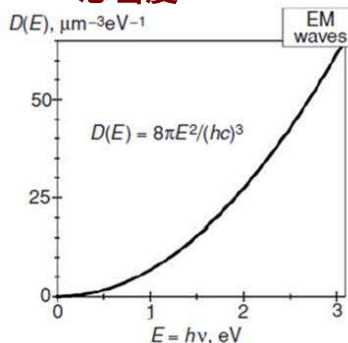
$$D(\omega) = D(k) \frac{dk}{d\omega}, D(E) = D(k) \frac{dk}{dE}, D(p) = D(k) \frac{dk}{dp}, D(\lambda) = D(k) \frac{dk}{d\lambda}$$

思考题：周期性边界条件如何推导？

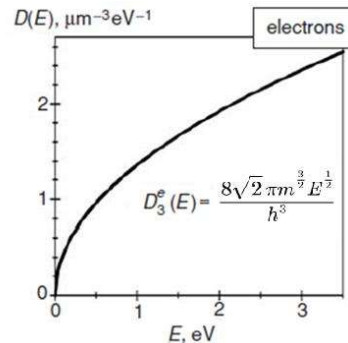
$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \Delta k_x = \frac{2\pi}{L} ?$$

12

## 2. 态密度



电磁波



自由电子

Density of state (DOS)

14

## 2. 态密度

在频率为  $\omega$  能量密度:

$$U(\omega)d\omega = E(\omega)D(\omega)F(\omega)d\omega$$

单个光子能量  $E = \hbar\omega$

态密度  $D(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$

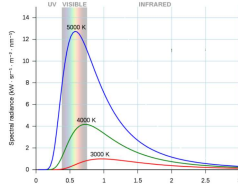
分布函数  $F(\omega) = \left( \exp \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1 \right)^{-1}$

玻色-爱因斯坦分布函数

光子能量密度:

$$U(\omega) = \hbar\omega \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1}$$

黑体辐射公式



Density of state (DOS)

15

## 3. 波函数与薛定谔方程

波动力学中的波函数: 
$$\begin{cases} |\Psi(\xi)|^2 d\xi = \Psi^*(\xi)\Psi(\xi)d\xi \\ \int |\Psi(\xi)|^2 d\xi = 1 \\ \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 \end{cases}$$

薛定谔方程:  $\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$

不含时哈密顿量即为能量算符:  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r})$

静态问题:  $\Psi(\xi, t) = \psi(\xi)\varphi(t)$   $\varphi(t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$

定态问题  
本征值问题  
固有值问题

$$\hat{H}\psi(\xi) = E\psi(\xi)$$

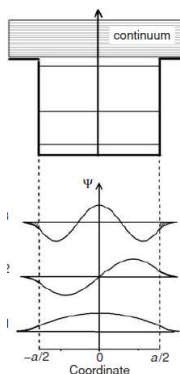
18

## 波的基本属性和量子力学粒子

- ▶ 波长与色散曲线
- ▶ 态密度
- ▶ 波函数与薛定谔方程
- ▶ 势场中的量子力学粒子
  - ▶ 无限势垒
  - ▶ 有限势垒
  - ▶ 量子谐振子
  - ▶ 球对称势场中的粒子
  - ▶ 库仑势中的电子
- ▶ 周期结构中的电子与量子限域效应

21

## 4.2 有限势垒中的量子力学粒子



1. 波函数扩展到经典禁区
2. 随着  $n$  增加波函数扩展增加
3. 色散曲线变为离散的点、线
4. 在势阱中发现粒子的几率总是小于1, 并且随能量增加而减小

势阱内的总态个数  $n$  满足:

$$E_n - U_0 < 0 \Rightarrow a\sqrt{2mU_0} > \pi\hbar(n-1).$$

$n=1$  该式总是成立, 至少有一个态在势阱中

23

## 不同维度的态密度 (微观粒子)

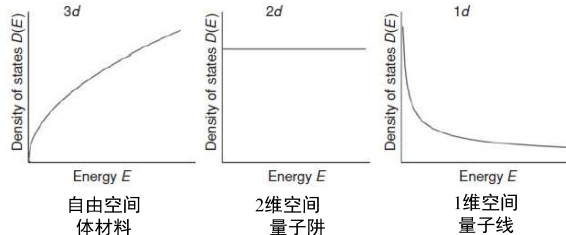
自由空间  $D_3(E) = \frac{8\pi m^{3/2} E^{1/2}}{\sqrt{2} \hbar^3}$

1维空间  $D_1(E) = D_1(k) \frac{dk}{dE} = \frac{\sqrt{2m} E^{-1/2}}{\hbar}$

2维空间  $D_2(E) = D_2(k) \frac{dk}{dE} = \frac{2\pi m}{\hbar^2}$

量子力学粒子态密度:

$$D_d(E) = \text{const} \frac{m^{d/2} E^{d/2-1}}{\hbar^d}$$



## 3. 波函数与薛定谔方程

对一维U势场中  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U_0 \psi(x) = E \psi(x)$

令:  $k^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0$$

$\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$  平面波!

粒子性: 恒定势场中的德布罗意波长

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - U_0)}}$$

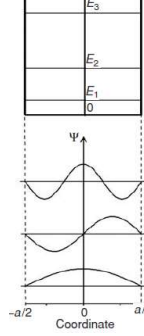
$E - U_0$  对应粒子的动能

16

19

## 4.1 无限势场中的量子力学粒子

薛定谔方程:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$



势场对称:  $U(x) = U(-x)$

几率对称:  $|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$

$\psi(x) = \pm \psi(-x)$

$$\psi^- = \frac{\sqrt{2}}{a} \cos \frac{\pi n}{a} x \quad (n = 1, 3, 5, \dots)$$

$$\psi^+ = \frac{\sqrt{2}}{a} \sin \frac{\pi n}{a} x \quad (n = 2, 4, 6, \dots)$$

分离能级:  $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$

三维:  $E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$

22

## 4.3 量子谐振子

A harmonic oscillator is a quantum particle moving in a field with potential being a square function of coordinate. In a one-dimensional problem this means (Fig. 2.5),

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (2.81)$$

The steady-state Schrödinger equation has the form,  $k^2 = 2mE/\hbar^2, \lambda = m\omega/\hbar$

$$\nabla^2 \psi(x) + (k^2 - \lambda^2 x^2) \psi(x) = 0, \quad (2.82)$$

$\psi_n(x) = u_n(x) \exp(-\lambda^2 x^2/2), \quad u_n(x):$  厄密多项式

$\psi_0(x) = \exp(-\lambda^2 x^2/2),$

$\psi_1(x) = \sqrt{2\lambda} \cdot x \exp\left(-\frac{1}{2} \lambda^2 x^2\right),$

$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - 2\lambda^2 x^2) \exp\left(-\frac{1}{2} \lambda^2 x^2\right).$

$\Delta E = \hbar\omega$

$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad \text{where } n = 0, 1, 2, \dots$

$E_0 = \hbar\omega/2$

24

4.3 量子谐振子

- 量子谐振子模型在量子物理中非常重要。
- 可以作为对复杂的势分布在局域极小值的一种近似。
- 将势函数在极小值 $x_0$ 附近做级数展开

$$U(x) = U(x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dx^2} (x - x_0)^2 + \dots$$

- 忽略高阶项，和量子谐振子的势函数一致  $U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ .
- 晶体中原子的振动可以看做是在这种势能下的振动，这种振动的量子称为声子。
- 晶格振动的能量永远不为零
- 轻原子He难以液化，永远不能形成固体

液氮：4.2K

Quantum harmonic oscillator

4.4 球对称势垒中的粒子

系统的状态由三个量子数表征：  
 $n$ : 主量子数； $l$ : 轨道量子数； $m$ : 磁量子数

角动量满足：

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

角动量  $z$  分量满足：

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

对于确定的  $l$ , 简并度  $2l+1$

系统的能量由势函数  $U(r)$  决定，考虑无限深球形势阱：

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a \\ \infty, & r > a \end{cases}$$

对应的能量表达式为：

$$E_{nl} = \frac{\chi_{nl}^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$\chi_{nl}^2$  为球贝塞尔函数的根， $n$  表示第几个根， $l$  为对应的阶数

4.5 库仑势场中的电子

一个电子同具有相同电荷量带正电的粒子间的库仑势为：

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}$$

对应波函数的径向部分满足方程：

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \varepsilon + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0$$

其中引入了无量纲的长度和能量：

$$\rho = \frac{r}{a^0}, \quad \varepsilon = \frac{E}{E^0}$$

其中  $a^0$  和  $E^0$  分别称为单位原子长度和单位原子能量：

$$a^0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} \approx 5.292 \times 10^{-2} \text{ nm}$$

$$E^0 = \frac{e^2}{2a^0} \approx 13.6 \text{ eV}$$

能级满足：

$$\varepsilon = -\frac{1}{(n_r + l + 1)^2} = -\frac{1}{n^2}$$

$n_r$  波函数节点数



4.5 库仑势场中的电子

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{r}$$

质心的运动

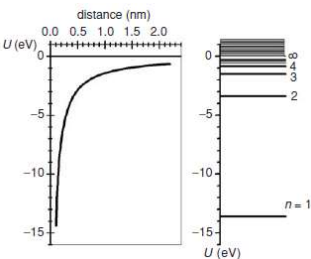
二体的内部状态，球形势场

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2} \text{ for } E < 0$$

$$Ry = \frac{e^2}{2a_B}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$Ry$  里德伯常数 —— 最低能量状态的离化能  
 $a_B$  氢原子的玻尔半径

用处：库伦势场——电子/空穴在纳米晶的建模  
氢原子模型——纳米晶中的激子的建模



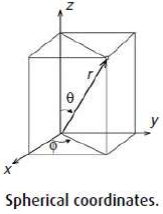
4.4 球对称势垒中的粒子

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r)$$

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$



Spherical coordinates.

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

采用分离变量法求解薛定谔方程，令  $\Psi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ ,  $R(r) = \frac{u(r)}{r}$

解的形式为： $\Psi_{n,l,m} = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  为球贝塞尔函数

$u(r)$  满足方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[ U(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \right] u = Eu$$

Degenerate state

4.4 球对称势垒中的粒子

$$E_{nl} = \frac{\chi_{nl}^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad L=0, \text{ 同一维无限深势阱一致}$$

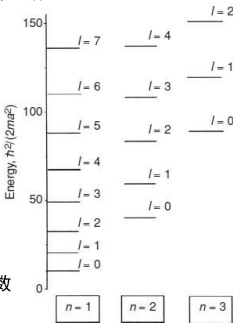
Table 2.1. Roots of the Bessel functions $\chi_{nl}$			
$l$	$n=1$	$n=2$	$n=3$
0	3.142 ( $\pi$ )	6.283 ( $2\pi$ )	9.425 ( $3\pi$ )
1	4.493	7.725	10.904
2	5.764	9.095	12.323
3	6.988	10.417	
4	8.183	11.705	
5	9.356		
6	10.513		
7	11.657		

$l=0, 1, 2, 3$  对应字母标记  $s, p, d, f$

除了量子数  $n, l, m$  外，考虑电子自旋，引入  $s$ : 自旋量子数

球对称势，氢原子，其它：

原子中的电子  
固体中的杂质中心  
晶体中的激子  
量子点中的电子



Degenerate state

4.5 库仑势场中的电子

对于  $n=1, l=0$  的  $1s$  态，波函数具有球对称性，且  $a^0$  是找到电子概率最大的壳层半径。这个球近似为真实的原子，该半径称为玻尔半径

考虑最简单的原子：氢原子。两体问题，对应的哈密顿量：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_0} \nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|}$$

引入相对坐标  $r$  和质心坐标  $R$ ：

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e, \quad \mathbf{R} = \frac{m_0 \mathbf{r}_e - M_0 \mathbf{r}_p}{m_0 + M_0}$$

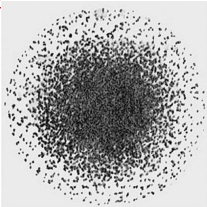
引入总质量和约化质量：

$$M = m_0 + M_0, \quad \mu = \frac{m_0 M_0}{m_0 + M_0}$$

$m_0$  电子静质量， $M_0$  中心质子质量

哈密顿量可改写为：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{r}$$



自由空间量子力学粒子运动规律



受限空间量子力学粒子运动规律



周期势场中量子力学粒子运动规律



波的基本属性和量子力学粒子

- ▶ 波长与色散曲线
- ▶ 态密度
- ▶ 波函数与薛定谔方程
- ▶ 势场中的量子力学粒子
  - ▶ 无限势垒
  - ▶ 有限势垒
  - ▶ 量子谐振子
  - ▶ 球对称势场中的粒子
  - ▶ 库仑势中的电子
- ▶ 周期结构中的电子与量子限域效应

周期势场中的粒子运动规律

1/m\* = 1/h^2 \* d^2E/dk^2 ≡ d^2E/dp^2 = const

E = p^2/2m

位于周期势场中的粒子“质量”可以“重”或“轻”于其位于自由空间甚至是负质量（粒子动量在外加势场中减小）例如：势垒，传递给晶体中正离子

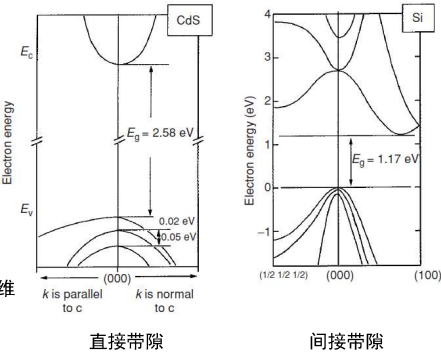
- ▶ 粒子在周期势场中的运动用调制的平面波描述
- ▶ 粒子态用准动量描述，相隔一个倒格矢的动量是等效的
- ▶ 能量谱具有间隙的准连续带
- ▶ 无外力作用下，周期势场中的粒子显示准自由运动
- ▶ 外力作用下，粒子行为用有效质量描述即质量重整化

固体中能带

存在未完全填充的能带：导体  
满带不导电；半导体绝缘体  
实际材料能带结构复杂，有效质量不是常数  
重要的物理事件往往发生在导带底与价带顶附近，可以近似用恒定有效质量描述。

实际能带：三维

作图：沿高对称点连线展开为一维



直接带隙

间接带隙

布洛赫波

薛定谔方程：-ħ^2/2m d^2ψ(x)/dx^2 + U(x)ψ(x) = Eψ(x)

周期势场：U(x) = U(x+a)

ψ(x) = e^(ikx) u\_k(x), u\_k(x) = u\_k(x)

第一布里渊区：-π/a < k < π/a

ψ(r) = e^(ik·r) u\_k(r), u\_k(r) = u\_k(r+T)

第二布里渊区：-2π/a < k < -π/a, π/a < k < 2π/a

在布里渊区中心和边界

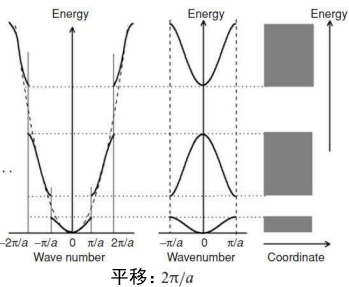
k\_n = π/a \* n; n = ±1, ±2, ±3, ...

dE/dk|\_k=0 = 0

E(k) = E\_0 + (k - k\_0) dE/dk|\_k=k\_0 + 1/2 (k - k\_0)^2 d^2E/dk^2|\_k=k\_0 + ...

E\_0 = 0, k\_0 = 0

E(k) = 1/2 ħ^2 d^2E/dk^2|\_k=0 = 1/m\* = 1/ħ^2 d^2E/dk^2 ≡ d^2E/dp^2 = const



平移：2π/a

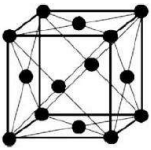
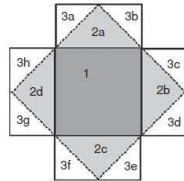
Bloch Wave

倒空间

b\_1 = 2π/V\_0 \* a\_2 × a\_3, b\_2 = 2π/V\_0 \* a\_1 × a\_3, b\_3 = 2π/V\_0 \* a\_2 × a\_1

V\_0 = a\_1 · (a\_2 × a\_3)

V\_0 = b\_1 · (b\_2 × b\_3) = 8π^3/V\_0



面心立方

一维周期势场中：波矢相差 2nπ/a 的态是等效的  
三维周期势场中：波矢差值为倒空间格子矢量是等效的

有效质量：

m\*\_{ij} = 1/ħ^2 \* ∂^2E/∂k\_i∂k\_j

二阶量子

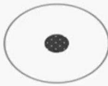
m\*\_{ij} = m\*\_{ji}

m\*\_{ij} a = F

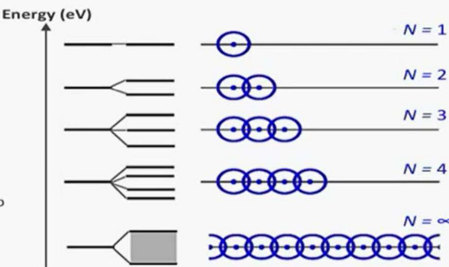
面心立方第一布里渊区

Reciprocal Space

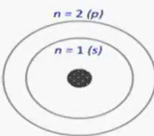
Splitting of atomic energy levels into bands



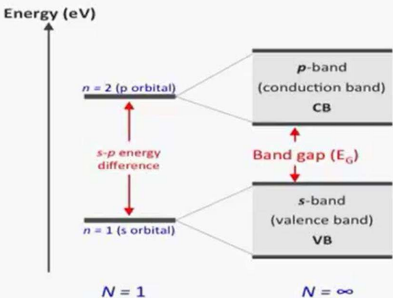
Formation of energy bands: Let's consider, a solid made up of a substance that involves only one type of atomic orbital.



Splitting of atomic energy levels into bands



Formation of energy bands: Let's now consider, a solid made up of a substance that involves two atomic orbital; s and p.



Crystals of group IV elements			Crystals of III-V compounds		
Crystal	Band gap energy E <sub>g</sub>	Light wavelength corresponding to E <sub>g</sub>	Crystal	Band gap energy E <sub>g</sub>	Light wavelength corresponding to E <sub>g</sub>
Si*	1.14 eV	1.1 μm	GaN	3.50 eV	354 nm
Ge*	0.67 eV	1.85 μm	GaP*	2.26 eV	550 nm
			GaAs	1.43 eV	870 nm
			InAs	0.42 eV	2.95 μm
			InSb	0.18 eV	6.9 μm
Crystals of II-VI compounds			Crystals of I-VII compounds		
Crystal	Band gap energy E <sub>g</sub>	Light wavelength corresponding to E <sub>g</sub>	Crystal	Band gap energy E <sub>g</sub>	Light wavelength corresponding to E <sub>g</sub>
ZnS	3.68 eV	337 nm	LiF	12 eV	100 nm
ZnSe	2.80 eV	440 nm	NaCl	>4 eV	<300 nm
ZnTe	2.25 eV	550 nm	CuCl	3.2 eV	390 nm
CdS	2.58 eV	480 nm	CuBr	2.9 eV	420 nm
CdSe	1.84 eV	670 nm	Crystals of IV-VI compounds		
CdTe	1.6 eV	770 nm	PbS	0.41 eV	3.0 μm
HgTe	0.15 eV	8.2 μm	PbSe	0.28 eV	4.4 μm

\* Indirect-gap materials

•同一族内，随原子序数的增加，带隙减小（高原子序数，库伦屏蔽）

•不同族间，共价键到离子键（离子键—强库伦势场）

## 自由空间量子力学粒子运动规律

态密度

## 受限空间量子力学粒子运动规律

库伦势场中导出玻尔半径

## 周期势场中量子力学粒子运动规律

有效质量

量子阱、量子线、量子点

## 固体中的量子限域效应

限域效应

电子：几何尺度——电子德布罗意波长  
激子：几何尺度——激子玻尔半径

假定电子的动能用温度度量

$$k_B T = \frac{p^2}{2m_e^*}, \quad p = \frac{h}{\lambda_e}$$

$$\text{电子的德布罗意波长} \quad \lambda_e = \frac{h}{\sqrt{2m_e^* k_B T}}$$

Table 4.3. Lattice constants and electron de Broglie wavelengths at room temperature for different semiconductor crystals

Material	Electron mass	Electron de Broglie wavelength $\lambda_e$ (nm)	Lattice constant $a_L$ (nm)
SiC	$0.41 m_0$	11	0.308
Si	$0.08 m_0$	26	0.543
GaAs	$0.067 m_0$	28	0.564
Ge	$0.19 m_0$	16	0.564
ZnSe	$0.15 m_0$	19	0.567
InSb	$0.014 m_0$	62	0.647
CdTe	$0.1 m_0$	23	0.647
In vacuum	$m_0$	7.3	

真空中室温下具有热振动能的电子德布罗意波长  $\lambda_e = 7.3$  nm

## 固体中的量子限域效应

量子阱

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{L_x L_y L_z}} \sin(k_n z) \exp(i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{r}), \quad k_n = \frac{\pi}{L_z} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_e^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* L_z^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

量子线

$$\psi(\mathbf{r}) = 2 \sqrt{\frac{1}{L_x L_y L_z}} \sin(k_n^{(z)} z) \sin(k_m^{(y)} y) \exp(i k_x x)$$

$$k_n^{(z)} = \frac{\pi}{L_z} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad k_m^{(y)} = \frac{\pi}{L_y} m, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* L_z^2} n^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* L_y^2} m^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

量子点

$$\psi(\mathbf{r}) = 2 \sqrt{\frac{2}{L_x L_y L_z}} \sin(k_n^{(z)} z) \sin(k_m^{(y)} y) \sin(k_\ell^{(x)} x), \quad n, m, \ell = 1, 2, 3, \dots$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* L^2} (n^2 + m^2 + \ell^2), \quad n, m, \ell = 1, 2, 3, \dots$$

## 不同维度的态密度（微观粒子）

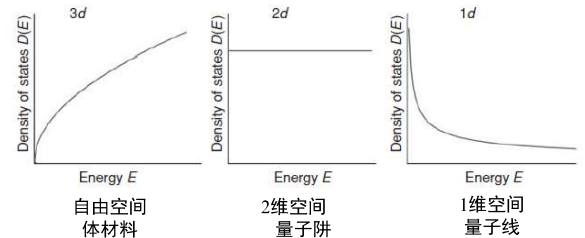
$$\text{自由空间} \quad D_3(E) = \frac{8\pi m^{3/2} E^{1/2}}{\sqrt{2} h^3}$$

$$\text{1维空间} \quad D_1(E) = D_1(k) \frac{dk}{dE} = \frac{\sqrt{2} m^{1/2} E^{-1/2}}{h}$$

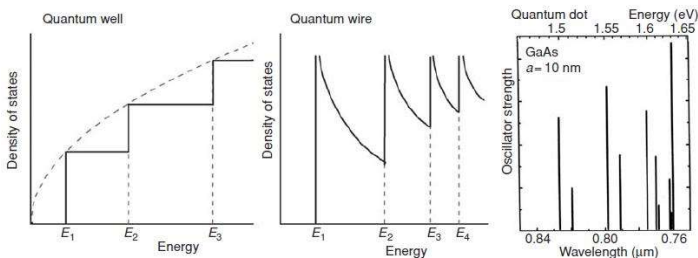
$$\text{2维空间} \quad D_2(E) = D_2(k) \frac{dk}{dE} = \frac{2\pi m}{h^2}$$

量子力学粒子态密度：

$$D_d(E) = \text{const} \frac{m^{d/2} E^{d/2-1}}{h^d}$$

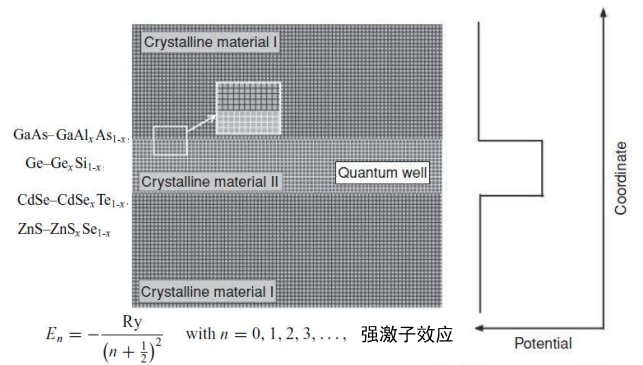


## 量子阱，量子线，量子点



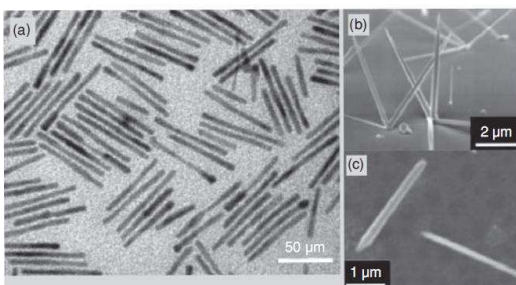
Electron density of states in a quantum well, in a quantum wire and calculated probabilities for optical transitions in a realistic GaAs quantum dot with size 10 nm. Data for GaAs dots are taken from Ref. [20].

## 量子阱



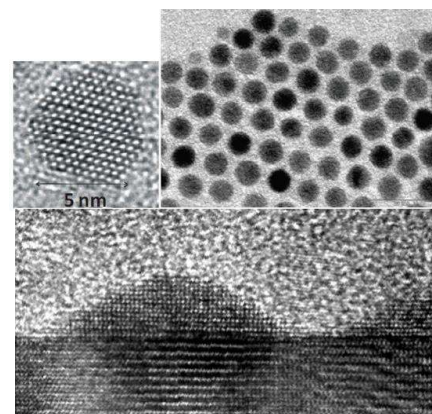
A heterostructure containing a narrow-band quantum well between two crystalline materials with wider band gaps (left) and the corresponding potential profile for an electron.

## 量子线



量子电导率： $G = \frac{e^2}{\pi h}$

## 量子点



液相合成的胶体量子点

气相制备的量子点  
GaN Quantum dot on AlN buffer layer