清华大学

半导体能带工程

2024 年春季学期

作业 2

廖汶锋 2024 年 3 月 15 日

2.1. 某一维晶格，晶格常数为 a，势函数为

$$V(x) = \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)(\text{eV})$$

利用近自由电子近似模型，计算其第一个和第二个禁带的带隙宽度。

解. 把势函数写成指数形式

$$V(x) = \frac{1}{2}\exp\left(-i\frac{4\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2}\exp\left(i\frac{4\pi x}{a}\right) \tag{1-1}$$

所以有 $\overline{V} = V_1 = 0$、$|V_2| = \frac{1}{2}\text{eV}$。

根据近自由电子模型，第一个和第二个禁带宽度为

$$E_{g,1} = 2|V_1| = 0\text{eV} \tag{1-2}$$

$$E_{g,2} = 2|V_2| = 1\text{eV} \tag{1-3}$$

2.2. 设有一晶格常数为 a 的一维晶体，电子在其中运动；

(1) 求布里渊区边界 $2\pi/a$ 处自由电子的能量；

(2) 请解释：布洛赫能带理论相比于索末菲自由电子模型，主要区别在前者增加的对什么的考虑；以及简单说明近自由电子近似的大致思想；

(3) 设周期性势场为

$$V(x) = -V_0\cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

其中 $V_0 > 0$，利用近自由电子近似，求布里渊区边界 π/a、$2\pi/a$、$3\pi/a$ 处的能隙；

解. (1) 第二布里渊区边界处自由电子能量表达式如下：

$$\begin{aligned} E^{(0)}_{\frac{2\pi}{a}} &= \overline{V} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \ (\text{不妨假设}\overline{V} = 0) \end{aligned} \tag{2-1}$$

(2) 布洛赫能带理论增加了两个因素，第一个是晶格离子势，即离子实对电子的势场作用；第二个是电子平均势，即大量电子之间的平均势场。

近自由电子近似建基于量子力学的微扰论上，以平均势场下的自由电子波函数（行波）作为基态波函数，以晶格的周期性势场作为微扰哈密顿量，求出其余階数的波函数及能量修正项。

(3) 利用积化和差公式化成指数形式

$$V(x) = -\frac{V_0}{4}\left[\exp\left(-i\frac{6\pi x}{a}\right) + \exp\left(-i\frac{2\pi x}{a}\right) + \exp\left(i\frac{2\pi x}{a}\right) + \exp\left(i\frac{6\pi x}{a}\right)\right] \tag{2-2}$$

所以布里渊区边界的能隙满足

$$E_{g,\frac{n\pi}{a}} = \frac{V_0}{2}(\delta_{n,-3} + \delta_{n,-1} + \delta_{n,1} + \delta_{n,\pm 3}) \tag{2-3}$$

因此，题中所求能隙为

$$E_{g,\frac{\pi}{a}} = E_{g,\frac{3\pi}{a}} = \frac{V_0}{2} \tag{2-4}$$

$$E_{g,\frac{2\pi}{a}} = 0 \tag{2-5}$$