第六节 晶体中电子的有效质量

1、波包的概念

微观粒子具有波粒二象性，粒子性的特征为局限于某一点，而波的特性为弥散在整个空间。二者在波包基础上统一

波包的定义：

设 $\vec{k}_0$ 对应于某平面波，波矢在

$$\vec{k}_0 - \frac{\Delta\vec{k}}{2} \rightarrow \vec{k}_0 + \frac{\Delta\vec{k}}{2}$$ 范围内的所有平

面波的迭加，称为波包。

以一维为例:

$$\psi(x,t)=\int_{k_0-\frac{\Delta k}{2}}^{k_0+\frac{\Delta k}{2}} a_k e^{i(kx-\omega t)}dk$$

设 Δk 很小，因为 a_k 为渐变函数

令 $a_k = a_{k_0}, k = k_0 + \xi$

$$\omega(k) = \omega(k_0 + \xi)$$

$$= \omega_0 + \left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)_{k_0} \xi + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}\right)_{k_0} \xi^2 + \cdots\cdots$$

$$\Downarrow$$

$$\psi(x,t) = a(k_0) \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} e^{i\left\{(k_0+\xi)x - [\omega_0 + (\frac{d\omega}{dk})_{k_0}\xi]t\right\}} d\xi$$

$$= a(k_0) \frac{\sin\{\frac{1}{2}[x - (\frac{d\omega}{dk})_{k_0} t]\}\Delta k}{\frac{1}{2}\{[x - (\frac{d\omega}{dk})_{k_0} t]\}\Delta k} e^{i(k_0 x - \omega t)}$$

$$\psi(x,t)=\boxed{a(k_0)\frac{\sin\{\frac{1}{2}[x-(\frac{d\omega}{dk})_{k_0}t]\}\Delta k}{\frac{1}{2}\{[x-(\frac{d\omega}{dk})_{k_0}t]\}\Delta k}}e^{i(k_0x-\omega t)}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\sin x}{x}$$ (极值点位于 $x=0$)

波包的极值位于: $x-(\frac{d\omega}{dk})_{k_0}t=0$

波包中心位置: $x=(\frac{d\omega}{dk})_{k_0}t$

波包的速度(群速): $v_g=\frac{x}{t}=(\frac{d\omega}{dk})_{k_0}$

2、晶体中电子的波包描述

晶体中电子的波包是Bloch波的迭加

$$\psi_{k_0}(x,t) = u_k(x)e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0-\frac{\Delta k}{2}}^{k_0+\frac{\Delta k}{2}} u_k(x)e^{i(kx-\omega t)}dk$$

因为 Δk 很小，所以 $u_k(x) \approx u_{k_0}(x)$

$$\Psi(x,t) = u_{k_0}(x)\frac{\sin\left(\dfrac{\Delta k}{2}\right)\left[x-\left(\dfrac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t\right]}{\dfrac{\Delta k}{2}\left[x-\left(\dfrac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t\right]}e^{i(k_0x-\omega_0 t)}$$

波包的中心位置： $x_0 = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} t$

波包的速度： $v(k) = \frac{x}{t} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}$

$$= \frac{1}{\hbar}\left[\frac{d(\hbar\omega)}{dk}\right]_{k_0} = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{dE}{dk}\right)_{k_0}$$

对于三维

速度：$$\vec{V}(\vec{k})=\frac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}}E(\vec{k})$$

$$\vec{V}(\vec{k})=\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_x}\hat{i}+\frac{\partial E}{\partial k_y}\hat{j}+\frac{\partial E}{\partial k_z}\hat{k}\right)$$

3、在外场作用下电子运动状态的变化

先以一维为例:

在外场作用下，外场对电子做功:

$$dW = Fdx = Fvdt = F\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}dt$$

外场对电子做功等于电子能量的变化:

$$dW = F\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}dt = dE$$

冲量定理:

$$F = \frac{dP}{dt}$$

$$F\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}dt = \frac{dE}{dk}dk \longrightarrow F = \frac{d(\hbar k)}{dt}$$

$$\boxed{\hbar k \text{ ----电子的准动量}}$$

在外场作用下，电子波矢发生变化

↓

速度发生变化，产生加速度

$$F=\frac{d(\hbar k)}{dt}$$

$$v=\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

$$F=\frac{d(\hbar k)}{dt} \qquad v=\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

加速度: $$\frac{dv}{dt}=\frac{dv}{dk}\frac{dk}{dt}=\frac{1}{\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{1}{\hbar}\frac{d(\hbar k)}{dt}$$

$$=\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}F=\frac{1}{m^*}F$$

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

m^*----电子的有效质量

电子的有效质量包含了电子的惯性质量和周期性势场的作用，与晶体的能带结构密切相关。

对于三维晶体，有效质量为 3×3

张量，其矩阵元为：

$$\frac{1}{m^*_{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}$$

$$\frac{1}{m^*_{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{bmatrix}$$

引入有效质量后，电子运动的描述:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m^*}\vec{F}$$ ----坐标空间

$$\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = \vec{F}$$ ----动量空间

4、讨论

(1)、电子的有效质量包含了周期性势场对电子的作用和电子的惯性质量两个部分，它与晶体的能带结构以及晶体的对称性密切相关。

(2)、在能带顶部，电子的有效质量为负值。在能带底部，电子的有效质量为正值。

(3)、电子有效质量为负值的物理解释

一方面，外场的作用电子获得动量，另一方面，电子受晶格散射而动量减小.

如果，电子从外场获得的动量大于电子传递给晶格的动量，则总体表现为：在外场的作用下，电子的动量增加，体现为$m^*>0$.

如果电子从外场获得的动量小于它传递给晶格的动量，则总体表现为：在外场的作用下，电子的动量反而减小，体现为$m^*<0$。