第四节 近自由电子近似

一、近自由电子模型

晶格周期性势场的振幅很小，晶体中电子可看成是处在平均势场中运动的自由电子受到微弱周期性势场的微扰。

采用量子力学的微扰理论处理

将势能函数$V(x)$按照晶格周期进行展开

$$V(x)=V_0+\sum_{n\neq 0}V_n e^{i\frac{2\pi}{a}nx}$$

取 $V_0=0$

根据微扰理论，零级近似波函数为平面波

分两种情况讨论：非简并微扰和简并微扰

1、非简并微扰

根据非简并微扰理论，电子的哈密顿量为：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

其中 $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

$$\hat{H}' = \sum_n V_n e^{i\frac{2\pi}{a}nx}$$

-----微扰

根据非简并微扰理论，电子的能量为：

$$E_k = E_k^{(0)} + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \cdots\cdots$$

$E_k^{(n)}$为第n级微扰能量。

若只取到二级近似，电子的能量为：

$$E_k = E_k^{(0)} + E_k^{(2)}$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_n \frac{2m|V_n|^2}{\hbar^2 k^2 - \hbar^2 (k - \frac{2\pi}{a} n)^2}$$

电子的波函数为：

$$\psi_k = \psi_k^0 + \sum_n \frac{H'_{kk'}}{E_k^0 - E_{k'}^0} \psi_{k'}^0(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} u(x)$$

其中， $u(x) = 1 + \sum_{n \neq 0} \frac{2mV_n^* e^{-i\frac{2\pi}{a}nx}}{\hbar^2 k^2 - \hbar^2 (k - \frac{2\pi}{a} n)^2}$

可以看出：电子波函数包含两个部分：

电子波函数由行进的平面波和

散射波迭加组成的。

第一部分为波矢为$\vec{k}$行进的平面波$\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$

第二部分为该平面波受到周期性势场的作用而产生的散射波，而且，

$$\frac{2mV_n^*}{\hbar^2k^2-\hbar^2(k-\frac{2\pi}{a}n)^2}$$代表相关散射波成分的振幅。

下面，看以下极端情况：波矢k在布里渊区边界附近取值的情况：

当$k=\frac{K_n}{2}=\frac{n\pi}{a}$时，

$---$在布里渊区边界取值，

这时，$\psi_k^{(2)}\rightarrow\infty$

非简并微扰失效。

即使波矢k在布里渊区边界附近取值时，

$$k=\frac{K_n}{2}(1+\Delta),\Delta<<1$$时，散射波也很强，

非简并微扰也失效。

因此，当波矢k在布里渊区边界附

近取值时，需要采用简并微扰来处理。

2、简并微扰

当波矢k在布里渊区边界附近取值时，需要采用简并微扰来处理。即：

$$当k = \frac{n\pi}{a}(1+\Delta)$$

$$k' = -\frac{n\pi}{a}(1+\Delta)时$$

$$E = \frac{1}{2}\left\{E_k^{(0)} + E_{k'}^{(0)} \pm \sqrt{(E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)})^2 + 4|V_n|^2}\right.$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{a})^2(1+\Delta^2) \pm \sqrt{|V_n|^2 + 4\Delta^2\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{a})^2\right]^2}$$

令：$T_n = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{a})^2$代表自由电子

在波矢$k = \frac{n\pi}{a}$状态下的动能，则：

$$E = T_n(1+\Delta^2) \pm \sqrt{|V_n|^2 + 4T_n^2\Delta^2}$$

下面，我们分两种情况来加以讨论:

(1)、当$\Delta = 0$时$---k$在

布里渊区边界上取值

$$E = T_n \pm |V_n|$$

因散射波的相互作用很强，能量为T_n

(即：$k=\dfrac{n\pi}{a}$及$k'=-\dfrac{n\pi}{a}$)的两个状态变成两个不同的

能量状态，即：一个状态的能量为$T_n-|V_n|$,另一个状态

的能量为$T_n+|V_n|$,其间的能量差为：

$E_g=2|V_n|$,这个能量差即为禁带宽度。

这表明：禁带发生在$k=\frac{n\pi}{a}$和$k^{'}=-\frac{n\pi}{a}$处，

即：布里渊区边界处，

禁带的宽度等于周期性势场的$Fourier$展开式

中波矢为$k_n=\frac{2n\pi}{a}$的$Fourier$分量V_n的2倍。

（2）、当$\Delta \neq 0$，但Δ很小

先假定：动能大于势能的微扰，

$$T_n\Delta << |V_n| < T_n, (\text{由于}\Delta\text{很小})$$

将$E = T_n(1+\Delta^2) \pm \sqrt{|V_n|^2 + 4T_n^2\Delta^2}$的根号部

分展开成$Taylor$级数，并保留到二次方项

$$\sqrt{\left|V_n\right|^2 + 4T_n^2\Delta^2} = \left|V_n\right|\sqrt{1+\frac{4T_n^2\Delta^2}{\left|V_n\right|^2}}$$

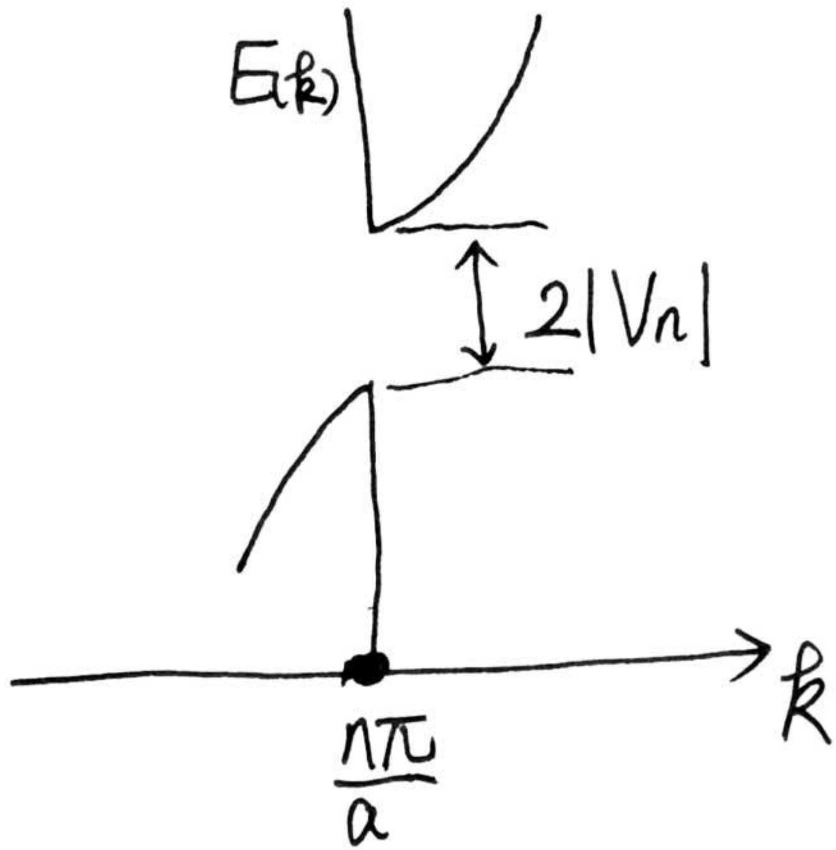
$$\approx \left|V_n\right|\left[1+\frac{2T_n^2\Delta^2}{\left|V_n\right|^2}\right]$$

则$$E = T_n(1+\Delta^2) \pm |V_n|\left[1+\frac{2T_n^2\Delta^2}{|V_n|^2}\right]$$

即$$\begin{cases} E_+ = T_n + |V_n| + T_n\left[1+\dfrac{2T_n}{|V_n|}\right]\Delta^2 \\ E_- = T_n - |V_n| + T_n\left[1-\dfrac{2T_n}{|V_n|}\right]\Delta^2 \end{cases}$$

由于$T_n > |V_n|$,所以$1-\frac{2T_n}{|V_n|}<1$,因此,E_-的Δ^2项前系数是负号，而E_+的Δ^2项前系数是正号.

在禁带之上的能带底部能量E_+随相对波矢Δ的变化关系是向上弯的抛物线，而在禁带之下的能带顶部能量E_-随相对波矢Δ的变化关系是向下弯的抛物线。



在布里渊区附近的

E(k)曲线.