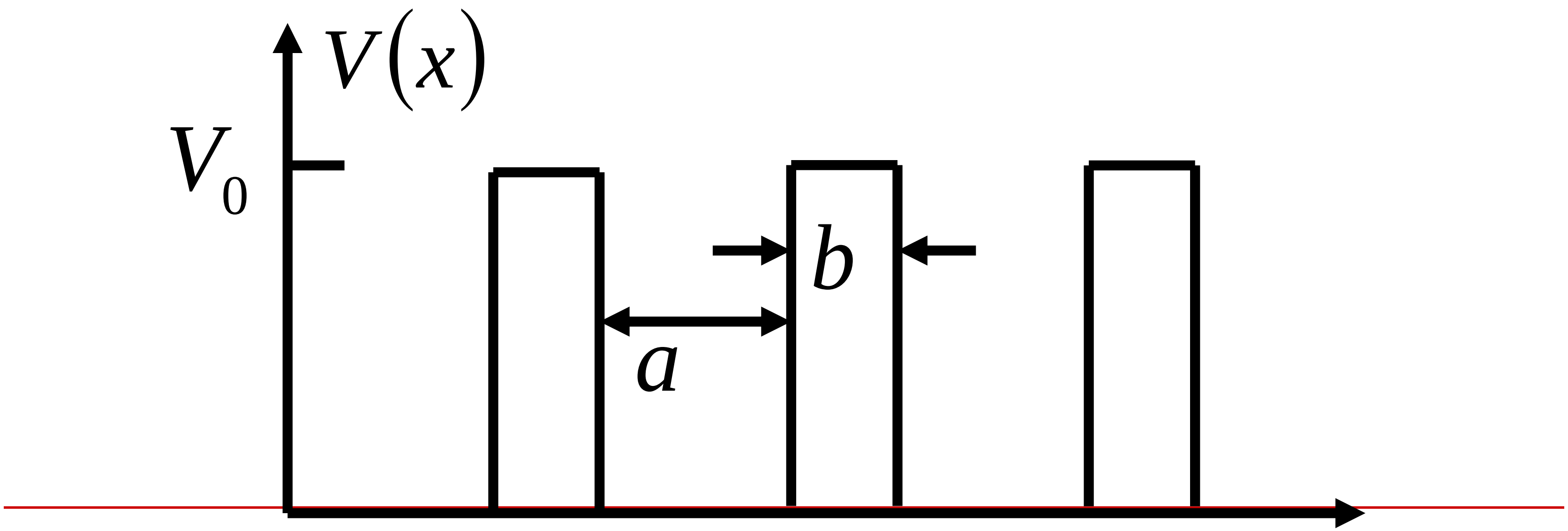
第二节　Kronig-Penney模型

Kronnig-Penney提出：

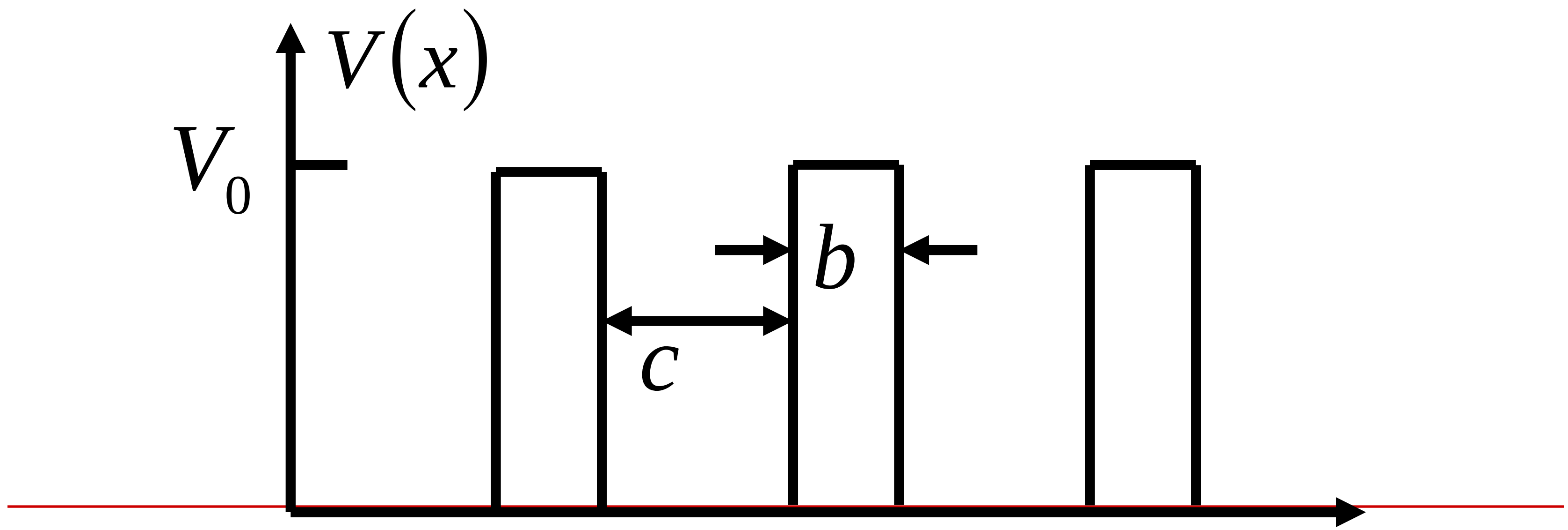
一维周期性方势阱模型



势阱宽度 c　　　势垒宽度 b

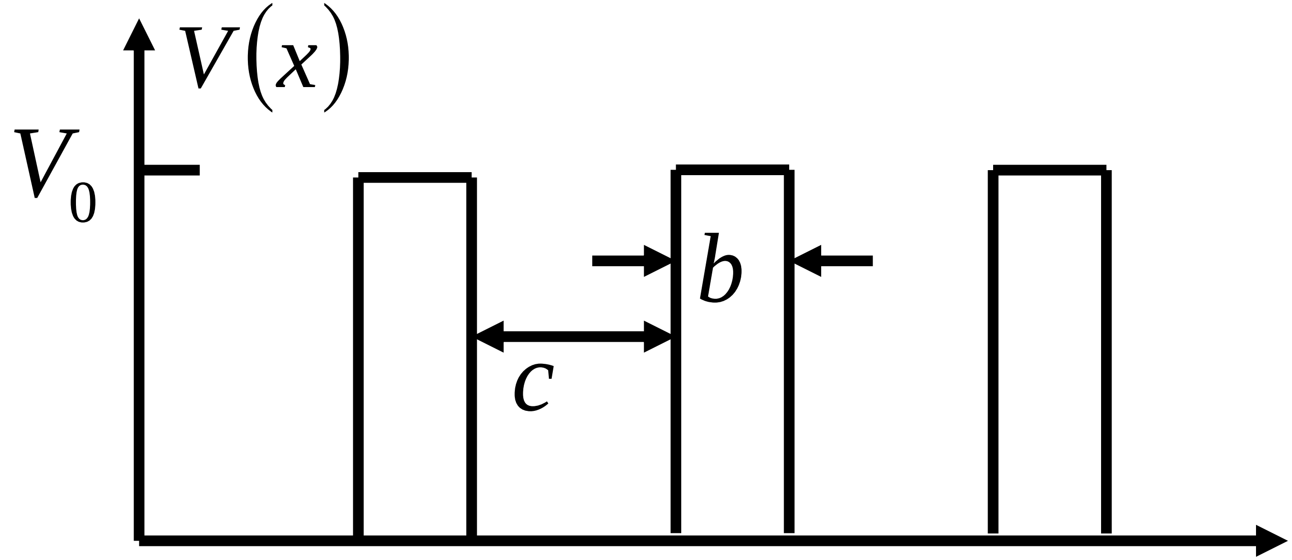
晶体势场的周期为 $a = b + c$

势阱的势能为 0　　　势垒的高度为 V_0



$$V(x)=\begin{cases}0 & (0<x<c)\\ V_0 & (-b<x<0)\end{cases}$$

且 $V(x)=V(x+na)$ （n为整数）



- 根据Bloch定理，电子波函数为：

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x) \qquad \text{且 } u(x) = u(x+na)$$

将波函数代入Schrodinger方程：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$

求解Schrodinger方程，得:

$$\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\sinh(\beta b)\sin(\alpha c)+\cosh(\beta b)\cos(\alpha c)$$

$$=\cos(ka)$$

$$\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\sinh(\beta b)\sin(\alpha c)+\cosh(\beta b)\cos(\alpha c)$$

$$=\cos(ka)$$

$$\alpha^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)=\frac{2m}{\hbar^2}V_0-\alpha^2$$

α与能量有关，这是一个决定粒子能量的超越方程。

为了更加清晰得出一些有用信息，对这个方程做简化

假设 $V_0 \to \infty, b \to 0, (c \to a)$

但保持 $V_0 b$ 为有限值

令 $\lim(\frac{\beta^2 ab}{2}) = P$ 由于 $\beta b = \sqrt{\frac{2Pb}{a}} << 1$

$$\downarrow$$

$\sinh(\beta b) \approx \beta b \quad \cosh(\beta b) \approx 1$

能量超越方程:

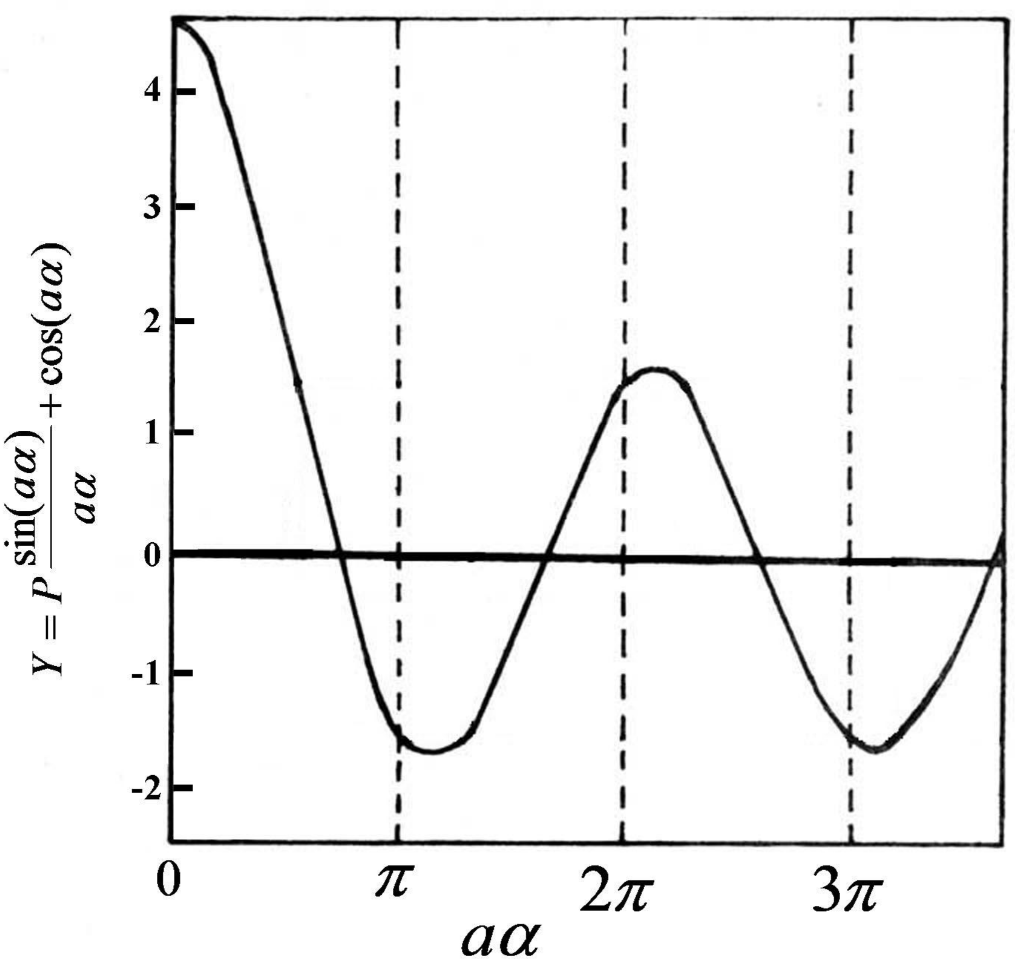
$$\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\sinh(\beta b)\sin(\alpha c)+\cosh(\beta b)\cos(\alpha c)$$

$$=\cos(ka)$$

$$\Big\downarrow \text{简化}$$

$$P\frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha}+\cos(a\alpha)=\cos(ka)$$

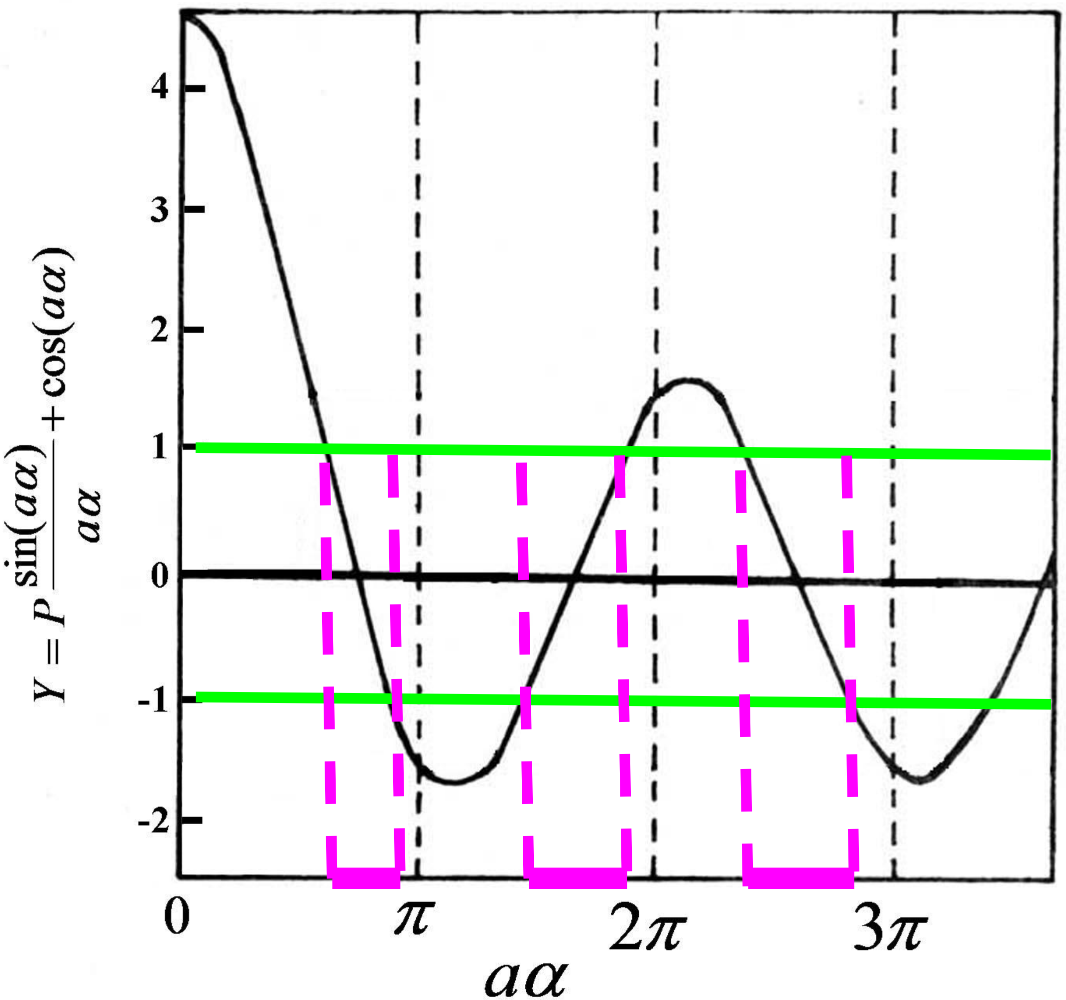
令： $$Y = P\frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha} + \cos(a\alpha)$$



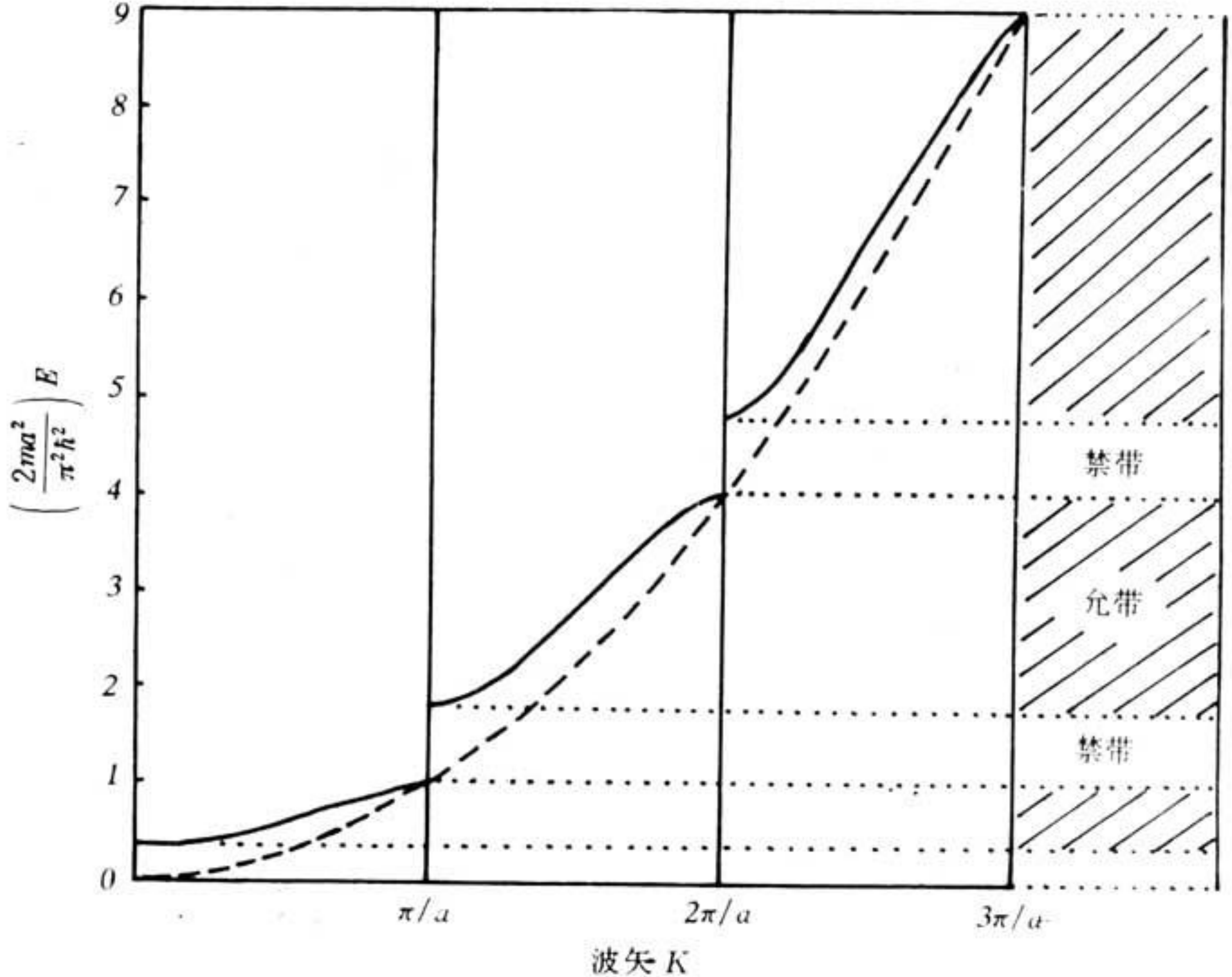
$$P\frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha}+\cos(a\alpha)=\cos(ka)$$

$$-1\le\cos(ka)\le 1$$

并非所有的 $a\alpha$ 值都满足方程



由于 $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ 代表能量，表明：并不是所有的能量状态都是许可的，许可的能量状态形成准连续的能带，在许可能带之间存在不许可的能量状态，称为禁带.



9
8
7
6
5
4
3
2
1
0
$\left(\frac{2ma^2}{\pi^2\hbar^2}\right)E$
禁带
允带
禁带
π/a
$2\pi/a$
$3\pi/a$
波矢 K

结　论

在周期性势场中运动的电子，其 $E(\vec{k})$ 关系具有如下特点：

1、许可能级形成能带，两相邻能带间存在能量不许可区域，称为禁带。

2、 电子能量 E 是波矢 $\vec{k}$ 的偶函数

$$P\frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha}+\cos(a\alpha)=\cos(ka)$$

因 $\cos(ka)=\cos(-ka)$ 且$\alpha^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

所以 $E(-k)=E(k)$

3、能带分界点(禁带位置)出现在

$$k = \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{2\pi}{a}, \cdots\cdots$$

$$\boxed{\text{禁带出现在布里渊区边界}}$$

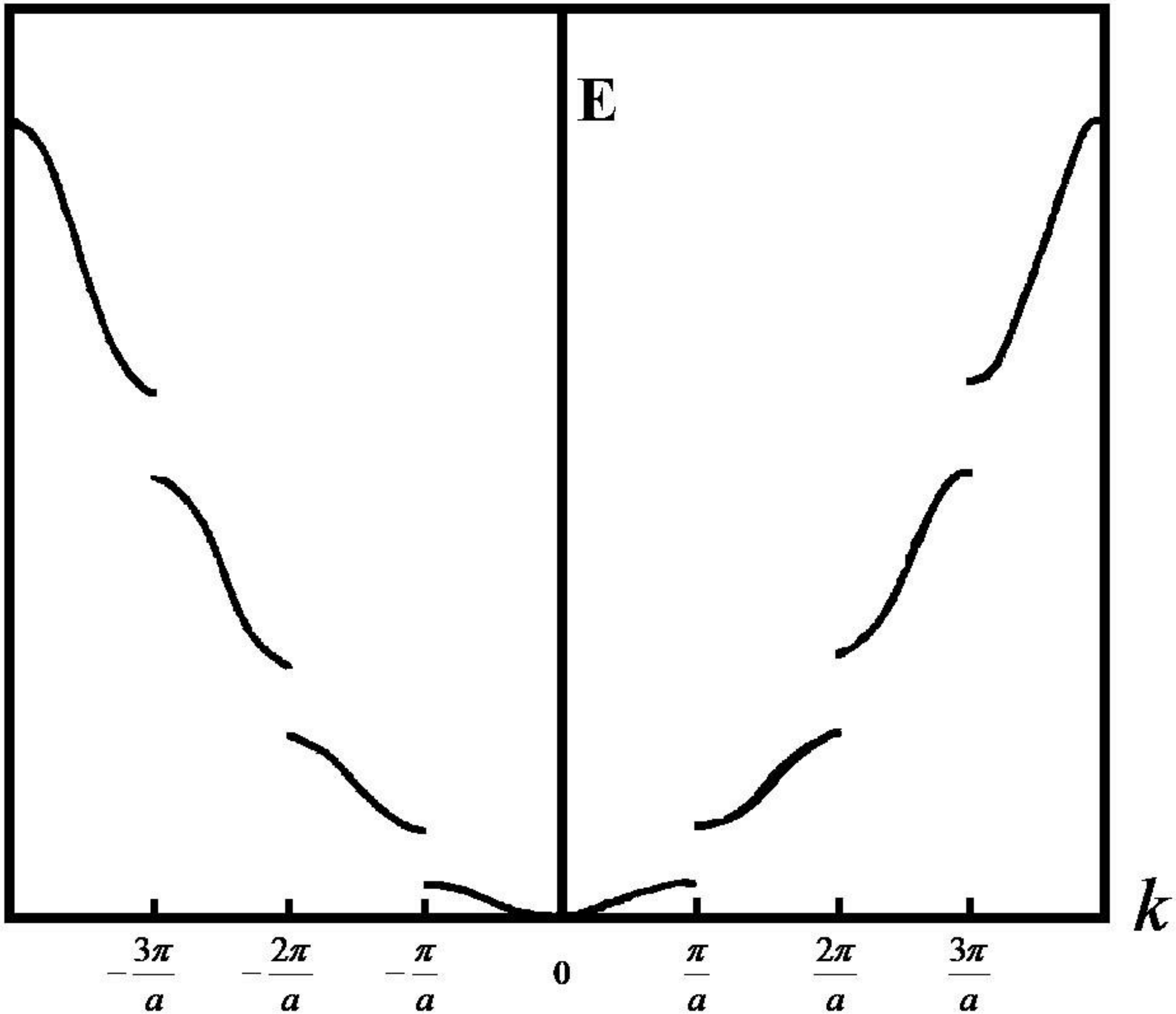
在布区边界，势场对电子存在强烈散射

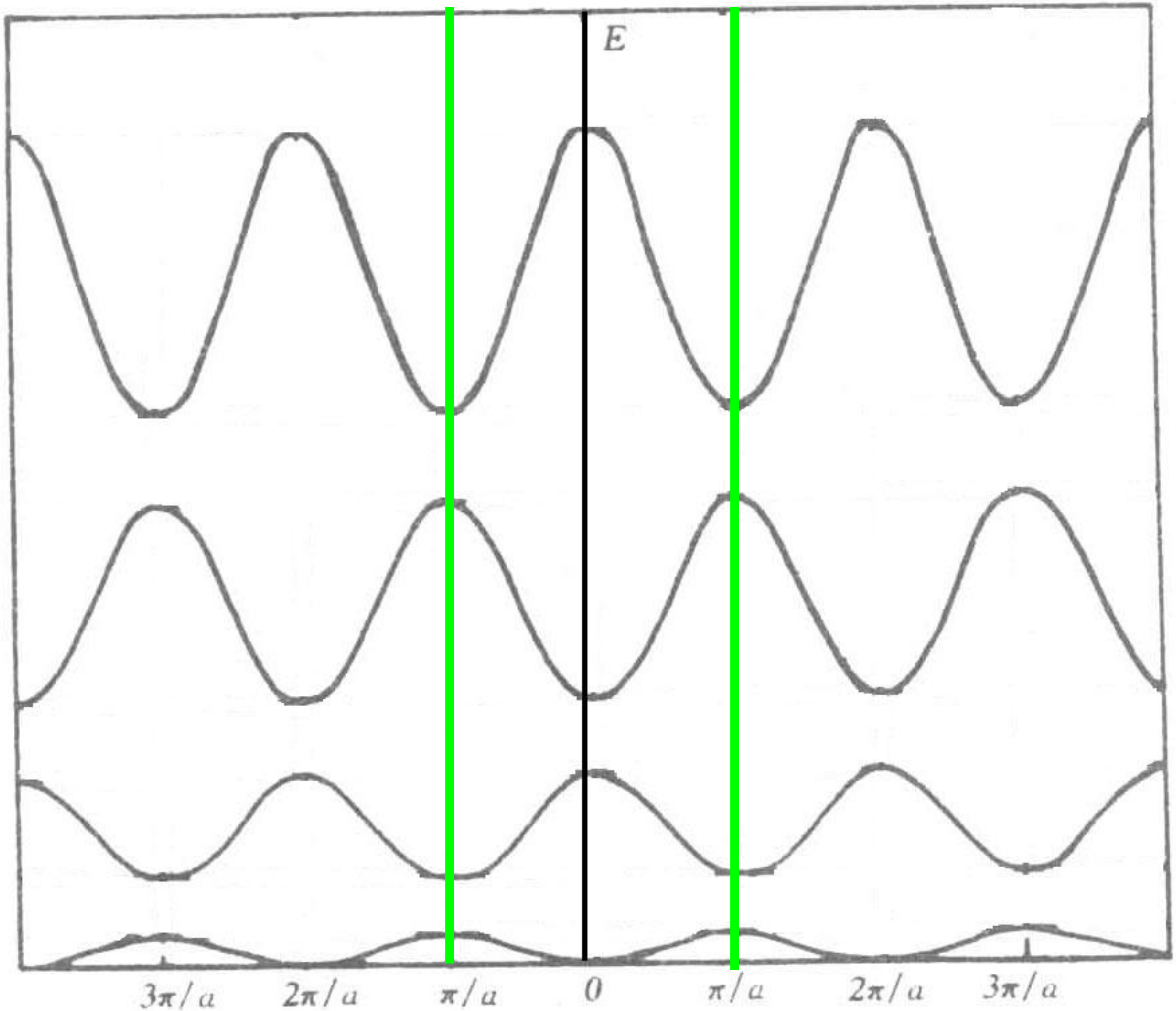
4、能带宽度随能量的增加而变宽。

5、能量的宽度随着势场对电子束缚程度的增加而减小。

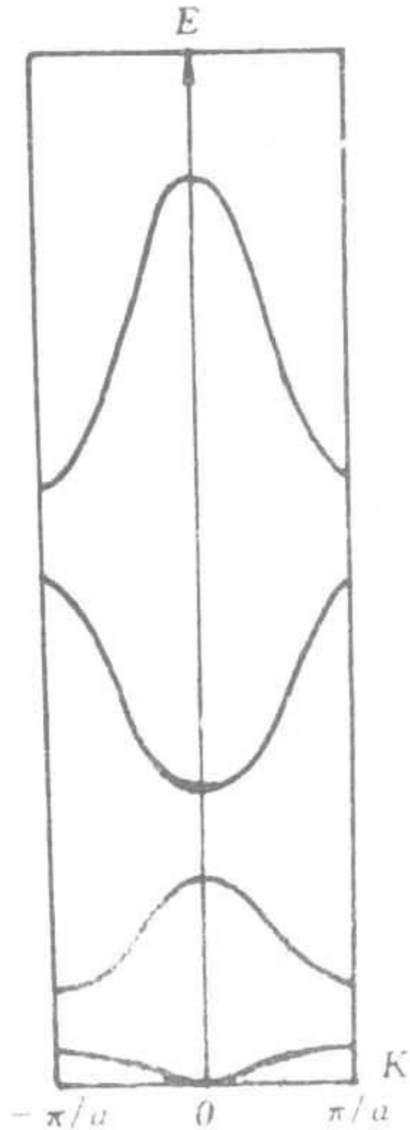
6、对于任一个给定的能量，能量 E 是波矢 k 的周期函数，周期等于倒格子周期.

由于，能量 E 是波矢 k 的周期函数，我们可将所有的能带都限制在第一布里渊区。


E
k
$-\frac{3\pi}{a}$
$-\frac{2\pi}{a}$
$-\frac{\pi}{a}$
0
$\frac{\pi}{a}$
$\frac{2\pi}{a}$
$\frac{3\pi}{a}$



E
3π/a
2π/a
π/a
0
π/a
2π/a
3π/a



(b)