固体物理和固体理论

ZQW

2019 年 2 月 24 日

1 Sommerfeld Theory

2 Bravais 格子

Bravais 格子的判别方法:

站在任意格点上, 通过周围格子的方位与距离关系, 不能知道在不同的格点上!

例如, honeycomb 格子就可以通过周围格子的方位与距离关系判断出两种不同的格点, 因此 honeycomb 格子不是 Bravais 格子.

3 倒格子

3.1 Definition of Reciprocal Lattice

Aschroft 书 86 页给出了倒格子的定义:

The set of all wave vectors $\vec{K}$ that yield plaves with the periodicity of a given Bravais lattice is known as the reciprocal lattice.

倒格子基矢就是为周期性而生, 为 Bravais 格子而生! 倒格子能够产生周期性的平面波.

Aschroft 书 86 页:

such a set of $\vec{K}$ is called a reciprocal lattice only if the set of vectors $\vec{R}$ is a Bravais lattice.

为 Bravais 而生!

3.2 More Details about Reciprocal Lattice

一般的平面波:

$$e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

没有周期性. 如果让它有 Bravais 格子的周期性, 应该有什么要求呢? 假设 $\vec{K}$ 满足我们的要求, 那 $\vec{K}$ 应该满足:

$$e^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

也就是

$$\vec{K}\cdot\vec{R} = 2\pi\cdot\mathrm{integer}$$

写成分量的形式:

$$\vec{K} = k_1\vec{b}_1 + k_2\vec{b}_2 + k_3\vec{b}_3$$
$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

它们的基底正交, 归一到 2π , 即

$$\vec{b}_i\cdot\vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$\vec{R}$ 是正格子的 k 格点, 所以 n_i 都得是整数. 若要任意的 $\vec{K},\vec{R}$ 都满足

$$\vec{K}\cdot\vec{R} = 2\pi\cdot\mathrm{integer}$$

那么 k_i 也必须都是整数, 就刚好取到倒格子的格点.

倒格子格点产生的平面波具有正格子的周期性!

4 Bloch 定理

4.1 Definition

单电子在 Bravais 格子中的 Hamiltonian :

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

的本征态可以选为

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad u_{n\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

是一个相位乘上一个周期函数的形式.

因为 Hamiltonian 具有平移对称性, 所以平移操作与 Hamiltonian 对易, 具有共同本征态. $e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$ 就是平移操作作用在波函数上所得出的本征值!

4.2 The Born-von Karman Boundary Condition

假设总的格点数为 $N = N_1 N_2 N_3$, 并且满足周期性边界条件, 那么

$$\psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi(\vec{r}), \quad i = 1, 2, 3$$

则

$$e^{\mathrm{i}N_i \vec{k}\cdot\vec{a}_i} = 1$$

所以

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^{3} \frac{m_i}{N_i}\vec{b}_i = \sum_{i=1}^{3} m_i \frac{\vec{b}_i}{N_i}, \quad m_i \,\text{integral}$$

$\vec{k}$ 的取值把倒格子基矢又进行了细分, 正好细分成正格子的格点个数. 所以有 Ashcroft 书 136 页的话:

the number of allowed wave vectors in a primitive cell of the reciprocal lattice is equal to the number of sites in the crystal.

在一个倒格子中允许的波矢的个数就是正格子的格点的个数.

4.3 A Proof of Bloch's theorem

假设系统满足 Born-von Karman 边界条件.

由于体系有周期性, 可以考虑在 $\vec{k}$ 空间求解 Schrodinger 方程.

任何波函数都可以按平面波展开. 满足周期性边界条件的波函数, 可以用有限个分立的平面波展开 (由部分离散的 Fourier Transform 可知). 即

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

离散的 $\vec{k}$ 能取到的值如定义中那样. 这里的 $\vec{k}$ 的离散来自于周期性的边界条件, 与所有的格点的数目 N 有关.

周期势 $U(\vec{r})$ 也可以按平面波展开. 由于具有周期性, 也是用有限个分立的平面波展开. 即

$$U(\vec{r})=\sum_{\vec{K}}U_{\vec{K}}e^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

离散能取的值就是倒格子的格点. 这里的 $\vec{K}$ 的离散来自于 Bravais 格子的周期性, 与 Bravais 格子有关.

注意这里出现的两个不同的周期性. 边界条件导致的周期性和 Bravais 格子的周期性. 它们分别导致了 $\vec{k}$ 和 $\vec{K}$ 取值的离散.

然后将展开的结果代入 Schrodinger 方程中有

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\sum_{\vec{K}}U_{\vec{K}}e^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot\vec{r}}\right]\sum_{\vec{k}}c_{\vec{k}}e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}=\mathcal{E}\sum_{\vec{k}}c_{\vec{k}}e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{\vec{k}}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}k^2-\mathcal{E}\right)c_{\vec{k}}+\sum_{\vec{K}}U_{\vec{K}}c_{\vec{k}-\vec{K}}\right\}e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}=0$$

因为 $\vec{k}$ 对于 $\vec{r}$ 积分是正交的, 所以两边左乘 $e^{\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}}$ 然后对 $\vec{r}$ 积分可得

$$\sum_{\vec{k}}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}k^2-\mathcal{E}\right)c_{\vec{k}}+\sum_{K}U_{\vec{K}}c_{\vec{k}-\vec{K}}\right\}\delta_{\vec{k},\vec{k}'}=0$$

$$\Downarrow$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}k^2-\mathcal{E}\right)c_{\vec{k}}+\sum_{K}U_{\vec{K}}c_{\vec{k}-\vec{K}}=0$$

通过周期性, 对 $\vec{k}$ 空间的 Schrodinger 方程进行了化简. 发现波函数 ψ 在 $\vec{k}$ 空间的展开系数并不是全部耦合在一起的, 只有相差 $\vec{K}$ 才会相互耦合.

现在可以将一开始的展开化简

$$\psi(\vec{r})=\sum_{\vec{k}}c_{\vec{k}}e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

为

$$\psi(\vec{r})=\sum_{\vec{k}\in F.B.Z.}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}),\quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\sum_{\vec{K}}c_{\vec{k}-\vec{K}}e^{\mathrm{i}(\vec{k}-\vec{K})\cdot\vec{r}}$$

而 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 是本征态. 变换一下形式就是 Bloch's Theorem 定义中的形式

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}} e^{-\mathrm{i}\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

4.4 讨论

因为晶体不具有完全的平移对称性, 只是具有具有沿格矢的平移对称性, 所以动量 $\vec{p}$ 不是一个好的量子数. 这里的 $\vec{k}$ 不是常说的那个" 动量".

$\vec{p}$ 和 $\vec{k}$ 是相似的. 前者表征完全的平移对称性, 而后者表征晶体中的平移对称性.

4.5 Band Index

将 Bloch 波函数代回到 Schrodinger 方程中进行化简得到

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\nabla + \vec{k}\right)^2 + U(\vec{r})\right) u_{\vec{k}}(r) = \mathcal{E}_{\vec{k}}(\vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\mathrm{BoundaryCondition:} \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

一个在周期性边界条件下的本征值问题, 它应该有分立的本征值, 用指标 n 来标记, 这就是 Band Index !

当 $\vec{k}$ 的间隔非常小的时候, 是趋于连续的. 由上述方程也可以看出 $\vec{k}$ 作为方程的参数, 其解的 n 值固定的时候, 是 $\vec{k}$ 的函数.

5 参考文献

Neil W. Ashcroft, N David Mermin, Solid State Physics

黄昆, 韩汝琦, 固体物理学