

固体物理基础

Elementary Solid State Physics

东南大学，电子科学与工程学院
School of Electronic Science and Engineering, SEU

2019-2020 03学期

固体物理课程内容

- 固体物理的主要任务是从**微观层次**上研究固体**宏观性质和规律**，需解决以下三个问题：
1. 如何从微观上研究原子、电子？
 2. 如何处理 $10^{29}/\text{m}^3$ 量级的粒子数？
 3. 如何描述固体中原子和电子的运动？

1. 量子力学基础

研究原子、电子等微观粒子

2. 统计学基础

如何建立微观与宏观的联系

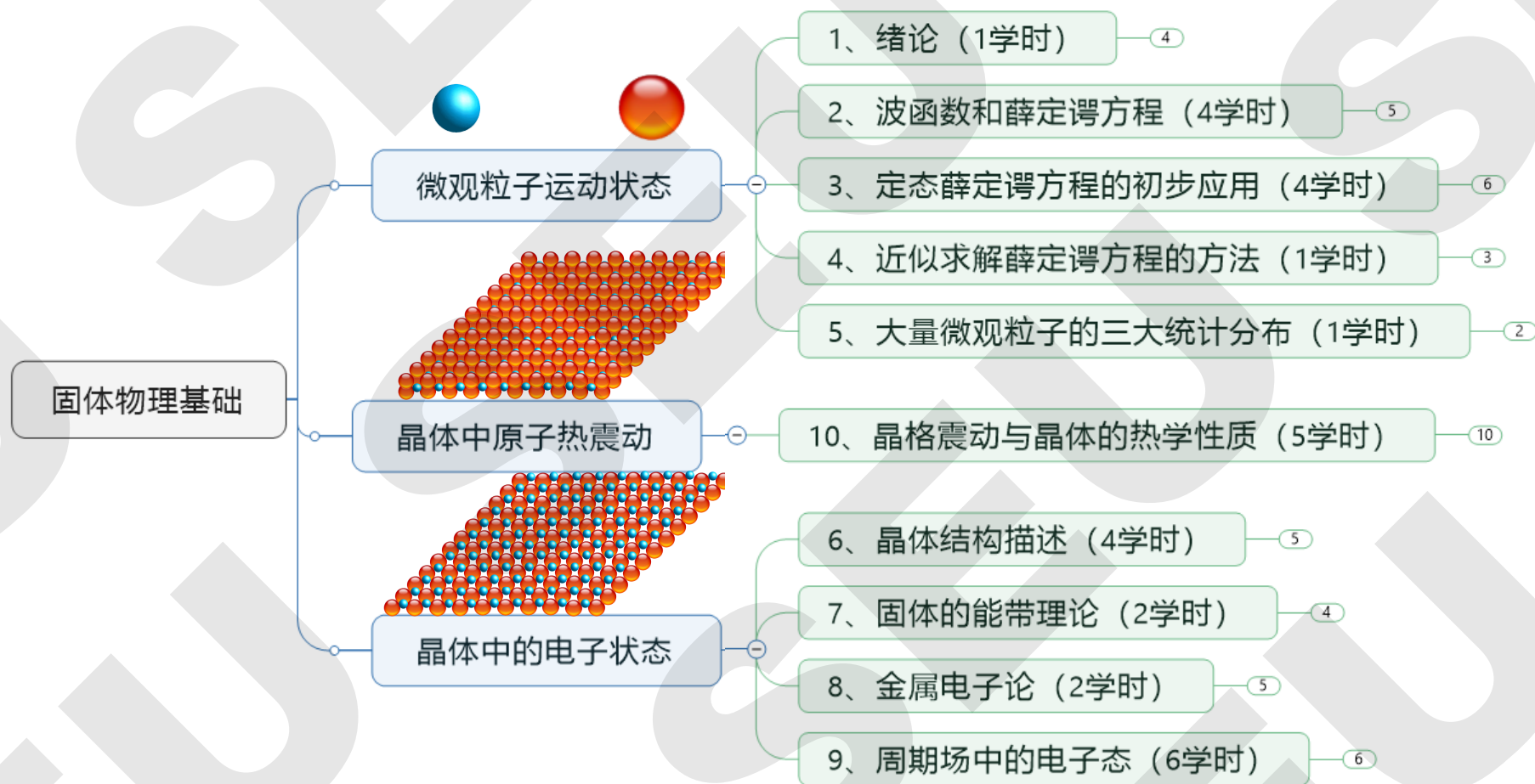
3. 晶格振动理论

研究原子的运动

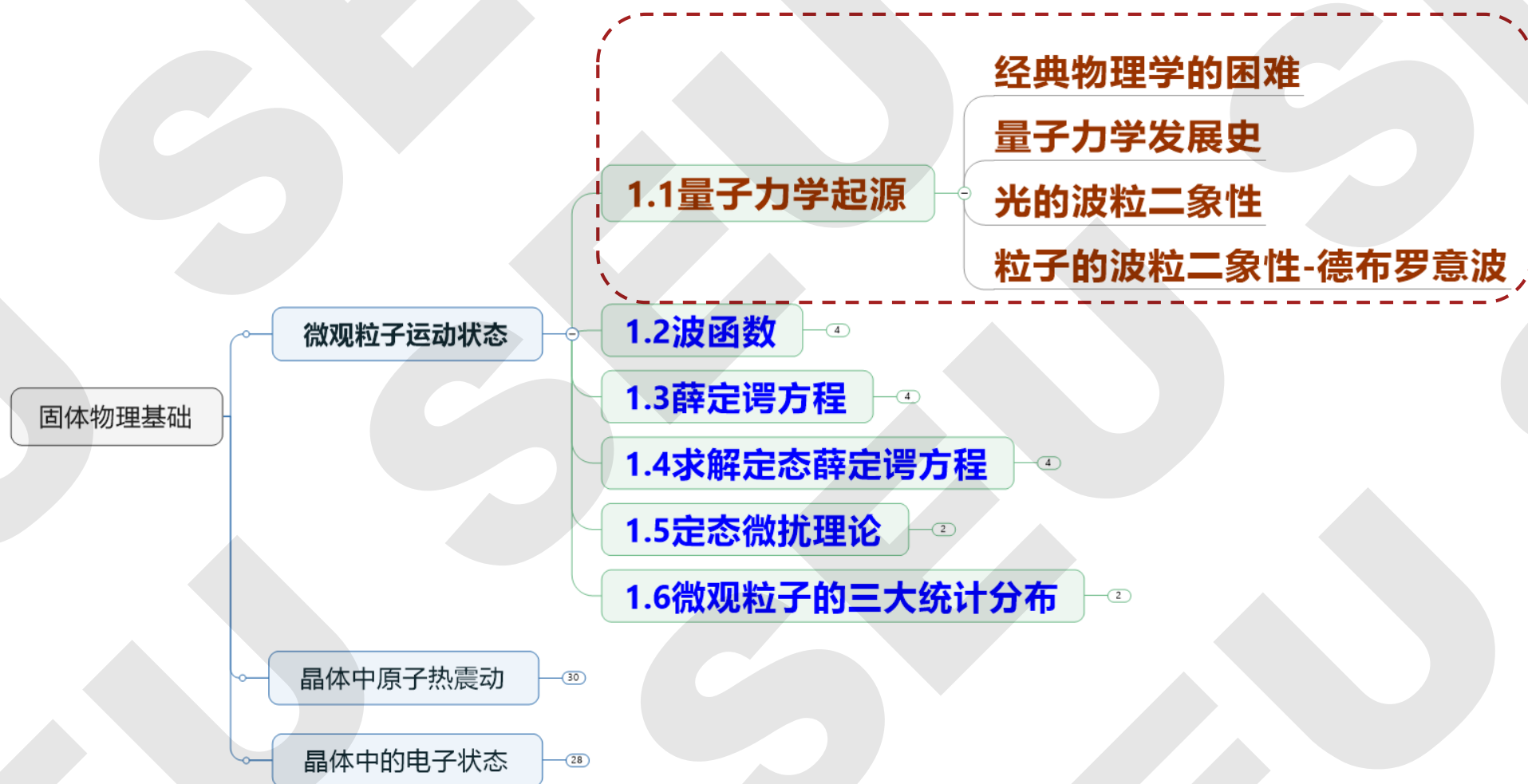
4. 电子能带理论

研究电子的运动

学什么：课程结构



目录



小结

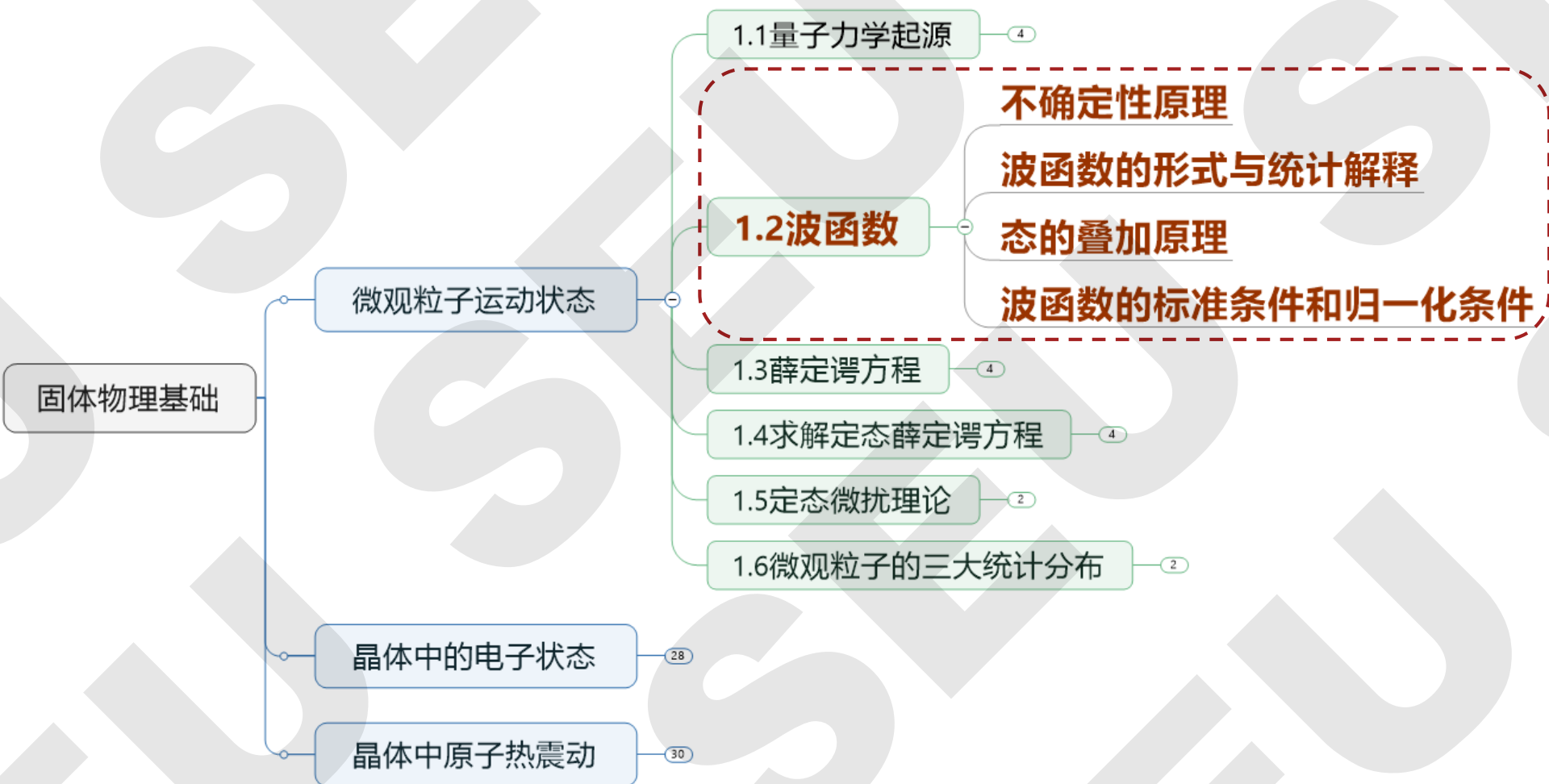
- 近代物理发展历程;
- 黑体辐射, Planck的量子假说
- 爱因斯坦的光量子假说:

$$E = h\nu = \hbar\omega, \text{ 其中 } h = 2\pi\hbar, \omega = 2\pi\nu \text{ 称为角频率}$$

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \hbar \vec{k}, \text{ 其中 } \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}, \text{ 称为波矢}$$

- 量子力学的两个最基本概念: 量子化, 波粒二象性;
- h 普朗克常数起关键作用。

下节课内容



小结

➤ 德布罗意关系： $E = \hbar\omega, \vec{p} = \hbar\vec{k}$

➤ 波函数的几率解释：波函数在空间某一点的强度（波函数的模平方）和在该点找到粒子的几率成正比。

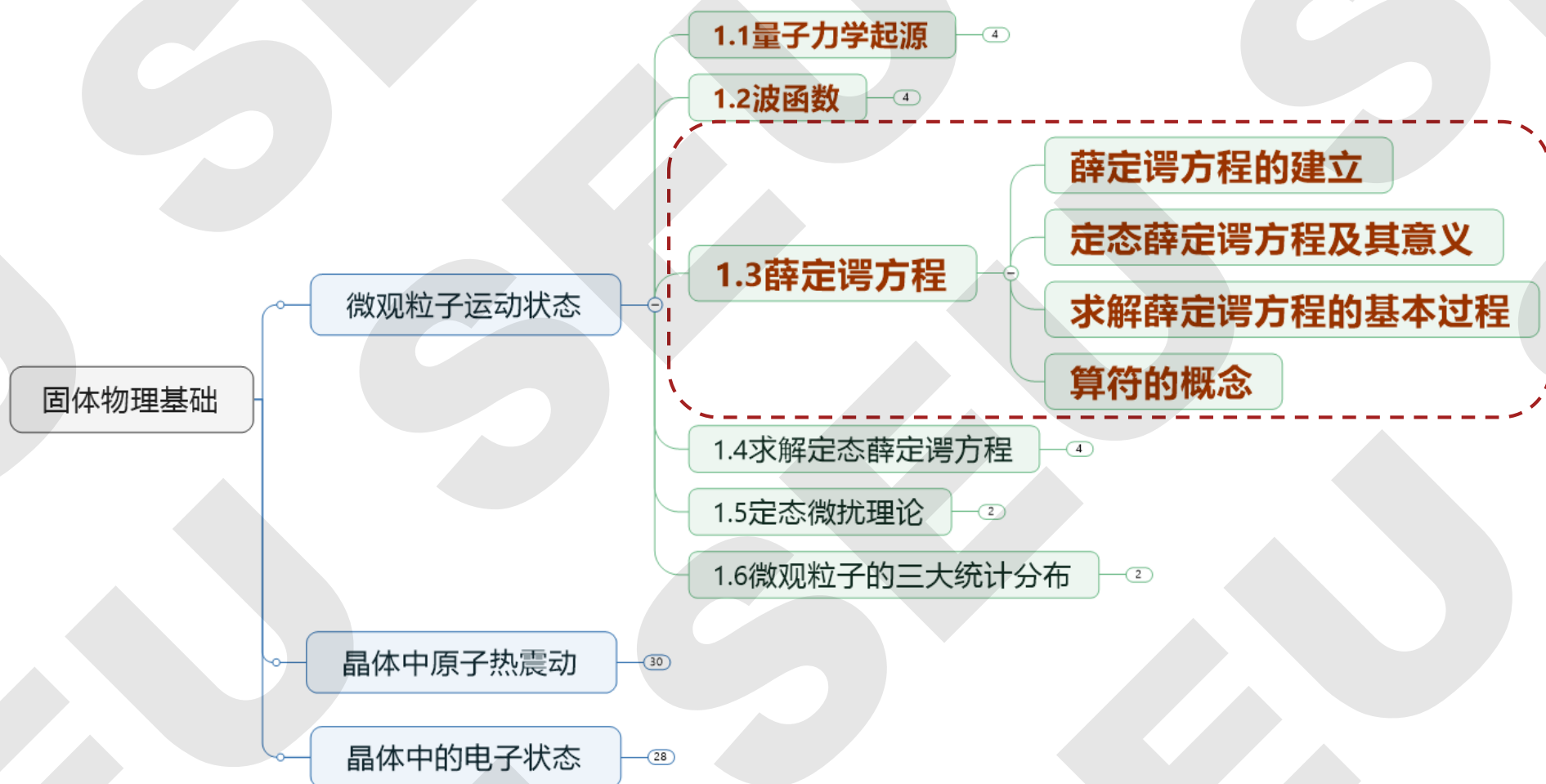
➤ 电子的双缝干涉实验： $n_{12}(x) \neq n_1(x) + n_2(x)$

➤ 态叠加原理 $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \cdots + c_i\Psi_i + \cdots = \sum_i c_i\Psi_i$

➤ 波函数的归一化条件和标准条件

➤ 不确定关系 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

目录



➤ 薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right) \Psi$$

➤ 连续性方程，守恒定律

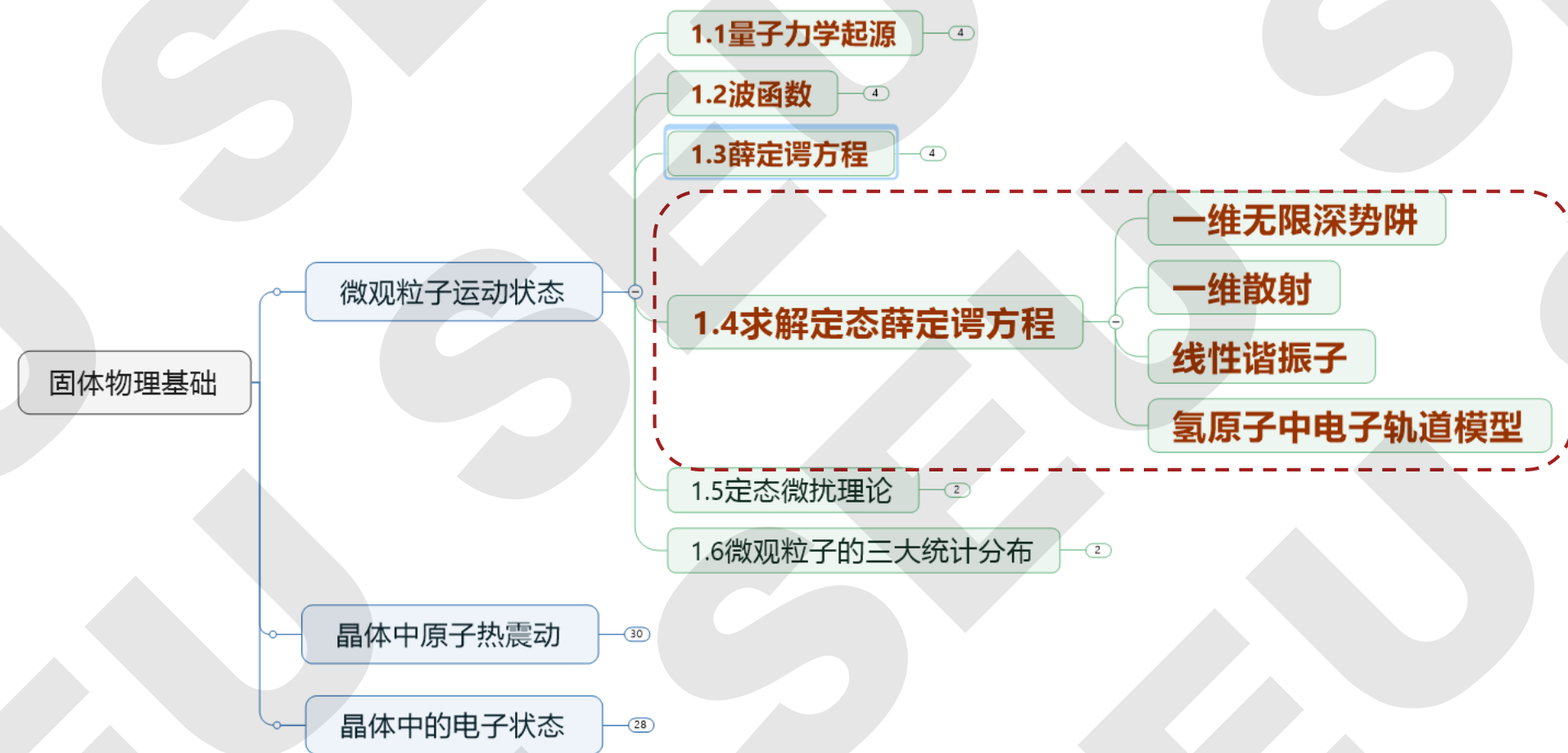
$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$$

➤ 定态薛定谔方程

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

➤ Hamilton算符和能量本征值方程

目录

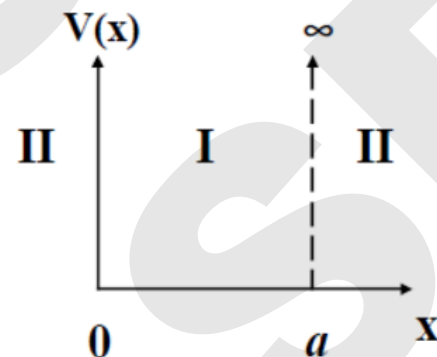


小结

➤ 一维无限深势阱

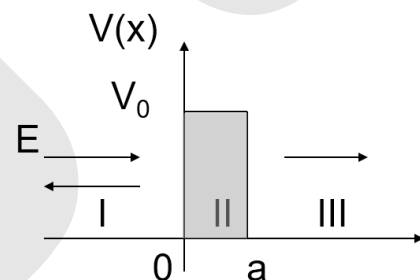
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\text{波函数: } \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad n = 1, 2, 3 \dots$$



➤ 一维散射:

- $E > V_0 \dots$; $E < V_0$, 隧道效应, 透射系数, 反射系数



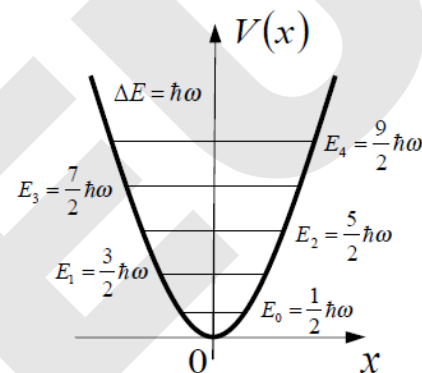
$$D = \frac{4k_1^2 k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2)^2 \sinh^2 k_3 a + 4k_1^2 k_3^2}$$

$$R = \frac{(k_1^2 + k_3^2)^2 \sinh^2 k_3 a}{(k_1^2 + k_3^2)^2 \sinh^2 k_3 a + 4k_1^2 k_3^2}$$

➤ 一维简谐振子:

$$E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

- 能量量子化:
- 厄米多项式、波函数递推关系;
- 波函数与波函数几率密度



小结

➤ 氢原子

- 主量子数(k)、角动量量子数(l)、磁量子数(m_l)、自旋量子数(m_s);
- 氢原子能级, 氢原子轨道角动量, 轨道角动量 z 分量;

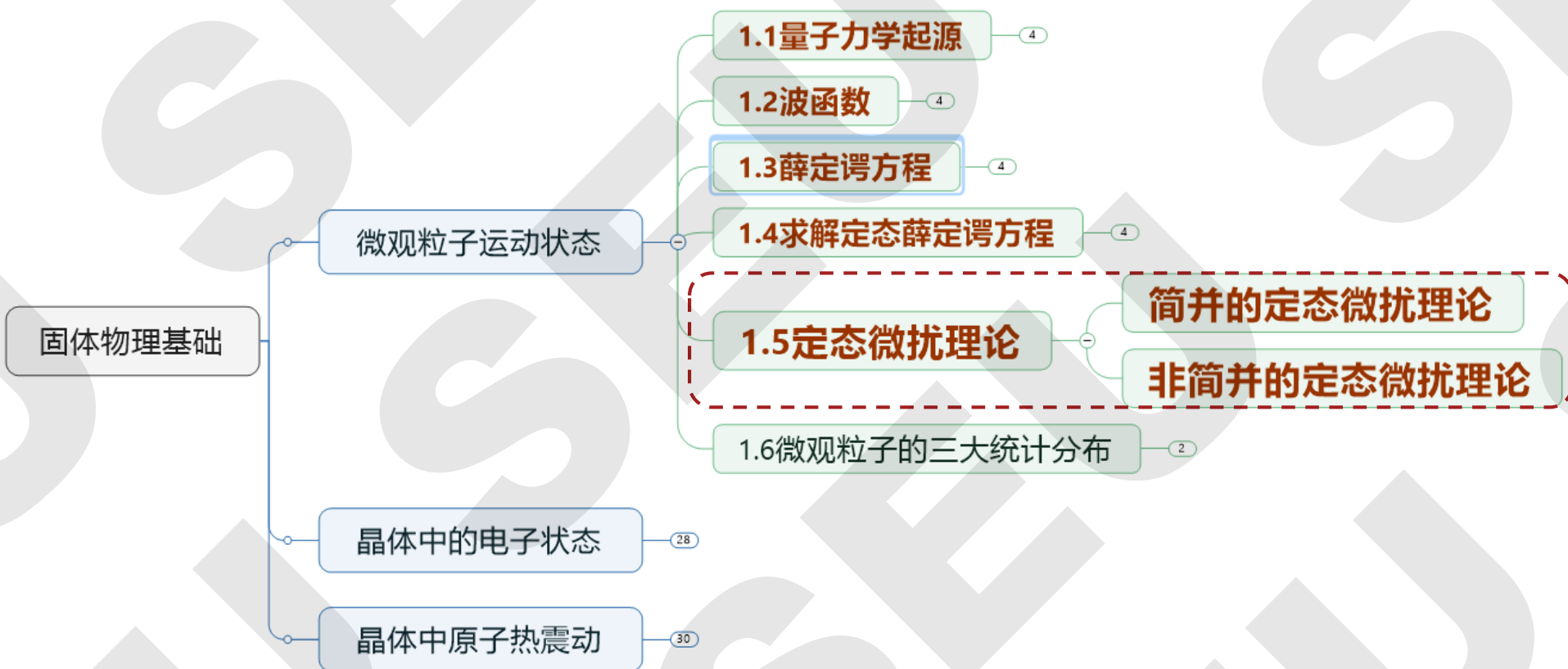
$$E = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

- 能级简并、简并度;
- 电子自旋与自旋量子数;
- 氢原子波函数与波函数的几率密度。

目录



定态微扰理论小结

➤ 非简并定态微扰

- 能量的二级近似:

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_m' \frac{|H'_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

- 波函数的一级近似:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

➤ 简并定态微扰

$$\begin{pmatrix} H'_{11} - E_k^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1f} \\ H'_{21} & H'_{22} - E_k^{(1)} & \cdots & H'_{2f} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H'_{f1} & H'_{f2} & \cdots & H'_{ff} - E_k^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdots \\ c_f \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{aligned} E_{n1} &= E_n^{(0)} + E_{n1}^{(1)} \\ E_{n2} &= E_n^{(0)} + E_{n2}^{(1)} \\ &\vdots \\ E_{nf_n} &= E_n^{(0)} + E_{nf_n}^{(1)} \end{aligned}$$

目录



小结

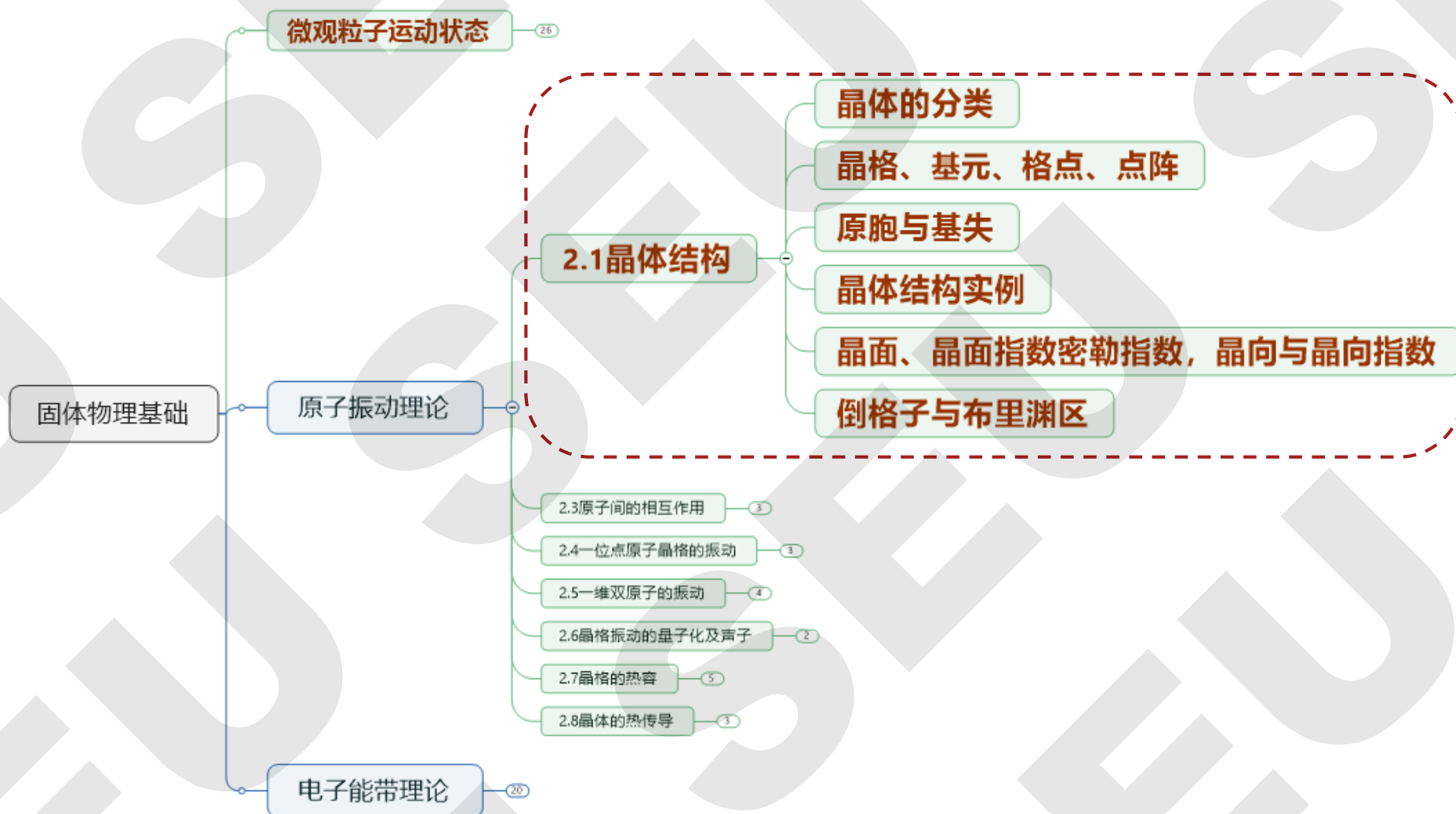
麦克斯韦-玻尔兹曼分布 (M-B) : $f_E = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{k_B T}}$

玻色-爱因斯坦分布 (B-E): $f_E = \frac{1}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1}$

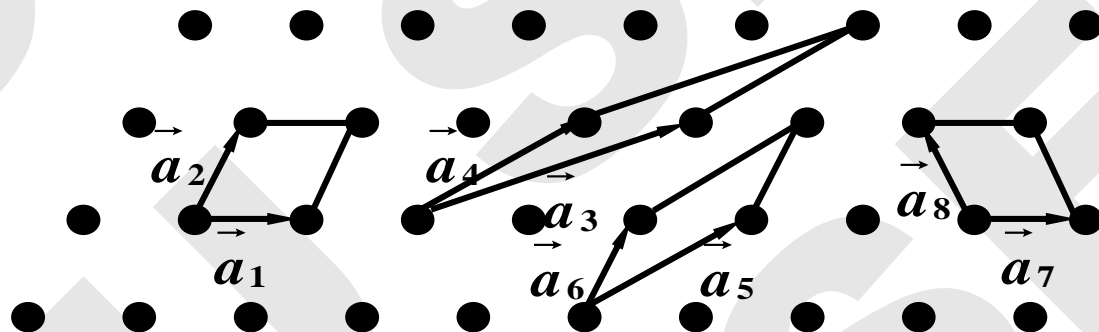
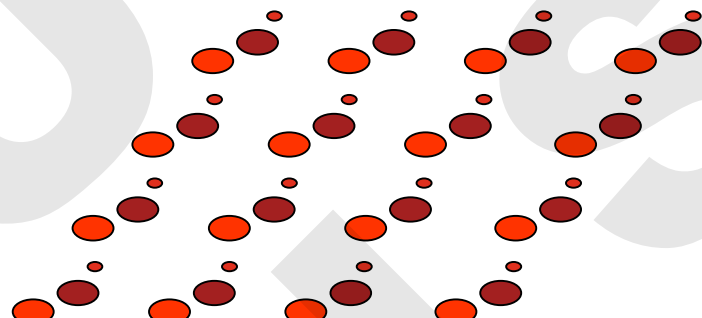
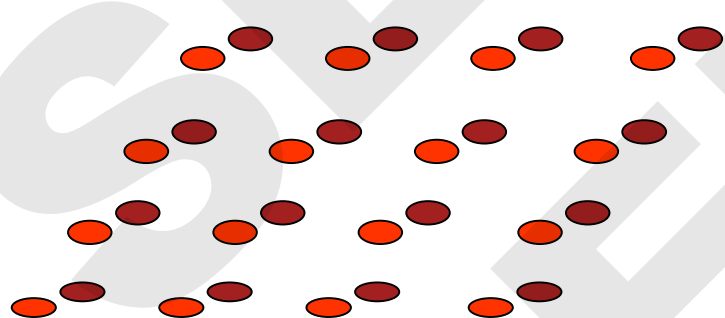
费米-狄拉克分布(F-D): $f_E = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$, E_F 称为费米能级

M-B分布	经典统计	粒子可区分	不受泡利原理限制
B-E分布	量子统计	粒子不可区分	不受泡利原理限制
F-D分布	量子统计	粒子不可区分	受泡利原理限制

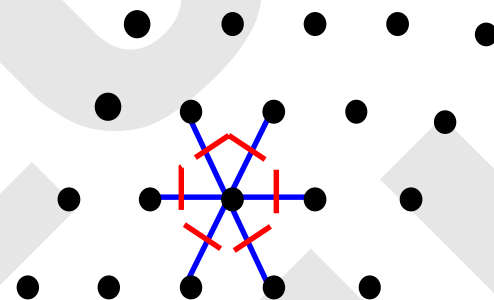
目录



晶体结构实例：二维



固体物理学原胞

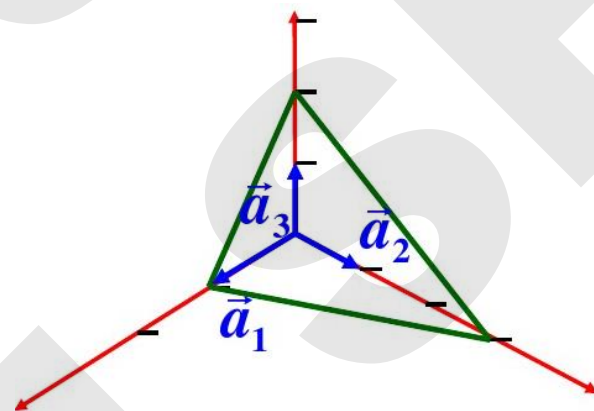


维格纳--塞茨单胞

密勒指数

➤ 密勒指数确定的两种方法：

- 1: 如果一族晶面中某个晶面截基矢 $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ 于 $h'\bar{a}_1, k'\bar{a}_2, l'\bar{a}_3$ 处，则三个截距 h', k', l' 倒数的互质整数比 (hkl) 称为该晶面族的密勒指数。这里 $\frac{1}{h'} : \frac{1}{k'} : \frac{1}{l'} = h : k : l$
- 2: 如果一晶面族将基矢 $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ 分别截成 h, k, l 段，则 (hkl) 称为该晶面族的密勒指数。



晶体结构小结

➤ 倒格子与布里渊区。

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega}$$

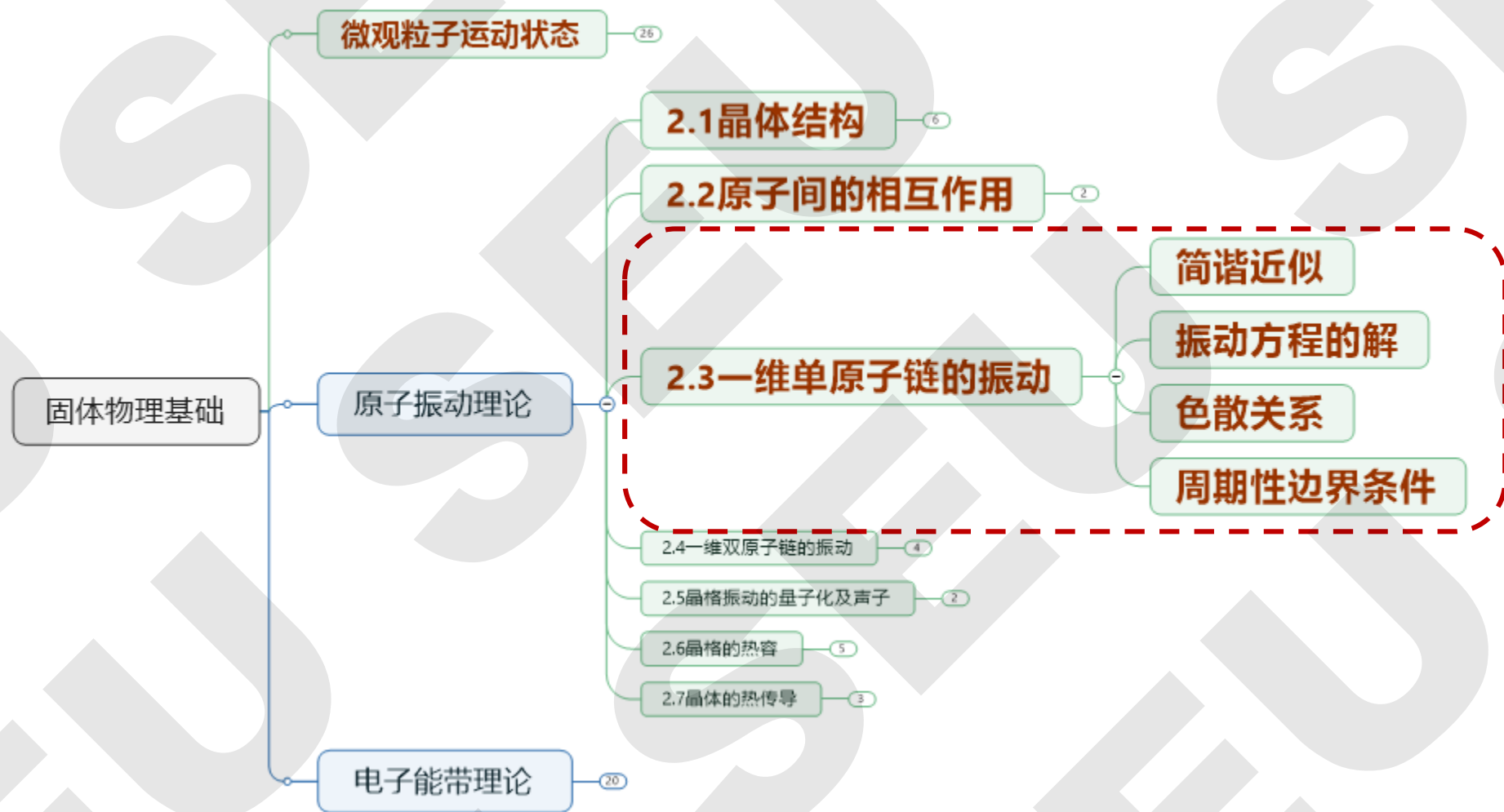
$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega}$$

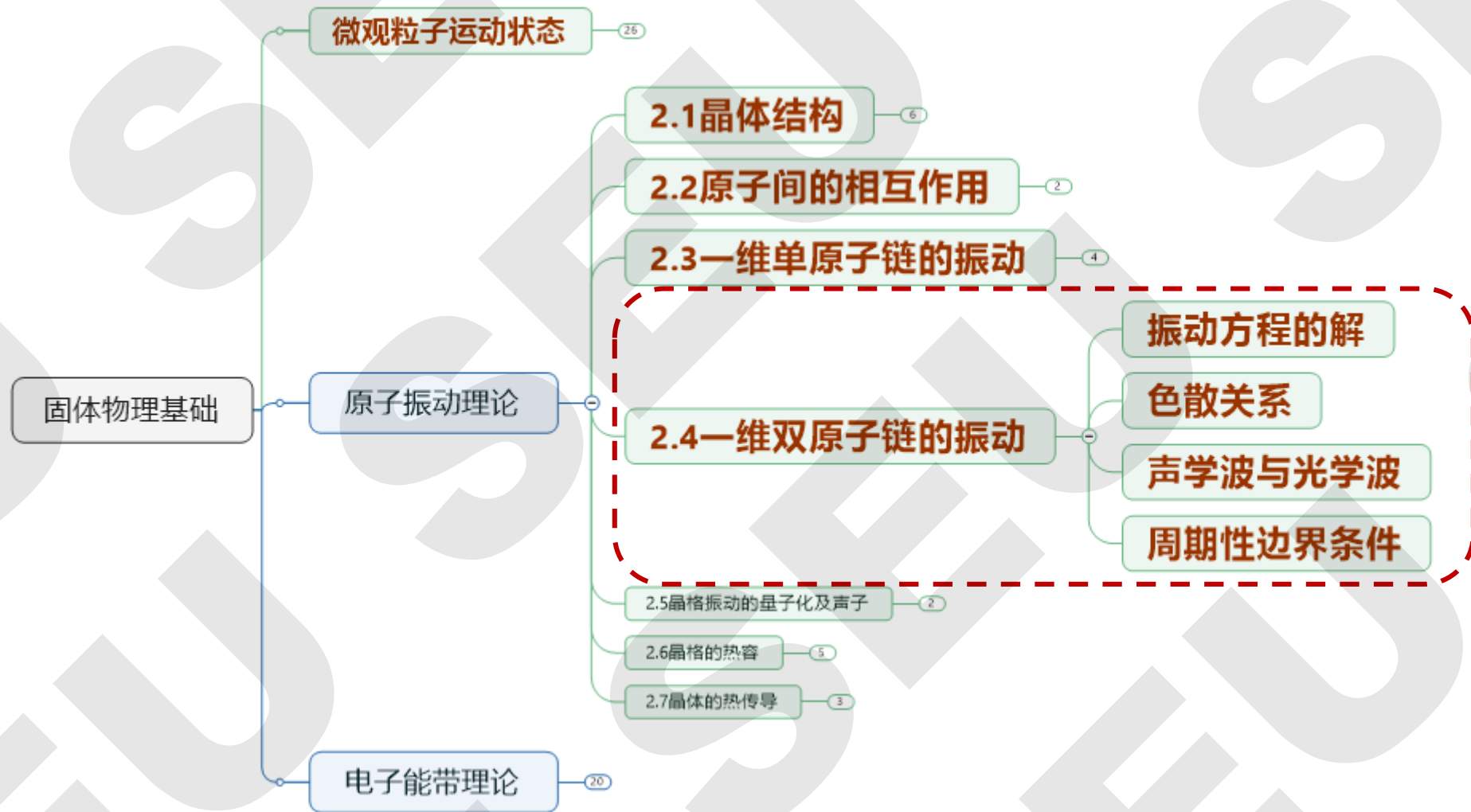
$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$



小结

- 原子负电性的含义及表达式。
- 金属键的特性、结构及对金属特性的影响；
- 共价键的方向性、饱和性及对半导体特性的影响；
- 离子键的没有方向性和饱和性，离子晶体的特点；
- 范德瓦耳斯键的含义及特点。





小结

- 简谐近似的概念和意义

$$U = U_0 + \frac{1}{4} \sum_{n,n'} [(\mu_n - \mu_{n'}) \cdot \nabla]^2 u(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})$$

- 一维单/双原子振动方程及其解

$$m\ddot{\mu}_n = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

$$\begin{cases} M\ddot{\mu}_n = \beta(v_n + v_{n-1} - 2\mu_n) \\ m\ddot{v}_n = \beta(\mu_n + \mu_{n+1} - 2v_n) \end{cases}$$

- 格波的概念和意义

格波方程: $\mu_n = Ae^{i(\omega t - naq)}$

- 色散关系的概念和意义

色散关系: $\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{1}{2} aq \right|$

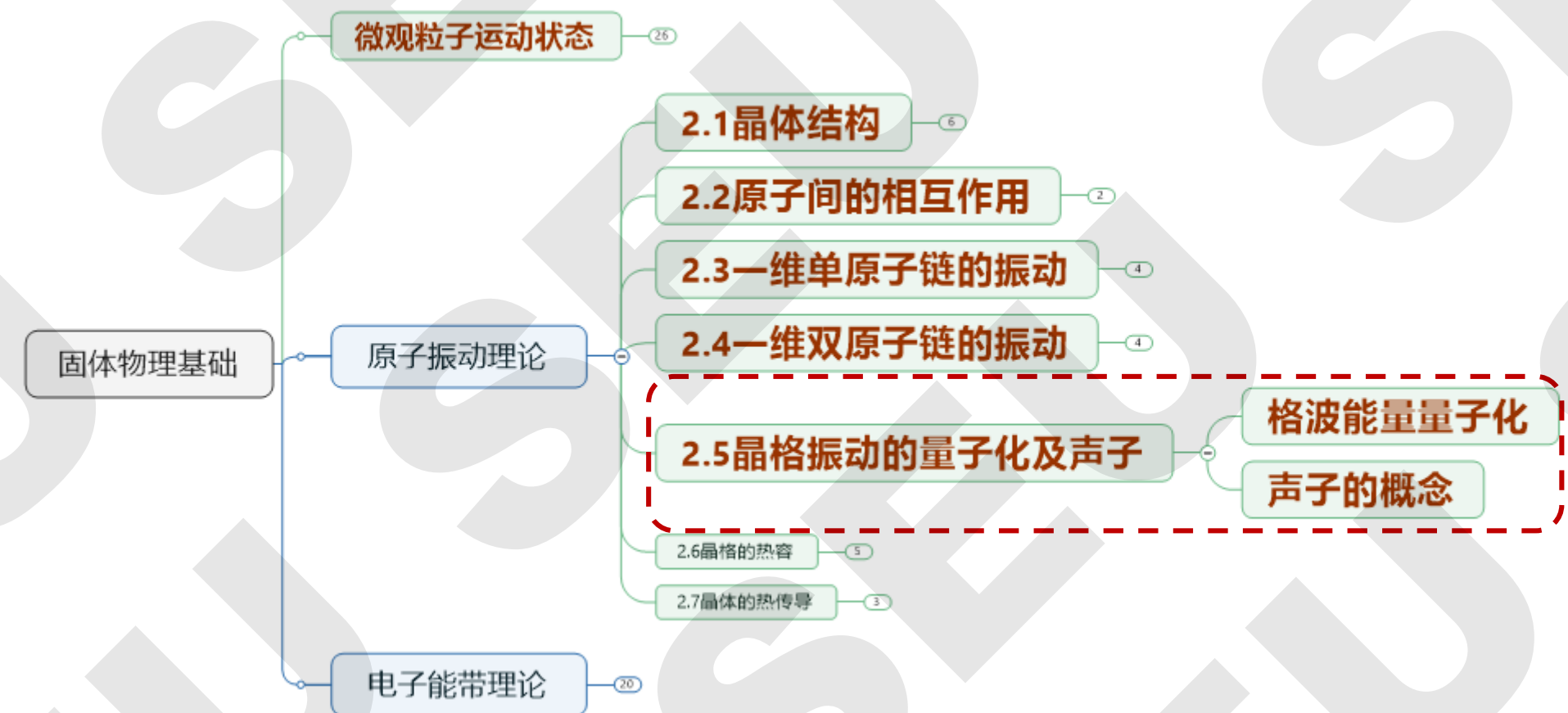
- 声学波与光学波的含义及特点

- 三维振动的结论推广

三维振动推广

	原胞中 原子数	原胞自 由度数	晶体中 原胞数	晶体自 由度数	格波 支数	q 数	ω 数
一维单原子	1	1	N	N	1	N	N
一维双原子	2	2	N	$2N$	2	N	$2N$
三维多原子	s	$3s$	N	$3sN$	$3s$	N	$3sN$

- 推广结论：
- 波矢数(q 取值数)=晶体中的原胞数
 - 格波的支数=原胞的自由度数
 - 格波的个数[$\omega(q)$ 取值数]=晶体的自由度数
 - 声学支格波的支数=晶体的维度



系统的哈密顿量与声子

$$H = \frac{1}{2} \sum_q [\dot{Q}^*(q, t) \dot{Q}(q, t) + \omega^2(q) Q^*(q, t) Q(q, t)]$$

- 引入简正坐标之后，哈密顿量对角化，每一项都是独立的；
- 表示以 $\omega(q)$ 为频率的一组独立简谐振子的哈密顿量之和；
- 依照简谐振子的能量表达式，格波的能量就可以表示为：

$$E_j(q) = \left[\frac{1}{2} + n_j(q) \right] \hbar \omega_j(q), \quad n_j(q) = 0, 1, 2, \dots$$

- 系统总的能量为：
$$E = \sum_{j=1}^{3s} \sum_{q=1}^N E_j(q) = \sum_{j=1}^{3s} \sum_{q=1}^N \left[\frac{1}{2} + n_j(q) \right] \hbar \omega_j(q), \quad n_j(q) = 0, 1, 2, \dots$$

- 量子数 $n_j(q)$ 只能取整数，基态能量为 $1/2 \hbar \omega_j(q)$ ，称为零点能；

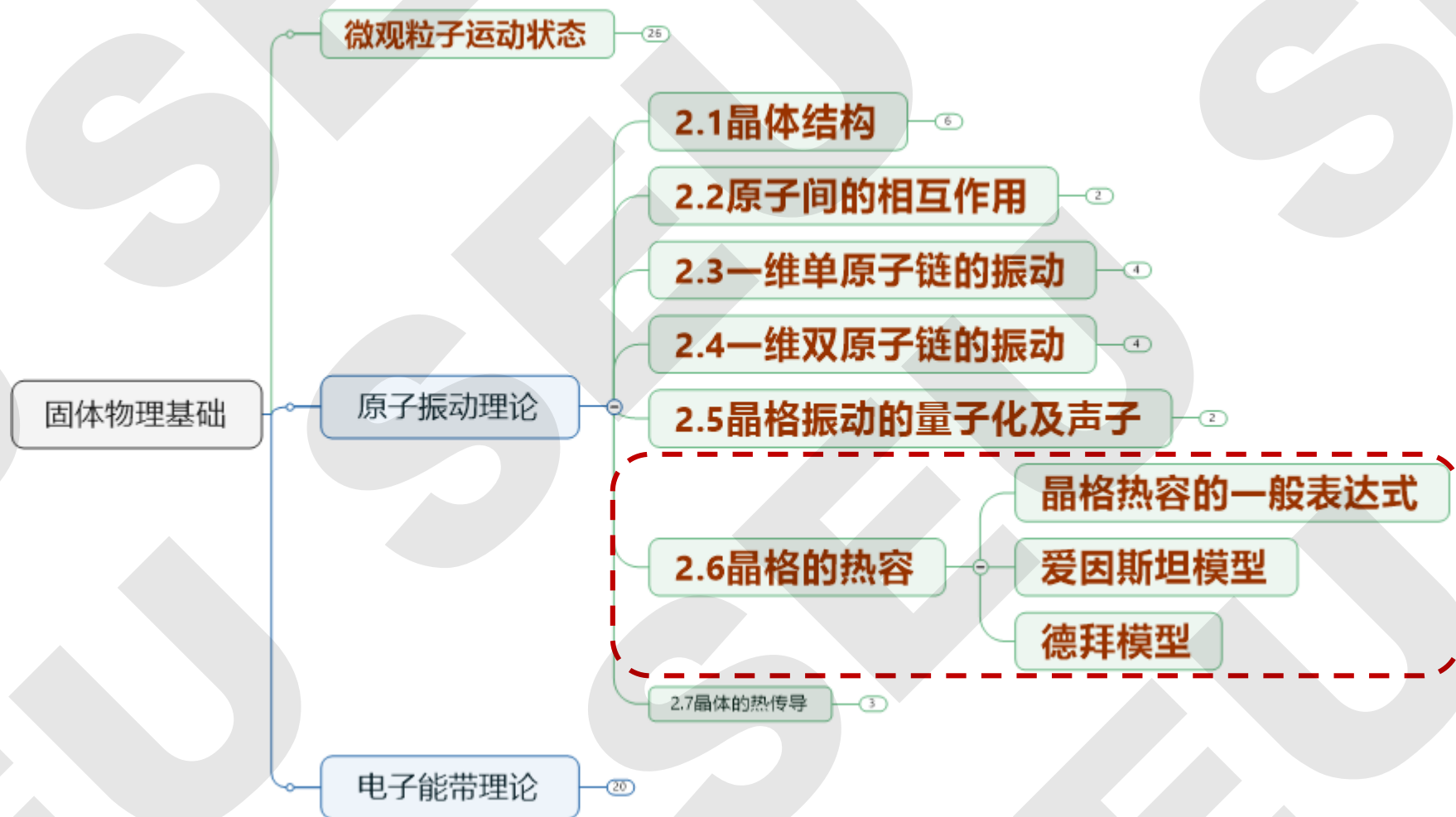
- 格波能量是量子化的，能量的增减只能是 $\hbar \omega_j(q)$ 的整数倍；

- **声子：格波能量的量子 $\hbar \omega_j(q)$ ；**

- 晶格振动的每一个格波，可以看作是由数目为 $n_j(q)$ ，能量为 $\hbar \omega_j(q)$ 的声子组成的，而整个系统则是由众多声子组成的声子气体。

声子补充

- 声子的能量 $\hbar\omega_j(q)$ 是格波能量的激发单元，称为元激发。声子不是真实粒子，只能存在于晶体中，而不能脱离晶体单独存在；
- 声子是一种准粒子，具有动量 $\hbar q$ ，表现格波的粒子性。声子动量 $\hbar q$ 不是真实动量，所有原子仍围绕其平衡位置做微振动，总体上没有形成质量的定向运动；
- 声子可以受激发而产生或湮没，声子的数目 $n_j(q)$ 不受限制，可以取任意整数值，取决于激发能量的大小；
- 声子是玻色子，服从玻色爱因斯坦统计，热平衡声子数与温度有关。



模式密度与晶格热容

$$E = \int d\omega g(\omega) \left(\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right), \quad g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{\Omega^*} d^3 q \delta(\omega - \omega_j(q))$$

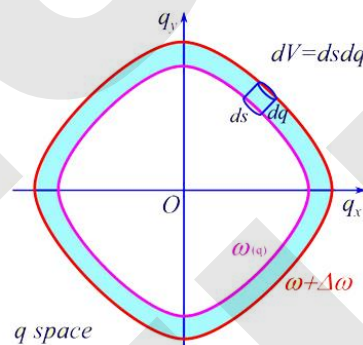
➤ 其中 $g(\omega)$ 称为模式密度，代表单位频率间隔内的振动模式数目；

$$\because d^3 q = dS_\omega dq_\perp, \quad d\omega = |\nabla_q \omega_s(q)| \cdot dq_\perp$$

$$\therefore g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \iint dS_\omega dq_\perp \delta(\omega - \omega_j(q))$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \iint \frac{dS_\omega}{|\nabla_q \omega_j(q)|} \delta(\omega - \omega_j(q)) d\omega_j(q)$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \iint \frac{dS_\omega}{|\nabla_q \omega_j(q)|}$$



$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \iint \frac{dS_\omega}{|\nabla_q \omega_j(q)|}, & \text{三维} \\ \frac{S}{(2\pi)^2} \sum_j \int \frac{dl_\omega}{|\nabla_q \omega_j(q)|}, & \text{二维} \\ \frac{L}{2\pi} \sum_j \frac{2}{|d\omega_j(q)/dq|}, & \text{一维} \end{cases}$$

➤ 晶格热容的一般表达式为： $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \int k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} g(\omega) d\omega$

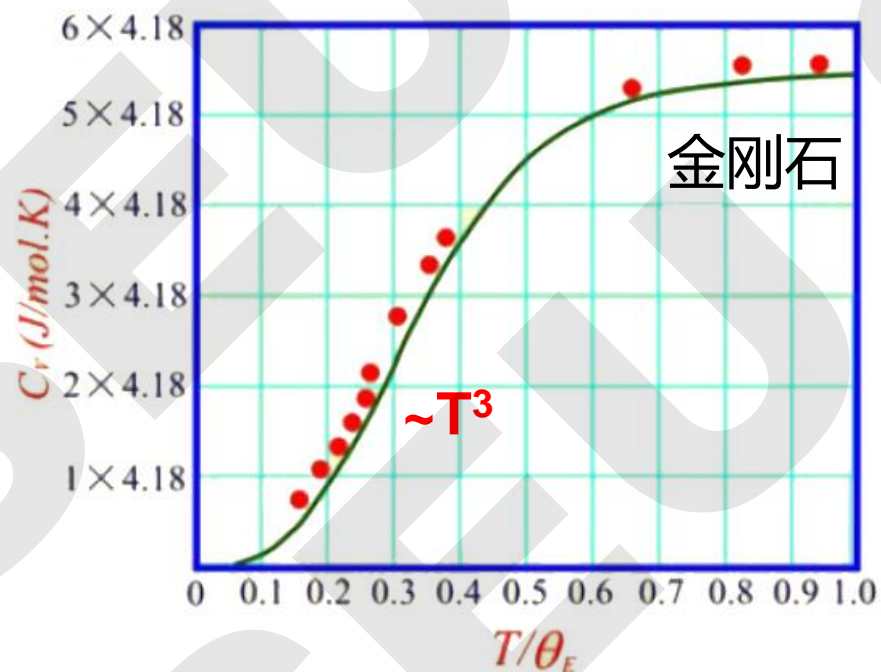
• 求解晶格热容需要知道格波的色散关系或模式密度。

爱因斯坦模型：低温极限

➤ 在低温时， $T \ll \theta_E$ ，即 $k_B T \ll \hbar \omega_E \rightarrow$ 爱因斯坦模型与实验不符

$$C_V = 3sNk_B \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \cdot \frac{e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}}{(e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}} - 1)^2} \approx 3sNk_B \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \cdot e^{-\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}$$

- $T \rightarrow 0$ 时， C_V 以指数方式趋于 0；
- 实验结果 $C_V(T) \sim T^3$ ，两者不符。
- 讨论：与实验不符原因？
- 爱因斯坦假定只有一个振动频率，缺少低能量的激发模式，因此爱因斯坦模型常被用作光学声子部分的模型。



德拜模型

➤ 德拜模型：把晶体看做连续介质，格波看做连续介质中的弹性波；

• 色散关系为： $\omega_j(q) = cq$

• 模式密度为：

$$g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_j \iint \frac{dS_\omega}{|\nabla_q \omega_j(q)|} = \frac{3V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi(\omega/c)^2}{c} = \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \omega^2$$

➤ 独立振动模式数与晶体总自由度相等，有频率上限 ω_D ，为德拜频率。

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N \rightarrow \omega_D = c \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \Rightarrow g(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2$$

➤ 晶格热容为：
$$C_V = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right) \omega^2 d\omega$$

$$= 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

➤ 其中， $\theta_D = \hbar \omega_D / k_B$ 称为德拜温度。

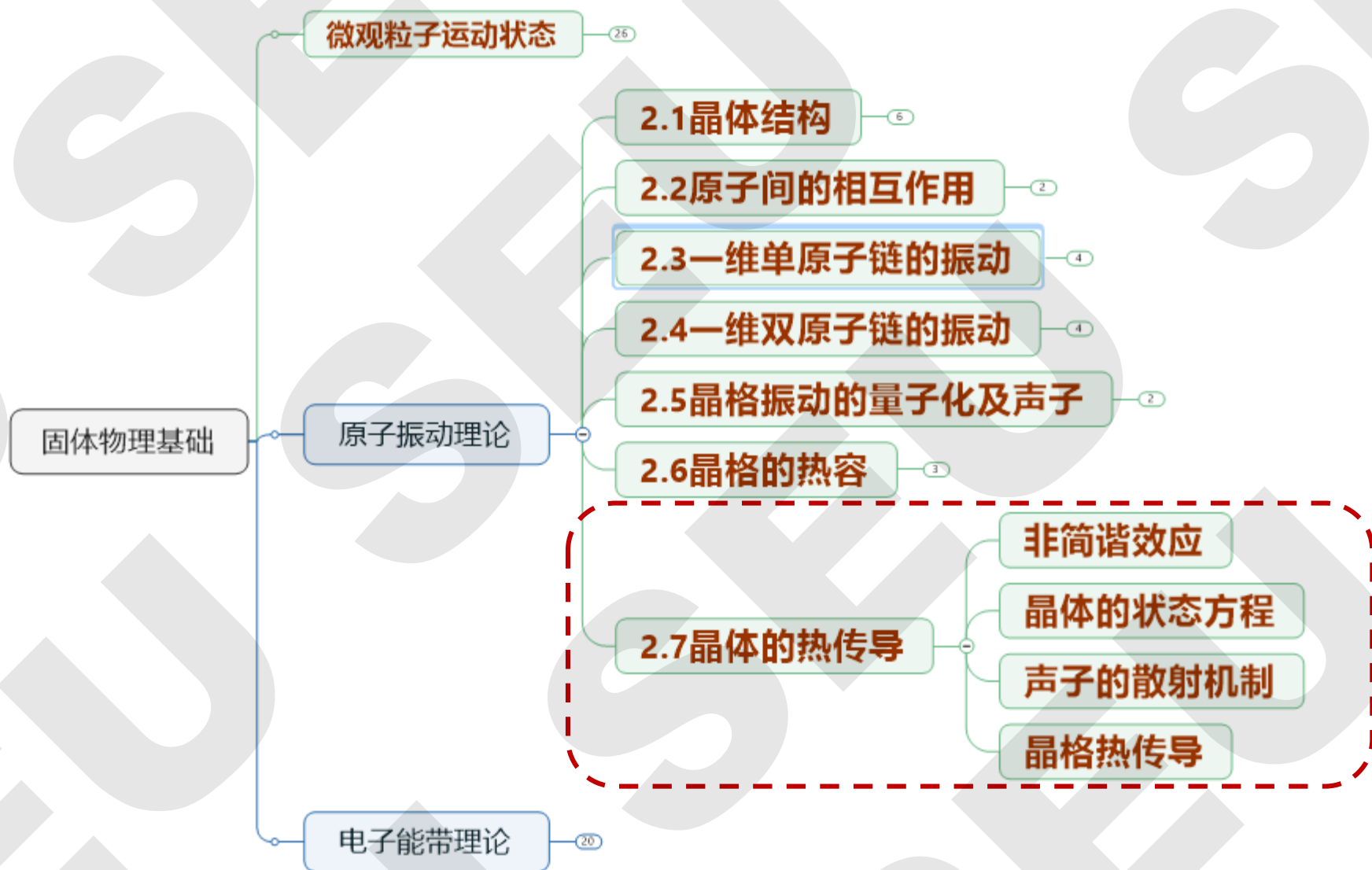
德拜模型：低温与高温极限

- 高温 $T \gg \theta_D$ 时，上式被积函数可按 x 很小展开，近似为： $\frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \approx x^2$
- 可得 $C_V = 3Nk_B$ ，与杜隆-珀蒂定律一致。
- 低温 $T \ll \theta_D$ 时，积分上限 θ_D/T 可模型视为无穷大，利用积分公式：

$$\int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{4\pi^2}{15} \Rightarrow C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

- 德拜模型在低温下很成功， $C_V \sim T^3$ 依赖关系与实验相符；
- 温度越低符合越好，因为低温下长波声学模的占主要，而长波声学模近似为弹性波；
- 德拜模型也有局限，德拜温度本应与温度无关，与实验结果不符。

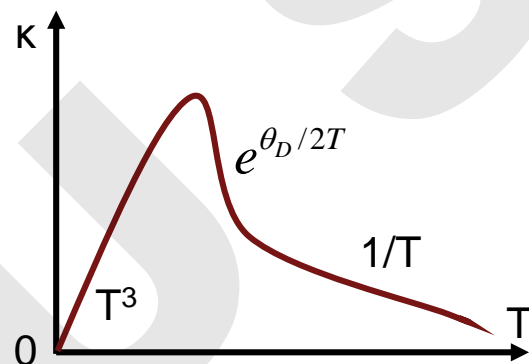
- 格波的能量量子化
- **声子的概念及特点**
- 晶格热容的一般表达、模式密度（思路）
- **爱因斯坦模型（结论）**
- **德拜模型（结论）**



晶体热传导

➤ 中温区：

- 能产生U过程的声子的波矢应比较大，至少波矢 q 超过1/4布里渊区的长度，能量约为 $\hbar\omega_D/2 = k_B\theta_D/2$ ，激发这种声子的概率正比于 $e^{-\theta_D/2T}$
- → 平均自由程： $l \sim e^{\theta_D/2T}$
- C_V 近似为常数；
- 热导率： $\kappa \propto e^{\theta_D/2T}$



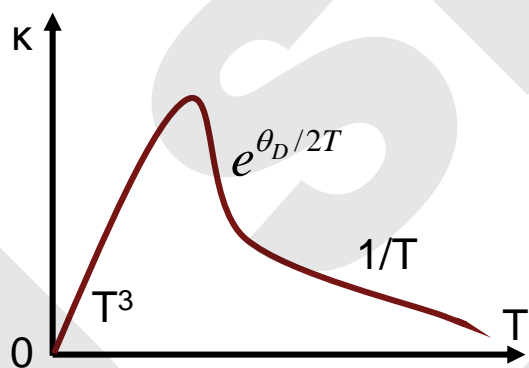
➤ 低温区($T \ll \theta_D$ 时)：

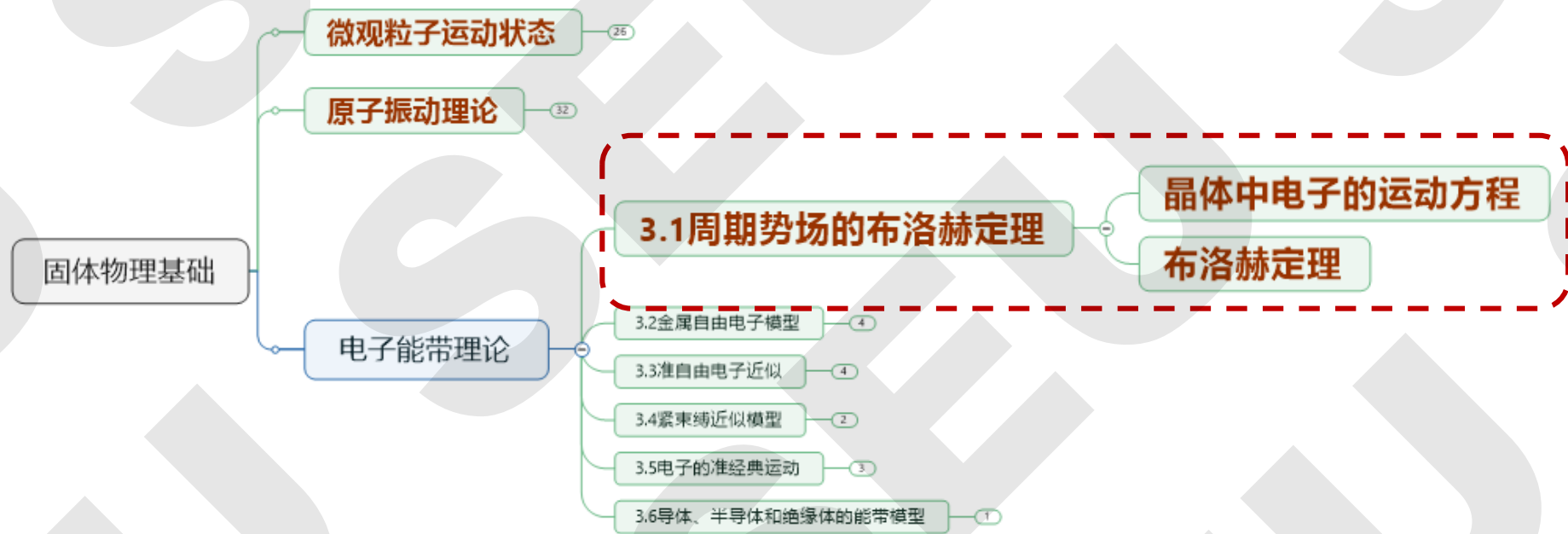
- 能产生U过程的声子非常少，平均自由程非常大，主要受到晶体大小的限制，边界散射成为主要因素；
- 低温下 C_V 与 T^3 成正比；
- 热导率： $\kappa \propto T^3$

- ### ➤ 总体而言，随温度降低， κ 先按 $1/T$ 规律上升，在中温区按指数规律上升，边界散射在低温区成主要因素，此时 κ 按 T^3 下降， κ 在某一温度出现极大值，与实验结果相符。

小结

- 非简谐效应的含义;
- 声子散射的U过程和N过程;
- 热导率随温度的变化:





布洛赫定理与布洛赫波函数

- 周期场中，描述电子运动的薛定谔方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad \begin{aligned} V(\vec{r}) &= V(\vec{r} + \vec{R}_l) \\ \vec{R}_l &= \ell_1 \vec{a}_1 + \ell_2 \vec{a}_2 + \ell_3 \vec{a}_3 \end{aligned}$$

- 方程的解为布洛赫波函数，周期势场的作用是用一个调幅平面波取代了平面波，布洛赫波在晶体中无衰减的传播，不受晶格势场散射。

$$\psi_k^n(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k^n(\vec{r}), \quad u_k^n(\vec{r} + \vec{R}_l) = u_k^n(\vec{r})$$

- 布洛赫定理：平移晶格矢量时波函数只增加一个相位因子

$$\psi_k^n(\vec{r} + \vec{R}_l) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \psi_k^n(\vec{r})$$

- 布洛赫电子：周期性势场中运动的电子或布洛赫波函数所描述的电子。

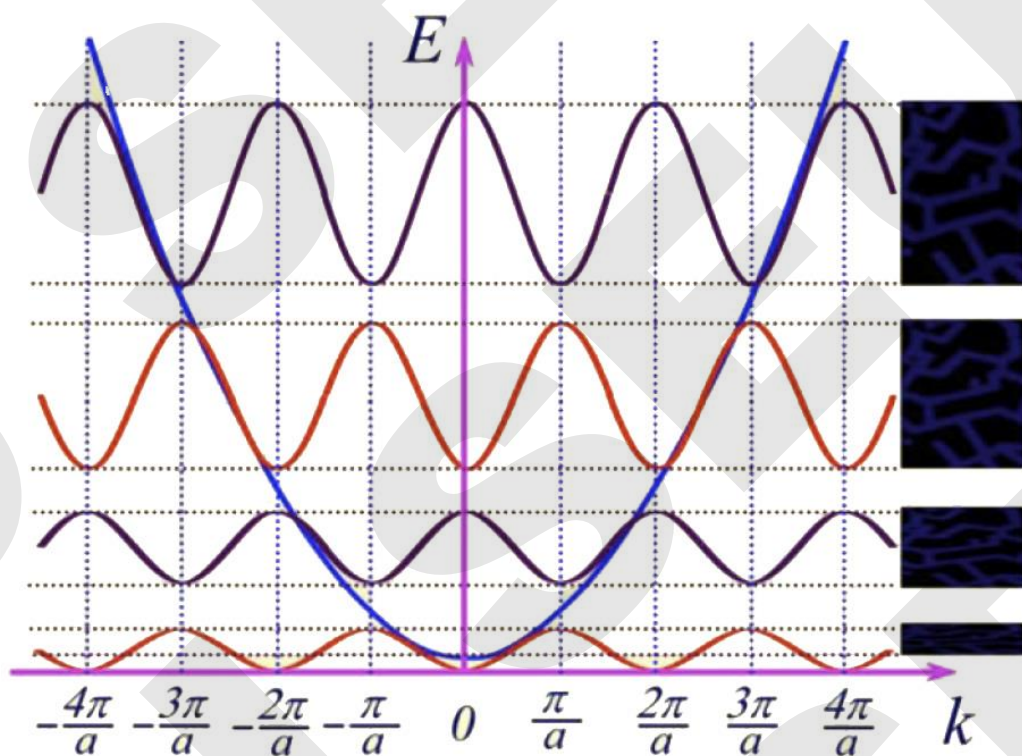
- 布洛赫波函数特点：
- $$\psi_k^n(\vec{r}) \begin{cases} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ u_k^n(\vec{r}) \end{cases}$$

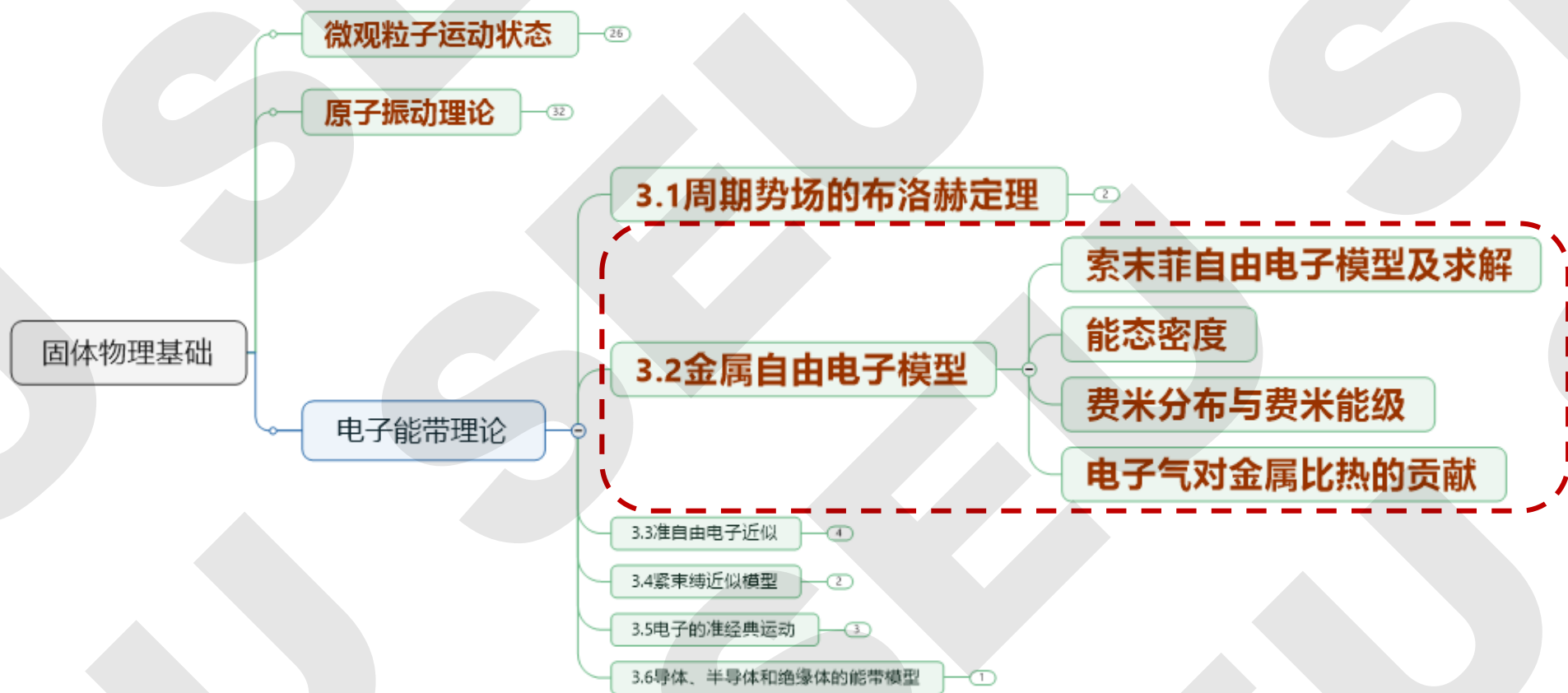
描述了晶体电子的共有化运动

描述了晶体电子围绕原子核的运动

电子的能带结构

- 对于一个确定的 n , $E_n(k)$ 是 k 的周期函数, 则必然有能量的上下界, 使得对于给定的 n , 所有的 k 对应的能级均包含在一个能量范围内;
- 因为晶体有宏观尺度, 波矢 k 的分布是准连续的, 相邻两个能级的差极小, 形成一个准连续的能带。





课程回顾

- 金属自由电子模型的解:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2)$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\frac{2\pi}{L}(l_x x + l_y y + l_z z)}$$

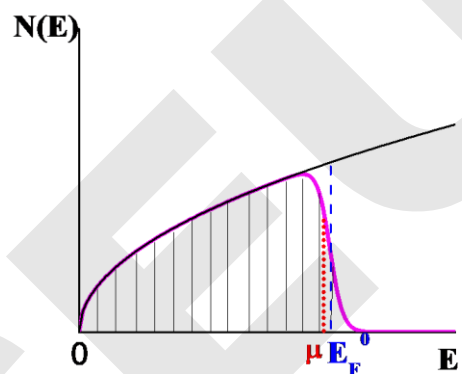
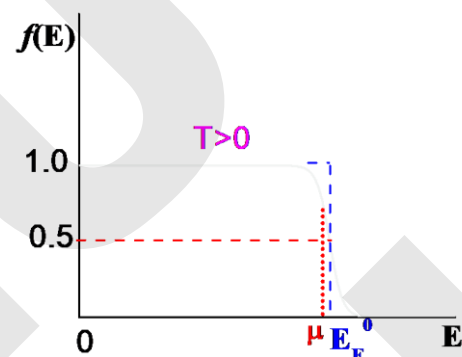
- 能态密度: 单位能量间隔中的能态数 $g(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{V(2m)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot E^{\frac{1}{2}}$

- 费米分布与费米能级:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}, \text{ 其中 } \mu \text{ 为化学势 } \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V}$$

$$N = \int_0^\infty f(E) g(E) dE = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{1/2} dE}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

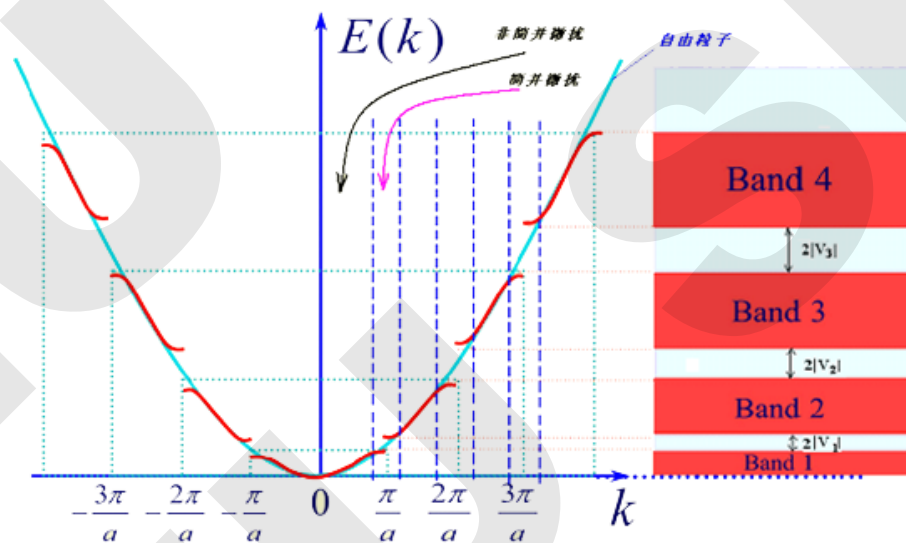
- 金属的热容: $C_V = \lambda T + \beta T^3$





能带图 $E_n(k)$ 的一般特性

- 自由电子能谱为抛物线，禁带出现在布里渊区边界；
- 禁带之上的一个能带底部，能量随波矢的变化是向上的抛物线；禁带之下的能带上部，能量随波矢变化是向下的抛物线；
- 禁带的宽度 $2|V_n|$ 取决于势场 $V(x)$ ；
- 波矢 k 准连续分布，形成一系列能带 $E_1(k)$, $E_2(k)$, $E_3(k)$, ..., 各能带之间是禁带，禁带中没有允许的能级。



能带序号	k 的范围	k 的坐标轴长度	布里渊区
$E_1(k)$	$-\frac{\pi}{a} \sim \frac{\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}$	第一布里渊区
$E_2(k)$	$-\frac{2\pi}{a} \sim -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \sim \frac{2\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}$	第二布里渊区
$E_3(k)$	$-\frac{3\pi}{a} \sim -\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a} \sim \frac{3\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}$	第三布里渊区
⋮	⋮	⋮	⋮

小结

➤ 近自由电子的近似条件: $V(x) = \sum_n V_n e^{in\frac{2\pi}{a}x} = V_0 + \Delta V$ (傅里叶展开)

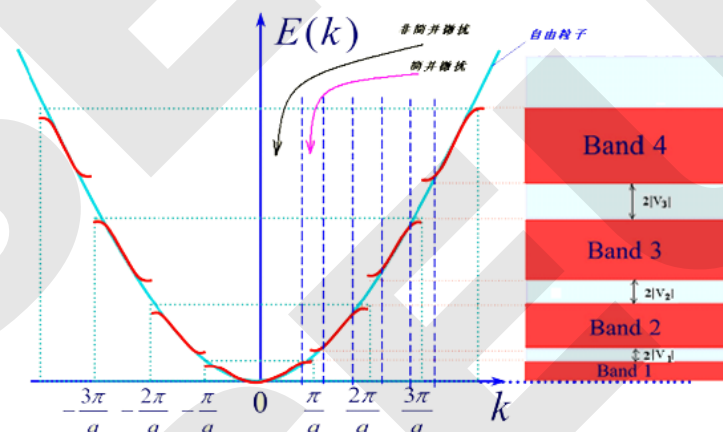
➤ 非简并微扰解 (含义):

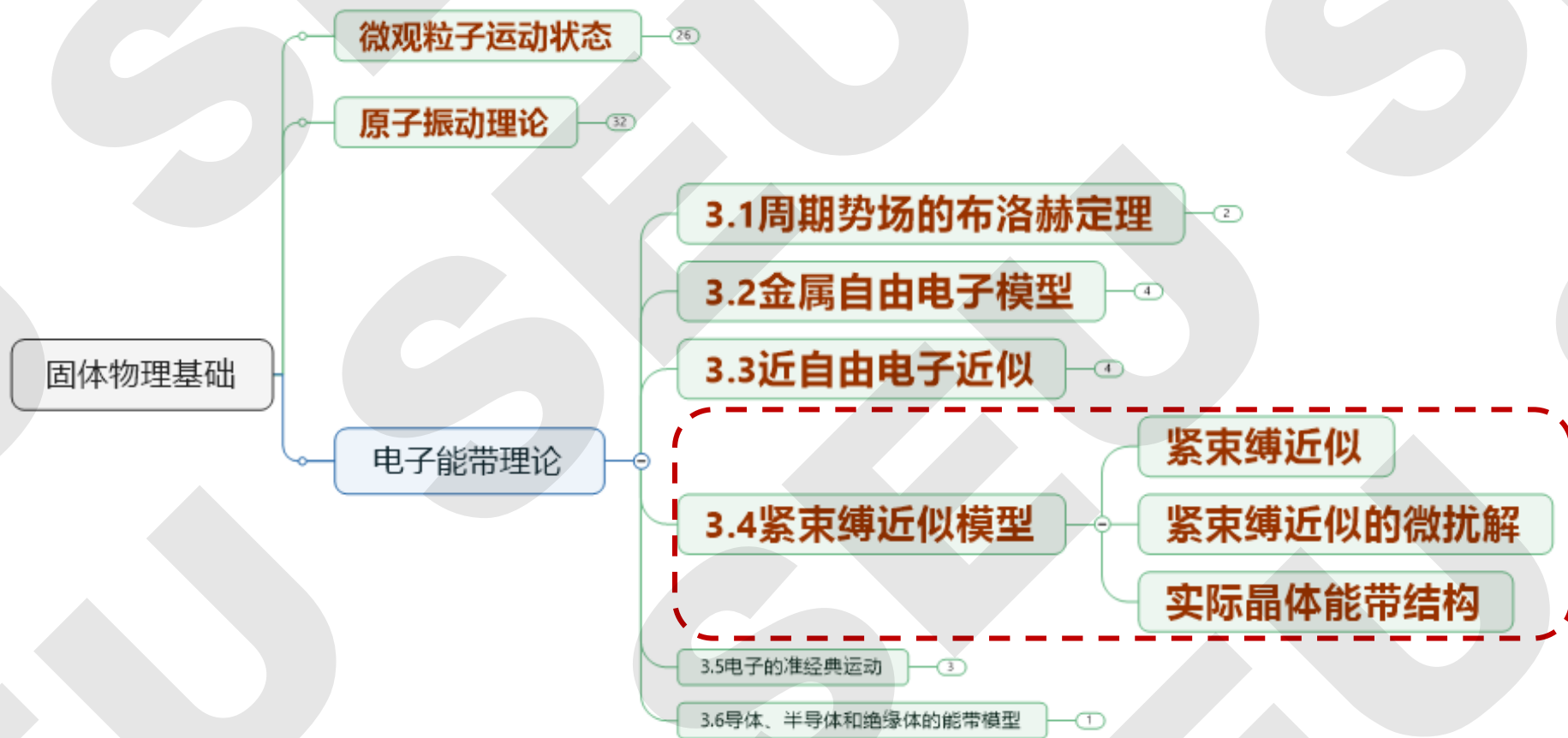
$$\psi_k(x) = \psi_k^{(0)} + \psi_k^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + \sum_n' \frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 - \left(k + \frac{2\pi n}{a} \right)^2 \right]} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right)x} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} u(x)$$

➤ 简并微扰条件: $k' = -k = k + \frac{2\pi n}{a} \Rightarrow k = -\frac{\pi n}{a}, k' = \frac{\pi n}{a}$

➤ 禁带产生的原因及宽度

➤ 能带结构图的三种表示方法





固体的能带结构：紧束缚近似

3. 紧束缚近似： $\hat{H} = \hat{H}_l + \Delta U(\vec{r})$

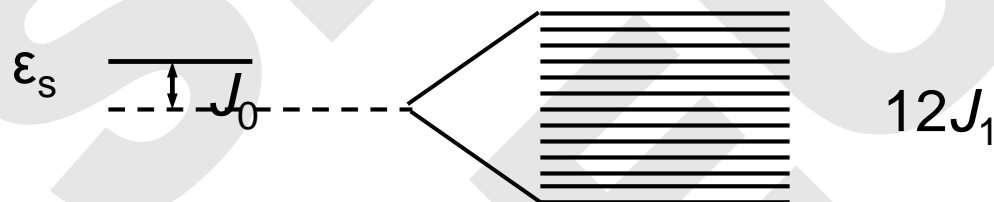
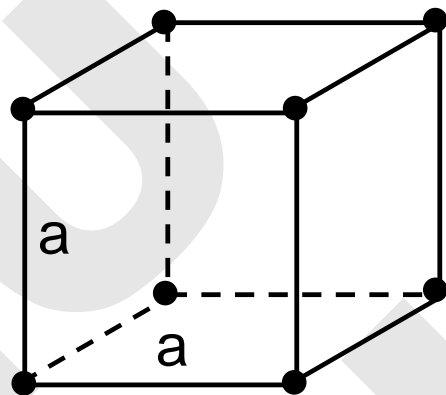
➤ 零级近似为单原子势场中的电子波函数，其他原子的影响作为微扰：

$$\hat{H}_l \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_l) = \varepsilon_j \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_l), \quad [\hat{H}_l + \Delta U(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}),$$

➤ 紧束缚近似的解为：

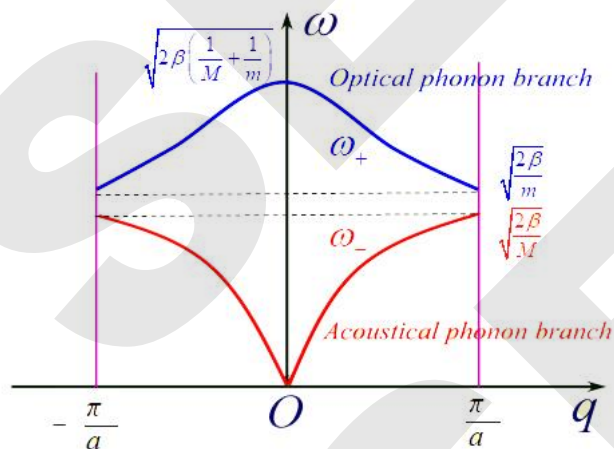
$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\ell}} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_{\ell})$$

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_j - J_0 - \sum_{\vec{R}_s = \text{近邻}} J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

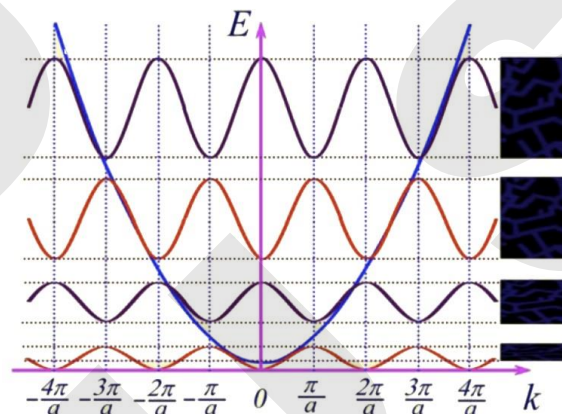


晶格振动理论与能带理论的对比

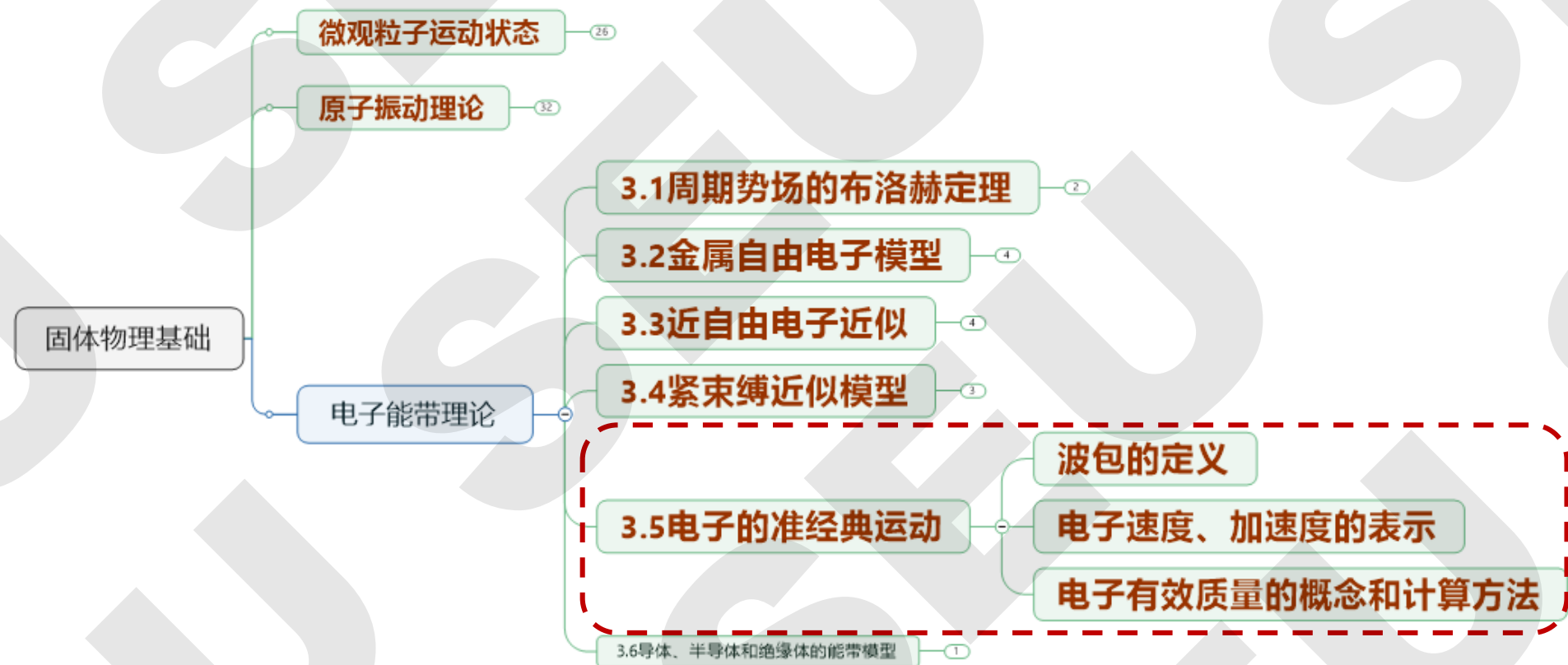
色散关系： $\omega(q)$



能带结构： $E(k)$



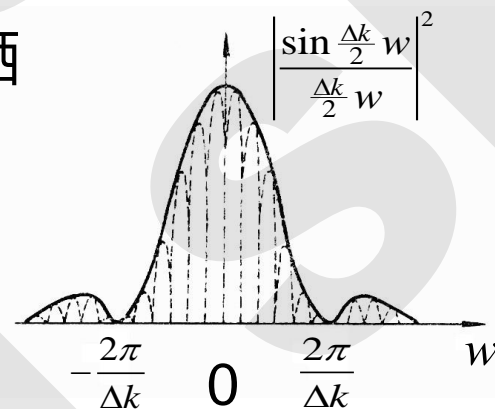
	晶格振动理论	能带理论
相同点	波矢 q/k 准连续，第一布里渊区内有 N 个值	
	偶函数	
	周期函数，周期为倒格矢	
	反映了能量与波矢的关系	
不同点	都有允带和禁带	
	每个 q 对应 $3s$ 个 $\omega_j(q)$	每个 k 对应无穷多个 $E_n(k)$
	满足玻色爱因斯坦分布	满足费米狄拉克分布



小结

- 波包的含义：含时间的Bloch函数来组成波包，牺牲波矢的完全确定来换取坐标的某种确定性。

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

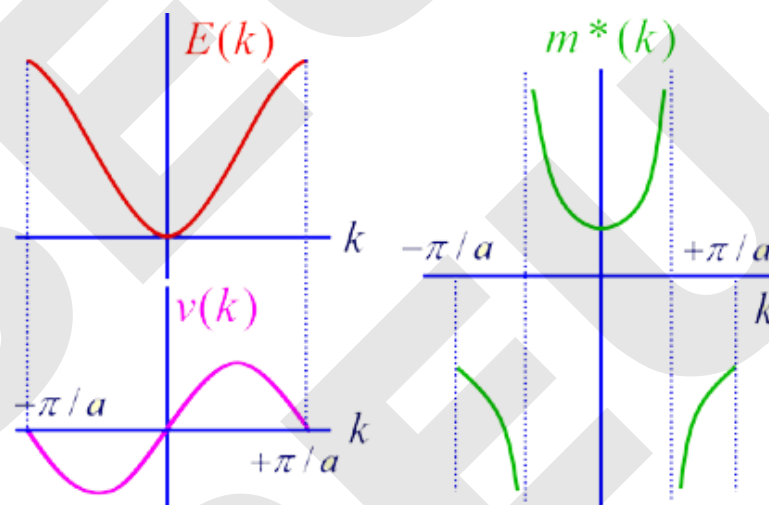


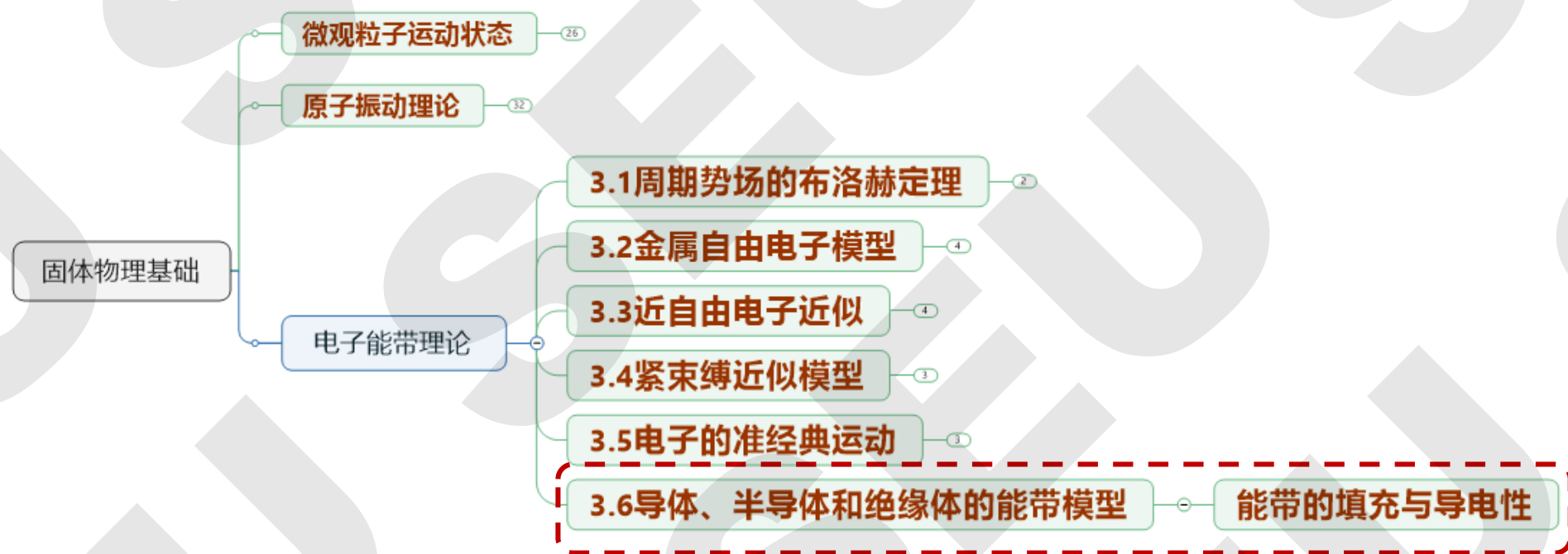
- 晶体中电子准经典运动基本关系式：
$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E \quad \vec{F} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$$

- 电子有效质量的含义及计算方法：

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

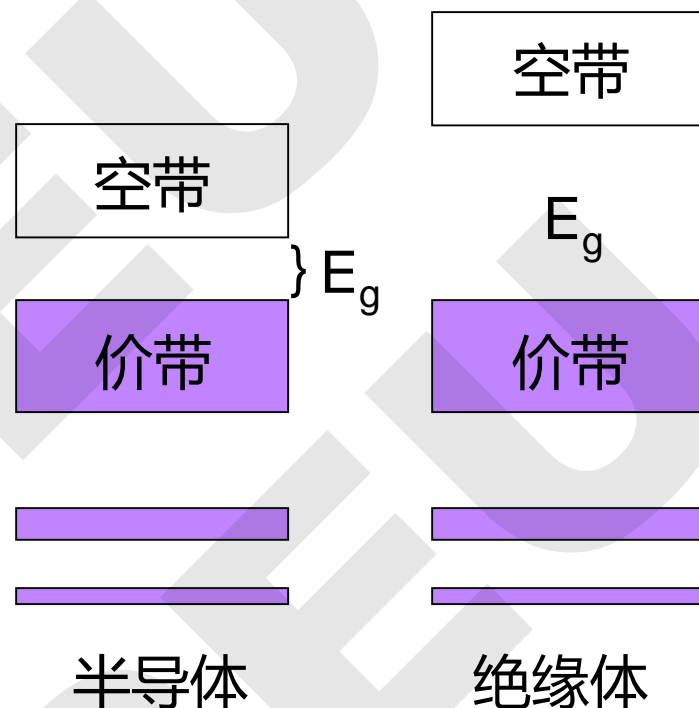
$$F = m^* \frac{dv}{dt}$$





非导体、半导体与绝缘体

- 若禁带上的允带是半满带，则该允带能产生电流，称为导带；
- 导带下面的允带称为价带；
- 导带和价带之间称为禁带。
- 非导体：电子刚好填满能量最低的一系列能带，而能量再高的各能带都是没有电子填充的空带。
- 半导体：禁带宽度一般较窄：
 - E_g 介于 $0.2 \sim 3.5 \text{ eV}$ 之间；
 - 常规半导体：如 Si: $E_g \sim 1.1 \text{ eV}$; Ge: $E_g \sim 0.7 \text{ eV}$; GaAs: $E_g \sim 1.5 \text{ eV}$ 。
- 绝缘体：禁带宽度一般都较宽，
 $E_g > \text{几个 eV}$ ；
 - 如 $\alpha - \text{Al}_2\text{O}_3$: $E_g \sim 8 \text{ eV}$;



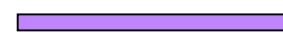
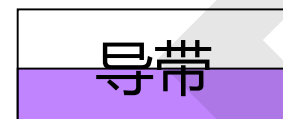
导体

- 导体：电子除填满能量最低的一系列能带外，在满带和空带间还有部分填充的导带。

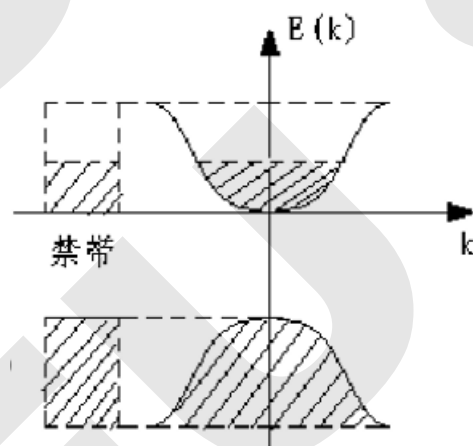
(1) 导体:能带中一定有不满带

(2) 绝缘体:能带中只有满带和空带

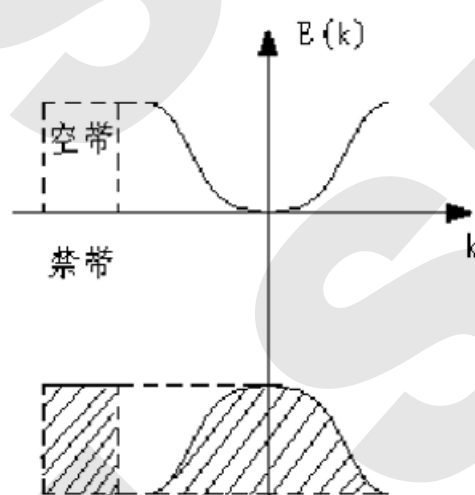
(3) 半导体:能带中只有满带和空带,但禁带宽度较窄。



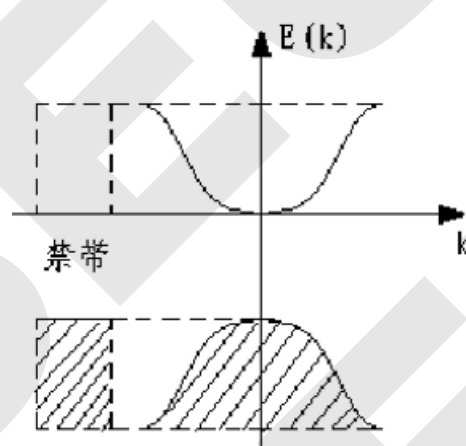
导体



导体



绝缘体



半导体