固体能带理论2
布洛赫电子的准经典运动

冯 雪
x-feng@tsinghua.edu.cn
罗姆楼2-101B

固体能带理论要解决的问题

- 1. 能带是如何形成的？
  - 周期性势场下电子可能的状态
- 2. 能带中电子在外场作用下的运动规律
  - 主要考虑静电场作用——导电性

- 德鲁德模型给出连接微观粒子运动与物质宏观特性的方法
  1. 单个电子的运动
  2. 大量电子组成的系综
  3. 电子系综在外场作用下的运动

固体能带理论

- 布洛赫电子
  - 布洛赫定理
  - 一维近自由电子近似

- 外场中电子运动状态的变化
  - 布洛赫电子的准经典运动
  - 导体、绝缘体和半导体的能带解释

黄昆书P236
(§5.1～§5.3)

布洛赫电子

- 布洛赫电子的准经典运动

- 导体、绝缘体和半导体的能带解释

晶体中电子在外场作用下的运动

- 为了研究电子的输运过程，仅有能带结构还是不够的，需要研究电子在外场中的作用

- 外场：
  - 电场：静电场、交变场
  - 磁场：静磁场、交变场
  - 杂质离子引入的局部势场

- 基本前提——不改变能带结构
  - 外场比周期场弱得多，可适用微扰条件
  - 否则需要重新计算能带结构

晶体中电子在外场作用下的运动

- 由于通常外加的场总是比晶体的周期场弱得多，因而可以在周期场的本征态的基础上进行讨论

（1）解含外场的波动方程

外场

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2+U(\boldsymbol{r})+U_{dv}\right]\psi=E\psi$$

通常情况下，只能得到近似解

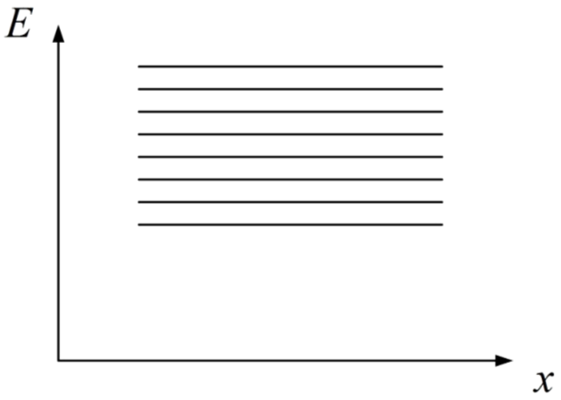
（2）在一定条件下，把晶体中电子在外场中的运动当作准经典粒子来处理

相对方便、直观

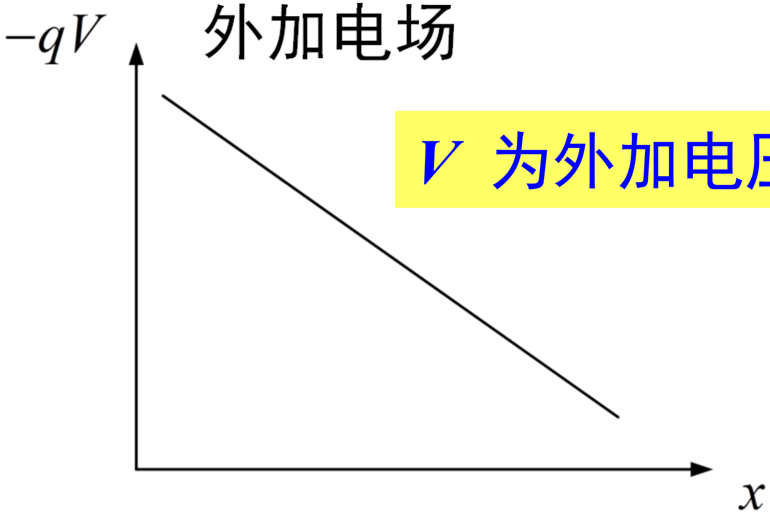
条件：外场较弱、恒定，不考虑电子在不同能带间的跃迁，不考虑电子的衍射、干涉及碰撞等

实空间下电子能带的倾斜与振荡

能带在空间中的分布



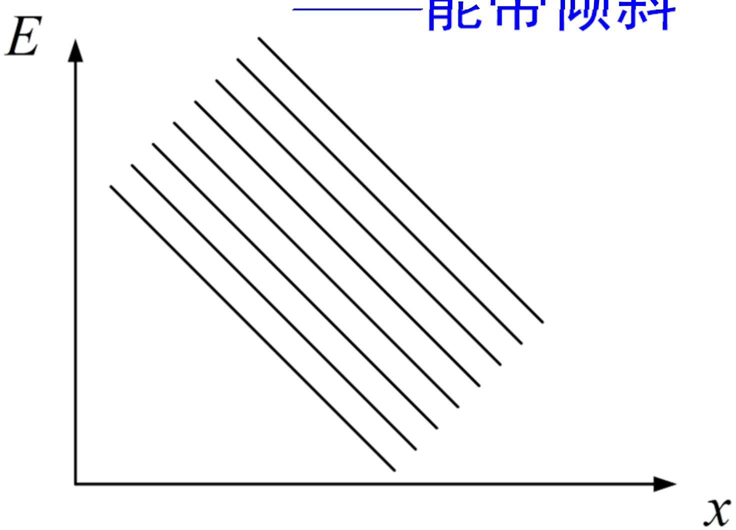
外加电场



V 为外加电压

外加电场后能带的分布

——能带倾斜



?

电子如何运动?

布洛赫电子的准经典运动

- 利用准经典近似来描述布洛赫(Bloch)电子在外场中的作用——准经典运动
- 经典运动：确定的动量和位置
- 准经典运动：测不准关系内近似的动量和位置

$$\Delta r \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \qquad \Delta r \cdot \Delta k \geq 1/2$$

引入准经典粒子——波包

波包

- 电子的运动状态由电子波函数的一个波包代表
- 所有坐标与动量都有近似的数值，其精确度由测不准原理所限制
- 所谓波包是指该粒子（例如电子）空间分布在 r_0 附近的 Δr 范围内，动量取值为 $\hbar k_0$ 附近 $\hbar\Delta k$ 范围内。
- Δr 与 Δk 满足测不准关系

波包中心： r_0 称为该粒子的位置
动量中心： $\hbar k_0$ 称为该粒子的动量

波包

在晶体中，组成波包的本征态是Bloch函数。

由于波包中含有能量不同的本征态，因此，必须用含时间的Bloch函数：

$$\vec{k}' = \vec{k}_0 + \Delta\vec{k} \qquad \psi_{k'}(r,t) = e^{i\left[\vec{k}'\cdot\vec{r}-\frac{E(k')}{\hbar}t\right]}u_{k'}(r)$$

把与k_0相邻近的各k'状态叠加起来就可以组成与量子态k_0相对应的波包

$$\psi(r,t) = \int_{-\Delta k_x/2}^{\Delta k_x/2} dk_x \int_{-\Delta k_y/2}^{\Delta k_y/2} dk_y \int_{-\Delta k_z/2}^{\Delta k_z/2} \psi_{k_0+k}(r,t)\, dk_z$$

要得到稳定的波包Δk必须很小

波包

把与k_0相邻近的各k'状态叠加起来就可以组成与量子态k_0相对应的波包

$$\psi(r,t)=\int_{-\Delta k_x/2}^{\Delta k_x/2}dk_x\int_{-\Delta k_y/2}^{\Delta k_y/2}dk_y\int_{-\Delta k_z/2}^{\Delta k_z/2}dk_z\psi_{k_0+k}(r,t)$$

$$\psi_{k'}(r,t)=e^{i\left[\vec{k}'\cdot\vec{r}-\frac{E(k')}{\hbar}t\right]}u_{k'}(r)$$

$$\frac{E(k')}{\hbar}t=\frac{E(k_0)}{\hbar}t+\overrightarrow{\Delta k}\cdot\frac{\nabla_k E}{\hbar}t$$

一级近似

$$u_{k'}(r)\approx u_{k0}(r)$$

$$\overrightarrow{k'}\bullet\vec{r}=\overrightarrow{k_0}\bullet\vec{r}+k_x x+k_y y+k_z z$$

$$\psi(r,t)=\psi_{k_0}(r,t)\int_{-\Delta k_x/2}^{\Delta k_x/2}\exp(ik_x u)\,dk_x\int_{-\Delta k_y/2}^{\Delta k_y/2}()\,dk_y\int_{-\Delta k_z/2}^{\Delta k_z/2}()\,dk_z$$

$$u=x-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0}t,\quad v=y-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0}t,\quad w=z-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0}t$$

波 包

把与k_0相邻近的各k'状态叠加起来就可以组成与量子态k_0相对应的波包

$$\psi(r,t)=\int_{-\Delta k_x/2}^{\Delta k_x/2}dk_x\int_{-\Delta k_y/2}^{\Delta k_y/2}dk_y\int_{-\Delta k_z/2}^{\Delta k_z/2}dk_z\psi_{k_0+k}(r,t)$$

$$\psi_{k'}(r,t)=e^{i\left[\vec{k}'\cdot\vec{r}-\frac{E(k')}{\hbar}t\right]}u_{k'}(r)$$

$$\frac{E(k')}{\hbar}t=\frac{E(k_0)}{\hbar}t+\overrightarrow{\Delta k}\cdot\frac{\nabla_k E}{\hbar}t$$

一级近似

$$|\psi(r,t)|^2=|u_{k0}(r)|^2\left|\frac{\sin(u\Delta k_x/2)}{u\Delta k_x/2}\right|^2\left|\frac{\sin(v\Delta k_y/2)}{v\Delta k_y/2}\right|^2\left|\frac{\sin(w\Delta k_z/2)}{w\Delta k_z/2}\right|^2(\Delta k_x)^2(\Delta k_y)^2(\Delta k_z)^2$$

$$u=x-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0}t,\quad v=y-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0}t,\quad w=z-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0}t$$

波 包

把与k_0相邻近的各k'状态叠加起来就可以组成与量子态k_0 相对应的波包

$$\psi(r,t)=\int_{-\Delta k_x/2}^{\Delta k_x/2}dk_x\int_{-\Delta k_y/2}^{\Delta k_y/2}dk_y\int_{-\Delta k_z/2}^{\Delta k_z/2}dk_z\psi_{k_0+k}(r,t)$$

$$\psi_{k'}(r,t)=e^{i\left[\vec{k}'\cdot\vec{r}-\frac{E(k')}{\hbar}t\right]}u_{k'}(r)$$

$$\frac{E(k')}{\hbar}t=\frac{E(k_0)}{\hbar}t+\overrightarrow{\Delta k}\cdot\frac{\nabla_k E}{\hbar}t$$

一级近似

$$|\psi(r,t)|^2=|u_{k0}(r)|^2\boxed{\left|\frac{\sin(u\Delta k_x/2)}{u\Delta k_x/2}\right|^2}\left|\frac{\sin(v\Delta k_y/2)}{v\Delta k_y/2}\right|^2\left|\frac{\sin(w\Delta k_z/2)}{w\Delta k_z/2}\right|^2(\Delta k_x)^2(\Delta k_y)^2(\Delta k_z)^2$$

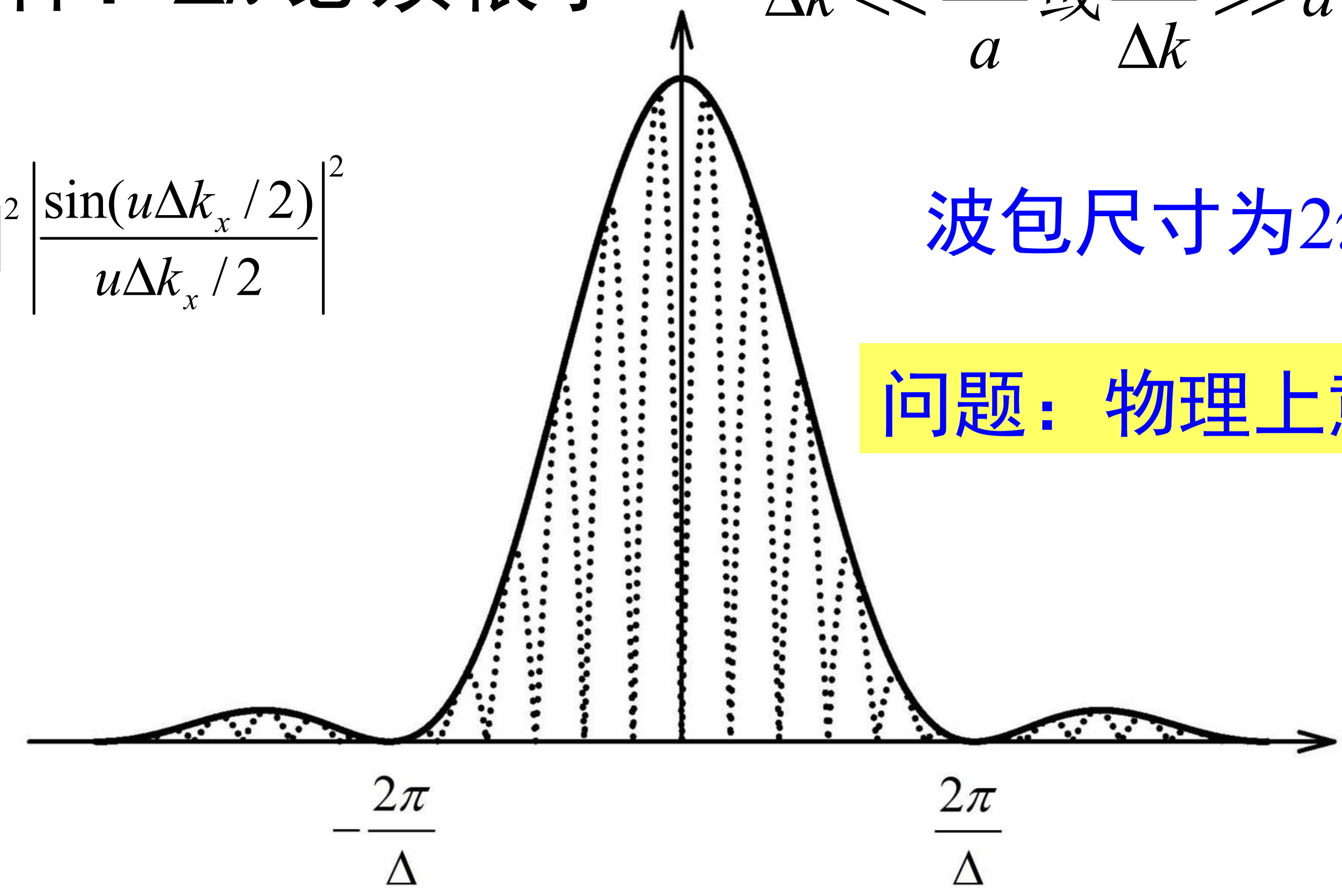
$$u=x-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0}t,\quad v=y-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0}t,\quad w=z-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0}t$$

电子的波包

- 条件：Δk 必须很小

$$\Delta k << \frac{2\pi}{a} \text{ 或 } \frac{2\pi}{\Delta k} >> a$$

$$|u_{k0}(u)|^2 \left|\frac{\sin(u\Delta k_x/2)}{u\Delta k_x/2}\right|^2$$



波包尺寸为$2\pi/\Delta k$

问题：物理上意味着？

波包尺度 $2\pi/\Delta k$ 远远大于原胞时：
电子可以视为准经典粒子

波包

把与k_0相邻近的各k'状态叠加起来就可以组成与量子态k_0相对应的波包

$$\psi(r,t)=\int_{-\Delta k_x/2}^{\Delta k_x/2}dk_x\int_{-\Delta k_y/2}^{\Delta k_y/2}dk_y\int_{-\Delta k_z/2}^{\Delta k_z/2}dk_z\psi_{k_0+k}(r,t)$$

$$\frac{E(k')}{\hbar}t=\frac{E(k_0)}{\hbar}t+\overrightarrow{\Delta k}\cdot\frac{\nabla_k E}{\hbar}t$$

$$|\psi(r,t)|^2=|u_{k0}(r)|^2\left|\frac{\sin(u\Delta k_x/2)}{u\Delta k_x/2}\right|^2\left|\frac{\sin(v\Delta k_y/2)}{v\Delta k_y/2}\right|^2\left|\frac{\sin(w\Delta k_z/2)}{w\Delta k_z/2}\right|^2(\Delta k_x)^2(\Delta k_y)^2(\Delta k_z)^2$$

$$u=x-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0}t,v=y-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0}t,w=z-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0}t$$

波包

把与k_0相邻近的各k'状态叠加起来就可以组成与量子态k_0相对应的波包

$$\psi(r,t)=\int_{-\Delta k_x/2}^{\Delta k_x/2}dk_x\int_{-\Delta k_y/2}^{\Delta k_y/2}dk_y\int_{-\Delta k_z/2}^{\Delta k_z/2}dk_z\psi_{k_0+k}(r,t)$$

$$\frac{E(k')}{\hbar}t=\frac{E(k_0)}{\hbar}t+\overrightarrow{\Delta k}\cdot\frac{\nabla_k E}{\hbar}t$$

波包中心的速度

$$\upsilon(k_0)=\frac{d\omega}{dk_0}=\frac{1}{\hbar}\left[\frac{dE(k)}{dk}\right]_{k_0}$$

$$u=x-\boxed{\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0}}t,\quad v=y-\boxed{\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0}}t,\quad w=z-\boxed{\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0}}t$$

波包群速度与布洛赫电子的速度

- 波包中心的移动速度(群速度)

$$\upsilon(k_0)=\frac{d\omega}{dk_0}=\frac{1}{\hbar}\left[\frac{dE(k)}{dk}\right]_{k_0} \qquad E(k)=\hbar\omega$$

- 布洛赫电子(晶体电子)的准经典运动速度：

$$\boxed{\upsilon_k=\frac{1}{\hbar}\nabla_k E(k)} \leftarrow \begin{aligned}\upsilon_x&=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_x}\\ \upsilon_y&=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_y}\\ \upsilon_z&=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_z}\end{aligned}$$

电子状态，决定电子速度

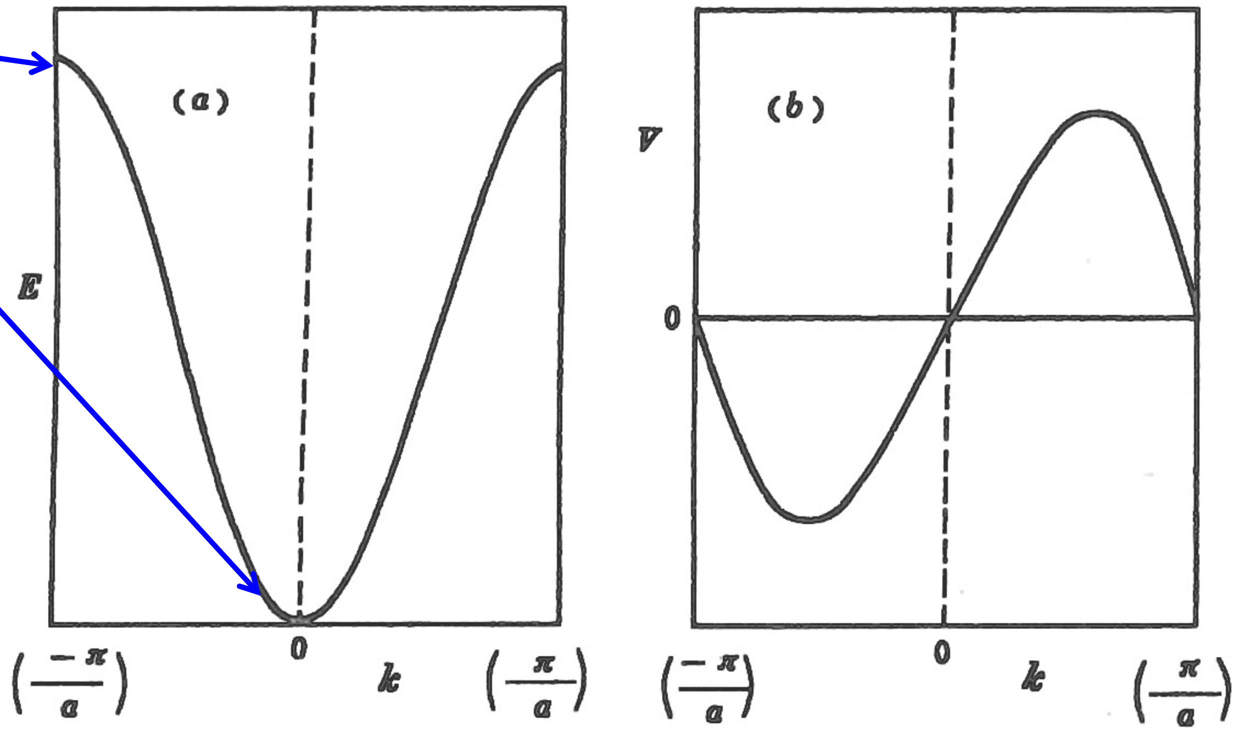
自由电子与晶体电子的速度

自由电子： $E(k)=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m_0}$ $\quad \upsilon=\dfrac{\hbar k}{m_0}$ 速度正比于k

晶体电子： $\boxed{\upsilon(k_0)=\dfrac{1}{\hbar}\left[\dfrac{dE(k)}{dk}\right]_{k_0}}$ 速度取决于$E\sim k$关系

一维为例：在能带底和能带顶, 电子速度$v=0$

$$\frac{dE}{dk}=0$$



自由电子与晶体电子的速度

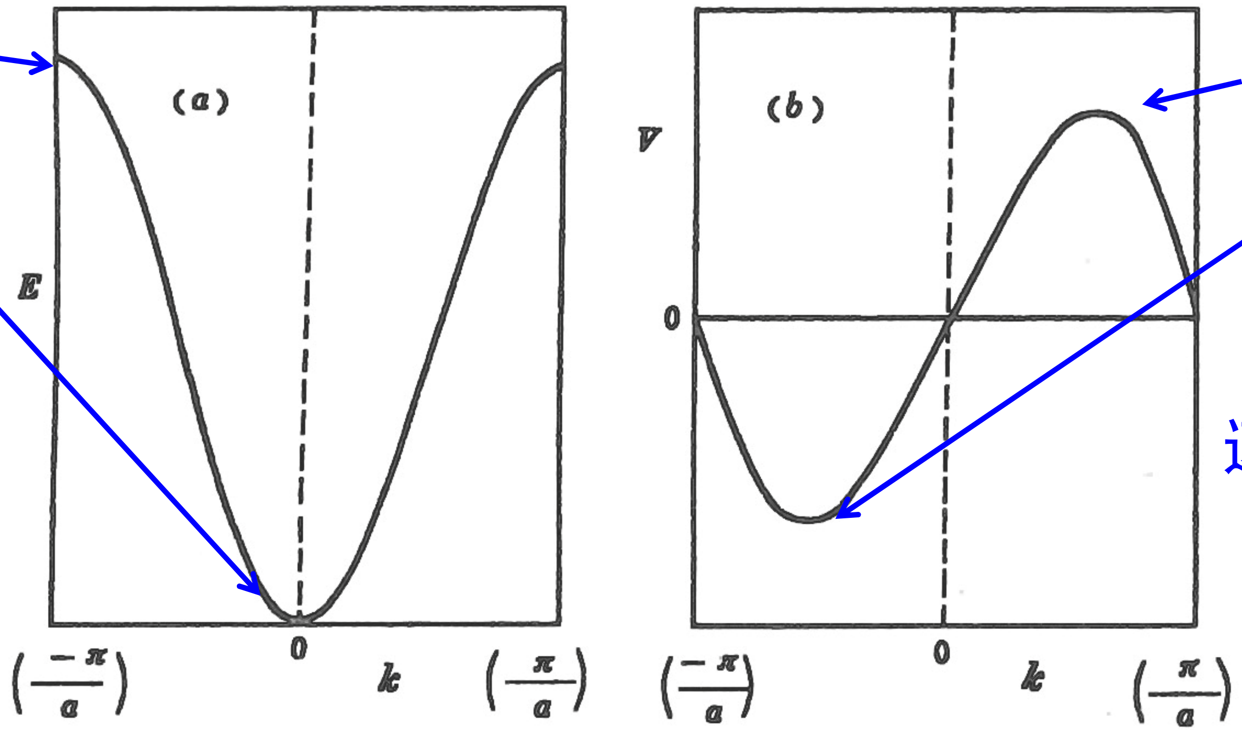
自由电子：$E(k)=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m_0}$　　$\upsilon=\dfrac{\hbar k}{m_0}$　　速度正比于k

晶体电子：$\boxed{\upsilon(k_0)=\dfrac{1}{\hbar}\left[\dfrac{dE(k)}{dk}\right]_{k_0}}$　　速度取决于$E\sim k$关系

一维为例：在能带底和能带顶，电子速度$v=0$

$\dfrac{dE}{dk}=0$

$\dfrac{d^2E}{dk^2}=0$



速度值极大

自由电子与晶体电子的速度

考虑了晶体电子后利用E～k关系重新定义速度：

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

自由电子： $E(k)=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m_0}$ $\quad \upsilon=\dfrac{1}{\hbar}\left[\dfrac{dE}{dk}\right]=\dfrac{\hbar k}{m_0}$

晶体电子速度与自由电子速度的区别：

晶体电子速度的方向为k空间能量梯度的方向(垂直于等能面)，因此取决于等能面的形状。

在一般情况下，在 k 空间中，等能面并不是球面，因此，速度的方向一般并不是 k 的方向，只有当等能面为球面，或在某些特殊方向上，速度才与k的方向相同

电子在晶体中的加速度

- 假设外力F作用于晶体电子

外力做功，电子获得能量：

$$dE = F \cdot \upsilon_k dt$$

$$= F \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \cdot dt$$

由于外力F的作用，必然使k发生变化，导致能量的变化：

$$dE = \nabla_k E(k) dk$$

$\Downarrow$

牛顿第二定律

$$\hbar \frac{dk}{dt} = F$$

电子的准动量（晶体动量）

$$\hbar\frac{dk}{dt}=F$$

$\hbar k$ 具有类似动量的性质，但已经不是普通意义下的电子动量

称作准动量或晶体动量

（1）自由电子波是平面波，平面波具有确定的动量。对于晶体电子，波函数是布洛赫波，布洛赫波不对应确定的动量。

（2）自由电子的动量变化完全是外力作用的结果，而晶体电子受到外力和晶体点阵的作用。

电子在晶体中的加速度

晶体电子的速度： $$\upsilon_k = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E(k)$$

牛顿第二定律： $$\hbar\frac{dk}{dt} = F \qquad F = m_0\frac{d\upsilon}{dt}$$

加速度： $$\frac{d\upsilon_k}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\hbar}\nabla_k E(k)\right)$$

$$\frac{d\upsilon_\alpha}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(k)}{\partial k_\alpha}\right) = \frac{1}{\hbar}\sum_\beta \frac{dk_\beta}{dt}\frac{\partial}{\partial k_\beta}\left(\frac{\partial E(k)}{\partial k_\alpha}\right) = \frac{1}{\hbar^2}\sum_\beta F_\beta \cdot \frac{\partial^2}{\partial k_\beta \partial k_\alpha}E(k)$$

$(\alpha, \beta = x, y, z)$

注意：$$\Delta\left[\frac{\partial E}{\partial k_\alpha}\right] = \frac{\partial}{\partial k_x}\left[\frac{\partial E}{\partial k_\alpha}\right]\Delta k_x + \frac{\partial}{\partial k_y}\left[\frac{\partial E}{\partial k_\alpha}\right]\Delta k_y + \frac{\partial}{\partial k_z}\left[\frac{\partial E}{\partial k_\alpha}\right]\Delta k_z$$

多元函数全微分

有效质量

$$\frac{dv_a}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\beta} F_{\beta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial k_{\beta}\,\partial k_{\alpha}} E(k)$$

有效质量

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

牛顿第二定律：

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m_0}\vec{F}$$

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{pmatrix} = \boxed{\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x\,\partial k_y} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x\,\partial k_z} \\ \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y\,\partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y\,\partial k_z} \\ \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z\,\partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z\,\partial k_y} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}$$

有效质量

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}$$

选取(k_x, k_y, k_z)为主轴方向时

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}$$

注意：各方向上的有效质量一般不同

自由电子模型

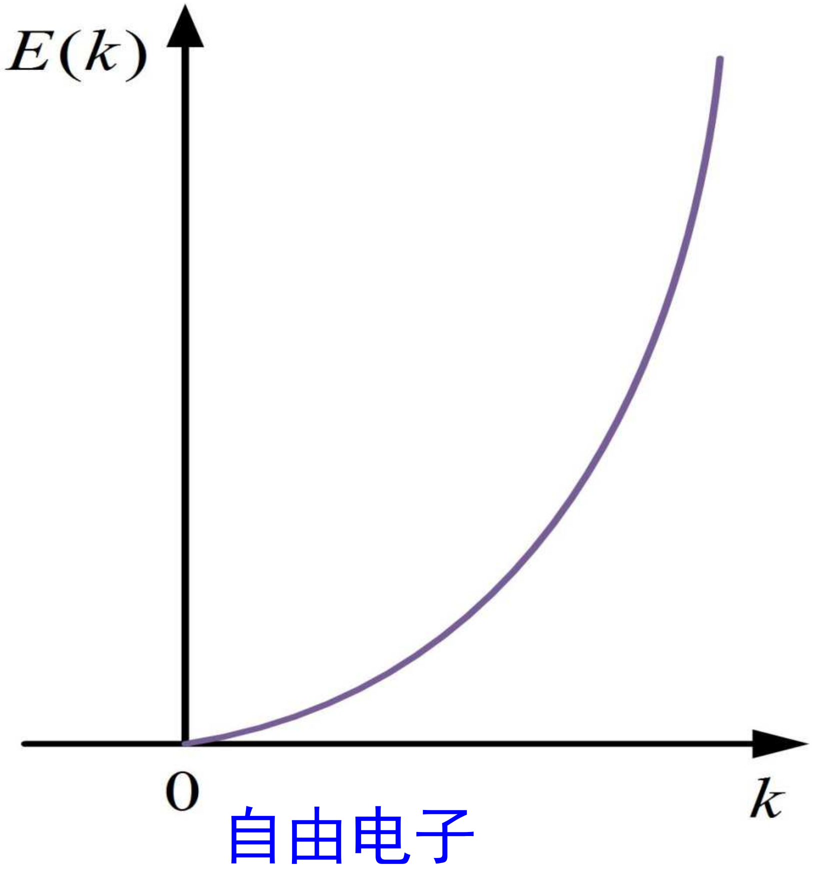
$$\boxed{k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}}$$

电子的能量：

$$E(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$p = \hbar k$$

$$E = \frac{1}{2m_0} p^2$$



电子质量：

$$\frac{1}{m_0} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}$$

抛物线上每一点二阶导数 → 带电粒子质量大，曲线开口大
带电粒子质量小，曲线开口小

有效质量

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

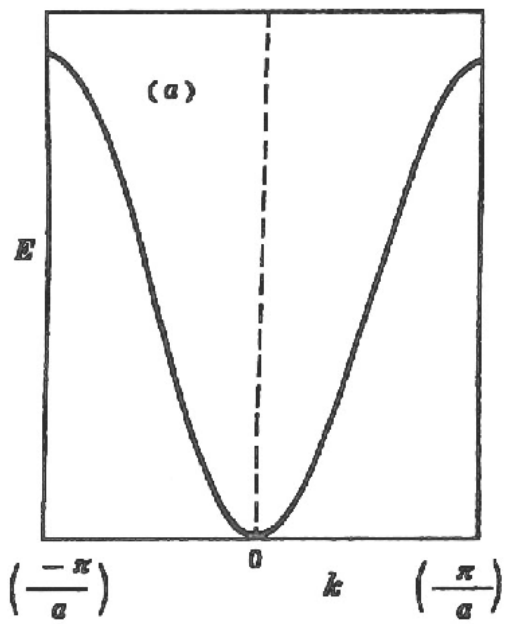
$$\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

(1) 质量是标量，而有效质量是张量

晶体中的电子，加速度和外力的方向可以不一致

有效质量

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



(1) 质量是标量，而有效质量是张量

晶体中的电子，加速度和外力的方向可以不一致

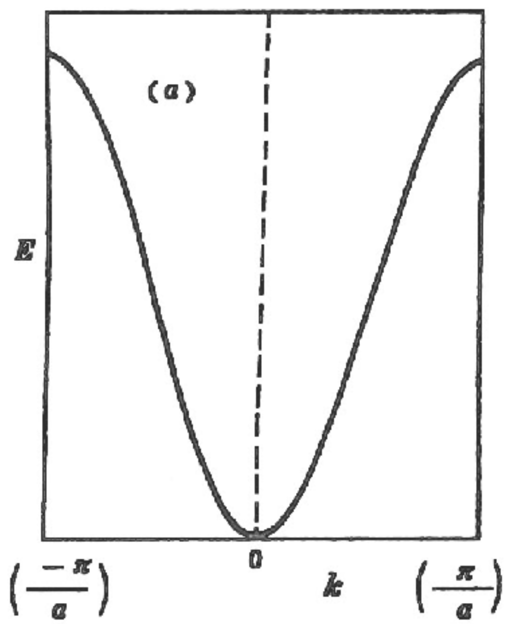
(2)质量常值，有效质量是变值，有正有负

能带底附近 > 0　　能带顶附近 < 0

有效质量m^*与电子质量m之间可以有很大的差别，因为有效质量中实际包含了周期势场的作用

有效质量

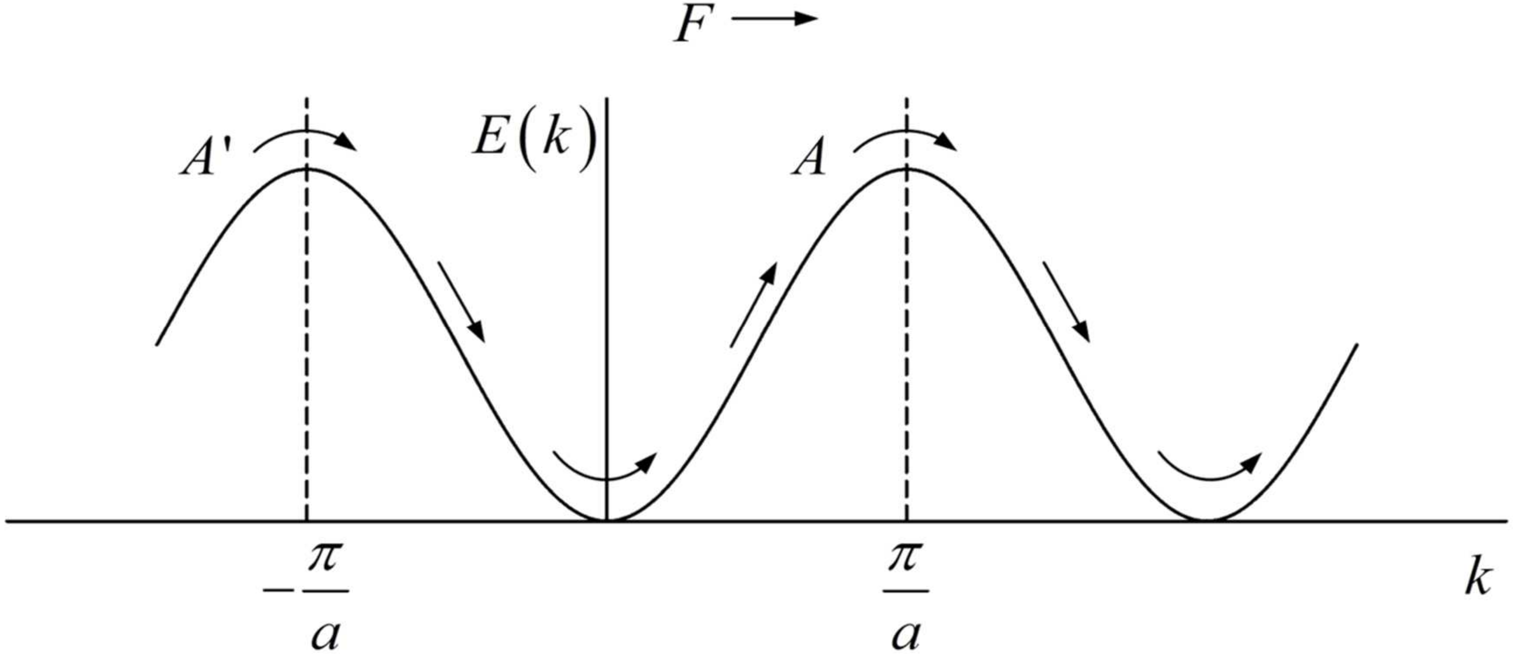
晶体电子：$$\upsilon(k_0)=\frac{1}{\hbar}\left[\frac{dE(k)}{dk}\right]_{k_0}$$



- 晶体所表现出来的有效质量，原因在于电子波在晶体中传播时与晶格交换动量。
- 正有效质量状态出现在能带底附近，体现电子从外场获得的动量，加速度为正。
- 负有效质量状态出现在能带顶附近，由电子从外场获得动量不足以弥补与晶格的碰撞，加速度为负。

恒定电场下的运动

电子在k 空间循环运动，电子从π/a移出，同时从 -π/a移入，作循环运动，电子的本征能量呈周期性变化



特别注意：这是在k空间中的运动 $F = \frac{d}{dt}(\hbar k)$

并不是在实际空间中的运动

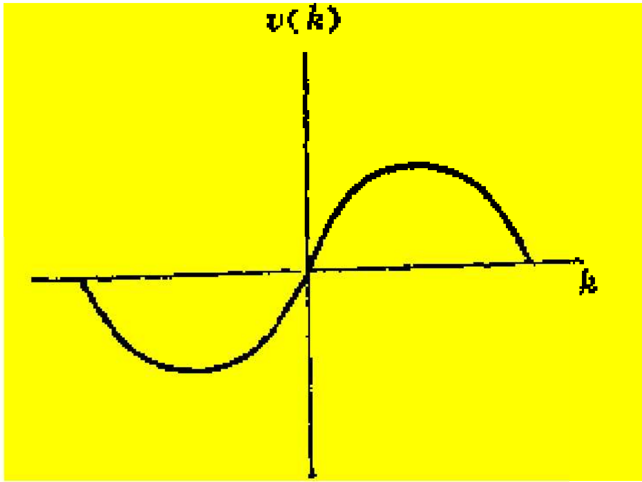
恒定电场下的运动

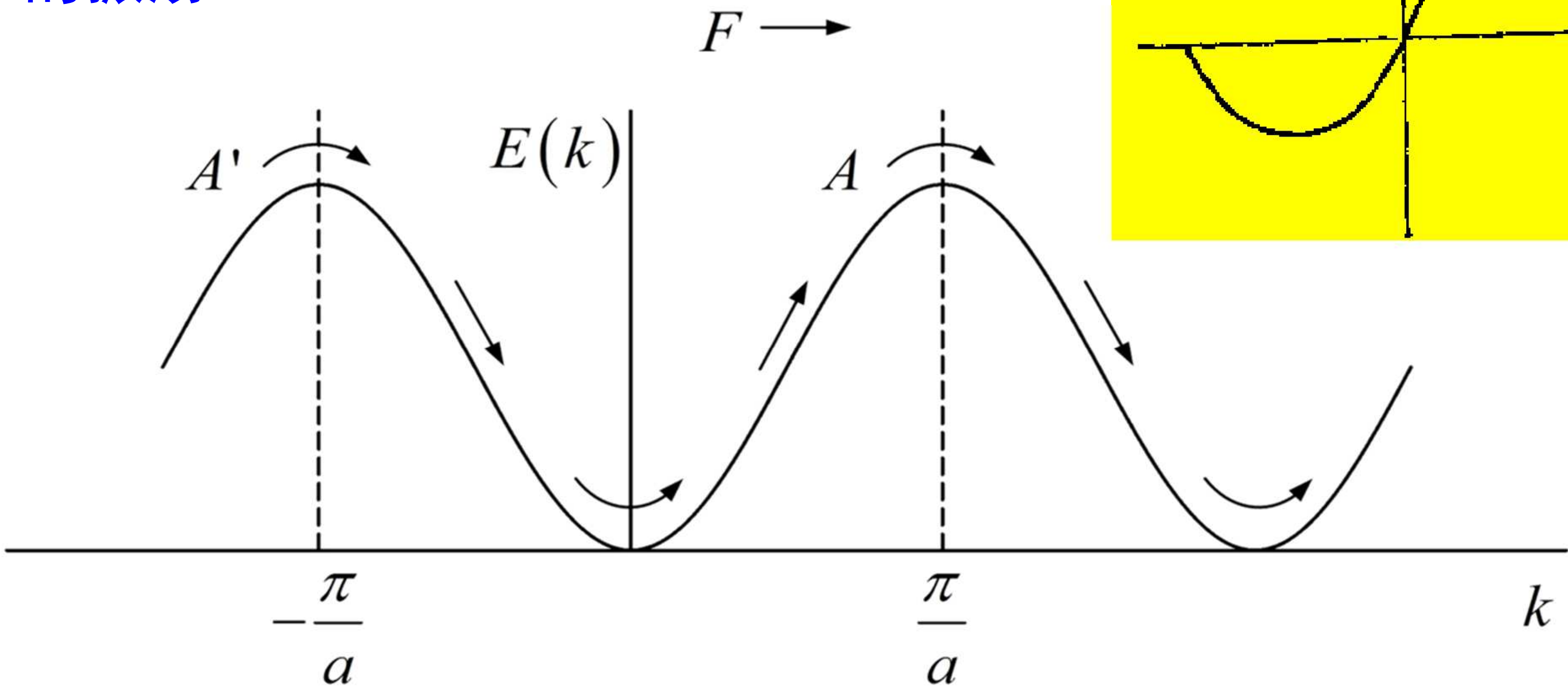
恒定电场$\boldsymbol{E}$，假定电场力$\boldsymbol{F}$沿轴的正向

电子在 $\boldsymbol{k}$ 空间的同一个能带内作匀速运动

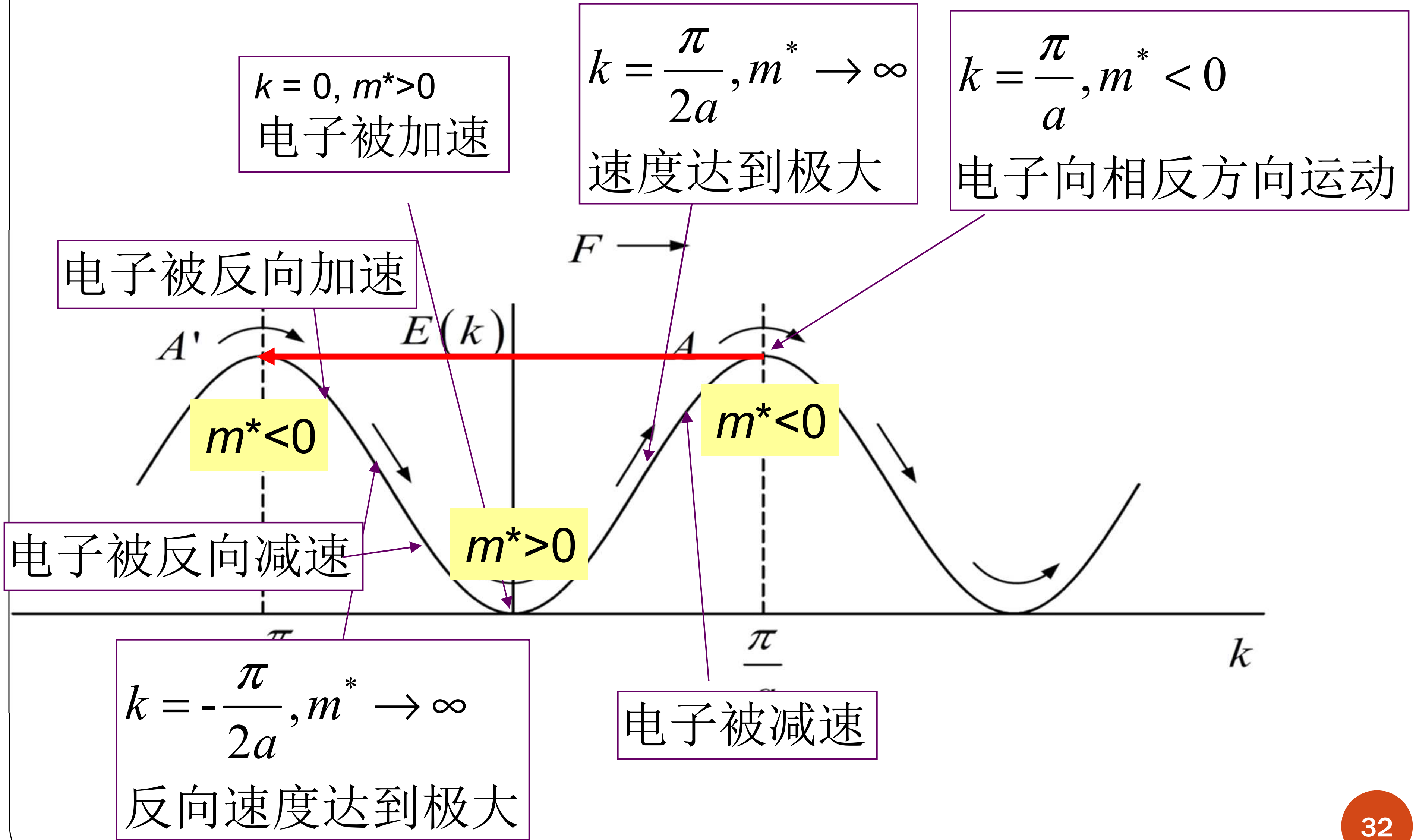
$$F = \frac{d}{dt}(\hbar k)$$

电子速度v：随时间振荡加速、减速、反方向加速、减速、加速反映在实空间的振荡



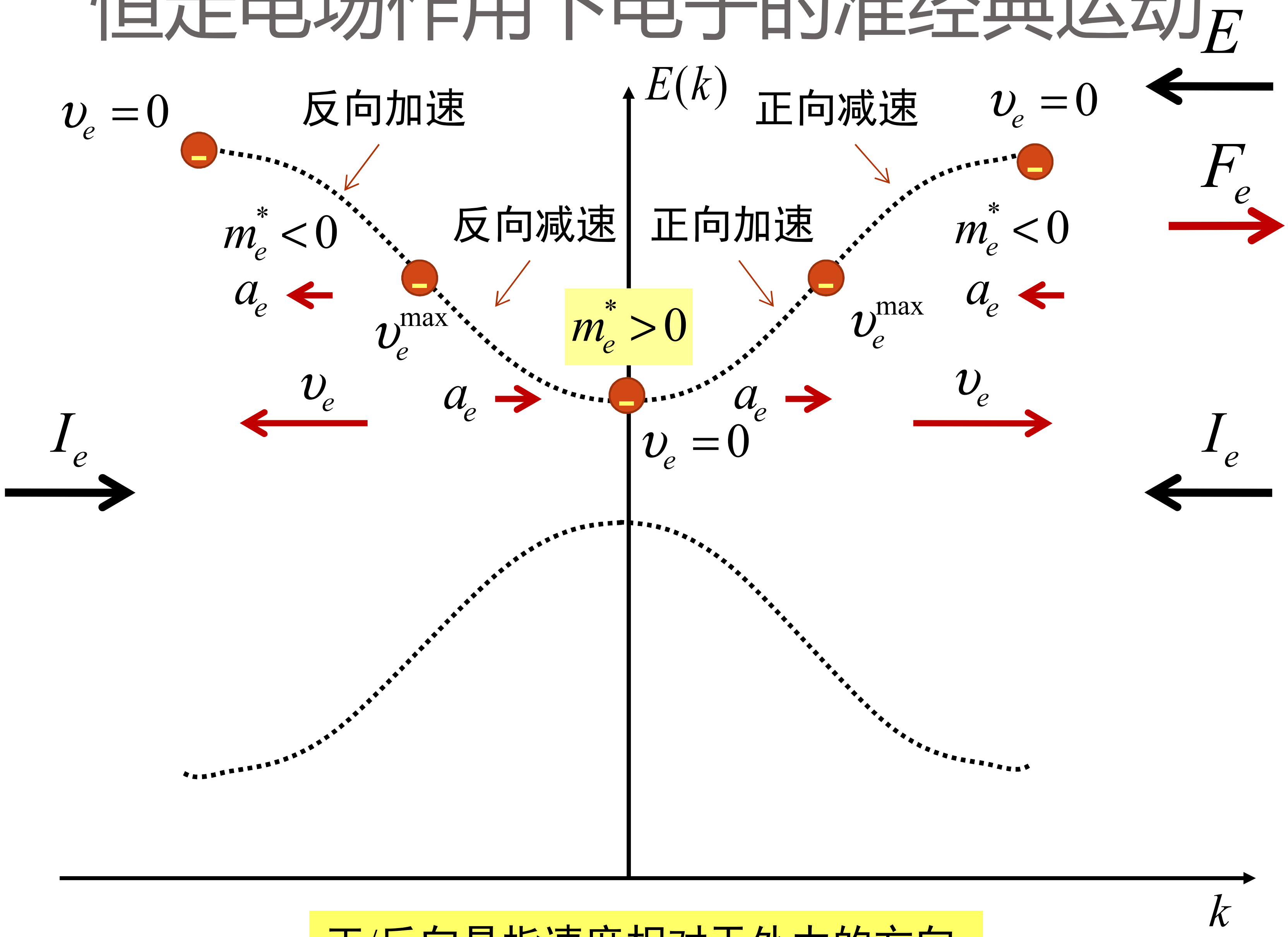


恒定电场下的运动



$k = 0$, $m^*>0$
电子被加速
$k = \frac{\pi}{2a}, m^* \to \infty$
速度达到极大
$k = \frac{\pi}{a}, m^* < 0$
电子向相反方向运动
电子被反向加速
F
$E(k)$
A'
A
$m^*<0$
$m^*<0$
$m^*>0$
电子被反向减速
$k = -\frac{\pi}{2a}, m^* \to \infty$
反向速度达到极大
电子被减速
k

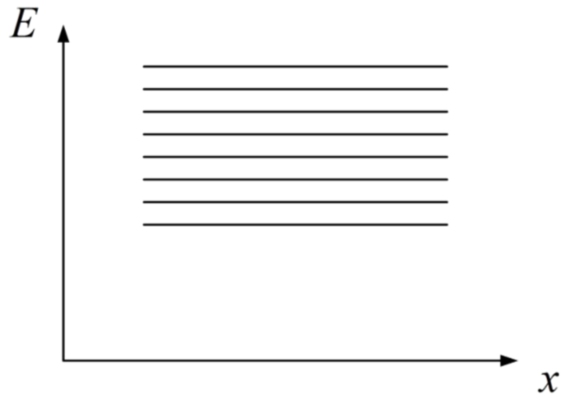
恒定电场作用下电子的准经典运动



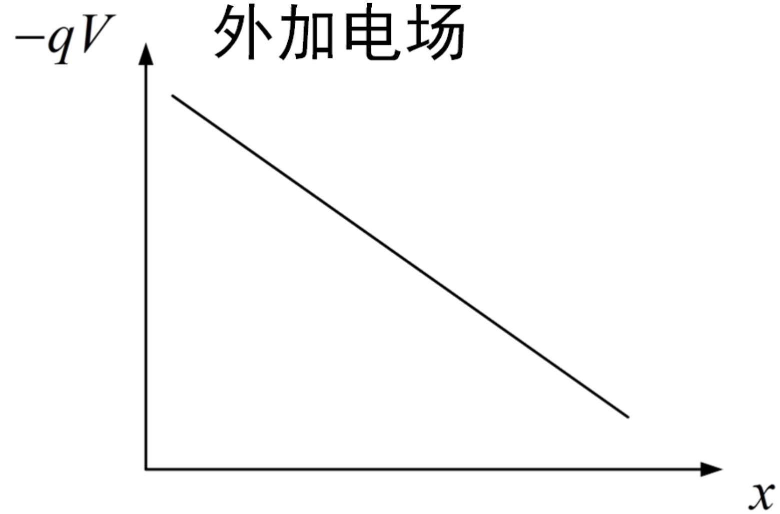
正/反向是指速度相对于外力的方向

实空间下电子能带的倾斜与振荡

能带在空间中的分布

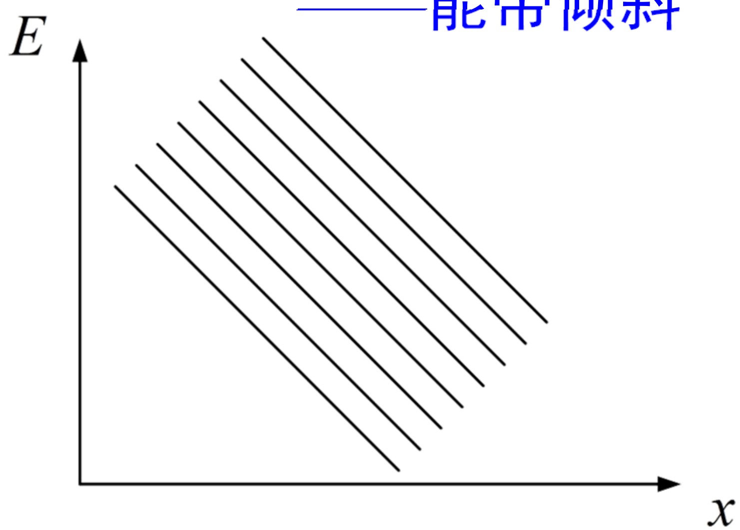


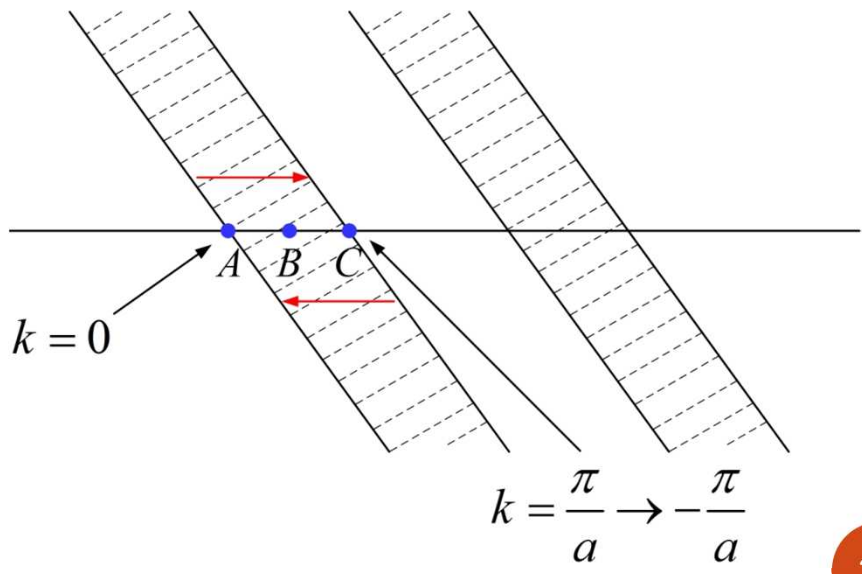
外加电场



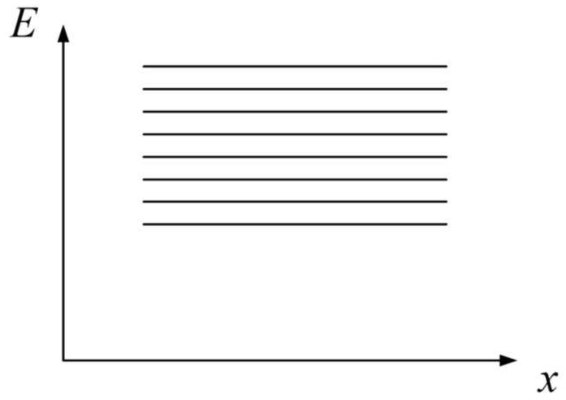
外加电场后能带的分布

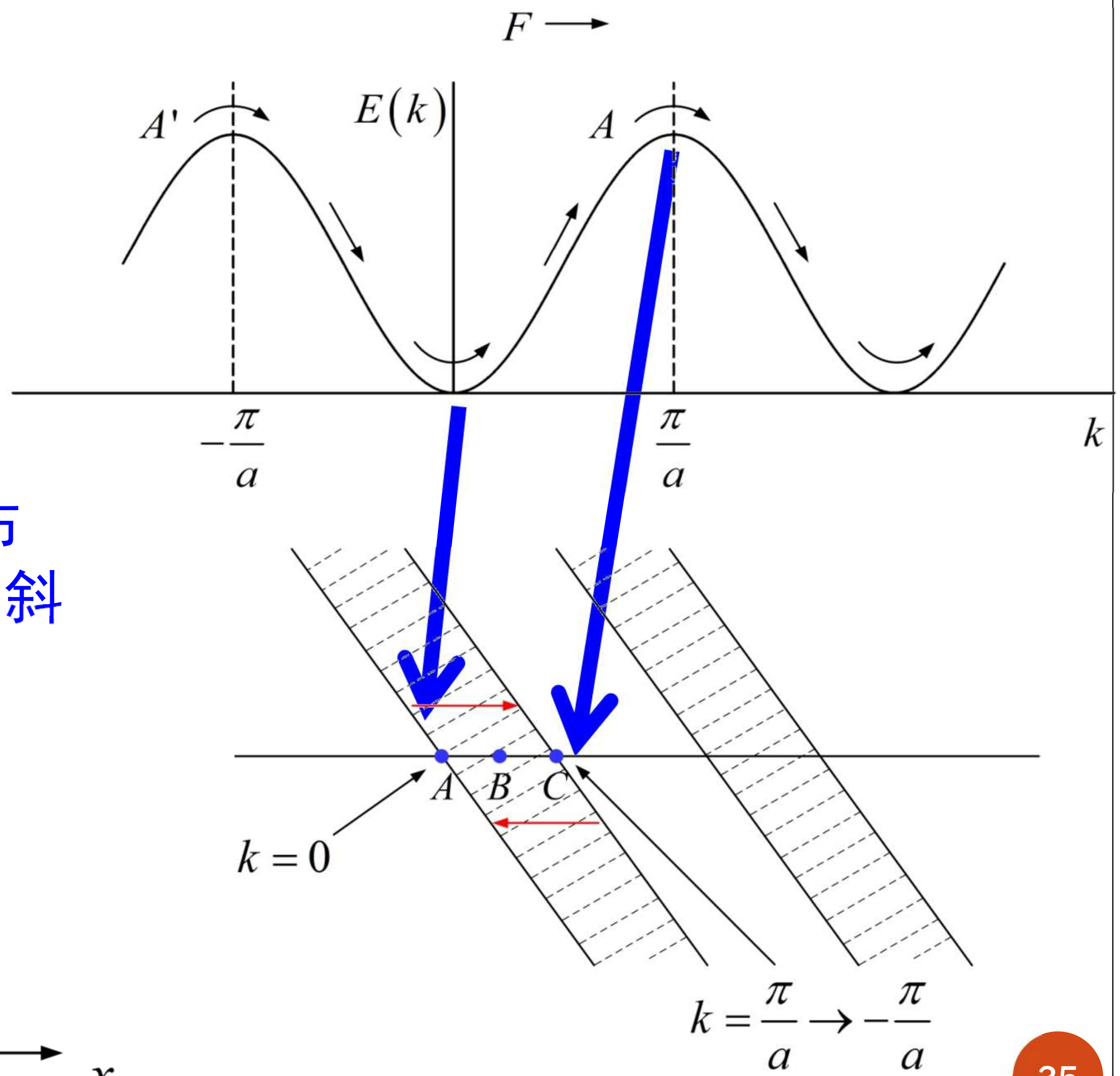
——能带倾斜





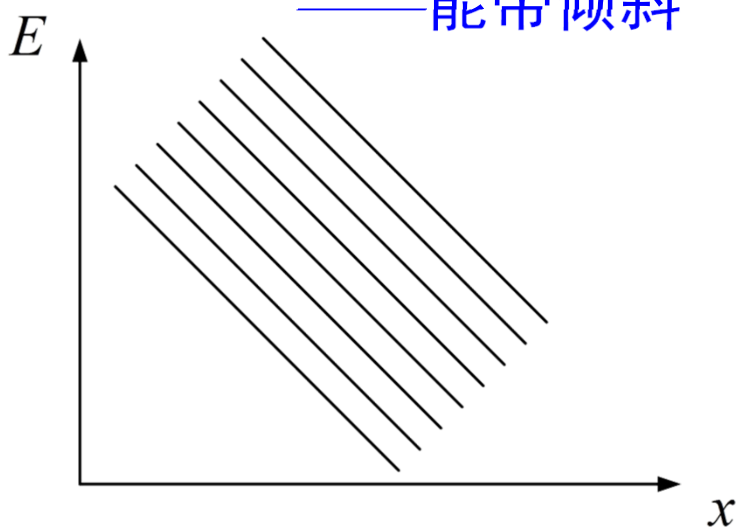
实空间下电子能带的倾斜与振荡





外加电场后能带的分布

——能带倾斜



实际情况下的电子运动

- 来回振荡很难观察到
  - 如果填满能带，电子运动无法观察
  - 如果是金属电子，电子运动过程不断受到声子、杂质和缺陷的散射
    - 平均自由运动时间τ的典型时间为10^{-13}s

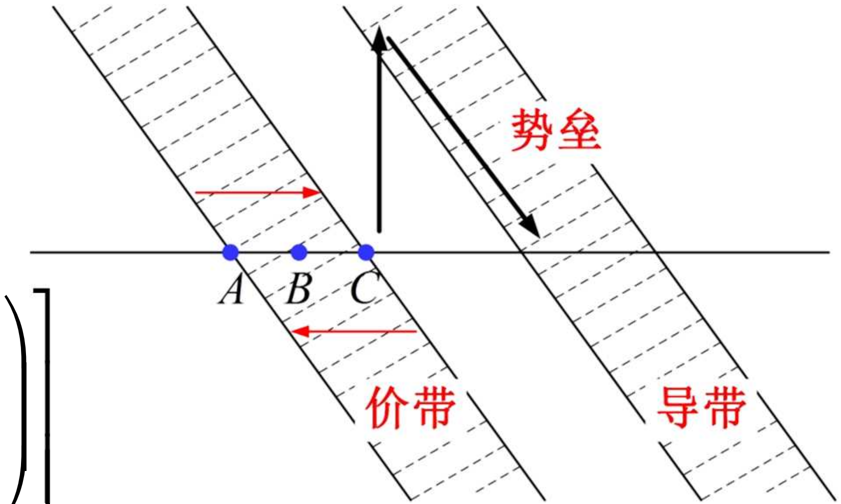
电子来不及完成振荡运动就被散射破坏掉了

除非特强的电场（$E>10^5$V/cm），但是绝缘体将被击穿

一般情况下，电子在 k 空间有小位移，难振荡

实际情况下的电子运动

- 实际情况下：带隙部分反射
- 根据量子理论，电子将有部分穿透势垒
- 穿透势垒的几率取决于位垒的高度E_g和势垒长度 $d=E_g/qE$

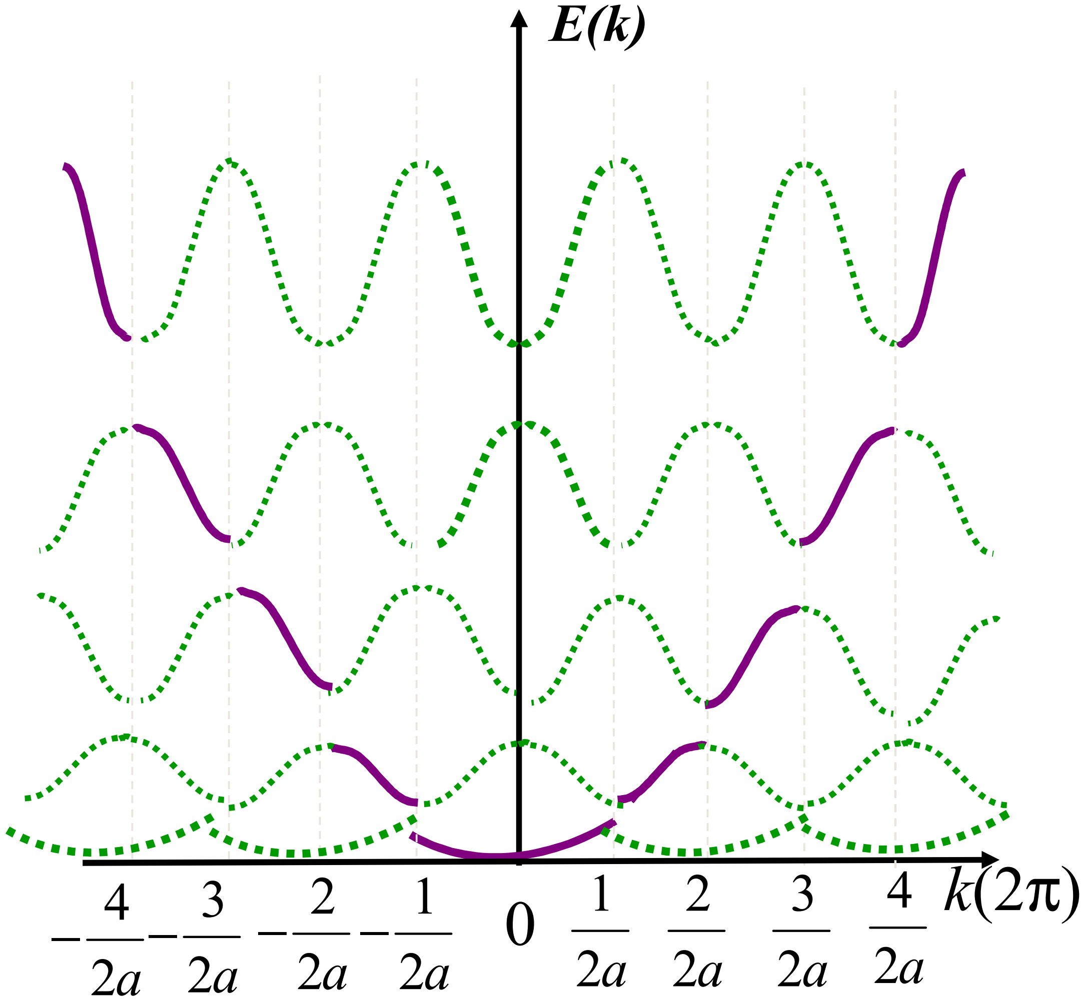


- 隧穿几率：

$$f \propto E\exp\left[-\frac{\pi^2}{\hbar}\left(2m_0E_g\right)^{1/2}\left(\frac{E_g}{qE}\right)\right]$$

准经典运动只适合描述
弱电场下电子在同一能带中的运动

周期布里渊区图景



适合研究准经典运动

外场中电子运动状态的变化

- 布洛赫电子的准经典运动

- 导体、绝缘体和半导体的能带解释

满带电子不导电

能带中所有电子贡献的电流密度由下式给出：

$$J=\frac{1}{V}(-e)\sum_{k}\upsilon(k)$$

这里V是晶体的体积，求和是对能带中所有状态求和

$$\upsilon(-k)=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(-k)}{\partial(-k)}=-\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(k)}{\partial(k)}=-\upsilon(k)$$

不加外场时，在一定温度下由于： $E(k)=E(-k)$

电子占据 k 态的几率同占据-k态的几率一样，它们的速度方向相反大小相等，这样满带中每个k电子都可找到-k电子，速度相反，k态和-k态的电子流正好成对抵消

——因此晶体中总电流为零

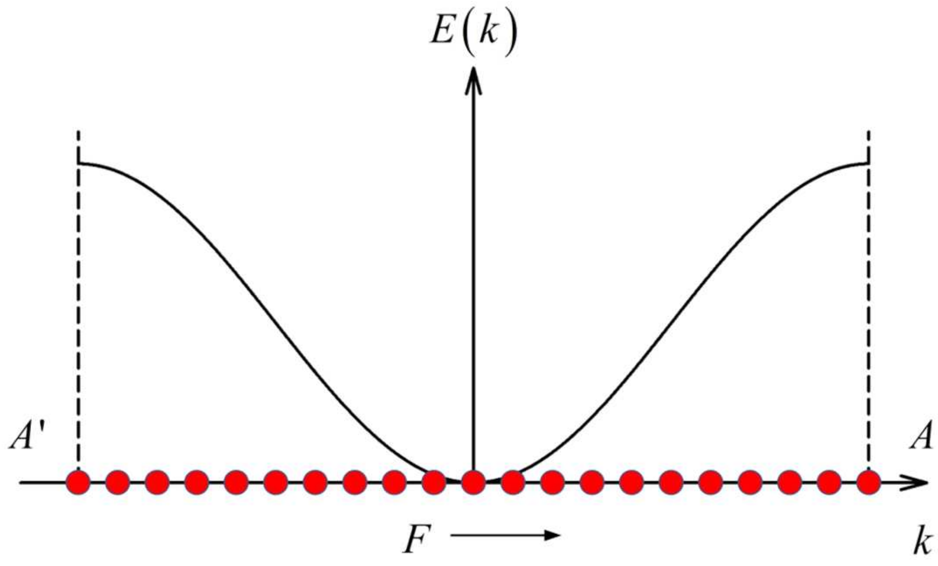
满带电子不导电

$$\boxed{\hbar\frac{dk}{dt}=F}$$

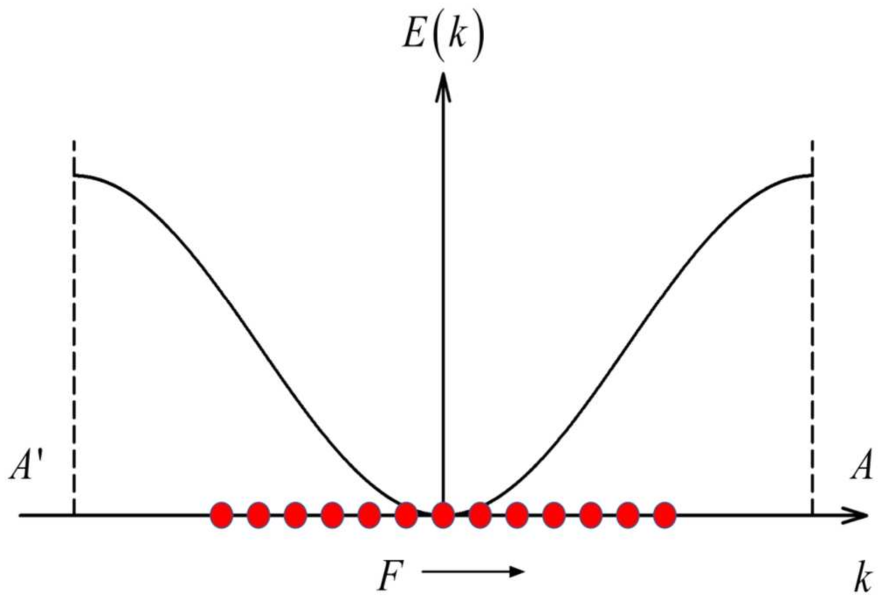
有电场时，k在布里渊区内是均匀分布的，所有电子的状态都按照

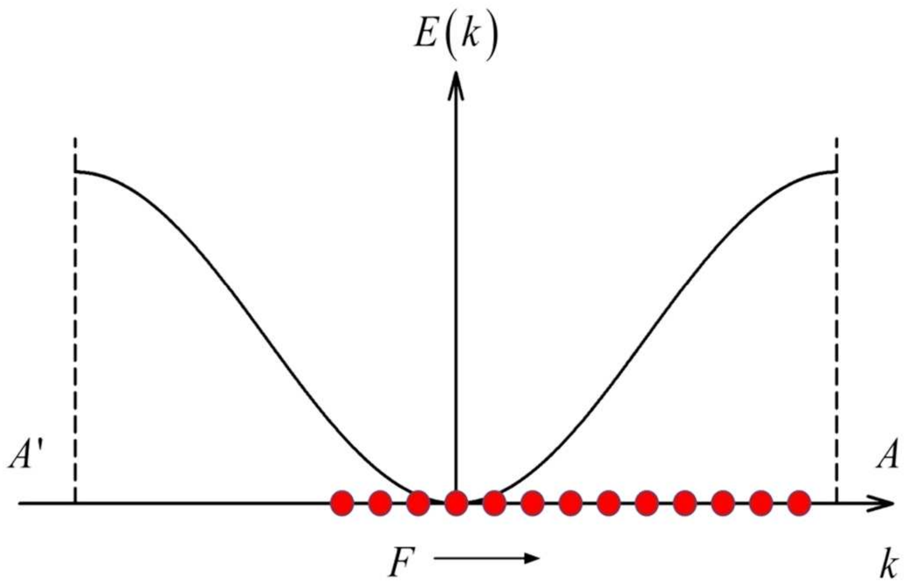
$$\frac{dk}{dt}=\frac{1}{\hbar}F=\frac{1}{\hbar}\left(-eE\right)$$

- k轴上各点均以相同的速度移动，没有改变填充各k态的情况。即由于布里渊区边界A和A'实际代表同一状态，所以从A点出去的电子实际上同时从A'移进来，仍保持均匀填充的情况。这样一来，有电场存在时，仍然是k态和-k态的电子流成对抵消，总电流为零



部分填充能带在电场下产生电流





无外场的电子能带

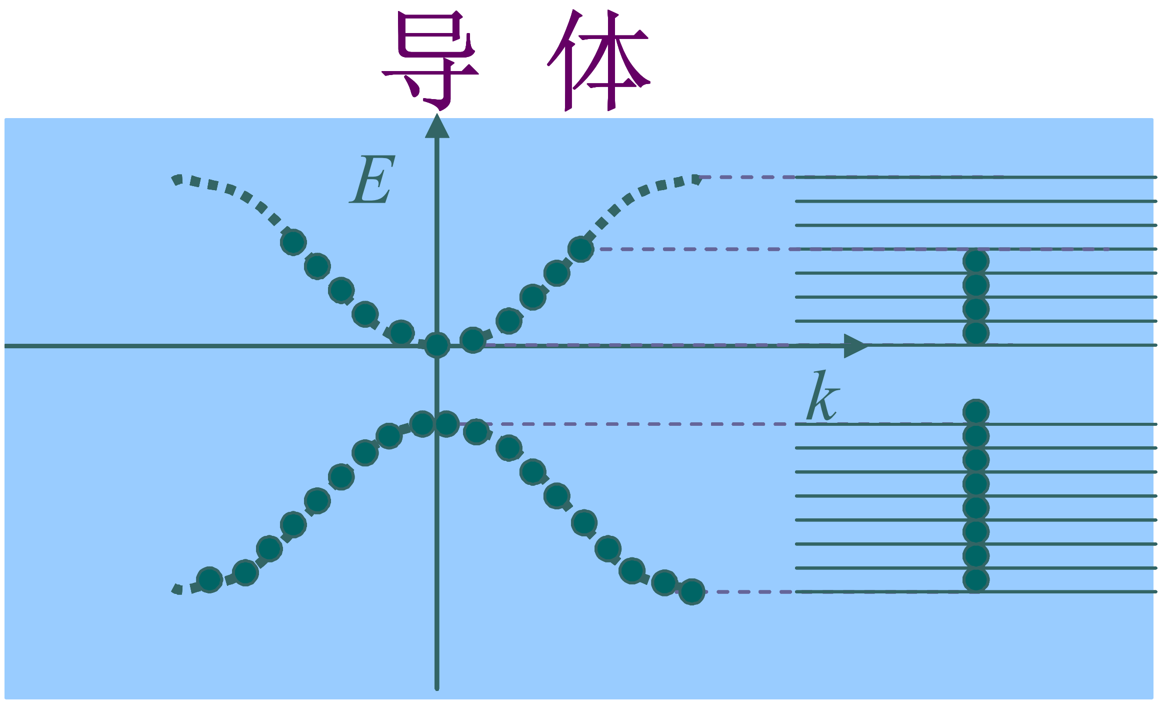
净电流为0

加电场的电子能带

整个电子k空间分布向一方移动，部分抵消，有净电流

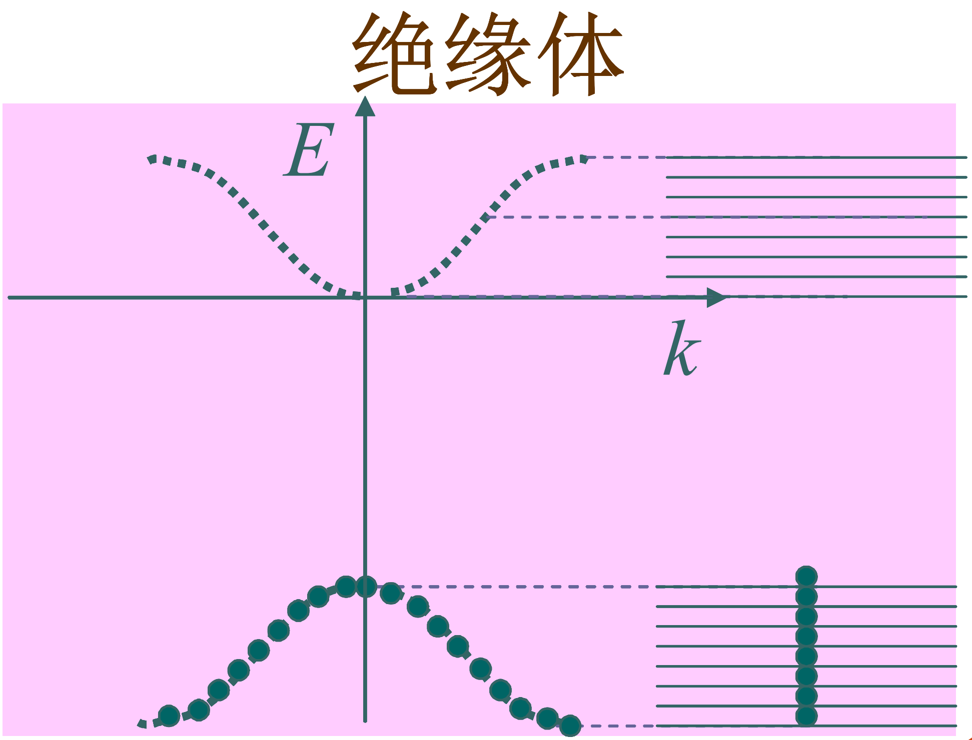
导体的能带模型

- 导体
  - 除去完全填满的一系列能带，还有仅被电子部分地填充的能带
  - 部分填充能带，称导带



非导体的能带模型

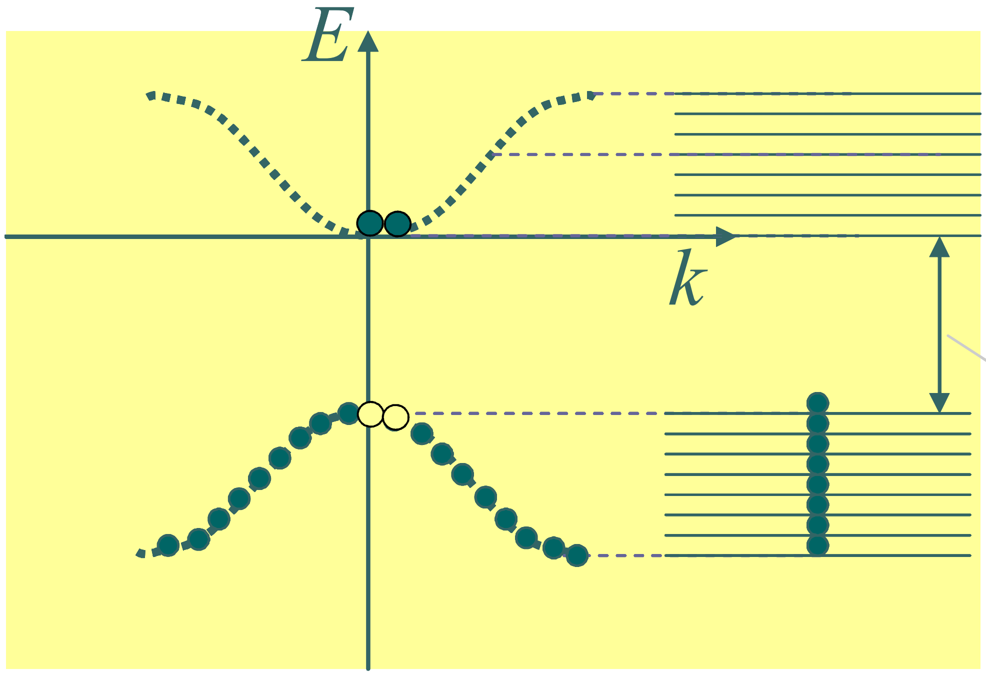
- 非导体
  - 电子恰好填满最低的一系列能带，再高的能带全空
  - 满带不导电，空带也不导电



非导体的能带模型

最高的满带的电子容易被激发到上面的空带，
从而使两个带皆变成未满带，产生一定的导电性

半导体



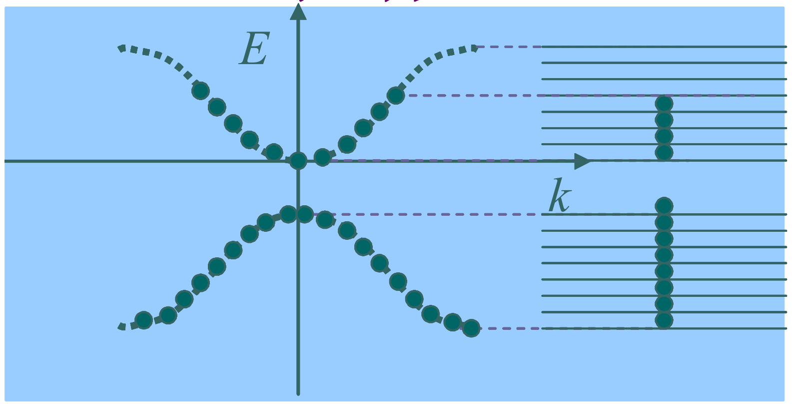
半导体的导电性受
- 杂质能级的影响
- 热激发的影响

禁带宽度 E_g<2eV

导体，绝缘体和半导体

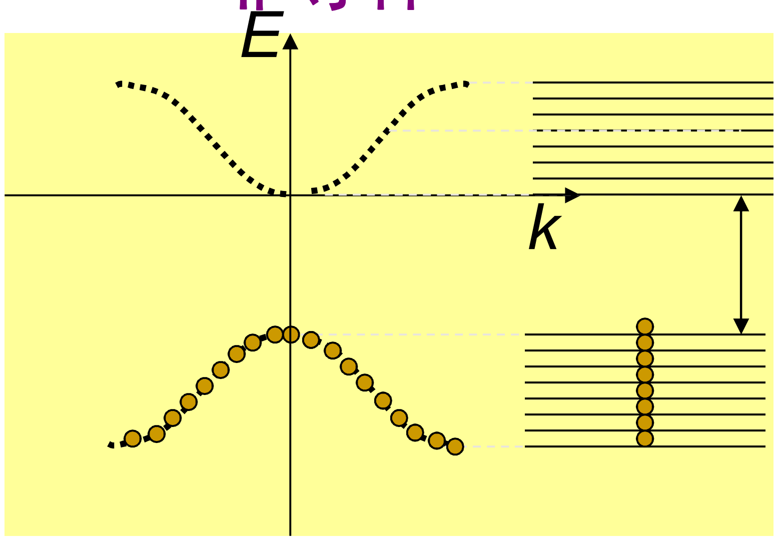
能带论: 满带电子不导电, 部分填充带可导电

导 体



即使在T=0K时，最外层的能带也处于未填满的状态

非导体



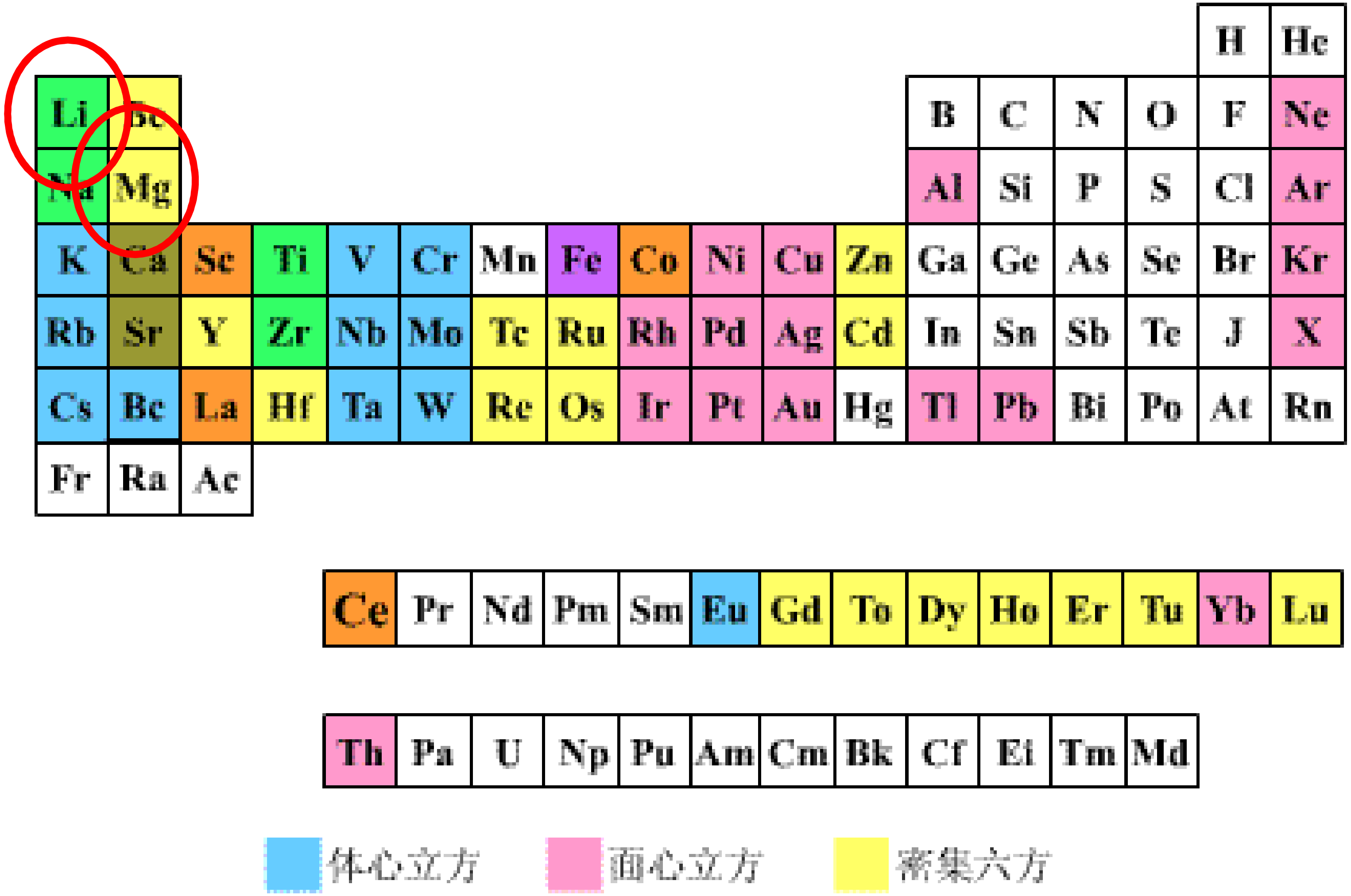
T=0K时，最外层电子正好填满成键态对应的能带。

绝缘体：带隙较大，常温时最外层能带仍然是全满

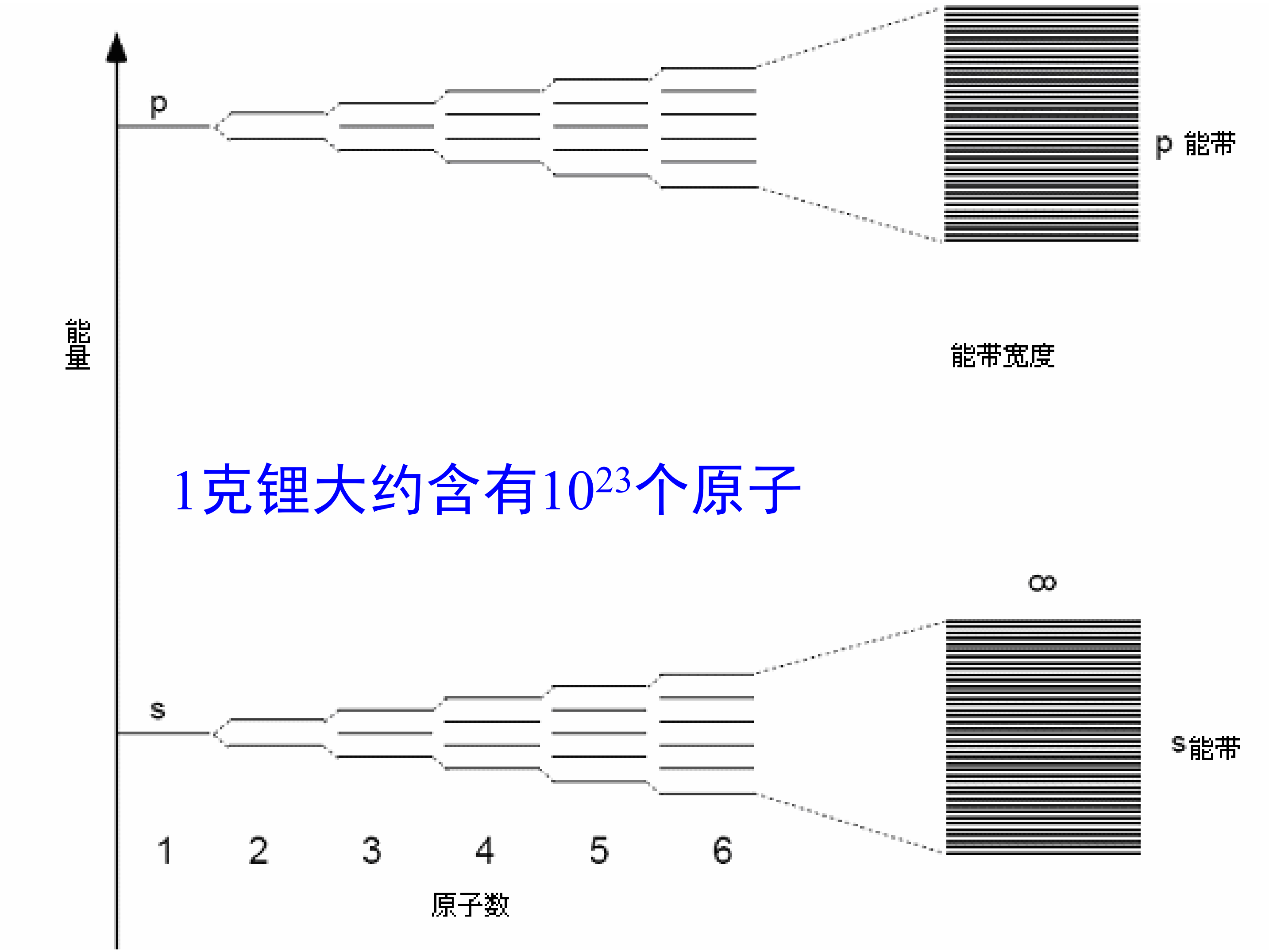
半导体：带隙较小，常温时反键态的能带已经有部分电子填充

一般：E_g<2eV (不绝对)

导体能带结构的例子——锂和镁



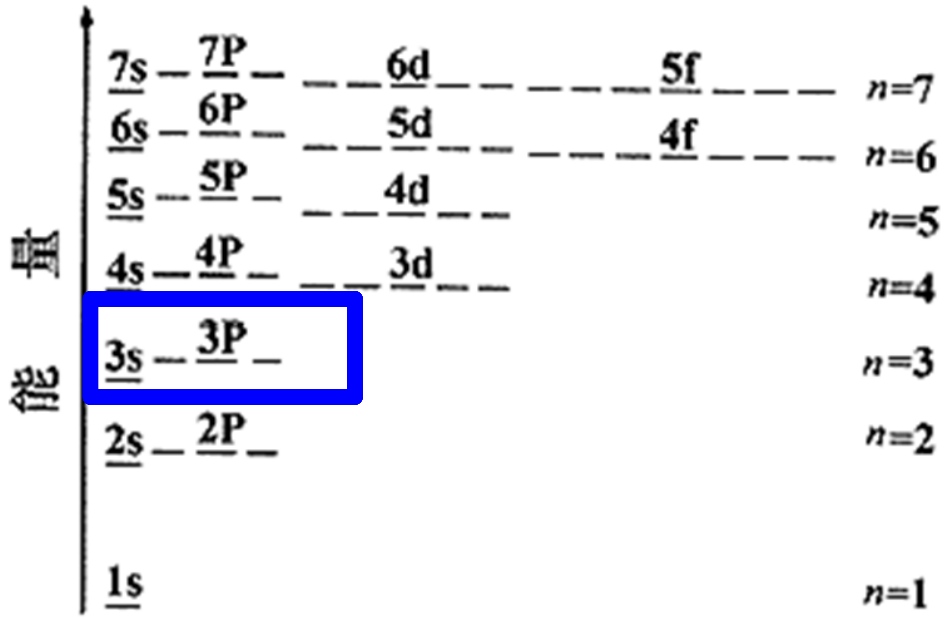
Li的原子量：3，镁的原子量：12

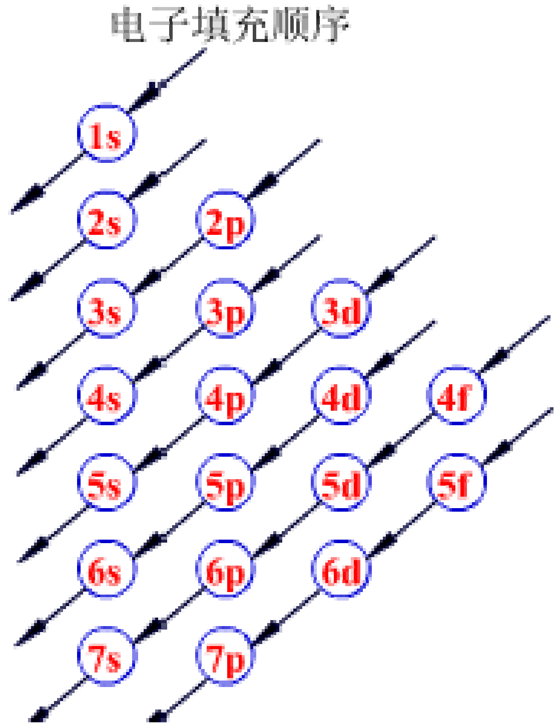


N个锂原子结合时，2s能级分裂为N个能级，能级间距很近如同带状，形象的被称为2s能带，同时每个能级被一对电子占据，因此的2s能带将处半满状态

导体的能带结构——镁

镁的原子量：12——1s2，2s2，2p6，3s2

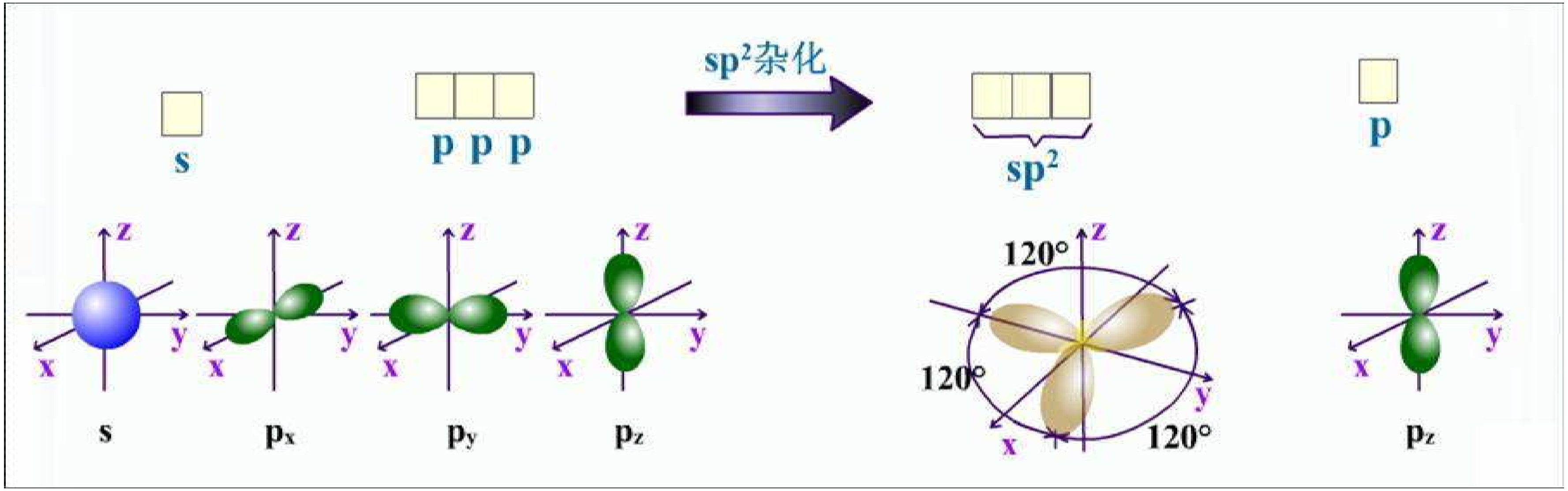




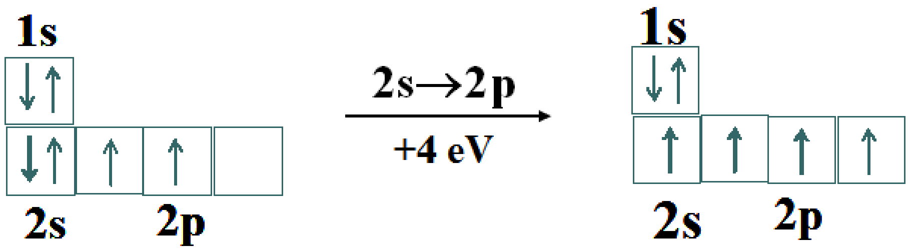
镁的每个原子中有两个电子（$3s^2$）占满了处于价电子层的3s状态。但是由于3s和3p的能带相重叠，电子在3s+3p能带中是部分填充的

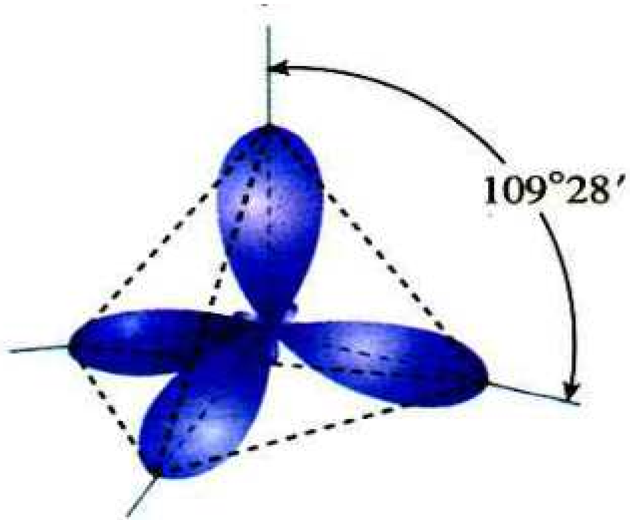
金刚石vs石墨

石墨：SP^2杂化

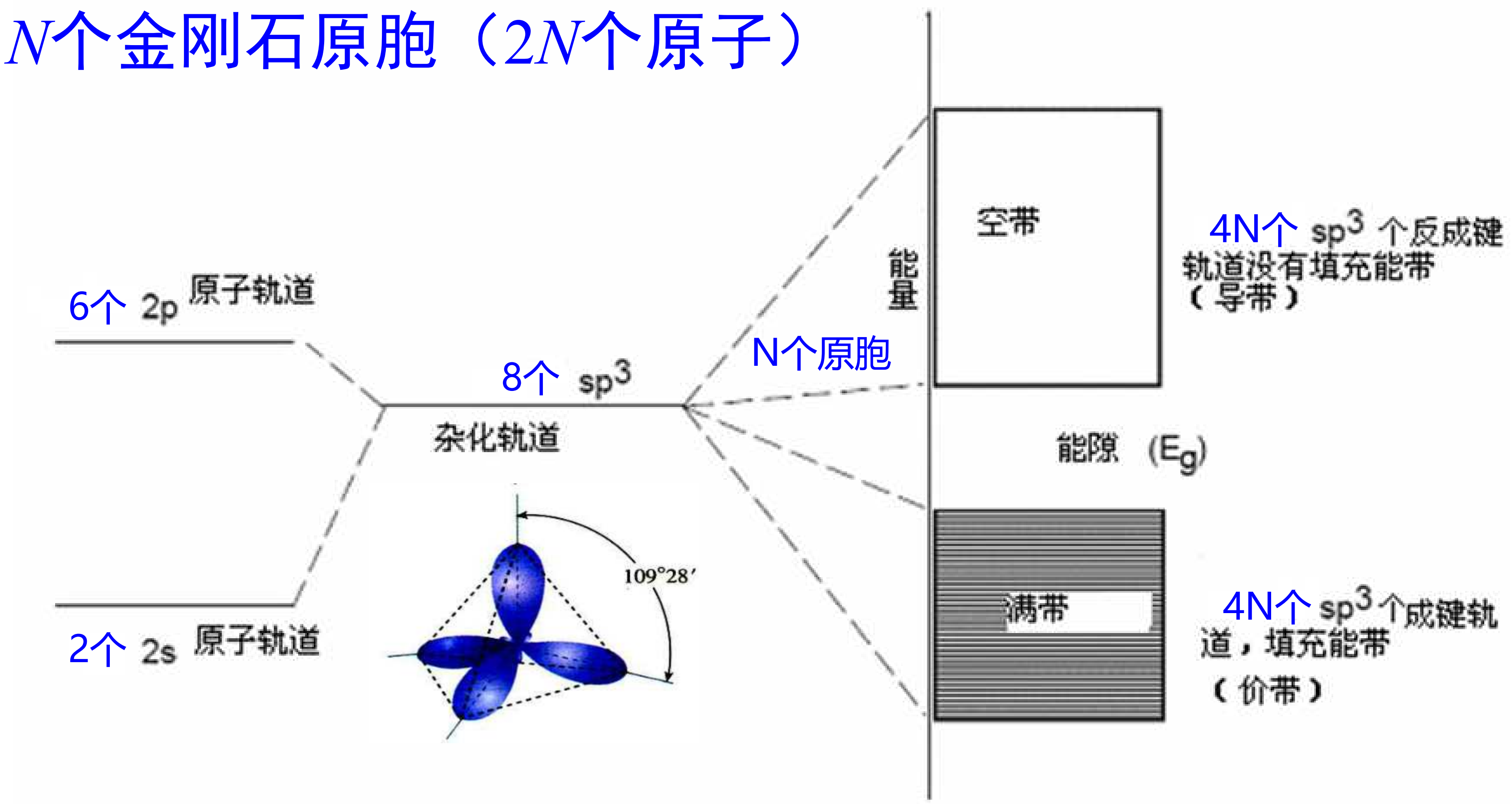


金刚石：SP^3杂化



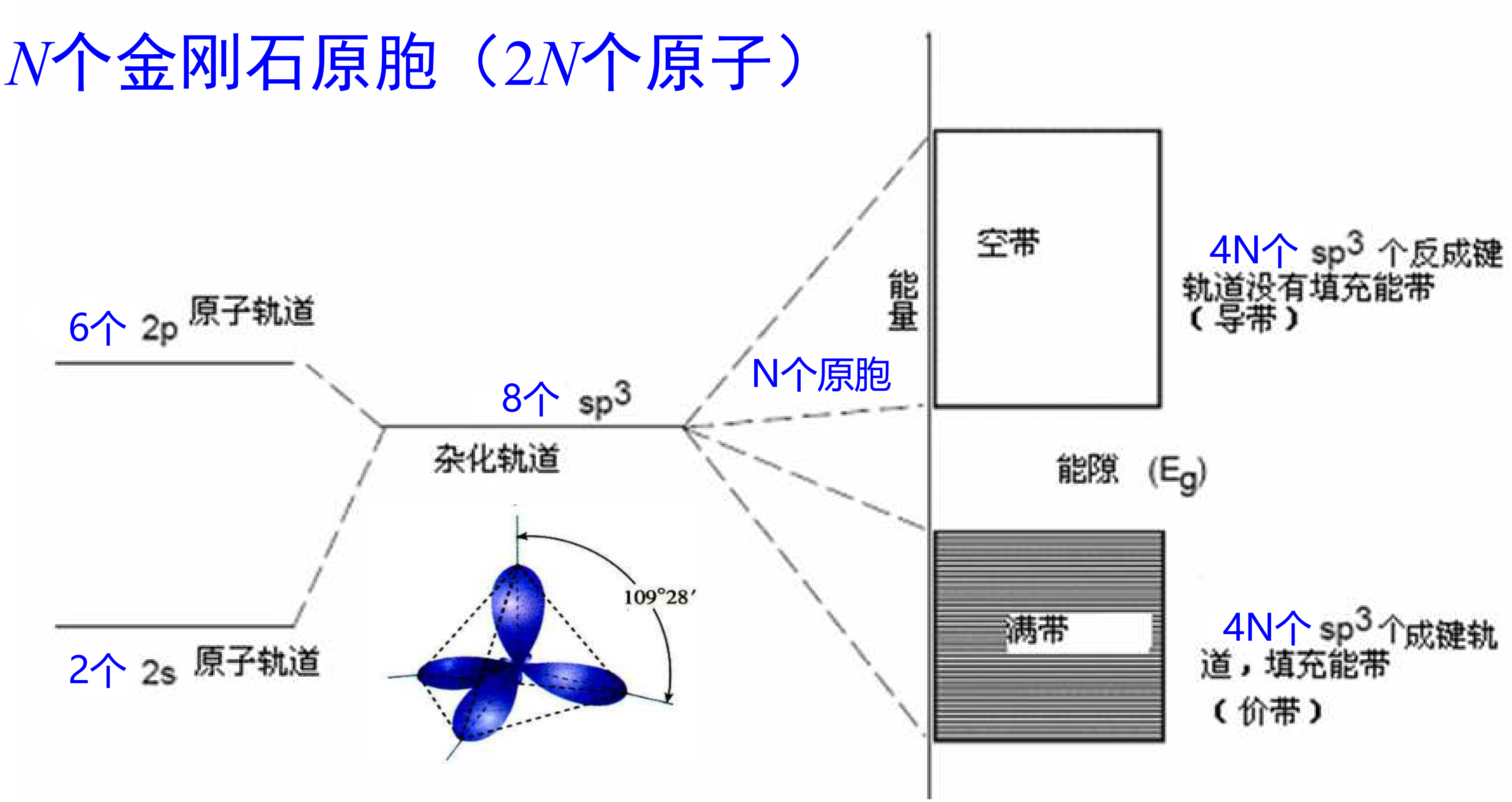


非导体的能带结构



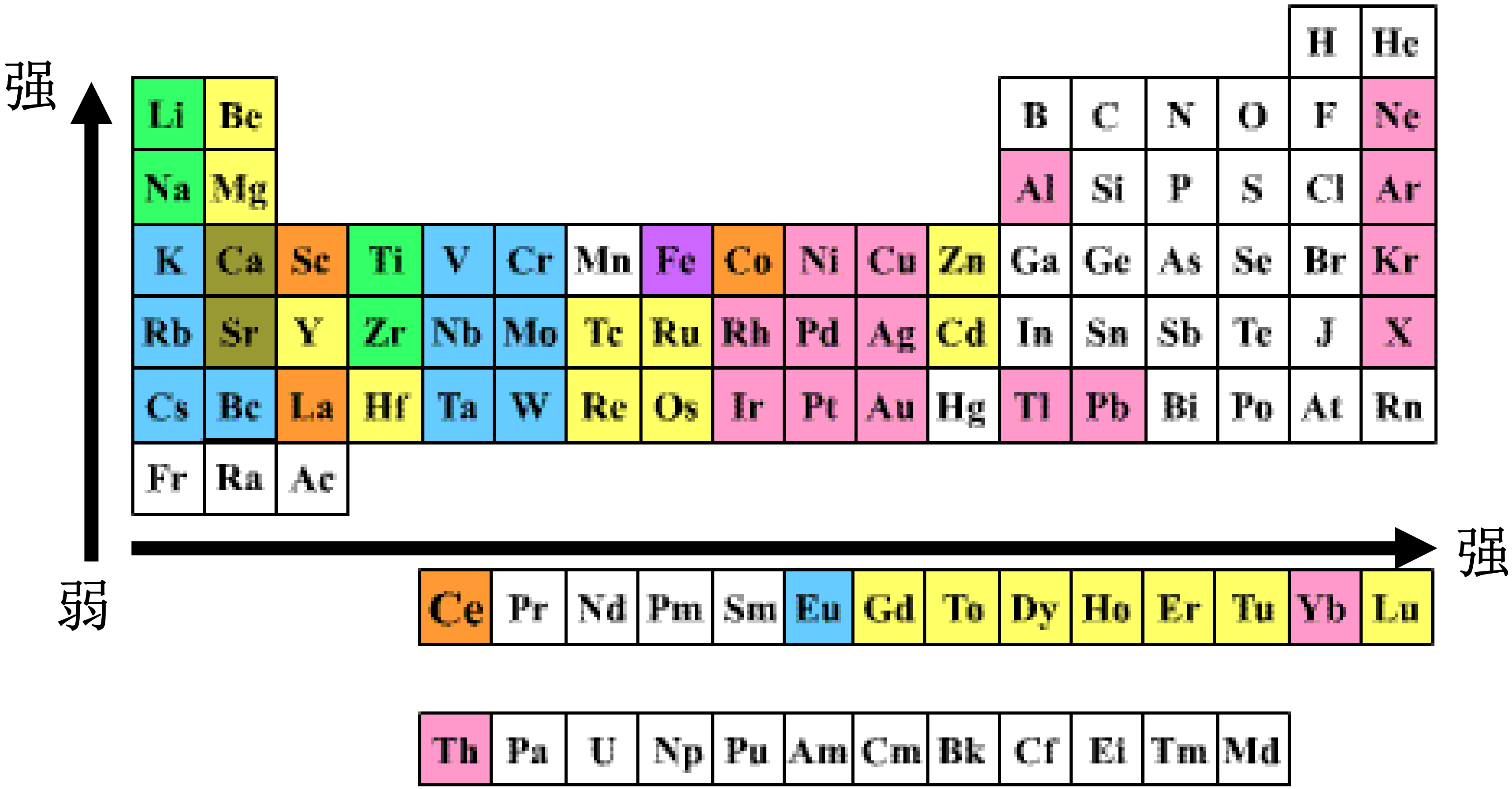
N个金刚石原胞（2N个原子）
6个 2p 原子轨道
2个 2s 原子轨道
8个 sp3
杂化轨道
109°28′
N个原胞
能量
空带
4N个 sp3 个反成键轨道没有填充能带（导带）
能隙 (Eg)
满带
4N个 sp3 个成键轨道，填充能带（价带）

非导体的能带结构



分子轨道能级形成一个比原子的sp^3杂化轨道能量更低的能带。由于每个原子提供四个轨道和四个电子，刚好能够填满成键轨道，在高能量的反键轨道上有空的轨道

原子负电性规定



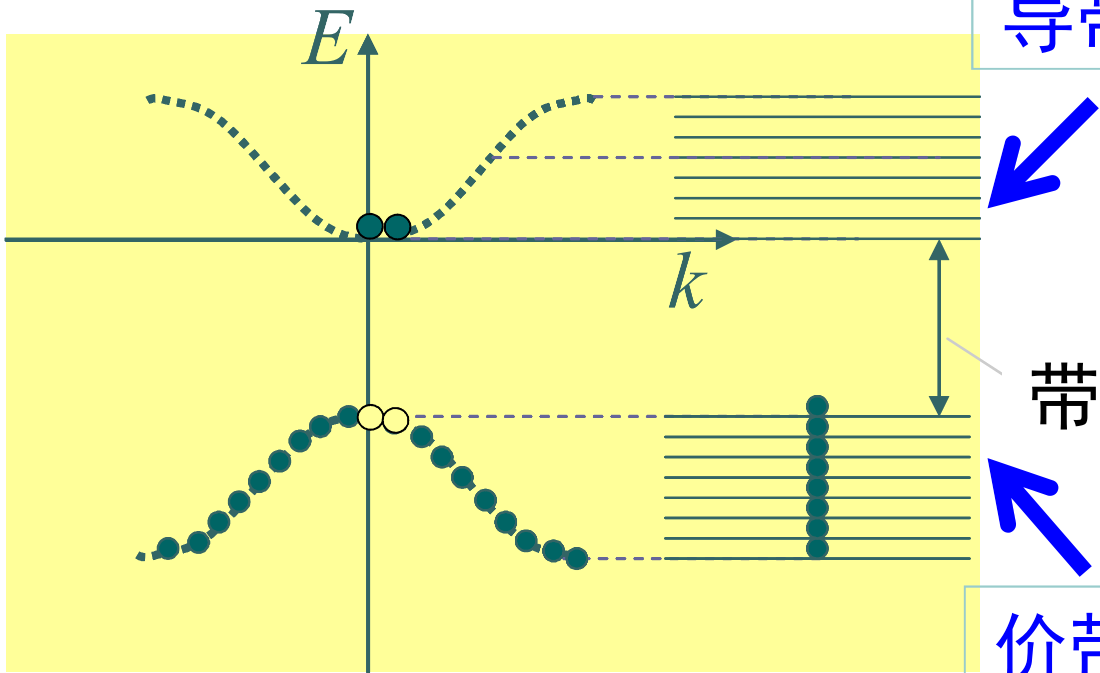
每一种元素的能带结构要具体分析

半导体的能带模型

常温下，T=0K时的满带电子容易被激发到上面的空带，从而使两个带皆变成未满带，产生一定的导电性

半导体的导电特性由导带和价带共同决定

半导体



导带——少量电子填充

带隙E_g

价带——少量电子空缺

近满带和“空穴”的概念

满带中缺少了电子，称作近满带，会产生一定的导电性，但这种导电性和部分填充带的导电性不同

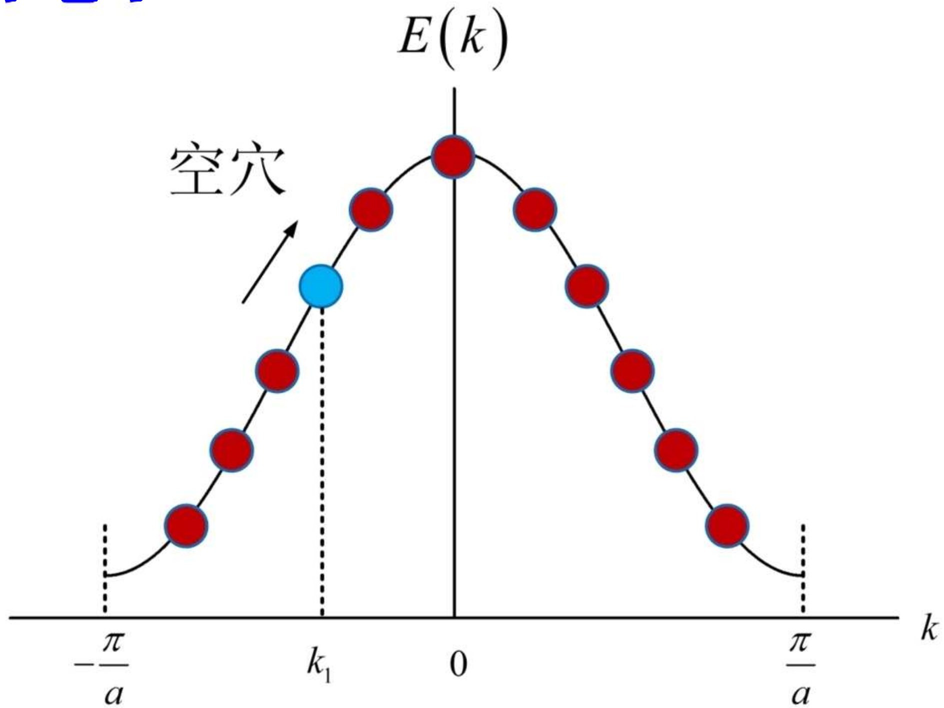
满带上只有一个状态k_1没有电子

此时对应电流为：

$$I(k_1)=\sum_{k\neq k_1}-ev(k)$$

$$=\sum_{k}-ev(k)-\left(-ev(k_1)\right)$$

$$=ev(k_1)$$



近满带和“空穴”的概念

满带中缺少了电子，称作近满带，会产生一定的导电性，但这种导电性和部分填充带的导电性不同

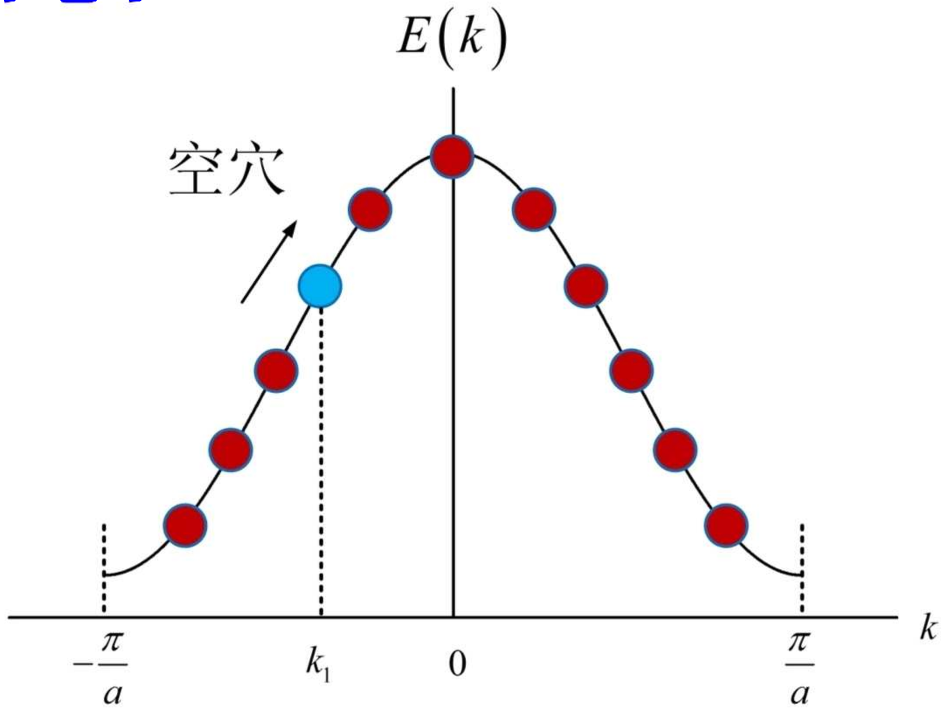
满带上只有一个状态k_1没有电子

此时对应电流为：

$$I(k_1) = ev(k_1)$$

如同有一个粒子导电

- 速度是电子的速度 $v(k_1)$
- 但电荷为正

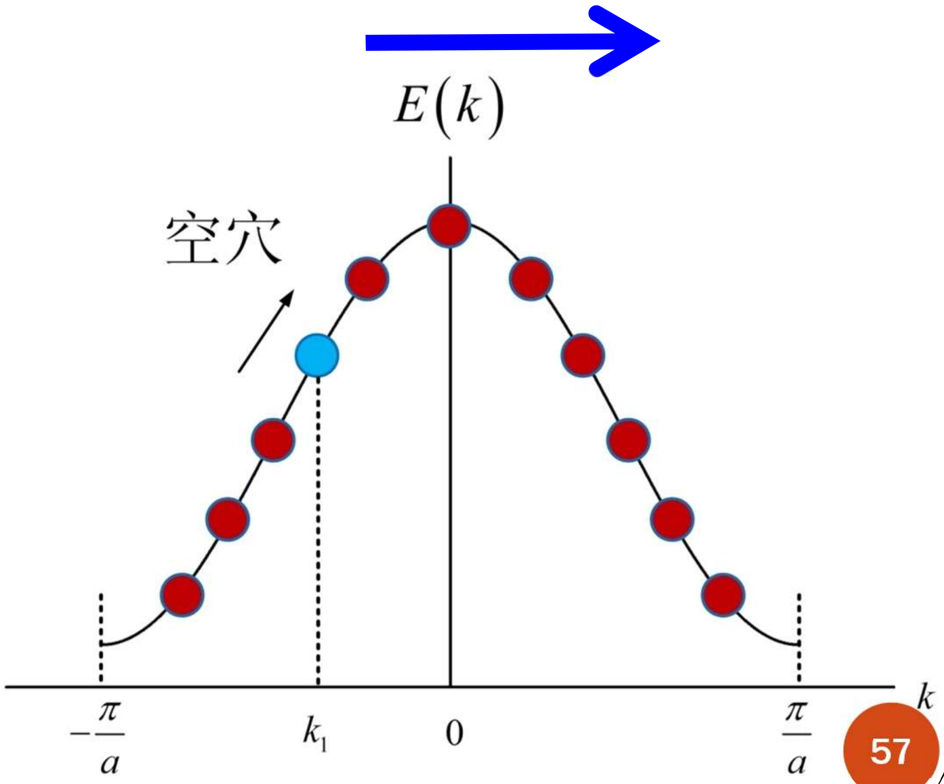


近满带和“空穴”的概念

空穴电荷为正，速度是电子的速度 $\upsilon(k_1)$

空穴的受力（F）方向

空穴的运动（v）方向



近满带和“空穴”的概念

空穴电荷为正，速度是电子的速度 $\upsilon(k_1)$

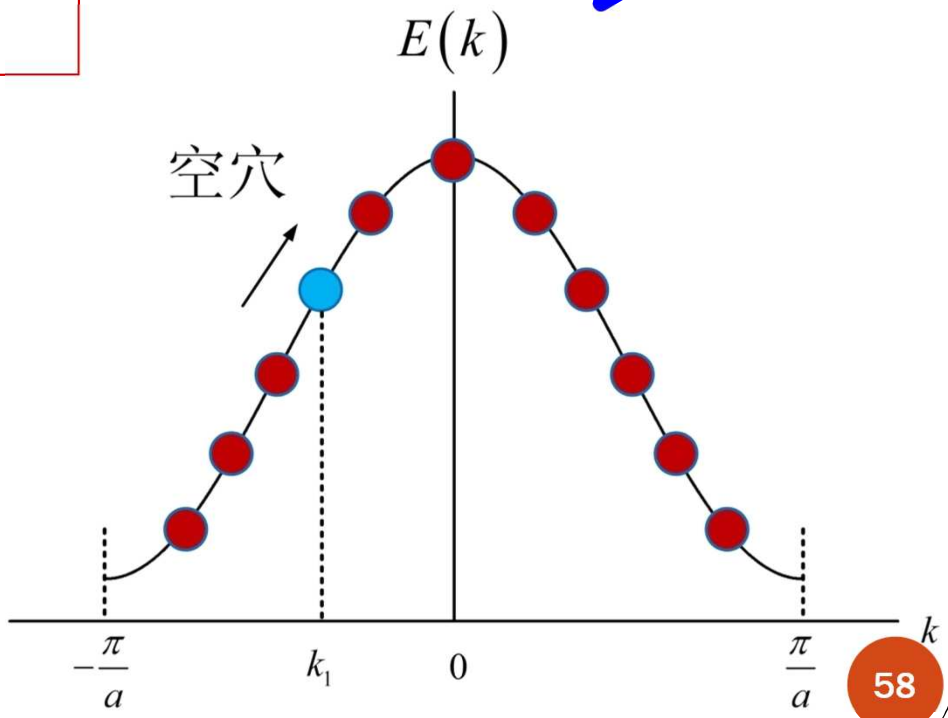
空穴的受力（F）方向

空穴的运动（ν）方向

空穴的波矢：

$$\boldsymbol{k_h = -k_e}$$

$$\boxed{\hbar\frac{dk}{dt} = F}$$



空穴有效质量：

$$\frac{1}{m_h^*} = -\left(\frac{1}{\hbar^2}\cdot\frac{d^2E}{dk^2}\right)$$

在能带顶部为正值

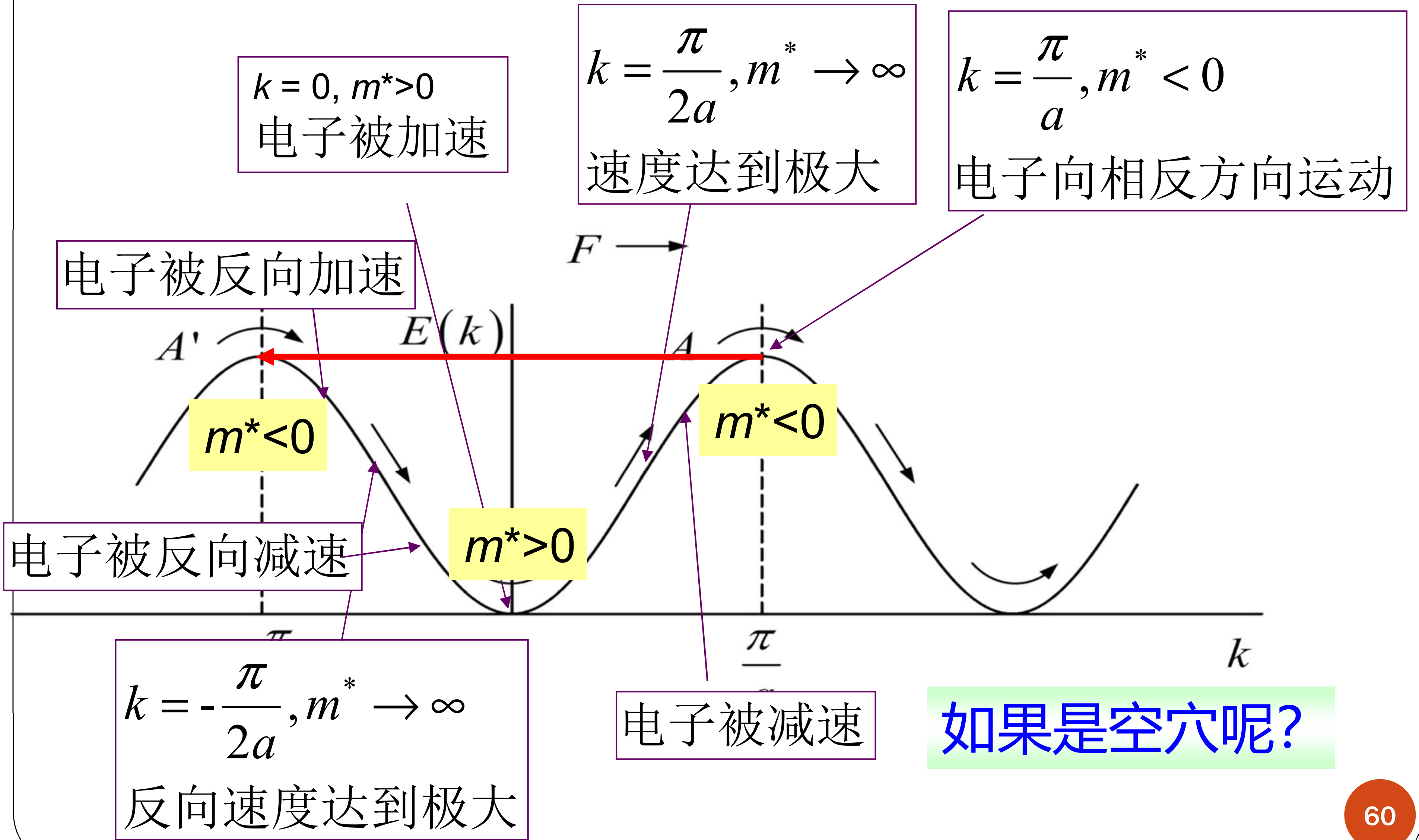
近满带和“空穴”的概念

- 当满带顶附近有空状态k时，整个能带中的电流，以及电流在外场作用下的变化，完全如同存在一个带正电荷e和具有正质量m^*、速度为$\upsilon(k)$的粒子的情况一样

- 空穴概念的引入使得满带顶附近缺少一些电子的问题和导带底有少数电子的问题十分相似，这两种情况下产生的导电性分别称为空穴导电性和电子导电性

电子(electron)和空穴(hole)统称为载流子(carrier)

恒定电场下的运动

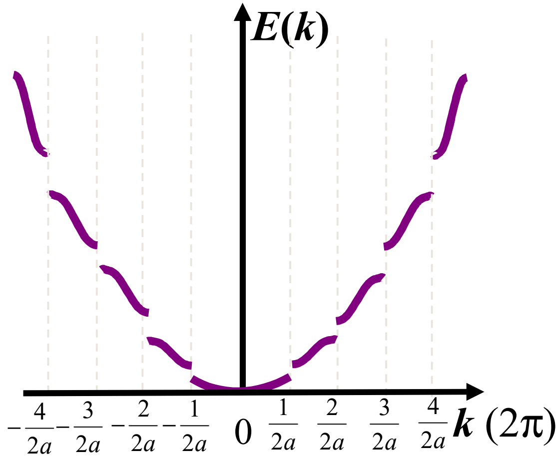


$k = 0$, $m^*>0$
电子被加速
$k=\frac{\pi}{2a}, m^* \to \infty$
速度达到极大
$k=\frac{\pi}{a}, m^* < 0$
电子向相反方向运动
电子被反向加速
$F \rightarrow$
$E(k)$
A'
A
$m^*<0$
$m^*>0$
$m^*<0$
电子被反向减速
$k=-\frac{\pi}{2a}, m^* \to \infty$
反向速度达到极大
电子被减速
k
如果是空穴呢?

第三部分：固体能带理论

- 布洛赫定理 $\psi(x+R_n)=e^{ik\cdot R_n}\psi(x)$

- 一维近自由电子近似
  - 能带、带隙的形成
  - 三种布里渊区图景



- 布洛赫电子的准经典运动
  - 波包描述
  - 电子速度、加速度、有效质量、准动量

- 导体、绝缘体和半导体的能带解释
  - 满带不导电
  - 电子与空穴