第5章 晶体中电子在电场和磁场中的运动

本章动机：探讨晶体中电子在外场作用下的运动规律

一、掌握描述电子准经典运动的物理量及运动方程.

二、理解电场作用下晶体中电子运动的特点.

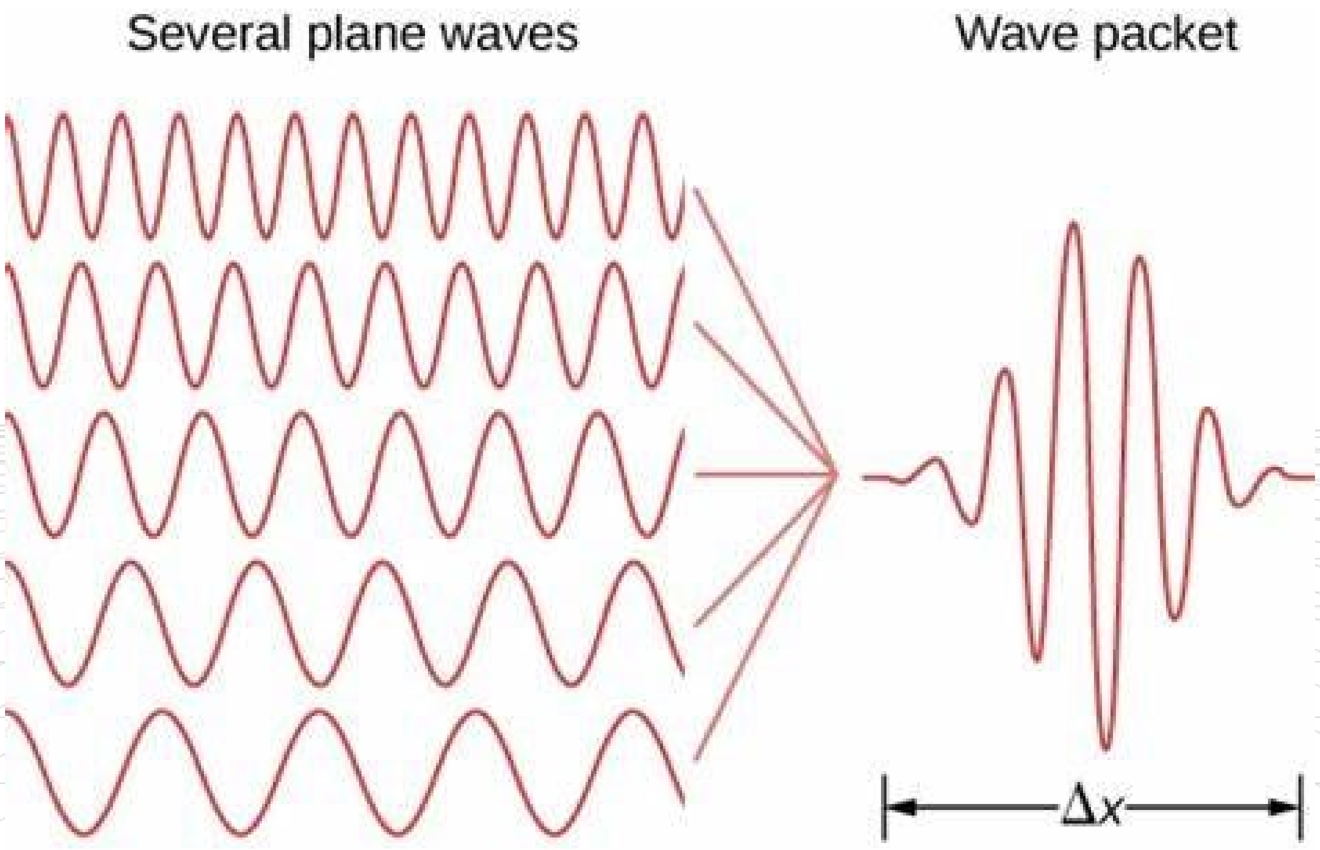
三、理解导体、半导体和绝缘体的能带论解释.

四、掌握恒定磁场中电子的运动.

§5.1 准经典运动

一、波包

- 波包：由波数不同的束波迭加而成的局限在一定空间的波叫波包.



一、波包

波包函数： $$\psi(x,t)=\frac{1}{\Delta}\int_{k_0-\Delta/2}^{k_0+\Delta/2}u_k(x)e^{i\left(kx-\frac{E(k)}{\hbar}t\right)}dk$$

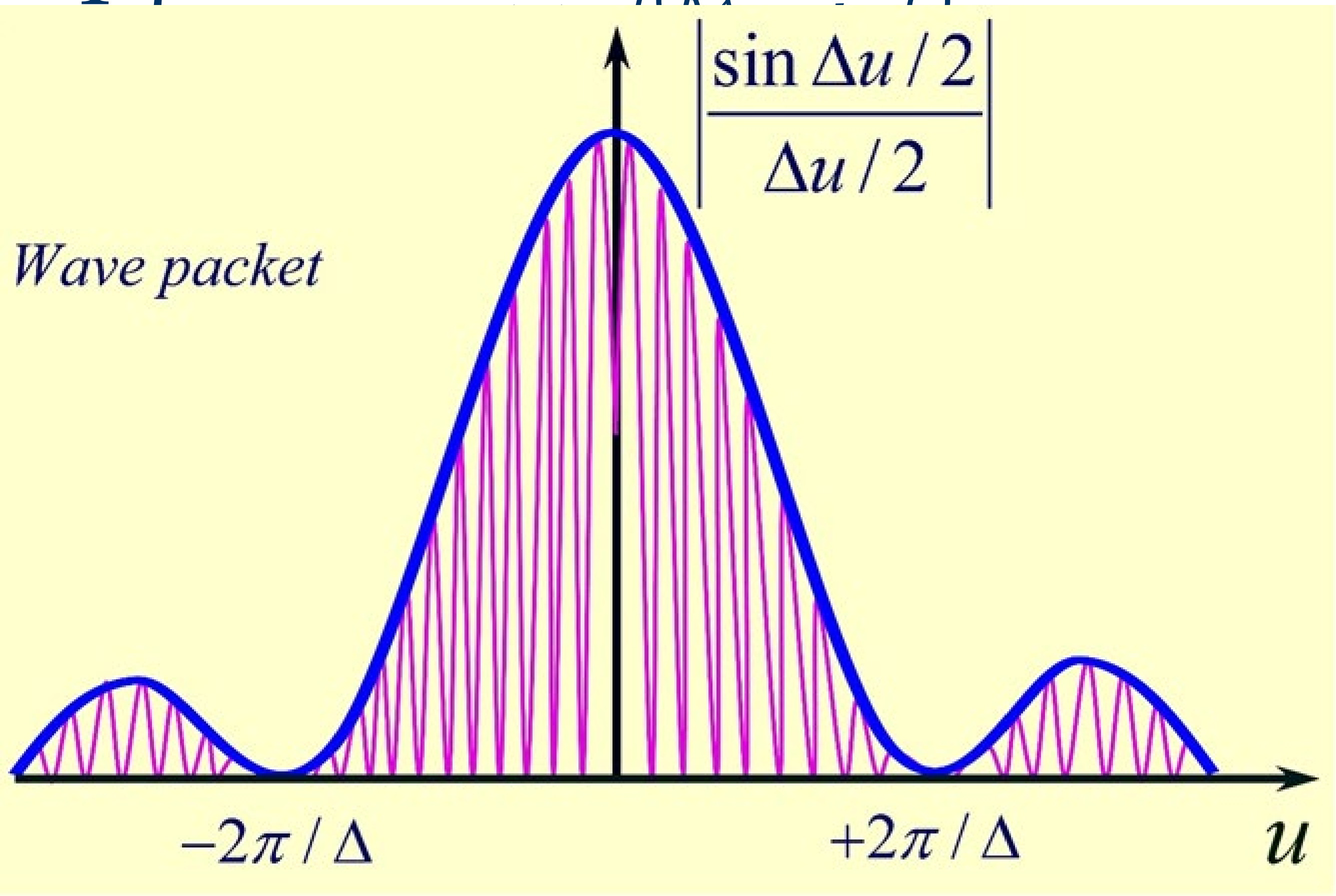
在k_0附近将$E(k)$展开： $$E(k)=E(k_0)+\left.\frac{dE}{dk}\right|_{k_0}(k-k_0)+\cdots$$

$$\psi(x,t)\approx\frac{1}{\Delta}u_{k_0}(x)e^{i\left(k_0x-\frac{E(k_0)}{\hbar}t\right)}\int_{k_0-\Delta/2}^{k_0+\Delta/2}\exp\left[i(k-k_0)\left(x-\frac{1}{\hbar}\left.\frac{dE}{dk}\right|_{k_0}t\right)\right]dk$$

$$=u_{k_0}(x)e^{i\left(k_0x-\frac{E(k_0)}{\hbar}t\right)}\frac{\sin\Delta\xi/2}{\Delta\xi/2}$$

一、波包

波包函数：　$\psi(x,t)$ … $\frac{1}{\ }\int^{k_0+\Delta/2}$ … $e^{i\left(kx-\frac{E(k)}{\ }t\right)}$



在k_0附近将$E(k)$展开

$$\psi(x,t)\approx\frac{1}{\Delta}u_{k_0}(x) \cdots \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}\bigg|_{k_0}t\Bigg)\Bigg]dk$$

$$=u_{k_0}(x)e^{i\left(k_0x-\frac{E(k_0)}{\hbar}t\right)}\frac{\sin\Delta\xi/2}{\Delta\xi/2}$$

二、平均速度

由量子力学求平均速度的方法：

$$\bar{\vec{v}} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int_{N\Omega} \psi_k^*(\vec{r})[\vec{r}H - H\vec{r}]\psi_k(\vec{r})d\vec{r}$$

将波矢空间梯度算符$\nabla_k = \frac{\partial}{\partial k_x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial k_y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial k_z}\vec{k}$作用到布洛赫函数

$$\nabla_k \psi_k(\vec{r}) = \nabla_k\left(u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = i\vec{r}\psi_k(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\nabla_k u_k(\vec{r})$$

将波矢空间梯度算符作用到定态薛定谔方程

$$\nabla_k[H\psi_k(\vec{r})] = \nabla_k[E_k\psi_k(\vec{r})]$$

二、平均速度

左端：$\nabla_k[H\psi_k(\vec{r})] = H\nabla_k\psi_k(\vec{r}) = iH\vec{r}\psi_k(\vec{r}) + He^{i\vec{k}\vec{r}}\nabla_k u_k(\vec{r})$

右端：$\nabla_k[E_k\psi_k(\vec{r})] = \nabla_k E_k\psi_k(\vec{r}) + i\vec{r}H\psi_k(\vec{r}) + E_k e^{i\vec{k}\vec{r}}\nabla_k u_k(\vec{r})$

所以有

$$\int_{N\Omega} \psi_k^*(\vec{r})\,[\nabla_k E_k + i\vec{r}H - iH\vec{r}]\psi_k(\vec{r})d\vec{r} = 0$$

即

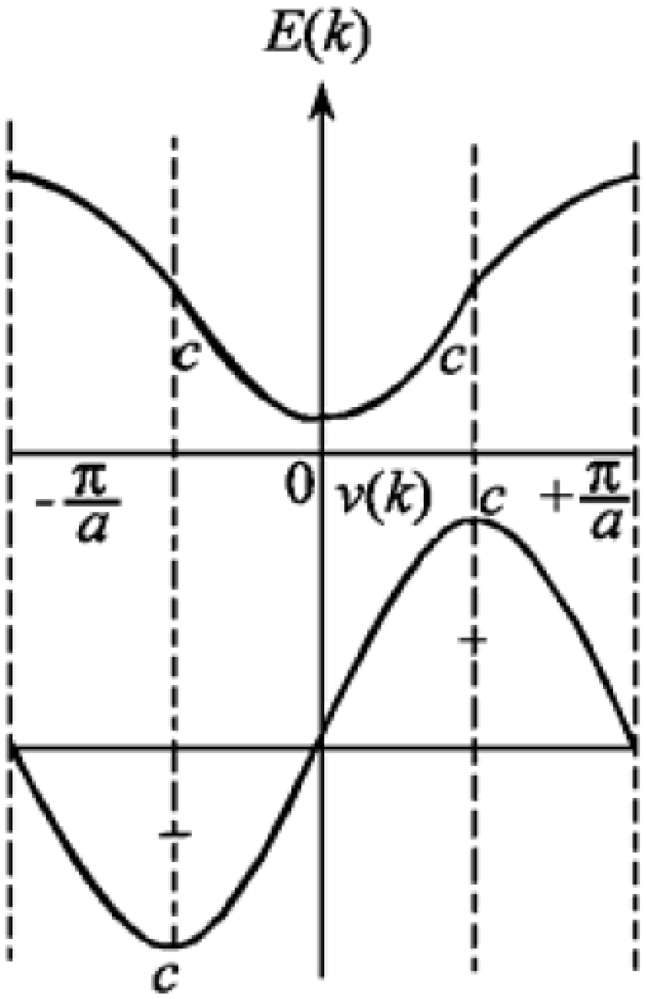
$$\nabla_k E_k = -\int_{N\Omega} \psi_k^*(\vec{r})\,[i\vec{r}H - iH\vec{r}]\psi_k(\vec{r})d\vec{r} = -i\overline{[\vec{r}H - H\vec{r}]}$$

↳ 电子的平均速度：$\bar{v} = \dfrac{1}{i\hbar}\overline{[\vec{r}H - H\vec{r}]} = \dfrac{1}{\hbar}\nabla_k E_k$

二、平均速度

说明：

- 如果波包大小远大于原胞的线度，则晶体中电子的运动可以用波包运动的规律来描述.
- 根据平均速度的计算公式，若已知能带结构$E(k)$，就可得到电子的平均速度.



三、电子的平均加速度和有效质量

根据动能定理，dt时间内在外力作用下电子能量的增加为：

$$dE = \vec{F} \cdot \vec{v} dt$$

由于：

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{d\vec{k}} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} = \hbar \vec{v} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{v} \cdot \frac{d(\hbar \vec{k})}{dt}$$

比较可得：

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

——支配晶体中电子状态变化的基本方程

三、电子的平均加速度和有效质量

由加速度的定义：

$$\vec{a}=\frac{d\vec{v}}{dt}=\frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}[\nabla_k E_k]=\frac{1}{\hbar}\nabla_k\left[\frac{d}{dt}E_k\right]=\frac{1}{\hbar}\nabla_k\left[\nabla_k E\cdot\frac{d\vec{k}}{dt}\right]=\frac{1}{\hbar^2}\nabla_k^2 E\cdot\vec{F}$$

张量形式：

$$\begin{bmatrix}a_x\\a_y\\a_z\end{bmatrix}=\frac{1}{\hbar^2}\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x\partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x\partial k_z}\\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y\partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y\partial k_z}\\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z\partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z\partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2}\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}F_x\\F_y\\F_z\end{bmatrix}$$

三、电子的平均加速度和有效质量

电子的有效质量张量

$$\frac{1}{m^*}=\frac{1}{\hbar^2}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z}\\ \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z}\\ \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z^2}\end{bmatrix}$$

或 $\dfrac{1}{m_{\alpha\beta}^*}=\dfrac{1}{\hbar^2}\dfrac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta},\quad (\alpha,\beta=x,y,z)$

一维情况： $m^*=\hbar^2\Big/\dfrac{\partial^2 E}{\partial k^2}$

三、电子的平均加速度和有效质量

说明：

- 布洛赫电子在外场力作用下，运动规律形式上遵守牛顿定律，只是质量把m用有效质量m^*代替.
- 有效质量为张量，一般情况下$m_x^* \neq m_y^* \neq m_z^*$，此时布洛赫电子的加速度与外场力方向可以不一致．在k空间，当等能面为球面时$m_x^* = m_y^* = m_z^* = m^*$,有效质量退化为标量.
- 晶体中电子的有效质量不同于自由电子的质量：自由电子的质量是标量，而有效质量是一个张量；自由电子的质量是常数,有效质量是波矢k的函数，可以取正值，也可以取负值，甚至可以为无穷大.

三、电子的平均加速度和有效质量

一维紧束缚近似：

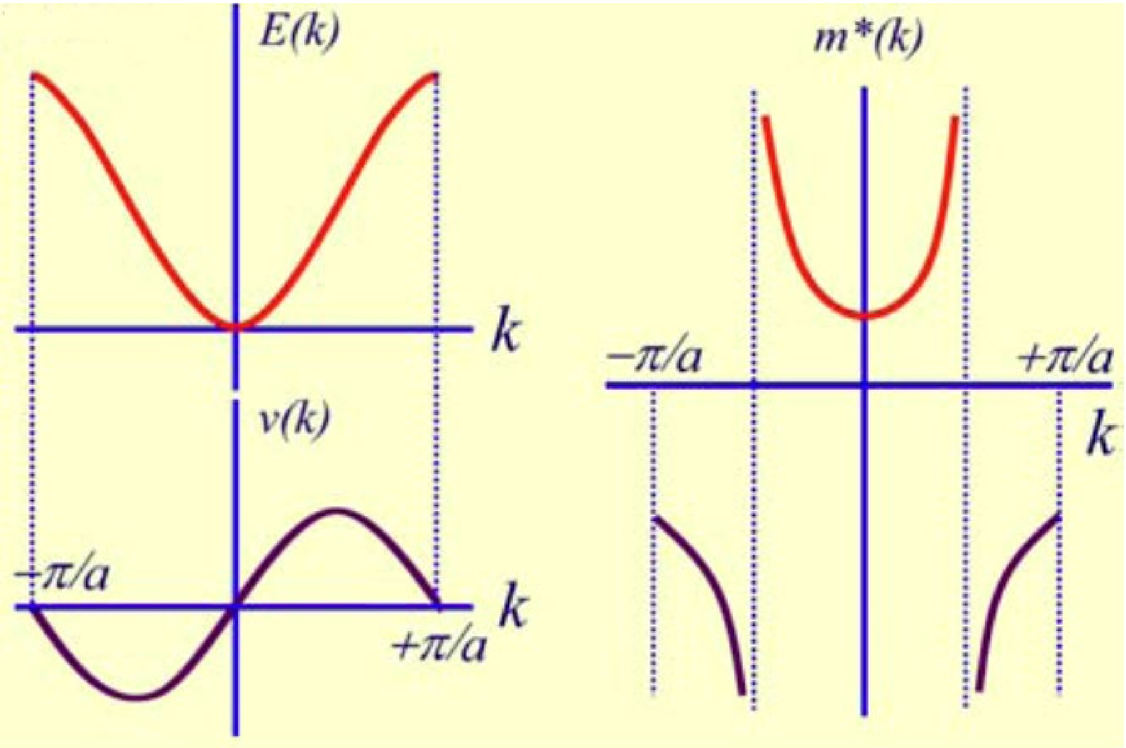
$$E_n(k) = \varepsilon_n - J_0 - 2J_1 \cos k\, a$$

电子的速度：

$$v(k) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{2J_1 a}{\hbar}\sin k\, a$$

电子的有效质量：

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} = \frac{\hbar^2}{2J_1 a^2 \cos k\, a}$$



在带底和带顶处，电子速度为零。中间有极大和极小值；带底处有效质量为正，带顶处有效质量为负，中间处有效质量为无穷大。

三、电子的平均加速度和有效质量

有效质量的物理意义：m为电子的惯性质量, $\vec{F}_l$为电子所受到的晶格场力, $\vec{F}$为电子所受到的晶体以外产生的场所施加的力,

$$\vec{a} = \frac{1}{m}(\vec{F} + \vec{F}_l) \rightarrow \vec{a} = \frac{1}{m^*}\vec{F}$$

比较可得 ：

$$m^* = m\frac{\vec{F}}{\vec{F} + \vec{F}_l}$$

即m^*除了反映电子的惯性之外, 还概括了晶格场力$\vec{F}_l$对电子的作用.

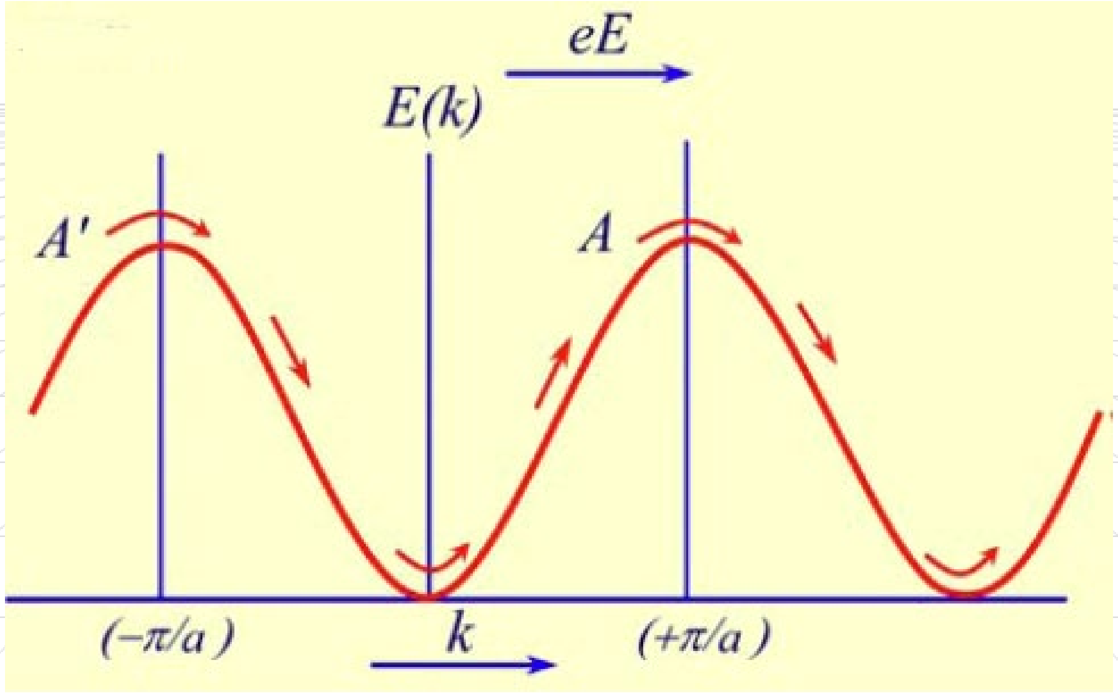
§5.2 恒定电场作用下电子的运动

一、电场作用下的运动方程

若沿$-x$方向加一恒定电场E，则支配电子运动的方程为

$$\hbar\frac{dk}{dt}=F=eE\rightarrow\frac{dk}{dt}=\frac{eE}{\hbar}=\text{const.}$$

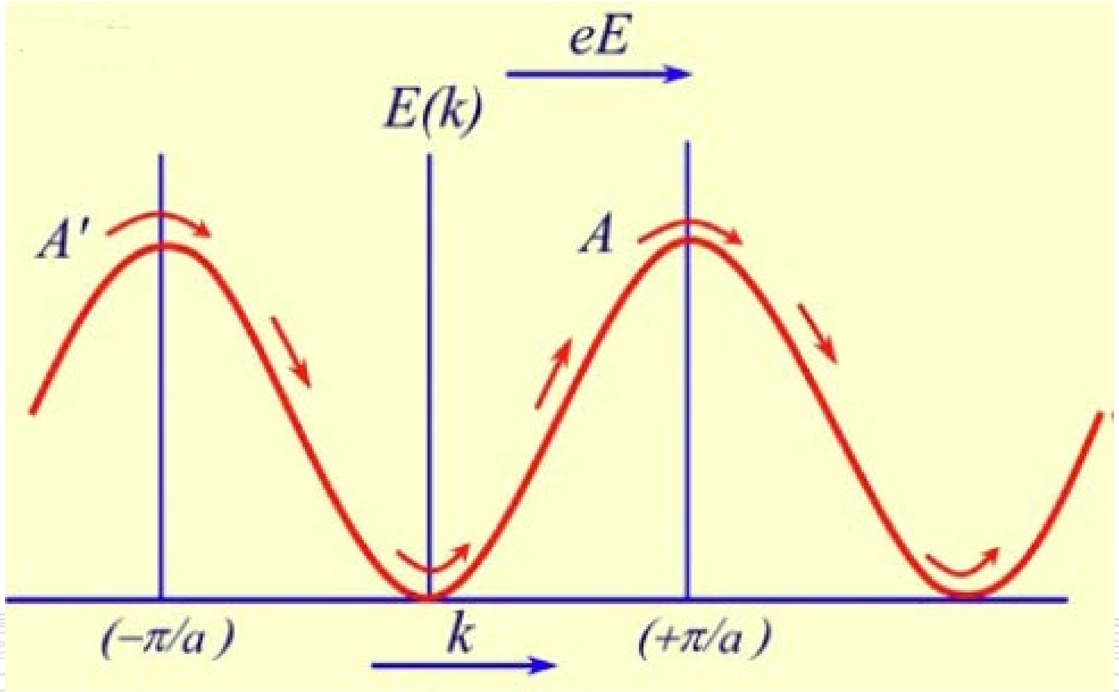
表明：电子在k空间中做匀速运动.



循环周期：

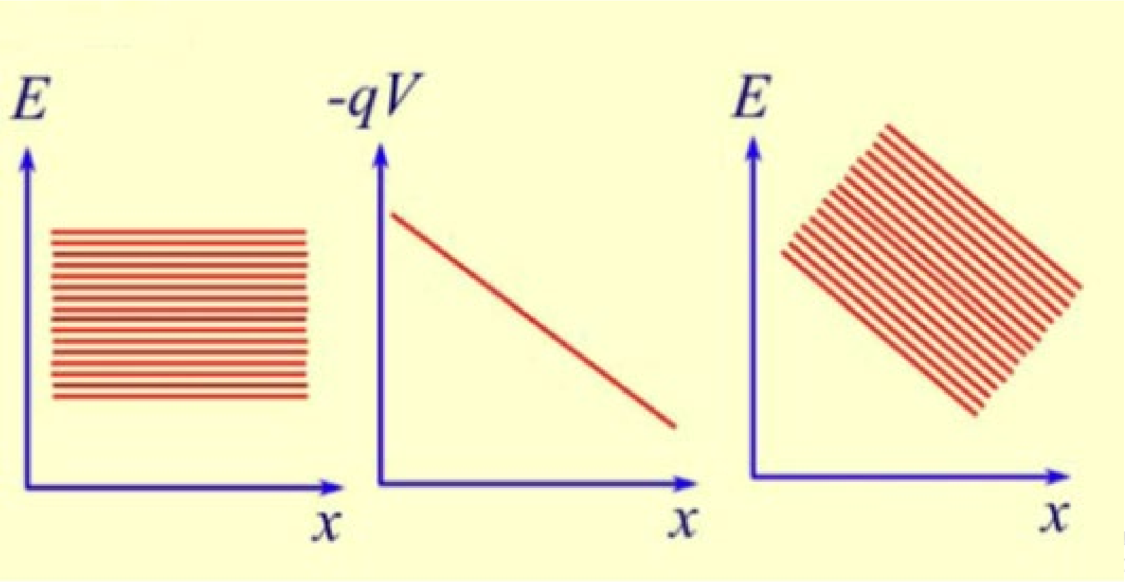
$$T=\frac{2\pi\hbar}{aeE}$$

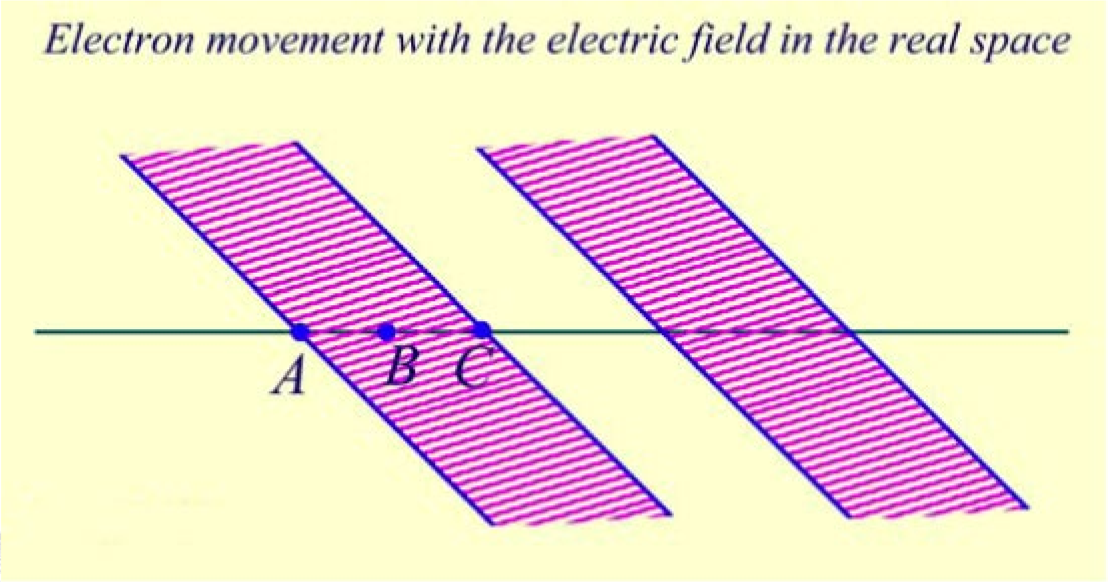
二、布洛赫振荡



电子在k空间的循环运动，表现在电子速度上是v随时间的振荡变化：设$t=0$时，电子处在带底，$k=0$，$m^*>0$，外力作用使电子加速，当到达$k=\pi/2a$时，$m*\to\infty$，速度v到达极大，k超过该点后，m^*，外力作用使电子减速，直至$k=\pi/a$时，速度为零，这时电子处于带顶．外力使电子反向运动，这就是在恒定外场作用下速度的振荡． Amazing！

二、布洛赫振荡



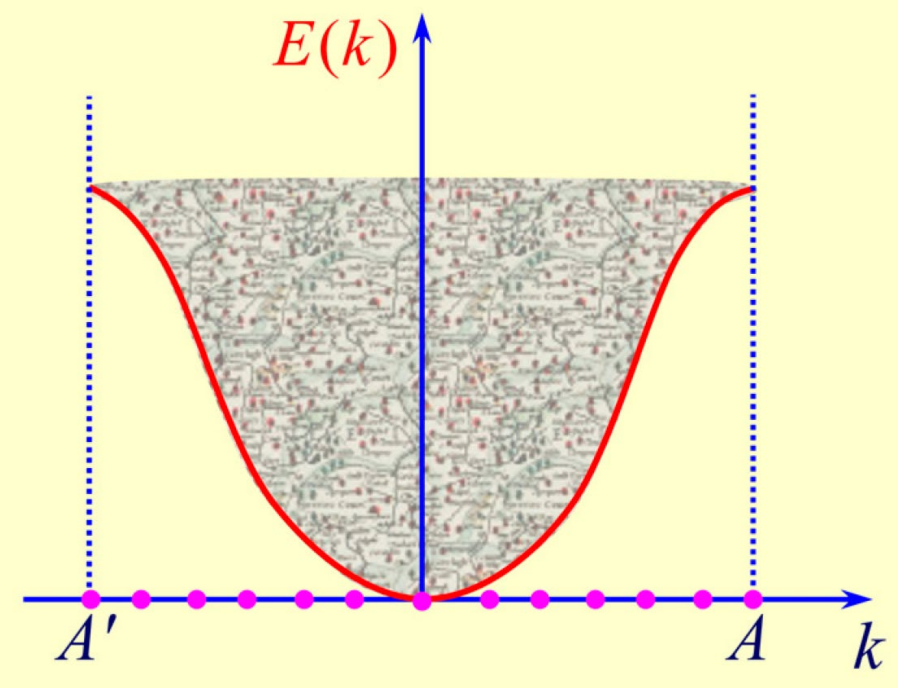


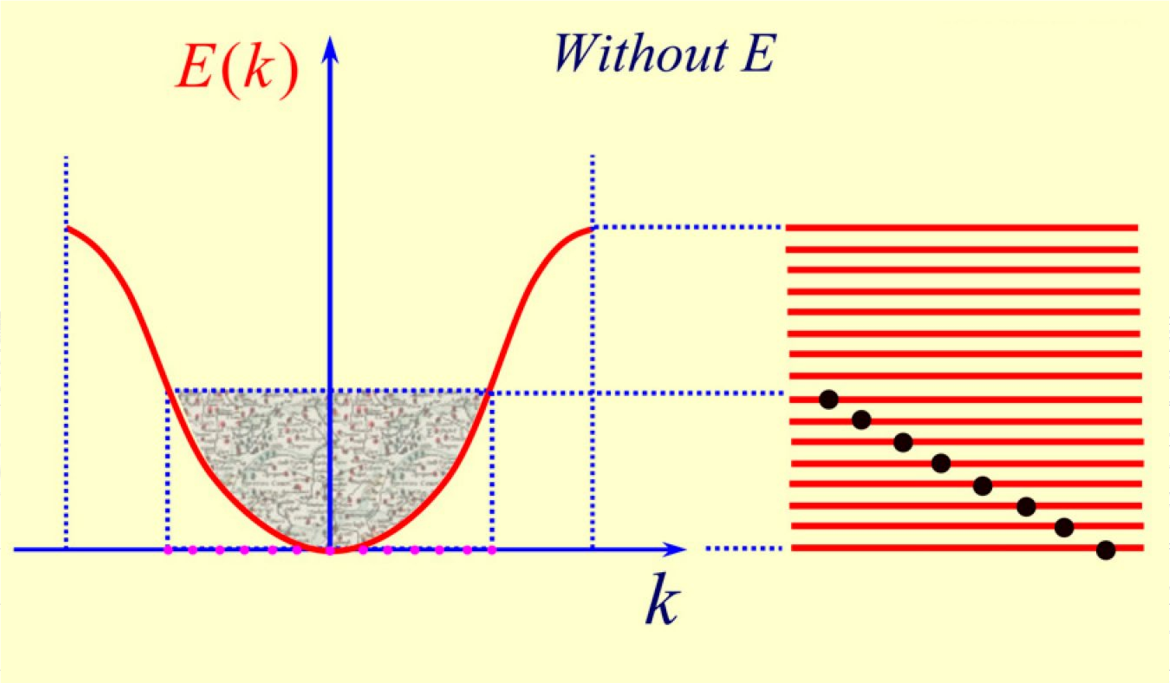
由于电子在运动过程中不断受到声子、杂质和缺陷的散射，布洛赫振荡现象实际上很难观察到，原因：

- 周期太长，电子还来不及完成一次振荡过程就已被散射.
- 隧穿效应，电子遇到势垒时，有一定几率穿透势垒.

三、导体、半导体和绝缘体能带论解释

- 满带：能带中的所有能级均被电子占据。
- 未满带：能带中的部分能级均被电子占据。

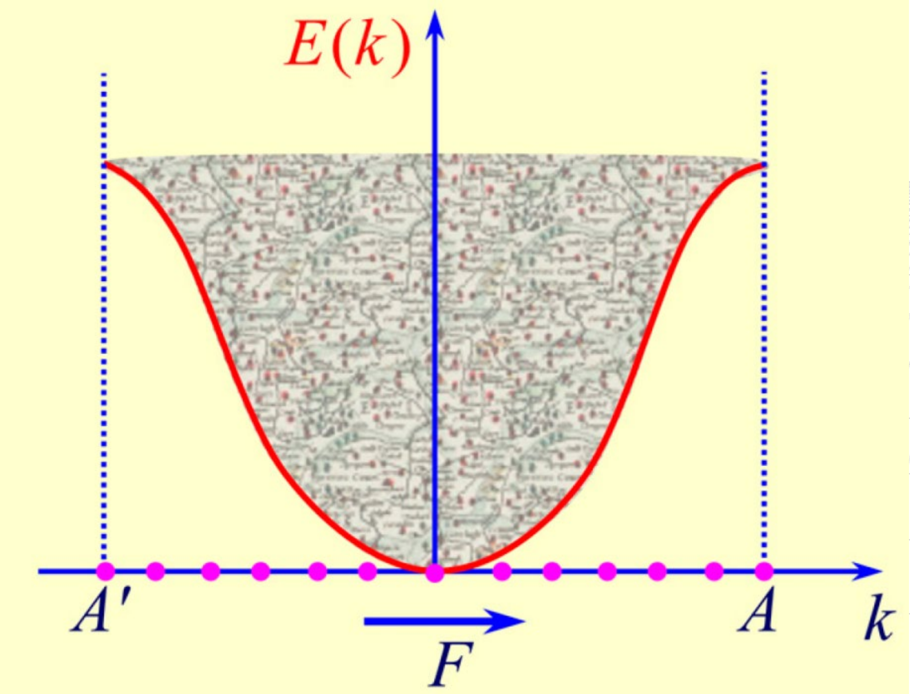


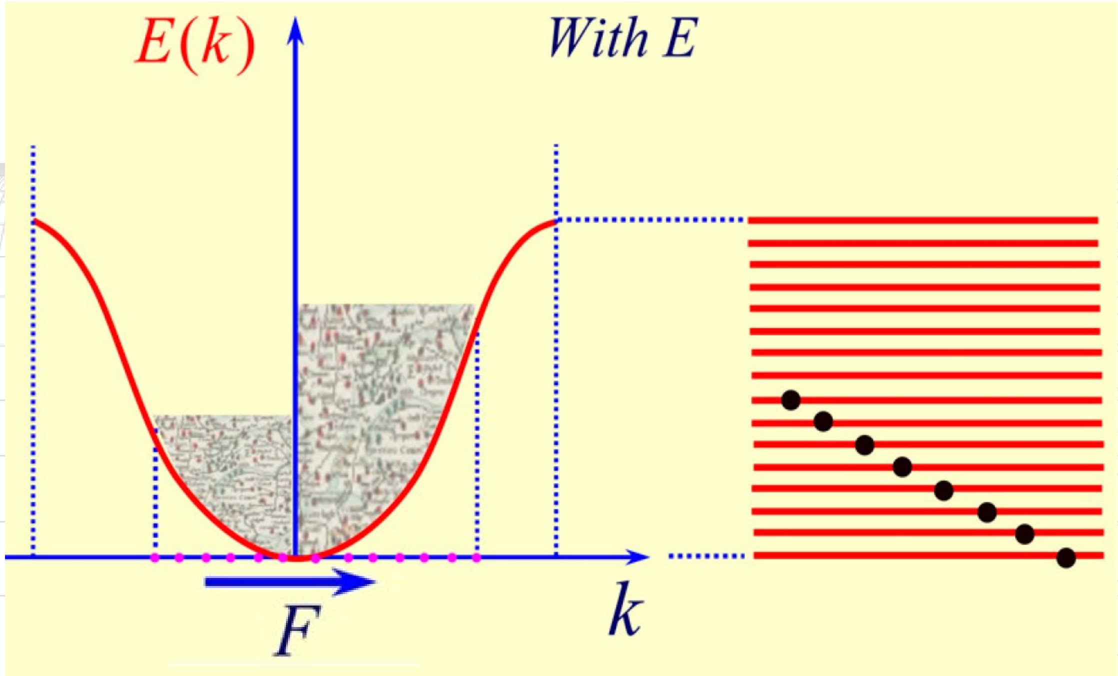


对于同一能带，处于k态和处于$-k$态的电子具有大小相等方向相反的速度，因此无外场时，无电子的定向转移。

三、导体、半导体和绝缘体能带论解释

有外场E作用时，所有的电子状态以相同的速度沿着电场的反方向运动. 对于满带，电子的运动不改变布里渊区中电子的分布. 所以在有外场作用的情形时，满带中的电子不产生宏观的电流. 对于未满带，逆电场方向上运动的电子较多，因此产生电流。





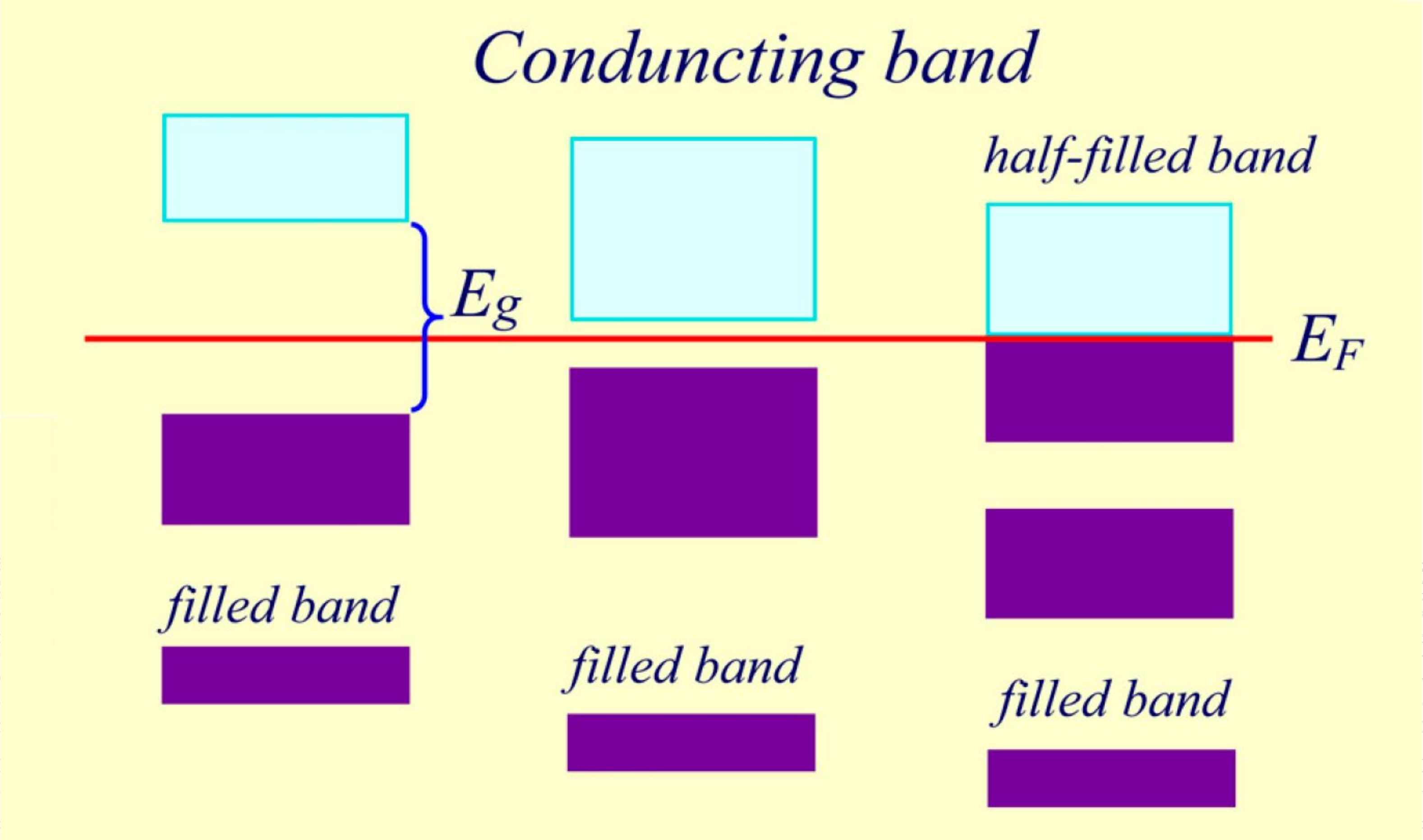
三、导体、半导体和绝缘体能带论解释

■ 绝缘体：价电子刚好填满了许可的能带形成满带，价带之上的能带没有电子，且导带和价带之间存在一个很宽的禁带，所以在电场作用下无电流产生.

■ 导体：存在部分被电子填充的能带，从而起导电作用.

■ 半导体：能带结构与绝缘体相似，但半导体禁带宽度较绝缘体的窄，依靠热激发即可以将满带中的电子激发到导带中，因而具有导电能力. 由于热激发到导带中的电子数目随温度按指数规律变化，所以半导体的电导率随温度的升高也按指数形式变大.

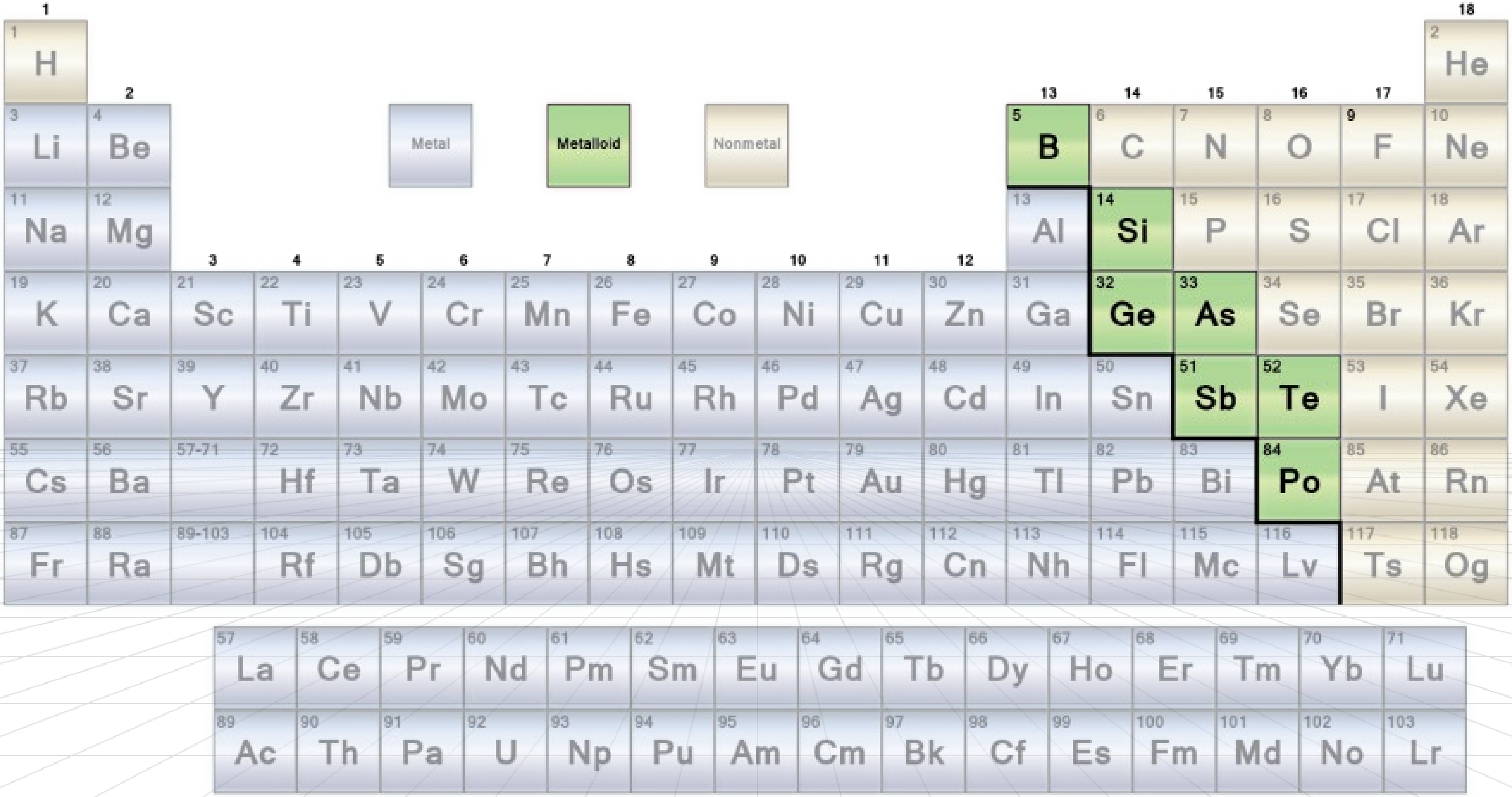
三、导体、半导体和绝缘体能带论解释



绝缘体、半导体和导体的能带图示

如何解释Mg(12)为导体？

三、导体、半导体和绝缘体能带论解释



半金属的能带有什么特点？

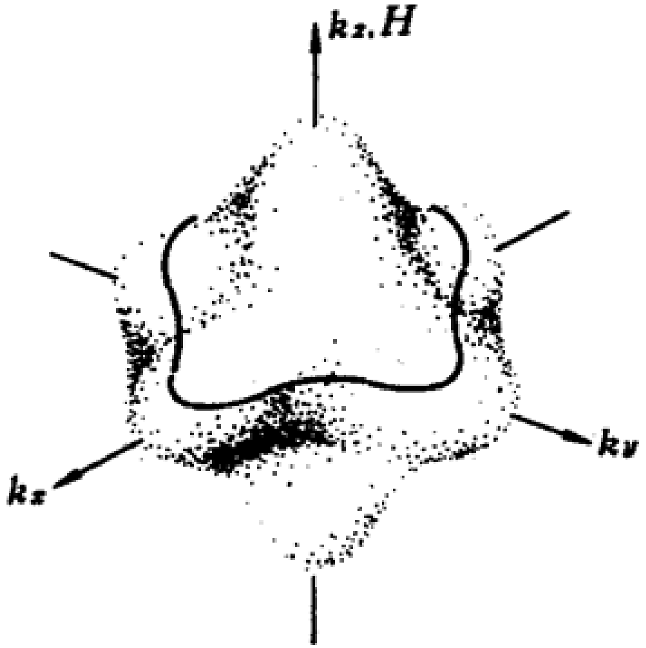
§5.3　恒定磁场中电子的运动

一、恒定磁场中的准经典运动

电子准经典运动服从的基本方程：

$$\vec{v}\left(\vec{k}\right) = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E\left(\vec{k}\right)$$

$$\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B} = \frac{d\vec{k}}{dt}$$



可以得出：

- 沿磁场方向k的分量不变化；
- 磁场对电子不作功，不改变电子的能量$E(k)$，即电子在等能面上运动.

➔ 在k 空间, 电子的运动轨迹是垂直于磁场的平面与等能面的交线, 即电子在垂直于磁场的等能线上运动.

二、自由电子的准经典运动

自由电子的能量：$E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}\rightarrow\vec{v}\left(\vec{k}\right)=\dfrac{1}{\hbar}\nabla_kE(k)=\dfrac{\hbar\vec{k}}{m}$

$$\frac{d\vec{k}}{dt}=-e\vec{v}\times\vec{B}=-\frac{e}{m}\left(\vec{k}\times\vec{B}\right)$$

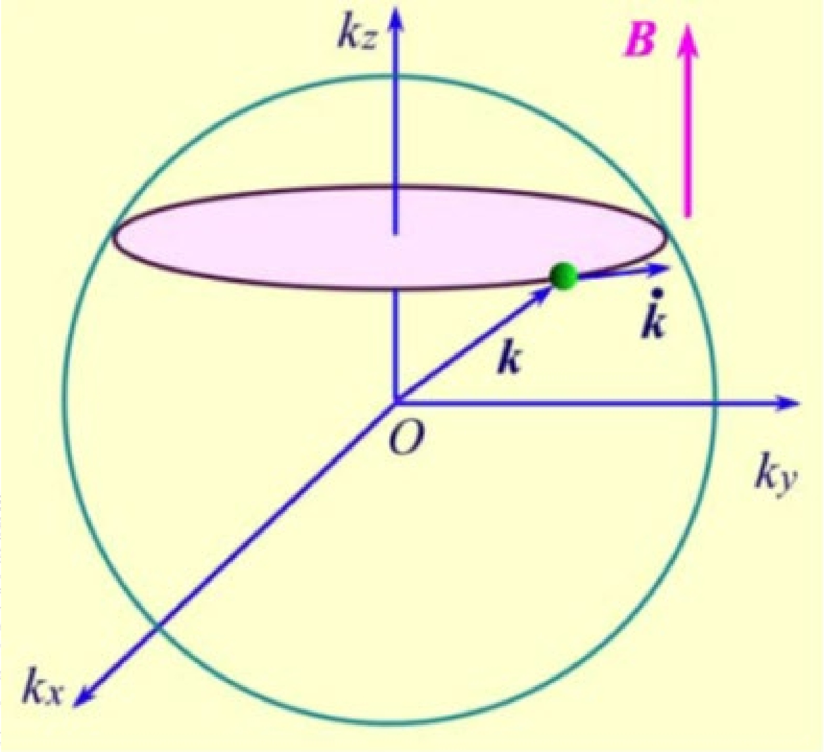
取B的方向沿k_z方向：$\vec{B}=(0,0,B)$,

$$\begin{cases}\dfrac{dk_x}{dt}=-\dfrac{eB}{m}k_y\\ \dfrac{dk_y}{dt}=\dfrac{eB}{m}k_x\\ \dfrac{dk_z}{dt}=0\end{cases}\rightarrow\begin{cases}\dfrac{d^2k_x}{dt^2}=-\left(\dfrac{eB}{m}\right)^2k_x\\ \dfrac{d^2k_y}{dt^2}=-\left(\dfrac{eB}{m}\right)^2k_y\end{cases}$$

——k空间电子在(k_x,k_y)平面内作回旋运动

二、自由电子的准经典运动

k空间电子在(k_x, k_y)平面内作回旋运动。



回旋频率：

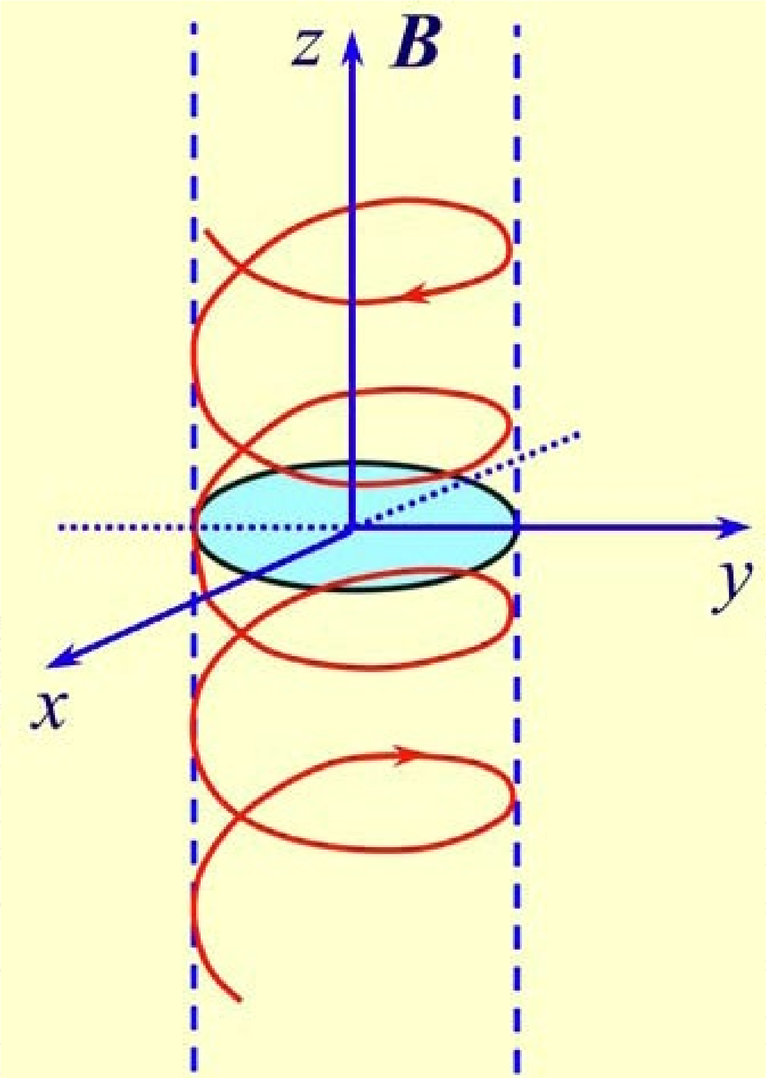
$$\omega = \frac{eB}{m}$$

推广：布落赫电子在磁场中虽然也在做回旋运动，但由于其等能面的复杂变化，其运动轨迹要复杂的多，因而其回旋频率的表达式需要具体积分求出． 在能带底和能带顶，可以给出类似自由电子的表达式：

二、自由电子的准经典运动

在实空间：

$$\begin{cases} \dfrac{dv_x}{dt} = -\dfrac{eB}{m} v_y \\ \dfrac{dv_y}{dt} = \dfrac{eB}{m} v_x \\ \dfrac{dv_z}{dt} = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \dfrac{d^2 v_x}{dt^2} + \left(\dfrac{eB}{m}\right)^2 v_x = 0 \\ \dfrac{d^2 v_y}{dt^2} + \left(\dfrac{eB}{m}\right)^2 v_y = 0 \\ \dfrac{dv_z}{dt} = 0 \end{cases}$$



——电子在z方向做匀速运动，在垂直磁场的平面内作匀速圆周运动，即螺旋线运动.

三、自由电子的量子理论

存在磁场时, 电子运动的哈密顿量:

$$H=\frac{1}{2m}\left(\vec{p}+e\vec{A}\right)^2$$

若磁场B 沿z方向, 可取: $\vec{A}=(-By,0,0)$

$$H=\frac{1}{2m}\left[(p_x-eBy)^2+p_y^2+p_z^2\right]$$

可见$[H,p_x]=[H,p_z]=0$, H与p_x, p_z有共同本征态.

$$H\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

分离变量:$\psi(\vec{r})=e^{i(k_x x+k_z z)}\phi(y)$

三、自由电子的量子理论

$\phi(y)$满足的方程：

$$\frac{1}{2m}\left[(\hbar k_x - eBy)^2 + p_y^2 + (\hbar k_z)^2\right]\phi(y) = E\phi(y)$$

$$\Rightarrow \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{(\hbar k_x - eBy)^2}{2m}\right]\phi(y) = \left[E - \frac{(\hbar k_z)^2}{2m}\right]\phi(y)$$

——谐振子模型

方程的解为：

$$\phi_n(y) = N_n \exp\left[-\frac{m\omega_c}{2\hbar}(y-y_0)^2\right] H_n\left[\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}}(y-y_0)\right]$$

$$\varepsilon_n = (n+1/2)\hbar\omega_c \qquad (n = 0,1,2,3\dots)$$

$\omega_c = ?$

三、自由电子的量子理论

综上：
$$E=\varepsilon_n+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}=\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

对比：
$$E=\frac{\hbar^2k_x^2}{2m}+\frac{\hbar^2k_y^2}{2m}+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}\rightarrow E=\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

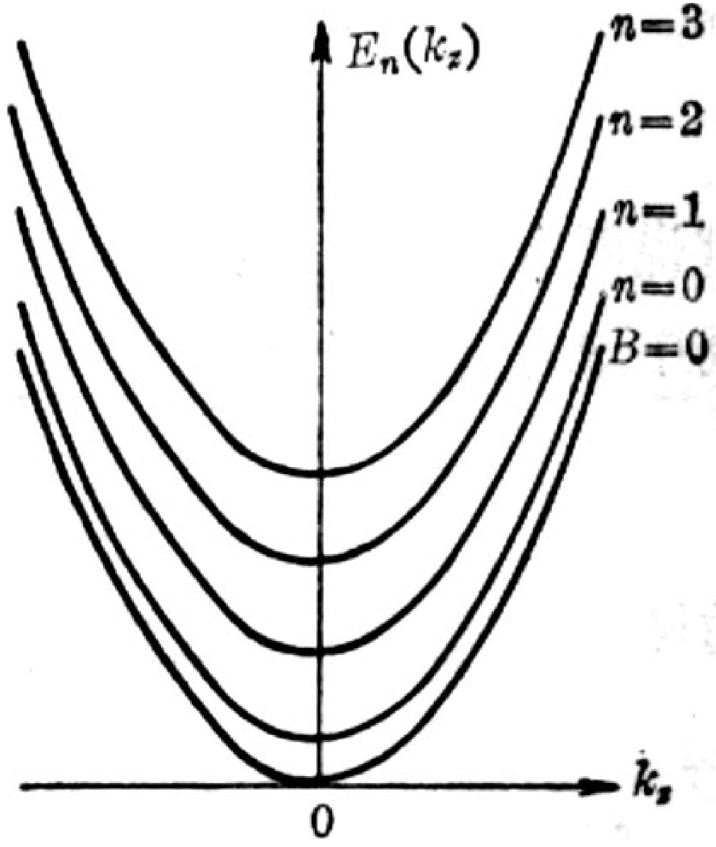
未施加磁场　　　　沿z方向施加磁场

沿磁场方向电子保持自由运动，在垂直磁场的xy平面，电子运动是量子化的，这种量子化的能级称为朗道能级.

三、自由电子的量子理论

❖ 结论:

- 电子的能量由准连续的能谱变成一维的分立的磁次能带，每条次能带都成抛物线形状.
- $n=0$是最低的次能带.
- n增加, 次能带向上移, 各能带有一定的交迭.
- 由ω_c知，磁场增强，次能带间隔大.



四、朗道能级的简并度

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}m\omega_c^2(y-y_0)^2\right]\phi(y)=\varepsilon\phi(y)$$

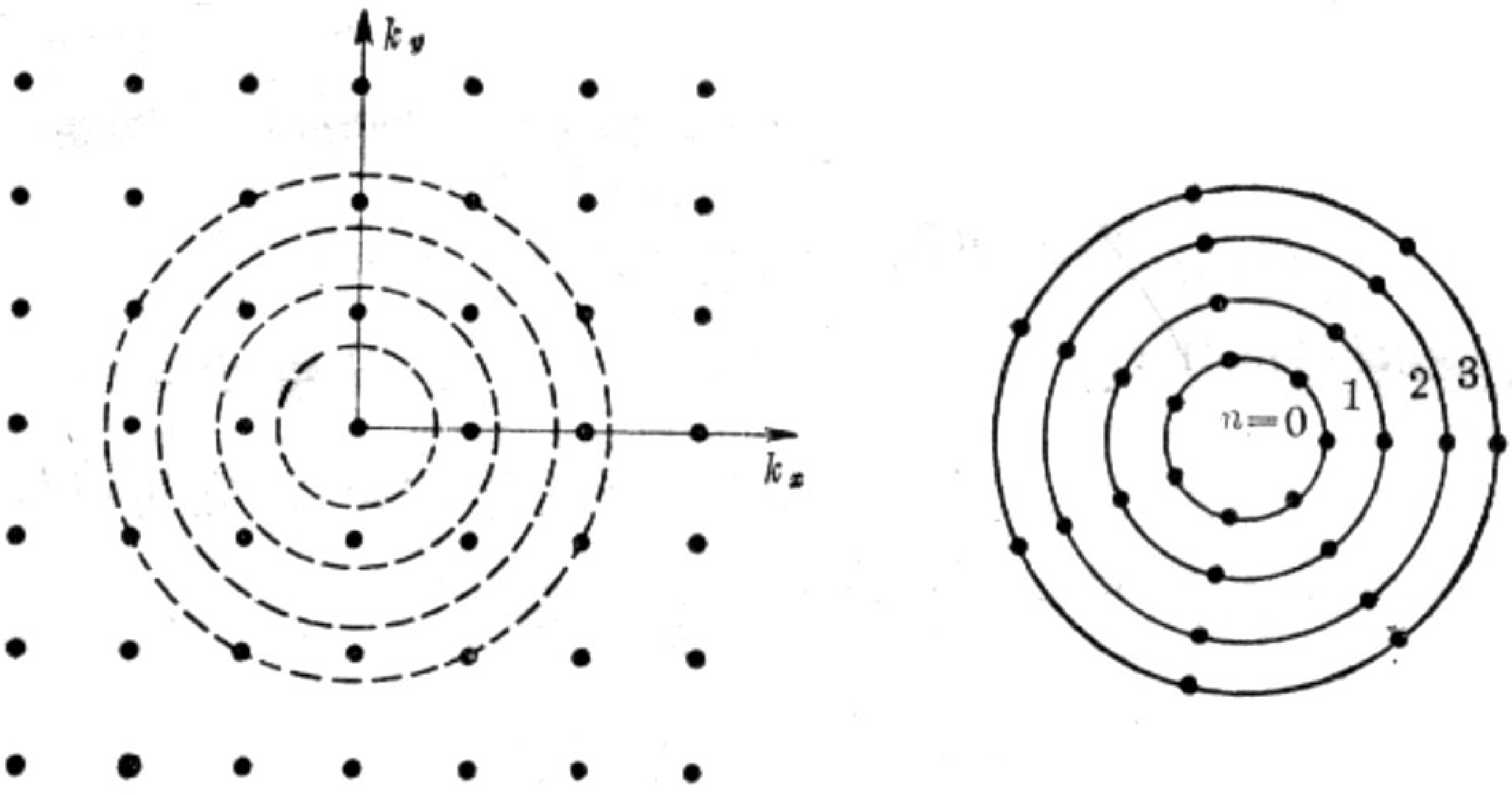
不同的y_0并不影响谐振子的本征值，而y_0又依赖于波矢分量k_x, 说明不同的状态是简并态．设L_x和L_y分别为晶体在x和y方向的尺寸

$$-\frac{L_y}{2}\le y_0\le\frac{L_y}{2}\xrightarrow{y_0=\frac{\hbar}{eB}k_x}-\frac{L_y}{2}\le\frac{\hbar k_x}{eB}\le\frac{L_y}{2}\rightarrow\ |k_x|\le\frac{eBL_y}{2\hbar}$$

波矢数目： $Q=2\left|\frac{eBL_y}{2\hbar}\right|\times\frac{L_x}{2\pi}=\frac{m\omega_c}{2\pi\hbar}L_xL_y$

$\boxed{\text{简并度(记及自旋)：}\ 2Q}$

四、朗道能级的简并度



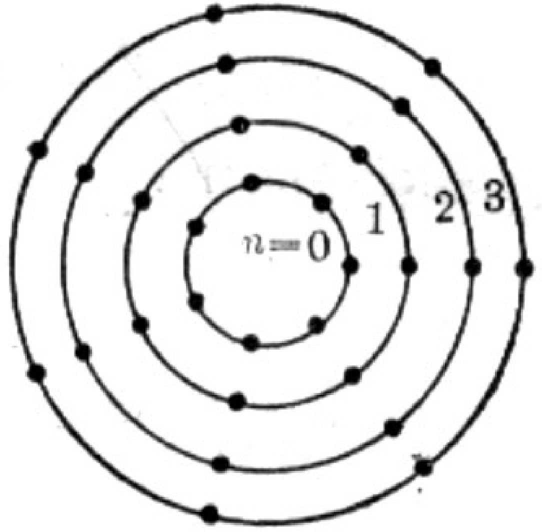
(a)无外磁场　　(b)有外磁场

简并度与磁感应强度B成正比.

四、朗道能级的简并度

证明： $$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c \rightarrow \pi k^2 = \frac{2\pi}{\hbar} m\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega_c$$

↳相邻圆周面积 $\Delta S = \dfrac{2\pi m\omega_c}{\hbar}$



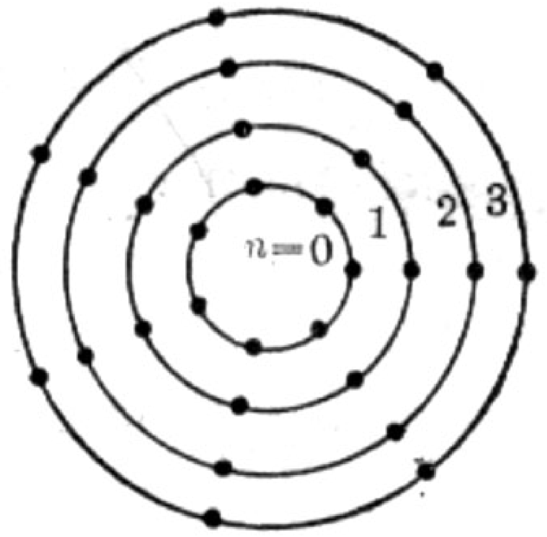
无磁场时此面积内的波矢数目为

$$\frac{2\pi m\omega_c}{\hbar} \times \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} = \frac{m\omega_c}{2\pi\hbar} L_x L_y = Q$$

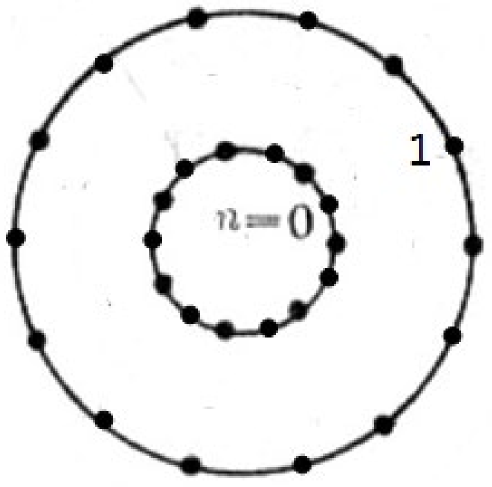
等于施加磁场后等能曲线上的波矢数目.

四、朗道能级的简并度

B增强，相邻圆周间隔成比例增大，圆周上波矢点数量也成比例增大.



磁场B中电子量子态分布



磁场$2B$中电子量子态分布

五、磁场中电子的能态密度

第n个次能带dk_z区间量子态数目：

$$Z(n,k_z)dk_z = 2Q\frac{L_z}{2\pi}dk_z = \frac{eB}{2\pi^2\hbar}L_xL_yL_zdk_z = \frac{eBV_c}{2\pi^2\hbar}dk_z$$

$$E = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} \Rightarrow \begin{cases} dk_z = \dfrac{m}{\hbar^2k_z}dE \\ k_z = \left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2}\left[E-\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right]^{1/2} \end{cases}$$

第n个次能带在$E\sim E+dE$能量区间的量子态数目

$$Z(E,n)dE = \frac{V_c\hbar\omega_c}{8\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left[E-\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right]^{-1/2}dE$$

五、磁场中电子的能态密度

$E \sim E + dE$间总的状态数：

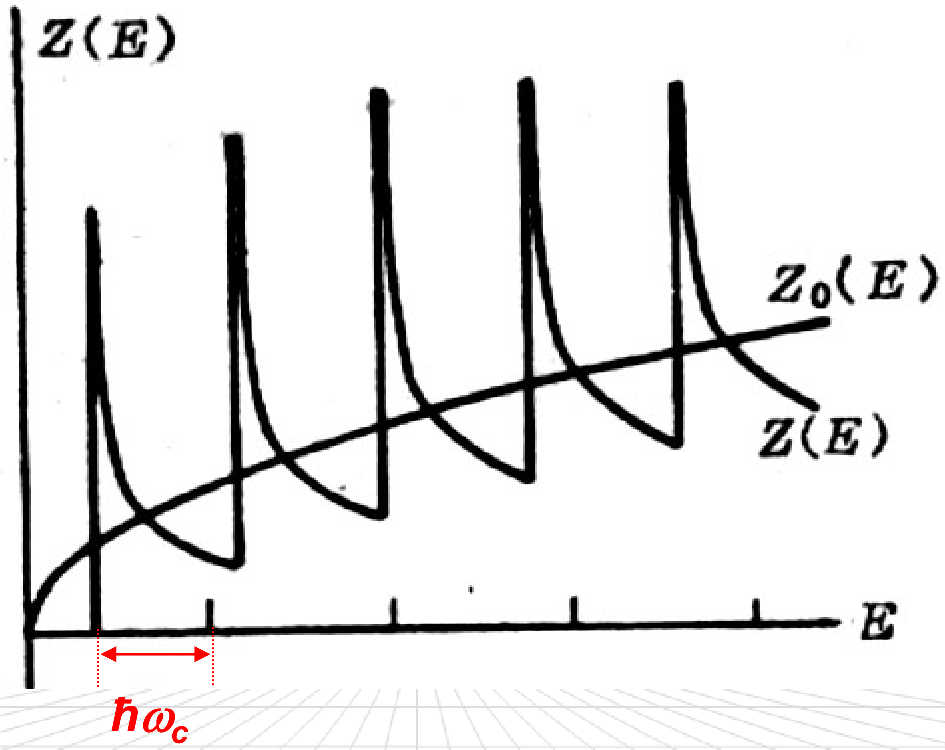
$$N(E,n)dE = \sum_{n=0}^{l} \frac{V_c \hbar\omega_c}{8\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left[E - \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right]^{-1/2} dE$$

如何理解求和上限？

电子的能态密度

$$N(E,n) = \sum_{n=0}^{l} \frac{V_c \hbar\omega_c}{8\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left[E - \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right]^{-1/2}$$

五、磁场中电子的能态密度



磁场中电子的能态密度曲线

- 能态密度出现峰值, 相邻峰值间能量差$\hbar\omega_c$；
- 能态密度与$\hbar\omega_c$成正比，增大磁场，能态密度增大;
- 峰数目与磁场近似成反比（总状态数一定）.

The End!