※ 能带理论

- 能带理论（近自由电子近似、紧束缚近似等）
  → 晶体中电子（单电子）的性质
  * 本征函数：布洛赫函数（周期性调幅的平面波）
  * 本征状态：电子允许状态形成所谓的能带$E(k)$
  * 能带结构
  * 能态密度
  * 电子填充、费米面
- 这是了解晶体中电子各种其它性质的基础
  * 电子统计问题 —— 热容量、热激发、光吸收、…
  * 电子的动力学问题 —— 外场下的运动……

第五章 晶体中电子在电场和磁场中的运动

问题的提出

晶体中的电子在外加场的作用下—— 电场、磁场、掺入杂质势场等，如何描述电子的运动？

- ✓ 无外场时：晶体电子的薛定谔方程 —— 定态！
- ✓ 有外场时：含外场的薛定谔方程？—— 含时方程！

  外场下电子的能量可能随时间变化

—— 外场与晶体的势场相比弱许多，可用电子在晶体周期性势场中的本征态为基础进行讨论

—— 晶体波函数以布洛赫函数为基展开，从而来求解含时薛定谔方程 → 布洛赫表象

—— 特定条件下，将晶体电子当作准经典粒子

具有静止质量m_e的电子在晶体周期性势场中运动 → 具有有效质量的准经典粒子在零势场中的运动（限制能量在能带中） → 用准经典粒子在外场下的动力学方程来描述

方法一 —— 求解在外加势场 U 时电子的薛定谔方程

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) + U]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

方法二 —— 满足一定条件下将电子的运动近似当作经典粒子的运动来处理

准经典粒子的动力学方程

—— 讨论均匀电磁场中晶体的电磁输运问题

§ 5.1 准经典运动

建立电子的准经典运动方程，需有电子的动量和坐标？

晶体中电子的动量和坐标？

- 经典粒子

  * 同时具有确定的动量和坐标！

- 电子

  * 具有量子行为，满足测不准原理

  * 自由电子：动量$\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$， $\psi_{\mathrm{p}}\sim e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$

  * 晶体电子：本征态为具有确定波矢k和能量的布洛赫函数，状态k完全确定，则坐标完全不确定

  * 外场下：非定态，电子状态**k**发生变化 → 波包！

—— 量子力学中，对任意有经典类比的力学系统，如果对一个态的经典描述近似成立，用一个波包来描述这个态

—— 粒子的坐标和动量满足量子力学测不准关系

1. 波包和电子速度

粒子的波包构成

粒子在空间分布在 $\vec{r}_0$ 附近的 $\Delta\vec{r}$ 范围内，动量取值为 $\hbar\vec{k}_0$ 附近的 $\hbar\Delta\vec{k}$ 范围内

波包中心 $\vec{r}_0$ — 粒子中心，中心的动量 $\hbar\vec{k}_0$ — 粒子的动量

晶体电子的波包波函数

晶体中的波包由布洛赫波组成

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

➢ 考虑到时间演化，并假定电子在能带间不跃迁

以量子态 $\vec{k}_0$ 为中心的波包

令 $\vec{k}'=\vec{k}_0+\vec{k}$ $\vec{k}$ —— 很小

势场周期性函数近似表示 $u_{k'}(\vec{r})\approx u_{k_0}(\vec{r})$

将能量 $E(\vec{k}')$ 按泰勒级数展开

$$E(\vec{k}')\cong E(\vec{k}_0)+\vec{k}\cdot(\nabla_k E)_{k_0}$$

$$E(\vec{k}') \cong E(\vec{k}_0) + \vec{k}\cdot(\nabla_k E)_{k_0}$$

$\vec{k}$ 的取值范围 $$-\frac{\Delta}{2} \le \begin{Bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{Bmatrix} \le \frac{\Delta}{2}$$ Δ —— 小量

—— 波包函数

(将k_0附近Δ范围内的本征函数迭加)

$$\psi(\vec{r},t) = \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_x \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_y \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_z e^{i[(\vec{k}_0+\vec{k})\cdot\vec{r} - \frac{E(\vec{k}_0+\vec{k})}{\hbar}t]} u_{\vec{k}_0+\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r},t) \cong u_{\vec{k}_0}(\vec{r}) e^{i[\vec{k}_0\cdot\vec{r} - \frac{E(\vec{k}_0)}{\hbar}t]} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_x \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_y \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_z e^{i\vec{k}\cdot[\vec{r} - \frac{(\nabla_k E)_{k_0}}{\hbar}t]}$$

—— 电子的概率密度分布函数

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2=\left|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})\right|^2\left|\int_{-\Delta/2}^{\Delta/2}dk_x\int_{-\Delta/2}^{\Delta/2}dk_y\int_{-\Delta/2}^{\Delta/2}dk_z e^{i\vec{k}\cdot[\vec{r}-\frac{(\nabla_k E)_{k_0}}{\hbar}t]}\right|^2$$

$$i\vec{k}\cdot[\vec{r}-\frac{(\nabla_k E)_{k_0}}{\hbar}t]=i[k_x(x-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_x})_{k_0}t]$$

$$+i[k_y(y-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_y})_{k_0}t]+i[k_z(z-\frac{1}{\hbar}(\frac{\partial E}{\partial k_z})_{k_0}t]$$

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

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |u_{\vec{k}_0}(\vec{r})|^2 \left| \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} e^{ik_x u} dk_x \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} e^{ik_y v} dk_y \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dk_z e^{ik_z w} \right|^2$$

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |u_{\vec{k}_0}(\vec{r})|^2 \left| \frac{\sin(\Delta u/2)}{\Delta u/2} \right|^2 \left| \frac{\sin(\Delta v/2)}{\Delta v/2} \right|^2 \left| \frac{\sin(\Delta w/2)}{\Delta w/2} \right|^2 \Delta^6$$

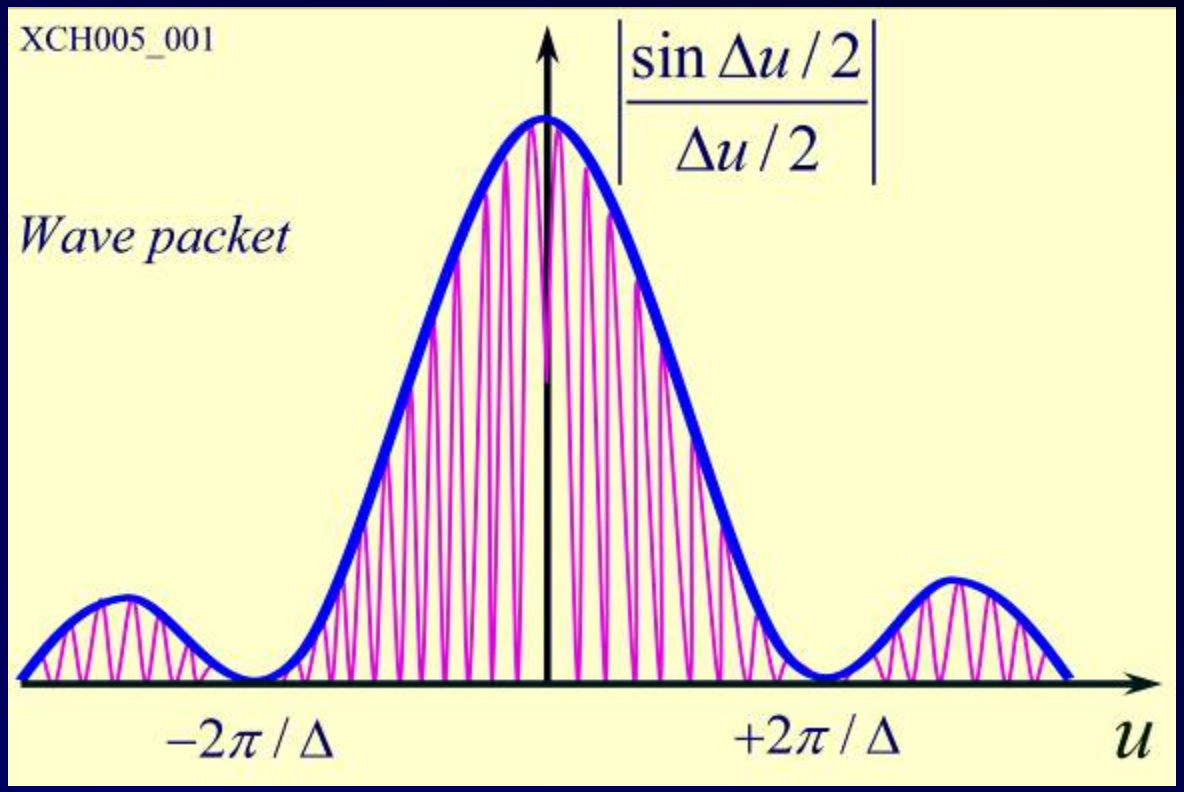
其中

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

- 电子分布既与周期调幅因子有关，也与Δ 有关
  - ＊若Δ=0，积分等于1；电子在全空间出现
  - ＊ 若Δ≠0?

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |u_{\vec{k}_0}(\vec{r})|^2 \left|\frac{\sin \Delta u/2}{\Delta u/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta v/2}{\Delta v/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta w/2}{\Delta w/2}\right|^2 \Delta^6$$

$\left|\frac{\sin \Delta u/2}{\Delta u/2}\right| \sim u$ 的曲线



波包的限度

$$u = \frac{2\pi}{\Delta}$$

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |u_{\vec{k}_0}(\vec{r})|^2 \left|\frac{\sin \Delta u/2}{\Delta u/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta v/2}{\Delta v/2}\right|^2 \left|\frac{\sin \Delta w/2}{\Delta w/2}\right|^2 \Delta^6$$

u = v = w = 0 $\quad |\psi(\vec{r},t)|^2 = |u_{\vec{k}_0}(\vec{r})|^2 \Delta^6$

$$\begin{cases} u = x_0 - \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0} t \\ v = y_0 - \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0} t \\ w = z_0 - \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0} t \end{cases} \qquad \begin{cases} x_0 = \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_x}\right)_{k_0} t \\ y_0 = \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_y}\right)_{k_0} t \\ z_0 = \dfrac{1}{\hbar}\left(\dfrac{\partial E}{\partial k_z}\right)_{k_0} t \end{cases}$$

粒子中心位置

$$\vec{r}_0 = \frac{1}{\hbar}\cdot(\nabla_k E)_{k_0} t$$

粒子的中心 $\vec{r}_0 = \frac{1}{\hbar}\cdot(\nabla_k E)_{k_0} t$

$$-\frac{\Delta}{2} \le \begin{Bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{Bmatrix} \le \frac{\Delta}{2}$$ k很小

粒子的速度 $\vec{v}_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar}(\nabla_k E)_{k_0}$

第一布里渊区 $(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ 要求 $\Delta << \frac{2\pi}{a}$ $\frac{2\pi}{\Delta} >> a$

$\delta u = \frac{2\pi}{\Delta}$ —— 实空间中波包的限度 $\delta u >> a$

—— 实空间中波包线度远远大于原胞（k空间中波包线度远远小于布里渊区宽度），在这一个限度里才能将电子看做是准经典粒子

准经典条件要求 $\Delta << \frac{2\pi}{a}$ $\delta u >> a$

→ 外场应该是时间和空间的缓变函数

* 外场变化的波长$\lambda >> a$

* 外场频率满足$h\omega << E_g$，禁止带间跃迁

上述条件仅针对外场，晶体的周期性势场已包含在能谱$E(k)$中

$$\vec{v}_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar}(\nabla_k E)_{k_0}$$ —— 布洛赫电子的群速度

→ 可证明，它是波矢为**k**，能量为**E(k)**的布洛赫电子的平均速度，与时间无关！

$$\vec{v}_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar}(\nabla_k E)_{k_0}$$ —— 与时间无关！

→电流与电子速度有关，如果电子平均速度与时间无关，则意味着电流永不衰减！

→无电阻机制！电导率无穷大！

→自由电子：电子-电子和电子-离子无相互作用。在外场下被无限加速，导致电流无限大

→晶体电子：电子速度是一个周期函数(有界)，电子不会被无限加速，其速度也不会衰减。晶体中电子和离子间有相互作用，并隐含在能带结构E(k)中。

粒子的速度 $\vec{v}_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar}(\nabla_k E)_{k_0}$

—— 一维紧束缚模型

$$v_k = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - 2J_1 \cos ka \qquad v_k = \frac{2J_1 a}{\hbar}\sin ka$$

$$\frac{dE}{dk} = 0 \qquad k = 0,\ \frac{\pi}{a} \qquad v_k = 0$$ —— 能带底和能带顶

$$\frac{d^2E}{dk^2} = 2J_1 a^2 \cos ka = 0 \qquad k = \frac{\pi}{2a} \qquad v_k = \frac{2J_1 a}{\hbar}$$

—— 速度最大

在一维紧束缚模型下

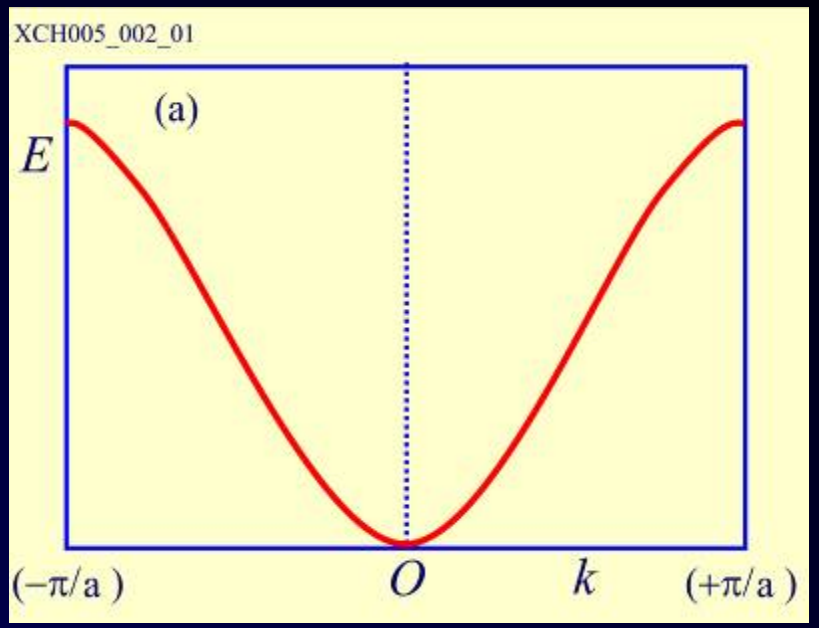
电子的速度 $v_k = \dfrac{2J_1 a}{\hbar}\sin ka$

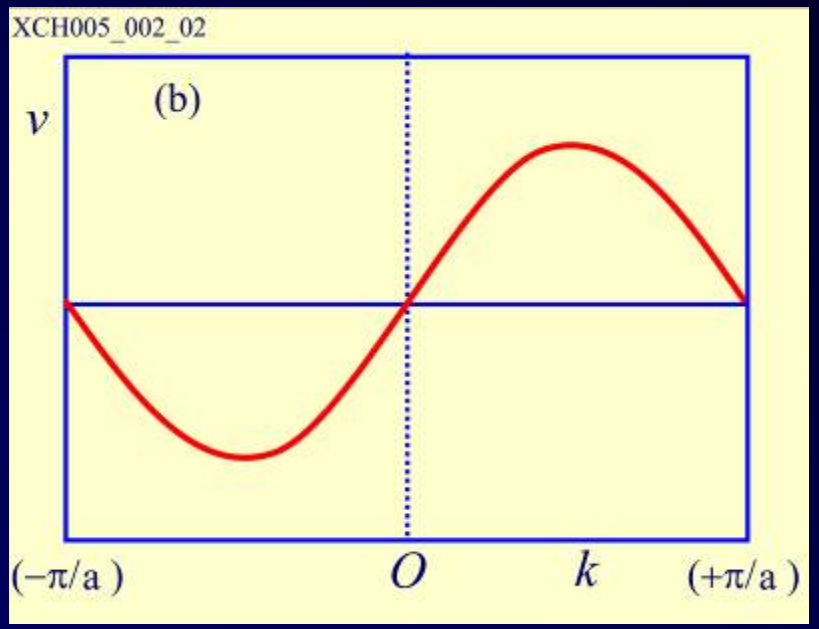
$$\frac{dE}{dk} = 0 \qquad k = 0,\ \frac{\pi}{a}$$

—— 速度为零

$$\frac{d^2E}{dk^2} = 0 \qquad k = \frac{\pi}{2a}$$

—— 速度最大





2. 在外力作用下状态的变化和准动量

外场力 $\vec{F}$ 对电子作功 $\vec{F}\cdot\vec{v}_k dt$

电子能量的增量 $dE = d\vec{k}\cdot\nabla_k E$ $\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E$

$$dE = d\vec{k}\cdot\hbar\vec{v}_k$$

根据功能原理 $\vec{F}\cdot\vec{v}_k dt = d\vec{k}\cdot\hbar\vec{v}_k = d(\hbar\vec{k})\cdot\vec{v}_k$

$$[\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} - \vec{F}]\cdot\vec{v}_k = 0$$

$\hbar\vec{k}$ 具有动量的性质

—— 晶体中电子的动量

$$[\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt}-\vec{F}]\cdot\vec{v}_k=0$$

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

晶体中电子的动量形式 $\hbar\vec{k}$

—— 布洛赫波不是动量的本征态，
$\hbar\vec{k}$ 不是动量算符的平均值

$\hbar\vec{k}$ 赝动量 —— 准动量

3. 加速度和有效质量

$$[\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt}-\vec{F}]\cdot\vec{v}_k=0$$

电子状态变化基本公式 $\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt}=\vec{F}$ $\frac{d(\hbar k_\alpha)}{dt}=F_\alpha$

电子的速度 $\vec{v}_k=\frac{1}{\hbar}\nabla_k E$

电子的速度分量 $v_\alpha=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha}$

电子的加速度分量 $\frac{dv_\alpha}{dt}=\frac{d}{dt}(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha})$

电子的加速度分量 $$\frac{dv_\alpha}{dt}=\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha}\right)$$

$$\frac{dv_\alpha}{dt}=\frac{1}{\hbar}\sum_\beta\frac{dk_\beta}{dt}\frac{\partial}{\partial k_\beta}\left(\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha}\right)$$

将 $\frac{d(\hbar k_\beta)}{dt}=F_\beta$ 代入

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

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

加速度分量的矩阵表示

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

电子的倒有效质量

与牛顿定律 $\frac{d\vec{v}}{dt}=\frac{1}{m}\vec{F}$ 比较

电子的倒有效质量 $$\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

k_x, k_y, k_z选在张量主轴方向上 $$\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

有效质量张量

$$\begin{pmatrix} m_x^* & 0 & 0 \\ 0 & m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & m_z^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar^2 / \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 / \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2 / \dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{m^*{}_x} & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{m^*{}_y} & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{m^*{}_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{cases} m_x^* \dot{v}_x = F_x \\ m_y^* \dot{v}_y = F_y \\ m_z^* \dot{v}_z = F_z \end{cases}$$

有效张量 m_x^*, m_y^*, m_z^* 是一个张量，一般不相等

$$\begin{cases} m_x^* \dot{v}_x = F_x \\ m_y^* \dot{v}_y = F_y \\ m_z^* \dot{v}_z = F_z \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} \dot{v}_x = F_x / m_x^* \\ \dot{v}_y = F_y / m_y^* \\ \dot{v}_z = F_z / m_z^* \end{cases}$$

—— 加速度和外力方向可以不同

—— 有效质量的特点

紧束缚近似下，简单立方格子s能带的有效质量

$$E^s(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

k_x, k_y, k_z在张量主轴方向上

可以验证

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \begin{cases} \neq 0, & \alpha = \beta \\ = 0, & \alpha \neq \beta \end{cases}$$

$$m_x^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_x a}$$

$$m_y^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_y a}$$

$$m_z^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_z a}$$

$$m_x^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_x a}$$

$$m_y^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_y a}$$ ——波矢的函数

$$m_z^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_z a}$$

能带底部 $\vec{k} = (0, 0, 0)$

$$m_x^* = m_y^* = m_z^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1}$$

$$\begin{pmatrix} m_x^* & 0 & 0 \\ 0 & m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & m_z^* \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

能带底部 $\vec{k}=(0,0,0)$ $$m^*=\frac{\hbar^2}{2a^2J_1}>0$$

能带顶部 $\vec{k}=(\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a})$

有效质量 $$m_x^*=m_y^*=m_z^*=-\frac{\hbar^2}{2a^2J_1}<0$$

布里渊区侧面中心的X点 $\vec{k}=(\frac{\pi}{a},0,0)$

有效质量 $$m_x^*=-\frac{\hbar^2}{2a^2J_1},\ m_y^*=m_z^*=\frac{\hbar^2}{2a^2J_1}$$

有效质量张量 $$\begin{pmatrix} m_x^* & 0 & 0 \\ 0 & m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & m_z^* \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2aJ_1}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

—— 晶体中的共有化电子的有效质量 m^* 一般是一个张量

—— 波矢的函数 → 随电子状态的变化而变化

—— 一个能带底部附近，电子的有效质量总是正的，能带顶部附近，有效质量总是负的

—— 一个能带的顶部有一个质量为负的电子

—— 宽能带：能量随k变化剧烈，有效质量小
窄能带：有效质量大

—— 有效质量为什么为负

晶体中电子运动同时受外力和晶体周期性势场力的作用

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 J_1} \quad J_1 = -\int \varphi_i^*(\vec{\xi} - \vec{R}_s)[U(\vec{\xi}) - V(\vec{\xi})]\varphi_i(\vec{\xi})\}d\vec{\xi} > 0$$

将周期性势场力的作用归并到晶体中电子的质量中 $m^* \neq m$

—— 电子通过与原子散射而交换动量

—— 电子从晶格获得的动量大于付出给晶格的动量 $m^* > 0$

—— 电子从晶格获得的动量小于付出给晶格的动量 $m^* < 0$

—— 在处理晶体中电子的输运问题，引入电子的有效质量和赝动量对于处理问题会带来很大方便

§ 5.2 恒定电场作用下电子的运动

—— 一维紧束缚近似下，电子在恒定电场作用下的运动规律

电子的能量 $E^i(k) = \varepsilon_i - J_0 - 2J_1 \cos ka$

电子的速度 $v(k) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE(k)}{dk}$ $v(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar}\sin ka$

有效质量 $m^*(k) = \hbar^2 / \frac{d^2E}{dk^2}$

$$m^*(k) = \hbar^2 / 2J_1 a^2 \cos ka$$

简约布里渊区能带、电子的速度和有效质量

$$v_r(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar}\sin ka$$

$$m^*(k) = \hbar^2 / 2J_1 a^2 \cos ka$$

能带底部 $k = 0$

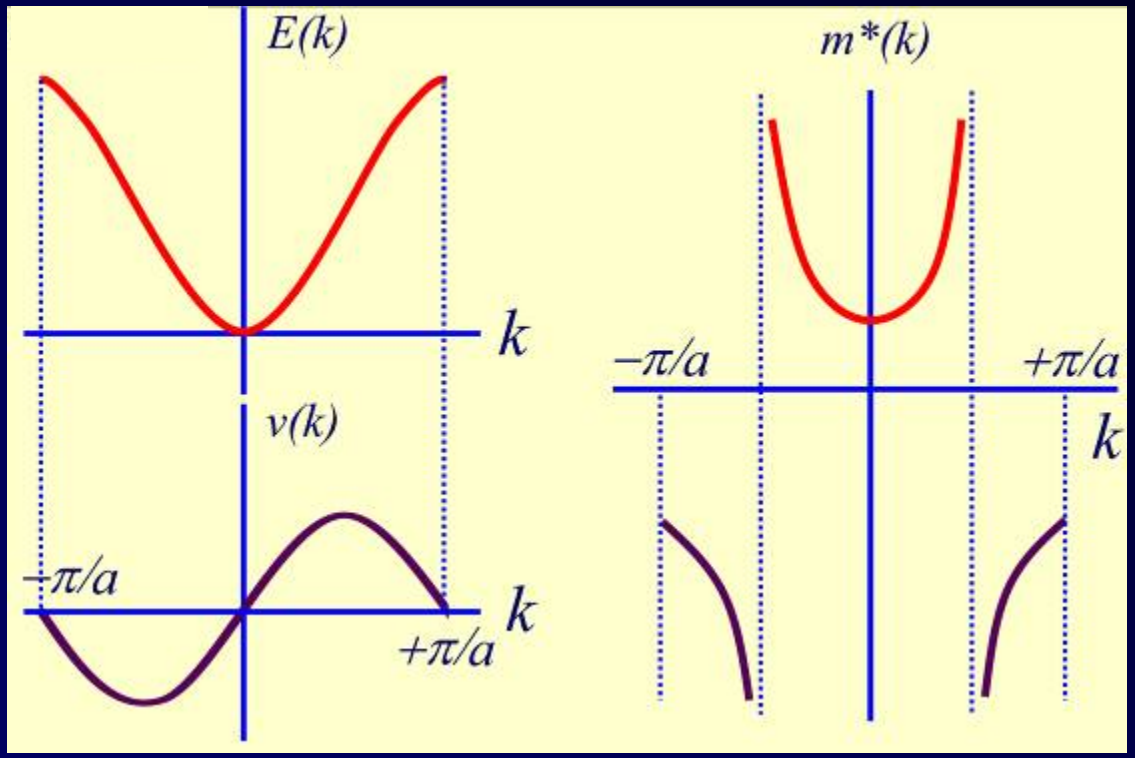
$$v_r(k) = 0$$

$$m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2J_1 a^2}$$

能带顶部 $k = \pm\pi / a$

$$v_r(k) = 0$$

$$m^*(k) = -\frac{\hbar^2}{2J_1 a^2}$$



—— 在外加电场作用下电子的运动

电场力 $\bar{F} = -q\bar{E}$ —— 沿**k**轴的正方向（***E***沿**k**的负方向）

$$\frac{\hbar dk}{dt} = F$$ —— 电子在**k**空间做匀速运动

$$k = \frac{1}{\hbar} Ft + C$$

$$E^i(k) = \varepsilon_i - J_0 - 2J_1 \cos ka$$

$$v_r(k) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin ka \qquad v_r(t) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin(a \frac{1}{\hbar} Ft)$$

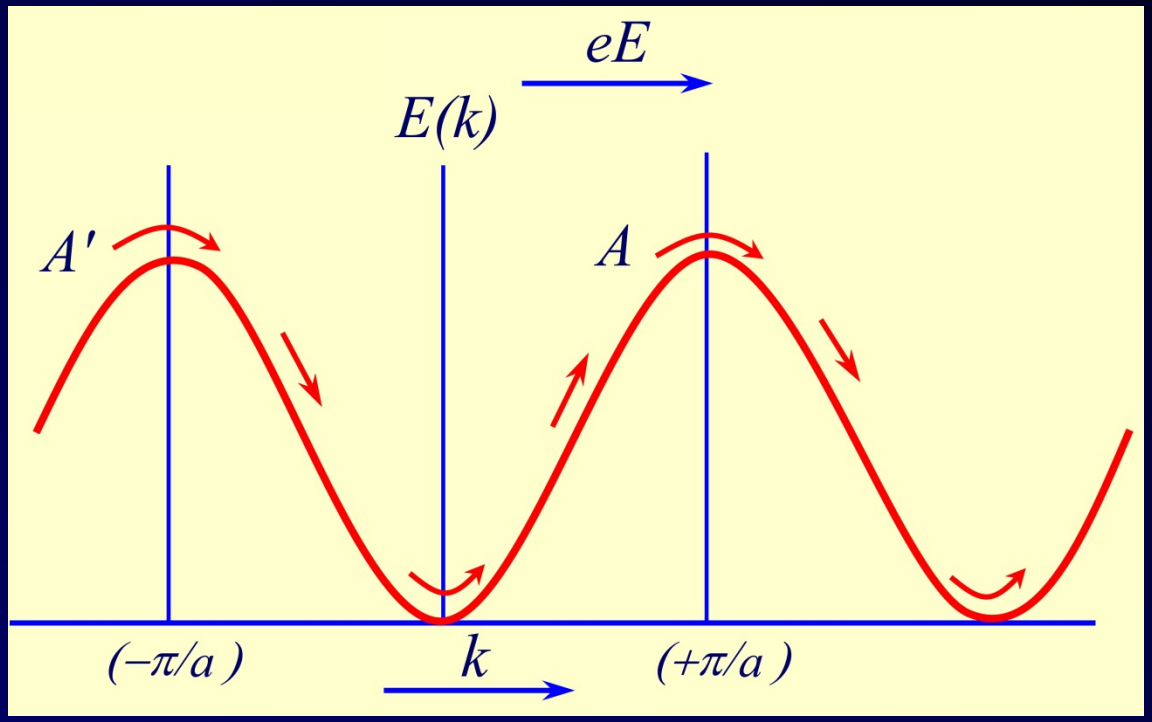
电子在k空间做匀速运动 $$k=\frac{1}{\hbar}Ft+C$$

—— 电子的运动保持在同一个能带内，能量周期性变化

k空间简约布里渊区

—— 电子从 $k=\pi/a$ 移动出去

—— 同时从 $k=-\pi/a$ 移动进来



实空间中电子速度振荡 $v(t)=\frac{2J_1a}{\hbar}\sin a\frac{1}{\hbar}Ft$ $m^*(k)=\frac{\hbar^2}{2J_1a^2\cos ka}$

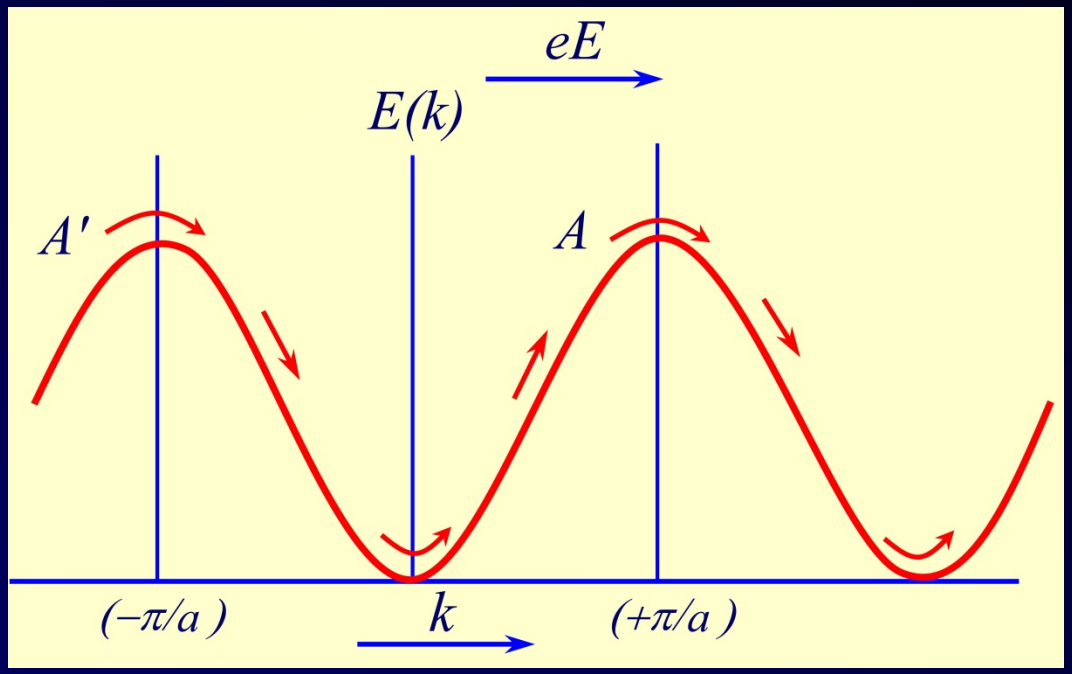
t=0: *k* = 0，*m > 0** —— 外力作用使电子加速，**v(*k*)** 增大

k* = *π*/2*a $v_r(k)=2J_1a/\hbar$

$m^*(k)\Rightarrow\infty$

***k* > π/2*a*，** ***m** < 0**

—— 电子做减速运动



k* = *π*/*a $v_r(k)=0$

$m^*(k)=-\hbar^2/2J_1a^2$ —— 电子到达能带顶部

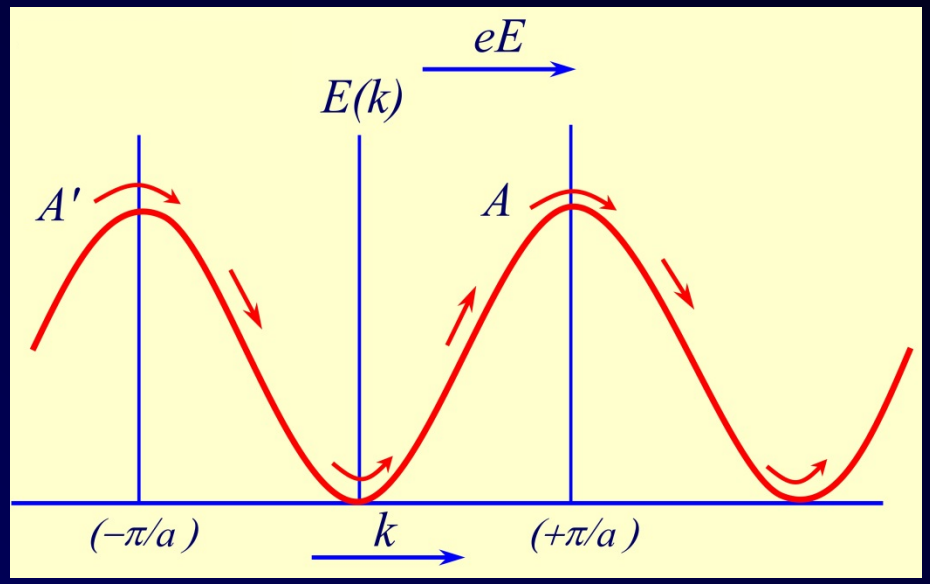
实空间中电子速度振荡 $v_r(t)=\frac{2J_1a}{\hbar}\sin a\frac{1}{\hbar}Ft$ $m^*(k)=\frac{\hbar^2}{2J_1a^2\cos ka}$

k = -π/a ~ -π/2a 范围内，$|v(k)|$不断增大

k = -π/2a $v_r(k)=-\frac{2J_1a}{\hbar}$

$$m^*(k)\Rightarrow\infty$$

k = -π/2a ~ 0



—— **$m^*(k)>0$，$|v(k)|$不断减小**

$k=0$ $v_r(k)=0$ $m^*(k)=\frac{\hbar^2}{2J_1a^2}$ —— 电子到达能带底部

电子运动在实空间中的描述

$$v_r(t) = \frac{2J_1 a}{\hbar} \sin a \frac{1}{\hbar} Ft$$ → 电子在实空间中运动的振荡

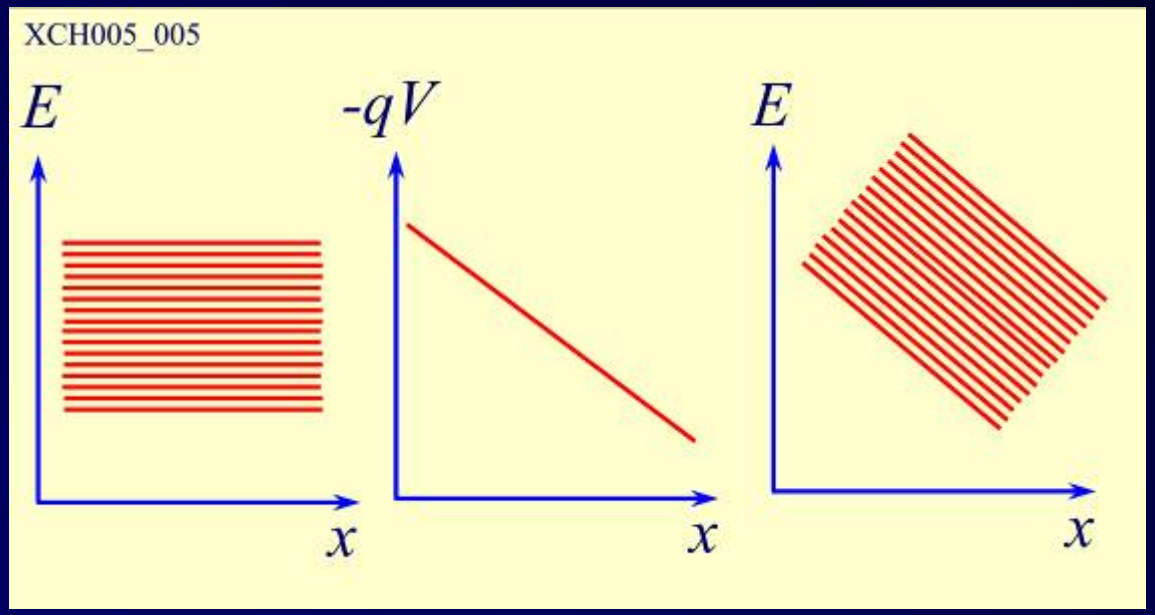
能带的倾斜

外电场对电子能量本征值附加的能量 —— E沿 $-x$ 方向

$$\Delta E = -qV$$

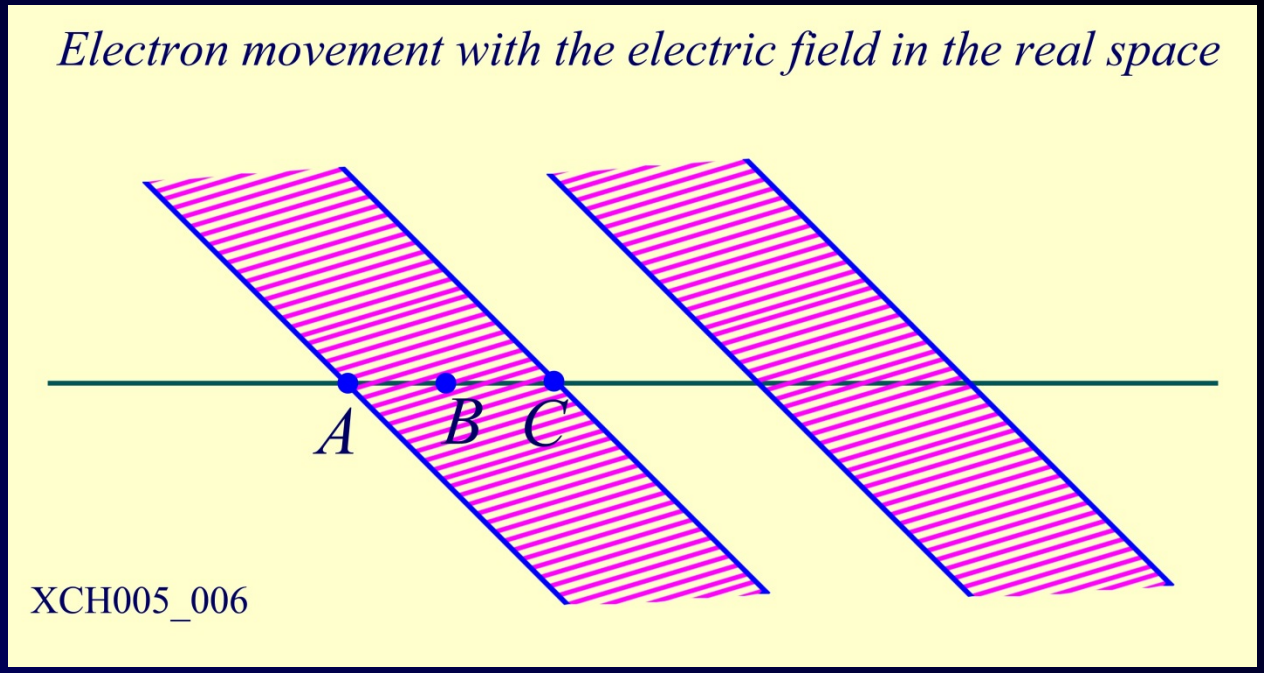
$$V = Ex$$

$$\Delta E = -qEx$$



电子运动的振荡
(Bloch振荡)

—— 两个能带的情形中，电子在实空间的运动振荡



t=0电子由带底A点经过B点到达C点

—— k=0 到 $k=\pi/a$ 的运动

—— 在C点电子遇到带隙，相对于存在一个位垒，电子将被全部反射回来，电子由C点经过B点回到A点

—— $k=-\pi/a$ 到 k=0 的运动

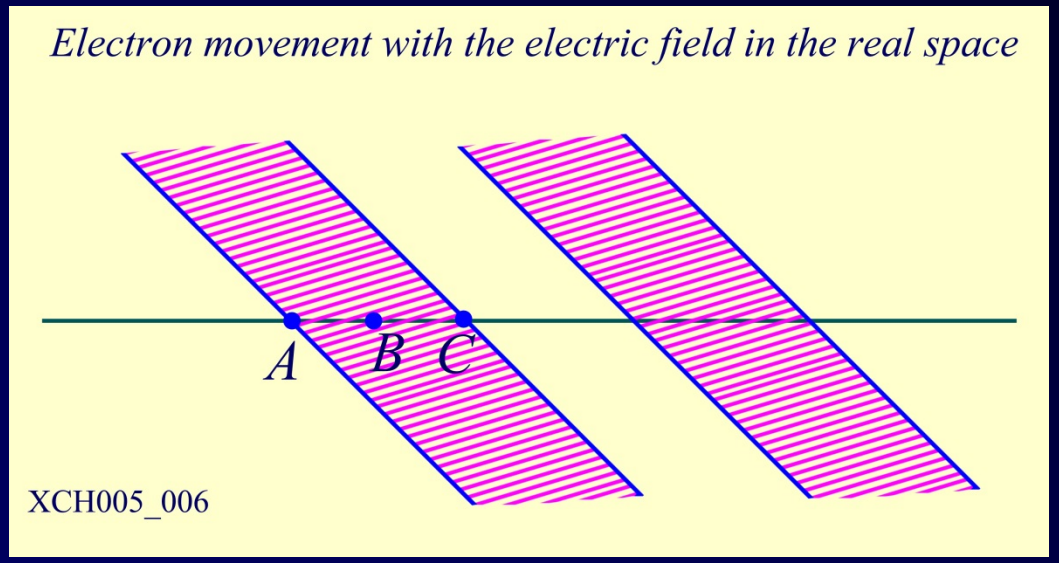
—— 电子在运动的过程中，由于受到声子、杂质和缺陷的散射（碰撞），相邻两次散射之间的平均时间间隔为电子的平均自由运动时间：τ

—— 如果τ很小，电子来不及完成振荡运动就被散射破坏了

观察电子运动振荡的条件

—— $\omega\tau >> 1$

—— ω 振荡圆频率



振荡圆频率 $\omega = \dfrac{2\pi}{T}$ $\qquad T = \dfrac{2\pi / a}{v_k(t)}$

$$\frac{\hbar dk}{dt} = F \qquad v_k(t) = \frac{dk}{dt} = \frac{qE}{\hbar}$$

$$\omega = 2\pi\left(\frac{2\pi / a}{qE / \hbar}\right)^{-1} \qquad \omega\tau >> 1$$

如果 $a \approx 0.3\ nm$, $\tau \approx 10^{-13}\ s$，则 $E > 2\times10^{7}\ V/m$

—— 在金属中无法实现，对于绝缘体早已被击穿

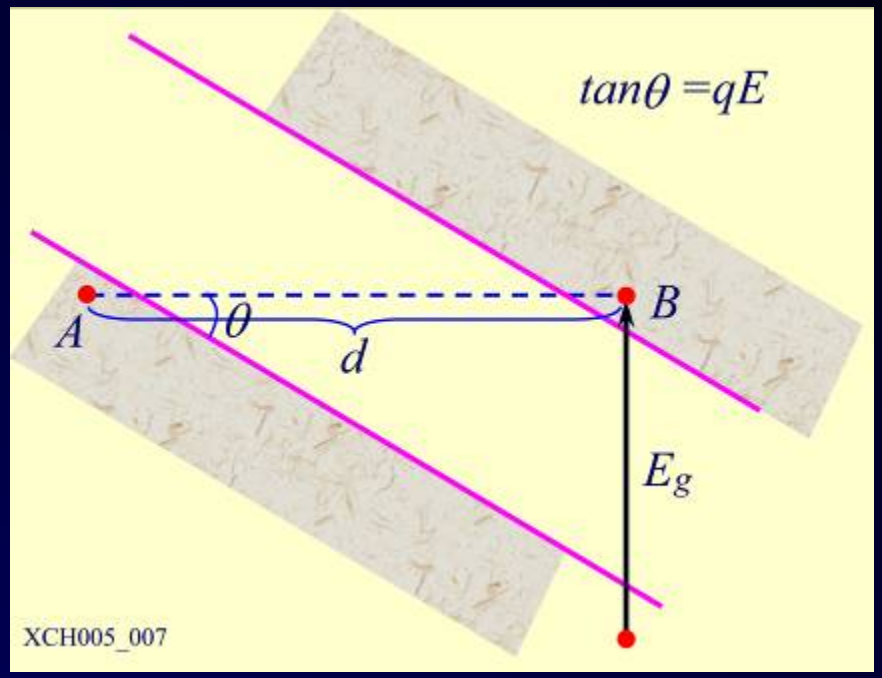
—— 很难观察到电子的振荡，在一般电场下，在k空间电子只是发生了一个小位移，无法实现振荡

—— 根据量子理论，电子可以发生势垒贯穿效应

穿透位垒的几率

$$\propto E\exp[-\frac{\pi^2\sqrt{2mE_g}}{\hbar}(\frac{E_g}{qE})]$$

$$d=\frac{E_g}{qE}$$ —— 位垒长度



—— 当电场足够强时，若下面的能带被电子填充满，或者接近填充满，上面能带是空带可以接纳电子，此时电子有一定的几率从价带穿透带隙进入导带

—— 隧道效应