第四课：半导体中的电子状态

Wednesday, September 4, 2019 5:35 AM

1. 薛定谔方程的近似解：
   a. 玻恩-奥本海默近似(绝热近似)：假定原子核静止不动，只分析电子的状态；
   b. 单电子近似：假定在凝聚态物质中电子是全同的，只分析单个电子的状态；
2. 每一个布里渊区中有N(原胞数)个k状态。与每一个k值对应有一个能量状态(能级)，由于k值是分立的，所以布里渊区中的能级是准连续的，每一个能带中有N个能级。N为晶体的固体物理学原胞数；
3. 证明：每一个布里渊区中有N(原胞数)个k状态。
   a. 在一维上有一个晶体长$L_x = N \cdot a$；
   b. 由周期性边界条件($x = 0$到$x = L_x$)；
   c. $\Rightarrow \psi(x) = \psi(x + L_x) = e^{ik(x+L_x)} \cdot \mu_k(x + L_x) = e^{ik_x} \cdot \mu_k(x)$；
   d. $\Rightarrow e^{ik_x \cdot L_x} = 1, k_x \cdot L_x = 2\pi m (m \in Z), k_x = \frac{2\pi m}{L_x} = \frac{2\pi m}{N \cdot a}$；
   e. $\Rightarrow -\frac{\pi}{a} \le k_x \le \frac{\pi}{a} \Rightarrow -\frac{N}{2} \le m \le \frac{N}{2} (m \in Z)$；
4. 原子势场：$\mu \propto -\frac{e}{r}$；
5. 晶体中电子的能量谱值：若得知晶体中势函数V(x)的具体表达式，就可求解薛定谔方程，得出电子的能量谱值。可以采用Kronig-Penney势场模型；
6. 推导：Kronig-Penney势场模型。
   a. $-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$;
   b. $\Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V) \cdot \psi(x) = 0$;
   c. $\because \psi(x) = e^{ik \cdot x} \cdot \mu(x)$;
   d. $\Rightarrow \mu_k''(x) + 2ik \cdot \mu_k'(x) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) - k^2\right] \cdot \mu_k(x) = 0$;
   e. $\because \mu(x) = A \cdot e^{r_i x} + B \cdot e^{r_i x}$;
   f. $1'.$势阱区$0 \le x \le a, V(x) = 0 \Rightarrow \mu_1(x) = A \cdot e^{i(\alpha - k)x} + B \cdot e^{-i(\alpha + k)x}$
   g. $2'.$势垒区$-b \le x \le 0, V(x) = V_0$，令$\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) = \beta^2 \Rightarrow \mu_2(x) = C \cdot e^{(\beta - ik)x} + D \cdot e^{(-\beta - ib)x}$
   h. 边界条件(A,B,C,D)->四个方程；
      i. $\mu_1(0) = \mu_2(0)$;
      ii. $\left.\frac{d\mu_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\mu_2}{dx}\right|_{x=0}$;
      iii. $\mu_1(a) = \mu_2(-b)$;
      iv. $\left.\frac{d\mu_1}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\mu_2}{dx}\right|_{x=-b}$;
   i. $f_1(A, B, C, D) = 0$
      $f_2(A, B, C, D) = 0$
      $f_3(A, B, C, D) = 0$
      $f_4(A, B, C, D) = 0$
   j. $\because (L) \cdot (A\ B\ C\ D)^T = 0$
   k. $|L| \Rightarrow f'(\alpha, \beta, k, a, b) = 0$;
   l. $\because E \sim k$
   m. $\Rightarrow f(k, v_0, E, a, b) = 0$;
   n. $\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\quad} \cdot sh(b \cdot \beta) \cdot \sin(2a) + ch(b \cdot \beta) \cdot \cos(2a) = \cos[k(a + b)]$;