

5.5 克勒尼希-彭尼（Kronig-Penny）模型：

我们从近自由电子近似（NFE）和紧束缚近似（TB）两种极端情形下的讨论中得出了共同的结论，即：晶体中电子的能级形成允带和禁带，但为了能和实际晶体的实验结果相比较，**使用尽可能符合晶体实际情况的周期势,求解具体 Schrodinger 方程的尝试从没有停止过**，最早的一个模型是 1931年 Kronig-Penney 一维方形势场模型，**它可以用简单的解析函数严格求解**，也得出了周期场中运动的粒子允许能级形成能带，能带之间是禁带的结论，但这是一**维周期势场**，还不能算是真正的尝试。不过近来却常使用 Kronig-Penney 势讨论超晶格的能带。

见： Kittel 8版 7.3节 p119； 7.4.4节p124

方俊鑫 书5.6节 p204;

冯端《凝聚态物理学》 5.2.4节p150

在两种近似之间的区域的真实情况如何？是我们关心的。金属中的价电子既不像自由电子那样自由，也不像孤立原子中的电子。

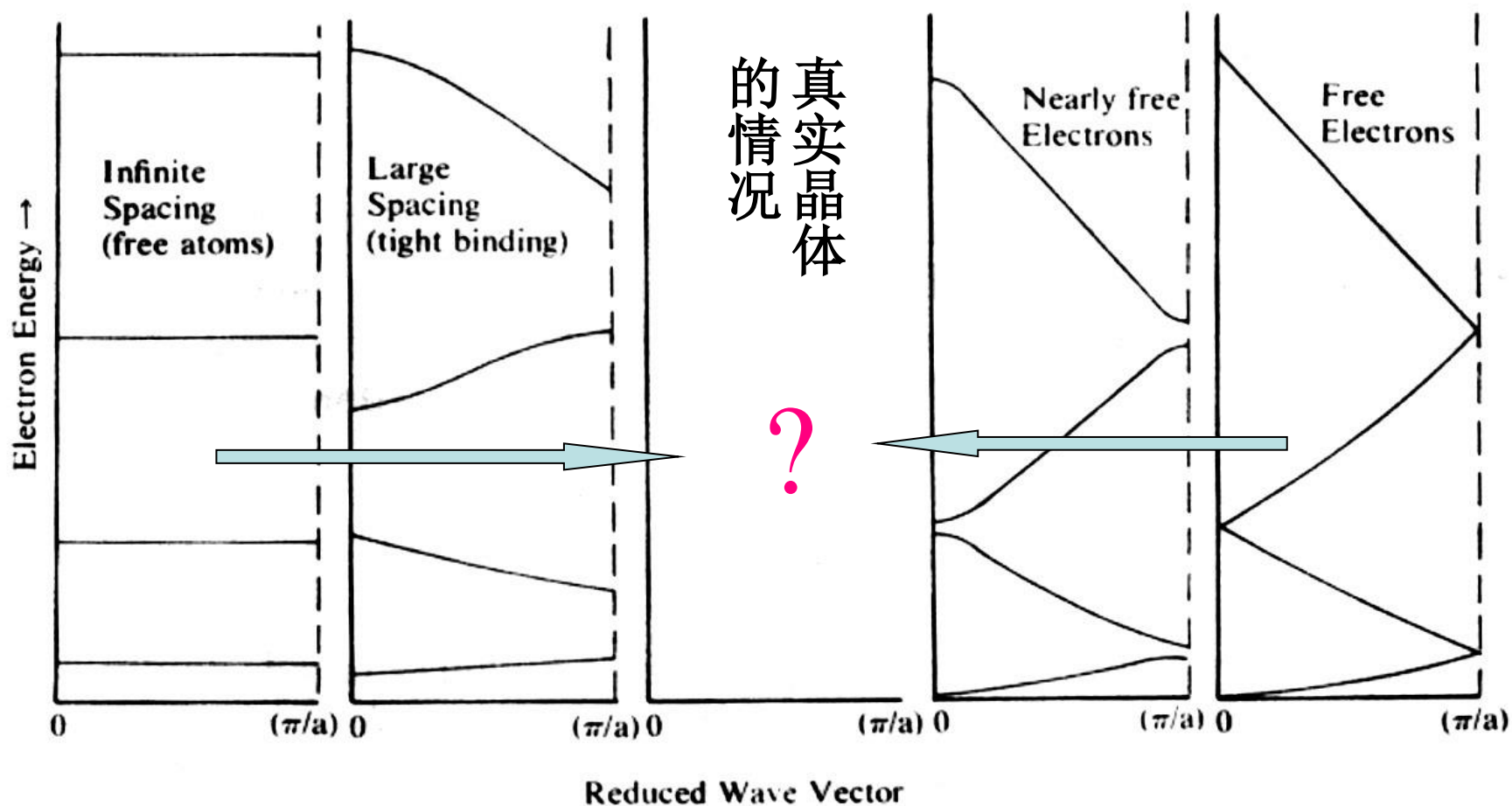
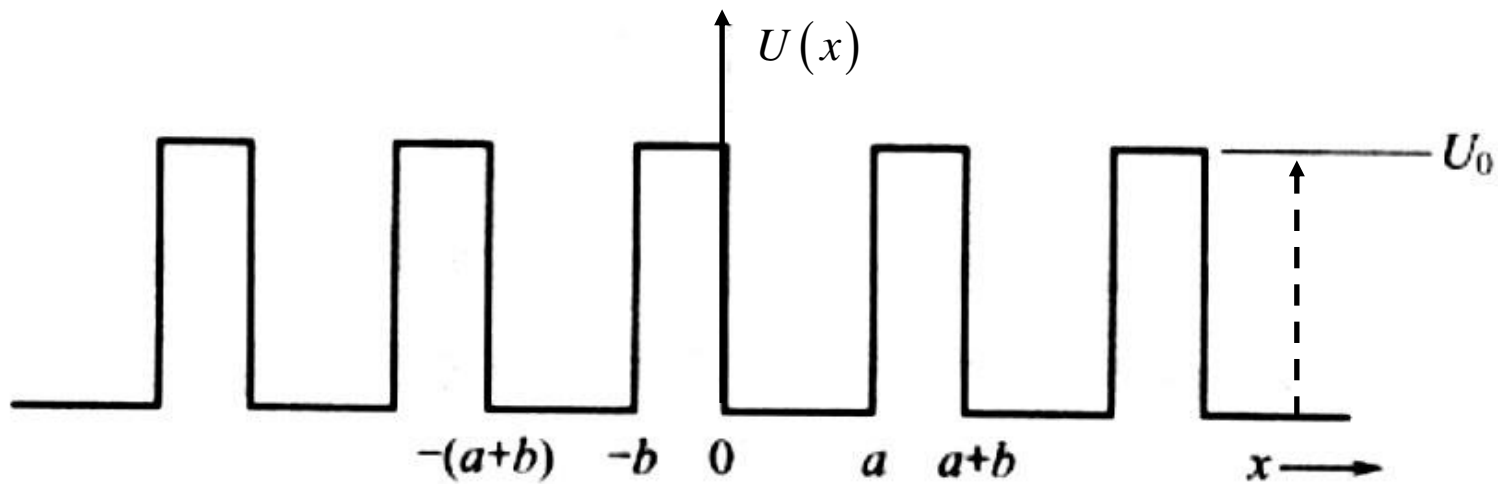


Figure 3-28 A one-dimensional visualization of the dependence of energy on wave-vector for electron states as the coupling between adjacent atoms varies from zero (atoms infinitely separated) to the total abolition of interatomic barriers.

见Blakemore:Solid State Physics P214,该书也有关于Kronig-Penney模型的叙述。



1931年 Kronig-Penney 一维方形势场是最早提出的周期势场模型，它由方型势阱势垒周期排列而成。势阱宽 a ，势垒宽 b ，因此晶体势的周期是： $a + b = c$ ，势垒的高度是： U_0

其解应具有 Bloch 函数形式：

$$\psi(x) = e^{ik \cdot x} u(x)$$

代入一维 Schrödinger 方程：

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi &= E\psi & \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi &= 0 & -b < x < 0 \\
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi & \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi &= 0 & 0 < x < a
 \end{aligned}$$

1. 在区域 $0 < x < a$: $U_0 = 0$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + 2ik \frac{du(x)}{dx} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} E - k^2 \right] u(x) = 0$$

$$\text{令: } \frac{2mE}{\hbar^2} = \alpha^2$$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + 2ik \frac{du(x)}{dx} + [\alpha^2 - k^2] u(x) = 0$$

这是一个二阶常系数微分方程，它的解为：

$$u(x) = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x}$$

$$\psi(x) = Ae^{i\alpha \cdot x} + Be^{-i\alpha \cdot x}$$

其中A,B都是任意常数。这个区域内的本征函数是向右和向左行进的平面波的线性组合。而能量：

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$$

2. 在区域: $-b < x < 0$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + 2ik \frac{du(x)}{dx} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) - k^2 \right] u(x) = 0$$

$$E < U_0 \quad \text{令: } \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) = \frac{2mU_0}{\hbar^2} - \alpha^2$$

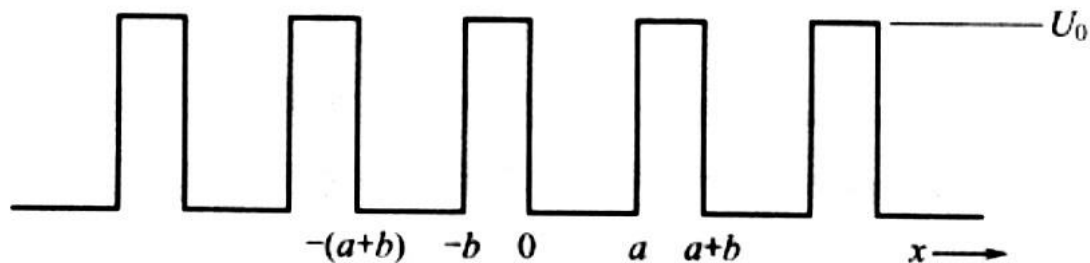
$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + 2ik \frac{du(x)}{dx} - [\beta^2 + k^2] u(x) = 0$$

其解: $u(x) = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x}$

所以有: $\psi(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}$

同样C,D都是任意常数。

$$U_0 - E = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$$



我们希望得到具有 $\psi(x) = e^{ik \cdot x} u(x)$ Bloch形式的完全解。如此一来，在区间 $a < x < a+b$ 内的解应当通过Bloch定理与区间 $-b < x < 0$ 内的解联系起来：

$$\psi(x + a + b) = e^{ik \cdot (a+b)} \psi(x)$$

它可以用来确定作为指标标识这个解的波矢 k 。

所以在区间 $a < x < a+b$ 内

$$\psi(x) = (C e^{\beta(x-a-b)} + D e^{-\beta(x-a-b)}) e^{ik(a+b)}$$

对整个系统而言，两个区域的波函数 $\psi, \frac{d\psi}{dx}$

在 $x = 0, x = a$ 处应是连续的，这就需要对 A, B, C, D 四个系数做选择。

在 $x = 0$ 处有： $A + B = C + D$

$$i\alpha(A - B) = \beta(C - D)$$

在 $x = a$ 处有： $Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a} = (Ce^{-\beta b} + De^{\beta b})e^{ik(a+b)}$

$$i\alpha(Ae^{i\alpha a} - Be^{-i\alpha a}) = \beta(Ce^{-\beta b} - De^{\beta b})e^{ik(a+b)}$$

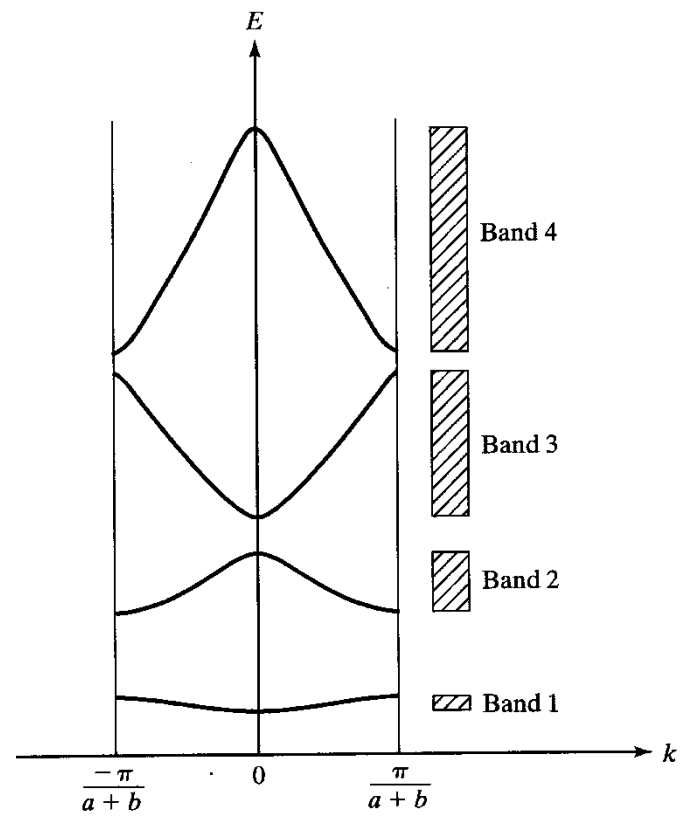
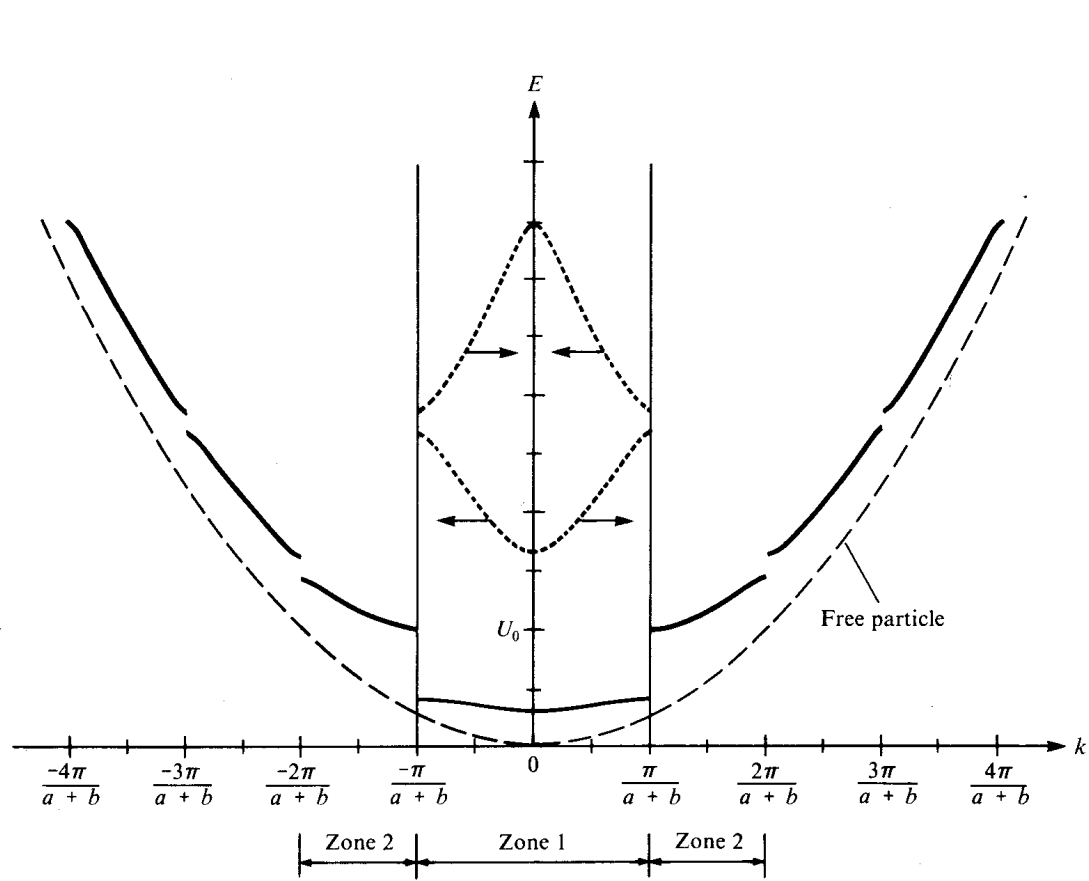
只有当A,B,C,D的系数行列式为零时，四个方程才有解：
求解从略。

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos(ka + kb)$$

其中， $\cosh(x) = (e^x + e^{-x})/2$, $\sinh(x) = (e^x - e^{-x})/2$

由此式可以计算出能量E对波矢k的色散关系

cos(ka+kb)取值只能在-1和+1之间，因此上式左边将对能量取值有所限制，一些能量取值将被禁止，从而形成能带



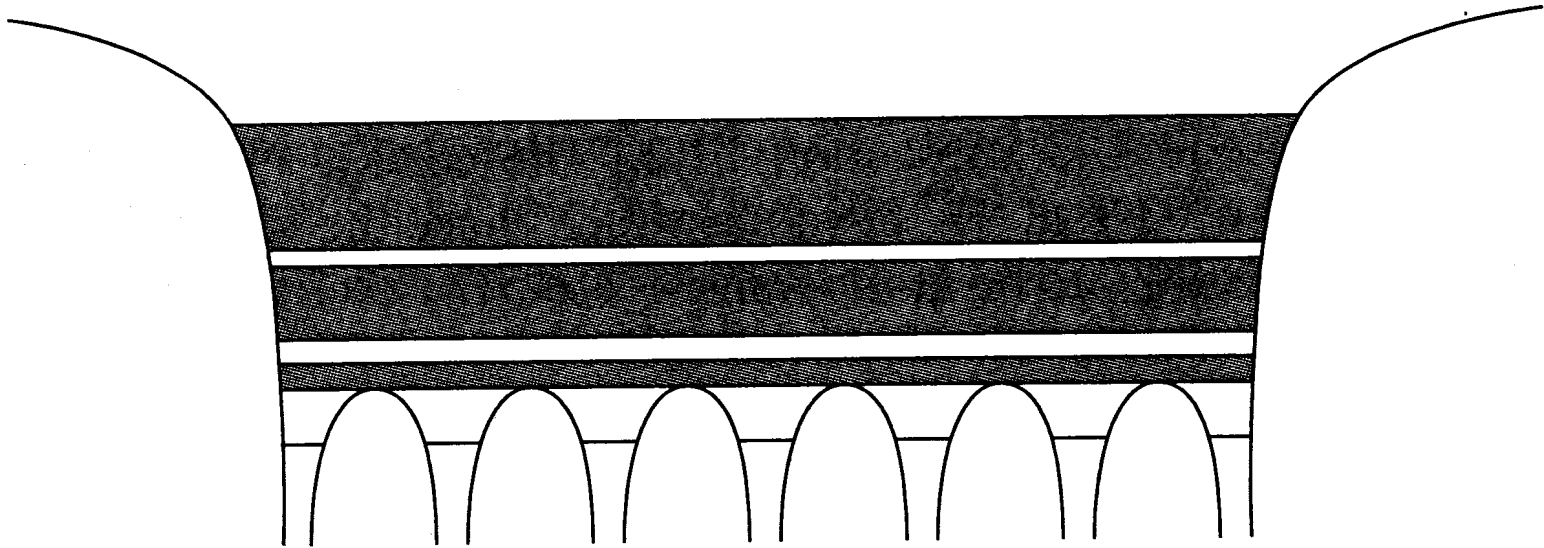


Figure 3.4 Visualization of the energy bands in a crystal.

Blakemore 书也介绍了这个模型，p213 给出了 $p=2$ 的结果。

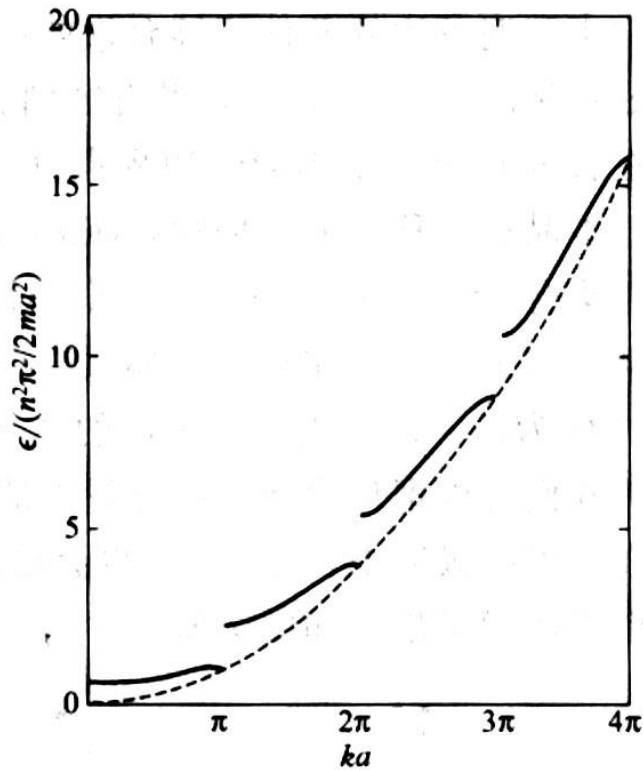


图 6 在克勒尼希—彭尼势场中的能量关于波数的关系曲线，其中 $P = 3\pi/2$ 。请注意在 $ka = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$ 处出现的能隙。

极限情形 ($b=0, U_0=\infty$)

见 Kittel 8版 p121

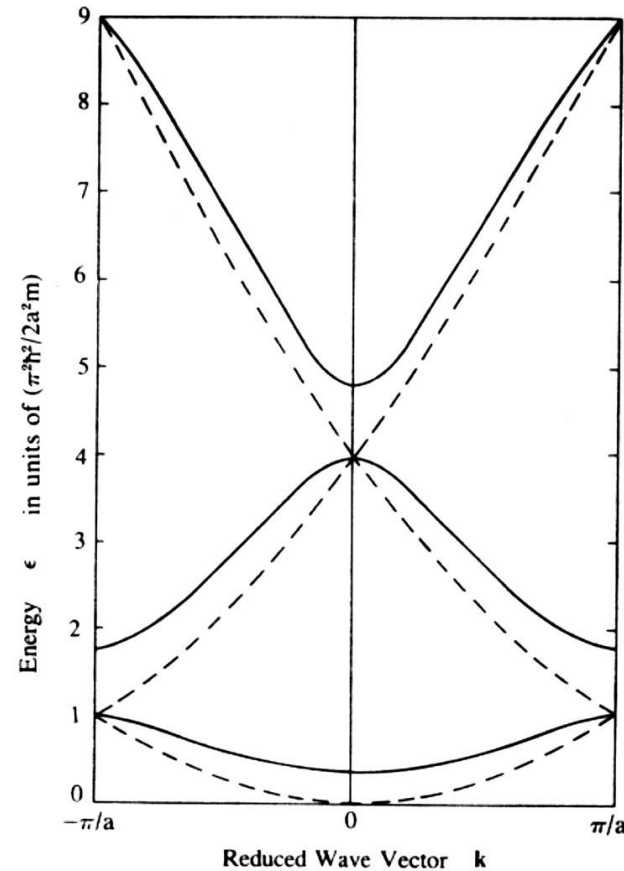


Figure 3-27 A reduced-zone representation of energy versus wave-vector for the Kronig-Penney model when $P = 2$ (as was chosen in Figure 3-26). The corresponding curves for $P = 0$ (free electrons) are shown as dashed curves.

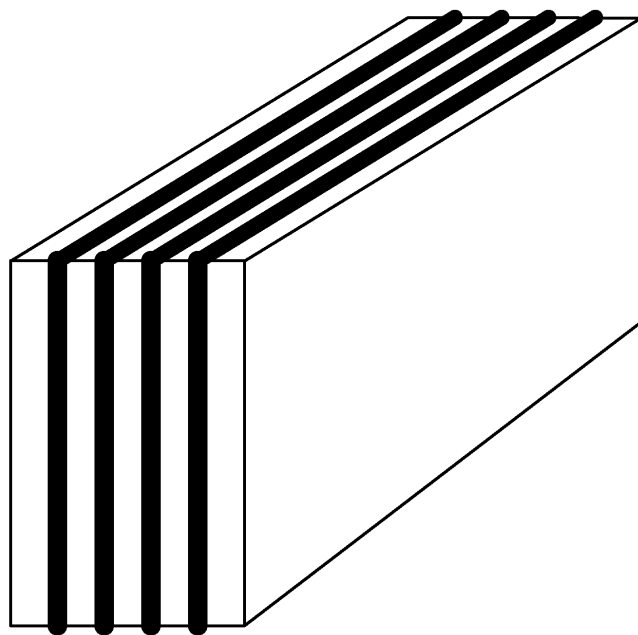
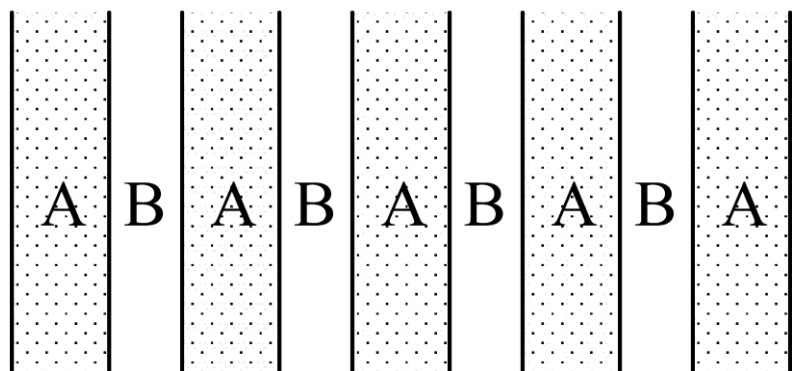
Kronig-Penney 一维方形势场模型有着重要意义，首先它是第一个可以严格求解的模型，证实了周期场中的电子可以占据的能级形成能带，能带之间存在禁带。其次，这个模型有多方面的适应性，经过适当修正可以用来讨论表面态，合金能带以及超晶格的能带问题。

冯端等《凝聚态物理学》就利用Kronig-Penney 模型讨论了超晶格问题。 见冯端等《凝聚态物理学》5.2.4节p150

$$U(\xi) - V(\xi)$$

超晶格材料是一种人工生长的周期性材料，即在原来自然晶体晶格的周期结构上叠加一个人工周期。超晶格材料可分为组分超晶格和掺杂超晶格两类，研究比较多的是组分超晶格。组分超晶格是由不同的半导体薄膜材料形成的周期性结构，可以用...**ABAB**...来表示，其中**A**代表一种半导体，如**GaAs**，**B**代表另一种半导体，如**Al_xGa_{1-x}As**。

一维超晶格—量子阱超晶格



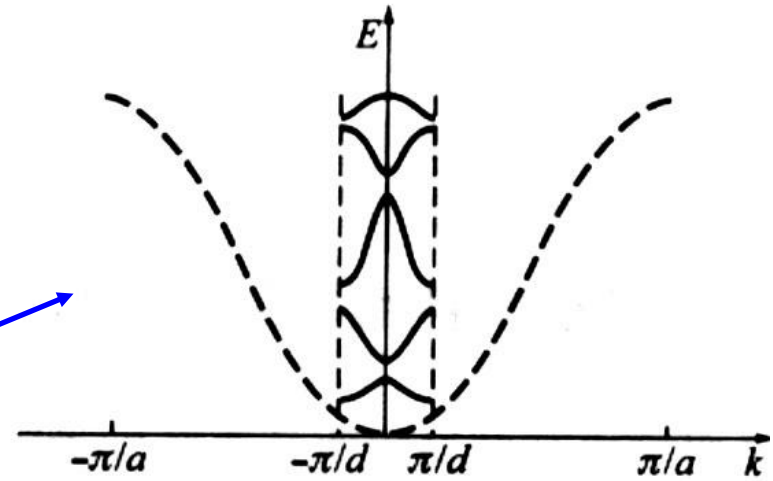
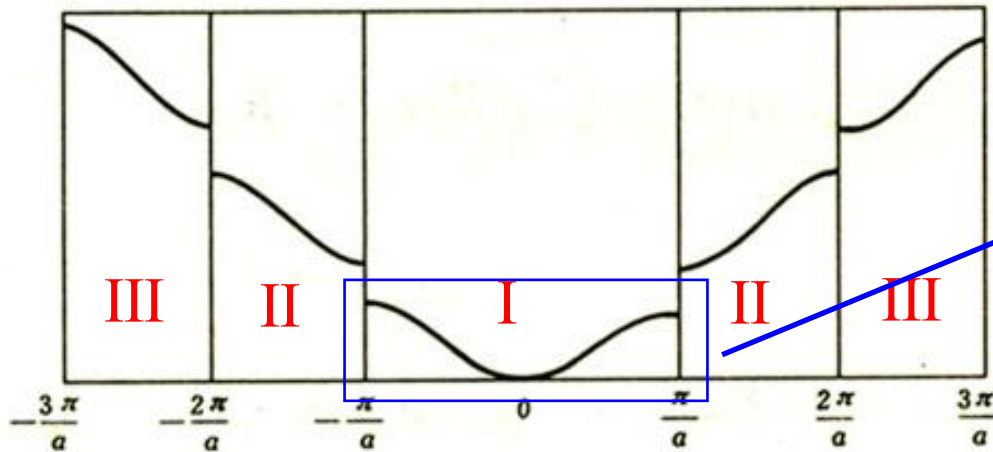


图 5.2.7 超晶格的 Brillouin 区折叠

超晶格形成的能带结构中，每一个子能带都有更精细的迷你子能带（minibands）结构，迷你子能带之间有迷你能隙（minigaps）。我们也可以认为超晶格的周期性导致了一套新的布里渊区边界以及相应的能隙。

习题

5.6 阎书3.3: 对于单价原子构成的三维简单立方单原子晶格, (1)在空晶格近似下, 用简约布里渊区图式, 画出沿 $[100]$ 方向的前4个能带, 并标出每个能带的简并度。(2)如果晶体受到均匀的流体静压强, 情况如何?(3)如仅在 $[100]$ 方向受到单轴应力, 情况又如何?

5.7 阎书3.4: 考虑晶格常数为 a 和 c 的三维简单六角晶体的第一布里渊区, 令 G_c 为平行于晶格 c 轴的最短倒格矢。(1)证明对于六角密堆积结构, 晶体势场 $V(\mathbf{r})$ 的傅里叶分量 $V(G_c)$ 为零。(2) $V(2G_c)$ 是否也为零?(3)为什么二价原子构成的简单六角晶格在原则上有可能是绝缘体?(4)为什么不可能得到由单价六角密堆积形成的绝缘体?

5.8 黄书4.6