

第六章 Bloch 电子的半经典描述

- 6.1 Bloch 电子的准经典描述
- 6.2 导体、绝缘体和半导体的能带解释
- 6.3 恒定磁场中 Bloch 电子的运动
- 6.4 能带结构以及 Fermi 面的实验研究

6.1 Bloch 电子的准经典描述

6.1 Bloch 电子的准经典描述

晶体里的 Bloch 电子波包

Bloch 电子的群速度

有效质量

恒定电场下 Bloch 振荡

包络波函数和有效质量近似

经典粒子同时具有确定的位置和动量，但是由于测不准原理，服从量子力学运动规律的粒子这两个量不可能同时确定。在自由空间里，我们一般用“波包”来代表一个经典粒子态：用具有不同动量的平面波组合，使得粒子的空间分布在 \mathbf{r}_c 附近 $\Delta\mathbf{r}$ ，动量分布在 $\hbar\mathbf{k}_c$ 附近 $\hbar\Delta\mathbf{k}$ 范围内。 $\Delta\mathbf{r}\Delta\mathbf{k} \geq 1/2$ 满足测不准原理。波包的中心位置 \mathbf{r}_c 为粒子的位置，中心动量 $\hbar\mathbf{k}_c$ 为粒子动量。

在晶体中，我们可以类似地用本征的 Bloch 波函数来组合出波包，把它当作准经典粒子来处理。

一、晶体里的 Bloch 电子波包

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \mathcal{H}_0\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) & \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \\ &= \varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) & \omega_n(\mathbf{k}) &= \varepsilon_n(\mathbf{k})/\hbar \end{aligned}$$

只允许电子处于在第 n 个能带

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_n(\mathbf{k})t} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_n(\mathbf{k})t]} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

选取适当的 $C_{\mathbf{k}}$, 可以构造出中心在 $\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c$ 的波包。常用的有 Gauss 型, 或者方形。

$$C_{\mathbf{k}} = \frac{1}{C} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_c - \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_c)^2}{2\Delta^2}} \quad \text{Gaussian}$$

$$C_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \frac{1}{C} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_c} & |\mathbf{k} - \mathbf{k}_c| < \Delta/2 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad \text{方形}$$

晶体里的波包

假设 $\Delta \mathbf{k}$ 很小, $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 可以用 \mathbf{k}_c 点的 $u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r})$ 近似。对于方形的 $C_{\mathbf{k}}$,

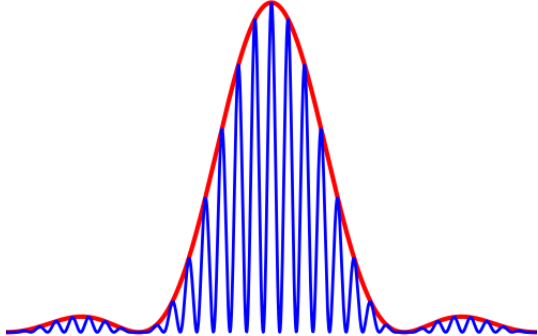
$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_n(\mathbf{k})t]} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) & \mathbf{k} &= \mathbf{k}_c + \boldsymbol{\xi} \\ &\simeq \frac{1}{C} u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r}) \int_{\mathbf{k}_c - \Delta \mathbf{k}/2}^{\mathbf{k}_c + \Delta \mathbf{k}/2} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - i\omega_n(\mathbf{k})t} d\mathbf{k} & \omega_n(\mathbf{k}) &\simeq \omega_n(\mathbf{k}_c) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c) \boldsymbol{\xi} \\ &\simeq \frac{1}{C} u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_c \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - i\omega_n(\mathbf{k}_c)t} \int_{-\Delta \mathbf{k}/2}^{\Delta \mathbf{k}/2} e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - i\mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c) \cdot \boldsymbol{\xi} t} d\boldsymbol{\xi} \\ &= \frac{1}{C} u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_c \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - i\omega_n(\mathbf{k}_c)t} \frac{2 \sin\{\Delta \mathbf{k} [\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t]/2\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t|} \\ &= \psi_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r}) \boxed{\mathbf{k}_c \text{ 处的 Bloch 波函数}} \times \Psi_n(\mathbf{r}, t) \boxed{\text{包络波函数}}\end{aligned}$$

- ☞ 波函数可以分成两部分的乘积, 一部分是波包中心 \mathbf{k}_c 处的 Bloch 波函数, 一部分是包络波函数。
- ☞ 取不同 $C_{\mathbf{k}}$, 包络波函数不同。

晶体里的波包

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \propto |u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r})|^2 \times$$

$$\left\{ \frac{\sin \Delta k [\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t]/2}{\Delta k [\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t]/2} \right\}^2$$

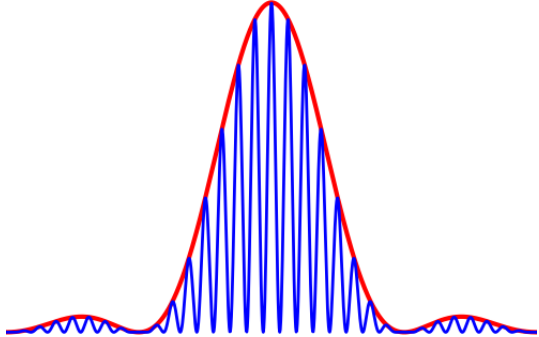


- 空间分布分为**包络函数**和**晶格周期函数**的乘积。
 - ☞ 包络部分描述波包。晶格周期部分代表周期势的作用。

晶体里的波包

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \propto |u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r})|^2 \times$$

$$\left\{ \frac{\sin \Delta k [\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t]/2}{\Delta k [\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t]/2} \right\}^2$$



- t 时刻，波包中心在 $\mathbf{r}_c(t) = \mathbf{r}_c + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t$ ，空间扩展为 $\frac{2\pi}{\Delta k}$ 。
- 波包中心随时间移动，速度为

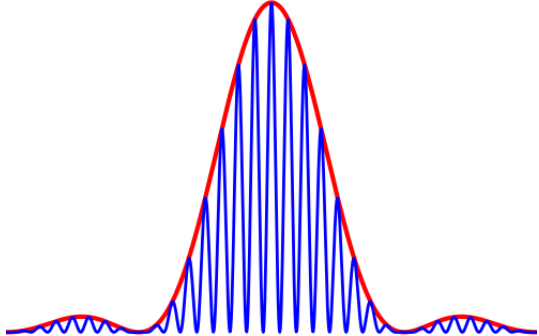
$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{d\omega_n(\mathbf{k}_c)}{d\mathbf{k}} = \frac{d\varepsilon_n(\mathbf{k}_c)}{d\hbar\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}_c)$$

☞ 这是波包的群速度，可以当作准粒子的速度。

晶体里的波包

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \propto |u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r})|^2 \times$$

$$\left\{ \frac{\sin \Delta k [\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t]/2}{\Delta k [\mathbf{r} - \mathbf{r}_c - \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t]/2} \right\}^2$$



- 准经典粒子图像可以成立的条件

Δk 比较小, 远小于第一布里渊区, $\Delta k \ll \pi/a$, $\Delta x \Delta k \geq 1/2$

☞ $\Delta x \gg a$ 。只有波包尺寸远大于晶格, 才能把电子当成准经典粒子处理。

☞ 波包尺寸远大于晶格时, 晶格周期函数部分 $|u_{n\mathbf{k}_c}(\mathbf{r})|^2$ 只给波包增加一定的细致结构, 但不改变整体外形。

晶体里的波包

严格计算

波包中心位置可以通过计算电子位置的平均值

$$\mathbf{r}_c(t) = \bar{\mathbf{r}}(t) = \langle \Psi(t) | \hat{\mathbf{r}} | \Psi(t) \rangle = \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathbf{r} d\mathbf{r}.$$

在忽略掉 $u_{n\mathbf{k}}$ 对 \mathbf{k} 的依赖后，得到的结果和前面计算完全相同： $\mathbf{r}_c(t) = \mathbf{r}_c + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t$

考虑 $u_{n\mathbf{k}}$ 对 \mathbf{k} 的依赖的一阶效应，有一个修正项：

$$\mathbf{r}_c(t) = \mathbf{r}_c + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c)t + i \langle u_{n\mathbf{k}_c} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}_c} \rangle$$

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}_c(t) = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c) + \dot{\mathbf{k}}_c \times [i \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n\mathbf{k}_c} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}_c} \rangle]$$

$$= \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_c) + \dot{\mathbf{k}}_c \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}_c)$$

反常速度，和波函数的几何结构有关

二、晶格中的电子群速度

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})$$

- 电子速度由晶格里的能谱决定，只取决于 \mathbf{k} 和能量 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 。
- 速度方向
电子速度方向 \mathbf{k} 空间里能量梯度的方向，即垂直于等能面。

在自由空间， $\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m)$ ，等能面是球面。电子速度方向和 \mathbf{k} 同向。

一般情况下，晶体里的等能面并非球面，因此 \mathbf{v} 和 \mathbf{k} 并不平行。

二、晶格中的电子群速度

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})$$

● 速度大小

自由空间里，速度正比于 \mathbf{k} ， $|\mathbf{k}|$ 越大，速度越大。

但在晶体里，这种单调关系不复存在。在能带底或者能带顶， $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 取极值， $\mathbf{v}_n(\mathbf{k})$ 为零。

例如在 TBA 下，s 轨道对应的能带 $\varepsilon_s(k) = \varepsilon_s - J_0 - 2J_1 \cos ka$ ， $v_s(k) = 2J_1 \sin ka$ 。因此群速度在 Γ 点处为零；随着 k 增加，群速度先增加；直到 $k = \pi/(2a)$ ，达到最大；然后开始减少，到了布里渊区边界 $k = \pi/a$ ，又变为零。近自由电子模型里，有类似的情况。

不同能带，群速度可能非常不同。例如一维的近自由电子模型，在最低能带里， $v_1(k)$ 和 k 同号；在第二个能带里， $v_2(k)$ 和 k 反号。

晶格中的电子速度

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})$$

- 电子速度由晶格里的能谱决定，只取决于 \mathbf{k} 和能量 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 。
- 在完美的晶格里，量子数 n 和 \mathbf{k} 不会发生改变。因此如果一开始电子处于确定的状态 $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ ，以后就一直不会改变。 $\mathbf{v}_n(\mathbf{k})$ 也就不会改变。因此电子的速度是一个常数，电子将以这个速度在晶体中不断运动，而不会被晶格所阻碍。这是因为晶格周期势对电子的影响已经包含在能谱 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 里了，不需要额外考虑。
- 任何偏离完美周期性的因素都会引起电子散射，改变其量子数 n 和 \mathbf{k} ，从而改变速度。
例如热运动使得离子实改变位置，从而破坏周期性。从准粒子的语言可以认为是电子和声子发生碰撞，从而改变速度。再入，晶体里存在的缺陷也会破坏周期性，导致电子散射。
- 外加电磁场也会改变电子速度。

三、有效质量

Bloch 电子在外电场中的加速

外电场 $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$:

$$\begin{aligned}dW &= \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_n(\mathbf{k})dt \\&= \varepsilon_n(\mathbf{k} + d\mathbf{k}) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = \hbar\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} \\ \frac{d\mathbf{k}}{dt} &= \frac{1}{\hbar}\mathbf{F}\end{aligned}$$

严格的说，这么推导只对 \mathbf{k} 中平行于 \mathbf{F} 分量才成立。我们可以通过求解波函数 $|\Psi(t)\rangle$ 在考虑外场之后的 Hamiltonian ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$) 作用下的 Schödinger 方程，求出波包中心波矢 $\mathbf{k}_c(t) = \bar{\mathbf{k}}(t) = \langle \Psi(t) | \mathbf{k} | \Psi(t) \rangle$ 随时间的演化。如果不考虑其它能带的影响，得到的结果就是 $\hbar\dot{\mathbf{k}}_c = \mathbf{F}$ 。

三、有效质量

Bloch 电子在外电场中的加速

外电场 $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$: $\hbar\dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e\mathbf{E}$

- 准动量

在自由空间中，有同样的关系， $\hbar\mathbf{k}$ 就是电子动量，因此这个关系相当于 Newton 第二定律，表示电子在外电场下的加速。

在晶体里，这个方程描述 Bloch 电子的准动量 $\hbar\mathbf{k}$ 在外电场中的加速。

- 准动量并不是电子的真正的动量

- 准动量的改变只是外场的作用，而真正电子动量的改变是包括晶格势场在内的和作用力的结果。

- $\hbar\mathbf{k}$ 是晶格平移算符的本征值，而不是电子动量 \mathbf{p} 的本征值。

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{p}} &= \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \mathbf{p} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}} \\ &= \hbar\mathbf{k} - i\hbar \int u_{n\mathbf{k}}^* (\nabla_{\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}) d\mathbf{r}\end{aligned}$$

- 在研究晶体中电子运动时，准动量比真实动量更有用。

有效质量

电子在实空间的加速度

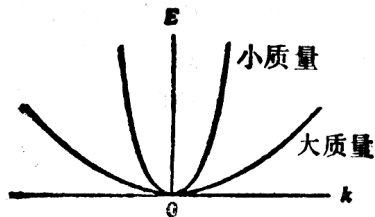
$$\mathbf{a}_i = \frac{d\mathbf{v}_i(\mathbf{k})}{dt} = \frac{d\mathbf{k}_j}{dt} \frac{\partial \mathbf{v}_i(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_j} = \frac{F_j}{\hbar} \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}_j \partial \mathbf{k}_i} = F_j \left(\frac{1}{\overleftrightarrow{m}^*} \right)_{ji}$$
$$\left(\frac{1}{\overleftrightarrow{m}^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_i \partial \mathbf{k}_j}$$

一维情况，有效质量是一个数： $m^* = \hbar^2 / \frac{d^2 \varepsilon_n(k)}{dk^2}$

- 在晶体里，当把加速度在形式上写成仅由外力引起的形式时，外力与加速度之间的关系显然不是由电子的惯性质量所联系的，而必须引入一个有效质量的概念，它计入了周期场的影响。

有效质量

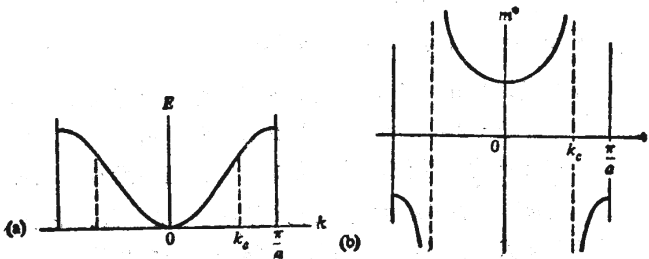
- 有效质量反比于能带的曲率，曲率越大，有效质量越小，反之，有效质量越大。



- 通常说来，能带宽度越大，曲率也越大，有效质量越小；反之，能带越窄，有效质量越大：平带材料，有效质量无穷大。
☞ 重费米子， $m^* > 100m_e$ 。

有效质量

- 由于周期场中电子的能量 $\varepsilon_n(k)$ 与 k 的函数关系不是抛物线关系，因此，电子的有效质量不是常数， m^* 与 k 有关。



(a) 能带结构。 (b) 有效质量 m^* 作为 k 的函数。

有效质量

- 在能带底， $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 极小， $d^2\varepsilon_n/dk^2 > 0$ ，有效质量 $m^* > 0$ 。
- 在能带顶， $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 极大， $d^2\varepsilon_n/dk^2 < 0$ ，有效质量 $m^* < 0$ 。
 - ☞ 在 k 空间的这个区域，晶格对电子产生一个很大的阻力，以致压制住外力，并产生一个与外力反向的加速度。
 - ☞ 这个结果也可以引入空穴的概念，让有效质量保持正号，但电荷反号来理解。

有效质量

有效质量张量 $\overleftrightarrow{m}^* = \hbar^2 [\nabla_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})]^{-1}$;

倒有效质量张量 $\overleftrightarrow{m}^{*-1} = [\nabla_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})] / \hbar^2$ 。

- 晶体场的作用被包括在有效质量里，加速度可以表示为倒有效质量和外力的乘积。
- (倒) 有效质量是一个对称的张量。
 - ☞ 电子加速度方向 $\mathbf{a} = \overleftrightarrow{m}^{*-1} \cdot \mathbf{F}$ 通常和外力不平行。
- 可以取主轴方向，把 m^* 对角化。

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{d^2 \varepsilon_n}{dk_x^2} & & \\ & \frac{d^2 \varepsilon_n}{dk_y^2} & \\ & & \frac{d^2 \varepsilon_n}{dk_z^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_x^*} & & \\ & \frac{1}{m_y^*} & \\ & & \frac{1}{m_z^*} \end{pmatrix}$$

一般情况下，三个有效质量不同，各向异性， $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*}$ 等能面是一个椭球面。在高对称点上，三个有效质量相同，张量退化为标量，等能面是一个球面。

有效质量

- 晶体动量 $\hbar\mathbf{k}$ ，群速度 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ 和有效质量 m^* 这几个概念，对研究晶体里的电子运动具有非常重要的作用。借助它们，我们可以忽略晶格力，因为这个力我们无法知道，也不像外力那么容易控制。
- 在导体里参与物理过程的电子能量范围很窄，波矢范围 $|\Delta\mathbf{k}| \ll \pi/a$ 。因此有效质量可以基本上认为时不随 $|\mathbf{k}|$ 变化的。引入有效质量后，Bloch 电子的行为很像自由电子，尤其是在价带顶或者导带底的时候。
- 有效质量可以通过测量某些物理量获得，例如电子热容、在磁场里的回旋频率等。

$$C_V = \gamma T \propto m^* T。$$

☞ 不同实验，涉及到的过程并不相同，因此得到的有效质量可能不同，尤其在各向异性的材料里。

四、恒定电场下 Bloch 振荡

外加 $-x$ 方向的电场 E ，不考虑散射，Bloch 电子受电场加速。

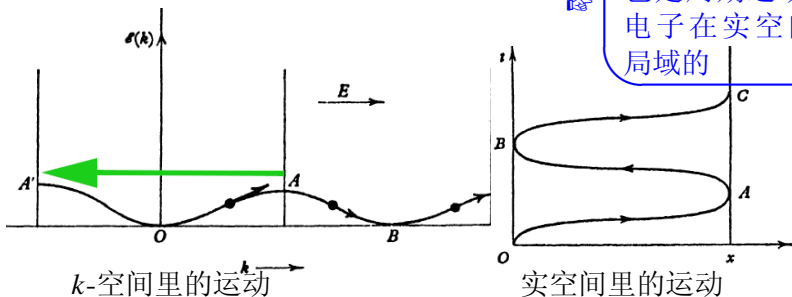
● 在 k 空间作匀速运动， $\dot{k} = F/\hbar = eE/\hbar$ 。

● 由于 BZ 的周期性，电子从 BZ 右端 (A) 出去，等价于从左端 (A') 进来。

电子在 k 空间
周期运动

● 在实空间：从 O 到 A 时，速度为正，电子向右运动。速度先增加后减小，到 A 点速度为零。然后在 k -空间从 A 到 B (或者从 A' 到 O) 时，实空间里速度反向，电子向左运动从 A 回到 O 。

电子在实空间里
也是周期运动 \Rightarrow
电子在实空间是
局域的



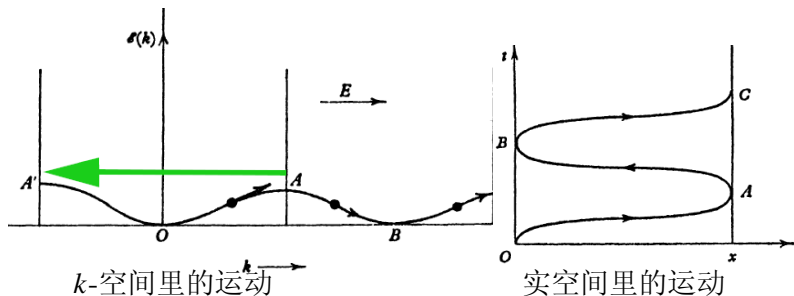
四、恒定电场下 Bloch 振荡

Bloch 振荡周期

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

$$T = \oint_{BZ} dt = \oint_{BZ} \frac{dk}{\dot{k}} = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{\hbar dk}{eE} = \frac{2\pi\hbar}{eEa}$$

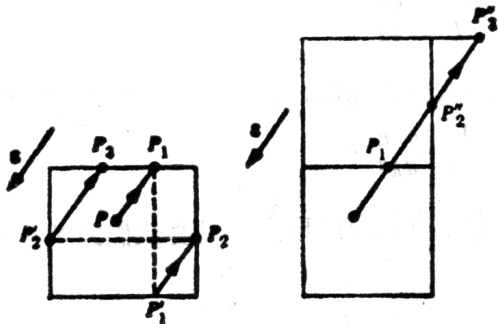
$$\omega_B = \frac{2\pi}{T} = \frac{eEa}{\hbar}$$



Ziman, P190, Fig 112

Bloch 振荡观测条件

- Bloch 振荡实际上很难观察到
晶体里存在各种散射，平均两次散射的时间间隔 $\tau \sim 10^{-14}\text{s}$ 。
Bloch 振荡周期 $T = 2\pi\hbar/(eEa)$ 。能够观察到这个振荡的话，
要求 $T \lesssim \tau$ 。取 $a = 3\text{\AA}$ ，要求 $E \gtrsim 2 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 。这在金属
里无法达到。而在绝缘体，或者半导体里，被击穿。
- 在高维材料，对外场方向很敏感。
- 半导体超晶格， $a \sim 10 \text{ nm}$ ，沿这个方向的话，要观察到 Bloch
振荡的话， $E \sim 10^3 \text{ V/cm}$ ，可以实现。

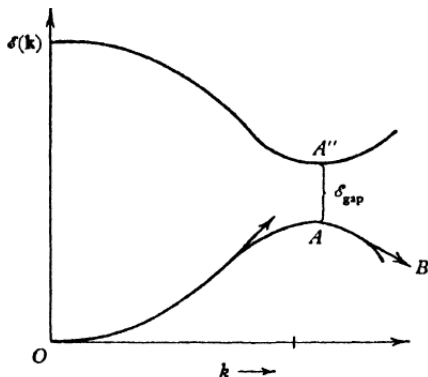


Wannier-Stark 台阶

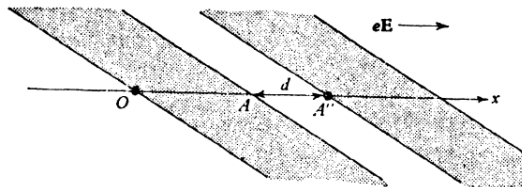
- 周期的晶体场下，电子本征波函数是扩展的 Bloch 波，等几率占据所有的原胞，能量分为不同能带。
- 外加电场 \Rightarrow 电子在某一点附近作局域的周期振荡，周期为 $\omega_B = eEa/\hbar \Rightarrow$ 沿着电场方向电子运动进一步量子化，能量间隔为 $\hbar\omega_B$
- 严格计算发现外加强电场下晶体中电子本征态是确实是局域化的：电子波函数局限在某个原胞附近，本征能量等间隔出现，状如台阶，因此被称为 Wannier-Stark 台阶。本征态能量间隔 $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_B = eEa$ 。
- 电场越大，局域化越严重。

强场下的 Zener 隧穿/击穿

- 当外加电场比较强大时，有可能出现电子从一个能带隧穿到能量更高的能带里。这种现象称为 Zener 隧穿。



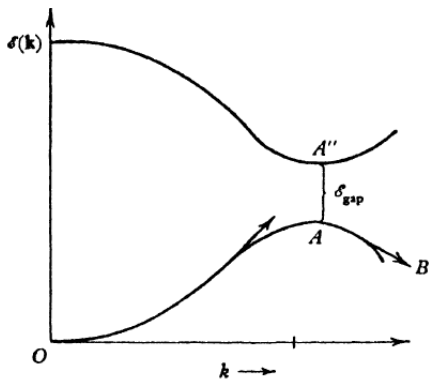
k 空间里的 Zener 隧穿



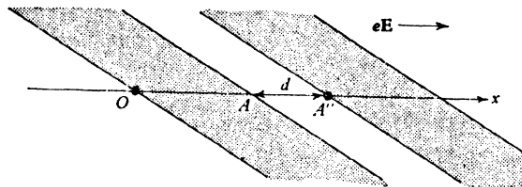
实空间里的 Zener 隧穿

强场下的 Zener 隧穿/击穿

- 在讨论 Bloch 振荡时，我们只考虑一个能带。电子从 O 到 A 时，能量逐渐增加，从带底跑到带顶。在 A 点发生 Bragg 反射，在 k 空间里从 $A \rightarrow B$ （或者 $A' \rightarrow O$ ），实空间里运动反向。电子在实空间里不能继续往前运动，否则的话能量会跑到禁区里。



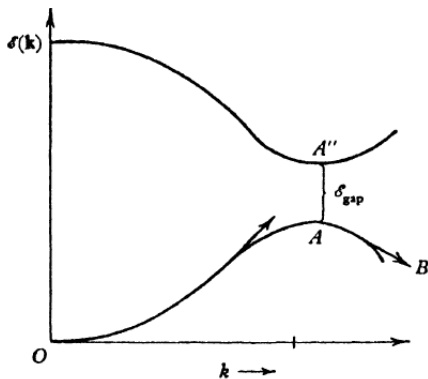
k 空间里的 Zener 隧穿



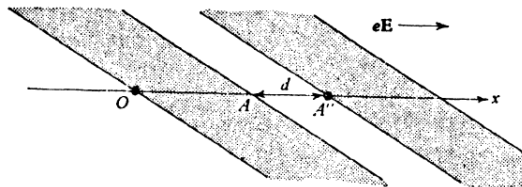
实空间里的 Zener 隧穿

强场下的 Zener 隧穿/击穿

- 如果上面还有一个能带的话，假设带底在 A'' ($k_{A''} = k_A$)，禁带宽度为 \mathcal{E}_{gap} ，那么电子可能发生从 A 到 A'' 的量子跃迁。在实空间上看，是电子突然从 A 跨过一个距离 d ，隧穿到 A'' ，其中 $d = \mathcal{E}_{gap}/(eE)$ 。此即 Zener 隧穿。



k 空间里的 Zener 隧穿

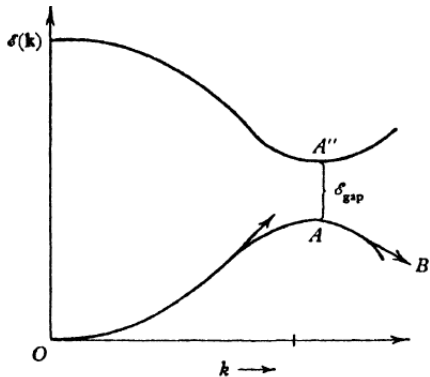


实空间里的 Zener 隧穿

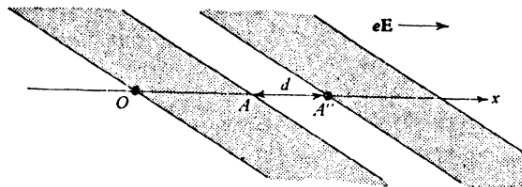
强场下的 Zener 隧穿/击穿

- 发生 Zener 隧穿时，电子实空间位置改变。电子从静电场里获得能量 $eEd = \mathcal{E}_{gap}$ ，从低能态跃迁到高能态上。

☞ 注意和光激发的区分：光激发时，电子位置不发生改变。电子从频率为 $\omega = \mathcal{E}_{gap}/\hbar$ 的交变电场（光场）里吸收能量。



k 空间里的 Zener 隧穿



实空间里的 Zener 隧穿

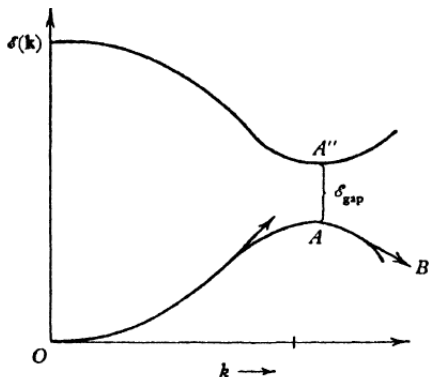
强场下的 Zener 隧穿/击穿

- Zener 隧穿发生几率

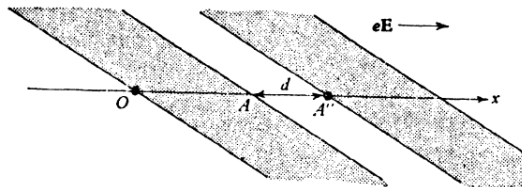
电场增加后，电子发生 Zener 隧穿的几率变大，载流子数目变多。因为这个指数关系，电场加大到一定程度，电流会随电场变大而迅速变大

☞ Zener 击穿

☞ Zener 二极管



k 空间里的 Zener 隧穿



实空间里的 Zener 隧穿

Zener 隧穿的计算

$$\left[-\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + V(x) + u(x) \right] \psi = \varepsilon \psi$$

$$V(x) = V(x+a)$$

$$u(x) = -eE(x - x_0)$$

$$x_0 = (x_1 + x_2)/2$$

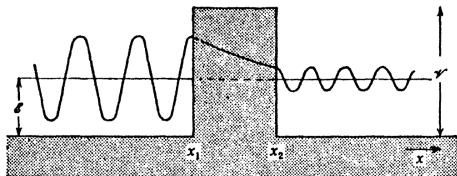
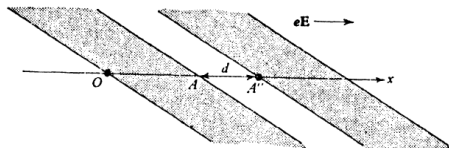
$$G = \frac{2\pi}{a}, \quad k_0 = \frac{G}{2} = \frac{\pi}{a},$$

$$k = k_0 + \kappa, \quad \varepsilon = \varepsilon_0 + \epsilon$$

$$\begin{aligned} \psi_{1k}(x) &\simeq e^{ikx} u_{1k}(x) & x < x_1 \\ &= e^{ikx} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{2k}(x) &\simeq e^{ikx} u_{2k}(x) & x > x_2 \\ &= e^{i(k-G)x} \end{aligned}$$

$$\Delta \varepsilon_{gap} = \varepsilon_2(k_0) - \varepsilon_1(k_0) = 2|V_G|$$



Ziman, "Principles of the Theory of Solids", pp190-196

Zener 隧穿的计算

$$k = k_0 + \kappa$$

$$\mathcal{H}(x) = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + u(x) & V_G \\ V_G^* & \frac{\hbar^2 (k-G)^2}{2m} + u(x) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 (k_0 + \kappa)^2}{2m} + u(x) & V_G \\ V_G & \frac{\hbar^2 (-k_0 + \kappa)^2}{2m} + u(x) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k_0 \kappa}{m} + u(x) & V_G \\ V_G^* & \epsilon_0 - \frac{\hbar^2 k_0 \kappa}{m} + u(x) \end{pmatrix}$$

$$0 = (\epsilon - u)^2 - \left(\frac{\hbar^2 k_0}{m}\right)^2 \kappa^2 - V_G^2 = (\epsilon - u)^2 - \frac{2\epsilon_0 \hbar^2 \kappa^2}{m} - V_G^2$$

$$\epsilon - u(x_1) = -|V_G| \quad \epsilon - u(x_2) = |V_G|$$

$$eEd = 2|V_G| = \epsilon_{gap} \quad \epsilon - u(x_0) = 0$$

Zener 隧穿的计算

以 x_0 为原点, $\epsilon = 0$,

$$\begin{aligned}\kappa^2 &= \frac{m}{2\hbar^2\epsilon_0} [u^2(x) - V_G^2] = \frac{m}{2\hbar^2\epsilon_0} [(eEd)^2 \frac{x^2}{d^2} - V_G^2] \\ &= \frac{m}{2\hbar^2\epsilon_0} |V_G|^2 \left[\frac{(2x)^2}{d^2} - 1 \right] < 0 \text{ for } -d/2 < x < d/2 \\ &= -\frac{k_0^2 |V_G|^2}{4\epsilon_0^2} \left[1 - \frac{(2x)^2}{d^2} \right]\end{aligned}$$

$$\kappa^2(x) = -\beta^2(x)$$

$$\begin{aligned}P &\propto \exp\left\{-2 \int_{-d/2}^{d/2} \beta(x) dx\right\} = \exp\left\{-\frac{\pi k_0 d |V_G|}{4\epsilon_0}\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{\pi^2 \epsilon_{gap}^2}{8\epsilon_0 e E a}\right\}\end{aligned}$$

五、包络波函数和有效质量近似

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

$$i\hbar\partial_t\psi_{n\mathbf{k}} = \mathcal{H}_0\psi_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}$$

$$\mathcal{H} = \frac{[\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}, t)$$

$$i\hbar\partial_t\Psi = \mathcal{H}\Psi$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_n(\mathbf{r}, t)\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

$$i\hbar\partial_t\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}_n\Psi_n(\mathbf{r}, t)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_n &= \varepsilon_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{p} + e\mathbf{A}) + U \\ &= \varepsilon_n(\mathbf{k}_0 - i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} + e\mathbf{A}) + U\end{aligned}$$



当外场变化比较缓慢时，电子不会被激发到其它带上。我们可以把波函数分成两个部分的乘积，其中 Ψ_n 为包络函数，它是波函数中缓慢变化部分。 $\psi_{n\mathbf{k}_0}$ 是周期场里的本征波函数，是快变部分。



\mathcal{H}_n 可以看成是一个有效哈密顿量，它描述第 n 个能带的准电子在外场 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 和 $U(\mathbf{r}, t)$ 中的运动。

包络函数和有效质量近似

进一步假设电子准动量的扩展比较小，集中在 \mathbf{k}_0 附近，我们可以把 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 在 \mathbf{k}_0 处展开，只保留最低的一两项。选取 \mathbf{k}_0 为能带的极值点，例如导带底和价带顶，在这个点上电子的群速度为零，我们可以进一步简化。

$$\mathcal{H}_n = \varepsilon_n(\hbar\mathbf{k}_0 + \mathbf{p} + e\mathbf{A}) + U$$

$$\simeq \varepsilon_n(\hbar\mathbf{k}_0) + (\mathbf{p} + e\mathbf{A})_i \left(\frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k}_0)}{\hbar \partial k_i} = v_i(\mathbf{k}_0) = 0 \text{ (在极值点上)} \right)$$

$$+ (\mathbf{p} + e\mathbf{A})_i \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{2\hbar^2 \partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{2m_{ij}^*} \right) (\mathbf{p} + \mathbf{A})_j + \dots + U$$

$$\simeq \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \frac{1}{2\overleftrightarrow{m}^*} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + U$$

$$\simeq \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \frac{1}{2\overleftrightarrow{m}^*} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + U$$

包络函数和有效质量近似

$$i\hbar\partial_t\Psi_n(\mathbf{r},t) = \mathcal{H}_n\Psi_n(\mathbf{r},t)$$

$$\mathcal{H}_n = \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\frac{1}{2\overleftrightarrow{m}^*}(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + U$$

这个近似下，晶格场的作用完全体现在有效质量张量 m^* 里。在各向同性情况下晶体里的准电子的运动和真正的自由电子几乎没有区别，唯一的不同只有质量。