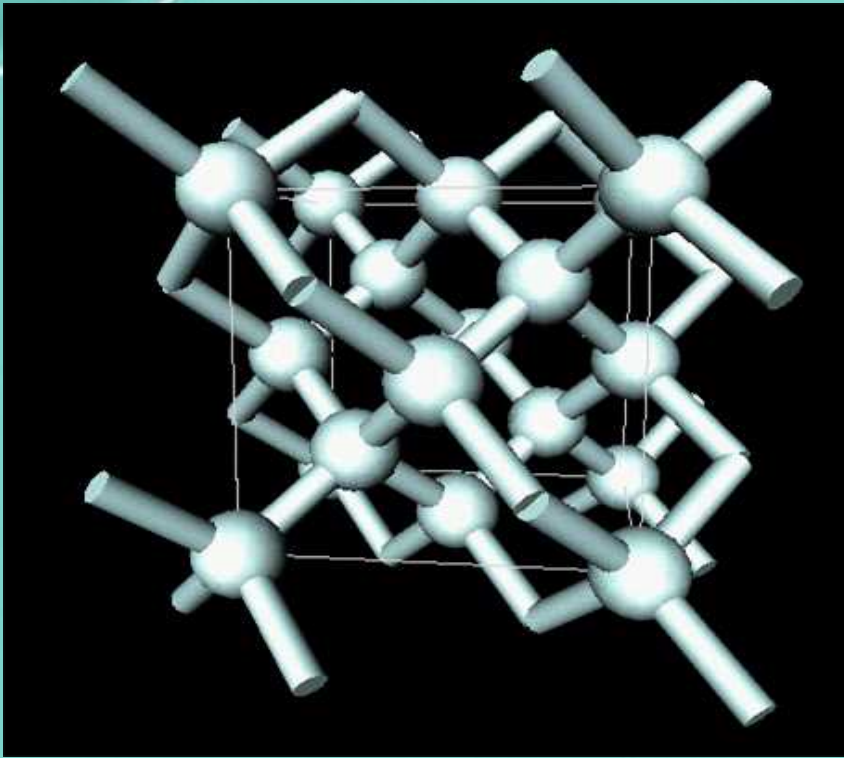


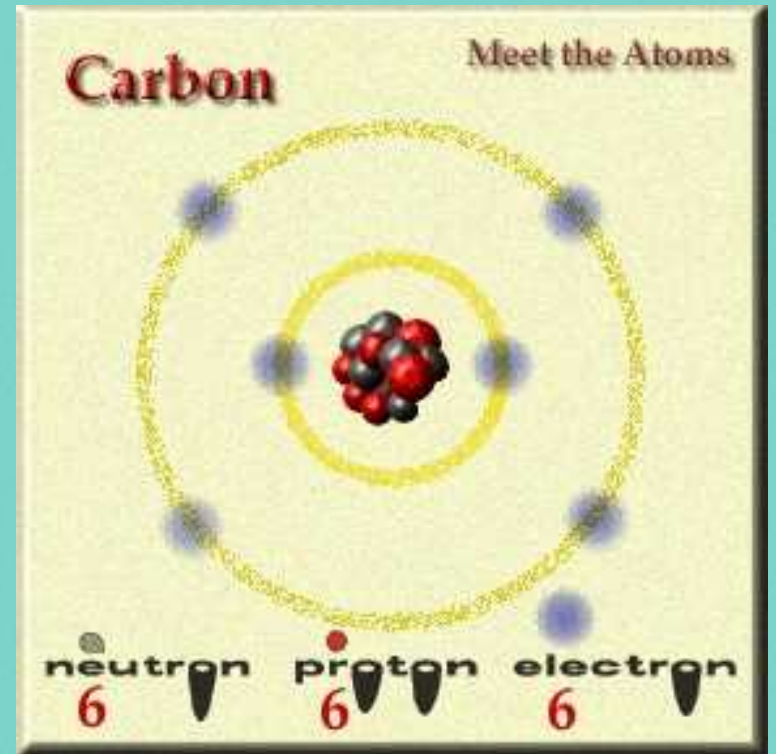
（优选）第一章固体中电子能量 结构和状态ppt讲解

金刚石和石墨

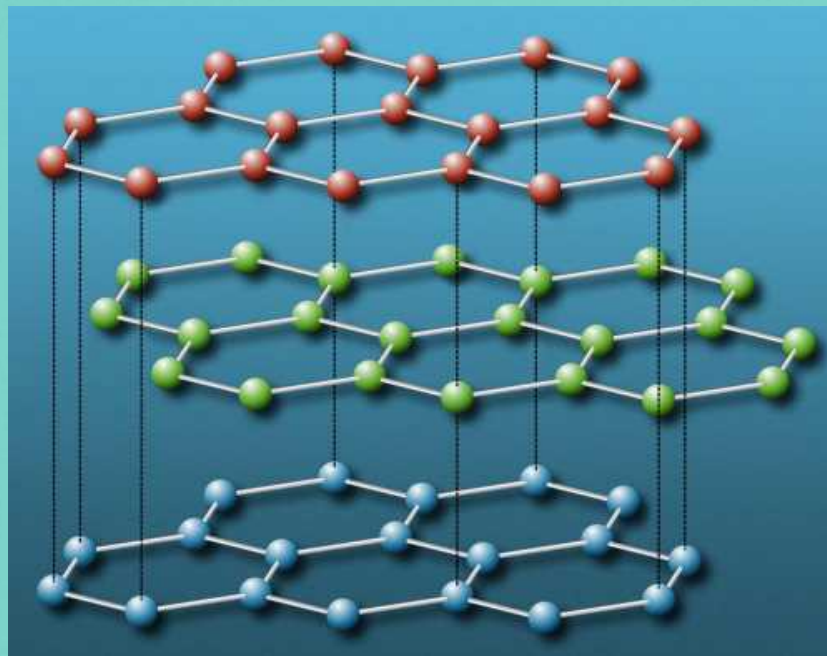




金刚石的原子结构



碳原子示意图



石墨和晶体结构

如此差异，原子核的状态没有区别，只是因为核外的电子能态不同而造成的

材料的物理性能强烈依赖于材料原子间的键合、晶体结构、电子能量结构与状态，这三者之中尤其以电子的能量与状态最为重要。

因果关系体现在什么地方？

第一章为描述，分析材料的物理性能提供理论工具，
后六章相对独立，分别介绍了各种不同的物理性能。

本章内容

材料物理性能主要依赖于材料中的电子结构，因此第一章的理论主要针对电子在不同情况下的能量结构和状态，因此第一章的关键词：电子行为描述。主要内容有：

- 电子的波动性
- 金属的费密（Fermi）-索末菲（Sommerfel）
电子理论
- 晶体能带理论

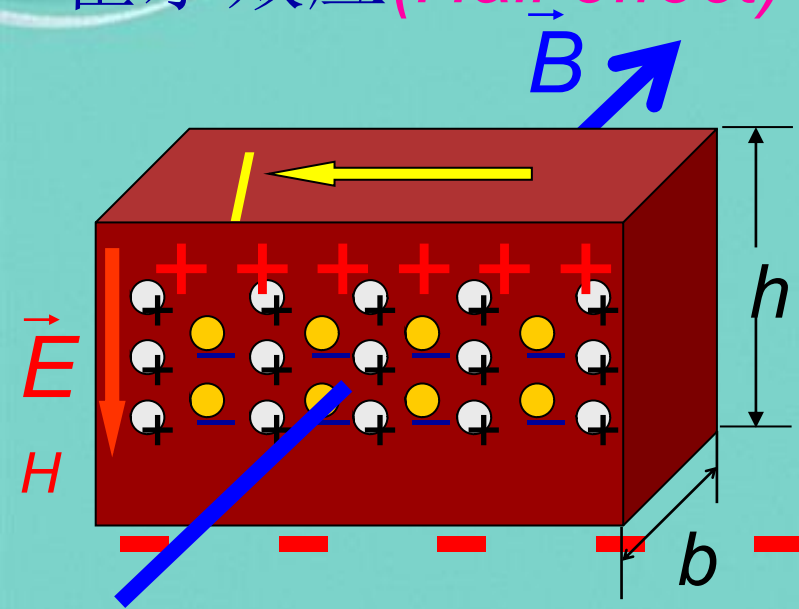
内容先后基本按照人类对电子行为认识的逐渐深入

1.1 .1 电子的粒子性

霍尔效应(Hall effect)

以金属导体为例：

金属中的电流就是自由电子的定向移动（与电流反向）。

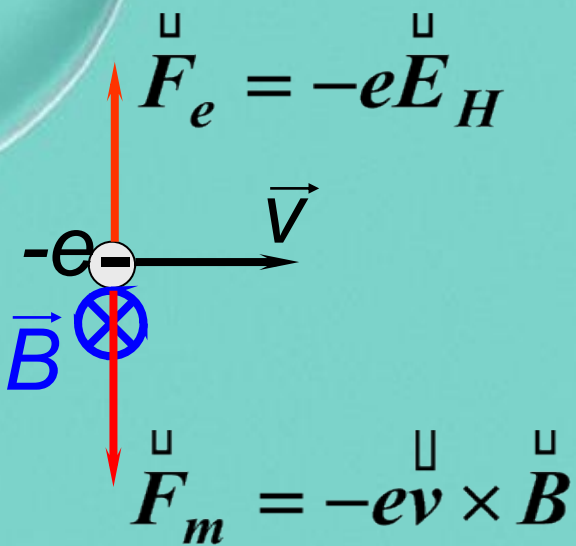


金属的上下表面出现电势差——霍尔电势差。

$$\vec{F}_m = -e\vec{v} \times \vec{B}$$

自由电子受洛仑兹力作用导致正、负电荷相对集中,产生Hall电场 $\vec{E}_H$.

$$\vec{F}_e = -e\vec{E}_H$$

$$\vec{F}_m = -e\vec{v} \times \vec{B}$$


A diagram showing a single electron (represented by a circle with a minus sign) moving with velocity $\vec{v}$ to the right. A magnetic field $\vec{B}$ is directed into the page (indicated by a circle with a cross). A red arrow labeled $\vec{F}_e$ points upwards, representing the electric force. A blue arrow labeled $\vec{F}_m$ points downwards, representing the magnetic force.

平衡时, $\vec{F}_m + \vec{F}_e = 0$

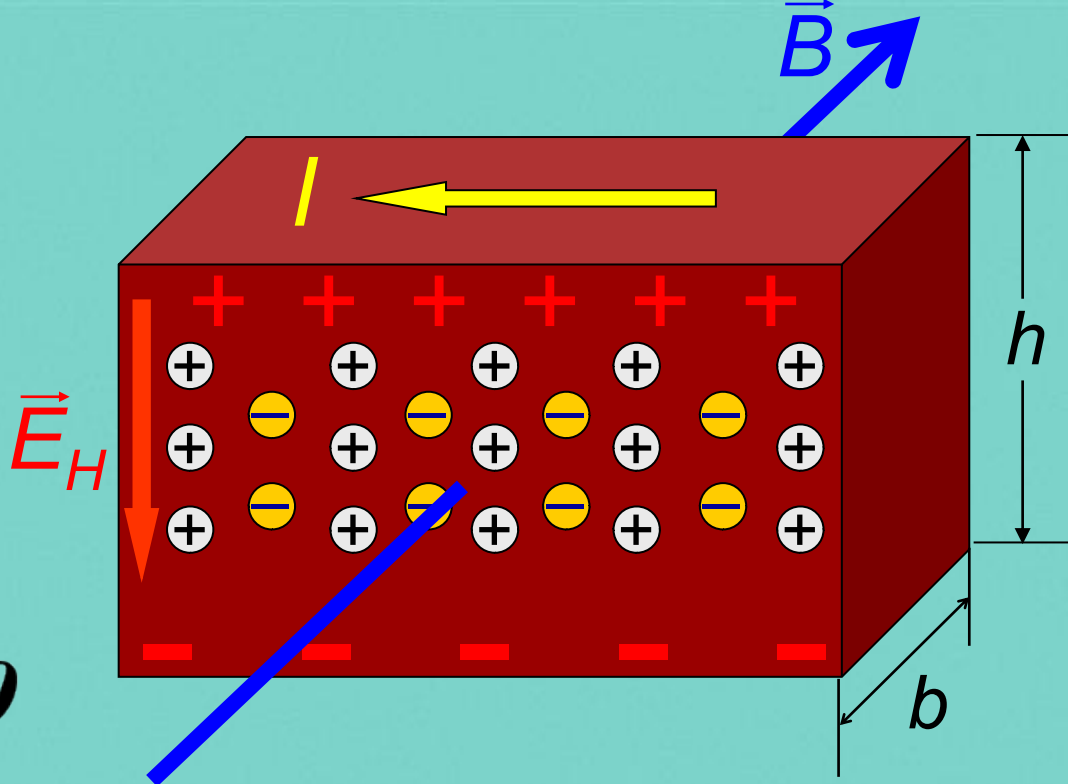
$$\vec{E}_H = -\vec{v} \times \vec{B}$$

$$E_H = vB$$

横向电势差为: $U_H = E_H h = vBh$

$$\text{又 } I = nSev = nbhev \therefore U_H = \frac{1}{ne} \frac{IB}{b}$$

$$R_H = \frac{1}{ne} \text{ —— Hall系数, 仅与导体材料有关。}$$



$$U_H = \frac{1}{ne} \frac{IB}{b} \Rightarrow \text{Hall效应的应用:}$$

(1) 测量载流子浓度(n)

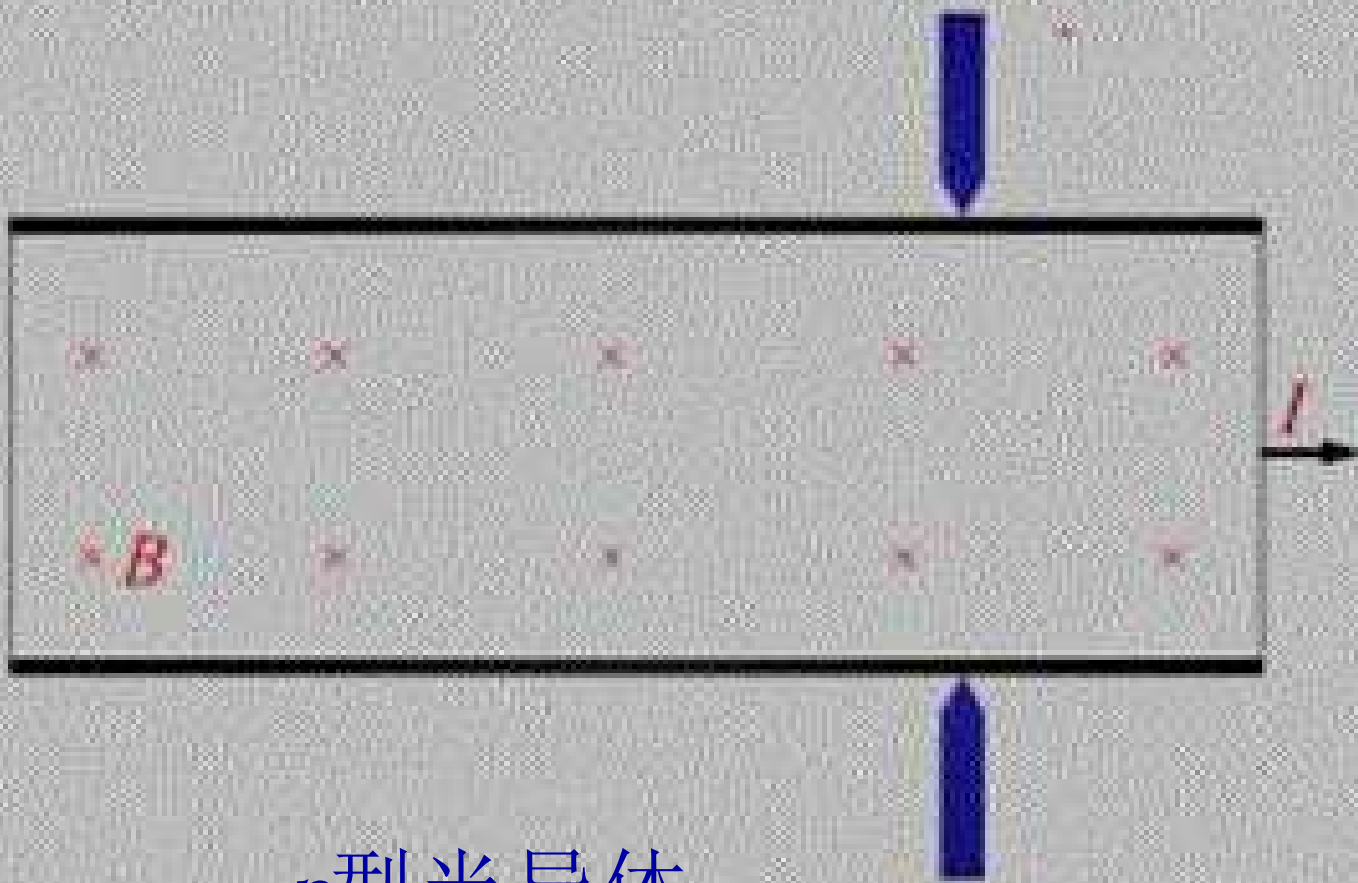
(2) 测量磁感应强度

(3) 判断半导体载流子的种类

半导体有两种载流子:

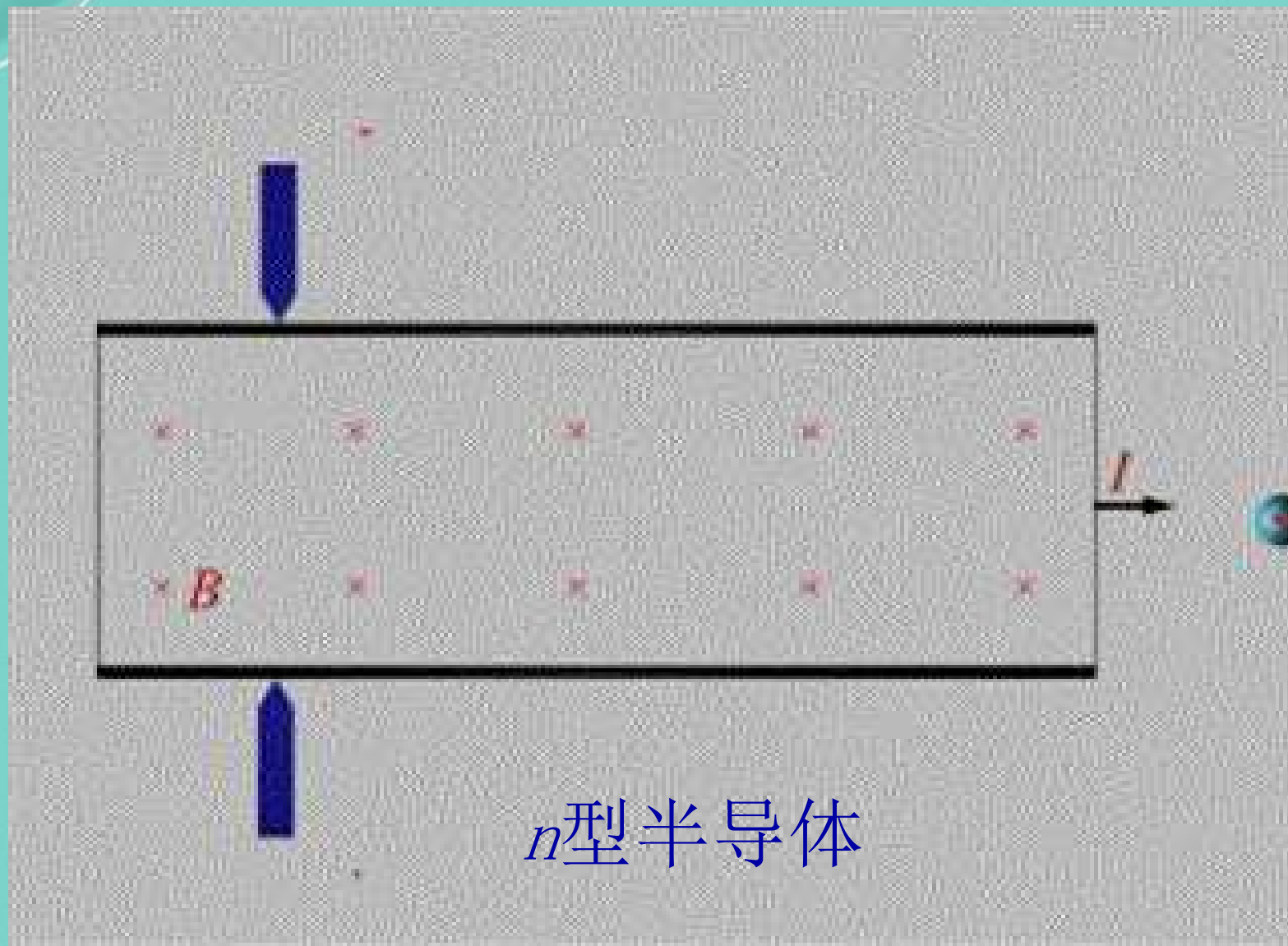
$\left\{ \begin{array}{l} p \text{型} \\ n \text{型} \end{array} \right.$	空穴导电
	电子导电

对Hall效应来说, 正电荷的运动与等量负电荷的反向运动并不等效!



p 型半导体





n 型半导体



第一节 1.1 .2 电子的波动性

微观粒子的波粒二象性

1、光量子的波粒二象性

1905年，爱因斯坦（26岁）为解释光电效应，提出光是由一种微粒—光子组成，频率为 ν 的光子能量

$$E=h\nu$$

普朗克常量 $h=6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

光子理论成功的解释了光的发射和吸收，爱因斯坦由此获得了1921年诺贝尔物理学奖

2、微观粒子的波粒二象性

1924年法国物理学家德布罗意（32岁）提出物质波的假说

一个能量为 E 、动量为 P 的粒子，同时也具有波动性

德布罗意波长

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

频率

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}$$

E 为相对论能量

1927年被美国贝尔实验室德戴维森和革末的电子衍射实验所验证，两人因此获1937年的诺贝尔物理学奖。

3、波粒二象性是一切物质具有的普遍属性

例 计算电子经过 $U_1=100\text{V}$ 和 $U_2=10000\text{V}$ 的电压加速后的德布罗意波长 λ_1 和 λ_2 分别是多少？

解：经过电压 U 加速后，电子的动能为

$$\frac{1}{2} m v^2 = eU \longrightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$$

根据德布罗意公式，此时电子的波长为：

$$\lambda = \frac{h}{m v} = \frac{h}{\sqrt{2em}} \frac{1}{\sqrt{U}}$$

将已知数据代入计算可得：

$\lambda_1 = 0.123\text{nm}$ ， $\lambda_2 = 0.0123\text{ nm}$ （误差较小，未考虑相对论效应）

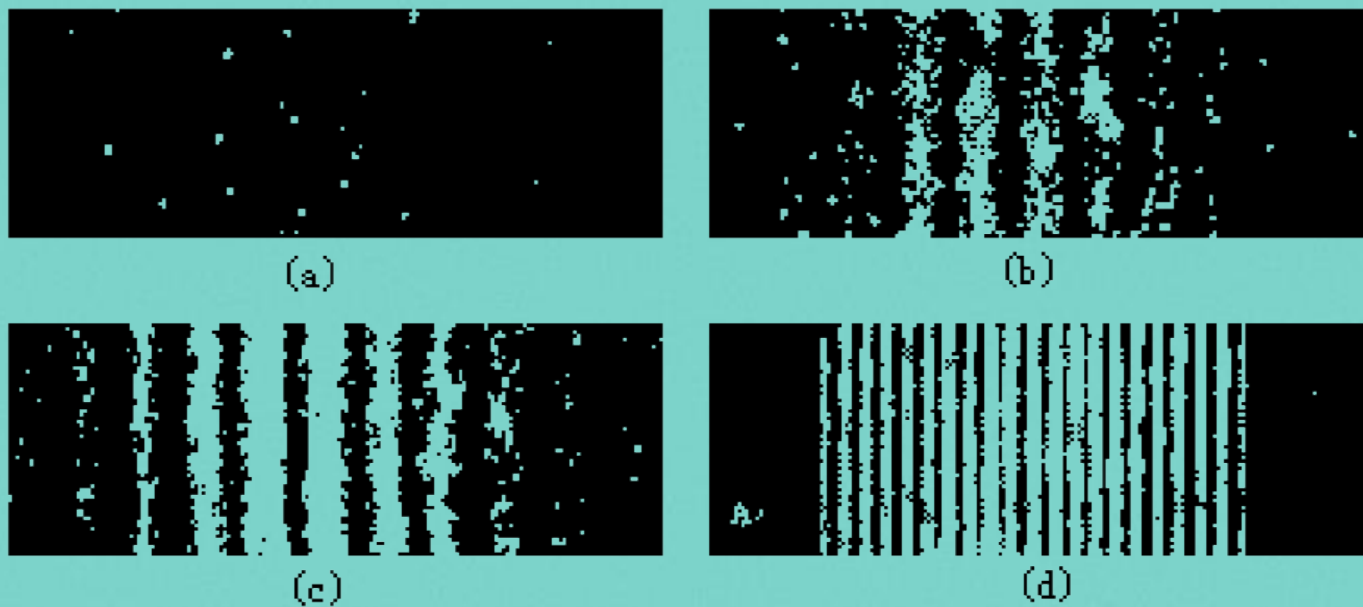


图 21 . 8 电子双缝衍射对概率波的验证

1.1.3 波函数

波函数是微观粒子运动的数学描述形式

经典力学中斜抛运动的
数学描述为

$$\begin{cases} x = v_0 \cos \theta \cdot t \\ y = H + v_0 \sin \theta \cdot t - \frac{1}{2} g t^2 \end{cases}$$

物质波的描述方法思想与经典粒子不同，物质波是一种具有统计规律的几率波，设为

$$\Phi(x, y, z, t)$$

粒子在有限空间出现的几率

$$dw = c |\Phi|^2 d\tau \quad \text{有限性}$$

令 $\Psi = \sqrt{c} \Phi$

成为归一化波函数

则 $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 d\tau = 1$

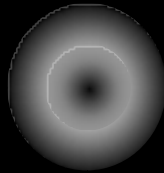
归一性

电子云示例

“电子云” $|\Psi|^2$ 代表微观粒子在空间出现的几率密度，若用点子的疏密程度表示粒子在空间出现的几率密度，这种图形称为电子云（描电子波动的一个工具，定性分析，较为形象，但不是真实的图像）

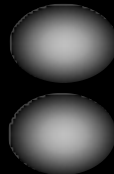
含 Z 轴的剖面上的电子云示意图

$$n = 1, l = 0$$

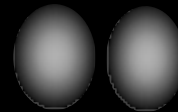


$$m_l = 0$$

$$n = 2, l = 1$$



$$m_l = 0$$

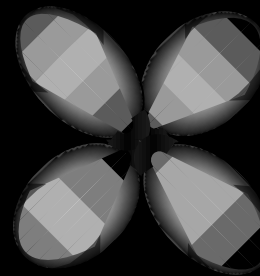


$$m_l = \pm 1$$

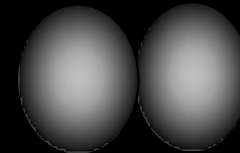
$$n = 3, l = 2$$



$$m_l = 0$$



$$m_l = \pm 1$$



$$m_l = \pm 2$$

1.1.4 薛定谔 (Schrodinger) 方程

电子在不同的条件下运动，其薛定谔方程的具体形式不同，由此得到的波函数不同

一维传播的平面波可以表示为

$$Y(x, t) = A \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right] \quad (\text{只体现波动性})$$

电子能量

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{\hbar^2}{2m} K^2 \quad \text{引入波数 } K = \frac{2\pi}{\lambda}$$

考虑方向时，K为矢量，称波矢量，以K为自变量的三维坐标轴成为K空间，描述电子的行为就在K空间中

考虑德布罗意假设以及归一化条件，波函数表示为

$$\Psi = A e^{i \frac{2\pi}{h} (px - Et)} = A e^{i \frac{\hbar}{\hbar} (px - Et)}$$

定态波函数

电子运动所在的势场其势能只是坐标的函数，则电子在其中运动状态总会达到一个稳定态，可表示为

$$\varphi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px}$$

电子在空间出现的几率密度和时间无关

薛定谔方程的建立的主要思路

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{h^2} p^2 \varphi(x)$$

因 $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ (非相对论形式, E 为经典粒子动能)

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

此为一维条件下自由电子的薛定谔方程

如电子是不自由的，其总能量是势能和动能之合

$$P^2 = 2m(E - U)$$

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi(x) = 0$$

三维空间中

$$\nabla^2 \varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi(x) = 0$$

拉普拉斯算符

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

非相对论非定态形式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(t) + U(\mathbf{r}) \Psi(t)$$

波函数的性质

根据波函数的统计解释，它应有以下性质：

- ▲ 有限性： 在空间任何有限体积元 ΔV 中找到粒子的概率 $(\iiint_{\Delta V} |\Psi|^2 dV)$ 必须为有限值。
- ▲ 归一性： 在空间各点的概率总和必须为1。
- ▲ 单值性： 波函数应单值， 从而保证概率密度在任意时刻、任意位置都是确定的。
- ▲ 连续性： 势场性质和边界条件要求波函数及其一阶导数是连续的。

玻恩（M.Born，英籍德国人，1882—1970）

由于进行了量子力学的基本研究，特别是对波函数作出的统计解释，获得1954年诺贝尔物理学奖。

波函数由薛定谔方程确定，应该体现粒子的波粒二象性：波指得是波动性，指粒子能发生衍射、干涉等现象；粒子性主要指粒子的能量是不连续的、是量子化的。

$$E_n = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{\hbar^2}{2m} K_n^2$$

在自由状态下， E 、 K 都是连续的，但一般说来电子不可能处于完全自由态，电子的运动总是受到各种限制，称为束缚态，束缚态下的电子的能量 E 和波矢 K 都是连续的都是量子化的

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/866001113025010202>