

Лекция 11

Динамика блоховских электронов в квазиклассическом приближении

Итак, на предыдущих лекциях мы познакомились с квантомеханическим подходом к описанию поведения электрона в периодическом поле решетки Браве. Мы решали уравнение Шредингера для электронов, волновая функция которых удовлетворяет условию Блоха. Тем самым мы знаем, каким образом можно определить собственную волновую функцию и собственные значения энергии электрона, а точнее, зависимость энергии от квазиимпульса где n - номер зоны. В основном состоянии электроны заполняют наинизшие энергетические состояния вплоть до энергии Ферми $E_F(\mathbf{k})$, значение которой также зависит от направления квазиимпульса. Тем самым в \mathbf{k} -пространстве формируются эквиэнергетические поверхности, одна из которых - есть *поверхность Ферми*.

Мы убедились в том, что эта задача отыскания собственных волновых функций $\Psi_{n,\mathbf{k}}$ и зависимости $E_n(\mathbf{k})$ не решается легко. При этом решетка предполагалась идеальной и жесткой, а внешние поля отсутствовали. Однако, именно поведение материала во внешних электрических, магнитных, тепловых полях или под действием механических сил представляет наибольший практический интерес. Естественно, что внешние поля усложняют и без того сложное описание кристаллов в рамках квантовой механики. Оказалось, что многие свойства кристаллов можно описать, сделав пол-шага назад, а именно, применив квазиклассический подход.

Основные положения квазиклассической модели. Электроны как волновые пакеты. Уравнения движения во внешних полях.

В классической механике электрон обладает траекторией, т.е. помимо энергии, в данный момент времени - координату и производные координаты по времени - скорость/импульс, ускорение и т.д.. Это, естественно, предполагалось в теории Друде. В теории Зоммерфельда утверждалось

также, что для расчета динамического поведения электронов можно пользоваться обычными уравнениями классической механики, если только не требуется описывать местоположение электрона с точностью порядка межэлектронных расстояний. Т.е., в промежутках между столкновениями, частица с импульсом $\hbar\mathbf{k}$ подчиняется уравнениям:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}} &= d\mathbf{r}/dt = \hbar\mathbf{k}/m \\ \hbar\dot{\mathbf{k}} &= \hbar d\mathbf{k}/dt = -e[\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}]\end{aligned}\quad (11.1)$$

(здесь и далее - в системе CGS, в системе СИ - нужно убрать фактор $1/c$ перед \mathbf{v}). Для оправдания квазиклассического подхода с точки зрения квантовой механики можно сказать, что уравнения (11.1) в действительности описывают поведение волнового пакета, составленного из уровней свободных электронов с волновыми векторами \mathbf{k}' :

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r},t) &= \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') \exp[i(\mathbf{k}'\mathbf{r} - \hbar\mathbf{k}'^2 t/2m)] \\ g(\mathbf{k}') &\rightarrow 0, \text{ when } |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| > \Delta\mathbf{k}\end{aligned}\quad (11.2)$$

где \mathbf{r} и \mathbf{k} - средние координата и квазиимпульс, вблизи которых сосредоточен волновой пакет (с учетом $\Delta x \Delta k > 1$, согласно с принципом неопределенности). В теории Блоха состояние электрона характеризуется волновой функцией $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)$, соответствующей заданной зоне n и волновому вектору \mathbf{k} . Волновой пакет блоховских электронов можно определить аналогично в. пакету свободных электронов:

$$\begin{aligned}\Psi_n(\mathbf{r},t) &= \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') \Psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \exp[-\frac{i}{\hbar} E_n(\mathbf{k}')t] \\ g(\mathbf{k}') &\rightarrow 0, \text{ если } |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| > \Delta\mathbf{k}\end{aligned}\quad (11.3)$$

Пусть ширина пакета по волновым векторам $\Delta\mathbf{k}$ мала по сравнению с размерами зоны Бриллюэна и поэтому $E_n(\mathbf{k})$ мало меняется для уровней, входящих в волновой пакет. Тогда групповая скорость пакета будет равна

$$\mathbf{v}_g = d\omega/d\mathbf{k} = d/d\mathbf{k}(E/\hbar) \quad (11.4a)$$

что совпадает со скоростью электронов в блоховском состоянии с волновой функцией $\Psi_{n,\mathbf{k}}$ (см. Приложение Д в Ашкрофт-Мермин):

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_n(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \quad (11.4b)$$

Поскольку Δk мало по сравнению с зоной Бриллюэна, $\Delta k \ll 1/a$, то размер волнового пакета в конфигурационном пространстве

$$\Delta R \approx 1/\Delta k \gg a, \quad (11.5)$$

т.е. в. пакет “размазан” по большому числу элементарных ячеек в реальном пространстве. Полуклассическая модель описывает воздействие на электроны полей, которые *медленно* меняются на длине волнового пакета, и, стало быть гораздо медленней на межатомном расстоянии, т.е. $\lambda \gg \Delta R \gg a$.
(11.6)

Основные положения полуклассической модели:

1. Схема зонных уровней $E_n(\mathbf{k})$ - известна. Модель применяется для расчетов кинетических коэффициентов (реакции электронов на внешние поля) по заданной (уже вычисленной) зонной структуре, а также для определения свойств зонной структуры по наблюдаемым кинетическим характеристикам. Электрон проводимости - классическая частица со сложным законом дисперсии. При движении во внешних полях $E_n(\mathbf{k})$ играет роль *кинетической энергии*.
2. Номер зоны - интеграл движения. Возможностью межзонных переходов пренебрегается.
3. Изменение со временем координаты и волнового вектора с данным номером зоны n определяется уравнениями движения:

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_n(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \quad (11.7a)$$

$$\hbar d\mathbf{k}/dt = -e[\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t)] \quad (4.76)$$

4. Наборы $n, \mathbf{r}, \mathbf{k}$ и $n, \mathbf{r}, \mathbf{k} + \mathbf{G}$ описывают один и тот же электрон.

Траектория электрона в присутствии магнитного поля $\mathbf{B} \neq 0$.

В присутствии магнитного поля уравнения движения будут:

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_n(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \quad (11.8a)$$

$$\hbar d\mathbf{k}/dt = \frac{e}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \frac{e}{c\hbar} \frac{dE_n(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) \quad (11.8b)$$

Т.е. в \mathbf{k} -пространстве электрон будет двигаться \perp -но вектору магнитного поля и градиенту энергии, следовательно, вдоль поверхности $E_n = \text{const}$ (т.к. $dE/d\mathbf{k} \perp E$ -поверхности). Т.о. в присутствии магнитного поля Ферми-электрон будет двигаться все время по этой Ферми поверхности.

Какова проекция орбиты на плоскость \perp -ную \mathbf{B} в \mathbf{r} -пространстве?

Запишем нормальную составляющую координаты в виде $\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r} - \mathbf{b}(\mathbf{b}\mathbf{r})$, где $\mathbf{b} = \mathbf{B}/|\mathbf{B}|$. Умножим (11.8б) векторно на \mathbf{b} . Получим

$$\mathbf{b} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e/c \mathbf{b} \times [\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}], \text{ или}$$

$$\mathbf{b} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e/c [(\mathbf{b}\mathbf{B}) \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{B}(\mathbf{b}\dot{\mathbf{r}})] = -eB/c [\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{b}(\mathbf{b}\dot{\mathbf{r}})] = -eB/c \dot{\mathbf{r}}_\perp.$$

После интегрирования получим:

$$\mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0) = -(\hbar c/eB) \mathbf{b} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] \quad (11.9)$$

Т.е. проекция орбиты в \mathbf{r} -пространстве есть та же орбита в \mathbf{k} -пространстве, повернутая на 90° вокруг направления поля, причем размеры орбиты масштабированы с фактором $\hbar c/eV$.

Электронные, дырочные и открытые орбиты.

Для электронов в магнитном поле на поверхности Ферми возможны 3 типа орбит: электронные, дырочные и открытые орбиты.

На рис. 11.1. изображены схематично траектории электронов в 1-й зоне Бриллюэна в магнитном поле, перпендикулярном

плоскости чертежа. Замкнутые траектории могут охватывать заполненную (рис.11.1а) и "пустую" (рис.11.1б) область. Градиент энергии направлен в сторону незаполненной области, т.е. в первом случае наружу, а во втором случае внутрь замкнутой траектории. Соответственно ур. (11.8б), направление движения в первом и во втором случае противоположны, что можно представить как движение частиц с противоположным знаком заряда. Поэтому, траектории типа рис. 11.1а и рис. 11.1б, называют, соответственно, "электроноподобные" и "дыркоподобные", или просто *электронные и дырочные орбиты*.



Рис. 11.1. Электронные а), дырочные б) и открытые в) орбиты

В отличие от предыдущих, траектории типа изображенных на рис. 11.1в не замкнуты 1-й зоной Бриллюэна, это т.н. *открытые* траектории. При достижении точки В на границе 1-й з.Б., частица перемещается в точку А, и движение повторяется.

Квантование орбит электрона во внешнем постоянном магнитном поле.

В r-пространстве.

Из электродинамики известно, что полный (или обобщенный) импульс частицы \mathbf{p} может быть представлен в виде суммы кинетического $\mathbf{p}_{\text{кин}}$ и потенциального $\mathbf{p}_{\text{пот}}$ слагаемых:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\text{кин}} + \mathbf{p}_{\text{пот}} \quad (11.10a)$$

где

$$\mathbf{p}_{\text{кин}} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}, \mathbf{p}_{\text{пот}} = q\mathbf{A}/c \text{ (в системе СГС)}, \quad (11.10б)$$

где q -заряд, \mathbf{A} - вектор потенциал, который удовлетворяет ур-ю

$$\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A} = [\nabla \mathbf{A}] \quad (11.10в)$$

Следуя полуклассическому подходу Онсагера и Лифшица, мы полагаем, что орбиты в магнитном поле квантуются в соответствии с правилом квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{r} = (n + \gamma) 2\pi \hbar,$$

где n -целое, $\gamma = 1/2$ - (коррекция фаз). Тогда,

$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{r} = \oint \hbar\mathbf{k} d\mathbf{r} + \frac{q}{c} \oint \mathbf{A} d\mathbf{r}$$

Интегрируя (4.8б), с точностью до константы имеем

$$\hbar\mathbf{k} = (q/c)[\mathbf{rB}] \quad (11.13)$$

Отсюда и из (11.10в) для 1-го слагаемого в правой части (11.12) имеем:

$$\oint \hbar\mathbf{k} d\mathbf{r} = \frac{q}{c} \oint [\mathbf{rB}] d\mathbf{r} = -\frac{q}{c} B \oint [r d\mathbf{r}] = -\frac{2q}{c} \Phi$$

где Φ - магнитный поток через площадь, ограниченную орбитой. Для второго слагаемого

$$\frac{q}{c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = (\text{используем теорему Стокса}) = (q/c) \int \text{rot} \mathbf{A} d\sigma = (q/c) \int \mathbf{B} d\mathbf{r} = (q/c) \Phi$$

Отсюда сумма

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = - (q/c) \Phi = (n + \gamma) 2 \pi \hbar$$

Т.о. орбита электронов квантуется так, что поток через нее равен

$$\Phi_n = (n + \gamma) (2 \pi \hbar c / e),$$

где $(2 \pi \hbar c / e) = 4.14 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2$ (или $4.14 \cdot 10^{-15} \text{ Т} \cdot \text{м}^2$) -квант магнитного потока (заметим, что в литературе также используется обозначение $\Phi_0 = S (2 \pi \hbar c / e) = 2.0710^{-15} \text{ Т} \cdot \text{м}^2$, соответствующее минимальному потоку при $n = 0$ в (11.17)).

Квантование в \mathbf{k} -пространстве.

Учитывая фактор масштабирования в (11.9) имеем:

$\Delta \mathbf{r} = (\hbar c / eB) \Delta \mathbf{k}$, и, соответственно, площадь A_n , охватываемая контуром в реальном пространстве, соотносится с площадью S_n в \mathbf{k} -пространстве:

$$A_n = (\hbar c / eB)^2 S_n$$

Отсюда: $\Phi_n = \int \mathbf{B} dA_n = B A_n = (\hbar c / eB)^2 S_n B = (n + \gamma) (2 \pi \hbar c / e)$

$$\text{или } S_n = (n + \gamma) (2 \pi e / \hbar c) B \quad (11.19)$$

Одинаковая площадь S в \mathbf{k} -пространстве на поверхности Ферми будет для двух последовательных значений магнитного поля:

$$S(1/B_{n+1} - 1/B_n) = 2\pi e/\hbar c \quad (11.20)$$

Равные инкременты $1/B$ соответствуют подобным орбитам!

Соотношение (11.20) получил Онсагер (1952), он же показал, что S - площадь экстремальной орбиты (подробнее - в следующей лекции). Это объясняет наблюдаемые осцилляционные эффекты при низких температурах в электросопротивлении, магнитной восприимчивости, теплоемкости при изменении магнитного поля (Лекция 12).

Уровни Ландау для свободных электронов в магнитном поле (Ландау, 1930, 1969).

Пусть имеем образец, помещенный в магнитное поле, направленное вдоль оси z перпендикулярно торцу с квадратным сечением. Волновые векторы имеют дискретные разрешенные значения $k_i = 2\pi n_i/L$, где L - сторона квадрата. Площадь, занимаемая орбитой, в плоскости $k_x k_y$ -плоскости, составляет $(2\pi n/L)^2$ (спином пренебрегаем). Площадь между соседними орбитами:

$$\Delta S = S_n - S_{n-1} = (2\pi e/\hbar c)B \quad (11.21)$$

Отсюда, число электронных орбит, которые вырождены в один магнитный уровень (рис.11.2в):

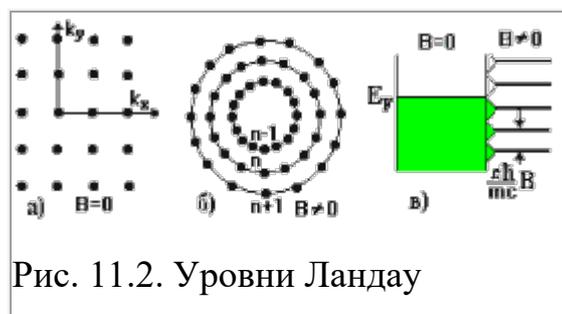


Рис. 11.2. Уровни Ландау

$$D = (2\pi eB/\hbar c) (L/2\pi)^2 = \rho B, \quad (11.22)$$

где $\rho = eL^2/(2\pi\hbar c)$. Такой (вырожденный) магнитный уровень называется *уровнем Ландау*. Рис.11.2 иллюстрирует описанный процесс формирования уровней Ландау. При $B \neq 0$ движение электронов в поперечной (по отношению к \mathbf{B}) k -плоскости ограничено окружностью (рис.11.2б). Площадь колец между соседними окружностями удовлетворяет (11.21), т.е. при фиксированном поле не зависит от n . Число разрешенных состояний (орбиталей) на окружности равно площади между кольцами, умноженной на число орбиталей на единицу площади, что дает (11.22).

Энергия уровней Ландау.

В соответствии с классической механикой движения заряда в магнитном поле, приравнивая центростремительную силу силе Лоренца $mv^2/r = evB/c$, где v - нормальная к \mathbf{B} составляющая скорости электрона, а r - радиус орбиты, получаем для частоты кругового движения (т.н. *циклотронной частоты*)

$$\omega_c = 2\pi/T = 2\pi/(2\pi r/v) = v/r = eB/(mc). \quad (4.23)$$

В квазиклассическом приближении, движение электрона в магнитном поле представляется как колебание осциллятора с частотой ω_c . Соответственно, энергия такого осциллятора квантуется с образованием равноотстоящих уровней

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c \quad (4.24)$$

Энергетический спектр свободных электронов при $B = 0$ перераспределяется по магнитным уровням Ландау при $B \neq 0$ как показано на рис. 11.2в.

Уровни Ландау для блоховских электронов.

Траектории блоховских электронов не являются окружностью, однако, правила квантования (11.20, 21, 22) остаются в силе. Это позволяет использовать их для исследования поверхности Ферми в реальных кристаллах. Другое отличие: - в выражении для циклотронной частоты (11.23), эффективная масса блоховской частицы (электрона или дырки), m^* , может отличаться от массы свободного электрона. В общем случае из уравнений движения (11.7) следует, что ускорение, приобретаемое частицей в поле сил

$$\mathbf{a} = d\mathbf{v}_n/dt = 1/\hbar \partial(\partial E_n/\partial \mathbf{k})/\partial t = 1/\hbar \partial^2 E_n/\partial^2 \mathbf{k} \partial \mathbf{k}/\partial t = F/\hbar^2 \partial^2 E_n/\partial^2 \mathbf{k} = F/m^*.$$

Т.е. обратная эффективная масса

$$1/m^* = 1/\hbar^2 \partial^2 E_n/\partial^2 \mathbf{k}$$

в общем случае является тензором, зависящим от \mathbf{k} :

$$[M^{-1}(\mathbf{k})]_{ij} = 1/\hbar^2 \partial^2 E_n/\partial k_i \partial k_j = 1/\hbar \partial v_i/\partial k_j \quad (4.26)$$

Так что циклотронная частота в общем виде определяется соотношением

$$\omega_c = eB/(m^*c).$$