

## 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:

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

(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  $\mathbf{k}'$  :

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

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:

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

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  $\Delta k$  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  $\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r} - \mathbf{b}(\mathbf{br})$ , где  $\mathbf{b} = \mathbf{B}/|\mathbf{B}|$ . Умножим (11.8б) векторно на  $\mathbf{b}$ . Получим

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

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

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  $90^\circ$  вокруг направления поля, причем размеры орбиты масштабированы с фактором  $\frac{c}{eV}$ .

### **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*.

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.**



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

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

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

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  $\Phi$  - 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:

$\Delta r = (\hbar c / eB) \Delta k$ , 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 осцилляторные 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):

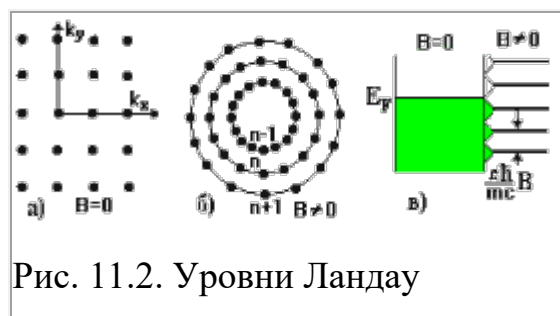


Рис. 11.2. Уровни Ландау

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



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  $\omega_c$ . 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

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