

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕОРИИ МЕТАЛЛОВ

I. КЛАССИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛАХ

И. М. Лифшиц, М. И. Каганов

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение.	419
2. Геометрия изоэнергетических поверхностей электронов.	422
3. Классическая механика частицы с произвольным законом дисперсии.	427
4. Столкновения квазичастиц. Рассеяние.	435
5. Квазиклассические уровни энергии.	437
6. Квантовая механика электрона с произвольным законом дисперсии.	445
7. Квантовая теория рассеяния электронов с произвольным законом дисперсии.	454

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Все представления электронной теории металлов и все ее успехи тесно связаны с идеями квантовой механики. Основным в этой теории являлось представление о свободных электронах — носителях проводимости в металлах. Уже наиболее примитивные воззрения о свободных электронах в металле, образующих идеальный, сильно вырожденный ферми-газ, оказались весьма плодотворными для объяснения (по крайней мере качественного) ряда наблюдаемых экспериментально закономерностей (линейный ход электронной теплоемкости, температурный ход электро- и теплопроводности и др.).

Значительно дальше удалось продвинуться в теоретическом отношении после фундаментальных работ Блоха и Пейерлса, в которых концепция свободных электронов была существенно развита. В теории Блоха взаимодействие электрона проводимости с кристаллической средой описывалось путем введения некоторого эффективного электрического поля с периодическим потенциалом, учитывающим симметрию решетки. Изучение движения частицы в периодическом поле привело к выяснению следующих обстоятельств. Энергетический спектр электрона имеет зонную структуру, т. е. состоит из ряда полос (зон), разделенных запрещенными областями энергии. Эти полосы могут частично перекрываться, однако их индивидуальность все же сохраняется и проявляется в первую очередь в различной зависимости энергии частицы ϵ от ее квазиимпульса p , т. е. в различии закона дисперсии электронов. Этот более сложный закон дисперсии заменяет зависимость $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$, справедливую для обычных свободных частиц.

Одним из самых существенных выводов зонной теории оказался вывод о возможности разделить все кристаллы на металлы и диэлектрики по признаку заполнения зон в основном состоянии (т. е. в наименьшем

энергетическом состоянии): в соответствии с принципом Паули электроны могут ускоряться лишь при условии, что соседние энергетические уровни свободны, т. е. вещество является металлом, если имеется зона, лишь частично заполненная электронами.

Модель Блоха недостаточно удовлетворительна в связи с тем, что она формулируется как одноэлектронная задача; остается неясным, не вызывает ли последовательный учет взаимодействия электронов принципиальных изменений в представлениях зонной теории. Поэтому было сделано много попыток выбора других моделей, в которых учитываются те или иные стороны взаимодействия между электронами и задача формулируется как многоэлектронная. Однако в большинстве своем такие формулировки чрезмерно модельны и неубедительны, а главное — не могут быть доведены до получения эффективных результатов.

Новый подход к проблеме электронной теории металлов связан с попыткой обойти трудности, возникающие при выборе различных моделей для определения электронного спектра металла. Этот подход основан на общих представлениях о возможных типах энергетического спектра квантовых систем и на понятии квазичастиц, реализующих этот спектр.

Как известно, понятие квазичастицы связано с рассмотрением низких уровней возбуждения макроскопических тел: энергетические уровни таких тел представляют суммы энергий отдельных элементарных возбуждений, каждое из которых обладает своим импульсом (в кристалле — квазиимпульсом). Простейшими примерами подобных элементарных возбуждений или квазичастиц являются фононы в кристаллах, спиновые волны в ферромагнетиках, экситоны в полупроводниках и диэлектриках и т. д. В зависимости от того, какой статистике подчиняются те или иные частицы, реализующие энергетический спектр системы, говорят о спектре бозевского или фермиевского типа.

Макроскопическая система может иметь несколько ветвей энергетического спектра, часть из которых является фермиевскими, а часть — бозевскими. Мы будем исходить из гипотезы о том, что спектр носителей проводимости в металле есть спектр фермиевского типа. Это означает, что перенос заряда осуществляется квазичастицами, подчиняющимися статистике Ферми. Таким образом, совокупность валентных электронов, взаимодействующих между собой и с полем кристаллической решетки, в отношении своих кинетических и статистико-термодинамических свойств может быть заменена идеальным газом заряженных фермиевских квазичастиц. Эти квазичастицы мы в дальнейшем будем условно называть электронами проводимости или просто электронами. Предположение о фермиевском характере энергетического спектра носителей проводимости не исключает, разумеется, возможности существования других ветвей спектра, связанных с возбуждениями бозевского типа. Если рассматривать металлы в целом, то такие возбуждения наверняка существуют. Однако на основании всей совокупности имеющихся в настоящее время экспериментальных данных весьма маловероятно, что в несверхпроводящем состоянии существует бозевская ветвь спектра, связанная с переносом заряда.

Что касается энергетического спектра отдельной квазичастицы (т. е. ее закона дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$), то в соответствии с симметрией кристалла энергия $\epsilon(\mathbf{p})$ должна быть периодической функцией квазиимпульса с периодом обратной решетки (умноженным на постоянную Планка $2\pi\hbar$). В общем случае эта функция является многозначной, что соответствует различным зонам энергии электрона. Таким образом, эта сторона зонной теории оказывается не связанной с одноэлектронной моделью Блоха и носит значительно более общий характер.

Предположение об идеальности газа квазичастиц является, разумеется, первым приближением, соответствующим достаточно низким уровням возбуждения (низким температурам). В кинетических задачах необходимо учитывать взаимодействие как внутри одной ветви, так и между различными ветвями возбуждений (например, между электронами и фононами). В простейшем случае это взаимодействие соответствует столкновению квазичастиц. Однако возможно, что такой учет взаимодействия является недостаточным и необходимо принимать во внимание изменение закона дисперсии отдельной частицы в зависимости от числа возбуждений, подобно тому как это было сделано в квантовой теории ферми-жидкости, развитой Л. Д. Ландау.

При полуфеноменологическом подходе к построению электронной теории металлов необходимо тщательное и глубокое изучение всех свойств электронов, которые не зависят от генезиса электронного энергетического спектра, а определяются только законом дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$. Обычно при построении электронной теории металлов подчеркивается сходство электрона в металле со свободным электроном и не уточняются те особенности в поведении электрона, которые связаны со сложным характером его закона дисперсии. Как показали исследования, проведенные в последние годы, ряд важных свойств металлов можно объяснить, только исходя из предположения о том, что электронный энергетический спектр металлов сложен и существенно отличается от энергетического спектра свободных электронов. Поэтому построение электронной теории металлов следует начинать с изучения механики (классической и квантовой) электрона со сложным законом дисперсии. При этом выясняется, что механика электрона проводимости отличается рядом существенных особенностей, которые находят свое отражение в весьма разнообразных макроскопических свойствах металла.

Сказанное определяет основную идею, связанную с возможностью изучить разнообразные следствия, вытекающие из предположения о фермиевском характере спектра электронов проводимости в металле, оставляя в стороне вопрос о генезисе подобного спектра и не задаваясь какой-либо конкретной моделью, приводящей к таким квазичастицам. Как оказывается, большая часть кинетических и статистико-термодинамических характеристик металла (включая и его магнитные свойства) может быть выражена через параметры, характеризующие квазичастицы (их число, закон дисперсии и т. д.). Поэтому может быть поставлена и решена также обратная задача — определение энергетического спектра квазичастиц (электронов) по экспериментальным данным относительно различных макроскопических характеристик металла. Наиболее чувствительным инструментом для определения энергетического спектра оказываются при этом разнообразные свойства металла в магнитном поле, когда радиус кривизны траектории электрона значительно меньше длины свободного пробега и электрон успевает между столкновениями проявить свои динамические свойства (низкотемпературные осцилляции восприимчивости, гальваномагнитные явления в сильных полях, высокочастотные характеристики металла и резонансные эффекты)

Вследствие статистики Ферми все уровни энергии электронов, вплоть до ее граничного значения ϵ_0 , в основном состоянии (т. е. при абсолютном нуле температуры) являются занятыми. Поэтому при температурах $T \ll \epsilon_0/k$ существенную роль во всех эффектах играют лишь частицы, имеющие энергию, близкую к ϵ_0 (т. е. лежащие в полосе ширины $\delta\epsilon \sim \sim kT$). В большинстве случаев температура вырождения $T_0 = \epsilon_0/k$ весьма высока ($T_0 \sim 10^4$ градусов), и неравенство имеет место практически всегда. Это означает, что в основном должны проявляться лишь те стороны

закона дисперсии электронов, которые связаны с поведением функции $\epsilon(\mathbf{p})$ вблизи поверхности постоянной энергии $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon_0$ в пространстве импульсов. Эта поверхность называется поверхностью Ферми, и ее характеристики определяют свойства электронов. Помимо формы поверхности Ферми, второй характерной для энергетического спектра величиной является $\mathbf{v} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}}$, имеющая смысл скорости электронов. Поэтому в дальнейшем, говоря об определении энергетического спектра, мы будем иметь в виду лишь определение этих двух его важнейших характеристик.

Обзор делится на три тесно связанные между собой части. Первая часть содержит механику (классическую и квантовую) электрона проводимости. Во второй части излагается статистическая термодинамика электронного газа, т. е. выясняются тепловые и магнитные свойства металлов в равновесных условиях. Наконец, третья часть посвящена исследованию кинетических явлений, в частности изучению гальваномагнитных и резонансных явлений.

Большая часть излагаемых результатов основана на работах группы харьковских физиков-теоретиков. Некоторые результаты публикуются впервые. Авторы не ставили своей целью охватить все работы по теории металлов, вышедшие за последние годы, поэтому цитированная литература не является библиографией по данному вопросу. Основное внимание уделено тем явлениям, которые могут служить индикатором электронного энергетического спектра металлов.

§ 2. ГЕОМЕТРИЯ ИЗОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОНОВ

Как мы уже говорили, закон дисперсии электрона проводимости существенно отличается от закона дисперсии свободного электрона.

В частности, периодичность кристаллической решетки приводит к периодической зависимости энергии от квазиимпульса с периодом обратной решетки, умноженным на $2\pi\hbar$ ($2\pi\hbar = h$ — постоянная Планка). Вообще элементы симметрии кристалла накладывают отпечаток на симметрию функции $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$. Кроме того, вследствие инвариантности уравнений квантовой механики относительно изменения знака времени всегда $\epsilon(-\mathbf{p}) = \epsilon(\mathbf{p})$.

Так как одному и тому же значению квазиимпульса соответствуют несколько значений энергии ϵ , то $\epsilon(\mathbf{p})$ — многозначная функция. Поэтому точнее было бы писать $\epsilon = \epsilon_s(\mathbf{p})$, где s — набор дискретных квантовых чисел, определяющих «номер» энергетической полосы (зоны). Эти энергетические полосы (или зоны) могут частично перекрываться (т. е. $\min \epsilon_s < \max \epsilon_s < \max \epsilon_{s'}$), однако их индивидуальность, естественно, сохраняется, так как каждой зоне соответствует свой закон дисперсии. Во всех тех случаях, когда это не может привести к недоразумению, индекс s мы будем опускать.

Внутри каждой зоны энергия при определенных значениях квазиимпульса достигает минимального и максимального значений.

Вблизи точек минимума (или максимума) энергию можно разложить по степеням отклонения от того значения импульса, при котором энергия принимает минимальное (максимальное) значение. Если не учитывать

случаев вырождения, то разложение имеет следующий вид^{*}):

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_k} \right)_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} (p_i - p_{i0})(p_k - p_{k0}), \quad (2.1)$$

$\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_k} \right)_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0}$ — симметричный тензор второго ранга; если \mathbf{p}_0 соответствует минимуму энергии, его главные значения положительны, если максимуму — отрицательны. Компоненты тензора имеют размерность обратной массы $\left(\frac{1}{\text{грамм}} \right)$. Поэтому сам тензор называется тензором обратных эффективных масс и обозначается m_{ik}^{-1} .

Таким образом,

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}_0) + \frac{1}{2} m_{ik}^{-1} (p_i - p_{i0})(p_k - p_{k0}). \quad (2.1a)$$

Вблизи описанных экстремальных точек изоэнергетические поверхности в пространстве квазиимпульсов — замкнутые, причем в непосредственной близости, как видно из разложения (2.1) (или (2.1a)), — эллипсоиды.

Следует иметь в виду, что любая замкнутая изоэнергетическая поверхность вблизи точек минимума окружает область в импульсном пространстве, где энергия меньше, чем ее значение на поверхности, а вблизи точек максимума любая замкнутая поверхность окружает область, где энергия больше, чем ее значение на поверхности. Это значит, что в первом случае (вблизи минимума) вектор $\mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}}$ направлен по внешней нормали к изоэнергетической поверхности, а во втором случае (вблизи максимума) — внутрь.

Так как $\varepsilon(\mathbf{p})$ — периодическая функция, то описанные выше поверхности периодически повторяются по всей обратной решетке. Мы их будем (несмотря на их периодическую повторяемость) называть **з а м к н у т ы м и**.

Очевидно, что между этими простыми с топологической точки зрения поверхностями должны расположиться более сложные поверхности — самопересекающиеся и открытые (т. е. поверхности, проходящие через всю обратную решетку), иначе невозможен непрерывный переход от поверхностей, окружающих точки минимума, к поверхностям, окружающим точки максимума.

На рис. 1 для примера изображены изоэнергетические «поверхности» (кривые) в двухмерном случае

$$\varepsilon = A_1 \cos \frac{p_x a_x}{\hbar} + A_2 \cos \frac{p_y a_y}{\hbar}.$$

Видно, что если $A_1 = A_2$, то имеется одна открытая «поверхность» (система прямых линий, проведенных жирно на рис. 1, а); если же $A_1 \neq A_2$, то таких поверхностей целый слой (рис. 1, б).

Заметим, что в трехмерном случае открытые поверхности должны встречаться очень часто. Например, такой «простой» закон дисперсии, как

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left(\cos \frac{p_x a_x}{\hbar} + \cos \frac{p_y a_y}{\hbar} + \cos \frac{p_z a_z}{\hbar} \right) \right\}, \quad (2.2)$$

^{*}) Вырождение вблизи края зоны, т. е. вблизи минимума или максимума, не редкость. Часто оно является следствием симметрии кристалла. При этом вблизи минимума (или максимума) сохраняется квадратичная зависимость от модуля импульса, но усложняется угловая зависимость. Так, энергетический спектр «дырок» в кристаллах Ge и Si имеет вид¹

$$\varepsilon = A p^2 \pm \sqrt{B^2 p^4 + C^2 (p_x^2 p_y^2 + p_x^2 p_z^2 + p_y^2 p_z^2)},$$

где A, B, C — постоянные, $\mathbf{p}_0 = 0$.

приводит к слоям открытых поверхностей, заполняющих примерно $1/3$ объема всей обратной решетки (рис. 2).

Закон дисперсии (2.2) можно трактовать как первые члены разложения общего закона дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$ в ряд Фурье. В теории Ф. Блоха

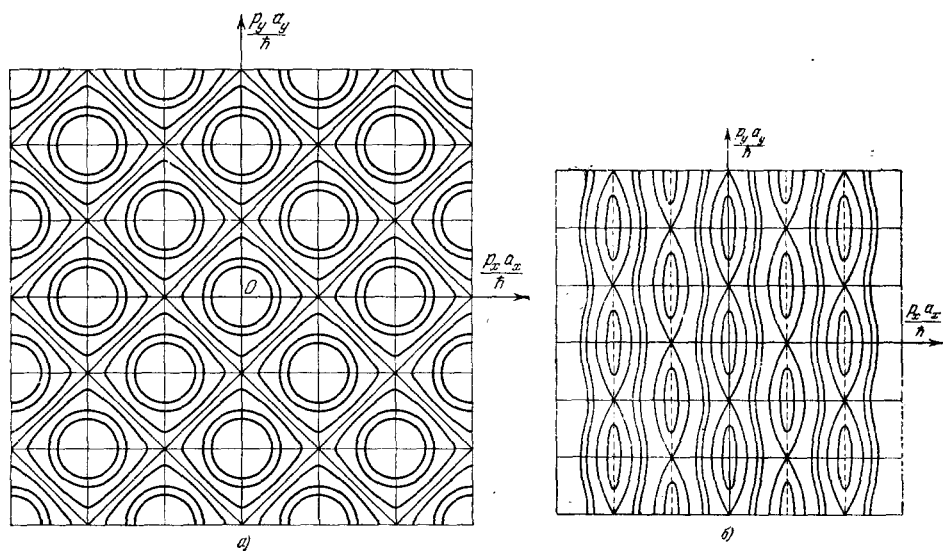


Рис. 1. Линии равных энергий.

Закон дисперсии $\varepsilon = A_1 \cos \frac{p_x a_x}{\hbar} + A_2 \cos \frac{p_y a_y}{\hbar}$. а) $A_1 = A_2$; наклонные прямые линии — «открытые поверхности»; б) $A_1 \neq A_2$; между эллипсами — слои «открытых поверхностей».

этот закон соответствует учету взаимодействия электронов с соседними атомами в простой кубической решетке.

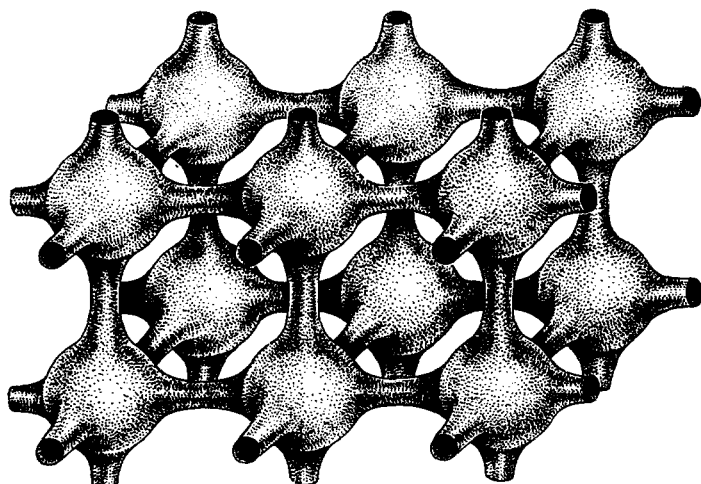


Рис. 2. Типичная открытая изоэнергетическая поверхность (пространственная сетка). Зависимость энергии от квазиимпульса определяется уравнением (2.2).

Как показано в^{2,3}, удержание следующих членов разложения (что соответствовало бы в блоховской теории учету взаимодействия не только с ближайшими атомами, но и с более далекими) приводит к значитель-

ному усложнению изоэнергетических поверхностей. В частности, очень часты случаи изоэнергетических поверхностей сложной связности (рис. 3).

Открытые поверхности могут быть самыми разнообразными — односвязными и многосвязными (некоторые примеры открытых поверхностей изображены на рис. 2 и 4).

Топология изоэнергетических поверхностей, а в некоторых случаях характер кривых, образующихся сечением этих поверхностей плоскостью,

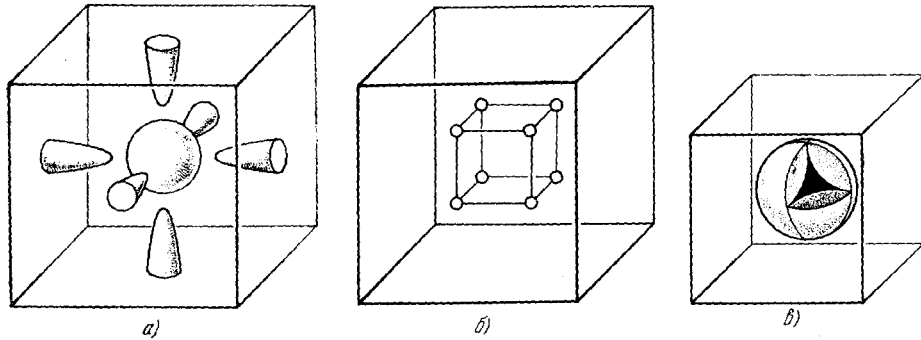


Рис. 3. Изоэнергетические поверхности для закона дисперсии

$$\begin{aligned} \varepsilon = & A_0 + A_1 \left(\cos \frac{p_x a}{\hbar} + \cos \frac{p_y a}{\hbar} + \cos \frac{p_z a}{\hbar} \right) + A_2 \left(\cos \frac{p_x + p_y}{\hbar} a + \cos \frac{p_x + p_z}{\hbar} a + \right. \\ & \left. + \cos \frac{p_y + p_z}{\hbar} a \right) + A_3 \left(\cos \frac{p_x + p_y + p_z}{\hbar} a + \cos \frac{p_x + p_y - p_z}{\hbar} a + \cos \frac{p_x - p_y + p_z}{\hbar} a + \right. \\ & \left. + \cos \frac{p_x - p_y - p_z}{\hbar} a \right) + A_4 \left(\cos \frac{2p_x}{\hbar} a + \cos \frac{2p_y}{\hbar} a + \cos \frac{2p_z}{\hbar} a \right) \end{aligned}$$

при различных значениях параметров A_j и энергии ε . На рис. 3, в изображен случай, когда одна часть изоэнергетической поверхности содержится в другой. Часть внешней поверхности вырезана.

определяют динамику электрона в электрическом и магнитном полях. Поэтому удобно классифицировать поверхности следующим образом:

I. Замкнутые поверхности. Они, естественно, вовсе не содержат открытых плоских кривых.

II. Открытые поверхности:

а) открытые кривые содержатся только при фиксированных направлениях нормали к секущей плоскости или вовсе не содержащие открытых кривых (рис. 4, б, например);

б) имеется одномерное множество (двугранный угол) направлений нормалей к секущим плоскостям, приводящим к открытым кривым (рис. 4, а — «гофрированный» цилиндр; двугранный угол равен 2π);

в) имеется двумерное множество (телесный угол) направлений, приводящих к открытым кривым (рис. 4, в — «гофрированная» плоскость, угол равен 4π , рис. 2 — «пространственная сетка», телесный угол меньше 4π).

В случае сложных изоэнергетических поверхностей направления нормалей к плоскостям, приводящим к открытым сечениям, удобно изображать на стереографической проекции (рис. 5).

Так как энергия ε — периодическая функция квазиимпульса \mathbf{p} , то все \mathbf{p} -пространство можно в соответствии с симметрией класса данного кристалла разбить на области, в которых энергия принимает совпадающие значения. Такие области были введены Бриллюэном при изучении энергетического спектра электронов в слабом периодическом поле и носят название зон Бриллюэна.

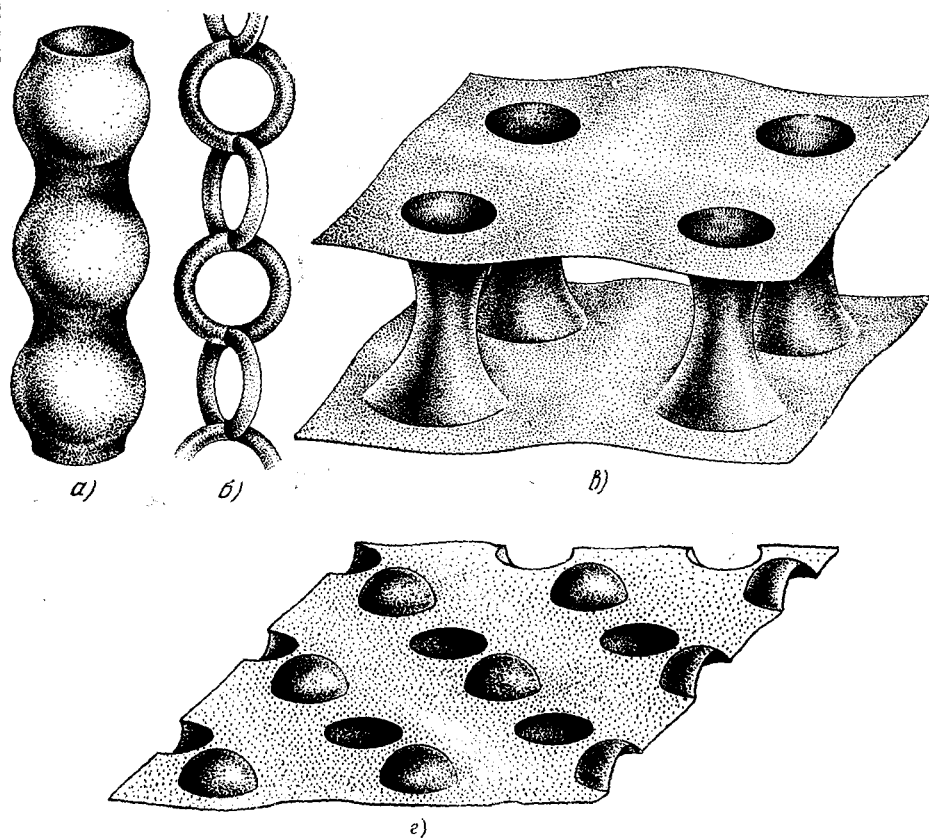


Рис. 4. Возможные типы изоэнергетических поверхностей.

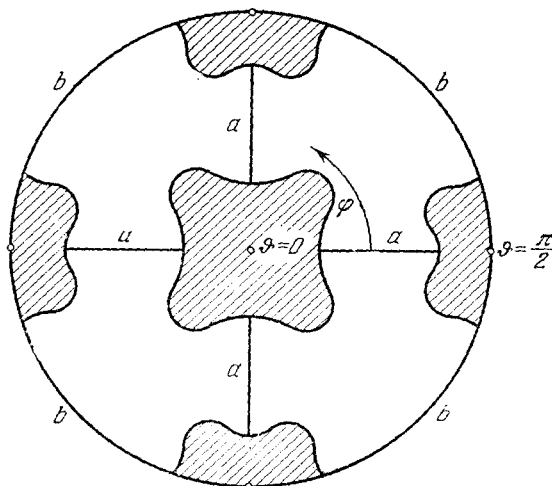


Рис. 5. Стереографическая проекция направлений нормалей к секущим плоскостям, при которых существуют открытые сечения для изоэнергетической поверхности, изображенной на рис. 2. Указанные направления отвечают заштрихованным областям и линиям a и b .

Расположение границ зон, т. е. плоскостей, которые отделяют одну зону Бриллюэна от другой, очень существенно для выяснения характера симметрии изоэнергетических поверхностей. Часто, однако, используя периодичность энергии $\varepsilon(\mathbf{p})$, «сводят» все зоны в одну, т. е. рассматривают квазиимпульс \mathbf{p} как величину, определенную в пределах одной (первой) зоны Бриллюэна, подчеркивая этим отличие квазиимпульса от истинного импульса. При этом, однако, очень трудно рассматривать движение электрона в электрическом и магнитном полях, когда квазиимпульс не сохраняется. Действительно, сразу возникают вопросы: что произойдет с электроном, если он достигнет границы зоны Бриллюэна?

Удобнее считать квазиимпульс электрона определенным во всем пространстве обратной решетки, а его энергию и скорость — периодическими функциями \mathbf{p} .

§ 3. КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА ЧАСТИЦЫ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

Электрон в металле, — несомненно, квантовомеханический объект, т. е. его законы движения могут быть получены только на основании квантовомеханического рассмотрения. В частности, только квантовая механика смогла объяснить «свободу» электрона в металле — его способность двигаться в идеальной решетке без сопротивления. Только квантовая механика позволяет сформулировать такие понятия, как квазичастица, закон дисперсии и т. п. Однако, поскольку они уже сформулированы и можно говорить об электроном в металле, как о частице со сложным законом дисперсии, возникает возможность рассматривать ряд задач чисто классически. Для этого необходимо, чтобы были выполнены следующие условия:

а) длина волны де Бройля электрона должна быть значительно меньше характерной длины, связанной с его (электрона) траекторией; это обычное требование классичности движения, которое вообще позволяет говорить об определенной траектории частицы;

б) длина, характеризующая траекторию частицы, должна быть значительно больше постоянной решетки a , чтобы состояние электрона можно было описывать с помощью квазиимпульса, и, наконец,

в) расстояние между квантовыми уровнями энергии должно быть значительно меньше энергии электрона.

Наиболее важными случаями квантования энергии электрона являются движение электрона в постоянном магнитном поле и движение в потенциальном ящике (тонкая пленка).

Оценим прежде всего, к каким ограничениям на магнитное поле приведут перечисленные условия. Движение электрона со сложным законом дисперсии в магнитном поле нами будет изучено ниже. Здесь (для оценок) мы будем считать, что имеет место квадратичный изотропный закон дисперсии. Тогда радиус орбиты электрона (винтовой линии) $r = \frac{c p}{e H}$, где H — напряженность магнитного поля, и условия а), б) и в) можно записать в виде неравенств

$$\text{а) } \frac{c p}{e H} \gg \frac{\hbar}{p}; \quad \text{б) } \frac{c p}{e H} \gg a; \quad \text{в) } \hbar \omega \ll \varepsilon, \quad \omega = \frac{e H}{m c}. \quad (3.1)$$

Как известно, наибольший интерес представляют электроны, энергия которых близка к граничной энергии Ферми $\varepsilon_0 = \frac{p_0^2}{2m}$, $p_0 = 2\pi\hbar \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{1/3}$, n — плотность электронов. Так как обычно $n \sim 1/a^3$, то $p_0 \sim \hbar/a$. Учитывая это, легко убедиться, что все три неравенства (3.1) совпадают

и практически очень слабо ограничивают величину магнитного поля

$$H \ll \frac{ch}{ea^2} \sim 10^8 \div 10^9 \text{ эрстед.} \quad (3.2)$$

Как видно, в последнее неравенство не входит эффективная масса. Мы увидим дальше, что оно имеет общее (для электронов с произвольным законом дисперсии) значение.

Аналогичным образом легко убедиться, что движение электрона в пленке можно считать классическим, если толщина пленки значительно больше межатомных расстояний ($d \gg a$)*.

В настоящем параграфе мы будем предполагать условия (3.1) выполненными, что позволяет рассмотреть движение электрона с произвольным законом дисперсии классически. При этом естественно не делать различия между квазимпульсом и импульсом. Это законно, если не учитывать специфически квантового эффекта переходов между энергетическими зонами.

Если металл помещен в электрическое, или магнитное поле, состояние электрона с определенным импульсом не является стационарным — импульс его изменяется со временем. Наша задача найти, каким уравнением описывается это изменение. Удобнее всего исходить из гамильтонова формализма. Если электрическое и магнитное поля описывать векторным и скалярным потенциалами \mathbf{A} и φ , то функция Гамильтона электрона может быть записана следующим образом:

$$H = \varepsilon \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + e\varphi. \quad (3.3)$$

Здесь $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$ — обобщенный импульс электрона (\mathbf{p} — его кинематический импульс). Уравнения движения имеют обычный вид:

$$\dot{\mathbf{P}} = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}; \quad \dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}}. \quad (3.4)$$

Так как $\dot{\mathbf{r}}$ — это скорость электрона \mathbf{v} , а от координат зависят только векторный и скалярный потенциалы, то учитывая, что

$$\mathbf{E} = - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi; \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A},$$

из (3.4) легко получаем

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right\}; \quad \mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} \quad (3.5)$$

— обобщенное уравнение Лоренца. Оно отличается от обычного уравнения Лоренца тем, что скорость электрона \mathbf{v} — сложная периодическая функция кинематического импульса \mathbf{p} . Это, как мы увидим ниже, придает много своеобразия движению электронов в металле.

Рассмотрим сначала движение в постоянном однородном электрическом поле.

Так как магнитное поле равно нулю, то

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}.$$

*) Следует сделать одно замечание. Квантовомеханические эффекты, связанные с дискретностью уровней энергии, могут проявляться не только в движении одного электрона, но и в поведении газа или коллектива электронов. Если мы будем интересоваться макроскопическими характеристиками такого газа, то условие его классичности значительно жестче, чем выписанные выше. Для возможности пренебрегать квантовыми эффектами в этом случае необходимо, чтобы расстояния между уровнями энергии были значительно меньше kT , т. е. необходимо, чтобы магнитное поле H было значительно меньше $kT/\mu \sim 10^4$ эрстед (при $T = 1^\circ \text{ K}$, μ — магнетон Бора), а толщина пленки значительно больше $a(e_0/kT)$.

Если напряженность электрического поля E не зависит от координат, то электрон в пространстве импульсов движется с постоянной «скоростью»

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + eE\mathbf{t}.$$

Интересно отметить, что движение электрона проводимости в постоянном и однородном электрическом поле финитно вдоль поля. Действительно, из закона сохранения энергии следует, что

$$\varepsilon - eE\mathbf{r} = \text{const.}$$

Так как ε — ограниченная функция \mathbf{p} , то отсюда ясно, что электрон будет совершать вдоль поля финитное движение

$$e(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)E = \varepsilon(\mathbf{p}_0 + eE\mathbf{t}) - \varepsilon(\mathbf{p}_0).$$

Если направление поля совпадает с одним из кристаллографических направлений, то электрон совершает колебания с частотой $\omega_E = \frac{2eE}{\Delta p_E}$, где Δp_E — период функции $\varepsilon(\mathbf{p})$ в направлении электрического поля. Так как $\Delta p_E \sim \frac{2\pi\hbar}{a}$ (a — параметр решетки), то $\omega_E \sim \frac{eEa}{\hbar}$. Амплитуда колебаний при этом равна $\Delta\varepsilon/eE$ ($\Delta\varepsilon$ — ширина энергетической зоны). В общем случае, когда направление поля не совпадает с одним из кристаллографических направлений, движение электрона близко к периодическому. При разумных значениях поля амплитуда колебаний электрона в электрическом поле чрезвычайно велика, в миллионы раз больше длины свободного пробега ($\Delta\varepsilon/eE \sim 10^6$ см при $E \sim 10^{-8}$ CGSE*), а $\Delta\varepsilon \sim 10^{-12}$ эрг). Поэтому при расчете сопротивления металла и в других аналогичных случаях периодический характер движения электронов можно не учитывать. На малых участках пути электрон, естественно, движется поступательно.

Может возникнуть вопрос: как совершается предельный переход от электрона в металле (скажем для простоты, в периодическом поле $V(\mathbf{r})$ кристаллической решетки) к свободному электрону при стремлении периодического потенциала к нулю? Как движение из финитного, периодического, становится инфинитным? Для того чтобы ответить на этот вопрос, надо вспомнить, что под действием электрического поля возможны переходы из одной зоны в другую⁴, причем при $V \rightarrow 0$ разрывы между зонами стремятся к нулю, а вероятность перехода стремится к единице.

Отметим, наконец, что анизотропный характер закона дисперсии приводит к тому, что в плоскости, перпендикулярной приложенному полю, электрон движется не как свободный: его скорость в этой плоскости изменяется с изменением проекции импульса на электрическое поле. Это одна из элементарных причин анизотропии сопротивления, теплопроводности и других кинетических коэффициентов.

Изучим теперь движение в постоянном и однородном магнитном поле ($E = 0$, $H \neq 0$).

Уравнения Лоренца в этом случае имеют следующий вид:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}H]. \quad (3.6)$$

Умножая его один раз скалярно на \mathbf{v} , а другой раз на \mathbf{H} , заключаем, что, как и в случае свободного электрона, при движении в магнитном

*) $E = 10^{-8}$ CGSE соответствует плотности тока в металле $j = 10^2 \left(\frac{a}{\text{см}^2} \right)$ при удельном сопротивлении $\rho = 10^{-8}$ ом см.

поле электрона проводимости сохраняется энергия электрона ε ($d\varepsilon = v dp$) и составляющая импульса p_z вдоль магнитного поля. Если выбрать ось z вдоль магнитного поля, то получим

$$\varepsilon = \text{const}, \quad p_z = \text{const}. \quad (3.7)$$

Равенства (3.7) описывают траекторию электрона в импульсном пространстве. В зависимости от топологии изоэнергетической поверхности она может быть либо замкнутой (т. е. распадающейся на замкнутые кривые, расположенные каждая в пределах одной ячейки обратной решетки *), либо открытой (т. е. непрерывно проходящей через всю обратную решетку). Классификация различных кривых приведена в § 2.

В настоящем параграфе мы не учитываем квантовых переходов, сопровождающихся скачкообразным изменением квазиимпульса. Поэтому мы должны считать, что электрон движется по одной из замкнутых кривых, описываемых уравнениями (3.7). Если кривая (3.7) не распадается на замкнутые кривые, а непрерывно проходит через всю обратную решетку, то электрон, естественно, совершает инфинитное движение в обратной решетке.

Положение электрона на траектории (3.7) в импульсном пространстве удобно определять, задав время обращения, отсчитываемое от какой-либо произвольной точки на траектории.

Проектируя уравнение (3.6) на плоскость (x, y) , получаем

$$\frac{dl}{dt} = -\frac{eH}{c} v_{\perp}. \quad (3.8)$$

Здесь dl — элемент дуги на кривой (3.7), а $v_{\perp} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$. Напомним, что ось z совпадает с направлением магнитного поля. Знак минус выбран в связи с тем, что заряд электрона принято считать отрицательным $-e > 0$.

Интегрирование уравнения (3.8) даст

$$t = -\frac{c}{eH} \int \frac{dl}{v_{\perp}}. \quad (3.9)$$

Если кривая (3.7) замкнутая, то электрон в магнитном поле, очевидно, совершает периодическое движение с периодом

$$T_H = -\frac{c}{eH} \oint \frac{dl}{v_{\perp}}. \quad (3.10)$$

Это выражение можно преобразовать, воспользовавшись тем обстоятельством, что \mathbf{v}_{\perp} (вектор с компонентами v_x и v_y) — нормаль к плоской кривой (3.7). Обозначим через $S(\varepsilon, p_z)$ площадь, ограниченную одной из кривых (3.7) (речь идет о замкнутых непересекающихся кривых).

Так как

$$S(\varepsilon, p_z) = \iint dp_x dp_y = \int d\varepsilon \oint \frac{dl}{v_{\perp}},$$

то

$$\oint \frac{dl}{v_{\perp}} = \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}, \quad (3.11)$$

*) Заметим, что в тех случаях, когда плоскость (x, y) не совпадает ни с одной из кристаллографических плоскостей, кривые, расположенные в различных ячейках обратной решетки, не тождественны. Это, очевидно, не противоречит периодичности функции $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$.

откуда ^{5.6}

$$T_H = -\frac{c}{eH} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}. \quad (3.12)$$

Величину $\frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} = m^*$ естественно назвать эффективной массой электрона в магнитном поле; m^* — функция сохраняющихся в магнитном поле величин (ε, p_z) , что делает ее использование значительно более удобным, чем использование обычного тензора обратных эффективных масс (см. § 1), который в общем случае зависит от всех компонент вектора \mathbf{p} .

Период и частота обращения электрона имеют вид, совпадающий с выражениями для периода обращения и частоты свободного электрона:

$$T_H = -\frac{2\pi m^* c}{eH}, \quad \omega_H = -\frac{eH}{m^* c}. \quad (3.12')$$

Отсюда ясно, что для свободного электрона $m^* = m$. Действительно, если $\varepsilon = p^2/2m$, то кривая (3.7) — окружность; она ограничивает круг, площадь которого равна $S = \pi(2m\varepsilon - p_z^2)$. Отсюда $\frac{\partial S}{\partial \varepsilon} = 2\pi m$.

Так как эффективная масса m^* зависит от ε и p_z , то, естественно, она различна для различных электронов в металле. Поэтому в отличие от газа свободных электронов газ электронов проводимости не вращается в магнитном поле с общей для всех электронов частотой. Разные электроны совершают различные периодические движения. Те электроны, которые движутся по открытым траекториям в плоскости, перпендикулярной магнитному полю (в пространстве импульсов), совершают инфинитное движение.

Мы до сих пор не обращали внимания на направление движения электрона, которое, очевидно, определяется взаимным направлением векторов \mathbf{v}_\perp и \mathbf{p}_\perp . Из уравнения (3.6) легко показать, что направление движения связано со знаком эффективной массы: если $m^* > 0$, то электрон движется по левому винту (как свободный электрон), а если $m^* < 0$ — по правому, как положительно заряженная частица. При этом эффективной массе приписывается знак производной $\frac{\partial S}{\partial \varepsilon}$, который, очевидно, зависит от того, будет ли энергия внутри поверхности $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon$ меньше, или больше ε . В первом случае производная $\frac{\partial S}{\partial \varepsilon} > 0$, а значит, и эффективная масса m^* положительна, во втором — отрицательна *).

Подчеркнем еще, что для открытых траекторий естественное понятие эффективной массы в магнитном поле, связанное с периодом обращения по орбите, ввести нельзя. Однако можно установить правило для определения направления движения электрона, справедливое и для замкнутых, и для открытых траекторий: электрон движется так, что справа от направления движения электрона в каждой точке траектории всегда расположена область с меньшей энергией.

Мы до сих пор говорили о движении электрона в пространстве импульсов. Из уравнения Лоренца видно, что траектория электрона в пространстве импульсов тесно связана с проекцией траектории электрона в обычном пространстве на плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Действительно из уравнения (3.6) видно, что скорость электрона в магнитном поле перпендикулярна «скорости» в пространстве

*) Как мы увидим ниже, зависимость направления вращения электрона проводимости от закона дисперсии — естественное объяснение аномального знака эффекта Холла у многих металлов и полупроводников.

импульсов $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{e}{c} \left[\frac{d\mathbf{r}}{dt}, \mathbf{H} \right]$. А это значит, что истинная траектория электрона получается из его траектории в пространстве импульсов путем поворота на угол $\pi/2$ и изменением масштаба (умножением на c/eH). В частности, это означает, что период и частота движения электрона в обычном пространстве равны T_H и ω_H .

Движению электрона проводимости в магнитном поле присущи интересные особенности, если его изоэнергетическая поверхность открытая. Так, например, его траектория в пространстве импульсов может быть открытой, но это значит, что в обычном пространстве электрон в плоскости, перпендикулярной полю, совершает пифинитное движение, уходит на бесконечность. При этом возможны случаи, когда вдоль магнитного поля электрон совершает финитное движение (или вовсе поконится).

Открытые траектории (или открытые сечения) возможны, естественно, только для электронов, находящихся на открытых изоэнергетических поверхностях. Однако и в этих случаях сечения, как мы уже говорили, могут быть либо открытыми, либо замкнутыми, в зависимости от направления магнитного поля и величины p_z .

Выясним, по какому закону обращается в бесконечность период движения электрона по траектории при изменении параметров движения (направления магнитного поля либо p_z). При этом следует иметь в виду, что период обращается в бесконечность в двух различных случаях.

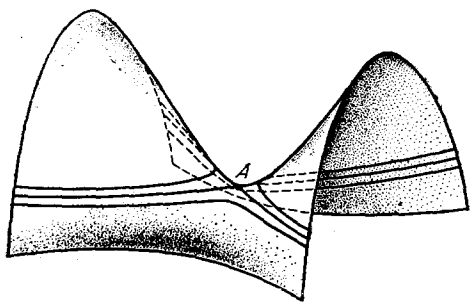


Рис. 6. Траектории электрона в магнитном поле вблизи седловой точки на изоэнергетической поверхности. Точка А—седловая точка.

Первый случай имеет место тогда, когда при изменении какого-либо из параметров (ϵ , p_z , направления магнитного поля) траектория электрона приближается к седловой точке (рис. 6, точка А). Другой случай имеет место тогда, когда электрон находится на изоэнергетической поверхности типа «гофрированный цилиндр» и переход к инфинитному движению происходит за счет приближения угла между осью «цилиндра» и магнитным полем к прямому (рис. 8)*). Рассмотрим сначала первый случай.

В седловой точке (точка А на рис. 6) скорость электрона $\mathbf{v} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}}$ равна нулю. Поэтому при движении по траектории, проходящей через седловую точку, электрон асимптотически приближается к ней. Электрон, который находится в седловой точке, вовсе не движется. Отсюда ясно, что электроны, которые движутся по траектории, проходящей вблизи седловой точки (рис. 6, 7), большую часть времени проводят вблизи седловой точки. Это означает, что величина периода в основном определяется характером движения электрона вблизи особенности. Около седловой точки уравнение траектории электрона в магнитном поле (в импульсном пространстве) при соответствующем выборе осей в общем случае имеет вид

$$\epsilon - \epsilon_0(p_z) = \frac{1}{2} \left(\frac{p_1^2}{m_1} - \frac{p_2^2}{m_2} \right). \quad (3.13)$$

Здесь $\epsilon_0(p_z)$ — значение энергии в седловой точке, положение осей 1

*) Конечно, изоэнергетическая поверхность может быть значительно сложнее; гофрированный цилиндр при этом представляет деталь поверхности.

и 2 ясно из рис., 7 ось z , как всегда, направлена по магнитному полю; $\frac{1}{m_1}$ и $\frac{1}{m_2}$ — значения соответствующих вторых производных от ϵ по p в седловой точке ($m_1, m_2 > 0$). Согласно (3.10) период движения электрона равен

$$T_H = \frac{c}{|e|H} \oint \frac{dl}{v_{\perp}}.$$

Так как по большей части траектории движение происходит с конечной скоростью, а вблизи точки A с бесконечно малой, то

$$T_H \cong \frac{c}{|e|H} \int_{-p_0}^{p_0} \sqrt{\frac{1 + \left(\frac{dp_1}{dp_2}\right)^2}{v_1^2 + v_2^2}} dp_2 \cong \frac{2c}{|e|H} \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{m_2}} \int_0^{p_0} \frac{dp_2}{\sqrt{\frac{p_1^2}{m_1^2} + \frac{p_2^2}{m_2^2}}} \quad (3.14)$$

(p_0 — значение p_2 , при котором траектория существенно удалена от седловой точки, рис. 6, 7).

Из (3.13)

$$\frac{p_1^2}{m_1} = 2\Delta\epsilon + \frac{p_2^2}{m_2},$$

$$\Delta\epsilon = \epsilon - \epsilon_0(p_z).$$

Отсюда и из (3.14) имеем

$$T_H \cong \frac{2c}{|e|H} \sqrt{m_1 m_2} \left| \ln \frac{\Delta\epsilon}{\epsilon} \right|. \quad (3.15)$$

Таким образом, при приближении траектории к седловой точке период логарифмически возрастает. Из вывода формулы (3.15) ясно, что приближение к особенности может при этом происходить как за счет изменения энергии ϵ (рассмотренный здесь случай), так и за счет изменения p_z либо направления магнитного поля.

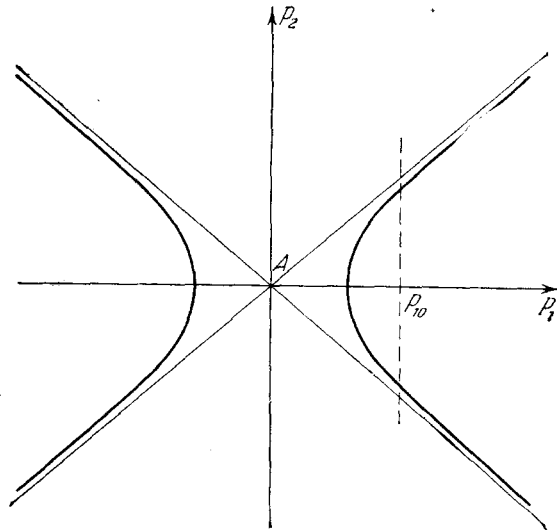


Рис. 7. Траектории электрона вблизи седловой точки. В точке A (седловая точка) скорость равна нулю.

Рассмотрим теперь случай «гофрированного» цилиндра. Для прямого (не гофрированного) цилиндра при уменьшении угла $\phi = \pi/2 - \vartheta$ (ϑ — угол между осью цилиндра и магнитным полем) период возрастал бы обратно пропорционально $\sin \phi \sim \phi$. Однако наличие гофрировки существенно меняет дело. Легко видеть, что при приближении угла ϑ между осью цилиндра и магнитным полем к прямому траектория обязательно проходит через седловые точки (рис. 8). При приближении к седловой точке период логарифмически обращается в бесконечность. В связи с этим характер угловой зависимости периода оказывается очень сложным: на зависимость по закону $1/\phi$ накладывается логарифмическая зависимость, как это показано на рис. 9. Точки, в которых период обращается в бесконечность, соответствуют тем значениям угла, при которых траектория проходит через седловые точки.

Рассмотрим теперь движение электрона проводимости в скрещенных электрическом и магнитном полях, которые для простоты будем

предполагать перпендикулярными друг другу. Известно, что свободный электрон, помещенный в скрещенное поле, дрейфует в направлении, перпендикулярном и электрическому, и магнитному полям. Скорость

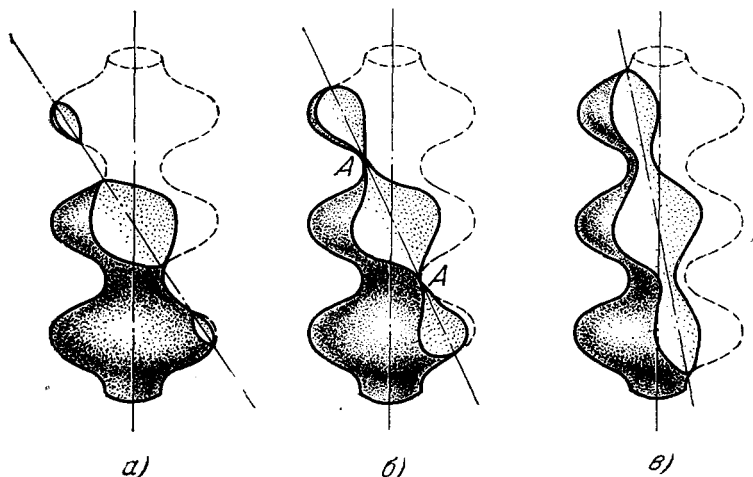


Рис. 8. Изменение характера траектории электрона в зависимости от угла между магнитным полем и осью гофрированного цилиндра. Точки A —седловые точки.

дрейфа, т. е. средняя скорость движения электрона, при этом равна*)

$$v_0 = \frac{c}{H^2} [\mathbf{E} \mathbf{H}]. \quad (3.16)$$

Посмотрим, как обстоит дело с электроном с произвольным законом дисперсии. С помощью (3.16) уравнение (3.5) можно записать следующим образом:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v} - \mathbf{v}_0, \mathbf{H}]. \quad (3.17)$$

Усредняя это уравнение по времени, видим, что в тех случаях, когда траектория в пространстве импульсов замкнутая, $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = 0$ и средняя скорость в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, совпадает с \mathbf{v}_0 , как и у свободного электрона, т. е.

$$\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{v}_0 + \mathbf{v}_{\parallel}, \quad \mathbf{v}_{\parallel} = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{v} \mathbf{H})}{H^2}.$$

Рис. 9. Зависимость периода обращения электрона от угла между магнитным полем и осью цилиндра (ср. с рис. 8). Пунктирная линия отвечает негофрированному цилиндру.

Однако в тех случаях, когда траектория открытая, $\frac{d\mathbf{p}}{dt} \neq 0$ и $\mathbf{v}_{\perp} \neq \mathbf{v}_0$. Следует подчеркнуть, что речь здесь идет не о траектории в магнитном поле, а о траектории в скрещенных полях.

*) Импульс электрона (а значит, и его скорость) в направлении магнитного поля при этом, естественно, сохраняется. Поэтому истинная средняя скорость направлена под углом к магнитному полю.

Из уравнения (3.17) видно, что движение в скрещенных полях частицы с законом дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$ можно трактовать как движение только в магнитном поле частицы с законом дисперсии

$$\varepsilon^*(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) - \mathbf{v}_0 \mathbf{p}. \quad (3.18)$$

Уравнения траектории в импульсном пространстве в этом случае имеют вид

$$\varepsilon(\mathbf{p}) - \mathbf{v}_0 \mathbf{p} = \text{const}, \quad p_z = \text{const}. \quad (3.19)$$

Легко видеть, что даже тогда, когда траектория в магнитном поле замкнута, траектория (3.19) в скрещенных полях может быть открытой*). Зная траекторию в пространстве импульсов, легко построить траекторию электрона проводимости в координатном пространстве, если заметить, что из закона сохранения энергии

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \mathbf{v} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{v}\mathbf{E}$$

следует, что скорость \mathbf{v} всегда перпендикулярна вектору

$$\frac{d\mathbf{p}^*}{dt}, \quad \text{где } \mathbf{p}^* = \mathbf{p} - e\mathbf{E}t.$$

В тех случаях, когда траектория электрона в импульсном пространстве — замкнутая кривая, легко определить период обращения электрона T_{EH} . Из (3.17) ясно, что так же, как в отсутствие электрического поля,

$$T_{EH} = -\frac{c}{eH} \frac{\partial S^*}{\partial \varepsilon^*};$$

здесь S^* — площадь, ограниченная кривой, определенной уравнением (3.19). $\frac{\partial S^*}{\partial \varepsilon^*}$ в общем случае зависит от электрического поля. Интересно отметить, что эта зависимость исчезает при квадратичном законе дисперсии. Электрическое поле практически всегда мало по сравнению с магнитным ($E/H \ll 1$). Воспользовавшись этим, можно определить явную зависимость периода обращения от электрического поля:

$$T_{EH} \approx T_H \left\{ 1 - \frac{\mathbf{v}_0}{eHT_H} \oint \frac{dl}{v_{\perp}^2} \left(\mathbf{n} + \frac{\mathbf{p}}{R} \right) \right\}; \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{v}_{\perp}}{v_{\perp}}.$$

Здесь R — радиус кривизны траектории в магнитном поле; интегрирование ведется по траектории в магнитном поле.

В заключение этого параграфа отметим, что при расчете электропроводности металла в магнитном поле оказывается возможным рассматривать электрическое поле как возмущение. Свойства металла в скрещенных полях поэтому определяются динамикой электрона проводимости только в магнитном поле.

§ 4. СТОЛКНОВЕНИЕ КВАЗИЧАСТИЦ. РАССЕЯНИЕ

В предыдущем параграфе мы рассмотрели классическое движение электрона проводимости в электрическом и магнитном полях. Поля при этом предполагались такими, чтобы характерные размеры траектории квазичастиц были значительно больше атомных размеров: это и позволило говорить об определенной траектории электрона проводимости. Но такими движениями не исчерпываются все возможные изменения, которые претерпевает электрон проводимости. В результате взаимодей-

*) Только наличием открытых траекторий можно объяснить тот факт, что полный ток целиком заполненной энергетической зоны равен нулю в скрещенных полях.

ствия с различного рода неоднородностями кристалла, размеры которых порядка размеров ячейки a , электрон резко (на расстояниях порядка a) изменяет свое состояние: меняются его импульс и энергия. В таких случаях говорят о столкновениях электрона с локальными нарушениями периодичности кристалла.

Некоторые важные выводы о рассеянии электрона можно получить, используя только законы сохранения, хотя вопрос об эффективном поперечнике рассеяния не может быть решен в общем случае: сечение существенно зависит от структуры локальной неоднородности, т. е. от вида потенциальной энергии электрона вблизи этой неоднородности.

Заметим, что даже в механике классической частицы эффективное сечение рассеяния вычисляется до конца только в простейшем случае

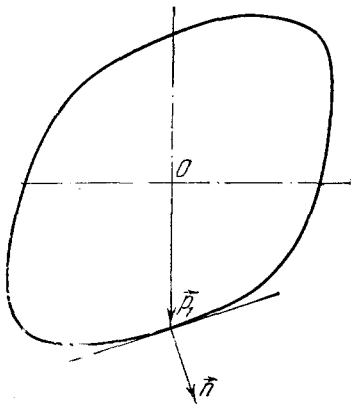


Рис. 10а. Определение импульса, рассеянного в направлении \mathbf{p} электрона. Точка p_1 есть точка касания опорной направлению \mathbf{p} плоскости с изоэнергетической поверхностью $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$.

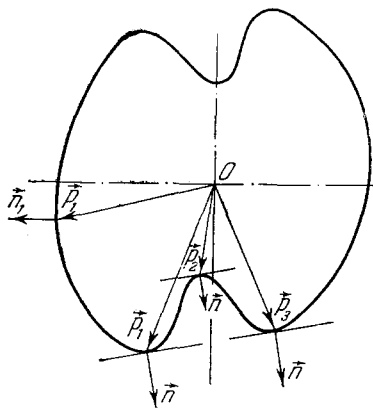


Рис. 10б. Определение импульсов электронов, рассеянных в направлениях \mathbf{p} и \mathbf{p}_1 . Видно, что усложнение геометрии изоэнергетической поверхности приводит к появлению в некоторых направлениях нескольких значений \mathbf{p} , отвечающих данному направлению рассеяния.

поля с центральной симметрией. Здесь же анизотропия кристалла делает эту задачу значительно более сложной *).

Как правило, локальные неоднородности кристалла — это атомы примеси (в частном случае изотопической) либо нарушения типа вакансий или дислокаций. Их подвижность значительно меньше подвижности электронов (они тяжелы). Поэтому рассеяние на таких неоднородностях надо рассматривать, как рассеяние на силовом центре. При этом, если столкновение упругое (а мы будем рассматривать только такие столкновения), то квазиимпульс электрона изменяется, а энергия сохраняется. Сложный закон дисперсии приводит к своеобразному явлению: угол рассеяния определяется направлением скорости (а не направлением импульса) электрона после столкновения. При этом, если изоэнергетическая поверхность в пространстве импульсов выпуклая, то каждому значению скорости соответствует одно значение импульса (его находиме ясно из рис. 10а), если же геометрия изоэнергетической поверх-

*) Квантовомеханическая задача о рассеянии частиц с произвольным законом дисперсии рассматривается в § 7.

ности более сложна, то обязательно существуют такие направления, рассеяние в которых отличается необычным для свободных частиц свойством — одному и тому же значению угла рассеяния отвечают несколько значений импульса рассеянной частицы (см. рис. 106). Каков будет импульс рассеянного электрона в действительности, в рамках классической теории рассеяния сказать нельзя. При квантовомеханическом рассмотрении можно вычислить вероятность рассеяния в данном направлении и с данным значением квазиимпульса (§ 7).

Кроме столкновений с локальными неоднородностями, электроны проводимости в металле могут также «сталкиваться» с другими квазичастицами (с электронами же, с фононами, со спиновыми волнами и др.). При таких столкновениях должны, естественно, выполняться законы сохранения квазиимпульса и энергии

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_e + 2\pi\hbar\mathbf{b}, \quad \varepsilon_i = \varepsilon_e;$$

\mathbf{b} — вектор обратной решетки, \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_e — сумма квазиимпульсов частиц до и после столкновения соответственно; например, для столкновения двух электронов $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_{1i} + \mathbf{p}_{2i}$, ... и ε_i , ε_e — энергия частиц до и после столкновения.

Следует иметь в виду, что числа бозонов до и после «столкновения» могут быть различными: возможны рождение и гибель фононов, спиновых волн и других квазичастиц. Число электронов в таких взаимодействиях сохраняется, если в металле нет фермионов другого знака (дырок)*), которые играют роль античастиц для электронов.

Если в металле имеются или могут возникать «дырки», то электроны и «дырки» гибнут и рождаются парами, так что разность между числами электронов и «дырок» остается постоянной.

§ 5. КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ УРОВНИ ЭНЕРГИИ

Квантовая механика электрона проводимости строится в последующих разделах. Здесь мы остановимся только на вычислении квазиклассических уровней энергии в ряде существенных случаев.

Очевидно, квантование энергии будет происходить тогда, когда электрон по какой-либо из степеней свободы совершает финитное движение.

Наиболее важным случаем финитного движения электрона, несомненно, является движение в магнитном поле.

В связи с изучением диамагнетизма электронного газа и эффекта де Гааза — ван Альфена теоретическому рассмотрению поведения электронов в магнитном поле посвящено большое число работ, которые восходят к работе Л. Ландау 1930 г. В этой работе показано, что уровни энергии свободного электрона в магнитном поле \mathbf{H} , направление которого выбрано за ось z , имеют вид

$$\varepsilon_{n, p_z} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_H + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (5.1)$$

Здесь

$$\omega_H = \frac{eH}{mc}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

Возникновение дискретных уровней энергии при фиксированном значении p_z , очевидно, связано с тем, что в плоскости (x, y) , перпендикулярной магнитному полю, электрон совершает финитное периодическое движение. Но, как выяснено в § 3, это свойство остается у электрона

*) Строгое введение понятия «дырка» будет дано во второй части обзора.

со сложным законом дисперсии, если его траектория в импульсном пространстве — замкнутая кривая.

Для вычисления квазиклассических уровней энергии мы можем воспользоваться правилами квантования Бора

$$\oint P_i dQ_i = n_i h, \quad (5.3)$$

где Q_i и P_i — сопряженные координата и импульс электрона, а n_i — целые числа. В этом пункте, как и в предыдущем, мы не будем делать различия между квазиимпульсом и импульсом. Пределы применимости полученных результатов будут выяснены ниже.

Итак, определим уровни энергии электрона с законом дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$ в магнитном поле \mathbf{H} , параллельном оси z . Если выбрать векторный потенциал в форме

$$A_x = -Hy, \quad A_y = A_z = 0,$$

то проекция импульса P_x сохраняется, а условие (5.3) можно записать для движения вдоль оси y :

$$\oint P_y dy = nh. \quad (5.4)$$

Интегрирование ведется по классической траектории частицы, т. е. P_y , как функция y , должна вычисляться при определенных значениях проекции импульса p_z и энергии частицы ε .

Рассматривая (5.4) как уравнение, в котором энергия является неизвестным, и решая его, можно определить уровни энергии электрона в магнитном поле. Однако удобно несколько преобразовать уравнение (5.4), записав его в более симметричной форме. Для этого перейдем от интегрирования по y к интегрированию по кинетическому импульсу p_x :

$$p_x = P_x + \frac{e}{c} Hy. \quad (5.5)$$

Так как $dy = \frac{c}{eH} dp_x$, а $P_y = p_y$, то из (5.4) имеем

$$\oint p_y dp_x = \frac{eH}{c} nh,$$

где интегрирование ведется по траектории электрона в импульсном пространстве. Интеграл в последнем равенстве определяет площадь $S(\varepsilon, p_z)$ сечения изоэнергетической поверхности плоскостью, перпендикулярной магнитному полю, так что условие для определения квазиклассических уровней энергии электрона проводимости можно записать следующим образом ^{7, 8, 9}:

$$S(\varepsilon, p_z) = \frac{eHh}{c} n. \quad (5.6)$$

Уровни энергии ε_{n, p_z} , конечно, не зависят от того, в какой форме взят векторный потенциал \mathbf{A} . Это отчетливо видно по инвариантной форме уравнения (5.6), в котором оси x и y не выделены.

Если

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m^*},$$

то

$$S(\varepsilon, p_z) = \pi(2m^*\varepsilon - p_z^2),$$

и мы приходим к формуле (5.4) (с точностью до $1/2$ в первом слагаемом*):

$$\varepsilon = \hbar \omega_H + \frac{p_z^2}{2m^*}, \quad \omega_H = \frac{eH}{m^*c}. \quad (5.7)$$

Если закон дисперсии квадратичен, но анизотропен, то формула (5.7) остается в силе. Однако под эффективной массой надо понимать величину, зависящую от углов между магнитным полем и осями тензора эффективных масс:

$$m^* = \left(\frac{\alpha_1^2}{m_1 m_3} + \frac{\alpha_2^2}{m_1 m_3} + \frac{\alpha_3^2}{m_1 m_2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.8)$$

(m_j — главные значения тензора эффективных масс, а α_j — направляющие косинусы магнитного поля ($\sum_{j=1}^3 \alpha_j^2 = 1$)).

Используя уравнение (5.6) для определения уровней энергии, вычислим расстояния между уровнями энергии $\Delta\varepsilon$. Так как в квазиклассике можно рассматривать только высокие уровни энергии, то $n \gg 1$, а значит, $\Delta\varepsilon \ll \varepsilon$. Поэтому из (5.6) имеем

$$\Delta\varepsilon = \frac{2\pi |e| \hbar H}{c \left(\frac{\partial S}{\partial \varepsilon} \right)}. \quad (5.9)$$

Учтя определение эффективной массы

$$m^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}, \quad (5.10)$$

имеем

$$\Delta\varepsilon = \frac{|e| \hbar H}{m^* c} = \hbar \omega_H, \quad (5.11)$$

где ω_H — частота обращения электрона в магнитном поле (3.12'). Последнее равенство вполне естественно — это частный случай общего принципа соответствия: в квазиклассическом приближении расстояние между уровнями совпадает с классической частотой периодического движения. Заметим, что в отличие от уровней энергии свободного электрона уровни электрона проводимости в магнитном поле не эквидистантны: эффективная масса m^* , а значит, и частота ω_H зависят от энергии ε и от p_z . Различие между свободным электроном и электроном проводимости особенно отчетливо проявляется в связи с существованием открытых поверхностей и открытых сечений, — квантуется движение отнюдь не всех электронов в металле, а только тех, для которых $\frac{\partial S}{\partial \varepsilon} \neq \infty$.

Появление или отсутствие дискретных уровней энергии определяется не только изоэнергетической поверхностью, на которой находится электрон, но и направлением магнитного поля, а при фиксиро-

*) Квазиклассические уровни энергии совпадают с истинными при больших n ($n \gg 1$). Более точные значения энергии можно получить, если вместо формулы (5.3) пользоваться уточненными условиями квантования

$$\oint P_i dQ_i = (n + \gamma) \hbar, \quad (5.3')$$

где $0 < \gamma < 1$. Однако значение γ может быть получено только при конкретизации закона дисперсии и выяснении характера движения электрона вблизи точки поворота. Для квадратичного закона дисперсии $\gamma = 1/2$, и, исходя из (5.3'), можно получить точные уровни энергии в этом частном случае.

ванном поле — величиной p_z . Переход от замкнутых траекторий к открытым рассмотрен подробно в § 3.

Полученные здесь формулы для энергии электрона в магнитном поле показывают, что имеющее место в случае свободного электрона бесконечнократное вырождение — независимость уровней энергии от сохраняющейся компоненты импульса P_x — имеет место в квазиклассическом приближении и в случае электрона с произвольным законом дисперсии. Однако, как будет видно ниже, это вырождение снимается при учете различия между импульсом и квазиимпульсом. Иначе говоря, имеется небольшое размытие уровней энергии (5.6) за счет зависимости ϵ от P_x . Физически эта зависимость связана с тем, что P_x определяет положение траектории электрона в пространстве (в случае свободного электрона cP_x/eH — центр орбиты на плоскости (x, y) , по которой вращается электрон). Если в свободном пространстве (для свободного электрона) все точки пространства эквивалентны (магнитное поле предполагается однородным), то в периодической структуре, которой является кристалл, эта однородность, естественно, отсутствует²².

В тех случаях, когда траектория электрона в импульсном пространстве в магнитном поле открытая, квазиклассическое распределение не приводит к квантованию энергии. Однако, как будет видно из дальнейшего, более строгое рассмотрение показывает, что благодаря периодической зависимости энергии от квазиимпульса возникают своеобразные разрывы в непрерывном спектре электрона.

Можно было бы, воспользовавшись различными выражениями для закона дисперсии, определять явную зависимость энергии электрона от магнитного поля и квантовых чисел (p_z, n) . В этом, однако, нет необходимости, так как все макроскопические характеристики металла могут быть выражены через S и $\frac{\partial S}{\partial \epsilon}$. Заметим, между прочим, что для нахождения большого числа макроскопических характеристик металла в магнитном поле достаточно знания квазиклассических уровней энергии.

В § 3 было показано, что движение в скрещенных электрическом и магнитном полях можно трактовать как движение частицы с законом дисперсии

$$\epsilon^*(\mathbf{p}) = \epsilon(\mathbf{p}) - v_0 p \quad (5.12)$$

только в магнитном поле, причем, если траектория в импульсном пространстве замкнутая, частица совершает финитное движение вдоль оси y (ось z по-прежнему выбрана вдоль магнитного поля, ось x — вдоль электрического). Это позволяет ранее полученные результаты перенести на случай движения частицы в скрещенных полях. Действительно, поступая совершенно аналогично предыдущему, мы получим условия квантования в виде

$$S^*(\epsilon, p_z) = \frac{|e| H h}{c} n, \quad (5.13)$$

где S^* — площадь сечения поверхности $\epsilon^*(\mathbf{p}) = \text{const}$ плоскостью $p_z = \text{const}$. Расстояние между уровнями $\Delta \epsilon$, как легко убедиться непосредственно, равно частоте ω_{EH} , умноженной на постоянную Планка \hbar , т. е.

$$\Delta \epsilon = \hbar \omega_{EH} = \frac{2\pi |e| \hbar H}{c \left(\frac{\partial S^*}{\partial \epsilon} \right)}. \quad (5.14)$$

Напомним, что частота ω_{EH} для случая произвольного закона дисперсии зависит от величины приложенного электрического поля, причем эта

зависимость выпадает для квадратичного закона дисперсии. Следовательно, и расстояния между дискретными уровнями энергии электрона в скрещенных полях должны зависеть от величины электрического поля.

Если не учитывать переходы между зонами, то электрон проводимости в однородном электрическом поле совершает финитное движение (§ 3). Этому финитному движению должны соответствовать квантовые уровни энергии, расстояния между которыми легко получить, воспользовавшись принципом соответствия

$$\Delta \varepsilon = \hbar \omega_E.$$

По-видимому, нет возможности наблюдать эффекты, которые могли бы иметь место в результате этого квантования. Даже если считать, что переходы между зонами крайне маловероятны, то электрону не удастся совершить полного колебания из-за столкновений с нерегулярностями решетки.

Кристаллическая решетка, в которой движется электрон, всегда ограничена размерами образца. Однако обычно размеры эти столь велики, что их можно считать бесконечными. Все же могут встретиться случаи, когда необходимо учитывать конечность размеров металла (например, при рассмотрении свойств тонких пленок). Поверхность металла всегда несколько деформирована, т. е. вблизи нее обязательно имеются нарушения периодичности структуры. Изучение поведения электрона вблизи поверхности — сложная задача, не всегда даже ясно сформулированная. С другой стороны, если большую часть времени электрон проводит в глубине металла, то нерегулярность структуры на расстояниях порядка размеров ячейки можно не учитывать и считать, что граница металла является потенциальным барьером, иначе говоря, рассматривать электрон в металле, как частицу в потенциальном ящике. Если энергия электрона значительно меньше высоты барьера, то барьер можно считать бесконечным. При этом, естественно, компоненты импульса могут принимать только определенные дискретные значения, которые легко определить, если считать, что образец представляет собой прямой параллелепипед:

$$p_{j_n} = \frac{\pi n_j \hbar}{d_j};$$

d_j — длина ребер параллелепипеда, вдоль которых выбраны оси координаты, n_j — целые числа. Квантование импульса приводит, конечно, к квантованию энергии:

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \varepsilon \left(\frac{\pi n_x \hbar}{d_x}, \frac{\pi n_y \hbar}{d_y}, \frac{\pi n_z \hbar}{d_z} \right). \quad (5.15)$$

Сравнительно простые компактные формулы могут быть получены также в том случае, когда электрон находится в постоянном магнитном поле \mathbf{H} ($H_x = H_y = 0$; $H_z = H$) и потенциальном поле $U(y)$. Если опять выбрать векторный потенциал в форме $A = A_x = -Hy$, то легко видеть, что координата x является циклической переменной, т. е. компонента импульса P_x сохраняется. Это значит, что поступая так же, как раньше, можно получить¹⁰

$$S(\varepsilon, p_z, P_x) = \frac{2\pi \hbar |e| H}{c} n. \quad (5.16)$$

Здесь $S(\varepsilon, p_z, P_x)$ — площадь, ограниченная траекторией электрона (плоской кривой) в пространстве кинематических импульсов. Уравнение

траектории определяется интегралами движения:

$$\varepsilon(p_x, p_y, p_z) + U \left[\frac{c}{eH} (p_x - P_x) \right] = \text{const},$$

$$p_z = P_z = \text{const}, \quad P_x = \text{const}. \quad (5.17)$$

Уравнения (5.16) и (5.17) определяют зависимость уровней энергии от квантового числа n , компонент импульса $P_z = p_z$ и P_x , а также от величины магнитного поля

$$\varepsilon = \varepsilon(p_z, P_x, n). \quad (5.18)$$

Обратим внимание на то, что в этом случае вырождение по P_x отсутствует: благодаря наличию поля U различные траектории, отвечающие одинаковым энергиям ε и p_z , не эквивалентны.

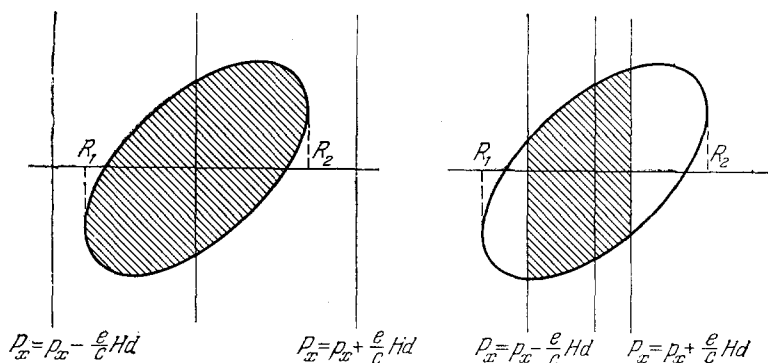


Рис. 11. Траектория электрона в пленке. Заштрихованная площадь входит в условие квантования (5.16).

Полученные здесь формулы можно использовать для выяснения зависимости уровней энергии электрона в магнитном поле от размеров пленки. Рассмотрим поэтому $U(y)$ в виде бесконечно глубокой потенциальной ямы

$$U(y) = \begin{cases} 0, & |y| < d, \\ \infty, & |y| > d, \end{cases} \quad (5.19)$$

где d — полутолщина пленки (потенциальной ямы).

Для этого случая область (5.17) задается условиями

$$\varepsilon(p_x, p_y, p_z) = \varepsilon; \quad |p_x - P_x| < \frac{|e|Hd}{c};$$

$$P_x = \text{const}; \quad p_z = P_z = \text{const}. \quad (5.20)$$

Обозначим через $R_1(\varepsilon, p_z)$ и $R_2(\varepsilon, p_z)$ левую и правую крайние p_x -координаты замкнутой кривой

$$\varepsilon(p_x, p_y, p_z) = \varepsilon; \quad p_z = \text{const}. \quad (5.21)$$

Если

$$R_1(\varepsilon, p_z) > P_x - \frac{|e|Hd}{c},$$

$$R_2(\varepsilon, p_z) < P_x + \frac{|e|Hd}{c} \quad (5.22)$$

рис. 11), то кривая (5.21) располагается между прямыми $P_x = p_x \pm \frac{|e|Hd}{c}$, т. е. траектория электрона (в координатном пространстве)

полностью помещается в пленке и вовсе ее не «чувствует». Уровни энергии электронов со значениями ϵ , P_x и p_z , которые удовлетворяют условиям (5.22), совпадают с полученными ранее (5.16). Если траектория электрона не помещается в пленке, то площадь, входящая в уравнение (5.16), является площадью, описанной кривой (5.24), усеченной прямыми (или одной из прямых) $P_x = p_x \pm \frac{|e|Hd}{c}$.

Для электронов, движущихся по замкнутым траекториям в импульсном пространстве, в достаточно большом магнитном поле большинство траекторий целиком уложится в пленке, т. е. эти электроны вовсе не будут «чувствовать» границ пленки. Иначе обстоит дело с электронами, которые движутся по открытым траекториям: в сколь угодно большом поле они совершают в перпендикулярной полю плоскости инфинитное движение и поэтому сталкиваются со стенкой.

Экспериментальное изучение эффекта де Гааза—ван Альфена потребовало применения импульсной методики для получения больших магнитных полей. При этом благодаря скин-эффекту электроны оказываются помещенными в неоднородное магнитное поле. Рассмотрим случай¹¹, когда магнитное поле, направленное вдоль оси z , неоднородно вдоль оси y : $H_z = H(y)$. По-прежнему x -я проекция обобщенного импульса сохраняется, что позволяет в условии квантования Бора

$$\oint P_y dy = nh$$

перейти к интегрированию по кинематическому импульсу p_x :

$$\oint \frac{p_y dp_x}{H(y)} = \frac{e}{c} nh. \quad (5.23)$$

Интегрирование ведется по траектории в импульсном пространстве

$$\epsilon(p_x, p_y, p_z) = \text{const}; \quad p_z = P_z = \text{const}, \quad (5.24)$$

причем y — корень уравнения

$$A(y) = \frac{e}{c} (P_x - p_x); \quad P_x = \text{const}. \quad (5.25)$$

Все рассмотренные здесь случаи квантования — частные случаи весьма общего способа квазиклассического квантования, который состоит в том, что находятся переменные действия I_j , соответствующие финитному движению, и приравниваются $n_j h$ (n_j — целые числа). Тогда уровни энергии (энергия может быть выражена через переменные действия) определяются так¹²:

$$\epsilon_{n_1, n_2, n_3} = \epsilon(n_1 h; n_2 h; n_3 h).$$

Это выражение справедливо, если движение финитно по всем трем степеням свободы. Если по одной или двум степеням свободы движение инфинитно, то энергия зависит только от двух или одного (соответственно) дискретных квантовых чисел.

Квантование энергии электрона приводит к интересным особенностям в поведении газа электронов. Наиболее подробно изучены как экспериментально, так и теоретически свойства газа электронов (т. е. металла) в сильном магнитном поле при низкой температуре (эффект де Гааза—ван Альфена, эффект Шубникова — де Гааза, циклотронный резонанс и др.). Все эти эффекты можно разделить на осцилляционные, т. е. явления, в которых наблюдается немонотонная зависимость физической характеристики металла от магнитного поля,

и резонансные, т. е. явления, в которых наблюдаются переходы электронов из одного стационарного состояния в другое, причем эти переходы сопровождаются поглощением квантов энергии внешнего поля. Подробная теория этих явлений, исходящая из представления об электронах как о квазичастицах со сложным законом дисперсии, будет изложена во второй и третьей частях настоящего обзора.

Однако некоторые важные черты явлений можно выяснить, основываясь только на формулах квантования. Так, например, осциллирующая зависимость от магнитного поля большого числа физических характеристик металла (магнитной восприимчивости, сопротивления и др.) связана с тем, что число заселенных уровней (с фиксированным значением p_z), т. е. уровней с энергией меньше граничной энергии Ферми ϵ_0 , изменяется на единицу при изменении обратного магнитного поля $\Delta \frac{1}{H}$ на величину, равную $\frac{|e| \hbar}{cS(\epsilon_0, p_z)}$ (см. (5.6)). Зависимость величины периода от p_z несколько сглаживает резкую зависимость от магнитного поля. Поэтому главную роль в осцилляционных эффектах играют электроны, имеющие те значения p_z , при которых $S(\epsilon_0, p_z)$ экстремальна (рис. 12), так как вблизи этих значений период сравнительно слабо зависит от p_z .

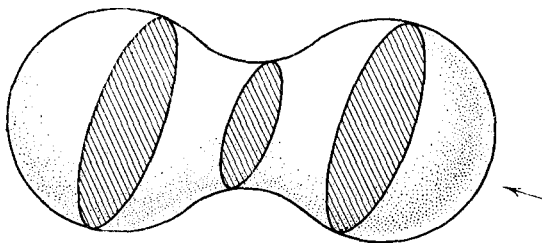


Рис. 12. Пример экстремальных сечений поверхности Ферми. Направление магнитного поля обозначено стрелкой.

Таким образом, период осцилляций в явлениях де Гааза—ван Альфена, Шубникова—де Гааза и др. определяется экстремальными сечениями поверхности Ферми^{9, 13, 14}:

$$\Delta \frac{1}{H} = \frac{|e| \hbar}{cS_{\text{extr}}(\epsilon_0)}. \quad (5.26)$$

Зависимость периода осцилляций от направления магнитного поля позволяет, согласно¹⁵, восстановить форму поверхности Ферми тех электронных групп, которые ответственны за осцилляционные эффекты*). Таким образом была восстановлена поверхность Ферми у алюминия¹⁶, цинка и свинца¹⁷.

В то время как осцилляционные эффекты дают удобный способ изучения экстремальных площадей сечения поверхности Ферми, эти эффекты крайне ненадежны для определения эффективных масс электронов $m^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \epsilon}$, которые связаны с распределением скоростей на поверхности Ферми (эффективная масса входит в зависящий от температуры множитель, который очень чувствителен к состоянию образца, в частности к его чистоте). Для экспериментального определения эффективных масс естественно использовать резонансные эффекты. Может показаться, что, вследствие зависимости ларморовой частоты ω_H электрона со сложным законом дисперсии от энергии ϵ и p_z , резонансное поглощение вовсе отсутствует у металлов. Однако строгое рассмотрение показывает, что, хотя размывание резонансных частот несколько уменьшает остроту резонанса, оно в ряде случаев не уничтожает его. Естественно, что при этом истинно резонансными частотами являются

*) Дело в том, что наиболее существенные осцилляции возникают в тех случаях, когда металл содержит малые электронные группы. Так, например, у цинка основной (с наибольшим периодом) гармонике в осцилляциях магнитного момента соответствует электронная группа, имеющая $\sim 10^{-6}$ электронов на атом.

частоты, соответствующие экстремальным значениям эффективной массы¹⁸:

$$\omega_{\text{рез}} = (\omega_H)_{\text{extr}} = \frac{eH}{cm_{\text{extr}}^*}. \quad (5.27)$$

Наблюдение резонансных эффектов в металле осложнено скин-эффектом и поэтому может производиться только при строгой параллельности постоянного магнитного поля поверхности образца (циклотронный резонанс).

Интересной особенностью, по-видимому, должен обладать диамагнитный резонанс у тех полупроводников, у которых зависимость энергии носителей тока от квазиимпульса существенно не квадратична (например, дырочный германий). Мы уже отмечали тот факт, что для таких «электронов» частота финитного движения в скрещенных полях зависит от величины электрического тока. Но это означает, что принципиально должна наблюдаться зависимость резонансной частоты диамагнитного резонанса от пропускаемого через образец тока. Наблюдать подобное явление в металлах, по всей вероятности, невозможно, так как вследствие большой электропроводности в металле нельзя создать сколько-нибудь заметное электрическое поле.

Для описания осцилляционных и резонансных эффектов мы пользовались квазиклассическими формулами (5.6), (5.9) и (5.14). Это вполне закономерно, так как основную роль во всех эффектах (особенно при низких температурах) играют электроны, энергия которых близка к граничной энергии Ферми ϵ_0 , а практически всегда $\epsilon_0 \gg \hbar\omega_H$. Таким образом, мы имеем дело с большими значениями квантового числа n .

§ 6. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЭЛЕКТРОНА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

Уравнение Шредингера обычно удобно записывать в координатном представлении. Это связано с тем, что оператор кинетической энергии очень просто выражается через оператор дифференцирования. Уравнение Шредингера благодаря этому — линейное дифференциальное уравнение в частных производных. Теория таких уравнений подробно разработана.

В случае электрона в металле более естественным является представление квазиимпульса, в котором состояние электрона полностью определяется заданием квазиимпульса и номера энергетической зоны s . При этом кинетическая энергия $\epsilon_s(\mathbf{p})$ предполагается известной функцией своих аргументов (s, \mathbf{p}) . В этом представлении (s, \mathbf{p}) -представление) оператор координаты имеет вид

$$\mathbf{r}_{ss'} = -\frac{\hbar}{i} \delta_{ss'} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{Q}_{ss'}(\mathbf{p}). \quad (6.1)$$

Наличие второго слагаемого ($\mathbf{Q}_{ss'}$) связано с тем, что координата, как величина, канонически сопряженная квазиимпульсу и удовлетворяющая правилам коммутации

$$\{p_i, x_k\} = \frac{\hbar}{i} \delta_{ik}, \quad (6.2)$$

не коммутирует с оператором номера зоны \hat{s} , т. е. с оператором,

собственными значениями которого являются квантовые числа, определяющие энергетическую зону (ее номер).

Знание оператора координаты (6.4) позволяет построить оператор Гамильтона электрона проводимости, движущегося во внешних полях, и, следовательно, принципиально решить любую задачу квантовой механики электрона со сложным законом дисперсии. При этом, естественно, результаты будут выражены через различные характеристики электрона, связанные с его законом дисперсии, а также через матричные элементы оператора $\hat{\Omega}$. Однако более привычным является задание не оператора $\hat{\Omega}$, а волновых функций электрона проводимости $\psi_{sp}(\mathbf{r})$, которые из общих соображений о симметрии кристалла *) имеют следующий вид:

$$\psi_{sp}(\mathbf{r}) = e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} u_{sp}(\mathbf{r}), \quad (6.3)$$

причем $u_{sp}(\mathbf{r})$, как функция радиус-вектора, периодична с периодом прямой решетки

$$u_{sp}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{sp}(\mathbf{r}). \quad (6.4)$$

Кроме того, функции $u_{sp}(\mathbf{r})$ предполагаются ортонормированными, т. е.

$$\int u_{sp}^*(\mathbf{r}) u_{s'p'}(\mathbf{r}) d\mathbf{v} = \delta_{ss'} \delta_{pp'}. \quad (6.5)$$

Интегрирование ведется по одной ячейке кристалла.

Вся волновая функция $\psi_{sp}(\mathbf{r})$, как функция квазиимпульса \mathbf{p} , периодична с периодом обратной решетки, умноженным на $2\pi\hbar$:

$$\psi_{s, \mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}}(\mathbf{r}) = \psi_{sp}(\mathbf{r}), \quad (6.6)$$

так как состояния с квазиимпульсами, отличающимися на $2\pi\hbar\mathbf{b}$, эквивалентны. $\psi_{sp}(\mathbf{r})$ — это волновые функции электрона проводимости в координатном представлении. Коэффициенты разложения волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ — произвольного состояния по волновым функциям $\psi_{sp}(\mathbf{r})$ — это волновые функции в (s, \mathbf{p}) -представлении. Так, волновая функция электрона в состоянии с определенным значением квазиимпульса \mathbf{p} , равным \mathbf{p}_0 , и номера зоны $s = s_0$ в (s, \mathbf{p}) -представлении есть

$$g_s(\mathbf{p}) = A \delta_{ss_0} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0); \quad (6.7)$$

A — нормировочная постоянная.

Используя вид волновых функций $\psi_{sp}(\mathbf{r})$, можно показать, что

$$\Omega_{ss'}(\mathbf{p}) = i\hbar \int u_{sp}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} u_{s'p}(\mathbf{r}) d\mathbf{v}, \quad (6.8)$$

где интегрирование ведется по одной ячейке кристалла.

Из периодической зависимости функций $\psi_{sp}(\mathbf{r})$ от квазиимпульса и функций $u_{sp}(\mathbf{r})$ от координат следует, что

$$\psi_{sp}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} A_s(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}) e^{\frac{i(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}, \mathbf{r})}{\hbar}}, \quad (6.9)$$

*) Функции $\psi_{sp}(\mathbf{r})$ выбираются так, чтобы они преобразовывались по неприводимому представлению группы симметрии кристалла.

где \mathbf{b} — произвольный вектор обратной решетки*). Из разложения (6.9) и формулы (6.3) следует, что

$$A_s(\mathbf{p}) = \frac{1}{v_0} \int u_{sp}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}; \quad (6.10)$$

v_0 — объем одной ячейки кристалла.

Таким образом, чтобы задать волновые функции электрона проводимости, достаточно задать величины $A_s(\mathbf{p})$, т. е. средние значения модулирующих функций $u_{sp}(\mathbf{r})$ при всех значениях \mathbf{p} .

Матричные элементы оператора $\hat{\Omega}$ можно выразить через величины $A_s(\mathbf{p})$. Действительно, из (6.8), (6.3) и (6.9) имеем

$$\Omega_{ss'} = i\hbar v_0 \sum_{\mathbf{b}} A_s^*(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} A_{s'}(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}). \quad (6.11)$$

Для оценок величины матричных элементов $\Omega_{ss'}$ удобно использовать модельные представления. Если исходить из модели сильно связанных электронов (Блох²⁰), то в одномерном случае (взятом для простоты) можно получить

$$\Omega_{ss'} = i \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_s(x) x \varphi_{s'}(x) dx + i \sum_{l \neq 0} e^{-\frac{2\pi i l p a}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_s(x - la) x \varphi_{s'}(x) dx.$$

Здесь $\varphi_s(x)$ — атомные функции. Из полученной формулы ясно, что матричные элементы оператора $\hat{\Omega}$ — порядка постоянной решетки a . Заметим, что в пределе бесконечно сильной связи, т. е. в тех случаях, когда перекрытием волновых функций соседних атомов можно пренебречь, $\Omega_{ss'} \neq 0$, так как возможны переходы в возбужденное состояние без перехода в соседнюю ячейку. При этом эффективная масса электрона стремится к бесконечности, а подвижность, — естественно, к нулю.

В том случае, когда периодическое поле $V(\mathbf{r})$ рассматривается как возмущение (Бриллюэн²¹), $\Omega_{ss'}$ при $|s - s'| \neq 1$ пропорциональны компонентам Фурье периодической функции $V(x)$; при $|s - s'| = 1$ — наоборот пропорциональны. Мы (опять-таки для простоты) использовали одномерный случай. При стремлении $V(x)$ к нулю $\Omega_{ss'} (|s - s'| = 1)$ стремятся к δ -функциям:

$$\Omega_{s, s+1} = 2 \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{s+1}{2}b + mb\right),$$

$$\Omega_{s, s-1} = -2 \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{sb}{2} + mb\right), \quad b = \frac{2\pi}{a}.$$

*) Представление функции $\psi_{sp}(\mathbf{r})$ в виде (6.9) следует из следующей цепочки равенств:

$$\begin{aligned} \psi_{sp}(\mathbf{r}) &= e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} u_{sp}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}'} A_{s\mathbf{b}'}(\mathbf{p}) e^{\frac{i(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}')\mathbf{r}}{\hbar}} = \\ &= \sum_{\mathbf{b}'} A_{s\mathbf{b}'}(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}) e^{\frac{i(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b} + 2\pi\hbar\mathbf{b}')\mathbf{r}}{\hbar}} = \sum_{\mathbf{b}'} A_{s, \mathbf{b}' - \mathbf{b}}(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}) e^{\frac{i(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}')\mathbf{r}}{\hbar}}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$A_{s, \mathbf{b}'}(\mathbf{p}) = A_{s, \mathbf{b}' - \mathbf{b}}(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}),$$

или

$$A_{s, \mathbf{b}}(\mathbf{p}) = A_{s, \mathbf{0}}(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}) \equiv A_s(\mathbf{p} + 2\pi\hbar\mathbf{b}).$$

Вычислим теперь оператор скорости электрона. Так как

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \{ \varepsilon_s(\mathbf{p}) \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \varepsilon_s(\mathbf{p}) \},$$

то согласно (6.1)

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} + \hat{\mathbf{Q}}. \quad (6.12)$$

Матричные элементы $\hat{\mathbf{Q}}$ связаны с матричными элементами $\hat{\mathbf{Q}}$ посредством соотношения

$$\hat{\mathbf{Q}}_{ss'}(\mathbf{p}) = \frac{i}{\hbar} \{ \varepsilon_s(\mathbf{p}) - \varepsilon_{s'}(\mathbf{p}) \} \mathbf{Q}_{ss'}(\mathbf{p}).$$

Отсюда видно, что при $s = s'$ $\hat{\mathbf{Q}}_{ss} = 0$, т. е. $\hat{\mathbf{Q}}$ не имеет диагональных матричных элементов.

Среднее (квантовомеханическое) значение скорости равно диагональному матричному элементу оператора (6.12). Согласно сказанному, имеем просто

$$\bar{\mathbf{v}} = \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}. \quad (6.13)$$

Таким образом, средняя скорость получается дифференцированием энергии по квазиимпульсу — аналогично классическому соотношению между энергией, импульсом и скоростью. Выражением (6.13) мы неоднократно пользовались в предыдущих параграфах.

Предположим, что металл помещен в однородное электрическое поле \mathbf{E} , в котором на электрон действует сила $e\mathbf{E}$. Тогда квазиимпульс электрона и номер зоны не будут сохраняться. Определим их производные по времени. Однородное поле добавляет к гамильтониану член $-e\mathbf{E}\mathbf{r}$, т. е.

$$\hat{H} = \varepsilon_s(\mathbf{p}) - e\mathbf{E}\mathbf{r}. \quad (6.14)$$

Коммутируя \mathbf{p} и s с гамильтонианом (6.14), с помощью (6.1) получим

$$\dot{\mathbf{p}} = e\mathbf{E}, \quad (\dot{s})_{ss'} = \frac{ie}{\hbar} (s - s') (E\mathbf{Q}_{ss'}). \quad (6.15)$$

Оператор производной по времени от квазиимпульса равен силе, действующей на электрон со стороны однородного поля, так же как это имеет место для производной от истинного импульса для свободного электрона.

Оператор производной от номера зоны, естественно, связан с оператором $\hat{\mathbf{Q}}$. Оператор \dot{s} не имеет диагональных элементов.

Сложнее обстоит дело, когда электрон проводимости движется в магнитном поле.

Компоненты оператора кинематического импульса $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}$ не коммутируют друг с другом, а также с оператором номера зоны \hat{s} , так как векторный потенциал \mathbf{A} зависит от \mathbf{r} , а \mathbf{P} и \mathbf{r} связаны соотношениями коммутации (6.2)*. Из (6.1), (6.2) легко устанавливаются обычные соотношения коммутации между компонентами оператора кинематического импульса

$$\{\hat{p}_i, \hat{p}_k\} = \frac{e\hbar}{ic} \varepsilon_{ikl} H_l \quad (6.16)$$

*) В выражении (6.1) надо теперь под \mathbf{p} понимать \mathbf{P} — обобщенный квазиимпульс электрона.

(ϵ_{ihl} — единичный антисимметричный тензор третьего ранга), а также соотношение коммутации между оператором номера зоны и оператором кинематического импульса

$$\{\hat{s}, \hat{\mathbf{p}}\}_{ss'} = -\frac{e}{2c}(s-s')[\mathbf{H}, \mathbf{\Omega}_{ss'}(\mathbf{p})]. \quad (6.17)$$

Последнее соотношение легко выводится, если пользоваться векторным потенциалом, взятым в виде $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{H}\mathbf{r}]$.

Периодичность закона дисперсии в \mathbf{P} -пространстве позволяет разложить $\epsilon_s(\mathbf{p})$ в ряд Фурье

$$\epsilon_s(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{a}} A_{\mathbf{a}}^{(s)} e^{\frac{i\mathbf{a}\mathbf{p}}{\hbar}}, \quad (6.18)$$

где суммирование ведется по всем периодам \mathbf{a} кристаллической решетки.

Переход от классического выражения для энергии (6.18) к гамильтониану осуществляется путем замены величин \mathbf{p} и s операторами с правилами коммутации (6.16) и (6.17).

Так как компоненты кинематического импульса не коммутируют друг с другом и с оператором номера зоны, то выражение (6.18) требует доопределения — следует указать, в каком смысле надо понимать функцию $\epsilon_s(\mathbf{p})$ от некоммутирующих переменных \hat{s} , \hat{p}_x , \hat{p}_y , \hat{p}_z . В общем случае этот вопрос, по-видимому, решен быть не может: он связан с генезисом фермиевской ветви энергетического спектра. Однако если пренебречь переходами между зонами, т. е. считать оператор \hat{s} с-числом, то характер симметризации функции $\epsilon_s(\mathbf{p})$ можно выяснить из достаточно общих соображений. Пусть магнитное поле направлено вдоль оси z . Тогда \hat{p}_z коммутирует с \hat{p}_x и \hat{p}_y , а \hat{p}_x и \hat{p}_y не коммутируют друг с другом:

$$\{\hat{p}_x, \hat{p}_y\} = \frac{eh}{ic} H. \quad (6.19)$$

При переходе к оператору Гамильтона, т. е. при замене компонент кинематического импульса операторами с правилами коммутации (6.19), естественно исходить из разложения (6.18), понимая каждое слагаемое как функцию (экспоненту) от одного оператора $\hat{\mathbf{a}\mathbf{p}}$. Иначе говоря, если пренебречь переходами между зонами, то

$$\epsilon_s(\hat{\mathbf{p}}) = \sum_{\mathbf{a}} A_{\mathbf{a}}^s e^{\frac{i\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}}. \quad (6.20)$$

Этот вывод основывается на том, что в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, оси x и y не зафиксированы и за канонически сопряженные переменные*) могут быть выбраны любые линейные комбинации из величин p_x и p_y . Выражение (6.20) соответствует «полной симметризации» гамильтониана по операторам компонент кинематического импульса.

Этот вывод о необходимости полной симметризации гамильтониана подтверждается исследованием, проведенным Г. Е. Зильберманом²² на основании модели электрона в периодическом поле.

Вычислим теперь производную от кинематического импульса по времени (мы по-прежнему пренебрегаем переходами из зоны в зону).

*) С точностью до постоянного множителя компоненты кинетического импульса канонически сопряжены друг другу.

Коммутируя $\hat{\mathbf{p}}$ с гамильтонианом $\hat{H} = \varepsilon(\hat{\mathbf{p}})$, используя соотношения (6.19), найдем

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{e}{c} \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}}, \mathbf{H} \right], \quad (6.21)$$

где производную от оператора Гамильтона надо понимать следующим образом:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{a}} \mathbf{a} A_{\mathbf{a}} e^{\frac{i \mathbf{a} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}}; \quad (6.22)$$

$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}}$ есть, очевидно, оператор скорости электрона $\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} \equiv \hat{\mathbf{v}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}}$. Если на электрон проводимости действует и электрическое и магнитное поля, то

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = e \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\hat{\mathbf{v}}, \mathbf{H}] \right\}. \quad (6.23)$$

Среднее значение оператора производной по времени от квазиимпульса равно согласно (6.23) обобщенной силе Лоренца

$$\overline{\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt}} = e \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\bar{\mathbf{v}}, \mathbf{H}] \right\}.$$

В квантовой механике различают два типа постановок задач: во-первых, можно рассматривать изменение состояния (волновой функции) во времени и, во-вторых, искать стационарные решения, т. е. определять уровни энергии частиц. Мы рассмотрим два простейших примера.

Начнем с задачи первого типа. Найдем зависимость от времени волновой функции электрона, когда на него действует постоянная однородная сила $e\mathbf{E}$ (\mathbf{E} — напряженность электрического поля). Мы в духе всего предыдущего будем решать задачу в представлении квазиимпульса. В этом представлении согласно (6.4) и (6.1) уравнение Шредингера для волновой функции $g_s(\mathbf{p}, t)$ имеет вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial g_s}{\partial t} = \varepsilon_s g_s + \frac{e\hbar}{i} \mathbf{E} \frac{\partial g_s}{\partial \mathbf{p}} - \sum_{s'} e \mathbf{E} \Omega_{ss'} g_{s'}. \quad (6.24)$$

В ряде случаев это уравнение можно решать методом последовательных приближений, рассматривая последний член в правой части как малое возмущение. Это в конечном счете оправдывается малостью приложенного поля, а безразмерным малым параметром является величина $eaE/(\varepsilon_s - \varepsilon_{s'})$ (напомним, что матричные элементы оператора $\hat{\Omega}$ — порядка постоянной решетки a). Прежде чем воспользоваться методом последовательных приближений, преобразуем несколько уравнение (6.24), введя вместо времени t новую переменную $\pi = p_x - eEt$ (ось x направлена вдоль электрического поля, p_x в дальнейшем обозначается просто p):

$$-\frac{\hbar}{i} eE \left(\frac{\partial g_s}{\partial p} \right)_{\pi} = \varepsilon_s g_s - eE \sum_{s'} \Omega_{ss'}^x g_{s'}, \quad (6.25)$$

p_y и p_z входят в последнее уравнение как параметры.

Введем теперь новую искомую функцию $\varphi_s(p, \pi)$, равную $e \int_{\varepsilon_s}^{\varepsilon_s + dp} g_s(p, \pi)$. Для φ_s уравнение выглядит особенно просто:

$$\left(\frac{\partial \varphi_s}{\partial p} \right)_{\pi} = \sum_{s'} q_{ss'} \varphi_{s'}(p, \pi), \quad (6.26)$$

где

$$q_{ss'} = \frac{i}{\hbar} e^{i \int \frac{\epsilon_s}{\hbar e E} dp} \Omega_{ss'} e^{-i \int \frac{\epsilon_{s'}}{\hbar e E} dp}. \quad (6.27)$$

Воспользуемся теперь методом последовательных приближений. В нулевом приближении, которое соответствует пренебрежению переходами между зонами,

$$\left(\frac{\partial \varphi_s^{(0)}}{\partial p} \right)_{\pi} = 0, \quad (6.28)$$

т. е.

$$\varphi_s^{(0)} = \varphi_s^{(0)}(\pi) \equiv \varphi_s^{(0)}(p - eEt). \quad (6.29)$$

Удовлетворим начальным условиям задачи. Если при $t = 0$ $g_s(p, 0) = g_s(p)$, то согласно (6.29)

$$g_s^{(0)}(p, t) = g_s(p - eEt) e^{\frac{i}{eE\hbar} \int_p^{p-eEt} \epsilon_s dp}. \quad (6.30)$$

Величина $|g_s(p)|^2$ определяет вероятность того, что электрон из s -й зоны имеет значение импульса из интервала $(p, p + dp)$. Последнее равенство показывает, что в нулевом приближении (при пренебрежении переходами между зонами) распределение вероятностей целиком движется в пространстве импульсов с постоянной «скоростью» $\frac{dp}{dt} = eE$.

В частности, это относится к δ -образному распределению вероятностей: если частица в начальный момент времени имела определенное значение квазиимпульса, то и в любой момент времени t частица будет иметь определенное значение квазиимпульса, которое может быть определено из классического уравнения движения

$$\frac{dp}{dt} = eE.$$

Найдем теперь первое приближение для функции $\varphi_s(p, t)$. Из уравнения (6.26) имеем

$$\left(\frac{\partial \varphi_s^{(1)}}{\partial p} \right)_{\pi} = \sum_{s'} q_{ss'} \varphi_{s'}^{(0)}(\pi).$$

Так как в начальный момент времени $\varphi_s^{(1)} = 0$, то

$$\varphi_s^{(1)}(p, \pi) = \sum_{s'} Q_{ss'}(p, \pi) \varphi_{s'}^{(0)}(\pi), \quad (6.31)$$

$$Q_{ss'}(p, \pi) = \int_{\pi}^p q_{ss'}(p) dp.$$

Если в начальный момент времени электрон имел определенное значение s , равное s_0 , то согласно формулам (6.30) и (6.31) функция φ_s в любой момент времени с точностью до линейных членов относительно $\Omega_{ss'}$ имеет вид

$$\varphi_s(p, \pi) = \varphi_{s_0}(\pi) \{ \delta_{ss_0} + Q_{ss_0} \}.$$

Переходя от функций φ_s к волновым функциям электрона $g_s(p, t)$, легко убедиться, что вероятности W_{ss_0} перехода электрона из зоны в зону выражаются через квадраты матричных элементов Q_{ss_0} :

$$W_{ss_0}(t) = A |Q_{ss_0}|^2, \quad (6.32)$$

где A — нормировочная константа.

Определение квантовых уровней энергии электрона со сложным законом дисперсии мы разберем на примере электрона в магнитном поле.

Уравнение Шредингера в этом случае, очевидно, имеет следующий вид:

$$\varepsilon_s(\hat{\mathbf{p}}) g_s(\mathbf{P}) = \varepsilon g_s(\mathbf{P}), \quad (6.33)$$

где

$$\varepsilon_s(\hat{\mathbf{p}}) \equiv \varepsilon_s(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = \varepsilon_s\left(P_x - \frac{e\hbar H}{ic} \frac{\partial}{\partial P_y}, P_y, P_z\right) \quad (6.34)$$

при условии полной симметризации гамильтониана (см. выше). Компоненты P_x и P_z входят в уравнение (6.33) как параметры.

В общем виде решить уравнение (6.33), конечно, невозможно. Однако из выражения (6.34) видно, что постоянная Планка \hbar входит в уравнение в комбинации с магнитным полем H , причем соответствующая безразмерная комбинация, включающая и магнитное поле и постоянную Планка, как ясно из (6.34) и (6.20), равна $\frac{a^2 e H}{\hbar}$, где a — постоянная решетки. Другими словами, уравнение (6.33) можно записать следующим образом:

$$\varepsilon_s\left(u_x + i\delta \frac{\partial}{\partial u_y}, u_y, u_z\right) g_s(\mathbf{u}) = \varepsilon g_s(\mathbf{u}), \quad (6.35)$$

где

$$\mathbf{u} = \frac{a\mathbf{P}}{\hbar} \quad (6.36)$$

— безразмерный импульс, а

$$\delta = \frac{a^2 e H}{\hbar c}. \quad (6.37)$$

Параметр δ имеет простой физический смысл. Как ясно из формулы (4.6), $a^2 e H / \hbar c$ есть отношение площади ячейки кристаллической решетки к минимальной площади, которую описывает электрон в магнитном поле H . Напомним, что траектория электрона в координатном пространстве получается из его траектории в импульсном пространстве путем поворота на угол $\pi/2$ и изменением масштабов (умножением на c/eH), т. е. площадь в координатном пространстве равна площади в импульсном пространстве, умноженной на $c^2/e^2 H^2$. Для всех реальных полей $\delta \ll 1$ (см. (1.2)). Поэтому решение уравнения (6.35) можно искать в виде разложения по степеням δ . Подобный метод соответствует квазиклассическому приближению. Может показаться, что он «противоположен» обычному квазиклассическому приближению, так как постоянная Планка стоит в знаменателе выражения (6.36). В действительности это, конечно, «обычное» квазиклассическое приближение. Кажущееся различие связано с тем, что уравнения (6.33) — (6.35) написаны в импульсном представлении. Выражение для параметра δ можно переписать так:

$$\delta = \frac{e\hbar H}{c p^2} \quad (6.38)$$

($p = \frac{\hbar}{a}$ — период в пространстве квазиимпульсов). Отсюда отчетливо видно, что разложение ведется по постоянной Планка. Не останавливаясь на выводах, изложим результаты квазиклассического рассмотрения (Г. Е. Зильберман^{22, 23}).

Во втором приближении квазиклассическое решение уравнения (6.35) имеет вид

$$g_s(\mathbf{P}) = e^{\frac{icP_x P_y}{ehH}} \frac{1}{\sqrt{\left| \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial p_x} \right|}} e^{\pm i \frac{c}{ehH} \int^{p_y} p_x(\varepsilon, p_y, p_z) dp_y}, \quad (6.39)$$

где $p_x = p_x(\varepsilon, p_y, p_z)$ — уравнение траектории в импульсном пространстве, т. е. действительное решение уравнения

$$\varepsilon(p_x, p_y, p_z) = \varepsilon.$$

В области между замкнутыми траекториями волновая функция экспоненциально затухает:

$$g_s(\mathbf{P}) = e^{\frac{icP_x P_y}{ehH}} \frac{1}{\sqrt{\left| \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial p_x} \right|}} e^{\pm i \frac{c}{ehH} \int^{p_y} |p_x| dp_y}. \quad (6.40)$$

Уровни энергии электрона $\varepsilon_s(p_z, n)$ определяются условиями квантования Бора (см. § 4):

$$S = \oint p_x dp_y = \frac{2\pi\hbar eH}{c} (n + \gamma), \quad (6.41)$$

причем если у точек поворота $p_y = p_y^{(0)}$ компонента p_x обращается в нуль, как $\sqrt{|p_y - p_y^{(0)}|}$, то $\gamma = 1/2$.

Как мы уже указывали, вырождение уровней энергии электрона в магнитном поле имеет место приближенно и для электрона с произвольным законом дисперсии. Исследование уравнения (6.35) показывает,

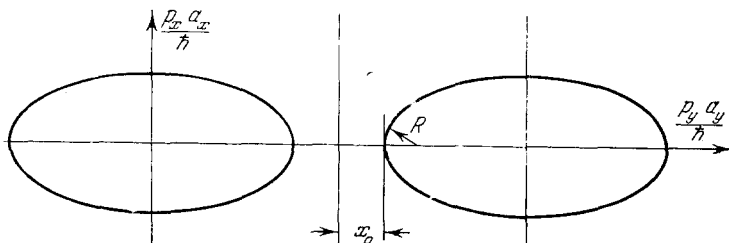


Рис. 13.

что вырождение снимается, если удерживать члены порядка δ^2 . Это означает, что (при фиксированном p_z) каждому значению квантового числа n соответствует не отдельный уровень, а зона, ширина которой порядка $\hbar\omega_H\delta^2$, если соседние траектории электронов далеки друг от друга. Если соседние траектории расположены близко, то имеется дополнительное расширение, связанное с переходом электрона с одной траектории на другую сквозь «потенциальный барьер». Ширина зоны

размытия в этом случае порядка $\hbar\omega_H e^{-\frac{\pi}{\delta} x_0^2} \sqrt{\frac{R}{x_0}}$, где x_0 — полуширина «барьера», R — радиус кривизны в точке наибольшего сближения траекторий, величины x_0 и R взяты в безразмерных единицах (см. рис. 13). Обычно уширение за счет переходов электрона с траектории на траекторию не существенно. Оно начинает играть роль только при аномально малых расстояниях траекторий друг от друга ($x_0 \sim \delta$, так как обычно при малых x_0 $R \sim x_0$). Однако при переходе от замкнутых сечений к открытым эффект уширения за счет переходов крайне существен. За счет этого

эффекта область размытия постепенно расширяется и спектр из дискретного превращается в непрерывный. Правда, периодический характер траектории электрона приводит к тому, что в непрерывном спектре имеются разрывы, места которых определяются следующим уравнением:

$$S_1 = \frac{2\pi\hbar e H}{c} n,$$

где S_1 часть описываемой электроном площади, приходящейся на одну ячейку. Ширина области разрыва — порядка $\hbar\omega_{He} - \frac{\pi}{8} x_0 \sqrt{\frac{R}{x_0}}$ (x_0 — полуширина «перешейка», а R — радиус кривизны на «перешейке», см. рис. 14).

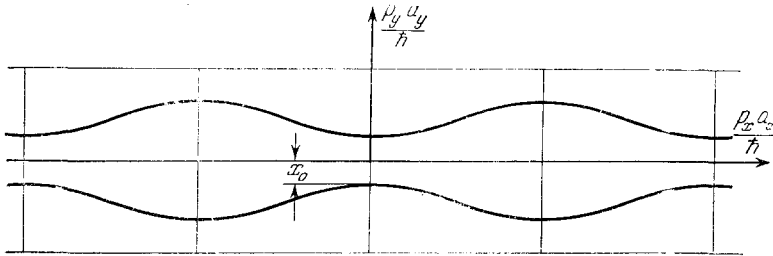


Рис. 14.

Мы до сих пор не учитывали возможности переходов между зонами. Анализ показывает, что в тех случаях, когда траектории, соответствующие квантовым числам n и p_z , в зонах s и s' пересекаются, то вероятность перехода пропорциональна δ^3 , а в противном случае она экспоненциально мала.

Этот параграф служит обоснованием классического и квазиклассического рассмотрений. С другой стороны, отмеченные здесь сравнительно тонкие обстоятельства (расширение уровней, разрывы в непрерывном спектре и др.) дают возможность выяснить ряд черт эффекта де Гааза — ван Альфена и других осцилляционных явлений.

§ 7. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

Построение теории рассеяния связано с вычислением эффективных сечений различных процессов и с исследованием формы волновой поверхности рассеянной частицы на больших расстояниях от рассеивающего центра. Если первая часть задачи (вычисление эффективных сечений) не может быть решена без знания структуры неоднородности, то вторая — исследование формы волновой поверхности на больших расстояниях — формулируется и решается при очень общих предположениях о характере неоднородности, причем асимптотическое поведение волновой функции электрона, как оказывается, определяется формой его изоэнергетической поверхности.

Рассмотрим рассеяние электрона, находящегося в состоянии (s_0, \mathbf{p}_0) , т. е. имеющего волновую функцию $\psi_{s_0 \mathbf{p}_0}^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{\frac{i \mathbf{p}_0 \mathbf{r}}{\hbar}} u_{s_0 \mathbf{p}_0}(\mathbf{r})$, на локальной неоднородности. Если считать, что рассеивающая частица бесконечно тяжела (атом примеси, вакансии и пр.), то возмущенная волновая функция электрона может быть записана следующим образом^{24, 25, 28}

$$\psi_{s_0 \mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = \psi_{s_0 \mathbf{p}_0}^{(0)}(\mathbf{r}) - \sum_s \int \frac{C_{s_0 \mathbf{p}_0}^{s \mathbf{p}} e^{\frac{i \mathbf{p} \mathbf{r}}{\hbar}}}{\varepsilon_s(\mathbf{p}) - \varepsilon_{s_0}(\mathbf{p}_0)} d\tau_{\mathbf{p}}. \quad (7.1)$$

Величины $C_{s_0 p_0}^{sp}$ определяются характером рассеивающего центра, находящегося, по предположению, в точке $\mathbf{r} = 0$. Если неоднородность кристалла характеризовать оператором возмущения Λ , то в тех случаях, когда возмущение имеет δ -образный характер^{26, 27},

$$C_{s_0 p_0}^{sp} = \frac{\Lambda_{s_0 p_0}^{sp} u_{sp}(\mathbf{r})}{1 + \sum_s \int \frac{\Lambda_{s_0 p_0}^{sp} d\tau_p}{\varepsilon_s(\mathbf{p}) - \varepsilon_{s_0}(\mathbf{p}_0)}}.$$

Здесь $\Lambda_{s_0 p_0}^{sp}$ — матричный элемент оператора Λ .

В тех же случаях, когда можно пользоваться теорией возмущений,

$$C_{s_0 p_0}^{sp} = \Lambda_{s_0 p_0}^{sp} u_{sp}(\mathbf{r}).$$

Обозначим

$$I_s(\mathbf{r}) = \int \frac{C_{s_0 p_0}^{sp} e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} d\tau_p}{\varepsilon_s(\mathbf{p}) - \varepsilon}; \quad \varepsilon \equiv \varepsilon_{s_0}(\mathbf{p}_0). \quad (7.2)$$

Специфическая структура интегралов $I_s(\mathbf{r})$ позволяет исследовать рассеянную волну на больших расстояниях от рассеивающего препятствия.

Интегрирование в (7.2) можно производить по энергиям и по поверхностям равных энергий, тогда

$$I_s(\mathbf{r}) = \int \frac{I_s(\mathbf{r}, \varepsilon') d\varepsilon'}{\varepsilon' - \varepsilon}, \quad (7.3)$$

где

$$I_s(\mathbf{r}, \varepsilon') = \int_{\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon'} \frac{C_{s_0 p_0}^{sp} e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}}}{|\nabla \varepsilon_s(\mathbf{p})|} dS_{\varepsilon'}, \quad (7.4)$$

$dS_{\varepsilon'}$ — элемент площади на изоэнергетической поверхности $\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon'$, а интегрирование в (7.3) производится в пределах, допустимых для s -й зоны значений энергии (от $\varepsilon_{s \min}$ до $\varepsilon_{s \max}$).

Для вычисления асимптотического значения (при больших r) интегралов (7.4) удобно на изоэнергетической поверхности $\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon'$ ввести систему координат, связанную с линиями пересечения поверхности плоскостями $\mathbf{p}\mathbf{n} = \text{const}$ ($\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}$). Обозначим $\mathbf{p}\mathbf{n} = u$ и будем производить интегрирование сначала по ленте на поверхности между u и $u + du$, а затем по переменной u (рис. 15). Это даст

$$\left. \begin{aligned} I_s(\mathbf{r}, \varepsilon') &= \int f_s(u) e^{\frac{iur}{\hbar}} du, \\ f_s(u) du &= \int \frac{C_{s_0 p_0}^{sp}}{|\nabla \varepsilon_s(\mathbf{p})|} dS_{\varepsilon'}, \\ \varepsilon_s(\mathbf{p}) &= \varepsilon'; \quad u < \mathbf{p}\mathbf{n} < u + du. \end{aligned} \right\} \quad (7.5)$$

Из полученного выражения ясно, что члены порядка $\frac{1}{r}$, которые соответствуют расходящимся, т. е. рассеянным, волнам, возникают при интегрировании вблизи разрывов функции $f_s(u)$. Как легко сообразить, единственными точками разрыва функции $f_s(u)$ являются точки касания поверхности $\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon'$ с опорной плоскостью направления

распространения \mathbf{n} (рис. 10,15). Обозначая точки касания через \mathbf{p}_ν , получим

$$I_s(\mathbf{r}, \varepsilon') \cong \sum_{\nu} \frac{2\pi C_{s_0 \mathbf{p}_0}^{s, \mathbf{p}_\nu} e^{\frac{i \mathbf{p}_\nu \mathbf{r}}{\hbar}}}{|\nabla \varepsilon_s(\mathbf{p}_\nu)| \sqrt{|K_\nu|}} \frac{1}{r}, \quad (7.6)$$

где K_ν — гауссова кривизна поверхности $\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon'$ в точке $\mathbf{p} = \mathbf{p}_\nu$.

Точки касания \mathbf{p}_ν определяются, очевидно, уравнениями

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_s(\mathbf{p}_\nu) &= \varepsilon'; \\ [\mathbf{n}, \mathbf{v}_s(\mathbf{p}_\nu)] &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.7)$$

Подставляя выражения (7.6) в формулу (7.3), убеждаемся, что при $r \rightarrow \infty$ интегралы по энергиям остаются конечными, только если $\varepsilon \equiv \varepsilon_{s_0}(\mathbf{p}_0)$ попадают внутрь интервала допустимых значений энергии в s -й зоне. В этом случае интегралы (7.3) следует понимать как предельные значения интегралов

$$I_s(\mathbf{r}) = \int \frac{I_s(\mathbf{r}, \varepsilon') d\varepsilon'}{\varepsilon' - \varepsilon + i\gamma} \quad (7.8)$$

при бесконечно малом затухании ($\gamma \rightarrow +0$).

Главная часть интегралов (7.3) или (7.8)) получается интегрированием вблизи полюса ($\varepsilon' = \varepsilon$).

Рис. 15. Сечение поверхности $\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon$ плоскостью $\mathbf{p}\mathbf{r} = \text{const}$. $\mathbf{p}_\nu, -\mathbf{p}_\nu$ ($\nu=1, 2, 3$) — точки касания опорной к направлению распространения \mathbf{n} плоскости.

Учитывая это, можно окончательно получить асимптотическое выражение для возмущенной волновой функции:

$$\psi_{s_0 \mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) \sim \psi_{s_0 \mathbf{p}_0}^{(0)}(\mathbf{r}) - \frac{(2\pi)^{3/2} i}{r^{1/2}} \sum_{s, \nu} \frac{C_{s_0 \mathbf{p}_0}^{s, \mathbf{p}_\nu} e^{\frac{i \mathbf{p}_\nu \mathbf{r}}{\hbar}}}{|\nabla \varepsilon_s(\mathbf{p}_\nu)| \sqrt{|K_\nu|}}, \quad (7.9)$$

причем значения \mathbf{p}_ν определяются уравнениями (7.7), если вместо ε' подставить $\varepsilon \equiv \varepsilon_{s_0}(\mathbf{p}_0)$.

Полученные здесь результаты согласуются с выводами § 4, сделанными на основании классического (корпускулярного) рассмотрения. Действительно, процедура определения \mathbf{p}_ν (уравнения (7.7)) заключается в том, что необходимо найти те точки на изоэнергетической поверхности, где скорость электрона ($\mathbf{v}_s = \nabla \varepsilon_s(\mathbf{p})$) совпадает по направлению с данным направлением рассеяния \mathbf{n} .

Найденное выражение для возмущенной волновой функции позволяет сделать ряд заключений о характере рассеянных волн.

В большинстве случаев волновая функция электрона, рассеянного единичной неоднородностью, представляет собой суперпозицию нескольких волн, число которых равно числу возможных решений уравнений (7.7) при $\varepsilon' = \varepsilon_{s_0}(\mathbf{p}_0)$. Каждая из этих волн имеет свою форму и свою

скорость распространения (рис. 16). Даже в тех случаях, когда энергия рассеиваемого электрона принадлежит только одной зоне, то и тогда число рассеянных волн, как правило, превышает единицу, так как обычно изоэнергетические поверхности не выпуклы, а имеют сложную форму. Амплитуда каждой из рассеянных волн определяется не только законом дисперсии, но и особенностями рассеивающего центра (посредством величин $C_{s_0 p_0}^{sp}$, которые могут быть связаны с возмущением, создаваемым рассеивающим центром). Фаза же волны, т. е. форма волновой поверхности, определяется только законом дисперсии, причем волновая поверхность каждой волны является полярной поверхностью по отношению к изоэнергетической поверхности электрона $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \epsilon$.

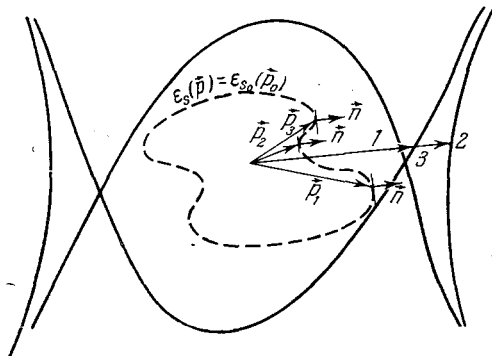


Рис. 16. Сечение волновой поверхности рассеянного электрона (сплошные линии). Пунктирной линией изображено сечение изоэнергетической поверхности.

Знание волновой функции рассеянного электрона позволяет вычислить эффективный поперечник рассеяния в направлении \mathbf{n} внутри телесного угла dO :

$$d\sigma(\mathbf{n}) = \frac{16\pi^4}{|\nabla \epsilon_{s_0}(\mathbf{p}_0)|} \sum_{s, \gamma} \frac{|B_{s_0 p_0}^{sp\gamma}|^2}{|K_\gamma| |\nabla \epsilon_s(\mathbf{p}_\gamma)|} dO, \quad (7.10)$$

где величины $B_{s_0 p_0}^{sp\gamma}$ простым образом связаны с коэффициентами $C_{s_0 p_0}^{sp\gamma}$.

Каждое слагаемое в формуле (7.10) определяет сечение процесса, при котором рассеянный электрон имеет определенное значение квазимпульса и принадлежит определенной зоне.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. G. Dresselhaus, A. Kip, C. Kittel, Phys. Rev. 98, 368 (1955).
2. Г. Е. Зильберман, Я. Е. Айзенберг, ФММ 4, 216 (1957).
3. F. G. Moliner, Phil. Mag. 3, 207 (1958).
4. Zener, Proc. Roy. Soc. A, 145, 523 (1934).
5. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, ЖЭТФ 31, 63 (1956).
6. W. Shockley, Phys. Rev. 79, 191 (1950).
7. И. М. Лифшиц, Доклад на сессии физико-математ. отд. АН УССР, декабрь 1951 г.
8. L. Onsager, Phil. Mag. 43, 1006 (1952).
9. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, ДАН СССР 96, 963 (1954); ЖЭТФ 29, 730 (1955).
10. А. М. Косевич, И. М. Лифшиц, ЖЭТФ 29, 744 (1955).
11. А. М. Косевич, ЖЭТФ 35, 738 (1958).
12. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, Изв. АН СССР 19, 395 (1955).
13. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ 30, 814 (1956); И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, ЖЭТФ 33, 88 (1957); Phys. Chem. Sol. 4, 1 (1958).
14. М. Я. Азбель, ЖЭТФ 34, 969, 1158 (1958).
15. И. М. Лифшиц, А. В. Погорелов, ДАН СССР 96, 1143 (1954).
16. E. M. Guptersen, Phil. Trans. Roy. Soc. A249, 299 (1957).
17. И. М. Дмитрико, В. И. Веркин, Б. Г. Лазарев, ЖЭТФ 35, 328 (1958).
18. М. Я. Азбель, Э. А. Канер, ЖЭТФ 32, 896 (1957), Phys. Chem. Sol. 6, 113 (1958).

19. Л. Ландау, Е. Лифшиц, Квантовая механика, Гостехиздат, М.—Л., 1948.
 20. F. Bloch, Zeits. Phys. **52**, 555 (1928).
 21. L. Brillouin, C. R. Acad. Sci. **191**, 232 (1930); J. phys. et rad. **1**, 377 (1930); Квантовая статистика, ОНТИ, 1934.
 22. Г. Е. Зильберман, ЖЭТФ **32**, 296 (1957).
 23. Г. Е. Зильберман, ЖЭТФ **33**, 387 (1957); **34**, 515 (1958).
 24. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **18**, 298 (1948).
 25. И. М. Лифшиц, В. И. Пересада, Ученые записки физ. отделения физ - матем. факультета МГУ **6**, 37 (1955).
 26. И. М. Лифшиц, ДАН СССР **48**, 83 (1945).
 27. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **17**, 1017 (1947).
 28. G. F. Koster, Phys. Rev. **95**, 1436 (1954).
-