

Полагая в (4.10)  $\delta U = 0$  и  $\chi_j = C_j \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right)$ , где  $C_j$  — постоянные, получаем для  $C_j$  систему однородных уравнений

$$\sum_{j'=1, 2} D_{\alpha\beta}^{jj'} p_\alpha p_\beta C_{j'} - E C_j = 0. \quad (4.11)$$

Условие разрешимости системы (4.11) определяет  $E$  как функцию вектора  $\mathbf{p}$ . Введя для краткости обозначение

$$D_{\alpha\beta}^{jj'} p_\alpha p_\beta = \gamma_{jj'}, \quad (4.12)$$

легко находим

$$E = \frac{\gamma_{11} + \gamma_{22}}{2} \pm \left[ \frac{(\gamma_{11} - \gamma_{22})^2}{4} + \gamma_{12}\gamma_{21} \right]^{1/2}. \quad (4.13)$$

Это есть не что иное, как формула (III.8.6), причем коэффициенты  $A$ ,  $B$ ,  $C$  легко выразить через  $D_{\alpha\beta}^{jj'}$ .

Аналогичным образом обстоит дело, если зоны не вырождены, но края их расположены достаточно близко друг от друга, так что условие (4.5) в интересной области энергий все же не выполняется (о таких зонах говорят как о «почти вырожденных»). Такой случай реализуется в полупроводниках с очень малой шириной запрещенной зоны. Роль «почти вырожденных» играют здесь зоны проводимости и валентная. При этом также надо пользоваться не простыми равенствами (4.2) и (4.3), а более сложными (4.9) и (4.10).

Подчеркнем, что деление на «невыврожденные» и «почти вырожденные» зоны не является абсолютным. Как видно из предыдущего, оно определяется интервалом энергий, представляющим интерес в том или ином случае. Ориентир здесь дает неравенство (4.5).

## § 5. Энергетический спектр носителя заряда в постоянном и однородном магнитном поле (квантовая теория)

Воспользуемся методом эффективной массы для решения квантовомеханической задачи о движении электрона в постоянном и однородном магнитном поле. Ограничимся для простоты движением электрона со скалярной эффективной массой у дна невырожденной зоны и будем отсчитывать энергию от произвольного начала отсчета. В отсутствие каких-либо структурных дефектов уравнение (4.3") принимает вид

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathcal{A} \right)^2 \chi + \beta g (\sigma \mathcal{B}) \chi = (E - E_c) \chi. \quad (5.1)$$

Направим ось  $Z$  параллельно напряженности магнитного поля. Тогда, в согласии с (4.6), вектор-потенциал можно выбрать в виде

$$\mathcal{A}_x = \mathcal{A}_z = 0, \quad \mathcal{A}_y = \mathcal{B}x. \quad (5.2)$$

При этом коэффициенты в уравнении (5.1) не зависят от координат  $y$  и  $z$  и можно искать решение в виде

$$\chi = e^{ik_y y + ik_z z} f(x), \quad (5.3)$$

где  $k_2$  и  $k_3$  — вещественные волновые числа,  $f = \begin{pmatrix} f_+ \\ f_- \end{pmatrix}$  — матричная функция; составляющие ее  $f_+$  и  $f_-$  соответствуют электрону с положительной и отрицательной  $z$ -компонентами спина. Подставляя это выражение в уравнение (5.1), раскрывая оператор  $\left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathcal{A}\right)^2$  и учитывая, что, согласно (5.2),  $\text{div } \mathcal{A} = 0$ , находим два уравнения для функций  $f_{\pm}$ . Их можно записать единым образом, приписывая и энергии  $E$  индекс « $\pm$ »:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f_{\pm}}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left( \hbar k_2 + \frac{e}{c} \mathcal{B}x \right)^2 f_{\pm} = \left( E_{\pm} - E_c - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} \mp \beta g \mathcal{B} \right) f_{\pm}. \quad (5.4)$$

Удобно ввести обозначение

$$\nu_{\pm} = E_{\pm} - E_c - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} \mp \beta g \mathcal{B} \quad (5.5)$$

и отсчитывать координату  $x$  от точки

$$x_0 = -\frac{c\hbar k_2}{\mathcal{B}e}, \quad (5.6)$$

полагая  $x = x_0 + x'$ .

Тогда уравнения (5.4) примут вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f_{\pm}}{dx'^2} + \frac{e^2 \mathcal{B}^2}{2mc^2} x'^2 f_{\pm} = \nu_{\pm} f_{\pm}. \quad (5.7)$$

Формально это есть не что иное, как уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с «коэффициентом упругости»  $k = \frac{e^2 \mathcal{B}^2}{mc^2}$  и собственной частотой

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\mathcal{B}e}{mc} \equiv \omega_c. \quad (5.8)$$

Решение уравнения (5.7) хорошо известно из квантовой механики. Собственные значения  $\nu_{\pm}$  равны

$$\nu_{\pm} = \hbar \omega_c (n + 1/2), \quad (5.9)$$

где  $n = 0, 1, \dots$  — целое число или нуль, а соответствующие собственные функции суть

$$f_{\pm} = \gamma^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{x-x_0}{\gamma} \right)^2 \right\} H_n \left( \frac{x-x_0}{\gamma} \right). \quad (5.10)$$

Здесь

$$\gamma = \left( \frac{\hbar c}{\mathcal{B}e} \right)^{1/2} \quad (5.11)$$

есть постоянная размерности длины (ее называют магнитной длиной),  $H_n$  — полином Эрмита  $n$ -го порядка.

Комбинируя теперь равенства (5.5) и (5.9), находим

$$E_{\pm} - E_c = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \pm \beta g \mathcal{B} + \hbar \omega_c (n + 1/2). \quad (5.12)$$

Первое слагаемое в правой части (5.12) представляет собой кинетическую энергию электрона с импульсом  $\hbar k_z$ , свободно движущегося вдоль направления магнитного поля. Такой характер движения вполне согласуется с классическими представлениями: компонента силы Лоренца по оси  $Z$  равна нулю.

Второе слагаемое в (5.12) описывает энергию спинового магнитного момента в магнитном поле. Она может принимать два значения соответственно двум возможным ориентациям спина.

Наконец, третье слагаемое отвечает энергии движения электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Видим, что эта энергия оказывается квантованной. При заданных значениях проекции спина на ось  $Z$  и волнового числа  $k_z$  возможные значения энергии  $E_{\pm}$  образуют ряд эквидистантных дискретных уровней (рис. 4.6). Расстояние между ними равно  $\hbar \omega_c$ . Этот результат был получен в 1930 г. Л. Д. Ландау; соответственно говорят об *уровнях Ландау* и о *квантовании Ландау*. При учете движения электрона вдоль оси  $Z$  уровни Ландау размываются в одномерные «подзоны». Каждая из них соответствует определенному значению квантового числа  $n$  и той или иной проекции спина на направление магнитного поля. Нижняя из этих подзон отвечает значению  $n = 0$ , а нижний край ее — дно зоны проводимости в магнитном поле — дается выражением

$$E_{\min} = E_c - |\beta| g \mathcal{B} + \frac{1}{2} \hbar \omega_c. \quad (5.13)$$

При классической трактовке орбитального движения электрона последнее слагаемое в (5.13) не появилось бы. Учет квантования приводит к повышению границы зоны на величину  $\frac{1}{2} \hbar \omega_c$  — нулевую энергию осциллятора.

Заметим, что энергия электрона, движущегося в магнитном поле, не зависит от волнового числа  $k_z$ . Последнее входит только в выражение для координаты  $x'$ . Согласно (5.6) точка  $x_0$  есть «центр

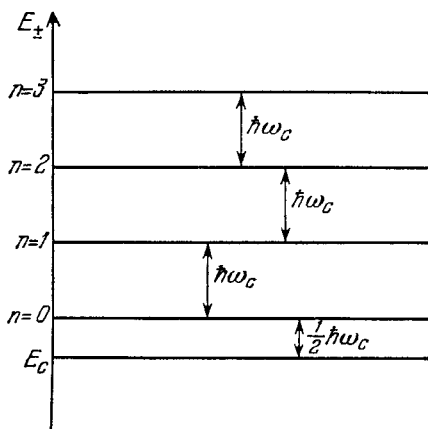


Рис. 4.6. Уровни Ландау при одной определенной ориентации спина (слагаемое  $\beta g \mathcal{B}$  в (5.12) опущено).

колебаний». В силу произвольности числа  $k_2$  при одном и том же значении энергии электрона центр колебаний может находиться где угодно в образце: имеет место вырождение по координате центра осциллятора. Этого и следовало ожидать: поскольку магнитная индукция не зависит от координат, в образце нет физически выделенных точек.

Вычислим теперь степень вырождения каждого уровня в подзоне Ландау, т. е. число квантовых состояний, отвечающих заданному значению энергии  $E$  и заданному значению  $k_3$ . Для этой цели рассмотрим образец конечного объема  $V$ . Как и в отсутствие магнитного поля, форма образца не играет роли, коль скоро размеры его достаточно велики. Удобно взять образец в виде куба со стороной  $L$ . По направлениям  $Y$  и  $Z$  подчиним волновую функцию условиям периодичности. Тогда, подобно (III.3.10),

$$k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z, \quad (5.14)$$

где  $n_y$  и  $n_z$  — положительные или отрицательные целые числа или нули.

Поскольку функция (5.10) локализована в области порядка  $\gamma$  около точки  $x_0$ , граничные условия по оси  $x$  вообще несущественны, коль скоро длина  $L$  значительно превышает магнитную длину  $\gamma$ . Достаточно ограничить возможные значения  $x_0$  условием

$$-\frac{L}{2} \leq x_0 \leq \frac{L}{2}. \quad (5.15)$$

Согласно (5.6), (5.8) и (5.14) отсюда следует, что

$$-\frac{1}{2} m\omega_c L \leq \hbar k_y \leq \frac{1}{2} m\omega_c L \quad (5.16)$$

и

$$-\frac{1}{2} m\omega_c \frac{L^2}{2\pi\hbar} \leq n_y \leq \frac{1}{2} m\omega_c \frac{L^2}{2\pi\hbar}. \quad (5.17)$$

Таким образом, при заданных энергии и числе  $n_z$  квантовое число  $n_y$  может принимать

$$g = m\omega_c \frac{L^2}{2\pi\hbar} \quad (5.18)$$

значений. Это и есть искомая кратность вырождения.

Формулу (5.12) можно обобщить на случай эллипсоидальных изоэнергетических поверхностей. Для этой цели надо лишь, в соответствии с (4.8), заменить оператор кинетической энергии в (5.1) более сложным выражением. Пусть, например, изоэнергетические поверхности представляют собой эллипсоиды вращения (III.8.5). Тогда энергия носителя заряда по-прежнему дается формулой (5.12), но частота  $\omega_c$  теперь оказывается зависящей от угла между осью магнитного поля и главной осью эллипсоида энергии: она

дается формулой (5.8), в которую вместо  $m$  надо подставить величину  $m_c$  из (3.5) или (3.5').

Совпадение результатов квантовомеханического и классического расчетов частоты  $\omega_c$  здесь не должно вызывать удивления. Действительно, классическое движение заряженной частицы массы  $m$  в однородном магнитном поле складывается из свободного перемещения вдоль оси поля и вращения в плоскости, перпендикулярной  $\mathcal{B}$ . Последнее можно представить как сумму двух гармонических колебаний с частотой  $\omega_c$ . Тот факт, что при квантовом рассмотрении мы получили лишь один осциллятор, не имеет значения: при другом выборе вектор-потенциала мы могли бы, вместо (5.12), получить выражение, формально содержащее сумму энергий двух гармонических осцилляторов; при этом значения  $E$  фактически не изменились бы.

Классическая трактовка задачи о поведении электрона в магнитном поле страдает, однако, двумя недостатками.

Во-первых, она логически непоследовательна: классическое движение заряда по круговой орбите не может быть устойчивым из-за неизбежного — в рамках классической механики — излучения электромагнитных волн ускоренно движущимся зарядом.

Во-вторых, классическая формула для частоты колебаний  $\omega_c$  совпадает с квантовой только при параболическом законе дисперсии. В более сложных условиях дело обстоит иначе: представление об уровнях и подзонах Ландау сохраняет силу, но формула (5.9) уже не имеет места; спектр уровней Ландау оказывается неэквидистантным. Так, например, обстоит дело в случае вырожденных зон, характерных для дырок в германии, кремнии и ряде других материалов.

Таким образом, магнитное поле существенно изменяет энергетический спектр свободных носителей заряда. Зона проводимости, понимаемая как совокупность значений энергии, характеризуемых тремя непрерывно изменяющимися компонентами квазивольного вектора, здесь исчезает. Вместо нее появляется совокупность одномерных подзон, каждая из которых отвечает одному из уровней Ландау, т. е. определенному значению квантового числа  $n$ , и описывается лишь одной компонентой  $k_z$ . Классическая трактовка задачи о движении свободного электрона или дырки в постоянном и однородном магнитном поле может быть оправдана, только если расстояние между соседними уровнями Ландау мало по сравнению с характерной энергией носителей заряда  $E$ :

$$\hbar\omega_c \equiv \frac{e\hbar\omega\mathcal{B}}{mc} \ll E. \quad (5.19)$$

Роль  $E$  обычно играет либо величина  $kT$  (если электронный газ подчиняется статистике Больцмана), либо уровень Ферми  $\zeta$ , отсчитанный от дна соответствующей зоны (если имеет место фер-

миевское вырождение). Магнитные поля, для которых неравенство (5.19) не выполняется и надо учитывать квантование Ландау, называются квантующими.

Следует, однако, помнить, что формулы, полученные в настоящем параграфе, тоже имеют определенные пределы применимости. Действительно, мы рассматривали здесь поведение носителей заряда в идеальном кристалле. В применении к реальному кристаллу полученные таким путем результаты имеют смысл, если можно пренебречь процессами рассеяния. Последние приводят к нестационарности рассматриваемых нами состояний: на каждом из уровней электрон может находиться лишь конечное время  $\tau_p$  — характерное время свободного пробега. Согласно принципу неопределенности между энергией и временем это означает, что каждый уровень приобретает конечную ширину:  $\Delta E \sim \hbar/\tau_p$ . Формулы (5.9), (5.12) и т. д. имеют смысл, лишь если эта ширина мала по сравнению с расстоянием между уровнями:

$$\hbar/\tau_p \ll \hbar\omega_c. \quad (5.20)$$

Как и следовало ожидать (в случае параболического закона дисперсии!), это есть не что иное, как классическое неравенство  $\omega_c\tau_p \gg 1$ .

Далее, применение в данной задаче метода эффективной массы оправдано, коль скоро магнитная длина, определяемая формулой (5.11), велика по сравнению с постоянной решетки. При  $\mathcal{B} = 10^4$  Гс мы имеем, согласно (5.11),  $\gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$  см.

Квантовомеханическое рассмотрение позволяет особенно ясно понять сущность явления диамагнитного резонанса. Очевидно, мы имеем здесь просто переходы между соседними уровнями Ландау, вызываемые фотонами частоты  $\omega_c$ .

## § 6. Движение и энергетический спектр носителей заряда в постоянном электрическом поле

Пусть в кристалле создано постоянное и однородное в пространстве электрическое поле напряженности  $\mathcal{E}$ . Этого можно добиться, например, используя достаточно тонкий образец в качестве «диэлектрической прослойки» в конденсаторе. Будем считать, что величина  $\mathcal{E}$  удовлетворяет условию (1.6).

В отличие от магнитного, электрическое поле уже с точки зрения классической механики может производить работу над зарядом. Соответственно следует ожидать, что при наложении постоянного и однородного электрического поля носитель заряда будет менять свою энергию, т. е. перемещаться по зоне. Для исследования этого движения воспользуемся уравнением движения (1.9). Для определенности будем говорить об электронах; все результаты для дырок получаются из приводимых ниже формул изменением знака при  $e$ .