G. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В r-ПРОСТРАНСТВЕ И В k-ПРОСТРАНСТВЕ ПРИ НАЛИЧИИ ВНЕШНИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И МАГНИТНОГО ПОЛЕЙ

При необходимости представить себе движение электрона без столкновений в энергетических зонах разных форм исследователь иногда испытывает некоторые затруднения. Поэтому полезно рассмотреть точные решения хотя бы для наиболее часто встречающихся ситуаций. Мы ниже опишем движение в обычном координатном пространстве ($\boldsymbol{r}$-пространстве) и в пространстве квазиимпульсов (волновых векторов), кратко называемом $\boldsymbol{k}$-пространством, поскольку уравнения движения содержат обычно обе величины $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{k}$ и они взаимосвязаны.

Сферическая зона проводимости. Рассмотрим движение волнового пакета (который содержит один электрон) в энергетической зоне кубического кристалла. Предположим, что функция $\varepsilon(\boldsymbol{k})$, описывающая эту энергетическую зону, имеет простой минимум при $\boldsymbol{k}=0$ и что вблизи этой точки функция приближенно может быть представлена в виде

$$\varepsilon(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar^2}{2m_e}\boldsymbol{k}^2, \qquad (\text{G.1})$$

где m_e — эффективная масса электрона. Поверхности постоянной энергии в $\boldsymbol{k}$-пространстве являются сферами, и поэтому такую зону мы будем называть *сферической*.

Внутри зон Бриллюэна ни одна энергетическая зона нигде не имеет вида (G.1); истинные энергетические зоны всегда деформированы воздействием границ зон Бриллюэна. Например, энергетическая зона (F 9) имеет вид

$$\varepsilon(\boldsymbol{k})=2\gamma(3-\cos k_x a-\cos k_y a-\cos k_z a); \qquad (\text{G.2})$$

отсчет энергии в этом случае ведется от значения $\varepsilon(0)=0$. Здесь γ — константа, зависящая от перекрытия атомных волновых функций соседних атомов. Если косинусы разложить в ряды до членов порядка $(ka)^4$, то мы получим:

$$\varepsilon(\boldsymbol{k})\approx\gamma\left[k^2a^2-\frac{1}{12}\left(k_x^4+k_y^4+k_z^4\right)a^4+\ \ldots\right], \qquad (\text{G.3})$$

т. е. функцию, близкую к сферической с точностью до 1%, если $ka<0{,}1\pi$.

Движение волнового пакета особенно просто описывать, пока мы остаемся в той части объема зоны Бриллюэна, где применимо сферическое приближение. В этом случае групповая скорость в координатном пространстве описывается следующим соотношением:

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\equiv\boldsymbol{v}\equiv\frac{1}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}}\varepsilon(\boldsymbol{k})\approx\frac{\hbar}{m_e}\boldsymbol{k}, \qquad (\text{G.4})$$

где $\boldsymbol{r}$ — радиус-вектор, описывающий среднее положение волнового пакета в обычном пространстве. Интегрируя уравнения движения по времени, получим:

$$\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}(0)+\frac{\hbar}{m_e}\int_0^t dt\,\boldsymbol{k}(t). \qquad (\text{G.5})$$

В электрическом поле $\boldsymbol{E}$ быстрота изменения вектора $\boldsymbol{k}$ описывается уравнением

$$\hbar \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = -e\boldsymbol{E}.$$

Если электрическое поле однородно и постоянно, то, интегрируя это уравнение по времени, получим:

$$\boldsymbol{k}(t) = \boldsymbol{k}(0) - \frac{e}{\hbar} \boldsymbol{E} t. \tag{G.6}$$

Отсюда видно, что длина $\boldsymbol{k}$ увеличивается в том же направлении, что и $\boldsymbol{E}$, с постоянной быстротой независимо от формы энергетической зоны. Проинтегрировав еще раз, получим:

$$\int_0^t dt\ \boldsymbol{k}(t) = \boldsymbol{k}(0)\, t - \frac{1}{2} \frac{e}{\hbar} \boldsymbol{E} t^2. \tag{G.7}$$

Подставляя (G.7) в (G.5), получим выражение, описывающее движение волнового пакета в координатном пространстве относительно положения пакета в момент $t = 0$, т. е. относительно точки $\boldsymbol{r}(0)$, $\boldsymbol{k}(0)$; это выражение имеет вид

$$\boxed{\boldsymbol{r}(t) = \boldsymbol{r}(0) + \frac{\hbar \boldsymbol{k}(0)}{m_e} t - \frac{1}{2} \frac{e}{m_e} \boldsymbol{E} t^2} \tag{G.8}$$

Этот результат имеет точно тот же вид, что и для случая движения свободной частицы с массой m_e и зарядом $-e$ в электрическом поле $\boldsymbol{E}$, поскольку в случае сферической энергетической зоны величина $\hbar\boldsymbol{k}(0)/m_e$ есть групповая скорость $v(0)$ в момент $t = 0$.

Теперь рассмотрим движение в однородном постоянном магнитном поле $\boldsymbol{B}$, направленном параллельно оси z. Поступим аналогично предыдущему, но в правой части уравнения надо будет поместить силу Лорентца:

$$\hbar \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = -\frac{e}{c} \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{G.9}$$

Здесь $\boldsymbol{v} \equiv \hbar^{-1} \nabla_{\boldsymbol{k}} \varepsilon$ — скорость волнового пакета в координатном пространстве [такая же, как в выражении (G.4) для случая сферической энергетической зоны]. Используя (G.4) в уравнении (G.9), получим:

$$\hbar \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = -\frac{e\hbar}{m_e c} \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{B}. \tag{G.10}$$

Вводим циклотронную частоту $\omega_c \equiv eB/m_e c$ и учитываем, что $\boldsymbol{B} = B\hat{z}$; уравнение движения в компонентах по осям координат примет вид:

$$\frac{dk_x}{dt} = -\omega_c k_y, \qquad \frac{dk_y}{dt} = \omega_c k_x, \qquad \frac{dk_z}{dt} = 0. \tag{G.11}$$

Решение уравнения (G.11) имеет вид

$$k_x(t) = K \cos(\omega_c t + \varphi), \qquad k_y(t) = K \sin(\omega_c t + \varphi), \qquad k_z = \text{const}. \tag{G.12}$$

В том, что (G.12) действительно является решением (G.11), можно убедиться непосредственной подстановкой. Здесь K и φ — константы, которые подбираются так, чтобы удовлетворить начальным условиям движения. Если, например, электрон первоначально находился на поверхности Ферми, то K^2 удовлетворяет условию

$$K^2 + k_z^2 = k_F^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \tag{G.13}$$

Если это условие выполнено в момент $t = 0$, оно будет выполняться для (G.12) в любой момент $t > 0$, поскольку K и k_z — постоянные. Следовательно, частица, находящаяся на поверхности Ферми в $\boldsymbol{k}$-пространстве, будет двигаться по кругу радиуса K с частотой ω_c, сохраняя постоянным значение k_z.

Положение частицы в обычном координатном пространстве получим интегрированием выражения для скорости $\boldsymbol{v} = \hbar^{-1}\nabla_{\boldsymbol{k}}\varepsilon(\boldsymbol{k})$ с учетом (G.12):

$$\begin{gathered} x(t) = x(0) + \frac{\hbar}{m_e}\int_0^t dt\, k_x = x(0) + \frac{\hbar K}{m_e\omega_c}[\sin(\omega_c t + \varphi) - \sin\varphi], \\ y(t) = y(0) - \frac{\hbar K}{m_e\omega_c}[\cos(\omega_c t + \varphi) - \cos\varphi], \quad z(t) = z(0) + \frac{\hbar k_z t}{m_e}. \end{gathered} \tag{G.14}$$

Следовательно, в обычном пространстве частица движется по спирали вокруг оси, параллельной направлению магнитного поля (оси z). Радиус спирали

$$R = \frac{\hbar K}{m_e\omega_c} = \frac{\hbar c K}{eB}. \tag{G.15}$$

Это выражение эквивалентно классическому соотношению $v_\perp = \omega_c R$, где $v_\perp$ — линейная скорость кругового движения в обычном пространстве в плоскости, перпендикулярной к направлению магнитного поля $\boldsymbol{B}$.

Заметим, что радиус R орбиты в обычном пространстве пропорционален радиусу K орбиты в $\boldsymbol{k}$-пространстве; коэффициент пропорциональности равен $\hbar c/eB$. График зависимости R от величины волнового вектора K в случае, когда напряженность магнитного поля равна 10 кГс, приведен на рис. G.1.

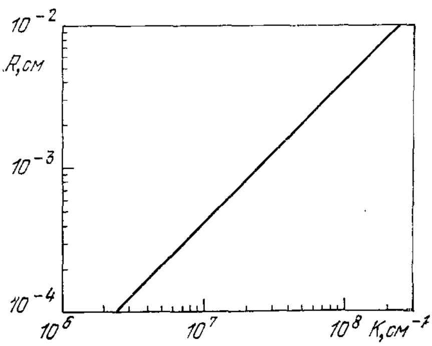

Рис. G.1. Электрон в магнитном поле $B = 1\cdot10^4$ Гс. Зависимость радиуса R орбиты в обычном пространстве от радиуса K орбиты в фурье-пространстве.