произведения $\psi_0(x)\psi_0(x-an)$ с $n\neq 0$ исчезающе малы везде, то

$$\int_{-a/2}^{a/2}\psi_k(x)\psi_0(x)\,dx\approx C.$$

Находим

$$\varepsilon(k)-\varepsilon_0=\frac{\hbar^2}{2mC}\left[\psi_0'\psi_k-\psi_0\psi_k'\right]_{-a/2}^{a/2}.$$

При $x=a/2$ в сумме (1) должны быть сохранены лишь члены с $n=0$ и $n=1$, причем $\psi_0(-a/2)=\pm\psi_0(a/2)$ в зависимости от четности или нечетности функции $\psi_0(x)$:

$$\psi_k(a/2)=C\psi_0(a/2)(1\pm e^{ika}),$$

$$\psi_k'(a/2)=C\psi_0'(a/2)(1\mp e^{ika});$$

аналогичным образом, при $x=-a/2$ должны быть сохранены лишь члены с $n=0$ и $n=1$. В результате получим

$$\varepsilon(k)-\varepsilon_0=\pm\frac{2\hbar^2}{m}\psi_0\left(\frac{a}{2}\right)\psi_0'\left(\frac{a}{2}\right)\cos ka.$$

Сюда надо подставить значения

$$\psi_0\left(\frac{a}{2}\right)=\left[\frac{m\omega}{2\pi p(a/2)}\right]^{1/2}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{a/2}|p(x)|\,dx\right],$$

$$\psi_0'\left(\frac{a}{2}\right)=\frac{p(a/2)}{\hbar}\psi_0\left(\frac{a}{2}\right),$$

где $\omega$ — классическая частота колебаний частицы в яме; $x_0$ — точка поворота, отвечающая энергии $\varepsilon_0$. Окончательно:

$$\varepsilon(k)-\varepsilon_0=\pm\frac{\hbar\omega}{\pi}\sqrt{D}\cos ka,\qquad D=\exp\left[-\frac{4}{\hbar}\int_{x_0}^{a/2}|p(x)|\,dx\right].$$

Таким образом, каждый уровень энергии $\varepsilon_0$, отвечающий движению частицы в изолированной яме, расширяется в узкую полосу (зону) с шириной $2\hbar\omega D^{1/2}/\pi$, определяемой коэффициентом проницаемости $D$ потенциального барьера, разделяющего две ямы.

## § 56. Влияние внешнего поля на движение электрона в решетке

Рассмотрим движение электрона при наложении на решетку постоянного магнитного поля $\mathbf{H}$. Если исходить из гамильтониана электрона в периодическом поле $U(\mathbf{r})$ в координатном представлении:

$$\hat{H}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}+U(\mathbf{r}),\tag{56,1}$$

(где $\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla$ — оператор истинного импульса), то введение внешнего магнитного поля осуществляется обычным образом:

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+U(\mathbf{r}), \tag{56,2}$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — векторный потенциал поля. Задача, однако, радикально упрощается — в случае достаточно слабого поля — путем перехода к квазиимпульсному представлению.

Ввиду большого разнообразия в возможных видах зонной структуры энергетического спектра электрона в решетке условие малости внешнего поля может быть сформулировано в общем виде лишь довольно грубым образом. Пусть электрон до включения поля находится в некоторой определенной ($s$-й) зоне. Обозначим через $\varepsilon_0$ наименьшую из энергетических величин, характеризующих эту зону, — ее характерную ширину или расстояние до соседних зон (т. е. разностей $\varepsilon_s(\mathbf{k})-\varepsilon_{s'}(\mathbf{k})$ при заданных $\mathbf{k}$). Для того чтобы магнитное поле можно было считать слабым, во всяком случае должно выполняться условие

$$\hbar\omega_H \ll \varepsilon_0, \tag{56,3}$$

где «ларморова частота» $\omega_H \sim |e|H/m^*c$, а $m^* \sim \hbar k/v$ — эффективная масса электрона[1]).

В отсутствие внешнего поля гамильтониан электрона в решетке в $\mathbf{k}$-представлении есть, как уже указывалось, диагональная матрица с элементами $\varepsilon_s(\mathbf{k})$. В присутствии поля гамильтониан будет содержать также и потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ и его производные по координатам — напряженность $\mathbf{H}$ (а в неоднородном поле — также и дальнейшие производные от напряженности); в $\mathbf{k}$-представлении функция $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ заменяется оператором $\hat{\mathbf{A}}=\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$, где $\hat{\mathbf{r}}$ — оператор (55,14).

Потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ есть возрастающая (для однородного поля — по линейному закону) функция координат. Ввиду этого возрастания потенциал, даже для слабого поля, отнюдь не является малым возмущением в гамильтониане неограниченной системы (электрон в решетке). Именно поэтому уже слабое магнитное поле существенно меняет свойства протяженной системы — превращает непрерывный спектр в дискретный (квантует уровни, см. § 58). Напряженность же слабого поля (в отличие от потенциала) приводит лишь к малым поправкам.

Покажем, что в пренебрежении этими поправками зависимость гамильтониана от потенциала поля можно выяснить в общем виде исходя из одних только требований калибровочной ин-

---

[1]) Более точное определение частоты дается ниже формулой (57,7). Для электронов проводимости в металле (см. ниже § 61) характерные значения $k \sim 1/a$ ($a$ — постоянная решетки); положив также $\varepsilon_0 \sim \hbar^2/m^*a^2$, найдем, что условие (56,3) эквивалентно неравенству $r_H \gg a$, где «радиус орбиты» $r_H \sim v/\omega_H$.

вариантности. Поскольку мы рассматриваем постоянные поля, то достаточно использовать инвариантность уравнений относительно не зависящих от времени преобразований потенциала и волновых функций вида

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla f, \quad \psi \to \psi \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right), \tag{56,4}$$

где $f(\mathbf{r})$ — произвольная функция координат (см. III (111,8—9)).

В слабом поле потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — медленно меняющаяся функция координат. Имея в виду выяснение роли этой медленности, рассмотрим сначала предельный случай постоянного потенциала: $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathrm{const} \equiv \mathbf{A}_0$ (разумеется, постоянный потенциал фиктивен — реальное поле при этом отсутствует, так что речь идет о формальном преобразовании). Переход от $\mathbf{A} = 0$ к $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0$ эквивалентен преобразованию (56,4) с $f = \mathbf{A}_0\mathbf{r}$; поэтому вместо исходных (при $\mathbf{A} = 0$) собственных функций

$$\psi_{s\mathbf{k}} = u_{s\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kr}} \tag{56,5}$$

собственными функциями нового гамильтониана будут

$$u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp\left\{i\left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}_0\right)\mathbf{r}\right\}.$$

Отсюда видно, что для придания квазиимпульсу прежнего смысла (величины, определяющей изменение фазы волновой функции при трансляциях) надо положить $\mathbf{k} + e\mathbf{A}_0/\hbar c = \mathbf{K}$; определенную таким образом величину $\mathbf{K}$ можно назвать *обобщенным квазиимпульсом*. Тогда новые собственные функции запишутся в виде

$$\psi_{s\mathbf{K}} = u_{s,\, \mathbf{K} - e\mathbf{A}_0/\hbar c}(\mathbf{r})\, e^{i\mathbf{Kr}},$$

а соответствующие им значения энергии электрона: $\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{K} - e\mathbf{A}_0/\hbar c)$. Мы можем теперь утверждать, что при не постоянном, но медленно меняющемся в пространстве потенциале $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ волновые функции «нулевого» (по напряженности поля) приближения будут

$$\psi_{s\mathbf{K}} = u_{s,\, \mathbf{K} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})/\hbar c}\, e^{i\mathbf{Kr}} \tag{56,6}$$

(причем функции $u$, благодаря переменности $\mathbf{A}$, уже не являются строго периодическими)[1]). Энергии же $\varepsilon_s(\mathbf{K} - e\mathbf{A}/\hbar c)$ надо рассматривать теперь как операторы, образующие гамильтониан

[1]) Если разложить функции (56,6) по функциям $\psi_{s\mathbf{k}}$, то в разложение войдут, вообще говоря, функции с различными $s$. Подчеркнем, однако, что это отнюдь не означает реального перехода в другую зону, а выражает лишь изменение волновой функции под влиянием постоянного поля; напомним в этой связи, что постоянное поле вообще не может вызвать реальный переход с изменением энергии. Для уяснения ситуации следует заметить, что хотя поле слабо, но связанное с ним изменение классификации состояний (в том числе соответствия между квазиимпульсом и энергией) значительно.

в $\mathbf{K}$-представлении. При этом, в том же приближении, под $\hat{\mathbf{r}}$ надо понимать оператор $\hat{\mathbf{r}}=i\partial/\partial\mathbf{K}$, опустив второй член ($\hat{\Omega}$) в определении (55,14). Действительно, при воздействии на волновую функцию оператор $i\partial/\partial\mathbf{K}$, по порядку величины, умножает ее на «размер орбиты» $r_H$, возрастающий при уменьшении поля; результат же воздействия оператора $\hat{\Omega}$ на волновую функцию такого возрастающего множителя не содержит. В этом смысле в слабом поле оператор $\hat{\Omega}$ мал по сравнению с $i\partial/\partial\mathbf{K}$. Поскольку, с другой стороны, оператор $\partial/\partial\mathbf{K}$ диагонален по номерам зон, то оказывается диагональным и гамильтониан.

Таким образом, мы приходим к результату, что движение электрона в решетке в слабом магнитном поле описывается гамильтонианом (в $\mathbf{K}$-представлении)

$$\hat{H}_s=\varepsilon_s\left(\mathbf{K}-\frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})\right),\quad \hat{\mathbf{r}}=i\frac{\partial}{\partial\mathbf{K}} \tag{56,7}$$

(*R. Peierls*, 1933). В этом приближении, следовательно, имеется полная аналогия со способом введения магнитного поля в гамильтониан свободной частицы в импульсном представлении.

Выражение (56,7) еще не вполне определено, так как не установлен порядок действия некоммутативных операторов — компонент вектора $\hat{\mathbf{k}}=\mathbf{K}-e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c$. Он должен быть определен так, чтобы обеспечить эрмитовость гамильтониана. Этого можно, в принципе, всегда достичь, представив периодическую (в обратной решетке) функцию $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ в виде ряда Фурье

$$\varepsilon_s(\mathbf{k})=\sum_{\mathbf{a}}A_{s\mathbf{a}}e^{i\mathbf{ka}} \tag{56,8}$$

(суммирование по всем векторам $\mathbf{a}$ прямой решетки). После замены $\mathbf{k}\to\hat{\mathbf{k}}$ в показателе каждого члена этого ряда будет стоять только один оператор (проекция вектора $\hat{\mathbf{A}}$ на $\mathbf{a}$), так что вопрос о порядке действия не возникает — все сводится к степеням этого одного оператора. Такой способ «эрмитизации», конечно, не единствен. Существенно, однако, что разница между различными способами лежит за пределами рассматриваемого приближения, поскольку коммутаторы операторов $\hat{k}_x$, $\hat{k}_y$, $\hat{k}_z$ в этом приближении представляют собой малые величины. Так, для однородного поля оператор

$$\hat{\mathbf{A}}=\frac{1}{2}[\mathbf{H}\hat{\mathbf{r}}]=\frac{i}{2}\left[\mathbf{H}\frac{\partial}{\partial\mathbf{K}}\right]; \tag{56,9}$$

прямым вычислением легко найти, что коммутаторы

$$\hat{k}_x\hat{k}_y-\hat{k}_y\hat{k}_x=i\frac{e}{\hbar c}H_z,\ldots \tag{56,10}$$

пропорциональны малой напряженности $\mathbf{H}$.

Операторы $\hat{\mathbf{r}}=i\partial/\partial\mathbf{K}$ и $\hat{\mathbf{K}}\equiv\mathbf{K}$ имеют те же правила коммутации, что и координаты и обобщенные импульсы «свободной» (без решетки) частицы. Естественно поэтому, что вычисление коммутаторов операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{K}}$ с гамильтонианом приводит к операторным уравнениям

$$\hbar\dot{\hat{\mathbf{K}}}=-\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{\mathbf{r}}},\quad \dot{\hat{\mathbf{r}}}=\frac{\partial\hat{H}}{\hbar\partial\mathbf{K}},\tag{56,11}$$

имеющим вид обычных уравнений Гамильтона (для вычисления — см. формулы III (16,4—5)).

Снова повторим, что гамильтониан (56,7) является приближенным в том смысле, что в нем отброшены все члены, зависящие от напряженности $\mathbf{H}$ и не содержащие больших множителей — порядка величины размеров орбиты $r_H$. В следующих приближениях ответ тоже может быть представлен в виде некоторого эффективного гамильтониана $\hat{H}_s(\mathbf{K}-e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c, \mathbf{H})$, диагонального по номерам зон, но уже не выражающегося через одни только функции $\varepsilon_s(\mathbf{k})$[1].

В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, учет спина электрона приводит в гамильтониане к появлению обычного члена, описывающего взаимодействие магнитного момента с полем: $-\beta\sigma\mathbf{H}$, где $\sigma$ — матрицы Паули, а $\beta=|e|\hbar/2mc$ — магнетон Бора. Если кристалл обладает центром инверсии, спин-орбитальное взаимодействие только меняет магнитный момент электрона, так что взаимодействие спина с магнитным полем приобретает вид

$$-\beta\sigma_i H_k\xi_{ik}(\mathbf{k}).\tag{56,12}$$

Действительно, в этом случае гамильтониан должен быть инвариантен по отношению к одновременным операциям обращения времени и инверсии. При этом преобразовании надо заменить $\mathbf{H}\to-\mathbf{H}$ и $\sigma\to-\sigma$ при неизменном $\mathbf{k}$; (56,12) является общим выражением, удовлетворяющим поставленному требованию. Тензор $\xi_{ik}(\mathbf{k})$, разумеется, нельзя вычислить в общем виде.

Наконец, остановимся на поведении электрона при наложении на решетку слабого электрического поля $\mathbf{E}$. Условие слабости означает, что энергия, приобретаемая электроном в поле

[1]) Простой пример вычисления поправочного члена будет дан в § 59. Изложение регулярного метода получения гамильтониана в виде ряда по степеням $\mathbf{H}$, а также общие выражения первых членов этого ряда даны в статьях: *E. I. Blount*, Phys. Rev. **126**, 1636 (1962); Solid State Physics, т. 13, стр. 306 (1963). Отметим, что если кристалл обладает центром инверсии, ряд начинается с членов порядка $\mathbf{H}^2$ (см. § 59).

на расстоянии $\sim a$, мала по сравнению с характерной энергией $\varepsilon_0$: $|e|Ea \ll \varepsilon_0$.

Как и в случае магнитного поля, наиболее важную роль играют члены, содержащие возрастающую функцию координат — скалярный потенциал электрического поля $\varphi(\mathbf{r})$. Зависимость гамильтониана от $\varphi$ можно снова выяснить в общем виде исходя из соображений, аналогичных использованным выше. Действительно, включение фиктивного постоянного потенциала $\varphi = \varphi_0$ эквивалентно в уравнении Шредингера добавлению к энергии постоянного слагаемого $e\varphi_0$; такое слагаемое добавится и ко всем собственным значениям $\varepsilon_s(\mathbf{k})$. При непостоянном же, но медленно меняющемся в пространстве потенциале $\varphi(\mathbf{r})$ аналогичный операторный член добавляется к эффективному гамильтониану в $\mathbf{k}$-представлении:

$$\hat{H}_s = \varepsilon_s(\mathbf{k}) + e\varphi(\hat{\mathbf{r}}). \tag{56,13}$$

## § 57. Квазиклассические траектории

Применим полученные в предыдущем параграфе результаты к важному случаю, когда движение электрона в магнитном поле квазиклассично. Условие квазиклассичности состоит, как известно, в малости изменения де-бройлевской длины волны частицы на расстояниях порядка ее самой. В данном случае это условие эквивалентно неравенству

$$r_H \gg \lambda \tag{57,1}$$

— радиус кривизны орбиты велик по сравнению с длиной волны $\lambda \sim 1/k$ [1]).

В квазиклассическом случае имеет смысл понятие траектории частицы. Она определяется уравнениями движения, получающимися из (56,11) заменой операторов соответствующими классическими величинами:

$$\hbar\dot{\mathbf{K}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}, \quad \mathbf{v} = \frac{\partial H}{\hbar\,\partial \mathbf{K}}, \quad H = \varepsilon\left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)$$

(индекс $s$ для краткости опускаем). Раскроем эти уравнения, введя вместо обобщенного квазиимпульса $\mathbf{K}$ «кинетический квазиимпульс»

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{r}).$$

---

[1]) Это условие, вообще говоря, более сильное, чем условие (56,3). Но если $k \sim 1/a$ (как это имеет место для электронов проводимости в металле), то оба условия совпадают и фактически всегда выполняются: при $r_H \sim c\hbar k/|e|H \sim c\hbar/a|e|H$ условие $r_H \gg a$ приводит к требованию $H \ll c\hbar/|e|a^2 \sim 10^8 - 10^9$ э.