на расстоянии $\sim a$, мала по сравнению с характерной энергией ε_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 φ 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.

Имеем

$$\frac{\hbar\, d\mathbf{k}}{dt}+\frac{e}{c}\frac{d\mathbf{A}(\mathbf{r})}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}=\frac{e}{c}v_i\frac{\partial A_i}{\partial \mathbf{r}}.$$

Написав здесь $d\mathbf{A}/dt=(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{A}$ и заметив, что

$$(v_i\nabla)A_i-(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{A}=[\mathbf{v}\operatorname{rot}\mathbf{A}]=[\mathbf{v}\mathbf{H}],$$

получим уравнение движения

$$\frac{\hbar\, d\mathbf{k}}{dt}=\frac{e}{c}[\mathbf{v}\mathbf{H}],\quad \mathbf{v}=\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{k})}{\hbar\,\partial\mathbf{k}}. \tag{57,2}$$

Это уравнение отличается от обычного классического уравнения Лоренца лишь другой зависимостью $\varepsilon(\mathbf{k})$: вместо простой квадратичной функции мы имеем дело со сложной периодической функцией; соответственно сложной периодической функцией является и зависимость $\mathbf{v}(\mathbf{k})$. Это обстоятельство приводит, естественно, к существенному изменению характера движения электрона.

Рассмотрим движение электрона в однородном магнитном поле. Умножив уравнение (57,2) на $\mathbf{v}$, найдем обычным образом: $\hbar\mathbf{v}\,d\mathbf{k}/dt=d\varepsilon/dt=0$. Умножив же уравнение (57,2) на $\mathbf{H}$, найдем, что $d(\mathbf{H}\mathbf{k})/dt=0$. Таким образом, при движении электрона в решетке, как и при движении свободного электрона в магнитном поле:

$$\varepsilon=\text{const},\quad k_z=\text{const} \tag{57,3}$$

(ось z — в направлении поля $\mathbf{H}$). Равенства (57,3) определяют траекторию электрона в $\mathbf{k}$-пространстве. Геометрически эта траектория представляет собой контур сечения изоэнергетической поверхности $\varepsilon(\mathbf{k})=\text{const}$ плоскостью, перпендикулярной магнитному полю.

Изоэнергетические поверхности могут иметь самую разнообразную форму. Они могут содержать (в каждой ячейке обратной решетки) несколько не связанных друг с другом листов. Эти листы могут быть односвязными или многосвязными, закрытыми или открытыми. Для уяснения последнего различия удобно рассматривать изоэнергетическую поверхность, периодически продолженную по всей обратной решетке. В каждой ячейке будут находиться одинаковые замкнутые полости, а открытые поверхности проходят непрерывным образом через всю решетку, уходя на бесконечность[1]).

[1]) Отметим, во избежание недоразумений, что может оказаться невозможным выбрать ячейку обратной решетки таким образом, чтобы все существенно различные (т. е. не являющиеся периодическими повторениями) замкнутые полости были расположены внутри одной ячейки без того, чтобы быть рассеченными ее гранями.

Сечения изоэнергетической поверхности складываются из бесконечного множества контуров. Сюда относятся как контуры сечения различных листов изоэнергетической поверхности в пределах одной ячейки обратной решетки, так и контуры сечения листов, повторяющихся в различных ячейках. Если лист изоэнергетической поверхности замкнут, то и все его сечения представляют собой замкнутые кривые. Если же лист открытый, то его сечения могут быть как замкнутыми, так и открытыми (т. е. непрерывно продолжающимися через всю обратную решетку).

Квазиклассичность движения подразумевает также и малость вероятности *магнитного пробоя* — скачкообразного изменения квазиимпульса электрона с переходом его с одного контура на другой (к условию этой малости мы вернемся в конце параграфа). В пренебрежении этой вероятностью, следовательно, электрон движется лишь по одному контуру сечения изоэнергетической поверхности.

Рассмотрим более подробно движение по замкнутым траекториям в квазиимпульсном пространстве. Такое движение, очевидно, периодично во времени; определим его период.

Проецируя уравнение (57,2) на перпендикулярную полю плоскость k_x, k_y, получим

$$\frac{dl_k}{dt}=\frac{|e|H}{c\hbar}v_\perp, \quad v_\perp=\sqrt{v_x^2+v_y^2},$$

где $dl_k=\sqrt{dk_x^2+dk_y^2}$ — элемент длины **k**-орбиты. Отсюда

$$t=\frac{c\hbar}{|e|H}\int\frac{dl_k}{v_\perp}.$$

Если траектория замкнута, то период движения дается интегралом

$$T=\frac{c\hbar}{|e|H}\oint\frac{dl_k}{v_\perp}, \tag{57,4}$$

взятым по всему ее контуру. Это выражение можно преобразовать к более наглядному виду следующим образом.

Введем площадь $S(\varepsilon, k_z)$ сечения изоэнергетической поверхности $\varepsilon=\mathrm{const}$ плоскостью $k_z=\mathrm{const}$. Ширина кольца в этой плоскости между контурами $\varepsilon=\mathrm{const}$ и $\varepsilon+d\varepsilon=\mathrm{const}$ составляет в каждой его точке

$$\frac{d\varepsilon}{|\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}_\perp|}=\frac{d\varepsilon}{\hbar v_\perp},$$

так что площадь этого кольца

$$dS=d\varepsilon\oint\frac{dl_k}{\hbar v_\perp}.$$

Отсюда видно, что интеграл в (57,4) представляет собой не что иное, как частную производную $\partial S/\partial\varepsilon$. Таким образом, период движения

$$T = \frac{c\hbar^2}{|e|H}\frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial\varepsilon} \tag{57,5}$$

(*W. Shockley*, 1950). Здесь естественно ввести величину

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi}\frac{\partial S}{\partial\varepsilon}, \tag{57,6}$$

которую называют *циклотронной массой* электрона в решетке. Частота обращения электрона по орбите выражается через эту величину согласно формуле

$$\omega_H = |e|H/m^*c, \tag{57,7}$$

отличающейся от известной формулы для ларморовой частоты свободных электронов заменой их массы на m^*[1]).

Подчеркнем, однако, что в случае электронов в решетке циклотронная масса — не постоянная величина, а функция ε и k_z, так что она различна для разных электронов. Отметим также, что эта величина может быть как положительной, так и отрицательной; в первом случае электрон движется по орбите как отрицательно заряженная, а во втором — как положительно заряженная частица — дырка. Соответственно этому говорят об *электронных* и *дырочных траекториях*.

До сих пор мы говорили о траектории электрона в $\mathbf{k}$-пространстве. Легко видеть, однако, что существует тесная связь между траекториями в квазиимпульсном и обычном пространствах. Уравнение движения (57,2), переписанное в виде

$$\hbar\, d\mathbf{k} = -\frac{|e|}{c}[d\mathbf{r}\mathbf{H}],$$

после интегрирования (и надлежащего выбора начала отсчета координат $\mathbf{r}$ и квазиимпульсов $\mathbf{k}$), дает

$$\hbar\mathbf{k} = -\frac{|e|}{c}[\mathbf{r}\mathbf{H}]. \tag{57,8}$$

Отсюда видно, что xy-проекция орбиты в обычном пространстве по существу повторяет $\mathbf{k}$-траекторию, отличаясь от нее лишь ориентацией и масштабом: первая получается из второй заменой

$$k_x \to -\frac{|e|H}{\hbar c}y, \quad k_y \to \frac{|e|H}{\hbar c}x.$$

[1]) Для свободного электрона изоэнергетическая поверхность — сфера $\varepsilon = \hbar^2k^2/2m$. Ее сечения — круги с площадью $S = \pi(2m\varepsilon\hbar^{-2} - k_z^2)$, так что производная $\partial S/\partial\varepsilon = 2\pi m/\hbar^2$ и $m^* = m$.

Кроме того, в обычном пространстве имеется движение вдоль оси z со скоростью $v_z = \partial\varepsilon/\hbar\,\partial k_z$. Если траектория в $\mathbf{k}$-пространстве замкнута, то в обычном пространстве она представляет собой спираль с осью вдоль направления поля. Если же траектория открытая, то открыта также и проекция траектории на плоскости xy в обычном пространстве, т. е. движение в этой плоскости инфинитно.

Скажем еще несколько слов о квазиклассическом движении электрона при наложении на решетку постоянного однородного электрического поля $\mathbf{E}$. Из квазиклассического уравнения $\hbar\dot{\mathbf{k}} = e\mathbf{E}$ имеем

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t. \qquad (57,9)$$

Из закона же сохранения энергии имеем

$$\varepsilon(\mathbf{k}) - e\mathbf{E}\mathbf{r} = \mathrm{const}. \qquad (57,10)$$

Но энергия $\varepsilon(\mathbf{k})$ пробегает значения в конечном интервале $\Delta\varepsilon$ (ширина зоны); поэтому из (57,10) следует, что движение электрона в однородном электрическом поле финитно вдоль поля: электрон совершает в этом направлении колебания с амплитудой $\Delta\varepsilon/|e|E$. Если поле параллельно какому-либо периоду $\mathbf{b}$ обратной решетки, то движение периодично с частотой $\omega = 2\pi|e|E/\hbar b$; при $b \sim 1/a$ имеем $\hbar\omega_E \sim |e|Ea$. В общем случае произвольного направления поля движение квазипериодично.

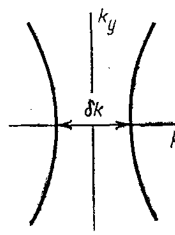

Рис. 14.

Наконец, остановимся на условии возможности пренебречь упомянутым выше явлением магнитного пробоя. Вероятность перехода с одной траектории (в $\mathbf{k}$-пространстве) на другую, естественно, велика, если эти траектории где-либо подходят аномально близко друг к другу. Такая ситуация возникает в случае, когда траектория близка к траектории с самопересечением, либо если траектория проходит вблизи пересечения двух листов изоэнергетической поверхности (т. е. вблизи точки вырождения). Типичная картина траекторий в таких случаях изображена на рис. 14; разрыв δk между траекториями мал по сравнению с характерными размерами орбит в целом, а радиус кривизны R_k траекторий вблизи точек их максимального сближения по порядку величины совпадает, вообще говоря, с δk. Переход с одной орбиты на другую происходит путем квантового туннелирования. Вероятность этого процесса мала (экспоненциально), если δk велико по сравнению с расстоянием Δk_x, на котором затухает волновая функция в классически недоступной области между траекториями.

Оценку Δk_x можно получить, воспользовавшись аналогией между движением электрона в магнитном поле и одномерным движением в некотором потенциальном поле $U(x)$. Эта аналогия основана на том, что, согласно (56,10), операторы $\hat{q}\equiv\hat{k}_x\hbar c/|e|H$ и $\hat{p}\equiv\hbar\hat{k}_y$ удовлетворяют правилу коммутации, совпадающему с правилом коммутации координаты и импульса. Вблизи точек максимального сближения траектории параболичны; им аналогична параболическая фазовая (x, p) траектория одномерного движения в однородном поле $(U=-Fx)$, уравнение которой $p^2/2m=Fx$ (если координата x отсчитывается от точки остановки). В последнем случае волновая функция затухает за точкой поворота на расстоянии $\Delta x\sim(\hbar^2/mF)^{1/3}$ (см. III § 24); введя радиус кривизны фазовой траектории $R\sim(d^2x/dp^2)^{-1}\sim mF$, напишем $\Delta x\sim(\hbar^2/R)^{1/3}$. По указанной аналогии искомое Δk_x можно получить путем замены $\Delta x\to\hbar c\Delta k_x/|e|H$, $R\to R_k\hbar|e|H/c$. Таким образом, находим $\Delta k_x\sim(|e|H/\hbar c)^{2/3}(\delta k)^{-1/3}$, и условие $\Delta k_x\ll\delta k$ принимает вид

$$|e|H/\hbar c\ll(\delta k)^2. \tag{57,11}$$

§ 58. Квазиклассические уровни энергии

Мы видели, что классическому движению электрона в решетке в магнитном поле по замкнутой траектории в **k**-пространстве отвечает в обычном пространстве движение, финитное в плоскости, перпендикулярной направлению поля **H**. При переходе к квантовой механике это приводит к возникновению дискретных уровней энергии при каждом фиксированном значении продольного квазиимпульса k_z. Эти уровни определяются общими правилами квазиклассического квантования.

Выберем векторный потенциал однородного магнитного поля (направленного вдоль оси z) в виде $A_x=-Hy$, $A_y=A_z=0$. Тогда компоненты обобщенного квазиимпульса

$$K_x=k_x+\frac{|e|}{c\hbar}Hy,\quad K_y=k_y,\quad K_z=k_z. \tag{58,1}$$

Координата x является циклической переменной, и поэтому x-компонента обобщенного квазиимпульса сохраняется:

$$K_x=k_x+\frac{|e|}{c\hbar}Hy=\text{const}. \tag{58,2}$$

Согласно правилу квантования Бора—Зоммерфельда (см. III § 48), пишем условие

$$\frac{1}{2\pi}\left|\oint K_y dy\right|=n, \tag{58,3}$$