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

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

где интегрирование распространено по периоду движения, а n — целое положительное число, предполагаемое большим[1]). Подставив сюда, согласно (58,1—2), $K_y=k_y$ и $dy=-(c\hbar/|e|H)\,dk_x$, получим

$$\frac{c\hbar}{2\pi|e|H}\left|\oint k_y\,dk_x\right|=n, \tag{58,4}$$

где теперь интеграл берется по замкнутой траектории в $\mathbf{k}$-пространстве. Этот интеграл — не что иное, как охватываемая траекторией площадь, т. е. введенная в предыдущем параграфе площадь $S(\varepsilon,\,k_z)$ сечения изоэнергетической поверхности плоскостью $k_z=\mathrm{const}$.

Таким образом, окончательно находим

$$S(\varepsilon,\,k_z)=2\pi\frac{|e|H}{c\hbar}n \tag{58,5}$$

(*И. М. Лифшиц*, 1951; *L. Onsager*, 1952). Этим условием и определяются в неявном виде уровни энергии $\varepsilon_n(k_z)$. Таким образом, энергетическая зона (номер s которой мы для краткости не выписываем) распадается на дискретный ряд *подзон Ландау*, каждая из которых представляет собой полосу уровней энергии, отличающихся значением непрерывной переменной k_z.

Как известно, квазиклассическое условие квантования может быть уточнено введением поправки, сводящейся к прибавлению к большому квантовому числу n числа порядка единицы. Определение этой поправки требует рассмотрения движения вблизи «точек остановки», ограничивающих область интегрирования в (58,3).

Зависимость $K_y=k_y$ от y на траектории электрона определяется уравнением

$$\varepsilon(\mathbf{k})=\varepsilon\left(K_x-\frac{|e|H}{c\hbar}y,\;k_y,\;k_z\right)=\mathrm{const} \tag{58,6}$$

при заданном значении k_z и при $K_x=\mathrm{const}$; точка остановки $y=y_0$ определяется условием обращения в нуль скорости $v_y=\partial\varepsilon/\hbar\,\partial k_y$. Вблизи этой точки разложение уравнения (58,6) по степеням $y-y_0$ дает

$$-\frac{|e|H}{c\hbar}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}\right)_0(y-y_0)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k_y^2}\right)_0(k_y-k_{y0})^2=0,$$

[1]) При движении в однородном магнитном поле адиабатическим инвариантом, не зависящим от выбора векторного потенциала, является интеграл $\frac{1}{2\pi}\oint \mathbf{K}_t\,d\mathbf{r}$, где $\mathbf{K}_t$ — проекция обобщенного квазиимпульса на плоскость, перпендикулярную полю (ср. II § 21). При сделанном выборе $\mathbf{A}$ интеграл $\oint K_x\,dx=K_x\oint dx=0$, так что адиабатический инвариант совпадает с интегралом в (58,3).

где $k_{y0}=k_y(y_0)$. Отсюда видно, что приближение к точке остановки происходит по корневому закону

$$k_y-k_{y0}=\pm A\sqrt{y-y_0}$$

(для определенности считаем, что классически недоступная область лежит при $y<y_0$). Но это—тот самый закон, к которому относится обычный вывод поправки в квазиклассическом квантовании (см. III §§ 47, 48). Уточненное правило (58,5) имеет, следовательно, вид

$$S(\varepsilon,\ k_z)=2\pi\frac{|e|H}{c\hbar}\left(n+\frac{1}{2}\right). \qquad (58,7)$$

Как это ясно из вывода (основанного на разложении функции (58,6)), для справедливости уточненного правила квантования необходимо, чтобы траектория проходила в достаточном удалении от особых точек функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ (в том числе от комплексных точек ветвления). Необходимо также, чтобы нигде вблизи траектории не нарушалось условие квазиклассичности (в частности—не обращалась в нуль x, y-проекция скорости $\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}$)[1]). Наконец, надо иметь в виду приближенность самого гамильтониана (56,7), на котором основаны все выводы. Если решетка обладает центром инверсии, то поправки к гамильтониану квадратичны по напряженности поля и не отражаются на условии (58,7). Но если центр инверсии отсутствует, то поправки к гамильтониану линейны по $\mathbf{H}$; в этом случае поправочный член 1/2 в (58,7) теряет смысл, так как погрешность того же порядка дает и приближенность гамильтониана[2]).

Интервал $\Delta\varepsilon$ между двумя последовательными уровнями отвечает изменению большого числа n на единицу. Он определяется, следовательно, равенством

$$\Delta S=\frac{\partial S}{\partial\varepsilon}\Delta\varepsilon=\frac{2\pi|e|H}{\hbar c}. \qquad (58,8)$$

Введя классическую частоту периодического движения ω_H, согласно (57,7), получим

$$\Delta\varepsilon=\hbar\omega_H. \qquad (58,9)$$

[1]) Вблизи точек аномального сближения двух траекторий эти условия совпадают с требованием малости вероятности магнитного пробоя.

[2]) Для свободных электронов (см. примечание на стр. 282) условие (58,7) дает

$$\varepsilon=\hbar\omega_H\left(n+\frac{1}{2}\right)+\hbar^2k_z^2/2m, \qquad \omega_H=|e|H/mc$$

в согласии с известным выражением Ландау для свободного электрона в магнитном поле (III § 112).

Подчеркнем, что частота ω_H сама есть функция ε (и k_z). Поэтому последовательные уровни энергии ε_n (при заданном k_z) не являются строго эквидистантными, как это было бы в случае свободных электронов, где ω_H есть постоянная величина.

Независимость уровней энергии от сохраняющейся величины K_x означает (как и для свободных электронов в магнитном поле — см. III § 112) их вырождение. Если представлять себе решетку, обладающей большим, но конечным объемом V, то кратность этого вырождения будет конечной. Число состояний в интервале dk_z и с заданным значением n определяется как $V\Delta S\cdot dk_z/(2\pi)^3$, где ΔS — площадь в плоскости $k_z=\mathrm{const}$, заключенная между траекториями с квантовыми числами n и $n+1$. Эта площадь дается выражением (58,8), и, таким образом, находим для искомого числа состояний выражение

$$\frac{Vdk_z}{(2\pi)^2}\frac{|e|H}{c\hbar} \tag{58,10}$$

— то же самое, что и в случае свободных электронов.

Наглядная причина вырождения уровней в магнитном поле заключается в независимости энергии от положения в пространстве «центра ларморовской орбиты» электрона. Для свободного электрона это вырождение является точным. Для электрона же в решетке оно может быть лишь приближенным: в виду наличия неоднородного (периодического) электрического поля различные положения «центра орбиты» в элементарной ячейке решетки уже не эквивалентны. Это обстоятельство должно приводить к некоторому расщеплению уровней Ландау.

Учет спина электрона приводит к расщеплению каждого уровня на две компоненты; в пренебрежении спин-орбитальной связью эти компоненты разделены (как и для свободного электрона) постоянным интервалом $2\beta H$, где β — магнетон Бора:

$$\varepsilon_{n\sigma}(k_z)=\varepsilon_n(k_z)+\sigma\beta H, \quad \sigma=\pm 1. \tag{58,11}$$

Такая ситуация остается и при учете спин-орбитального взаимодействия, если кристалл обладает центром инверсии. В этом случае состояния электрона в отсутствие поля вырождены по спину, а магнитное поле снимает это вырождение. В результате получается та же формула (58,11) с заменой β на $\beta\xi_n(k_z)$, где $\xi_n(k_z)$ характеризует изменение магнитного момента электрона.

§ 59. Тензор эффективных масс электрона в решетке

Рассмотрим точку $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$ в $\mathbf{k}$-пространстве, в которой энергия электрона $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ имеет экстремум; таковы, в частности, точки, отвечающие верху и низу зоны. Если в этой точке нет вырождения (за исключением лишь возможного крамерсовского вы-