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 вырождения по спину — см. конец § 55), то в ее окрестности функция $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ может быть подвергнута регулярному разложению по степеням разности $\mathbf{q}=\mathbf{k}-\mathbf{k}_0$. Первые члены такого разложения квадратичны:

$$\varepsilon_s(\mathbf{k})=\varepsilon_s(\mathbf{k}_0)+\frac{\hbar^2}{2}m_{ik}^{-1}q_iq_k. \tag{59,1}$$

Тензор m_{ik}, обратный тензору коэффициентов m_{ik}^{-1} в (59,1), называют *тензором эффективных масс* электрона в решетке. Покажем, каким образом можно выразить этот тензор через матричные элементы по отношению к блоховским функциям $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ в точке $\mathbf{k}_0$.

В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием гамильтониан электрона имеет вид (56,1). Подставим в уравнение Шредингера с этим гамильтонианом волновую функцию в виде

$$\psi_{s\mathbf{k}}=e^{i(\mathbf{k}_0+\mathbf{q})\mathbf{r}}u_{s\mathbf{k}}\equiv e^{i\mathbf{qr}}\varphi_{s\mathbf{k}}. \tag{59,2}$$

Тогда уравнение примет вид

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\mathbf{r})+\left[\frac{\hbar}{m}\mathbf{q}\hat{\mathbf{p}}+\frac{\hbar^2q^2}{2m}\right]\right\}\varphi_{s\mathbf{k}}=\varepsilon_s(\mathbf{k})\varphi_{s\mathbf{k}}, \tag{59,3}$$

где $\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla$ — оператор истинного импульса.

В окрестности точки $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$ вектор $\mathbf{q}$ является малой величиной, и выражение в квадратной скобке в (59,3) можно рассматривать как оператор возмущения. В нулевом приближении, при $\mathbf{q}=0$, функции $\varphi_{s\mathbf{k}}$ совпадают с функциями $\psi_{s\mathbf{k}_0}$. Поэтому обычная теория возмущений позволяет выразить поправку к энергии через матричные элементы по отношению к этим функциям.

Так как $\mathbf{k}_0$ — точка экстремума, то линейная по $\mathbf{q}$ поправка отсутствует. Это значит, что диагональные матричные элементы

$$\langle s\mathbf{k}_0|\mathbf{p}|s\mathbf{k}_0\rangle=0. \tag{59,4}$$

Для определения квадратичной по $\mathbf{q}$ поправки надо учесть член с q^2 в операторе возмущения в первом, а член с $\mathbf{q}$ — во втором порядке теории возмущений. В результате получим для $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ формулу (59,1), где

$$m_{ik}^{-1}=\frac{\delta_{ik}}{m}+\frac{1}{m^2}\sum_{s'}{}'\frac{(p_i)_{ss'}(p_k)_{s's}+(p_k)_{ss'}(p_i)_{s's}}{\varepsilon_{s'}(\mathbf{k}_0)-\varepsilon_s(\mathbf{k}_0)}; \tag{59,5}$$

суммирование производится по всем $s'\neq s$ [1]). Для упрощения записи в обозначении матричных элементов здесь и ниже опу-

---

[1]) Суммирование же по $\mathbf{k}'$ отсутствует, так как, согласно (55,15), импульс $\mathbf{p}=m\mathbf{v}$ не имеет матричных элементов, недиагональных по $\mathbf{k}$, так что все промежуточные состояния относятся к тому же квазиимпульсу $\mathbf{k}_0$.

скаем диагональный индекс $\mathbf{k}_0$: $\mathbf{p}_{ss'} \equiv \langle s\mathbf{k}_0 | \mathbf{p} | s'\mathbf{k}_0 \rangle$. Отметим, что при наличии близко расположенных зон (т. е. малых разностей $\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s$) второй член в (59,5) может оказаться большим по сравнению с первым, в результате чего эффективные массы будут малы по сравнению с m.

Пусть теперь на кристалл наложено однородное магнитное поле $\mathbf{H}$. Тогда, согласно (56,7), гамильтониан, действующий на функции обобщенного квазиимпульса $\mathbf{Q}$, получается из (59,1) заменой $\mathbf{q}$ на оператор

$$\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{Q} - \frac{e}{\hbar c}\hat{\mathbf{A}}, \quad \hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2}\left[\mathbf{H} \cdot i\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}\right]. \tag{59,6}$$

Получающийся таким образом гамильтониан

$$\hat{H}_s^{(0)} = \varepsilon_s(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} m_{ik}^{-1}\hat{q}_i\hat{q}_k \tag{59,7}$$

пригоден, разумеется, лишь в той же области энергий, что и исходная формула (59,1). Это значит, что (помимо условия слабости поля (56,3)) предполагается, что рассматриваемые уровни Ландау расположены не слишком высоко. В этом смысле величины $\mathbf{q}$ и $\mathbf{Q}$ должны рассматриваться как малые (возрастающий же характер потенциала $\mathbf{A}$ проявляется в том, что даже в слабом поле нельзя считать, что $\mathbf{A}$ мало по сравнению с $\mathbf{Q}$).

Следующие после (59,7) члены в гамильтониане содержат поле $\mathbf{H}$ в «чистом» (т. е. без сопровождающих операторов $\partial/\partial\mathbf{Q}$) виде. Такие члены уже нельзя найти из одних лишь соображений калибровочной инвариантности. Определим первый из этих членов, линейный по $\mathbf{H}$. При этом можно в силу относительной малости этой поправки при ее вычислении положить $\mathbf{Q} = 0$.

Рассмотрим сначала поставленный вопрос без учета спин-орбитального взаимодействия. Интересующий нас линейный по $\mathbf{H}$ член может возникнуть только из линейного по $\mathbf{A}$ члена в исходном точном гамильтониане электрона (56,2), т. е. путем усреднения по волновой функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ выражения

$$-\frac{e}{2mc}(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) = -\frac{e}{mc}\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} \tag{59,8}$$

(равенство связано с выбранной уже калибровкой с $\operatorname{div}\mathbf{A} = 0$). Это приводит к добавлению к гамильтониану (59,7) члена

$$H_s^{(1)} = -\mathbf{M}\mathbf{H}, \tag{59,9}$$

где

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2mc}\langle s\mathbf{k}_0 | [\mathbf{r}\mathbf{p}] | s\mathbf{k}_0 \rangle \tag{59,10}$$

есть просто среднее значение магнитного момента электрона в состоянии $s\mathbf{k}_0$. Подчеркнем, что поправку (59,9) можно добавить к гамильтониану (59,7), не опасаясь, что этот эффект уже частично учтен заменой (59,6); действительно, линейные по $\mathbf{H}$ члены в (59,7) при $\mathbf{Q}=0$ вообще отсутствуют.

Распишем выражение (59,10) по правилу матричного умножения, учтя, что в силу (59,4) $\mathbf{p}$ не имеет диагональных матричных элементов

$$M_x=\frac{e}{2mc}\sum_{s'}{}'\left[(\Omega_y)_{ss'}(p_z)_{s's}-(\Omega_z)_{ss'}(p_y)_{s's}\right]$$

(и аналогично для M_y, M_z); как и должно было быть, поправка к гамильтониану (59,7) выражается через матричные элементы оператора $\mathbf{\Omega}$. С помощью соотношения

$$\mathbf{\Omega}_{s's}=\frac{\mathbf{p}_{s's}}{i(\varepsilon_{s'}-\varepsilon_s)}$$

можно переписать $\mathbf{M}$ в виде

$$M_x=\frac{ie}{2mc}\sum_{s'}{}'\frac{(p_z)_{ss'}(p_y)_{s's}-(p_y)_{ss'}(p_z)_{s's}}{\varepsilon_{s'}(\mathbf{k}_0)-\varepsilon_s(\mathbf{k}_0)},\ \ldots \qquad (59,11)$$

Отметим, что $\mathbf{M}$, а тем самым и вся поправка (59,9) обращается в нуль, если кристалл обладает центром инверсии. Действительно, при одновременном обращении времени и инверсии состояние электрона (без учета его спина) не изменяется, а потому не изменится и правая сторона равенства (59,11); между тем магнитный момент при этом преобразовании должен изменить знак.

Учтем теперь спин-орбитальное взаимодействие в кристалле, добавив к гамильтониану (56,1) спин-орбитальный член $\hat{H}_{sl}$ из (55,17). Это приведет к изменению линейного по $\mathbf{q}$ члена в уравнении (59,3): оператор $\hat{\mathbf{p}}$ в этом члене заменится на

$$\hat{\boldsymbol{\pi}}=\hat{\mathbf{p}}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}[\boldsymbol{\sigma}\nabla U]. \qquad (59,12)$$

Оператор $\hat{\boldsymbol{\pi}}$ имеет простой физический смысл: непосредственно коммутируя гамильтониан (с учетом $\hat{H}_{sl}$) с $\mathbf{r}$, найдем, что (в отсутствие магнитного поля)

$$\hat{\dot{\mathbf{r}}}=\hat{\boldsymbol{\pi}}/m. \qquad (59,13)$$

Аналогично, произведя при наличии магнитного поля обычную замену $\hat{\mathbf{p}}\to\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A}/c$ в исходном гамильтониане (в том числе в $\hat{H}_{sl}$), мы найдем, что и линейный по $\mathbf{A}$ член имеет вид $-e\hat{\boldsymbol{\pi}}\mathbf{A}/mc$, отличающийся от (59,8) той же заменой $\hat{\mathbf{p}}$ на $\hat{\boldsymbol{\pi}}$. К магнитному же моменту (59,11) надо прибавить еще и спиновый магнитный момент свободного электрона, так что будет

$$M_x=\beta\langle s\mathbf{k}_0|\sigma_x|s\mathbf{k}_0\rangle+\frac{ie}{2mc}\sum_{s'}{}'\frac{(\pi_z)_{ss'}(\pi_y)_{s's}-(\pi_y)_{ss'}(\pi_z)_{s's}}{\varepsilon_{s'}-\varepsilon_s}. \tag{59,14}$$

С учетом спин-орбитального взаимодействия второй член в этом выражении отнюдь не равен нулю даже в кристалле с центром инверсии. Действительно, одновременное изменение знака времени и инверсия приводят к состоянию, отличающемуся направлением спина, так что все выражение (59,14), чтобы изменить знак при этом преобразовании, должно лишь сводиться к среднему от оператора $\beta\sigma_i\xi_{ix}(\mathbf{k})$ (ср. (56,12)).

Вычислим тензор ξ_{ik} в случае, когда спин-орбитальное взаимодействие может рассматриваться как возмущение[1]). Перепишем (55,17) в виде

$$\hat{H}_{sl}=\sigma\hat{\chi},\quad \hat{\chi}=\frac{i\hbar^2}{4m^2c^2}[\nabla U\cdot\nabla]. \tag{59,15}$$

Рассматривая (59,9) и (59,15) как возмущение, найдем поправку к энергии во втором порядке теории возмущений, оставив при этом только перекрестные (по (59,9) и (59,15)) члены. Эта поправка (все еще остающаяся оператором — матрицей — по спиновым переменным) имеет вид (56,12) с тензором ξ_{ik}, равным

$$\xi_{ik}=\delta_{ik}+\frac{1}{2}\sum_{s'}{}'\frac{(\chi_i)_{ss'}(L_k)_{s's}+(L_k)_{ss'}(\chi_i)_{s's}}{\varepsilon_{s'}-\varepsilon_s}, \tag{59,16}$$

где $\hbar\hat{\mathbf{L}}=[\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}]$.

Все сказанное относилось к невырожденным (кроме как по спину) состояниям. Если же при $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$ имеется вырождение, то для определения энергии надо составить секулярное уравнение, учитывающее возмущение (квадратные скобки в уравнении (59,3)) вплоть до членов второго порядка (т. е. по формуле III (39,4)). Свойства получающегося таким образом секулярного уравнения зависят от симметрии в точке $\mathbf{k}_0$. Мы вернемся еще к этому вопросу в § 68.

Задача

Найти квазиклассические уровни энергии для частицы с квадратичным законом дисперсии (59,1) в магнитном поле произвольного направления.

Решение. Приведем тензор m_{ik} к диагональному виду и будем отсчитывать энергию и импульс от точки экстремума (для определенности —

[1]) Выражение $\hat{H}_{sl}$ (55,17) представляет собой первый член разложения по релятивистскому отношению $(v/c)^2$ и потому в определенном смысле всегда мало. Эта малость, однако, не имеет отношения к применимости теории возмущений в данной конкретной зоне. Поэтому $\hat{H}_{sl}$ в рассматриваемой задаче не всегда может рассматриваться как малое возмущение.

минимума). Тогда

$$\varepsilon(\mathbf{k})=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_1^2}{m_1}+\frac{k_2^2}{m_2}+\frac{k_3^2}{m_3}\right), \tag{1}$$

где m_1, m_2, m_3 — главные значения тензора m_{ik} (положительные величины). Обозначив через $\mathbf{n}$ единичный вектор в направлении поля $\mathbf{H}$, имеем

$$k_z=\mathbf{nk}=n_1k_1+n_2k_2+n_3k_3 \tag{2}$$

(n_1, n_2, n_3 — направляющие косинусы поля относительно главных осей тензора m_{ik}). Нам надо найти площадь S той части плоскости (2), которая лежит внутри эллипсоида (1); она может быть представлена в виде интеграла

$$S=\int\delta(\mathbf{nk}-k_z)\,d^3k, \tag{3}$$

взятого по объему эллипсоида (1) [1]. Заменой переменных $\hbar k_i=(2\varepsilon m_i)^{1/2}q_i$ интеграл приводится к виду

$$S=(2\varepsilon)^{3/2}\hbar^{-3}(m_1m_2m_3)^{1/2}\int\delta(\mathbf{vq}-k_z)\,d^3q,$$

где вектор $\mathbf{v}$ в $\mathbf{q}$-пространстве имеет компоненты $\nu_i=(2\varepsilon m_i)^{1/2}n_i/\hbar$, а интегрирование производится по объему сферы $\mathbf{q}^2=1$. Интегрирование легко выполняется в цилиндрических координатах с осью вдоль $\mathbf{v}$ и дает

$$S(\varepsilon, k_z)=\frac{2\pi}{\hbar^2}m_\perp\left(\varepsilon-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m_\parallel}\right),$$

где

$$m_\parallel=m_1n_1^2+m_2n_2^2+m_3n_3^2,\qquad m_\perp=(m_1m_2m_3/m_\parallel)^{1/2}. \tag{4}$$

Подставив в (58,7), найдем уровни энергии

$$\varepsilon_n(k_z)=\frac{|e|\hbar H}{m_\perp c}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m_\parallel}. \tag{5}$$

§ 60. Симметрия состояний электрона в решетке в магнитном поле

В этом параграфе мы рассмотрим точные общие свойства трансляционной симметрии волновых функций блоховского электрона в магнитном поле, не связанные с каким-либо приближением (вроде условия слабости поля или условия квазиклассичности).

---

[1]) Пусть $f(x, y, z)=\mathrm{const}$ — семейство поверхностей, заполняющих некоторый объем. Расстояние dl между двумя бесконечно близкими поверхностями семейства: $dl=df/|\nabla f|$, а объем между этими поверхностями: $dV=S(f)\,dl$, где $S(f)$ — площадь поверхности с заданным значением f. Умножив равенство $S(f)\,df=|\nabla f|\,dV$ на δ-функцию $\delta(f)$ и проинтегрировав по объему и по df, получим площадь поверхности $f(x, y, z)=0$ в виде $S(0)=\int|\nabla f|\,\delta(f)\,d^3x$. В нашем случае $|\nabla f|=1$, откуда и получается выражение (3).