Лекция 10.

Движение электронов во внешнем электрическом поле. Уравнение движения для квазиимпульса. Ускорение. Тензор эффективных масс. Блоховские осцилляции. Возможность создания полупроводниковых диодов – генераторов.

Теперь рассмотрим, как электрон и кристалл реагирует на наличие внешнего электрического поля:

$$\begin{cases} \hat{H} \to \hat{H} + \hat{H}' \\ \hat{H}' = -e\vec{\varepsilon}\,\hat{\vec{r}} \end{cases}$$

$$\dot{\hat{\vec{q}}} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}+\hat{H}',\hat{\vec{q}}\right] = \underbrace{\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\vec{q}}\right]}_{0} + \frac{0}{\hbar}\left[-e\vec{\varepsilon}\,\hat{\vec{r}},\hat{\vec{q}}\right] = -\frac{i}{\hbar}e\varepsilon^{\alpha}\left[\hat{r}^{\alpha},\hat{\vec{q}}\right] =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}e\varepsilon^{\alpha}\left[i\frac{\partial}{\partial q_{\alpha}} + \hat{\Omega}_{\alpha}(\hat{\vec{q}}),\hat{\vec{q}}\right] = -\frac{i}{\hbar}e\varepsilon^{\alpha}\left\{i\left[\frac{\partial}{\partial q_{\alpha}},\hat{\vec{q}}\right] + \left[\hat{\Omega}_{\alpha}(\hat{\vec{q}}),\hat{\vec{q}}\right]\right\} =$$

(Второе слагаемое $\left[\hat{\Omega}_{\alpha}(\vec{q}), \hbar\vec{q}\right] = 0$, так как $\hat{\Omega}$ по определению действует на n

(перепутывает).)

$$= -\frac{i}{\hbar} e\varepsilon^{\alpha} i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial q_{\alpha}} \vec{q} - \vec{q} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha}} \right\} = e\varepsilon^{\alpha} \left\{ \begin{array}{c} \dfrac{\partial \vec{q}}{\partial q_{\alpha}} + \cancel{\vec{q} \dfrac{\partial}{\partial q_{\alpha}}} - \cancel{\vec{q} \dfrac{\partial}{\partial q_{\alpha}}} \\ \dfrac{\partial}{\partial q_{\alpha}} \vec{q} \ldots \end{array} \right\}$$

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial q_{\alpha}} = \vec{e}_{\alpha};$$

$$\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{q} = e\left(\vec{e}_{\alpha}\varepsilon^{\alpha}\right) = e\vec{\varepsilon}}$$

Рассмотрим величину, соответствующую ускорению:

$$w_n^{\alpha}\left(\vec{q}\right)=\dot{V}_n^{\alpha}\left(\vec{q}\right)=\frac{d}{dt}\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n\left(\vec{q}\right)}{\partial q_\alpha}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\frac{d}{dt}E_n\left(\vec{q}\right)=$$

$$=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\frac{\partial E_n\left(\vec{q}\right)}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 E_n\left(\vec{q}\right)}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}\frac{1}{\hbar}e\varepsilon^{\beta}\equiv\left(\frac{1}{m_n^*}\right)^{\alpha\beta}\left(e\varepsilon^{\beta}\right)$$

$$\dot{q}_\beta$$

$$w_n^{\alpha}\left(\vec{q}\right)=\left(\frac{1}{m_n^*}\right)^{\alpha\beta}\left(e\varepsilon^{\beta}\right)=\dot{V}_n^{\alpha}\left(\vec{q}\right)$$, тензорный коэффициент имеет размерность

$^{1}\!/_{массу}$.

$$\left(\frac{1}{m_n^*}\right)^{\alpha\beta}\equiv\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_n\left(\vec{q}\right)}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}\equiv\left(\frac{1}{m_n^*}\right)^{\beta\alpha}$$ - тензор эффективных масс (название – из – за размерности);

Пусть

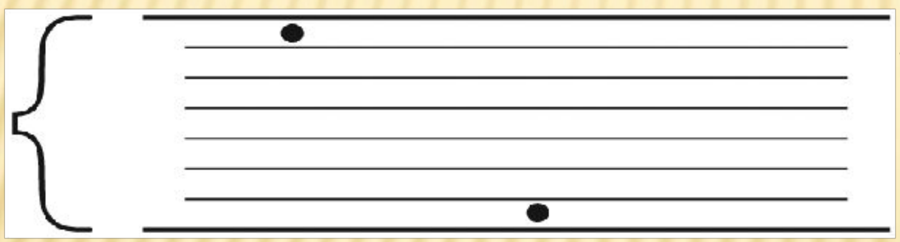
$$1)\ \vec{q} \approx \vec{q}_0 \to E_n(\vec{q}_0) = E_n^{\min},$$

тогда

$$E(\vec{q} \approx \vec{q}_0) = E_n^{\min} + 0 + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E_n(\vec{q}_0)}{\partial q_0^\alpha \partial q_0^\beta}(q-q_0)^\alpha (q-q_0)^\beta \ldots$$

По α, β идет сумма.

$E_n^{\max}$

$E_n(\vec{q})$ 

$E_n^{\min}$

$\dfrac{\partial^2}{\partial q^\alpha \partial q^\beta}$ -симметричный тензор , следовательно, может быть приведен к диагональному виду.

$$\approx E_n^{\min} + \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\left(q^x - q_0^x\right)^2}{m^*_{n,x}} + \frac{\left(q^y - q_0^y\right)^2}{m^*_{n,y}} + \frac{\left(q^z - q_0^z\right)^2}{m^*_{n,z}}\right]$$

$$\frac{1}{m^*_{n,\alpha}} \equiv \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_n\left(\vec{q}_0\right)}{\partial\left(q_0^\alpha\right)^2} > 0!$$

Мы получили представление о функциональном поведении $E\left(\vec{q}\right)$ вблизи минимума.

$$\left(\frac{1}{m^*_n}\right)^{\alpha,\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_n\left(\vec{q}\right)}{\partial q^\alpha\,\partial q^\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial q_\alpha \partial q_\beta}\left[\dots\right] = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\left[\frac{\partial}{\partial q_\beta}\frac{\left(q_\beta - q_{0\beta}\right)^2}{m^*_{..}}\right] =$$

$$= \frac{1}{\cancel{2}}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\frac{\cancel{2}\left(q_\beta - q_{0\beta}\right)}{m^*_{n,\beta}} = \delta^{\alpha\beta}\frac{1}{m^*_{n,\alpha}}$$

$\vec{q} \approx \vec{q}_0$

Ускорение $$\boxed{w_n^{\alpha}\left(\vec{q}\right) = \frac{\delta^{\alpha\beta}}{m^{*}_{n,\alpha}} e\mathcal{E}^{\beta} = \frac{e\mathcal{E}^{\alpha}}{m^{*}_{n,\alpha}} > 0 \ !}$$

$$2)\ \vec{q} \approx \vec{q}\,'_0 \rightarrow E_n\left(\vec{q}\,'_0\right) = E_n^{\max}$$

$$E_n\left(\vec{q} \approx \vec{q}\,'_0\right) \approx E_n^{\max} - \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\left(q_x - q'_{0x}\right)^2}{m'^{*}_{n,x}} + \frac{\left(q_y - q'_{0y}\right)^2}{m'^{*}_{n,y}} + \frac{\left(q_z - q'_{0z}\right)^2}{m'^{*}_{n,z}}\right];$$

$$\frac{1}{m'^{*}_{n,\alpha}}=\frac{1}{\hbar^{2}}\left|\frac{\partial^{2}E_{n}\left(\vec{q}'_{0}\right)}{\partial\left(\vec{q}'_{0\alpha}\right)^{2}}\right|$$; теперь, с учетом знака минус в предыдущей формуле

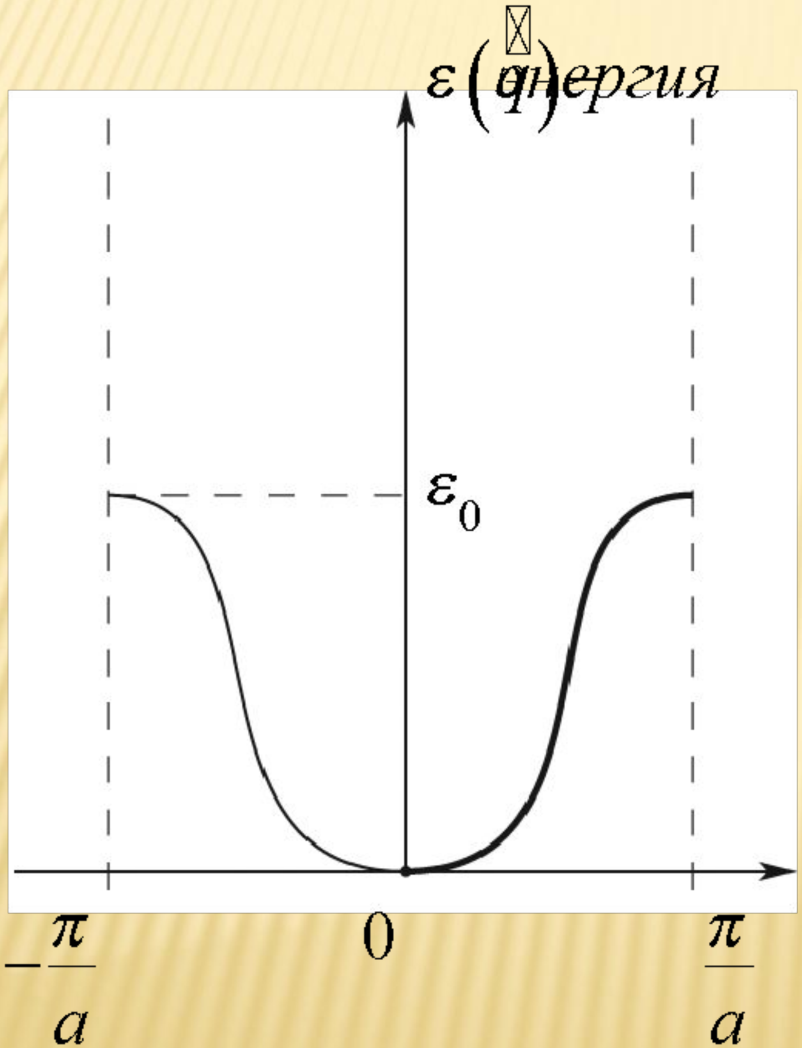
$$\left(\frac{1}{m_{n}^{*}}\right)^{\alpha\beta}_{\Big|\vec{q}\to\vec{q}'_{0}}=-\frac{\delta^{\alpha\beta}}{m'^{*}_{n,\alpha}}\to w_{n}^{\alpha}\left(\vec{q}\to\vec{q}'_{0}\right)=-\frac{e\varepsilon^{\alpha}}{m'^{*}_{n,\alpha}}<0 \;\; !$$

Понятие эффективной массы можно ввести только вблизи экстремумов (в силу разложения). Иначе в точке, где вторая производная переходит через ноль, эффективная масса m^{*} обращалась бы в бесконечность.

Электрон находится под воздействием двух полей – поля решетки и внешнего однородного постоянного поля $\vec{\varepsilon}$.

Знание $E_{n}\left(\vec{q}\right)$ и есть знание воздействия поля решетки.

Вблизи минимума зоны электрон “почти” свободный (воздействие поля решетки сведено к минимуму), и он ускоряется внешним полем.
Затем поле решетки “притормаживает” внешнее поле, и кривизна из положительной переходит в отрицательную!



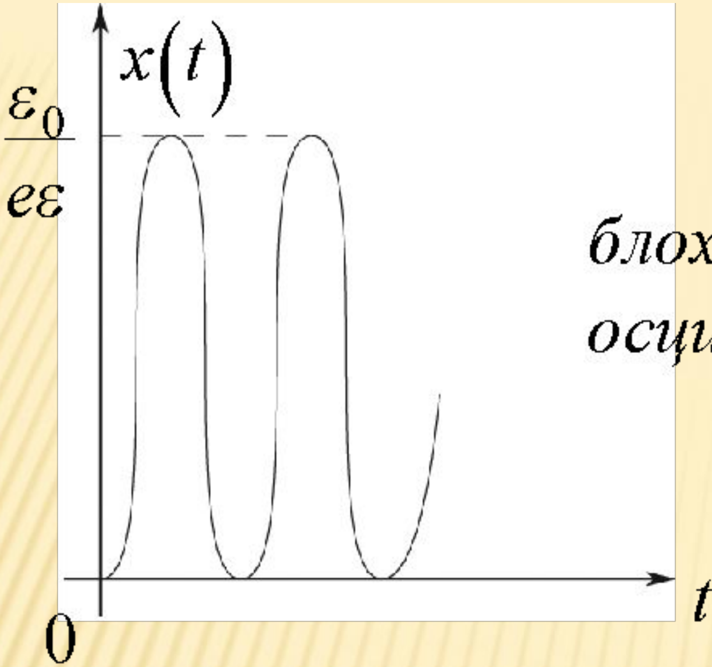
$$\boxtimes\overset{\boxtimes}{q} = (-e)(-\varepsilon) = e\varepsilon > 0$$

$q(t) = \dfrac{e\varepsilon}{\boxtimes} t + q(0)$; q только растет со временем, $q(0) = 0$ - в минимальном положении.

$-\varepsilon$ - против оси, чтобы учесть знак заряда.

$$x(t) = \int_0^t V(t_1)\,dt_1 = \int_0^t \frac{1}{\boxtimes} \frac{\partial \varepsilon\left(\overset{\boxtimes}{q}(t_1)\right)}{\partial q(t_1)}\,dt_1 = \int_0^t \frac{1}{\cancel{\boxtimes}} \frac{\partial \varepsilon\left(q(t_1)\right)}{\frac{1}{\cancel{\boxtimes}} e\varepsilon} =$$

$$= \frac{\varepsilon\left(q(t)\right)}{e\varepsilon} = \boxed{\frac{\varepsilon\left(\frac{e\varepsilon}{\boxtimes} t\right)}{e\varepsilon} = x(t)}$$



блоховские осцилляции

$x(0)=0$ координата электрона.

$x(t)$ - осциллирующая функция , следовательно, ток равен нулю.

Для того, чтобы наблюдать такое поведение электрона необходимо иметь идеальный кристалл размером с Эверест. В реальных кристаллах раньше сработает отражение от стенок, чем блоховость.
Существуют такие потенциалы (созданные руками), при которых векторная функция будет меняться на расстояниях порядка нужных нам.

При таких осцилляциях $x(t)$, производная от тока, то есть динамическое

сопротивление – отрицательно, таким образом этот “прибор” является генератором (диод Ганна).