<u>Лекция 10.</u>
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:

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

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

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

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

$$=-\frac{i}{\hbar}e\varepsilon^\alpha i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\vec{q}-\vec{q}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\right\}=e\varepsilon^\alpha\left\{\underbrace{\frac{\partial\vec{q}}{\partial q_\alpha}+\cancel{\vec{q}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}}}_{\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\vec{q}\ldots}-\cancel{\vec{q}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}}\right\}$$

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

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

Рассмотрим величину, соответствующую ускорению:

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

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

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

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

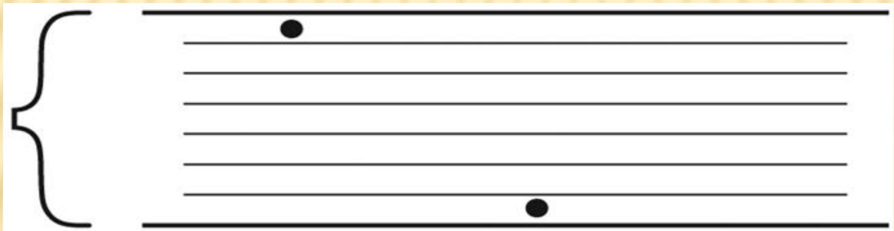
Пусть

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

тогда

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

По α, β идет сумма.

$E_n(\vec{q})$  $E_n^{\max}$ $E_n^{\min}$

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

$$\simeq E_n^{\min} + \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\left(\tilde{q}^x - \tilde{q}_0^x\right)^2}{m_{n,x}^*} + \frac{\left(\tilde{q}^y - \tilde{q}_0^y\right)^2}{m_{n,y}^*} + \frac{\left(\tilde{q}^z - \tilde{q}_0^z\right)^2}{m_{n,z}^*}\right]$$

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

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

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

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

Ускорение

$$\boxed{\begin{array}{l} \tilde{q} \sim \tilde{q}_0 \\ \swarrow \\ w_n^{\alpha}(\vec{q}) = \dfrac{\delta^{\alpha\beta}}{m_{n,\alpha}^{*}} e\varepsilon^{\beta} = \dfrac{e\varepsilon^{\alpha}}{m_{n,\alpha}^{*}} > 0 \;\; ! \end{array}}$$

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

$$E_n(\vec{q} \sim \vec{q}_0') \simeq E_n^{\max} - \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\left(\tilde{q}_x - \tilde{q}'_{0x}\right)^2}{m'^{*}_{n,x}} + \frac{\left(\tilde{q}_y - \tilde{q}'_{0y}\right)^2}{m'^{*}_{n,y}} + \frac{\left(\tilde{q}_z - \tilde{q}'_{0z}\right)^2}{m'^{*}_{n,z}}\right];$$

$$\frac{1}{m'^{*}_{n,\alpha}}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{\partial^2 E_n\left(\vec{q}'_0\right)}{\partial\left(\tilde{q}'_{0\alpha}\right)^2}\right|$$; теперь, с учетом знака минус в предыдущей формуле

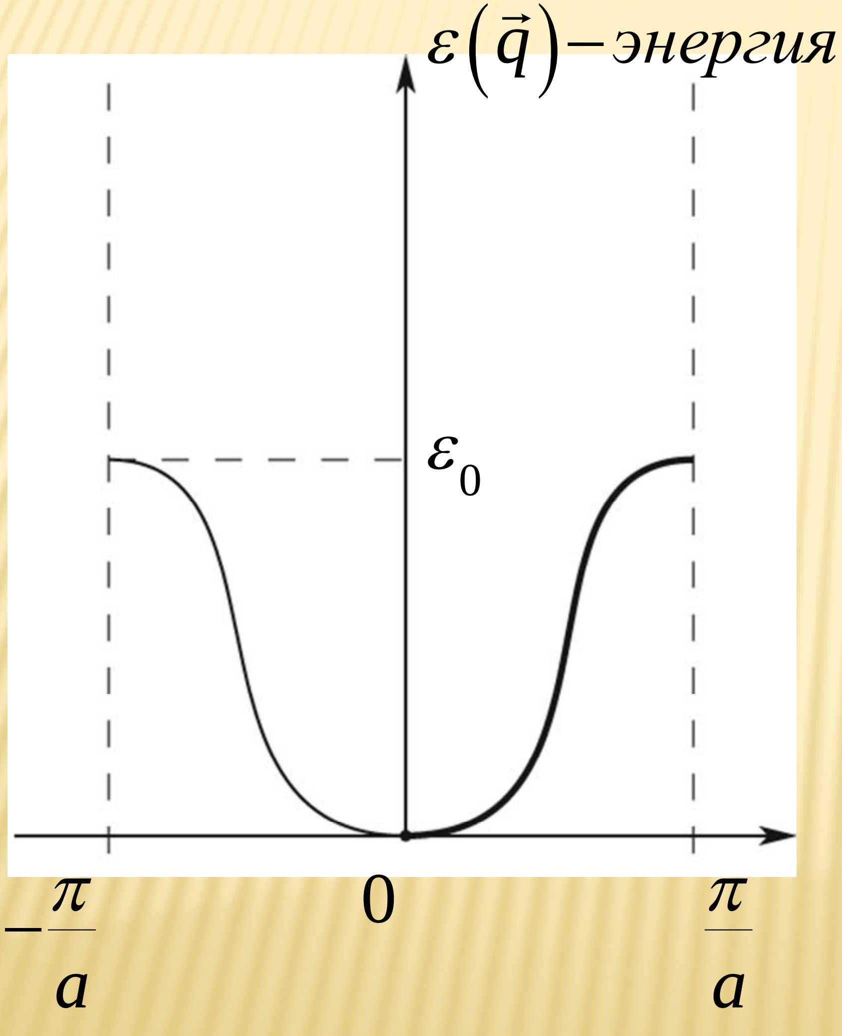
$$\left(\frac{1}{m_n^*}\right)^{\alpha\beta}_{\Big|\vec{q}\sim\vec{q}'_0}=-\frac{\delta^{\alpha\beta}}{m'^{*}_{n,\alpha}}\rightarrow w_n^\alpha\left(\vec{q}\sim\vec{q}'_0\right)=-\frac{e\varepsilon^\alpha}{m'^{*}_{n,\alpha}}<0\ !$$

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!



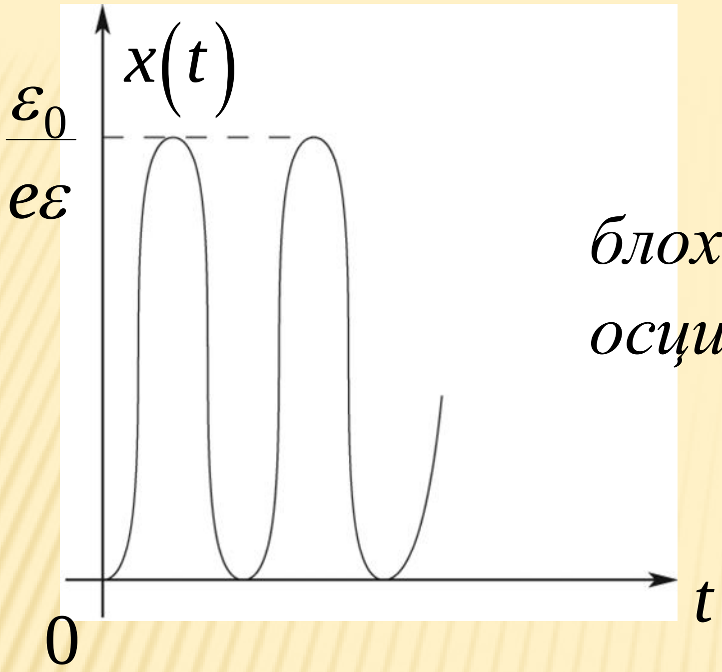
$$\hbar\dot{\vec{q}}=(-e)(-\varepsilon)=e\varepsilon>0$$

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

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

$$x(t)=\int_0^t V(t_1)dt_1=\int_0^t\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon(\vec{q}(t_1))}{\partial q(t_1)}dt_1=\int_0^t\frac{1}{\cancel{\hbar}}\frac{\partial\varepsilon(q(t_1))}{\frac{1}{\cancel{\hbar}}e\varepsilon}=$$

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



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).