

## 7 Dynamika elektronu w polu magnetycznym

### 7.1 Trajektoria ruchu elektronu

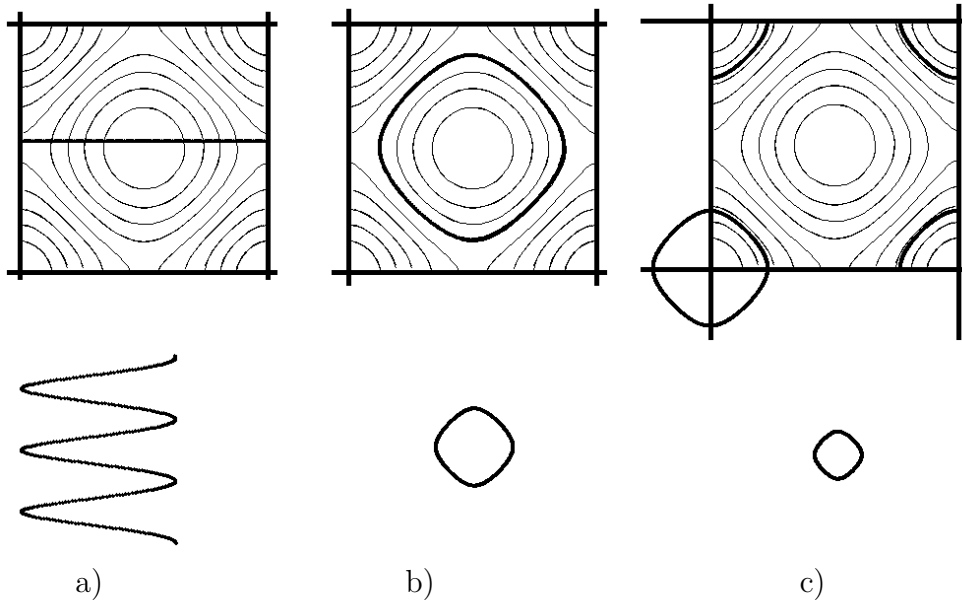
Równanie ruchu elektronu

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e(\vec{v} \times \vec{B}). \tag{123}$$

Prędkość elektronu o danym  $\vec{k}$  zależy od relacji dyspersji

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{d\vec{k}}. \tag{124}$$

**SYM** Symulacje ziman.exe ruchu elektronów w kryształach w polu magnetycznym. W polu magnetycznym trajektoria ruchu powinna być taka, że  $\mathcal{E} = \text{const}$ .



Rysunek 68: Strefa Brillouina dla sieci kwadratowej z zaznaczonymi powierzchniami izoenergetycznymi, a poniżej trajektorie w przestrzeni rzeczywistej. Prędkość  $\vec{v}$  elektronu jest proporcjonalna do gradientu  $\mathcal{E}(\vec{k})$ , a więc jest prostopadła do powierzchni izoenergetycznych. a) pole elektryczne  $E_x > 0$ ,  $B = 0$ . b) i c) pole magnetyczne  $B_z > 0$ , pole elektryczne  $E = 0$ . Wektor  $d\vec{k}/dt$  jest prostopadły do  $\vec{B}$  i do  $\vec{v}$ . Nie wszystkie trajektorie są zamknięte, jak te na rysunkach. W przypadku c) kierunek obrotu stanu jest przeciwny niż dla elektronu. Jest to **orbita dziurowa**. Wpływa to bardzo na efekt Halla, i prowadzi w niektórych metalach wieloelektronowych do dodatniego ładunku nośników w efekcie Halla.

## 7.2 Rezonans cyklotronowy\*

Z równań (123) i (124) wynika, że okres ruchu po orbicie zamkniętej, prostopadłej do pola magnetycznego może być wyliczony z zależności

$$T_c = \oint_{\mathcal{E}(\vec{k})=\text{const}} dt, \quad dt = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{dk}{|(d\mathcal{E}/d\vec{k})_{\perp}|}$$

gdzie  $(\dots)_{\perp}$  oznacza składową prostopadłą do  $\vec{B}$ . Na przykład dla najprostszego przypadku parabolicznej zależności

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2, \quad \vec{B} = B\hat{z},$$

jest

$$(d\mathcal{E}/d\vec{k})_{\perp} = \frac{\hbar^2}{m^*} k_{\perp}, \quad k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}.$$

Wtedy okres ruchu po kolistej trajektorii wynosi

$$T_c = \oint_{\mathcal{E}(\vec{k})=\text{const}} \frac{\hbar^2}{eB} \frac{m^*}{\hbar^2 k_{\perp}} dk = \frac{m^*}{eB k_{\perp}} \oint dk = \frac{m^*}{eB k_{\perp}} 2\pi k_{\perp} = \frac{2\pi m^*}{eB},$$

a związana z tym **częstość cyklotronowa**

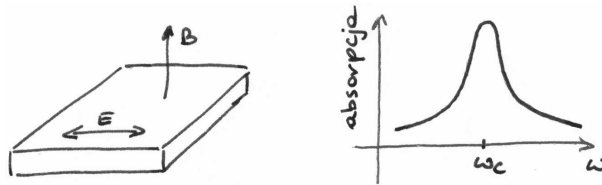
$$\omega_c = \frac{2\pi}{T_c} = \frac{eB}{m^*}.$$

Rząd wielkości: dla pola 1 Tesla i  $m^* = m_e$ ,  $T_c = 3.6 \times 10^{-11}$  s,  $\nu = \omega_c/2\pi \simeq 28$  GHz (mikrofale), energie fotonów  $\mathcal{E} = \hbar\omega_c \simeq 0.11$  meV.

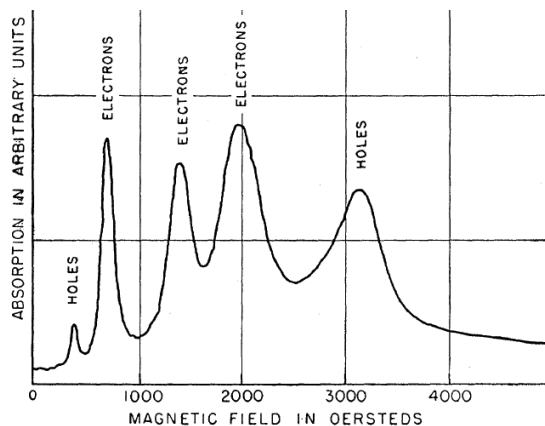
Uwaga. W ogólnym przypadku anizotropowego tensora masy  $M_{ij}$  wprowadza się tzw. cyklotronową masę efektywną

$$m^* = \sqrt{\frac{\det M_{ij}}{M_{zz}}}. \quad (125)$$

Te częstości ruchu elektronu po zamkniętej orbicie obserwuje się doświadczalnie jako tzw. rezonans cyklotronowy. Jest to możliwe gdy czas relaksacji elektronu  $\tau$  (czas między rozproszzeniami) jest wyraźnie większy od  $T_c$ . Tak jest dla czystych kryształów w niskich temperaturach, gdzie rozpraszanie na domieszkach i fononach jest mało prawdopodobne. Z pomiarów takich uzyskuje się informację o masach efektywnych elektronów dla półprzewodników. Dla metali pole  $E$  jest mocno ekranowane i nie wnika w głąb próbki, jest większa gęstość nośników oraz większe masy efektywne – dlatego dla metali takie pomiary znacznie trudniejsze, choć też możliwe przy odpowiedniej geometrii.



Rysunek 69: Monokryształ umieszczony jest w polu magnetycznym i mierzona jest absorpcja pola elektrycznego (mikrofal) w zależności od jego częstości. Pole  $\vec{E}$  jest prostopadłe do pola  $\vec{B}$ . Dla częstości  $\omega = \omega_c$  jest maksimum absorpcji. Główny przyczynik dają **orbity ekstremalne** ograniczające maksymalne lub minimalne powierzchnie z  $\mathcal{E} = \text{const}$ .



Rysunek 70: Absorpcja mikrofal o  $\nu = 382$  GHz w germanie w temperaturze  $T = 4$  K. Kierunek pola  $\vec{B}$  jest w płaszczyźnie (110) pod kątem  $60^\circ$  od osi [100]. Jest kilka maksimumów, bo jest kilka orbit w paśmie i związane z tym różne masy  $m^*$ . Dobór polaryzacji kołowej pola  $E$  pozwala odróżnić orbity elektronowe od dziurowych. Rysunek z pracy G. Dresselhaus, A. F. Kip, C. Kittel, *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals*, Phys. Rev. 98, 368 (1955).

### 7.3 Kwantyzacja Landaua

Opis elektronów w metalach w polu magnetycznym przedstawiony w rozdziale 1.9 *Paramagnetyzm Pauliego* pomijał pewne kwantowe efekty, które objawiają się w silnym polu i w niskich temperaturach.

Hamiltonian energii kinetycznej dla cząstki o ładunku  $-e$  poruszającej się w polu magnetycznym ma postać

$$\mathcal{H} = \frac{(\hat{p} + e\vec{A})^2}{2m}.$$

Oddziaływanie spinu elektronu z polem magnetycznym daje jedynie stałe przesunięcie energii o  $g\mu_B B(\pm\frac{1}{2})$  i dlatego jest pominięte w tym rozdziale dla uproszczenia wzorów.

Rozważmy pole jednorodne  $\vec{B} = B\hat{z} = (0, 0, B)$ . Jako potencjał wektorowy pola magnetycznego można przyjąć  $\vec{A} = (0, xB, 0)$ , czyli  $A_y = xB$ ,  $A_x = A_z = 0$ . Łatwo sprawdzić, że jest  $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$  tak jak powinno być. To wyprowadzenie można robić również przy innej postaci  $\vec{A}$  (innego cechowania) dającego takie same  $\vec{B}$ . W takim polu magnetycznym hamiltonian elektronu ma postać

$$\mathcal{H}\psi = \mathcal{E}\psi,$$

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}(\hat{p}_y + exB)^2 + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (126)$$

Komutatory operatorów pędu z hamiltonianem

$$[\hat{p}_x, \mathcal{H}] \neq 0, \quad [\hat{p}_y, \mathcal{H}] = 0, \quad [\hat{p}_z, \mathcal{H}] = 0.$$

Wartości własne i funkcje własne operatorów pędu

$$\hat{p}_y \exp(ik_y y) = \hbar k_y \exp(ik_y y),$$

$$\hat{p}_z \exp(ik_z z) = \hbar k_z \exp(ik_z z).$$

Hamiltonian  $\mathcal{H}$  komutuje z  $\hat{p}_y$  oraz z  $\hat{p}_z$ , więc funkcja  $\psi$  będzie miała postać

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(x) \exp(ik_y y) \exp(ik_z z) \quad (127)$$

Hamiltonian (126) działając na funkcję postaci (127) może być zapisany jako

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\psi &= \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m \frac{e^2 B^2}{m^2} \left( \frac{\hbar k_y}{eB} + x \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \psi \\ &= \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2 (x - x_0)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \psi, \end{aligned}$$

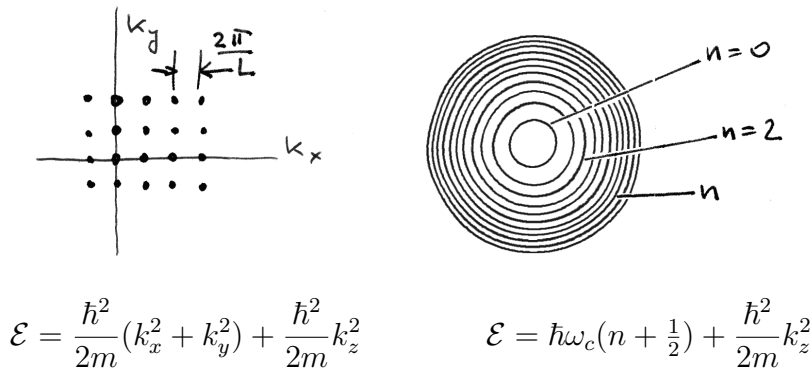
gdzie  $x_0 = -\hbar k_y / eB$ . Pierwsze dwa składniki w (...)

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(x - x_0)^2$$

mają postać hamiltonianu dla oscylatora harmonicznego, który ma energie własne  $\mathcal{E}_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$ . Dlatego energie własne hamiltonianu elektronu w polu magnetycznym danego równaniem (126) **mają końcową postać**

$$\mathcal{E}_{n,k_z} = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad \text{gdzie } \omega_c = \frac{eB}{m}. \quad (128)$$

Wartości energii dla różnych  $n$  nazywane są w tym przypadku **poziomami Landaua**.<sup>51</sup>



Rysunek 71: Kwantyzacja stanów elektronowych. Po lewej sytuacja bez pola magnetycznego: kwantyzacja wartości wektora falowego  $\vec{k}$  dla stanów elektronowych w periodycznych warunkach brzegowych. Po prawej: sytuacja w polu  $B_z \neq 0$ . Wielkości  $k_x$  i  $k_y$  nie są już dobrymi liczbami kwantowymi (nie są określone dla stanów własnych hamiltonianu). Dlatego rysuje się te poziomy jako **rurki Landaua**. Na każdej rurce jest tyle samo stanów elektronowych.

Komentarz: Powyższe wyprowadzenie zrobione było dla elektronów bez potencjału okresowego w kryształach. Po uwzględnieniu potencjału rurki Landaua mogą przestać być okrągłe. Pozostaną to jednak powierzchnie izoenergetyczne. Dlatego dalsze rozumowanie prawdziwe jest również dla elektronów w kryształach.

<sup>51</sup> $n$  w tym rozdziale ma inne znaczenie niż koncentracja elektronów  $n$  w rozdziałach poprzednich i kolejnych.

### 7.4 Degeneracja poziomów Landaua i pole orbity

czyli ile stanów elektronowych przypada na jedną rurkę (jedną wartość  $n$ ). Pole powierzchni między dwoma kolejnymi okręgami

$$2\pi k \Delta k = 2\pi \frac{m}{\hbar^2} \Delta \mathcal{E} = 2\pi \frac{m}{\hbar^2} \hbar \omega_c = 2\pi \frac{eB}{\hbar} \tag{129}$$

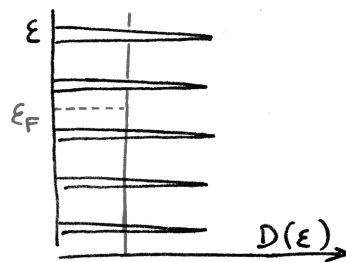
Na jeden okrąg przypada

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 2\pi \frac{eB}{\hbar} = L^2 \frac{e}{\hbar} B$$

stanów. Korzystając z (129) mamy powierzchnię orbity  $n$  w przestrzeni  $\vec{k}$

$$S_n = 2\pi \frac{eB}{\hbar} \left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{130}$$

Wynik ten, wyprowadzony tutaj dla elektronów swobodnych, jest poprawny również dla elektronów w strukturze pasmowej kryształu.



Rysunek 72: Gęstość stanów bez pola (niezależna od  $\mathcal{E}$ , na czerwono) i w polu magnetycznym (piki). W 2-dim jest  $D(\mathcal{E}) = \text{const} \cdot \mathcal{E}^0 = L^2 m / 2\pi \hbar^2$ . Niezależnie od wielkości pola  $B$  ilość stanów musi być stała, to znaczy ma być  $\int D(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \text{const}$ . Im piki są węższe, tym muszą być wyższe.

### 7.5 Kwant strumienia pola\*

Chcemy wyliczyć powierzchnię  $A_n$  orbity  $n$  w przestrzeni rzeczywistej. Żeby przeliczyć trajektorię ruchu elektronu z przestrzeni  $\vec{k}$  do przestrzeni  $\vec{r}$  trzeba skorzystać z równania

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B}.$$

Daje to proporcje pomiędzy zmianami  $k$  i  $r$

$$\Delta r = \frac{\hbar}{eB} \Delta k$$

w płaszczyźnie prostopadłej do  $\vec{B}$ . Stąd otrzymuje się powierzchnię przekroju  $n$ -tej rurki Landaua

$$A_n = \left(\frac{\hbar}{eB}\right)^2 S_n = 2\pi \frac{\hbar}{eB} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Strumień pola magnetycznego zawarty w  $n$ -tej rurce

$$\Phi = BA_n = \frac{h}{e} \left(n + \frac{1}{2}\right) = \Phi_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (131)$$

jest niezależny od pola  $B$ . Wielkość  $\Phi_0 = h/e = 4.14 \times 10^{-15} \text{ Tm}^2$  jest kwantem strumienia pola magnetycznego.<sup>52</sup>

## 7.6 Efekt de Haasa-van Alpheny i podobne

- zjawisko de Haasa-van Alpheny – oscylacje momentu magnetycznego w funkcji pola (odkryte dla kryształów bizmutu w Leiden ok 1930, czekało 20 lat na wyjaśnienie),<sup>53</sup>
- zjawisko Schubnikova-de Haasa – oscylacje magnetooporu,
- oscylacje innych wielkości związanych z gęstością stanów na poziomie Fermiego (przewodność cieplna, siła termoelektryczna, pochłaniania ultradźwięków)<sup>54</sup>

Okres oscylacji jest stały gdy mierzona wielkość jest narysowana w funkcji  $1/B$ . Wyraża to **relacja Onsagera**<sup>55</sup>

$$\Delta_{1/B} = \frac{2\pi e}{\hbar} \frac{1}{S_{\text{ekstr}}}, \quad (132)$$

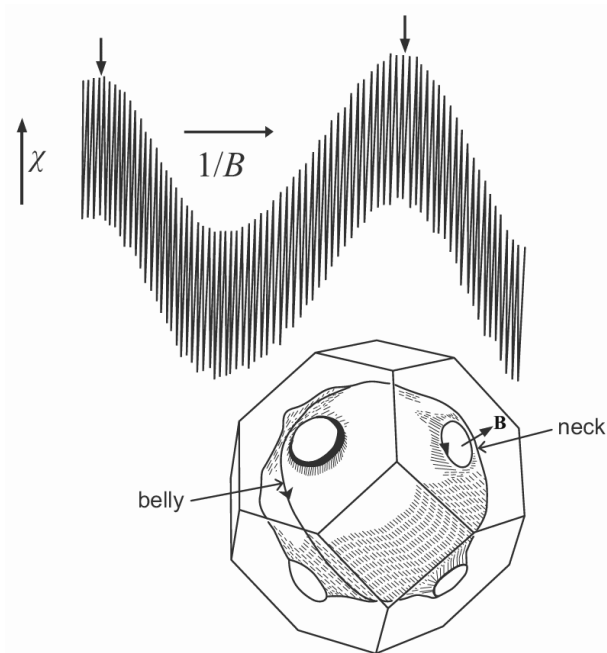
wiążąca odległość pomiędzy kolejnymi maksimami z  $S_{\text{ekstr}}$  – ekstremalnym (maksymalnym lub minimalnym) polem przekroju powierzchni Fermiego płaszczyzną prostopadłą do pola magnetycznego. Jeżeli powierzchnia Fermiego jest rozmyta przez temperaturę, lub rurki Landaua są rozmyte poprzez rozpraszanie elektronów, amplituda oscylacji dHvA zmniejsza się, aż do zera. Na ćwiczenia: oszacować jak niska musi być temperatura żeby efekt dHvA był obserwowalny.

<sup>52</sup>Dla nadprzewodników jest  $\Phi_0 = h/2e$  bo są pary elektronów (pary Coopera).

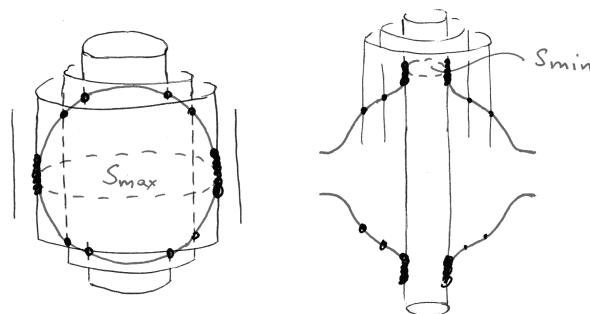
<sup>53</sup>W.J.de Haas, P.M. van Alphen, Leiden Comm., 208d (1930). Pomiary dla kryształów Bi w 14 K, do 20 kOe. Od 5 do 20 kOe widać dwa okresy.

<sup>54</sup>Przykład współczesny: B.S.Tan et al. Science 349, 287, 2015. *Unconventional Fermi surface in an insulating state*, (from abstract: quantum oscillation measurements of magnetic torque in high-purity single crystals of the Kondo insulator SmB6) To samo również Physics Today 2015. <http://scitation.aip.org/content/aip/magazine/physicstoday/news/10.1063/PT.5.7188>

<sup>55</sup>Lars Onsager, *Interpretation of the de Haas-van Alphen effect*, Philosophical Magazine, 43 (1952) 1006.



Rysunek 73: Oscylacje podatności dHvA w dużym polu magnetycznym dla srebra wzdłuż kierunku  $\langle 111 \rangle$ . Dwa różne okresy oscylacji są związane z orbitami *belly* i *neck* zaznaczonymi na przedstawionej powierzchni Fermiego. Rysunek z D. Schönberg and A.V. Gold, *Physics of Metals-1*, ed. J.M. Ziman (Cambridge, 1969).



Rysunek 74: Powierzchnia Fermiego i jej przekrój powierzchnią ekstremalną,  $S_{max}$  lub  $S_{min}$ , prostopadłą do kierunku pola. Rurki Landaua są równoległe do pola i ich przekrój  $S_n$  rośnie wraz ze wzrostem pola  $B$ . Jeżeli rurka Landaua rosnąc robi się styczna do powierzchni Fermiego to skokowo zmienia się gęstość stanów na powierzchni Fermiego i wszystkie związane z nią wielkości (podatność Pauliego, przewodnictwo elektryczne i ciepłne, ...). Te argumenty pozostają prawdziwe dla powierzchni Fermiego o bardziej skomplikowanych kształtach, a nie tylko o kołowych przekrojach, ponieważ zarówno powierzchnia Fermiego jak i rurki Landaua to powierzchnie izoenergetyczne. Rurki Landaua nie muszą być okrągłe.



Liczba stanów z powierzchni Fermiego pokrywająca się w rurką Landaua jest duża tylko gdy ta rurka jest styczna do powierzchni Fermiego, czyli wtedy gdy przekrój rurki  $S = S_{\text{ekstr}}$

Powierzchnia orbity Landaua w przestrzeni  $\vec{k}$

$$S_n = 2\pi \frac{eB}{\hbar} (n + \frac{1}{2})$$

rośnie przy zwiększonym polu  $B$ . Przy zmianie  $B$  tak żeby kolejna rurka zrobiła się styczna,

$$S_{\text{ekstr}} = S_n = 2\pi \frac{eB_n}{\hbar} (n + \frac{1}{2})$$

$$S_{\text{ekstr}} = S_{n+1} = 2\pi \frac{eB_{n+1}}{\hbar} (n + 1 + \frac{1}{2})$$

$$\Delta_{1/B} = \frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} = 2\pi \frac{e}{\hbar S_{\text{ekstr}}} \left[ n + 1 + \frac{1}{2} - (n + \frac{1}{2}) \right] = 2\pi \frac{e}{\hbar} \frac{1}{S_{\text{ekstr}}}$$

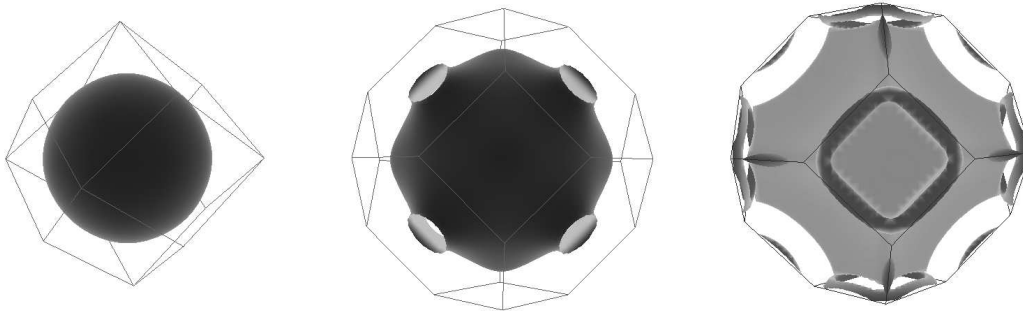
**Na ćwiczenia:** Jakiego rzędu jest  $n$  w takich warunkach. Na przykład dla elektronów swobodnych  $S = \pi k_F^2 = \pi(3\pi^2 N/V)^{2/3}$ . Dla Cu koncentracja elektronów  $N/V = 8.4 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  i dostajemy  $S = 5.78 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$  oraz ze wzoru (130)  $n \simeq 7800$ . Potrzebna jest jednorodność pola  $B$  lepsza niż  $1/n$ .

## 7.7 Powierzchnie Fermiego różnych metali

Powierzchnia Fermiego to powierzchnia izoenergetyczna w przestrzeni  $k$ , o energii  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_F$  – maksymalnej energii stanów obsadzonych w  $T = 0 \text{ K}$ .

Efekt dHvA pozwala eksperymentalnie sprawdzić przewidywania jakie są powierzchnie Fermiego dla metali.<sup>56</sup>

<sup>56</sup>Układ okresowy z powierzchniami Fermiego – na wykładzie.



Rysunek 75: Powierzchnie Fermiego dla potasu K, miedzi Cu oraz aluminium Al wyliczone w modelu TBA. Dla potasu jest to praktycznie kula (jak w modelu swobodnych elektronów) w całości mieszcząca się w 1BZ. Dla Cu powstają deformacje przy granicach 1BZ, ale nadal wszystkie elektrony są w 1BZ. Dla Al gdzie są 3 elektrony na węzeł sieci 1BZ jest całkowicie wypełniona i nie pokazana, 2BZ (na zielono) i 3BZ (na czerwono) są częściowo wypełnione. Decyduje to np. o dodatnim znaku współczynnika Halla dla Al, bo przeważające elektrony na powierzchni Fermiego są z 2BZ i mają odwrócone relacje dyspersji (obsadzone są stany na zewnątrz zielonej powierzchni, a nie w środku - jak dla innych powierzchni na rysunkach). Źródło: Univ. of Florida; T.-S. Choy *et al.*, *A database of fermi surface in virtual reality modeling language (vrml)*. Bull. Amer. Phys. Soc. 45:L36 42, 2000.