

Конспект лекции для аспирантов Института физики
им. Л.В.Киренского СО РАН

Квантовые осцилляции

(эффект де Гааза - ван Альфена)

Дзедзисашвили Д.М.



План лекции

- 1) Эффект де Гааза – ван Альфена.
- 2) Квазиклассическая динамика электрона в магнитном поле с произвольным $\varepsilon(k)$.
- 3) Квазиклассическое квантование движения электрона в магнитном поле с произвольным $\varepsilon(k)$.
- 4) Квантование Ландау.
- 5) Формула Лифшица-Косевича.

§1 Эффект де Гааза – ван Альфена

Осцилляционная зависимость намагниченности (восприимчивости) металла от магнитного поля

Теория

Диамagnetизм электронного газа

L. Landau, Z. Phys, 64, 629 (1930)

$$\chi_{\text{диа}} = -\frac{1}{3} \chi_{\text{пара}}$$

Слабые магнитные поля.

$$\mu_B H \ll k_B T$$

Что произойдет в сильном магнитном поле?

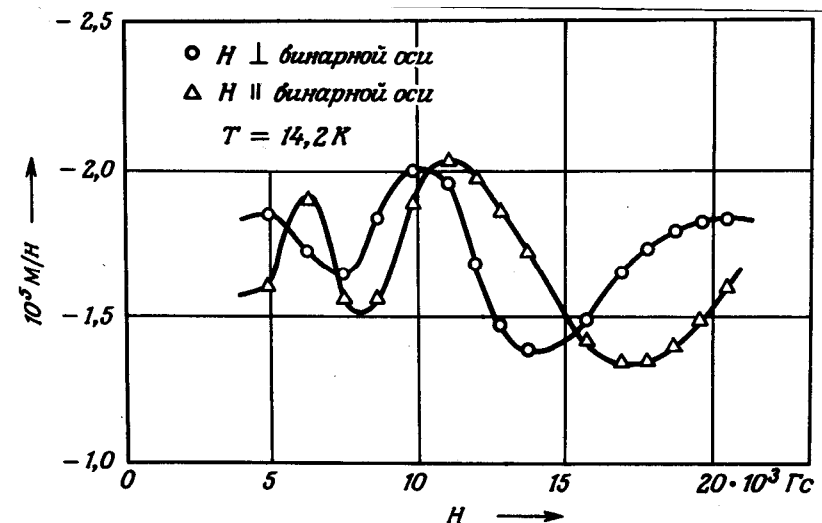
$$\mu_B H \gg k_B T \quad ?$$

Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Т.V, Статистическая физика. Ч 1, §59,60 (2001)

Эксперимент

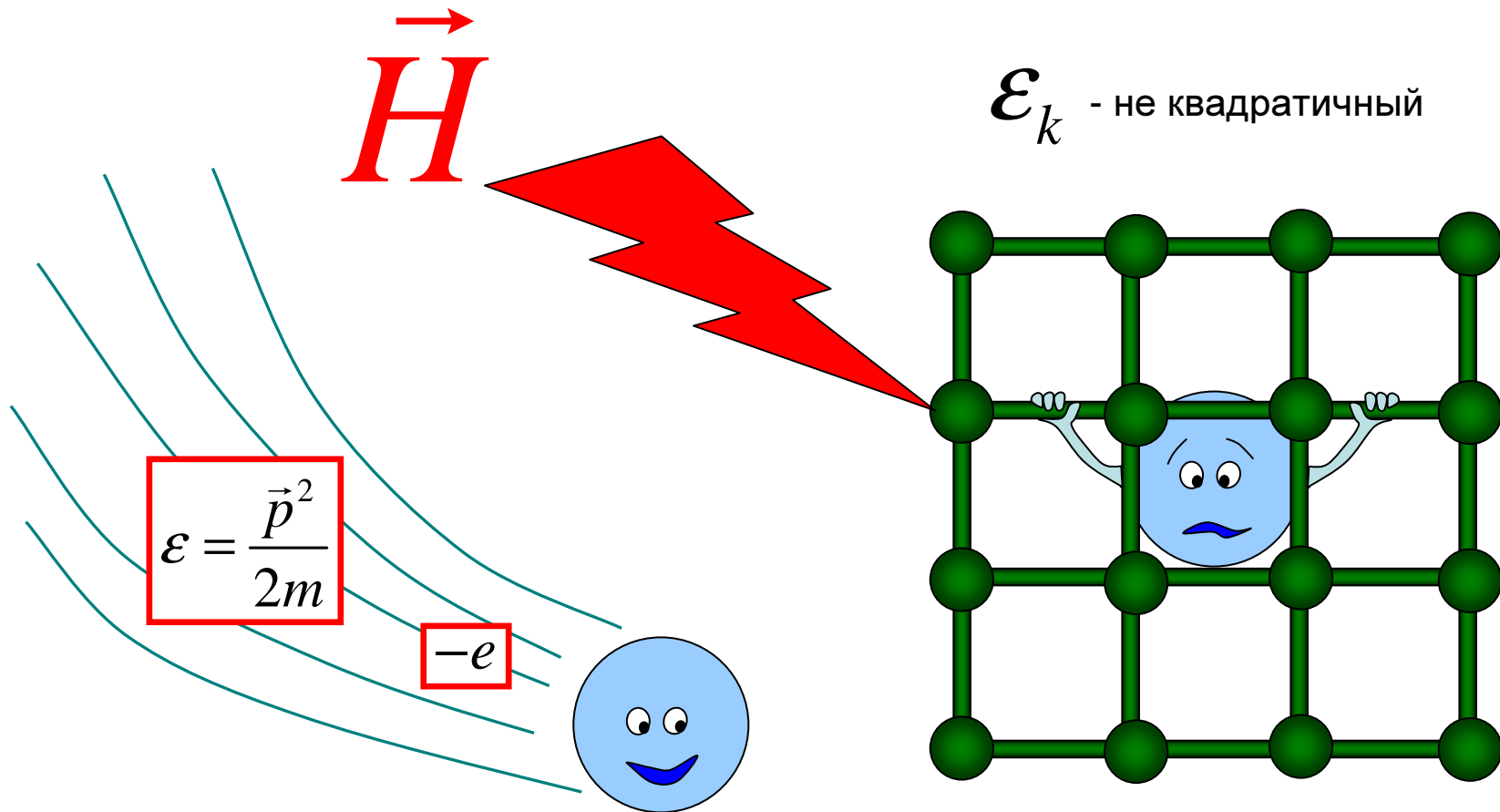
de Haas W.J., van Alphen P.M. Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci. 33, 1106 (1930)

Первое наблюдение эффекта дГВА на монокристалле висмута



Из книги: *Д. Шенберг. Магнитные осцилляции в металлах. М.: Мир, (1986)*

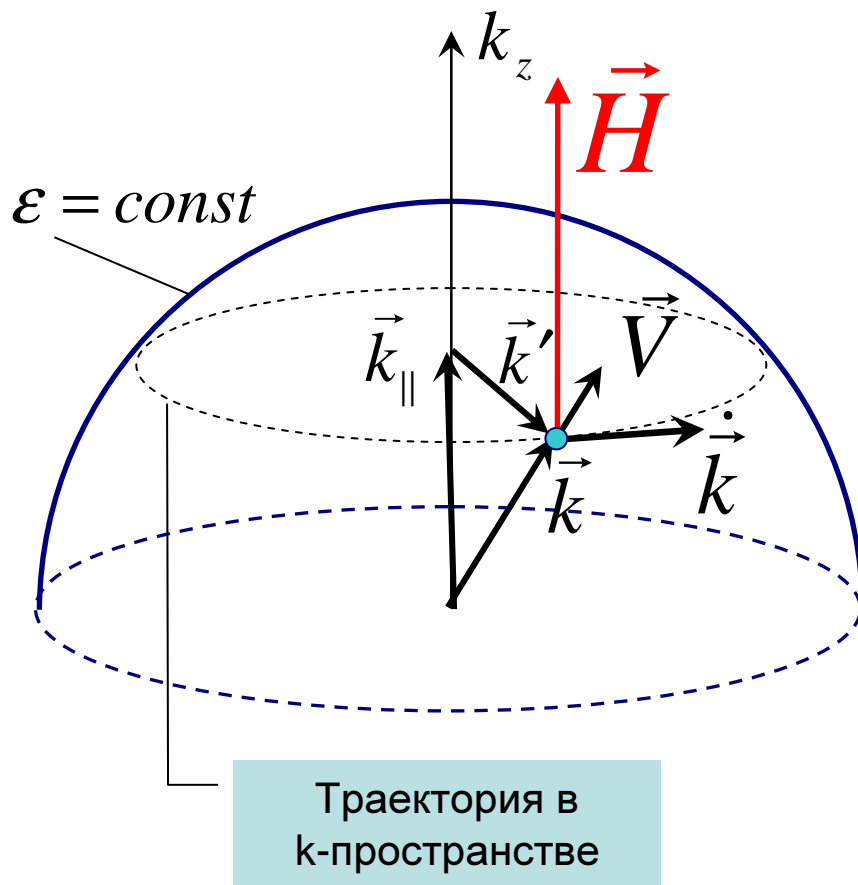
§2 Динамика электрона с произвольным законом дисперсии в магнитном поле (квазиклассическое рассмотрение)



Динамика электрона с произвольным законом дисперсии в магнитном поле (квазиклассическое рассмотрение)

Основные уравнения
квазиклассического
подхода:

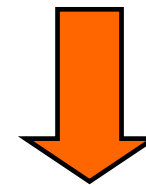
$$\hbar \dot{\vec{k}} = \frac{-e}{c} \vec{V} \times \vec{H}, \quad \vec{V} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \mathcal{E} \quad e > 0$$



Магнитное поле не совершает
работы – энергия сохраняется

$$\hbar(\vec{k} - \vec{k}_0) = \frac{-e}{c} (\vec{R} - \vec{R}_0) \times \vec{H}$$

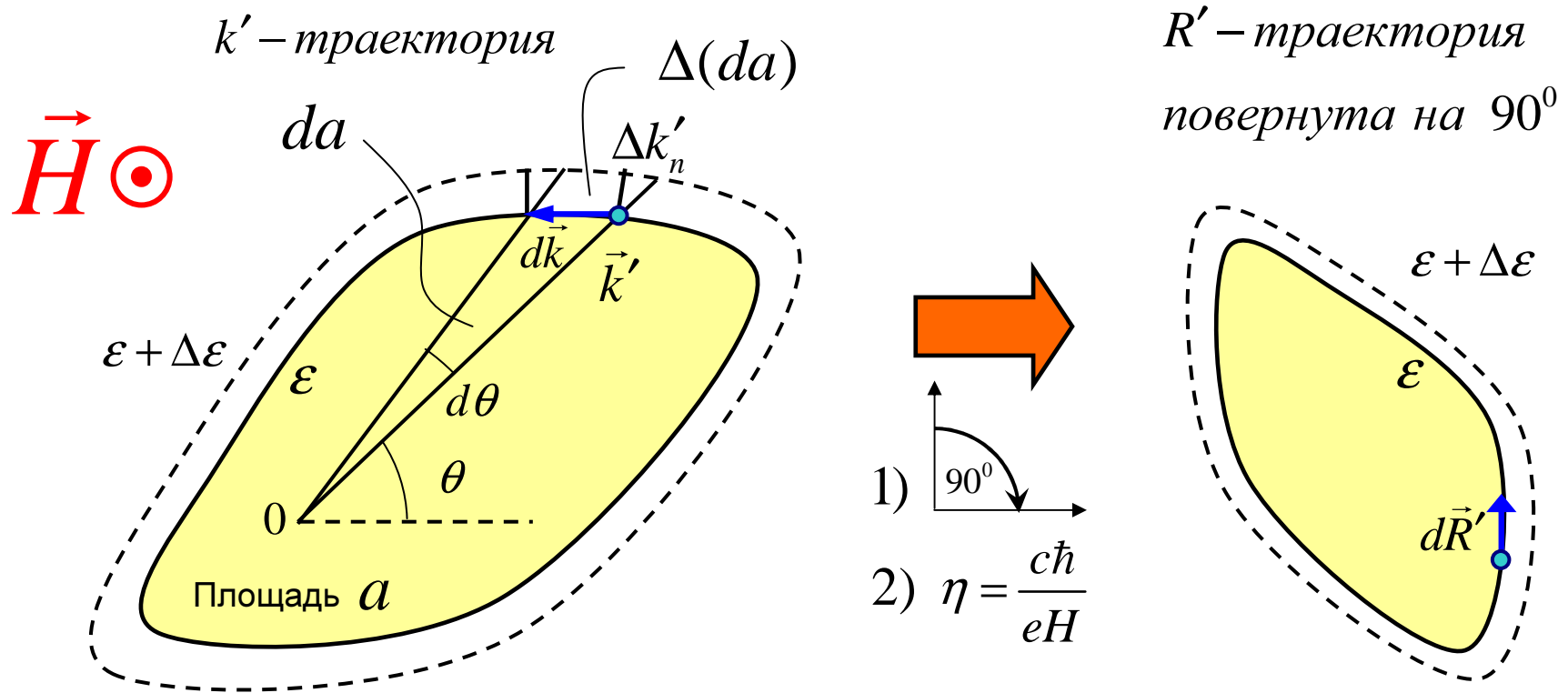
\vec{R} - радиус вектор
классической
траектории



$$\eta |\vec{k} - \vec{k}_0| = |\vec{R}' - \vec{R}'_0|$$

$$\eta = c\hbar / eH, \quad \vec{R}' \perp \vec{H}$$

Динамика электрона в магнитном поле



Время движения по элементу dk

$$dt = \frac{c\hbar^2}{e|\vec{\nabla}_k \epsilon \times \vec{H}|} dk = \frac{c\hbar^2}{eH \frac{\Delta\epsilon}{\Delta k'_n}} dk = \frac{c\hbar^2}{eH} \frac{\Delta k'_n dk}{\Delta\epsilon} = \frac{c\hbar^2}{eH} \frac{\Delta(da)}{\Delta\epsilon} = \frac{c\hbar^2}{eH} \left(\frac{\partial(da)}{\partial\epsilon} \right)_{k_{||}}$$

$k_{||}$ - проекция волнового вектора вдоль магнитного поля

Динамика электрона в магнитном поле

Циклотронная частота

$$\omega_c = \frac{2\pi eH}{c\hbar^2 \left(\frac{\partial a}{\partial \varepsilon} \right)_{k_{\parallel}}}$$

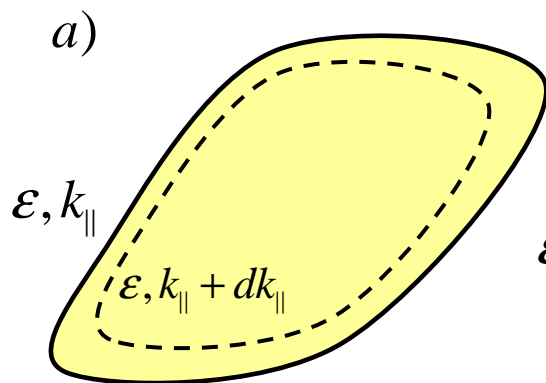
Шаг винтовой линии

$$P = -\frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial a}{\partial k_{\parallel}} \right)_{\varepsilon}$$

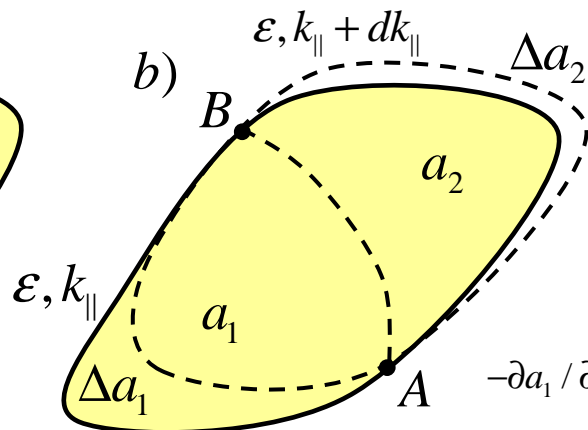
Смещение электрона вдоль поля

$$\begin{aligned} dR_{\parallel} &= V_{\parallel} dt = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\parallel}} \right)_{k'} dt = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\parallel}} \right)_{da} dt = \\ &= \frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\parallel}} \right)_{da} \left(\frac{\partial (da)}{\partial \varepsilon} \right)_{k_{\parallel}} = -\frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial (da)}{\partial k_{\parallel}} \right)_{\varepsilon} \\ &= - \left(\frac{\partial (da)}{\partial k_{\parallel}} \right)_{\varepsilon} \end{aligned}$$

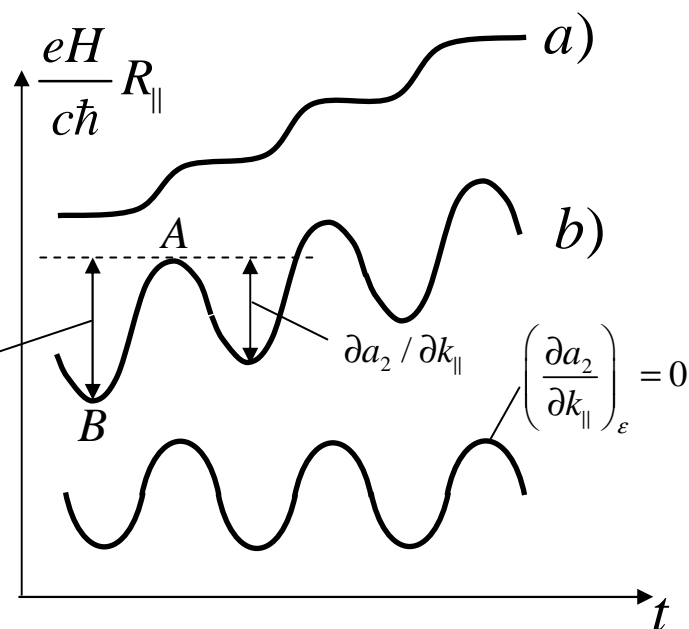
$$a = a(\varepsilon, k_{\parallel})$$



R_{\parallel} -монотонно
возрастает



Площадь нижней части
уменьшается быстрее, чем
увеличивается площадь верхней

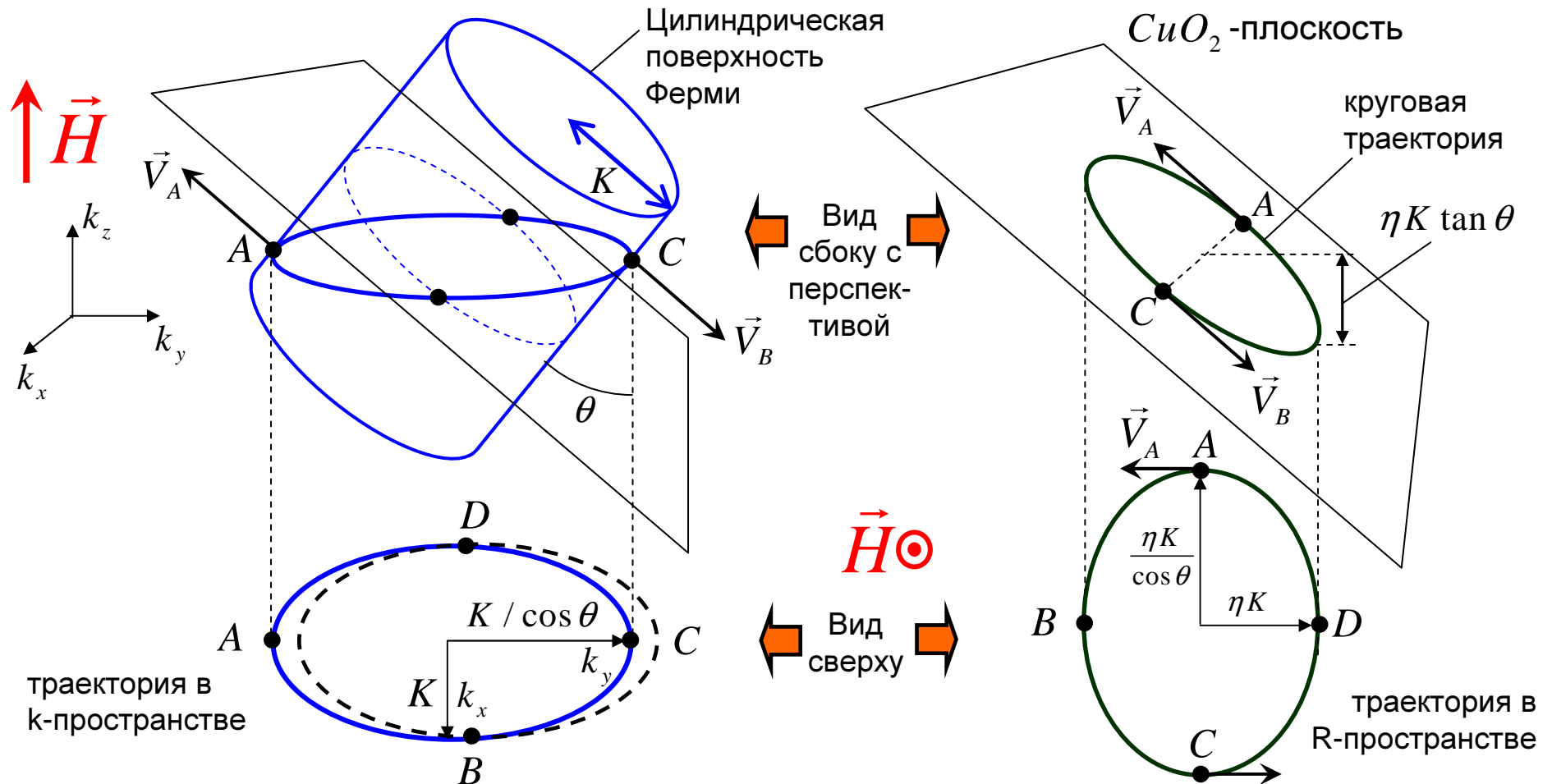


Динамика электрона в магнитном поле

Для эффекта дГВА интересны «экстремальные» орбиты $\left(\frac{\partial a}{\partial k_{\parallel}}\right)_{\varepsilon} = 0$

Для таких орбит: $P = 0$
 R_{\parallel} - может осциллировать

Хотя проекция орбиты в R-пространстве на нормальную к H плоскость имеет, ту же форму что и орбита в k-пространстве, сама орбита в R-пространстве может не лежать в нормальной к H плоскости.



Пример: газ электронов в магнитном поле

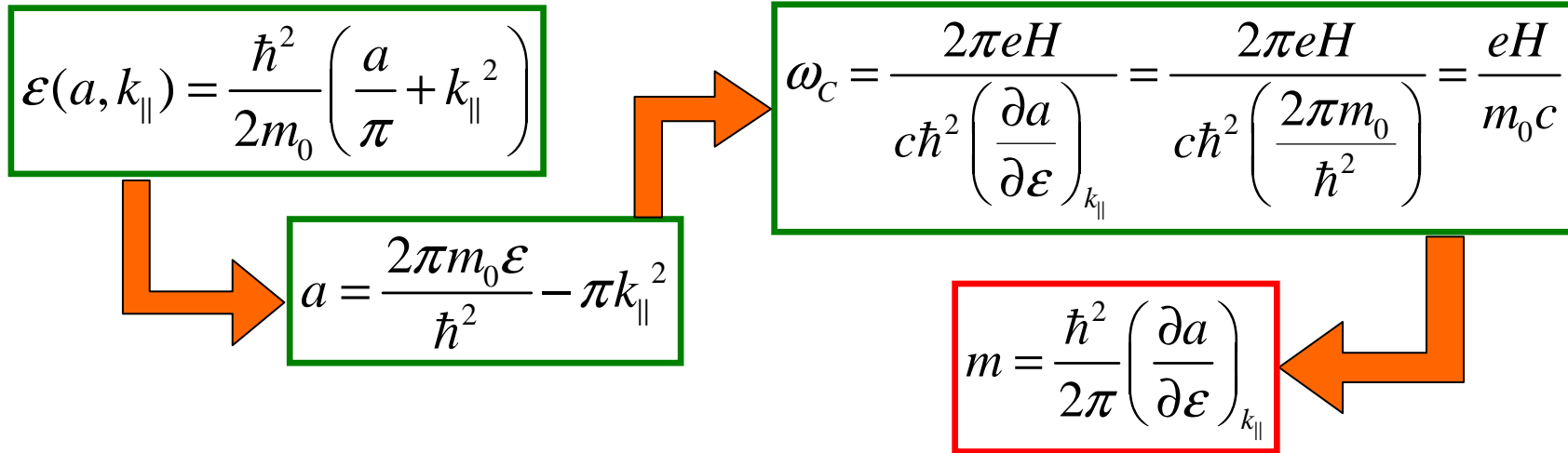
Закон дисперсии свободных электронов:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_{\parallel}^2 + k'{}^2)$$

Орбиты в k-пространстве – окружности площади: $a = \pi k'{}^2$

в R-пространстве – окружности, радиуса: $R' = \eta k' = c\hbar k' / eH$

Для свободных электронов: $V' = \hbar k' / m_0 \quad \longrightarrow \quad R' = cm_0 V' / eH$

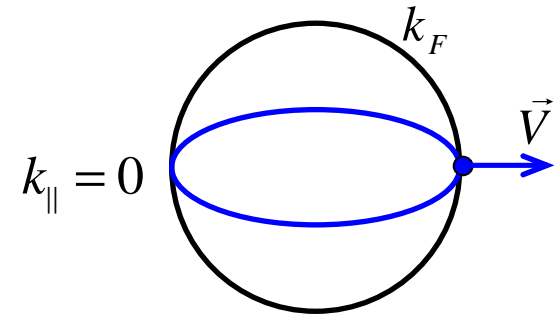


Определение циклотронной массы для произвольного закона дисперсии

Пример: газ электронов в магнитном поле

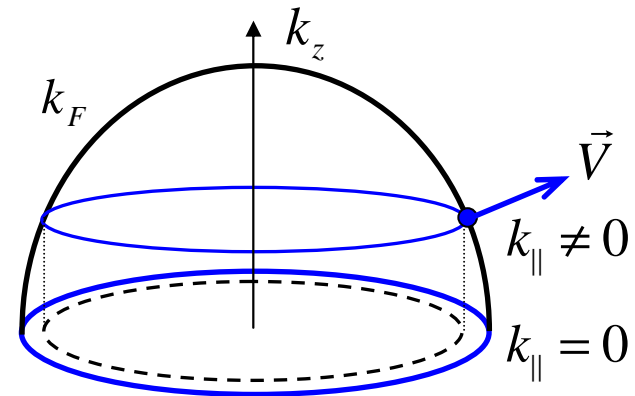
Поскольку:
$$dR_{\parallel} = -\frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial(da)}{\partial k_{\parallel}} \right)_{\varepsilon} \equiv 0$$

то во всех точках траектории экстремальной орбиты (т.е. при $k_{\parallel} = 0$), траектория электрона в R-пространстве перпендикулярна H.



Если $k_{\parallel} \neq 0$, то электрон движется по винтовой линии с шагом:

$$P = -\frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial a}{\partial k_{\parallel}} \right)_{\varepsilon} = \frac{2\pi c\hbar}{eH} k_{\parallel} = \frac{2\pi}{\omega_c} V_{\parallel}$$



В эффекте дГВА, как и в термодинамике и кинетике, главную роль играют электроны в окрестности поверхности Ферми.

Для металлов: $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_0} \sim 1 \div 8 \text{ (эВ)}$ \longrightarrow $k_F \sim 10^8 \text{ (см}^{-1}\text{)}$

§3 Квазиклассическое квантование движения электрона в магнитном поле

Условие квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint d\vec{q}\vec{p} = (n + \gamma) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Согласно Планку энергия осциллятора квантуется:

$$\frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega^2 q^2}{2} = \hbar\omega n$$

$$S = 2\pi\hbar n \quad \gamma = 0$$

Савельев И.В. Курс общей физики. Т.3, §16

В квазиклассическом приближении для параболической зоны:

$$\gamma = 1/2$$

Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Т. III, Квантовая механика §48

Для электрона в магнитном поле можно выбрать:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} - \frac{e}{c}\vec{A},$$

$$\vec{q} = \vec{R}'$$

$$\oint d\vec{R}' \left(\hbar\vec{k} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) = 2\pi\hbar(n + \gamma)$$

Из уравнений движения: $\hbar\vec{k} = \vec{b} - \frac{e}{c}\vec{R} \times \vec{H}$ где $\vec{b} = const$

$$-\frac{e}{c} \oint d\vec{R}' (\vec{R} \times \vec{H} + \vec{A}) = 2\pi\hbar(n + \gamma)$$



$$\underbrace{\vec{H} \oint (\vec{R} \times d\vec{R}')}_{2H\alpha} - \underbrace{\int d\vec{S}\vec{H}}_s = (n + \gamma) \frac{2\pi\hbar c}{e}$$

$$\Phi \equiv H\alpha = (n + \gamma) \frac{2\pi\hbar c}{e}$$

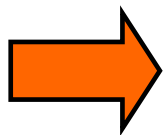
Магнитный поток через орбиту квантуется

α - площадь \vec{R}' - орбиты в реальном пространстве

Квазиклассическое квантование движения электрона в магнитном поле

Поскольку:

$$\alpha = (c\hbar / eH)^2 a$$



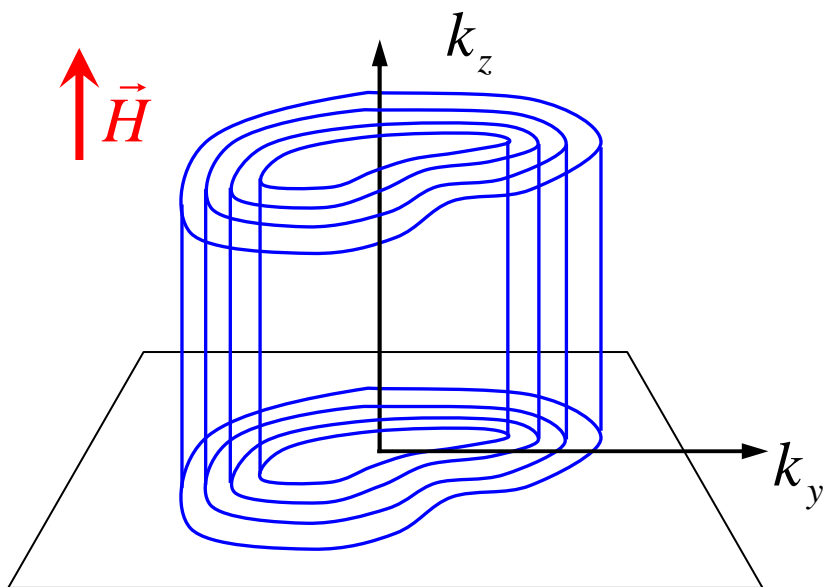
Соотношение Онзагера

$$a(\varepsilon, k_{\parallel}) = (n + \gamma) \frac{2\pi eH}{c\hbar}$$

Условие
квантования
площади
орбиты в
k-пространстве

Задаёт разрешенные уровни энергии в зависимости от H, n, k_{\parallel} .

Из $H, n, \Rightarrow a$, и зная закон дисперсии $\varepsilon(\vec{k})$ для каждого k_{\parallel} находим ε .



Величина n зависит от магнитного поля и для металлов $n \sim 10^3 - 10^4$

При $H=0$ число состояний
в единице объема
k-пространства: $= V / 4\pi^3$

Площадь кольца: $\Delta a = 2\pi eH / c\hbar$

Плотность состояний на длину dk_{\parallel}
одной трубки равна:

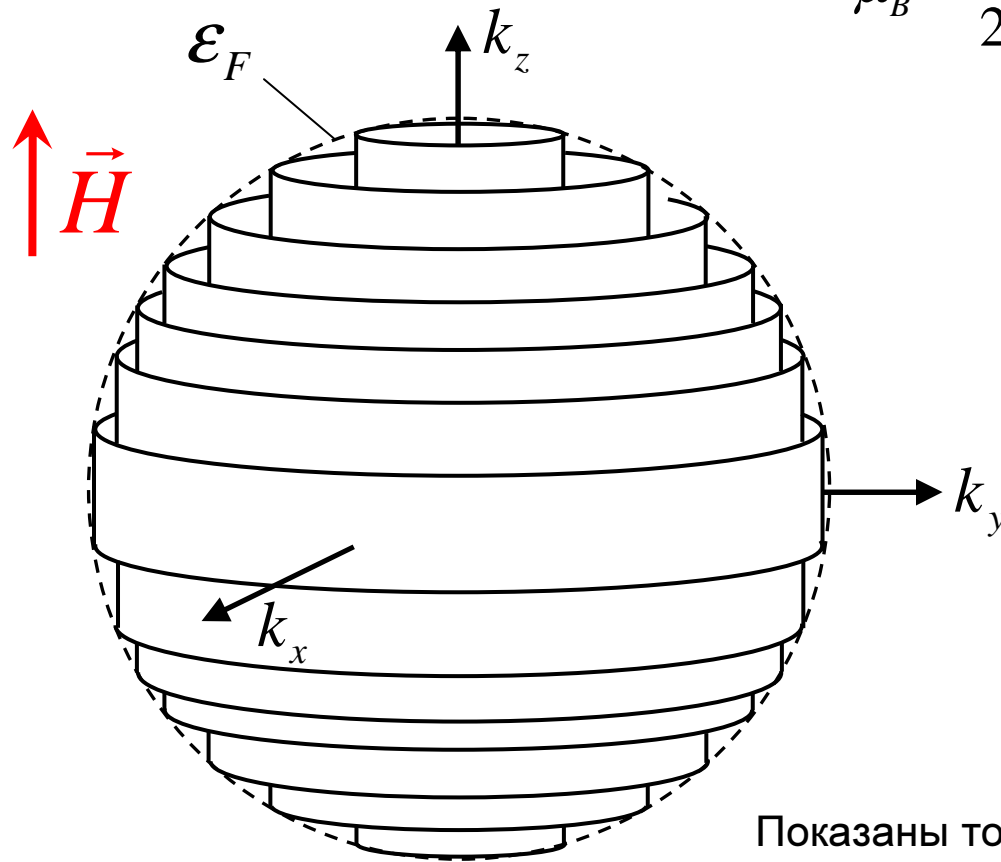
$$g_3 = \frac{\Delta a dk_{\parallel} V}{4\pi^3} = \frac{VeH dk_{\parallel}}{2\pi^2 \hbar c}$$

Пример: газ свободных электрона в магнитном поле

Для газа свободных электронов соотношение Онзагера дает:

$$\varepsilon(a, k_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + (n + \gamma) 2\mu_B H \quad \gamma = 1/2$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c} \quad \text{- магнетон Бора}$$



$$\frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2) = \left(n + \frac{1}{2} \right) 2\mu_B H$$

Трубки Ландау – коаксиальные круговые цилиндры, с площадью между кольцами:

$$\Delta a = 2\pi e H / c\hbar$$

зависящей от поля H

Показаны только занятые состояния под поверхностью Ферми

§4 Квантование Ландау. Квантовый осциллятор

Гамильтониан квантового осциллятора:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2}$$

Уравнение Шредингера для квантового осциллятора:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2} \psi = E \psi$$

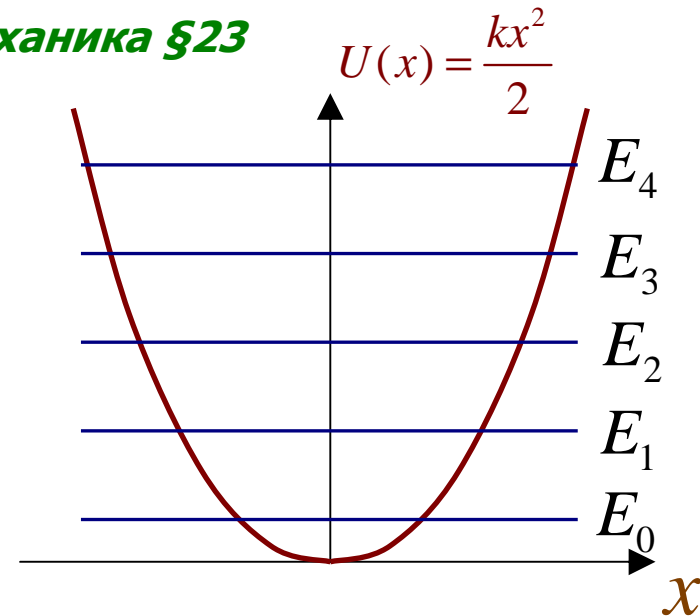
Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. т.III, Квантовая механика §23

Спектр:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Собственные функции:

$$\psi_n = \left(\frac{m_0 \omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m_0 \omega}{2\hbar} x^2} H_n \left(x \sqrt{\frac{m_0 \omega}{\hbar}} \right)$$



Полиномы
Чебышева - Эрмита :

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2} \right)$$

Тихонов А.Н. Самарский А.А., Уравнения математической физики, (1966)

Электрон в однородном магнитном поле

Гамильтониан электрона в магнитном поле:

Подстановка
Пайерлса:

$$\hat{p} \Rightarrow \hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \mu \vec{H}$$

Здесь $e < 0$

Оператор скорости: $\hat{V} = \dot{\vec{r}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \vec{r}] \Rightarrow m_0 \hat{V} = \hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$

$$[V_x, V_y] = \frac{ie\hbar}{m_0^2 c} H_z, \quad [V_y, V_z] = \frac{ie\hbar}{m_0^2 c} H_x, \quad [V_z, V_x] = \frac{ie\hbar}{m_0^2 c} H_y$$

В магнитном поле электрон не может иметь одновременно определенных значений скорости по всем трем направлениям!

Магнитное поле вдоль оси z можно задать векторным потенциалом

вида: $\vec{A} = (-Hy, 0, 0)$ или $\vec{A} = \frac{\vec{H} \times \vec{r}}{2}$,

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -Hy & 0 & 0 \end{vmatrix} = (H, 0, 0)$$

Электрон в однородном магнитном поле

Гамильтониан электрона в магнитном поле направленном вдоль оси z:

$$[\hat{S}_z, \hat{H}] = 0 \Rightarrow \hat{S}_z \rightarrow \sigma = \pm \frac{1}{2}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m_0} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_0} - 2\sigma\mu_B H$$

Так как гамильтониан не содержит x и z, то:

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = [\hat{p}_z, \hat{H}] = 0$$

значит p_x и p_z сохраняются.

Решение уравнения Шредингера:

$$\hat{H} \Psi(x, y, z,) = E \Psi(x, y, z,)$$

ищем в виде:

$$\Psi(x, y, z,) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_x x + p_z z) \right\} \chi(y)$$

$$-\infty < p_x < +\infty, \quad -\infty < p_z < +\infty$$

Поскольку $A_z = 0$, то $p_z = mV_z$, то движение вдоль поля не квантуется.

Электрон в однородном магнитном поле

$$\chi''_{yy} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left[\left(E + 2\sigma\mu_B H - \frac{p_z^2}{2m_0} \right) - \frac{m_0}{2} \omega_C^2 (y - y_0)^2 \right] \chi = 0$$

Из сравнения с УШ
для квантового
осциллятора:

$$= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_C$$

$$y_0 = -\frac{cp_x}{eH}, \quad \omega_C = \frac{|e|H}{m_0c}$$

Спектр электрона в
магнитном поле:

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_C + \frac{p_z^2}{2m_0} - 2\sigma\mu_B H \quad n = 0, 1, \dots, +\infty$$

Квантовых чисел, было четыре: p_x, p_y, p_z, σ

Стало три: $?, n, p_z, \sigma$

Спектр не зависит от p_x – состояния вырождены по p_x

Число состояний на интервал Δp_x : $g_2 = \frac{L_x \Delta p_x}{2\pi\hbar} = \frac{L_x L_y eH}{2\pi\hbar c}$

$$y_0 = -\frac{cp_x}{eH}, \quad 0 < y_0 < L_y \Rightarrow L_y = \frac{c}{eH} \Delta p_x$$

$$g_3 = 2 \frac{L_x L_y eH}{2\pi\hbar c} \cdot \frac{L_z \Delta p_z}{2\pi\hbar} = \frac{VeH \Delta p_z}{2(\pi\hbar)^2 c}$$

$$g_3 = \frac{V \omega_c \sqrt{2m_0^3}}{(2\pi\hbar)^2} \frac{dE}{\sqrt{[E - (n+1/2)\hbar\omega_c + 2\sigma\mu_B H]}}$$

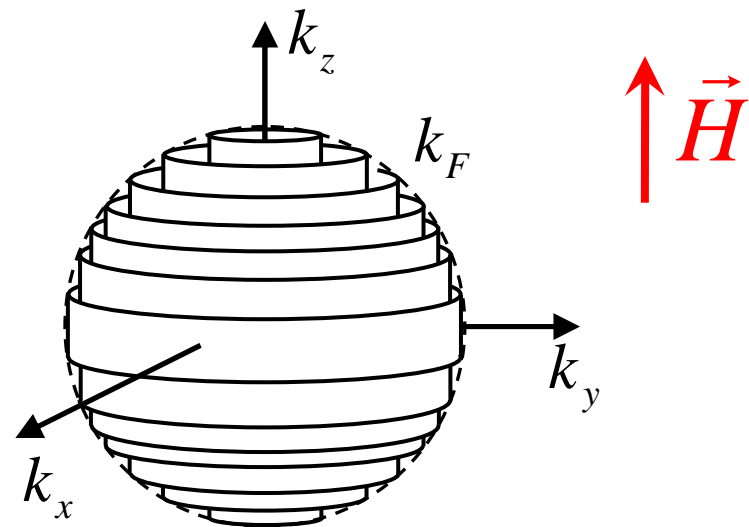
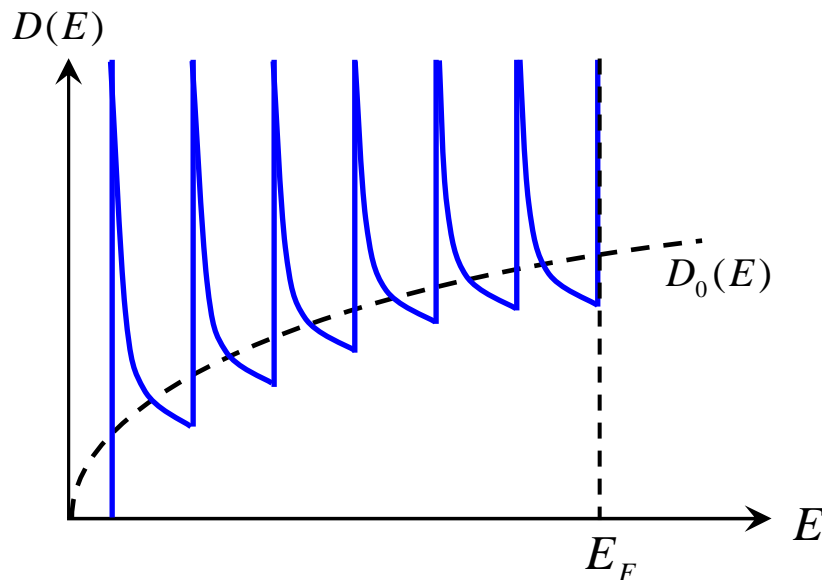
$$p_z = \sqrt{2m_0} \sqrt{[E - (n+1/2)\hbar\omega_c + 2\sigma\mu_B H]}$$

$$= D(E, n, \sigma) dE$$

$$D(E) = \sum_{n=0}^{n_F} \sum_{\sigma=\pm 1/2} D(E, n, \sigma)$$

При увеличении поля H трубки Ландау поочередно пересекают ПФ. Это приводит к осцилляциям DOS и всех термодинамических величин.

$$D_0(E) = \lim_{H \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{n_F} \sum_{\sigma=\pm 1/2} D(E, n, \sigma) = \frac{\sqrt{2Vm_0^3}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E}$$



§5 Формула Лифшица - Косевича

- 1) Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Т.В, Статистическая физика. Ч 1, (2001), §60

Для газа свободных электронов:
$$M_{\sim} = -\frac{\sqrt{2\mu_B m_0^{3/2}} \mu T V}{\pi \hbar^3 \sqrt{H}} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi\mu}{\mu_B H} k - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{k \sinh\left(\pi^2 k_B T / \mu_B H\right)}}$$

- 2) Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. М.: МГУ, (1991), Гл.3, §3

$$\frac{\pi\mu}{\mu_B H} \cong \frac{\pi \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}}{\frac{e\hbar}{2mc} H} = \frac{c\hbar}{eH} \pi k_F^2 = \frac{c\hbar}{e} \frac{a_{extr}}{H}$$

Для электронов с произвольным законом дисперсии

- 3) Лифшиц И.М., Косевич А.М., ДАН, 96, 963 (1954)
 4) Лифшиц И.М., Азбель М.Я., Каганов М.И. Электронная теория металлов. М.: Наука, (1971), §15,16
 5) Шенберг Д. Магнитные осцилляции в металлах. М.: Мир, (1986)

Критерии наблюдения
 эффекта дГВА:

$$\mu_B H \gg k_B T, \quad l \gg r_H$$