

二维 Bloch 电子在电场与磁场中的 准经典输运行为^{*}

陈意桥 雷啸霖

(中国科学院上海冶金研究所信息功能材料国家重点实验室, 上海 200050)

(1997 年 6 月 27 日收到; 1998 年 1 月 12 日收到修改稿)

分别从周期场中电子准经典运动方程和作者之一最近提出的输运平衡方程出发, 分析了二维 Bloch 电子在电场和磁场作用下的准经典输运, 给出了不同电场下电子纵向漂移速度 v_x 和霍耳漂移速度 v_y 随磁场的变化趋势. 结果显示, v_x 和 v_y 均随磁场连续变化, 在任何给定电场下都没有发现纵向漂移速度或霍耳漂移速度随磁感应强度发生突变. 这一结论与其他作者的预言相左. 分析了造成分歧的可能原因, 并指出: 在电子准经典运动方程中直接引入阻尼力来描述准经典输运的办法有其局限性.

PACC: 7220H; 7340

1 引 言

二维周期势场中运动电子在电场和磁场中的经典和量子输运, 由于包含丰富的物理内涵, 近年来一直是实验上和理论上广为研究的领域^[1-4]. 载流子输运是一个非平衡统计问题, 通常是通过系综平均建立输运方程, 如 Boltzmann 方程或平衡方程^[5], 然后求解. 文献[6]在电子准经典运动方程中直接引入阻尼力, 并用来研究 Bloch 电子在电场和磁场中的经典输运, 认为二维周期势场中弱阻尼电子的纵向漂移速度和霍耳漂移速度随磁感应强度变化时会出现很大的突变. 我们认为, 这种突变可能是由于他们在方程中引入的阻尼项是状态的不连续函数所致, 因而物理上是不可靠的. 当把阻尼项换成状态的连续函数时, 在任何电场下纵向漂移速度和霍耳漂移速度随磁场变化都不发生突变. 基于最近发展的输运平衡方程, 我们作了对照分析, 不但进一步证实了这个结论, 而且清楚地表明, 在电子准经典运动方程中直接引入阻尼力来描述准经典输运的办法有其局限性.

2 电子准经典运动方程和阻尼力

文献[6]在 Bloch 电子的准经典运动方程中直接引入一项阻尼力, 即提出用方程:

$$\frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B} - \frac{\hbar[\mathbf{k}]}{\tau} \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金资助的课题(批准号: 19774061).

来描述在 x - y 平面内的二维周期势场 $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ ($\mathbf{r} = (x, y)$, $\mathbf{R}$ 为晶格常数为 a 的正方格子任一格矢) 中的电子系统在电场 $\mathbf{E}$ 和磁场 $\mathbf{B}$ 作用下在整个能带内的准经典运动. 其中 $-e$ 为电子的电荷, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 为描述电子 Bloch 状态的晶格波矢, $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k})$ 为电子的速度函数, $\epsilon(\mathbf{k})$ 为电子在 $\mathbf{k}$ 状态的能量, $\hbar[\mathbf{k}]/\tau$ 为文献[6]的作者引入的代表电子由散射而引起的有效阻尼力, 其中 τ 为准动量弛豫时间, $[\mathbf{k}] \in$ 第一布里渊区. 对于紧束缚能带,

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\Delta}{2} [2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)], \quad (2)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = v_m [\sin(k_x a) \mathbf{i} + \sin(k_y a) \mathbf{j}] \quad (3)$$

($v_m = a\Delta/(2\hbar)$, Δ 为能带宽度). 设电场沿 $-x$ 方向, 磁场沿 z 方向, 方程(1)的两个分量可写成

$$\frac{dX}{dt_1} = c_E - c_B \sin(2\pi Y) - [X], \quad (4)$$

$$\frac{dY}{dt_1} = c_B \sin(2\pi X) - [Y], \quad (5)$$

其中 $X = k_x a/(2\pi)$, $Y = k_y a/(2\pi)$, $t_1 = t/\tau$, $[X], [Y] \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$, $c_E = eE\tau a/(2\pi\hbar)$, $c_B = eB\tau a^2 \Delta/(4\pi\hbar^2)$.

在一定的电场下(例如, 取 $c_E = 0.6$), 文献[6]对上述方程数值求解并对解的性质作了讨论, 认为对于 $t \rightarrow \infty$ 时方程的稳定解, 即电子的晶格动量, 在某个磁场 ($c_B = 0.5425$) 处会发生明显突变, 相应地, 系统的纵向漂移速度和霍尔漂移速度都要发生明显突变.

我们指出, 除非电子只限于在布里渊区中心附近运动, 否则从物理上看方程(1)是有问题的. 暂且不论在单个粒子的运动方程中简单地加进阻尼项来描述输运问题的办法在什么样的条件下可能近似有效, 仅就方程本身而论, 阻尼项 $\hbar[\mathbf{k}]/\tau$ 的形式就不合理. 我们知道, 周期势场中的电子态可以用波矢 $\mathbf{k}$ 来描述, $\mathbf{k}$ 与 $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ ($\mathbf{G}$ 为任何一个倒格矢) 代表同一状态. 任何可观察的物理量, 如速度 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ 、

能量 $\epsilon(\mathbf{k})$ 以及晶格波矢的时间微商 $d\mathbf{k}/dt$ 等, 都不仅必须是状态 $\mathbf{k}$ 的周期函数, 而且还应当是状态的连续函数. 当电子的状态有微小的变化时, 任何可观察的物理量只有微小的变化. 然而, 形如 $\hbar[\mathbf{k}]/\tau$ 的阻尼力, 虽然是 $\mathbf{k}$ 的周期函数, 却不是状态的连续函数, 如图 1 所示, A, A', B 为 $\mathbf{k}$ 空间中三个点, 其中 A 和 A' 为等价点, B 所代表的状态与 A' 所代表的状态很相近. 如果阻尼力为 $\hbar[\mathbf{k}]/\tau$, 则 B, A 和 A' 所受的阻尼力分别为 $f_0 = \pi\hbar/a\tau$, $-f_0$ 和 $-f_0$. 这样, 状态很相近的两个点 B 和 A' 却受到数值有限而方向完全相反的阻尼

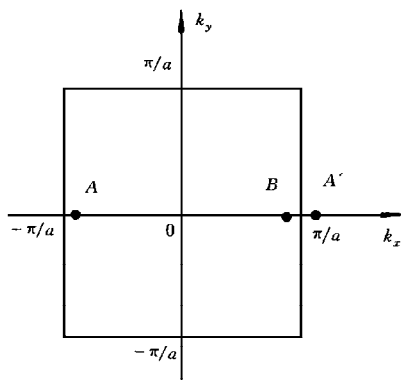


图1 能带中靠近布里渊区边界的三个点: A , A' 和 B A 和 A' 为等价点

力,这在物理上显然不合理.

要使方程(1)至少在物理上合理,其阻尼项必须是状态的连续函数.在形式较简单的状态函数中,只有速度函数 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ 是与动量相关并且在整个布里渊区中是状态的连续函数.鉴于此,我们认为以 $\nu \mathbf{v}(\mathbf{k})$ 代替 $\hbar[\mathbf{k}]/\tau$ 作为描述电子在整个布里渊区运动时受到的阻尼力较为合理,其中 ν 为一个阻尼因子,因而把有阻尼的电子准经典运动方程写为

$$\frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B} - \nu \mathbf{v}(\mathbf{k}). \quad (6)$$

对紧束缚能带,当电场 $\mathbf{E}$ 沿 $-x$ 方向,磁场 $\mathbf{B}$ 沿 z 方向时,方程(6)可写为

$$\frac{dX}{dt_1} = c_E - c_B \sin(2\pi Y) - c \sin(2\pi X), \quad (7)$$

$$\frac{dY}{dt_1} = c_B \sin(2\pi X) - c \sin(2\pi Y), \quad (8)$$

其中 $c = \nu \tau a^2 \Delta / (4\pi \hbar^2)$.

对于不同的参数 c ,我们在不同的电场和磁场下,即对于不同的 c_E 和 c_B ,数值求解方程组(7)和(8).结果表明,电子的漂移速率 v_x 和 v_y 均随磁感应强度连续变化.以 $c = 0.5$, $c_E = 0.6$ 为例,当 $0 < c_B \leq 0.2231$ 时,方程组没有稳定解,只有一个周期解.当 $0.2231 < c_B$ 时,方程组有 4 个稳定解,其中三个稳定解的吸引域为零,只有一个稳定解的吸引域为无穷大,且此稳定解的数值随磁感应强度连续变化,没有出现电子准动量随磁感应强度的突变,故霍尔漂移速度也无突变现象.图 2 示出当 $c = 0.5$ 时,在不同电场下,电子的漂移速率 v_x 和 v_y 随磁场的变化,没有出现突变现象.

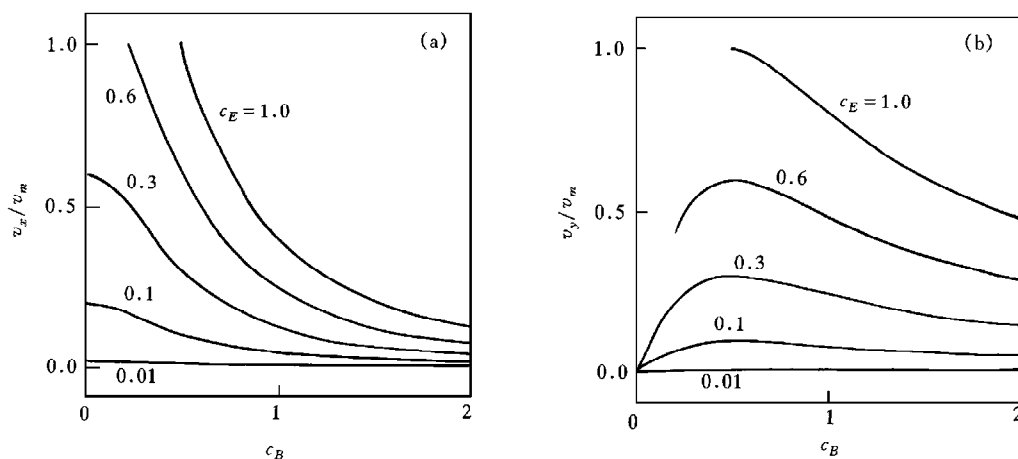


图 2 不同电场下 ($c_E = 0.01, 0.1, 0.3, 0.6, 1.0$) 由方程(6)得到的 v_x (a) 和 v_y (b) 随 $c_B (\propto B)$ 的变化

当然,阻尼项可以有不同的选择,但即使阻尼项不选为 $\nu \mathbf{v}(\mathbf{k})$,而选为其他形式的状态连续函数,纵向漂移速度 v_x 和霍尔漂移速率 v_y 随磁场变化的突变也不会出现.由此可见,如果没有其他原因,文献[6]得到的霍尔漂移速度随磁场的突变现象是由于不合理地把阻尼力选为 $\hbar[\mathbf{k}]/\tau$ 而引起的.

3 二维 Bloch 电子在电场和磁场中的平衡方程

应当指出, 在电子准经典运动方程中直接引入阻尼力来描述准经典输运不是可靠的方法. 为了进一步讨论这个问题, 我们引用作者之一最近提出的描述二维多电子系统在电场和磁场中经典输运现象的加速度平衡方程^[3]

$$\frac{d v_x}{d t} = \frac{e E}{m_x^*} - \gamma \frac{e B v_y}{m_x^*} + A_x, \quad (9)$$

$$\frac{d v_y}{d t} = \gamma \frac{e B v_x}{m_y^*} + A_y, \quad (10)$$

和能量平衡方程

$$\frac{d \epsilon}{d t} = e E v_x - W. \quad (11)$$

这里已假设电场 $\mathbf{E}$ 沿 x 方向, 磁场 $\mathbf{B}$ 沿 z 方向. 方程中 v_x 和 v_y 为电子沿 x 和 y 方向的漂移速度, $\epsilon \equiv \epsilon_x + \epsilon_y$ 为每个电子的平均能量, m_x^* 和 m_y^* 为系综平均的有效质量张量的 xx 和 yy 分量, A_x 和 A_y 为由散射引起的阻尼加速度的 x 和 y 分量, W 为单位时间内平均每个电子传递给晶格的能量, γ 为描述能带非抛物性、依赖于电子浓度和温度的参数, 其中, ϵ , m_x^* , m_y^* , A_x , A_y 和 W 均为漂移速度 $\mathbf{v}_d \equiv (v_x, v_y)$ 和电子温度 T_e 的函数. 这些量的表达式见文献[3].

注意, 理论处理中考虑能量方程是很重要的. 如果不管能量平衡方程(11), 企图只用加速度平衡方程(9)和(10)研究二维 Bloch 电子的输运问题, 在非线性情况下将产生非物理的结果. 求解以上三个方程, 可得电子的漂移速度 $\mathbf{v}_d$ 和电子温度 T_e , 从而确定系统的输运性质. 在线性极限下, 电子温度 T_e 与晶格温度 T 相等, 能量平衡方程(11)恒成立, 只需求解加速度平衡方程(9)和(10)以得到电子的漂移速度 $\mathbf{v}_d$. 但在电场较高时, 电子温度将显著地高于晶格温度, 此时必须考虑能量平衡方程.

原则上求解上述平衡方程需要考虑各种散射机制, 从 A_x , A_y 和 W 的详细表达式出发, 为了与前两节的方法比较, 这里用“弛豫时间近似”来描述阻尼加速度和能量损失率, 取

$$A_x = -v_x / \tau_p, \quad (12)$$

$$A_y = -v_y / \tau_p, \quad (13)$$

$$W = (\epsilon - \epsilon_T) / \tau_\epsilon, \quad (14)$$

其中 τ_p 为动量弛豫时间, τ_ϵ 为能量弛豫时间, ϵ_T 为没有外场时电子在晶格温度 T 下与晶格共处于平衡态时的平均能量. 应当注意, 方程(12)–(14)只能在一定的范围内定性代表 A_x , A_y 和 W 的行为.

按照平衡方程理论, 二维 Bloch 电子系统的输运状态用动量偏移 $\mathbf{p}_d \equiv (p_x, p_y)$ 和电子温度 T_e 描述, $\mathbf{p}_d$ 代表电子分布函数的重心在布里渊区中的位置. 对于紧束缚能带, 方程(9)–(11)中有关参数可用 $\mathbf{p}_d$ 和 T_e 表示^[3]:

$$v_x = v_m \alpha(T_e) \sin(p_x a / \hbar), \quad (15)$$

$$v_y = v_m \alpha(T_e) \sin(p_y a / \hbar), \quad (16)$$

$$\frac{1}{m_x^*} = \frac{1}{M^*} \alpha(T_e) \cos(p_x a / \hbar), \quad (17)$$

$$\frac{1}{m_y^*} = \frac{1}{M^*} \alpha(T_e) \cos(p_y a / \hbar), \quad (18)$$

$$\epsilon_x = \frac{\Delta}{2} [1 - \alpha(T_e) \cos(p_x a / \hbar)], \quad (19)$$

$$\epsilon_y = \frac{\Delta}{2} [1 - \alpha(T_e) \cos(p_y a / \hbar)], \quad (20)$$

$$\epsilon_T = \Delta [1 - \alpha(T)], \quad (21)$$

其中 $\frac{1}{M^*} = a^2 \Delta / (2 \hbar^2)$, $\alpha(T_e)$ 亦为依赖于能带色散关系、电子浓度和电子温度 T_e 的参数^[3]. 由于 γ 随电子温度变化不明显^[3], 我们近似地认为 γ 是一个与电子温度无关的常数. 这样, 方程(9)–(11)中电子温度 T_e 只通过 $\alpha(T_e)$ 出现, 由此我们可以用 p_x , p_y 以及 $\alpha \equiv \alpha(T_e)$ 作为三个未知数. 方程(9)–(11)可化为

$$\begin{aligned} & \cos(2\pi X_p) \frac{dX_p}{dt_2} + \frac{1}{2\pi\alpha} \sin(2\pi X_p) \frac{d\alpha}{dt_2} \\ &= C_E \cos(2\pi X_p) - \gamma C_B \alpha \cos(2\pi X_p) \sin(2\pi Y_p) - \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi X_p), \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} & \cos(2\pi Y_p) \frac{dY_p}{dt_2} + \frac{1}{2\pi\alpha} \sin(2\pi Y_p) \frac{d\alpha}{dt_2} \\ &= \gamma C_B \alpha \cos(2\pi Y_p) \sin(2\pi X_p) - \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi Y_p), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} & \sin(2\pi X_p) \frac{dX_p}{dt_2} + \sin(2\pi Y_p) \frac{dY_p}{dt_2} - \frac{1}{2\pi\alpha} [\cos(2\pi X_p) + \cos(2\pi Y_p)] \frac{d\alpha}{dt_2} \\ &= C_E \sin(2\pi X_p) + \frac{1}{2\pi} \frac{\tau_p}{\tau_e} [\cos(2\pi X_p) + \cos(2\pi Y_p)] - \frac{1}{\pi} \frac{\tau_p}{\tau_e} \frac{\alpha_0}{\alpha}, \end{aligned} \quad (24)$$

其中 $X_p = p_x a / (2\pi \hbar)$, $Y_p = p_y a / (2\pi \hbar)$, $t_2 = t / \tau_p$, $C_E = eE\tau_p a / (2\pi \hbar)$, $C_B = eB\tau_p a^2 \Delta / (4\pi \hbar^2)$, $\alpha_0 \equiv \alpha(T)$.

取 $\tau_e / \tau_p = 10$, $\gamma = 0.5$, $\alpha_0 = 1$, 在不同的电场和磁场下, 即当 C_E , C_B 取不同值时, 数值求解方程(22)–(24), 结果显示, 在一定的电场和磁场下, 系统从不同的初始状态 $p_x(0)$, $p_y(0)$ 和 $\alpha(0)$ 出发, 经过一个瞬态过程以后, p_x , p_y 和 α 均趋于稳定的终态, 且从不同初值出发得到的稳定的终态都相同. 电子的漂移速度 v_x 和 v_y 可通过方程(15)和(16)得到.

图3示出不同电场下, 电子的纵向漂移速度 v_x 和横向漂移速度 v_y 随磁场的变化. 从图3可看到, v_x 和 v_y 均随磁场连续变化, 未出现电子漂移速度随磁场的突变现象.

对于不同的 τ_e / τ_p , γ 和 α_0 的取值, 方程(9)–(11)的解的性质并不改变, 这三个参数的取值不同, 将使最后的稳定解的数值不同, 但 v_x 和 v_y 随电场和磁场的变化趋势不变. 为了节省篇幅, 当 τ_e / τ_p , γ 和 α_0 取其他数值时的结果不在此一一列出.

图4示出不同磁场下, 电子纵向漂移速度 v_x 随电场的变化. 从图4可见, 当电场达到

一定数值时,出现了负微分迁移率.

还应当指出,虽然图 3 与图 2 有相似的变化趋势,但二者有一个显著的区别. 方程

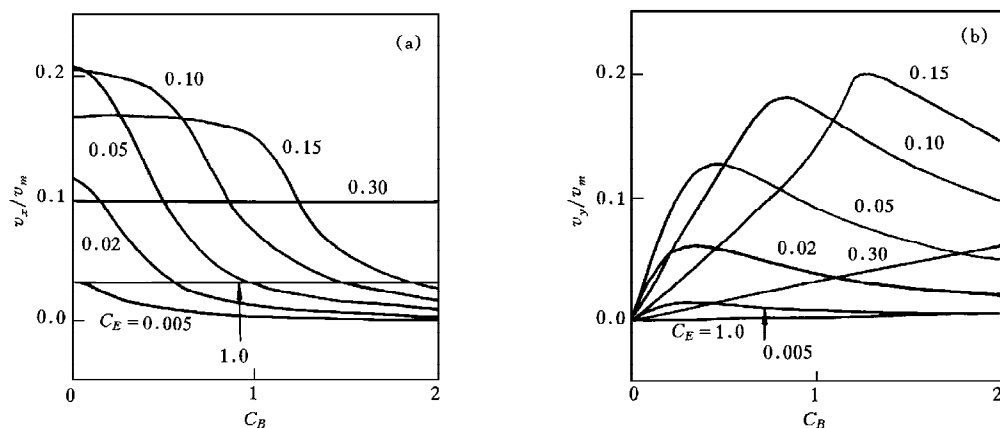


图 3 不同电场下 ($C_E = 0.005, 0.02, 0.05, 0.10, 0.15, 0.30, 1.0$) 由方程(9)–(11)得到的 v_x (a) 和 v_y (b) 随 $C_B(\propto B)$ 的变化 $\tau_e/\tau_p = 10$

(9)–(11)在任何电场和磁场下均有稳定解;但按方程(4),(5)或方程(7),(8),当电场增加到某个值时(例如,对于方程(7),(8),当电场 $E > \nu a \Delta / (2 e \hbar)$ 时),阻尼力不足以抵消电场的加速,因而对于小磁场系统将没有稳定解. 这说明在电子经典运动方程中直接引入阻尼项来代表散射效应是不可取的. 实际上,在经典(非量子的)力学和统计力学规律的范畴内,只要存在阻尼力,有限宽度能带中的电子在电场作用下的输运总是趋于稳定态的. 如果不是在单个电子的准经典运动方程中引入阻尼项,而是对电子在电场加速下的周期性运动状态(电子无阻尼运动方程的解)进行统计平均时引入阻尼效应,则在任何电场下都会得到稳定的解^[7]. 这一结论的有效性只依赖于经典规律的适用极限. 实际上,如果阻尼很小,在电场作用下电子的周期性运动将首先量子化,形成可以清晰分辨的 Stark 能级,对输运的描述将完全不同.

4 结 论

本文从周期势场中电子准经典运动方程出发,讨论了二维 Bloch 电子在电场和磁场

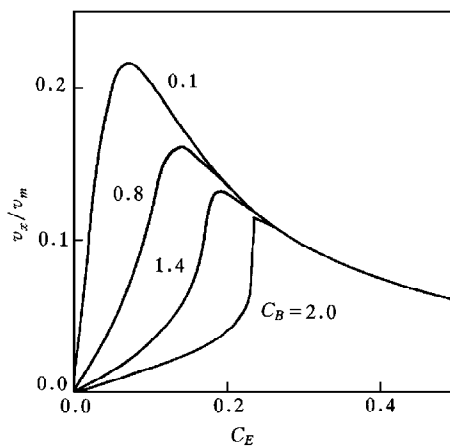


图 4 不同磁场下 ($C_B = 0.1, 0.8, 1.4, 2.0$), 由方程(9)–(11)得到的电子纵向漂移速度 v_x 随 $C_E(\propto E)$ 的变化 $\tau_e/\tau_p = 10$

作用下的准经典输运行为,指出:即使在某种特殊条件下可以在单电子运动方程中直接引入阻尼力来描述载流子的输运,阻尼力也必须是状态的连续函数.因此,用 $\hbar[\mathbf{k}]/\tau$ 表示晶格电子受到的阻尼力是不合理的.对包含状态连续函数的阻尼项的电子准经典运动方程进行的数值研究表明,在任何电场下,均不出现电子漂移速度随磁感应强度的突变.本文还根据最近发展的输运平衡方程分析了电场和磁场中二维电子系统的准经典输运性质,发现在给定的电场下,电子漂移速度总是随磁场连续变化.这些结果表明,文献[6]预言电子霍尔漂移速度会随磁感应强度的变化而发生突变在物理上不合理.本文还指出,在电子准经典运动方程中直接引入阻尼力来描述准经典输运不是可靠的方法.

- [1] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 2239.
- [2] R. R. Gerhardt, D. Weiss, U. Wulf, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 5192.
- [3] X. L. Lei, *J. Phys.*, **C5**(1993), 8579.
- [4] M. C. Chang, Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.*, **75**(1995), 1348.
- [5] X. L. Lei, C. S. Ting, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 4809; *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 1112.
- [6] Tian Qiang, Ma Ben-kun, Zhu Yi-nan, *Acta Physica Sinica*, **46**(1997), 762(in Chinese).
- [7] L. Esaki, R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.*, **14**(1970), 61.

QUASI-CLASSICAL TRANSPORT OF TWO-DIMENSIONAL BLOCH ELECTRONS UNDER ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS *

CHEN YI-QIAO LEI XIAO-LIN

(State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics, Shanghai Institute of Metallurgy,
Academia Sinica, Shanghai 200050)

(Received 27 June 1997; revised manuscript received 12 January 1998)

ABSTRACT

We present a theoretical study of quasi-classical transport of two-dimensional Bloch electrons under the influence of an electric and a magnetic fields, starting respectively from the quasi-classical equation of motion of electrons and from the balance equations proposed by one of the authors. The electron longitudinal velocity v_x and the Hall drift velocity v_y are calculated as functions of the magnetic field under different strengths of the applied electric field. It is shown that both v_x and v_y always change continuously with variation of magnetic field. No sudden jump in the v_x - B or the v_y - B curve has been found at any given electric field, in contradiction with the claim made in a recent paper published in *Acta Physica Sinica* (vol. 46). The possible cause for this disagreement is discussed. Furthermore, we point out that the validity of the naive way to study electron transport by directly introducing a damping force into the quasi-classical equation of motion of electron is quite limited.

PACC: 7220H; 7340

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China under the Grant No. 19774061.