минимума). Тогда

$$\varepsilon(\mathbf{k})=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_1^2}{m_1}+\frac{k_2^2}{m_2}+\frac{k_3^2}{m_3}\right), \tag{1}$$

где m_1, m_2, m_3 — главные значения тензора m_{ik} (положительные величины). Обозначив через $\mathbf{n}$ единичный вектор в направлении поля $\mathbf{H}$, имеем

$$k_z=\mathbf{nk}=n_1k_1+n_2k_2+n_3k_3 \tag{2}$$

(n_1, n_2, n_3 — направляющие косинусы поля относительно главных осей тензора m_{ik}). Нам надо найти площадь S той части плоскости (2), которая лежит внутри эллипсоида (1); она может быть представлена в виде интеграла

$$S=\int\delta(\mathbf{nk}-k_z)\,d^3k, \tag{3}$$

взятого по объему эллипсоида (1)[1]. Заменой переменных $\hbar k_i=(2\varepsilon m_i)^{1/2}q_i$ интеграл приводится к виду

$$S=(2\varepsilon)^{3/2}\hbar^{-3}(m_1m_2m_3)^{1/2}\int\delta(\boldsymbol{\nu}\mathbf{q}-k_z)\,d^3q,$$

где вектор $\boldsymbol{\nu}$ в $\mathbf{q}$-пространстве имеет компоненты $\nu_i=(2\varepsilon m_i)^{1/2}n_i/\hbar$, а интегрирование производится по объему сферы $\mathbf{q}^2=1$. Интегрирование легко выполняется в цилиндрических координатах с осью вдоль $\boldsymbol{\nu}$ и дает

$$S(\varepsilon,k_z)=\frac{2\pi}{\hbar^2}m_\perp\left(\varepsilon-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m_\parallel}\right),$$

где

$$\begin{aligned} m_\parallel&=m_1n_1^2+m_2n_2^2+m_3n_3^2,\\ m_\perp&=(m_1m_2m_3/m_\parallel)^{1/2}. \end{aligned} \tag{4}$$

Подставив в (58,7), найдем уровни энергии

$$\varepsilon_n(k_z)=\frac{|e|\hbar H}{m_\perp c}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m_\parallel}. \tag{5}$$

§ 60. Симметрия состояний электрона в решетке в магнитном поле

В этом параграфе мы рассмотрим точные общие свойства трансляционной симметрии волновых функций блоховского электрона в магнитном поле, не связанные с каким-либо приближением (вроде условия слабости поля или условия квазиклассичности).

---

[1]) Пусть $f(x, y, z)=\mathrm{const}$ — семейство поверхностей, заполняющих некоторый объем. Расстояние dl между двумя бесконечно близкими поверхностями семейства: $dl=df/|\nabla f|$, а объем между этими поверхностями: $dV=S(f)\,dl$, где $S(f)$ — площадь поверхности с заданным значением f. Умножив равенство $S(f)\,df=|\nabla f|\,dV$ на δ-функцию $\delta(f)$ и проинтегрировав по объему и по df, получим площадь поверхности $f(x, y, z)=0$ в виде $S(0)=\int|\nabla f|\,\delta(f)\,d^3x$. В нашем случае $|\nabla f|=1$, откуда и получается выражение (3).

Наложение однородного магнитного поля не меняет физической трансляционной симметрии системы: она остается периодической в пространстве. Своеобразие ситуации состоит, однако, в том, что в то же время гамильтониан электрона (56,2) теряет свою симметрию. Это связано с тем, что в гамильтониан входит не постоянная напряженность $\mathbf{H}$, а векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, зависящий от координат и не обладающий периодичностью.

Неинвариантность гамильтониана приводит, естественно, к усложнению закона преобразования волновых функций при трансляциях. Выберем для векторного потенциала однородного поля калибровку

$$\mathbf{A}=\frac{1}{2}[\mathbf{Hr}], \tag{60,1}$$

и пусть $\psi(\mathbf{r})$ — некоторая собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r})$. При трансляции $\mathbf{r}\to\mathbf{r}+\mathbf{a}$ ($\mathbf{a}$ — какой-либо из периодов решетки) эта функция переходит в $\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a})$, но это будет уже собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r}+\mathbf{a})$, не совпадающего с $\hat{H}(\mathbf{r})$, поскольку произошла замена векторного потенциала

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})\to\mathbf{A}(\mathbf{r}+\mathbf{a})=\mathbf{A}(\mathbf{r})+\frac{1}{2}[\mathbf{Ha}].$$

Для нахождения искомого закона преобразования надо вернуться к исходному гамильтониану, что достигается калибровочным преобразованием

$$\mathbf{A}\to\mathbf{A}+\nabla f,\quad f=-\frac{1}{2}[\mathbf{Ha}]\mathbf{r}.$$

При этом волновая функция преобразуется согласно (56,4):

$$\psi\to\psi\exp(ief/\hbar c).$$

Обозначив результат всех этих операций как $\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})$, находим, таким образом,

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})=\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a})\exp\left(\frac{i}{2}\mathbf{r}\,[\mathbf{ha}]\right), \tag{60,2}$$

где $\mathbf{h}=|e|\mathbf{H}/\hbar c$, а $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ назовем оператором магнитной трансляции. Если $\psi(\mathbf{r})$ — решение уравнения Шредингера $\hat{H}(\mathbf{r})\psi=\varepsilon\psi$, то и (60,2) есть решение того же уравнения, относящееся к той же энергии ε (*R. Peierls*, 1933).

Из определения (60,2) легко заключить, что

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'}=\hat{T}_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}\omega(\mathbf{a},\mathbf{a}'),$$

$$\omega(\mathbf{a},\mathbf{a}')=\exp\left(-\frac{i}{2}\mathbf{h}\,[\mathbf{a}\mathbf{a}']\right). \tag{60,3}$$

При перестановке **a** и **a′** показатель степени в множителе $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}')$ меняет знак; поэтому операторы $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ и $\hat{T}_{\mathbf{a}'}$, вообще говоря, не коммутативны:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'} = \hat{T}_{\mathbf{a}'}\hat{T}_{\mathbf{a}} \exp(-i\mathbf{h}[\mathbf{a}\,\mathbf{a}']). \tag{60,4}$$

Таким образом, произведение двух операторов $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ и $\hat{T}_{\mathbf{a}'}$ отличается, вообще говоря, фазовым множителем от оператора $\hat{T}_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}$. По математической терминологии это означает, что операторы $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ осуществляют не обычное, а проективное представление группы трансляций; базисом этих представлений являются волновые функции стационарных состояний блоховского электрона в магнитном поле [1]). Классификация уровней энергии должна производиться, следовательно, по неприводимым проективным представлениям группы трансляций, подобно тому как в отсутствие поля она производится по неприводимым обычным представлениям этой группы.

Напомним в этой связи, что группа трансляций — абелева (все ее элементы коммутативны), а потому все ее неприводимые обычные представления одномерны. Функция ψ базиса каждого такого представления при трансляции лишь умножается на некоторый фазовый множитель, причем для двух последовательных трансляций этот множитель должен быть равен произведению множителей для каждой трансляции в отдельности. Это значит, что

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi,$$

где **k** — постоянный вектор; этот вектор (квазиимпульс электрона) оказывается параметром, классифицирующим неприводимые представления.

Полная классификация неприводимых проективных представлений группы трансляции может быть произведена (*E. Brown*, 1964; *J. Zak*, 1964) в случае, когда магнитное поле удовлетворяет условию

$$\mathbf{h} = 4\pi \frac{p}{q}\frac{\mathbf{a}_3}{v}, \tag{60,5}$$

где p и q — любые два взаимно простых целых числа; $\mathbf{a}_3$ — один из трех произвольно выбранных основных периодов решетки

[1]) С понятием о проективных представлениях групп мы встречались уже в V § 134. Напомним, что проективными представлениями группы G называются вообще представления, осуществляемые операторами $\hat{G}$, соотношения между которыми совпадают с соотношениями между соответствующими элементами группы G лишь с точностью до фазовых множителей: если $G_1G_2 = G_3$, то для операторов имеем $\hat{G}_1\hat{G}_2 = \omega_{12}\hat{G}_3$, где ω_{12} должно быть равно единице только по модулю.

$\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$; $v=[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]\mathbf{a}_3$ — объем элементарной ячейки решетки[1]). Другими словами, магнитное поле должно быть направлено вдоль какого-либо периода решетки, а величина $hv/4\pi a_3$ должна быть рациональным числом. Умножив равенство (60,5) на $[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]$, можно представить это условие также и в виде

$$\mathbf{h}[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]=4\pi p/q, \tag{60,6}$$

Для классификации неприводимых проективных представлений группы трансляций существенно, что из этой группы можно выделить подгруппу (будем называть ее *магнитной*), по отношению к которой представление является не проективным, а обычным. При соблюдении условия (60,6) такой подгруппой является совокупность трансляций вида

$$\mathbf{a}_m=n_1\mathbf{a}_1+n_2q\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3 \tag{60,7}$$

с целочисленными коэффициентами n_1, n_2, n_3. Действительно, когда вектор $\mathbf{h}$ направлен вдоль $\mathbf{a}_3$ и удовлетворяет условию (60,6), для всех трансляций такого вида показатель экспоненты в (60,3) обращается в нуль или в кратное от 2π, так что все множители $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}')=1$[2]). Совокупность трансляций (60,7) образует решетку с основными периодами $\mathbf{a}_1$, $q\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ (назовем ее магнитной). Магнитная же обратная решетка соответственно имеет периоды $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2/q$, $\mathbf{b}_3$, где $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$ — периоды основной обратной решетки.

Обычные неприводимые представления магнитной подгруппы, как и группы трансляций в целом, одномерны; они характеризуются волновыми векторами (квазиимпульсами) $\mathbf{K}$, все неэквивалентные значения которого заключены в одной ячейке магнитной обратной решетки.

Пусть $\psi^{(1)}$ — функция базиса одного из таких представлений с квазиимпульсом $\mathbf{k}^{(1)}\equiv\mathbf{K}$. Для нее

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_m}\psi^{(1)}(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{a}_m}\psi^{(1)}(\mathbf{r}). \tag{60,8}$$

При трансляции же на период $\mathbf{a}_2$ (не входящий в магнитную подгруппу) получим из $\psi^{(1)}$ функцию $\psi^{(2)}$ с другим квазиимпульсом. Для его определения пишем, используя (60,4) и (60,8):

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_m}\psi^{(2)}=\hat{T}_{\mathbf{a}_m}\hat{T}_{\mathbf{a}_2}\psi^{(1)}(\mathbf{r})=\exp(-i\mathbf{h}[\mathbf{a}_m\mathbf{a}_2])\,\hat{T}_{\mathbf{a}_2}\hat{T}_{\mathbf{a}_m}\psi^{(1)}(\mathbf{r})=$$
$$=\exp\{-i\mathbf{a}_m[\mathbf{a}_2\mathbf{h}]+i\mathbf{a}_m\mathbf{k}^{(1)}\}\,\hat{T}_{\mathbf{a}_2}\psi^{(1)}(\mathbf{r})$$

[1]) Напомним, что в качестве основных можно выбрать наименьшие периоды решетки в любых трех некомпланарных кристаллических направлениях (т. е. направлениях, проходящих через бесконечное множество узлов решетки). Объем элементарной ячейки от выбора основных периодов не зависит.

[2]) Выбор магнитной подгруппы, вообще говоря, неоднозначен: вместо (60,7) можно выбрать любую совокупность трансляций вида $\mathbf{a}_m=n_1q_1\mathbf{a}_1+n_2q_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3$, где q_1, q_2 — целые числа такие, что $q_1q_2=q$.

или окончательно

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(2)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{a}_m} \psi^{(2)}(\mathbf{r}),$$

где

$$\mathbf{k}^{(2)} = \mathbf{k}^{(1)} - [\mathbf{a}_2 \mathbf{h}] = \mathbf{K} - 2\frac{p}{q}\mathbf{b}_1$$

(в последнем равенстве подставлено (60,5) и введен период обратной решетки $2\pi[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]/v = \mathbf{b}_1$). Далее надо различать случаи нечетных и четных значений q[1]).

Пусть q — нечетное число. Повторив трансляцию на $\mathbf{a}_2$ еще $q-2$ раз, получим всего q различных функций с квазиимпульсами

$$\mathbf{k}^{(1)} = \mathbf{K}, \quad \mathbf{k}^{(2)} = \mathbf{K} - 2\frac{p}{q}\mathbf{b}_1, \ \ldots, \ \mathbf{k}^{(q)} = \mathbf{K} - 2\frac{p(q-1)}{q}\mathbf{b}_1. \qquad (60,9)$$

Вычитанием надлежащего целого кратного вектора $\mathbf{b}_1$ эти значения приводятся (в той или иной последовательности) к значениям

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}, \quad \mathbf{K} + \frac{1}{q}\mathbf{b}_1, \quad \mathbf{K} + \frac{2}{q}\mathbf{b}_1, \ \ldots, \ \mathbf{K} + \frac{q-1}{q}\mathbf{b}_1. \qquad (60,10)$$

Эти q функций и осуществляют q-мерное неприводимое проективное представление группы трансляций. Мы получим все неэквивалентные представления, когда $\mathbf{K}$ пробегает значения в ячейке со сторонами $\mathbf{b}_1/q$, $\mathbf{b}_2/q$, $\mathbf{b}_3$ (квазиимпульсы же $\mathbf{k}^{(1)}$, $\mathbf{k}^{(2)}$, .. пробегают при этом значения в ячейке со сторонами $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2/q$, $\mathbf{b}_3$).

Пусть теперь q — четное число. Тогда в последовательности (60,9) уже $(q/2+1)$-е значение, равное $\mathbf{K} - p\mathbf{b}_1$, отличается от $\mathbf{K}$ лишь целым кратным периодов обратной решетки $\mathbf{b}_1$. Другими словами, имеется всего $q/2$ неэквивалентных значений $\mathbf{k}$; они даются выражением (60,10) с $q/2$ вместо q. Таким образом, в этом случае неприводимые представления $q/2$-мерны, причем $\mathbf{K}$ пробегает значения в ячейке со сторонами $2\mathbf{b}_1/q$, $\mathbf{b}_2/q$, $\mathbf{b}_3$.

Эти результаты позволяют сформулировать следующее заключение о характере изменения энергетического спектра электрона в решетке при наложении на нее магнитного поля (удовлетворяющего условию (60,5)). В отсутствие поля спектр состоит из дискретных энергетических зон, в каждой из которых энергия $\varepsilon(\mathbf{k})$ является функцией квазиимпульса, пробегающего значения в одной ячейке обратной решетки. При наложении поля такая

[1]) При $q=1$ магнитная подгруппа совпадает с полной группой трансляций. Таким образом, если $\mathbf{h}$ — целое кратное от $4\pi a_3/v$, то проективные неприводимые представления группы трансляций совпадают с обычными неприводимыми представлениями и состояния электрона классифицируются так же, как в отсутствие поля.

зона расщепляется на q подзон, в каждой из которых все уровни энергии вырождены с кратностью q при нечетном или $q/2$ при четном q. Энергия в подзоне может быть выражена как функция $\varepsilon(\mathbf{K})$ вектора $\mathbf{K}$, пробегающего значения в $1/q^2$-й (при нечетном q) или $2/q^2$-й (при четном q) части ячейки обратной решетки.

Описанная картина в определенном смысле крайне чувствительна к величине и направлению магнитного поля. Действительно, сколь угодно близко к значению $\mathbf{H}$, удовлетворяющему условию (60,5) с некоторыми p и q, лежат значения, удовлетворяющие такому же условию, но с гораздо большими q, так что путем сколь угодно малого изменения поля число подзон можно сделать сколь угодно большим. Подчеркнем, однако, что это отнюдь не означает такой же неустойчивости в наблюдаемых физических свойствах. Последние определяются не столько конкретной зонной структурой, сколько распределением числа состояний по малым, но конечным интервалам энергий; это распределение мало меняется при малом изменении поля. Дело в том, что сильно меняется не энергия состояний, а лишь их классификация ввиду изменения области определения квазиимпульса.

§ 61. Электронный спектр нормальных металлов

В реальных кристаллах нормальных (несверхпроводящих) металлов электроны образуют квантовую ферми-жидкость, относящуюся к описанному в главе I типу. Ряд отличий возникает, однако, в связи с тем, что здесь мы имеем дело не со «свободной» изотропной жидкостью, а с жидкостью в анизотропном периодическом поле решетки.

Подобно тому как энергетический спектр свободной ферми-жидкости строится аналогично спектру идеального ферми-газа, так спектр электронной ферми-жидкости в металле строится аналогично спектру идеального «газа в решетке». Появление квазиимпульса как сохраняющейся величины связано только с пространственной периодичностью системы (подобно тому как сохранение истинного импульса является следствием полной пространственной однородности). Естественно поэтому, что перечисленные в § 55 свойства переносятся и на характер классификации уровней в спектре электронной жидкости в металле, причем роль частиц (электронов) переходит к квазичастицам.

При температуре абсолютного нуля частицы идеального ферми-газа в периодическом поле займут все нижние уровни с энергиями ε вплоть до некоторого граничного значения ε_F (совпадающего со значением химического потенциала μ при $T=0$),