

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 $\epsilon(\mathbf{K})$ 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 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 $T=0$),

определяемого условием, что число состояний с $\varepsilon \leq \varepsilon_F$ совпадает с полным числом электронов. При этом энергетические зоны, для которых $\varepsilon_s(\mathbf{k}) < \varepsilon_F$ при всех значениях \mathbf{k} , окажутся полностью заполненными, зоны с $\varepsilon_s(\mathbf{k}) > \varepsilon_F$ — пустыми, а зоны, для которых уравнение

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_F \quad (61,1)$$

имеет решение, — будут заполнены частично. Уравнения (61,1) определяют в \mathbf{k} -пространстве граничную поверхность Ферми, отделяющую (для каждой зоны) заполненные состояния от пустых.

Аналогично, в реальном металле существует поверхность в \mathbf{k} -пространстве, отделяющая область заполненных (при $T=0$) состояний квазичастиц от свободных состояний; по одну сторону этой поверхности энергии квазичастиц $\varepsilon > \varepsilon_F$, а по другую $\varepsilon < \varepsilon_F$. Напомним, однако (см. § 1), что понятие квазичастиц в ферми-жидкости имеет реальный физический смысл лишь вблизи ферми-поверхности, где затухание элементарных возбуждений сравнительно мало. Поэтому представление о заполненных энергетических зонах (возникающее при описании спектра идеального ферми-газа) в реальной электронной жидкости теряет свой буквальный смысл.

Квазичастицы вблизи ферми-поверхности называют *электронами проводимости*. Их энергия является, в общем случае, линейной функцией квазимпульса; аналогично (1,12), имеем

$$\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F \approx \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) \mathbf{v}_F, \quad (61,2)$$

где \mathbf{k}_F — точка на ферми-поверхности, а

$$\hbar \mathbf{v}_F = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} \quad (61,3)$$

— скорость электронов проводимости в этих точках¹⁾.

Вблизи ферми-поверхности должна лежать и «область размытости» распределения электронов проводимости при отличных от нуля температурах. Отсюда возникает условие применимости теории ферми-жидкости: $T \ll \hbar k_F v_F$, где k_F и v_F — характерные величины размеров ферми-поверхности и скорости на ней. Обычно размеры k_F совпадают по порядку величины с размерами ячейки обратной решетки, так что $k_F \sim 1/a$ (исключение составляют так называемые полуметаллы — см. ниже). Положив также для оценки $v_F \sim \hbar k_F / m$, приходим к условию $T \ll 10^4 - 10^5$ К, практически всегда выполняющемуся.

¹⁾ Формулы же типа (2,11) для эффективной массы, полученные в § 2 для «свободной» ферми-жидкости из соображений галилеевой инвариантности, к электронной жидкости в кристаллической решетке, разумеется, не относятся.

Фактически все металлы имеют кристаллические решетки с центром инверсии. Согласно сказанному в конце § 55, все уровни энергии электронов проводимости (с заданными k) двукратно вырождены по спину (речь идет о металлах не ферри- и не антиферромагнитных).

Форма и расположение ферми-поверхности являются важной характеристикой каждого конкретного металла. У различных металлов они имеют самую разнообразную, вообще говоря сложную, форму. Ферми-поверхность может состоять из нескольких не связанных между собой листов, которые могут быть односвязными или многосвязными, закрытыми или открытыми (ср. сказанное в § 55 об изоэнергетических поверхностях вообще).

Замкнутые листы ферми-поверхности можно разделить на две категории в зависимости от того, ограничивают ли они области заполненных (при $T=0$) или свободных состояний квазичастиц (в первом случае внутри полости $\varepsilon < \varepsilon_F$, а во втором $\varepsilon > \varepsilon_F$). Оба случая можно, однако, описывать аналогичным образом, если считать во втором случае, что «пустая» полость заполнена «квазидырками»; переход системы в возбужденное состояние описывается тогда как переход квазидырок изнутри ферми-поверхности наружу. Самую ферми-поверхность называют тогда *дырочной*, в отличие от *электронной* в первом случае¹). Физическое различие между двумя типами квазичастиц — электронами и дырками — ясно проявляется при их движении во внешних полях. Так, все сечения дырочной (или электронной) ферми-поверхности, определяющие квазиклассические траектории при движении в магнитном поле, относятся к дырочному (или электронному) типу в указанном в § 57 смысле.

В изотропной «свободной» ферми-жидкости, о которой шла речь в § 1, ферми-поверхность представляла собой сферу, радиус которой определялся плотностью жидкости согласно теореме Ландау (1,1). Аналогичная связь имеется и для электронной жидкости в металле, но специфика свойств, связанных с периодичностью решетки, приводит к некоторому изменению в формулировке этой связи.

Число электронов в металле удобно относить к одной элементарной ячейке его решетки; пусть n — полное число электронов в атомах одной ячейки. Обозначим через τ_F суммарный объем в одной ячейке обратной решетки, лежащий с заполненной стороны ферми-поверхности (т. е. со стороны, где $\varepsilon < \varepsilon_F$). Слово суммарный означает здесь, что если заполненные области, соот-

¹) Подчеркнем, однако, во избежание недоразумений, что смысл термина «дырка» не совпадает здесь со смыслом, в котором он применялся в описанном в конце § 1 альтернативном способе описания спектра ферми-жидкости (там назывались дырками лишь пустые места, образовавшиеся в заполненной области при возбуждении системы).

ветствующие различным листам ферми-поверхности, частично перекрываются, то они все равно должны складываться независимо. Объем τ_F условимся измерять в единицах объема самой ячейки обратной решетки; сделанное замечание о перекрытии областей означает, что определенная таким образом величина τ_F может превышать единицу.

Интересующее нас утверждение (*теорема Латтинжера*), заменяющее для металла теорему Ландау, выражается равенством

$$n_c \equiv 2\tau_F = n - 2l \quad (61,4)$$

где l — некоторое целое число ($l \geq 0$). В модели идеального газа в решетке это число имеет простой смысл: полному заполнению каждой зоны соответствует два электрона в ячейке обратной решетки (удвоение связано с двумя спиновыми состояниями), так что $2l$ есть число электронов, заполняющих l нижних зон, а разность $n - 2l$ — число электронов в частично заполненных зонах. Формула (61,4) выражает тот — отнюдь не тривиальный — факт, что аналогичная ситуация продолжает иметь место и при учете взаимодействия между электронами¹⁾. По определению металла, целое число n_c отлично от нуля.

Пусть в металле имеются только замкнутые листы ферми-поверхности — электронные и дырочные. Обозначим посредством $\tau_-^{(s)}$ и $\tau_+^{(s)}$ вклады в τ_F от отдельных электронных и дырочных полостей:

$$\tau_F = \sum_s \tau_-^{(s)} + \sum_s \tau_+^{(s)}$$

(суммирование соответственно по всем электронным и всем дырочным листам). Величина $\tau_-^{(s)}$ совпадает с объемом электронной полости, а объем дырочной полости есть $1 - \tau_+^{(s)}$. Введем числа электронных и дырочных квазичастиц

$$n_- = 2 \sum_s \tau_-^{(s)}, \quad n_+ = 2 \sum_s (1 - \tau_+^{(s)}).$$

При четном n (а потому и четном n_c) возможны случаи, когда n_c совпадает с удвоенным числом дырочных полостей. Тогда равенство (61,4) сведется, как легко убедиться, к равенству

$$n_- = n_+. \quad (61,5)$$

Такие металлы с равными числами квазичастиц и квазидырок называют *компенсированными*.

Обратим внимание на то обстоятельство, что при точно выполняющемся равенстве (61,5) сами величины n_- и n_+ могут

¹⁾ Строгий вывод этого утверждения см. *J. M. Luttinger, Phys. Rev. 119, 1153 (1960)*.

быть произвольными, в том числе сколь угодно малыми. В таких случаях, когда объемы всех полостей ферми-поверхности очень малы (по сравнению с объемом одной ячейки обратной решетки), говорят о *полуметаллах*¹⁾. Существует, однако, нижняя граница для числа электронов проводимости, за которой электронный спектр металлического типа становится неустойчивым и существовать не может (см. об этом ниже, в конце § 66).

Термодинамические величины металла складываются из решеточных и электронных частей. Температурная зависимость последних определяется квазичастицами в окрестности ферми-поверхности (закон дисперсии (61,2)). Характер этой зависимости, естественно, тот же, что и у идеального ферми-газа или у изотропной ферми-жидкости (ср. § 1); отличие в формулах возникает лишь от другого числа состояний квазичастиц вблизи ферми-поверхности, не являющейся теперь сферой.

Обозначим число состояний (отнесенное к единице объема металла), приходящееся на интервал энергий $d\varepsilon$, через $\nu d\varepsilon$. Элемент объема k -пространства между бесконечно близкими изоэнергетическими поверхностями, отвечающими энергиям ε_F и $\varepsilon_F + d\varepsilon$, равен $df d\varepsilon / \hbar \nu_F$, где df — элемент площади ферми-поверхности, а ν_F — величина нормального к ней вектора $\nu_F = \partial\varepsilon / \hbar \partial k$. Поэтому

$$\nu_F = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{df}{\hbar \nu_F}, \quad (61,6)$$

где интегрирование производится по всем листам ферми-поверхности, расположенным внутри одной ячейки обратной решетки (при открытой ферми-поверхности грани самой ячейки в область интегрирования, разумеется, не входят).

Величина (61,6) заменяет собой в термодинамических величинах выражение, которое для газа свободных частиц (поверхность Ферми — сфера) имело вид

$$\frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p_F^3}{p_F/m} = \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3}.$$

Так, для электронной части термодинамического потенциала Ω металла имеем (ср. V § 58)

$$\Omega_e = \Omega_{0e} - \frac{\pi^2}{6} \nu_F V T^2, \quad (61,7)$$

где Ω_{0e} — значение потенциала при $T = 0$. Рассматривая второй член в (61,7) как малую добавку к Ω_{0e} , согласно теореме о малых добавках, можно написать такую же формулу и для

¹⁾ Так, у висмута $n_- = n_+ \sim 10^{-4}$.

термодинамического потенциала Φ :

$$\Phi_e = \Phi_{0e} - \frac{\pi^2}{6} v_F V T^2, \quad (61,8)$$

где теперь v_F и V предполагаются выраженными через P (по «нулевому» приближению, т. е. при $T=0$).

Определяя из (61,8) энтропию, а затем теплоемкость, найдем

$$C_e = \frac{\pi^2}{3} v_F V T. \quad (61,9)$$

Решеточная же часть теплоемкости пропорциональна T^3 (при температурах, малых по сравнению с дебаевской Θ); поэтому при достаточно низких температурах электронный вклад в теплоемкость становится преобладающим¹⁾.

По этой же причине становится преобладающим в этой области температур также и электронный вклад в тепловое расширение металла. Определяя из (61,8) объем $V = \partial\Phi/\partial P$, а затем коэффициент теплового расширения α , найдем

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -T \frac{\pi^2}{3V} \frac{\partial (V v_F)}{\partial P}. \quad (61,10)$$

Отметим, что здесь (как и в области $T \gg \Theta$ — см. V § 67) отношение

$$\frac{\alpha V}{C} = - \frac{\partial \ln (V v_F)}{\partial P}$$

оказывается не зависящим от температуры.

§ 62. Гриновская функция электронов в металле

Проведенное в §§ 56—58 рассмотрение относилось к движению одного электрона в решетке, на которую наложено еще внешнее магнитное поле. Покажем теперь, что полученные при этом результаты остаются по существу справедливыми и для квазичастиц (электронов проводимости) в электронной жидкости реального металла, — меняется лишь несколько определение входящих в соотношения величин (Ю. А. Бычков, Л. П. Горьков, 1961; J. M. Luttinger, 1961). Подходящим математическим аппаратом для общего рассмотрения электронной жидкости является аппарат гриновских функций.

В главе II этот аппарат был развит для «свободной» ферми-жидкости. Выясним, в каких пунктах он должен быть изменен для жидкости в решетке.

¹⁾ Малым параметром разложения в (61,9) является отношение T/ε_F , а в решеточной теплоемкости — отношение T/Θ . Поэтому обе части теплоемкости сравниваются при $T^2 \sim \Theta^2/\varepsilon_F$.