ЛЕКЦИИ ПО МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

А.Г.Сергеев

1. Лекция I. Оператор Шредингера

1.1. **Одночастичный оператор Шредингера.** Теория Блоха описывает свойства твердых тел, обладающих кристаллической решеткой, называемой *решеткой Бравэ*. С математической точки зрения это дискретная абелева группа Γ в пространстве $\mathbb{R}^d$, где $d = 2, 3$, изоморфная $\mathbb{Z}^d$ и действующая в $\mathbb{R}^d$ трансляциями T_γ на векторы $\gamma \in \Gamma$.

Поведение свободного электрона в твердом теле определяется *одночастичным оператором Шредингера*, собственные функции которого удовлетворяют уравнению

$$H\psi := (-\Delta + U)\psi = E\psi, \tag{1}$$

где Δ – оператор Лапласа, а U – потенциал, инвариантный относительно действия Γ. Оператор H коммутирует со всеми трансляциями T_γ, $\gamma \in \Gamma$.

Более подробно о свойствах оператора Шредингера (сасопряженность, дискретный спектр), в том числе с периодическим потенциалом, можно прочесть в книге Ф.А.Березина и М.А.Шубина ([4] в списке литературы к Введению).

Обозначим через Γ' *двойственную решетку* в двойственном пространстве $(\mathbb{R}^d)'$, называемом также *импульсным*, которая определяется как

$$\Gamma' = \{k \in (\mathbb{R}^d)' : (k \cdot \gamma) \in 2\pi\mathbb{Z} \quad \text{для любого } \gamma \in \Gamma\}.$$

Фундаментальная область (единичная клетка) $M_{\Gamma'}$ решетки Γ' называется *зоной Бриллюэна* Br_d.

Функции, инвариантные относительно Γ, можно рассматривать как функции на торе $\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d/\Gamma$. Обозначим через $\mathcal{H}_0$ гильбертово пространство

$$\mathcal{H}_0 = L^2(\mathbb{T}^d) = L^2(\mathbb{R}^d/\Gamma)$$

относительно меры на $\mathbb{R}^d/\Gamma$, индуцированной лебеговой мерой dx на $\mathbb{R}^d$. Экспонента $e_k := e^{ik\cdot x}$ принадлежит $\mathcal{H}_0$, если $k \in \Gamma'$. Более того, такие функции образуют ортонормированный базис в пространстве $\mathcal{H}_0$.

Гладкие функции вида

$$\psi(x) = e^{ik\cdot x}\varphi(x),\ x \in \mathbb{R}^d,$$

где вектор k принадлежит зоне Бриллюэна Br_d, а функция $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^d/\Gamma)$ является C^∞-гладкой Γ-периодической функцией на $\mathbb{R}^d$, называются *блоховскими*, а вектор k – *квазиимпульсом*. Векторное пространство блоховских функций с квазиимпульсом k обозначается через L_k. Эквивалентно, его можно определить как

$$L_k = \{\psi \in C^\infty(\mathbb{R}^d) : \psi \circ T_\gamma = e^{ik\cdot\gamma}\psi \text{ для всех } \gamma \in \Gamma\}.$$

Замечание 1. Квазиимпульс k похож на импульс, однако собственные функции оператора Шредингера $\psi_m(k) = e^{ik\cdot x}\varphi_m(k)$ (см. ниже формулу (3)) не являются собственными функциями оператора импульса. Действительно, применяя оператор импульса p к функции $\psi_m(k)$, получим

$$\nabla\psi_m(k) = k\psi_m(k) + \frac{e^{ik\cdot x}}{i}\nabla\varphi_m(k)$$

в правой части, т.е. помимо "правильного" члена $k\psi_m(k)$, еще один "лишний" член.

Оператор Шредингера (1) действует на блоховские функции по правилу

$$H\left(e^{ik\cdot x}\varphi(x)\right) = e^{ik\cdot x}H_k\varphi(x). \tag{2}$$

Оператор H_k, называемый *блоховским гамильтонианом*, имеет вид

$$H_k\varphi = (\frac{1}{i}\nabla + k)^2\varphi + U\varphi,$$

где ∇ – вектор-градиент.

Оператор H_k отображает пространство $C^\infty(\mathbb{R}^d/\Gamma)$ в себя, а из формулы (2) следует, что исходный оператор Шредингера $H = H_0$ отображает пространство L_k блоховских функций с квазиимпульсом k в себя. Если обозначить через I_k оператор умножения на $e^{ik\cdot x}$, то формулу (2) можно будет переписать в виде

$$I_k^{-1} \circ H \circ I_k = H_k.$$

Отсюда следует, что

$$H|_{L_k} = I_k \circ H_k|_{L_0} \circ I_k^{-1},$$

т.е. исследование оператора $H|_{L_k}$ сводится к изучению оператора $H_k|_{L_0}$.

Обозначим через $H(k)$ замыкание оператора $H_k|_{L_0}$ в пространстве $\mathcal{H}_0$. Область определения этого оператора совпадает с подпространством

$$D = \left\{\varphi : \varphi(x) = \sum_{\gamma'\in\Gamma'}\varphi_{\gamma'}e^{i\gamma'\cdot x)},\ \sum_{\gamma'\in\Gamma'}(1+|\gamma'|^2)^2|\varphi_{\gamma'}|^2 < \infty\right\}$$

со скалярным произведением

$$\|\varphi\|_2^2 = V_\Gamma\sum_{\gamma'\in\Gamma'}(1+|\gamma'|^2)^2|\varphi_{\gamma'}|^2,$$

где V_Γ есть объем фундаментальной области M_Γ решетки Γ. Указанное подпространство можно отождествить с соболевским пространством $H^2(\mathbb{R}^d/\Gamma)$.

Спектр оператора $H(k)$ является дискретным, а его собственные функции $\varphi_m(k)$, являющиеся решениями уравнения

$$H(k)\varphi_m(k) = E_m(k)\varphi_m(k), \tag{3}$$

образуют полную ортогональную систему в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_0$.

Подчеркнем, что функции $\varphi_m(k)$ являются функциями от x, зависящими от двух параметров — дискретного параметра $m \in \mathbb{N}$ и непрерывного параметра $k \in \mathrm{Br}_d$. При каждом фиксированном k эти функции образуют полную ортогональную систему в пространстве $\mathcal{H}_0$.

Блоховские функции

$$\psi_m(k) = e^{ik\cdot x}\varphi_m(k) \tag{4}$$

являются собственными функциями исходного оператора Шредингера H.

Прежде, чем переходить к математическому описанию многочастичных систем, приведем их физическую интерпретацию.

1.2. **Физическая интерпретация.** Во многих работах по теории твердых тел принято использовать *приближение сильной связи*. Гильбертово пространство состояний в этой модели отождествляется с $\ell^2(\Gamma)\otimes V$, где Γ – решетка Бравэ, а V – гильбертово пространство.

Основное состояние системы (т.е. состояние с наименьшей ъенргией) устроено следующим образом. Заполненные одноэлектронные уровни с энергиями ниже *энергии Ферми* E_F называются *валентными*. Выше E_F располагаются пустые (не заполненные) уровни, называемые *уровнями проводимости*. Интервал энергий между самым высоким заполненным уровнем и самым низким пустым уровнем называется *энергетической щелью* или *запрещенной зоной*. Твердые тела, обладающие широкой энергетической щелью, называются *диэлектриками* или *изоляторами*.

Рассматриваемые гамильтонианы, действующие в пространстве состояний $\ell^2(\Gamma)\otimes V$, являются самосопряженными операторами, обладающими пространственной симметрией. Иными словами, они инвариантны относительно трансляций на векторы решетки Бравэ Γ. В то же время гильбертово пространство V отвечает за внутренние симметрии (такие, как спин).

В твердых телах при низких температурах активные степени свободы концентрируются вблизи энергии Ферми. Иначе говоря, при описании таких систем можно ограничиться низко-энергетическим сектором гильбертова пространства V, порождаемым состояниями, расположенными вблизи от энергии Ферми. В приближении сильной свзит считается просто, что гильбертоао пространство V конечномерно.

Список литературы

[1] N.W.Ashcroft, N.D.Mermin, *Solid State Physics*, Saunders, New York, 1976 [Русский перевод: Н.Ашкрофт, Н.Мермин, Физика твердого тела, М.: Мир, 1979]

[2] F.A.Berezin, M.A.Shubin, *The Schrödinger Equation*, Kluwer, Boston, 1991.

[3] Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский, *Статистическая физика, часть 2*, Наука, Москва, 1978.