Физика низких температур, 1995, т. 21, №3, с. 300–309 УДК 538.945

Приближение Хартри—Фока в теории ферми-жидкости с учетом пространственной симметрии кристаллов

Ю. М. Полуэктов

Национальный научный центр. Харьковский физико-технический институт, Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1

Статья поступила в редакцию 3 октября 1994 г., после переработки 1 ноября 1994 г.

Хартри-фоковский подход к описанию электронов в твердом теле при отличных от нуля температурах обобщен с учетом пространственной симметрии кристалла. Показано, что учет межэлектронного взаимодействия не изменяет классификацию электронных состояний, используемую в одноэлектронном подходе. Приближение Хартри—Фока при конечных температурах приводит к соотношениям теории ферми-жидкости. Эффективная масса электронов в такой теории определяется как периодическим потенциалом решетки, так и электрон-электронным взаимодействием.

Хартрі-фоківський підхід до опису електронів в твердому тілі при відмінних від нуля температурах узагальнено з урахуванням просторової симетрії кристалу. Показано, що урахування міжелектронної взаємодії не змінює класифікацію електронних станів, що використовується в одноелектронному підході. Наближення Хартрі—Фока при скінченних температурах приводить до співвідношень теорії фермі-рідини. Ефективна маса електрона в такій теорії визначається як періодичним потенціалом гратки, так і електрон-електронною взаємодією.

Многие свойства нормальных металлов могут быть поняты и хорошо описаны уже в рамках одноэлектронного приближения, при котором электроны рассматриваются как газ независимых квазичастиц со сложным законом дисперсии [1]. Однако для исследования коллективных явлений в твердых телах, таких как сверхпроводимость, магнетизм и некоторых других, приближение независимых электронов принципиально непригодно и с самого начала необходимо хотя бы частично учитывать электрон-электронное взаимодействие. Достаточно эффективным способом учета взаимодействия между электронами является подход Хартри—Фока (ХФ), который часто используется для обоснования замены многочастичной проблемы одночастичной [2]. Применению метода ХФ и его модификаций к расчету физических свойств кристаллов посвящена монография Слэтера [3]. Вывод самосогласованных уравнений ХФ в классических работах [4–6] основан на представлении волновой функции электронов в виде определителя Слэтера. Такой подход фактически ограничивает использование теории ХФ нулевой температурой, хотя приближение самосогласованного поля, несомненно, может быть использовано и при отличных от нуля температурах. Во многих случаях при хартри-фоковском подходе используют континуальное приближение. В такой модели не учитываются специфические особенности кристалла, определяемые симметрией его кристаллической решетки.

В настоящей работе на основе метода, использующего формализм вторичного квантования [7], получены уравнения Хартри—Фока, справедливые при отличных от нуля температурах и учитывающие симметрию кристаллической решетки. Последовательный учет симметрии потребовал привлечения теории пространственных групп. В статье показано, что приближение ХФ для конечных температур приводит к соотношениям, эквивалентным соотношениям теории ферми-жидкости [8], обобщенным с учетом симметрии кристалла. Фермижидкостные параметры выражены через решения хартри-фоковских уравнений. Эффективная масса электронов вблизи поверхности Ферми определяется совместным влиянием как периодического потенциала решетки, так и фермижидкостного взаимодействия.

1. Гамильтониан системы электронов в представлении вторичного квантования имеет вид

$$H = H_0 + H_1 - \mu N \,, \qquad (1)$$

$$H_0 = \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathrm{x}\, d\mathrm{x}'\, \Psi^+_\sigma(\mathrm{x}) H_{\sigma\sigma'}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') \Psi_{\sigma'}(\mathrm{x}') \,, \qquad (1a)$$

© Ю. М. Полуэктов, 1995

$$H_1 =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int d\mathbf{x}d\mathbf{x}'\,\Psi^+_\sigma(\mathbf{x})\Psi^+_{\sigma'}(\mathbf{x}')U(\mathbf{x},\mathbf{x}')\Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}')\Psi_\sigma(\mathbf{x})\,, \tag{1б}$$

$$N = \sum_\sigma \int d\mathbf{x}\,\Psi^+_\sigma(\mathbf{x})\Psi_\sigma(\mathbf{x})\,, \tag{1в}$$

где полевые операторы $\Psi^+_\sigma(\mathbf{x})$, $\Psi_\sigma(\mathbf{x})$, описывающие рождение и уничтожение электрона в точке $\mathbf{x}$ с проекцией спина σ, подчинены антикоммутационным соотношениям

$$\left\{\Psi_\sigma(\mathbf{x}), \Psi^+_{\sigma'}(\mathbf{x}')\right\} = \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,,$$

$$\left\{\Psi_\sigma(\mathbf{x}), \Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}')\right\} = 0\,. \tag{2}$$

Без учета спин-орбитального взаимодействия одночастичный гамильтониан в (1а) может быть записан следующим образом:

$$H_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')H(\mathbf{x})\,,$$

$$H(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_0(\mathbf{x})\,, \tag{3}$$

где m — масса свободного электрона, $U_0(\mathbf{x})$ — потенциал взаимодействия электрона с ионами. В формуле (1б) $U(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ — потенциал межэлектронного взаимодействия. Химический потенциал μ выбирается так, чтобы среднее число электронов в кристалле было равно $\bar{N}$.

Приближение среднего поля состоит в замене исходного гамильтониана H на редуцированный гамильтониан

$$\widetilde{H} = H_0 + \widetilde{H}_1 - \mu N\,, \tag{4}$$

$$\widetilde{H}_1 = \sum_{\sigma\sigma'}\int d\mathbf{x}\,d\mathbf{x}'\,W_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x},\mathbf{x}')\Psi^+_\sigma(\mathbf{x})\Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}')\,. \tag{4а}$$

Введенный в (4а) потенциал, вид которого будет найден ниже, обладает очевидным свойством

$$W_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = W^*_{\sigma'\sigma}(\mathbf{x}',\mathbf{x})\,. \tag{5}$$

В данной работе не будут рассматриваться магнитные состояния кристалла. С учетом этого, а также в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, потенциал (5) диагонален по спиновым индексам. Таким образом, исходный гамильтониан аппроксимируется гамильтонианом

$$\widetilde{H} = \sum_\sigma \int d\mathbf{x}\,d\mathbf{x}'\,\Omega(\mathbf{x},\mathbf{x}')\Psi^+_\sigma(\mathbf{x})\Psi_\sigma(\mathbf{x}') - \mu N\,, \tag{6}$$

квадратичным по операторам $\Psi^+_\sigma(\mathbf{x})$, $\Psi_\sigma(\mathbf{x})$, где

$$\Omega(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')H(\mathbf{x}) + W(\mathbf{x},\mathbf{x}')\,. \tag{7}$$

Представим полевые операторы в виде

$$\Psi_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_j \varphi_j(\mathbf{x})\,\gamma_{j\sigma}\,,\quad \Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_j \varphi^*_j(\mathbf{x})\gamma^+_{j\sigma}\,, \tag{8}$$

где j — набор квантовых чисел, определяющих состояние электрона; $\varphi_j(\mathbf{x})$ — полная система ортонормированных функций:

$$\int d\mathbf{x}\,\varphi^*_j(\mathbf{x})\varphi_{j'}(\mathbf{x}) = \delta_{jj'}\,,$$

$$\sum_j \varphi^*_j(\mathbf{x})\varphi_j(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,. \tag{9}$$

В силу соотношений (2), (9), операторы $\gamma^+_{j\sigma}$, $\gamma_{j\sigma}$ также подчиняются фермиевским условиям антикоммутации

$$\left\{\gamma_{j\sigma}, \gamma^+_{j'\sigma'}\right\} = \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'}\,,\quad \left\{\gamma_{j\sigma}, \gamma_{j'\sigma'}\right\} = 0\,. \tag{10}$$

Введем оператор $\hat{\Omega}$, действие которого на функцию φ_j определим выражением

$$\hat{\Omega}\,\varphi_j(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}'\,\Omega(\mathbf{x},\mathbf{x}')\,\varphi_j(\mathbf{x}')\,. \tag{11}$$

Подставив (8) в (6) и потребовав, чтобы функции $\varphi_j(\mathbf{x})$ удовлетворяли уравнению

$$\hat{\Omega}\,\varphi_j(\mathbf{x}) = \varepsilon_j\,\varphi_j(\mathbf{x})\,, \tag{12}$$

приведем редуцированный гамильтониан к виду, совпадающему с гамильтонианом идеального газа квазичастиц

$$\widetilde{H} = \sum_{j\sigma}(\varepsilon_j - \mu)\,\gamma^+_{j\sigma}\gamma_{j\sigma}\,. \tag{13}$$

О таких квазичастицах естественно говорить как о хартри-фоковских квазичастицах. Параметр ε_j, входящий в гамильтониан (13), имеет смысл энергии хартри-фоковской квазичастицы, а операторы $\gamma^+_{j\sigma}$, $\gamma_{j\sigma}$ являются операторами рождения и уничтожения такой квазичастицы.

Уравнение (12) не позволяет определить одночастичные волновые функции $\varphi_j(\mathbf{x})$, пока остается неопределенным потенциал $W(\mathbf{x},\mathbf{x}')$. Найдем его, потребовав, чтобы функции $\varphi_j(\mathbf{x})$ реализовывали минимум среднего от разности точного и редуцированного гамильтонианов взаимодействия:

$$I = \langle(H_1 - \widetilde{H}_1)\rangle\,. \tag{14}$$

Усреднение в (14) производится с собственными функциями оператора $\widetilde{H}$, имеющего вид гамильтониана газа невзаимодействующих квазичастиц. В этом случае справедлива теорема Вика

$$\langle\Psi_1^+\Psi_2^+\Psi_3\Psi_4\rangle = \langle\Psi_1^+\Psi_4\rangle\langle\Psi_2^+\Psi_3\rangle - \langle\Psi_1^+\Psi_3\rangle\langle\Psi_2^+\Psi_4\rangle .$$

Таким образом, получаем

$$I = \sum_{\sigma\sigma'} \int dx\, dx' \left[\frac{1}{2} U(x, x')\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_\sigma(x)\rangle\langle\Psi_{\sigma'}^+(x')\Psi_{\sigma'}(x')\rangle - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{2} U(x, x')\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}(x')\rangle\langle\Psi_{\sigma'}^+(x')\Psi_\sigma(x)\rangle - W_{\sigma\sigma'}(x, x')\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}(x')\rangle\right]. \qquad (15)$$

Варьируя (15) по $\delta\varphi_j(x)$ или, что в данном случае эквивалентно, по $\delta\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}(x')\rangle$ и полагая $\delta I = 0$, находим

$$W_{\sigma\sigma'}(x, x') = W(x, x')\,\delta_{\sigma\sigma'} = -U(x, x')\langle\Psi_{\sigma'}^+(x')\Psi_\sigma(x)\rangle + \delta(x - x')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\sigma''}\int dx''\, U(x, x'')\langle\Psi_{\sigma''}(x'')\Psi_{\sigma''}(x'')\rangle . \qquad (16)$$

Подставляя в (16) соотношения (8), выражаем потенциал (5) через одночастичные функции:

$$W(x, x') = -U(x, x')\sum_j \varphi_j^*(x')\varphi_j(x) f(\varepsilon_j) + 2\delta(x - x')\sum_j \int dx'' U(x, x'')\varphi_j^*(x'')\varphi_j(x'') f(\varepsilon_j) . \qquad (17)$$

Здесь учтено, что $\langle\gamma_{j\sigma}^+\gamma_{j'\sigma'}\rangle = \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} f(\varepsilon_j)$, а $f(\varepsilon_j)$ — функция распределения хартри-фоковских электронов. Поскольку гамильтониан системы электронов в приближении ХФ (13) эквивалентен гамильтониану идеального газа, энтропия может быть записана обычным образом через функцию распределения квазичастиц:

$$S = -2\sum_j \left[f_j \ln f_j + (1 - f_j)\ln(1 - f_j)\right] , \qquad (18)$$

где $f_j = f(\varepsilon_j)$. Варьируя термодинамический потенциал $F = \langle\widetilde{H}\rangle - TS$ по δf_j и полагая $\delta F = 0$, получаем, что распределение хартри-фоковских квазичастиц является фермиевским

$$f(\varepsilon_j) = \left[\exp(\varepsilon_j - \mu)/T + 1\right]^{-1} . \qquad (19)$$

Уравнение (12) совместно с полученным явным видом потенциала (17) позволяет определить функции $\varphi_j(x)$ и энергии квазичастиц ε_j. Подставив (17) в (12), находим окончательный вид уравнений Хартри—Фока для конечных температур

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_0(x)\right]\varphi_j(x) + \sum_{j'}\int dx'\, U(x, x') f_{j'}\varphi_{j'}^*(x')\,,$$
$$\left[2\varphi_j(x)\varphi_{j'}(x') - \varphi_j(x')\,\varphi_{j'}(x)\right] = \varepsilon_j\,\varphi_j(x) . \qquad (20)$$

Здесь суммирование осуществляется по всем состоянием. Однако, поскольку под знаком суммы стоит фермиевская функция, реально в сумму дают вклад состояния, для которых f_j заметно отлична от нуля. При $T = 0$ вклад вносят только состояния под поверхностью Ферми. Химический потенциал μ определяется через среднее число электронов $\overline{N}$ условием

$$\overline{N} = \langle N\rangle = 2\sum_j f_j . \qquad (21)$$

Энергия квазичастицы может быть представлена в следующем из (20) виде:

$$\varepsilon_j = \int dx\,\varphi_j^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_0(x)\right]\varphi_j(x) +$$
$$+ \sum_{j'} f(\varepsilon_{j'})\left[2\int dx\, dx'\,\varphi_j^*(x)\varphi_{j'}^*(x')U(x, x')\varphi_{j'}(x')\varphi_j(x) - \int dx\, dx'\,\varphi_j^*(x)\varphi_{j'}^*(x')\,U(x, x')\varphi_j(x')\varphi_{j'}(x)\right]. \qquad (22)$$

Поскольку под знак суммы в правой части (22) входит функция Ферми, в свою очередь зависящая от энергии квазичастицы (19), то соотношение (22) представляет собой в общем случае весьма сложное уравнение для определения ε_j. Первый член под знаком суммы в формуле (22) описывает взаимодействие электрона в состоянии j с электронами во всех состояниях j', включая и самодействие. Второй член, с одной стороны, корректирует это самодействие, а с другой — учитывает требуемое принципом Паули обменное взаимодействие. Термодинамические свойства электронного газа в кристалле в приближении ХФ определяются термодинамическим потенциалом

$$F = 2\sum_j \left[(\varepsilon_j - \mu)f_j - T\left(f_j \ln f_j + (1 - f_j)\ln(1 - f_j)\right)\right] \tag{23}$$

Отличие данного выражения от формулы, относящейся к идеальному газу частиц, состоит в том, что здесь сама энергия квазичастицы является функциалом от функции распределения.

2. До сих пор нигде не учитывалось, что рассматривается кристалл, обладающий определенной пространственной симметрией. Учтем теперь это обстоятельство. Пусть кристалл симметричен относительно преобразований g некоторой пространственной группы G. В таком случае должны быть выполнены условия

$$T(g)U_0(\mathbf{x}) = U_0(g^{-1}\mathbf{x}) = U_0(\mathbf{x}) \ , \tag{24а}$$

$$T(g)U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = U(g^{-1}\mathbf{x}, g^{-1}\mathbf{x}') = U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \ . \tag{24в}$$

Здесь $T(g)$ — оператор, соответствующий элементу симметрии $g \in G$, действующий в пространстве функций [9]. Произвольный элемент пространственной группы может быть записан в виде

$$g = \{h|\vec{\tau} + \mathbf{t}|\} \ , \tag{25}$$

где h — собственное или несобственное вращение; $\vec{\tau}$ — сопровождающая поворот h трансляция, которая равна либо нулю, либо 1/4, 1/3 или 1/2 части периода решетки Браве; $\mathbf{t} = \sum_i n_i \mathbf{t}_i$ — вектор трансляции решетки, $\mathbf{t}_i$ — основные векторы трансляций, n_i — целые числа, $i = 1, 2, 3$. Группы, для которых хотя бы некоторые $\vec{\tau} \neq 0$, среди элементов симметрии имеют винтовые оси или плоскости скольжения (несимморфные группы). У групп, где все $\vec{\tau} = 0$, такие элементы симметрии отсутствуют (симморфные группы). Дальнейшее рассмотрение справедливо как для симморфных, так и для несимморфных пространственных групп. Часто бывает удобным рассматривать кристалл конечных размеров объема V, накладывая циклические граничные условия Борна—Кармана. Тогда волновой вектор в первой зоне Бриллюэна будет принимать конечное число дискретных значений, равное числу элементарных ячеек. В таком случае пространственную группу кристалла можно рассматривать как конечную группу, обладающую конечным количеством неприводимых представлений.

Как известно, в одноэлектронной теории состояние электрона в кристалле обычно характеризуется волновым вектором (квазиимпульсом) $\mathbf{k}$, принадлежащим первой зоне Бриллюэна, и номером зоны (полосы) энергетического спектра n. В этом случае волновая функция электрона имеет вид функции Блоха $\psi_j(\mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{x})$, так что $j = (\mathbf{k}, n)$. Иногда, как будет видно дальше, оказывается полезной более подробная характеристика состояния электрона, основанная на учете полной пространственной симметрии кристалла. Поясним это. Каждый волновой вектор первой зоны Бриллюэна принадлежит звезде некоторого неприводимого представления группы пространственной симметрии кристалла и является одним из ее лучей. Поэтому можно записать $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{pL}$. Такая запись содержит информацию о том, что данный вектор $\mathbf{k}$ является L-лучом p-звезды. Списки звезд для решеток всех типов даны, например, в справочнике [10]. Решения уравнения Шредингера, отвечающие определенной энергии, образуют базис неприводимого представления максимальной группы симметрии гамильтониана [11,12]. Неприводимое представление пространственной группы помимо звезды характеризуется также неприводимым представлением группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$ [9–12]. Следовательно, необходимо указать, по какому неприводимому представлению группы волнового вектора τ преобразуется волновая функция электрона. Если это представление неодномерно, то следует ввести индекс f, нумерующий базисные функции τ-представления группы $G_{\mathbf{k}}$. Одно и то же неприводимое представление может быть индуцировано разными наборами функций, которые нельзя получить один из другого унитарным преобразованием. Эти базисы отвечают различным значениям энергии и будут нумероваться индексом $m = 0, 1, 2, \ldots$ в порядке ее возрастания. Таким образом, состояние электрона в кристалле с учетом его пространственной симметрии полностью определяется: 1) парой индексов $(p\tau)$, показывающих, по какому неприводимому представлению пространственной группы G преобразуется его волновая функция; 2) парой индексов (Lf), нумерующих базисные функции данного неприводимого представления группы G; 3) индексом m, нумерующим совокупности базисных функций, относящихся к определенному неприводимому представлению и отвечающие различной энергии.

В дальнейшем для сокращения записи пары индексов будем заменять одним: $(p\tau) = \nu$ и $(Lf) = l$. Если звезда имеет n_p лучей ($L = 1, 2, ..., n_p$) и неприводимое представление группы $G_{\mathbf{k}}$ имеет размерность n_τ ($f = 1, 2, ..., n_\tau$), то размерность неприводимого представления всей пространственной группы G равна $n_\nu = n_p n_\tau$. Энергия электронов, состояния которых характеризуются лучами данной звезды, одинаковы (при одинаковом m) и, кроме того, состояния каждого такого электрона вырождено n_τ раз, так что полная кратность вырождения равна n_ν. Дополнительное удвоение кратности вырождения может возникать вследствие симметрии относительно операции обращения времени. Таким образом, энергия электрона характеризуется только индексами неприводимого представления группы G и индексом m ($E = E_{(p\tau)m} = E_{\nu m}$), но не зависит от индексов (Lf). Волновая функция в одночастичной теории в данных обозначениях записывается в виде

$$\psi_j(\mathbf{x}) = \psi_{\nu lm}(\mathbf{x}) = \psi_{(p\tau)(Lf)m}(\mathbf{x}) \ . \qquad (26)$$

Под действием оператора $T(g)$ ($g \in G$) эти функции преобразуются следующим образом:

$$T(g)\psi_{(p\tau)(Lf)m}(\mathbf{x}) = \sum_{L'f'} D^{(p\tau)}_{L'f';Lf}(g)\psi_{(p\tau)(L'f')m}(\mathbf{x}) \ , \qquad (27)$$

где матрицы неприводимого представления могут быть записаны в виде

$$D^{(p\tau)}_{L'f';Lf}\left(\left\{h\middle|\vec{\tau}+\mathbf{t}\right\}\right) =$$

$$= d^{(\mathbf{k}\tau)}_{f'f}\left(\left\{h^{-1}_{L'}hh_L\middle|h^{-1}_{L'}(\vec{\tau}-\vec{\tau}_{L'})+h^{-1}_{L'}h\vec{\tau}\right\}\right)\times$$

$$\times\, e^{-i(h_L\mathbf{k})\mathbf{t}}\sum_{\mathbf{b}}\delta_{h^{-1}_{L'}hh_L\mathbf{k};\mathbf{k}+\mathbf{b}} \ . \qquad (28)$$

Здесь введены элементы $g_L = \left\{h_L\middle|\vec{\tau}_L\right\}$ ($L = 1, 2, \ldots, n_p$), которые в результате их действия на некоторый исходный луч звезды позволяют получить любой другой ее луч $\mathbf{k}_L = g_L\mathbf{k} = h_L\mathbf{k}$. В (28) $\mathbf{b} = \sum_i m_i\mathbf{b}_i$, $\mathbf{b}_i$ — основные векторы обратной решетки, m_i — целые числа, $i = 1, 2, 3$. Матрицы $d^{(\mathbf{k}\tau)}_{f'f}(g)$ являются матрицами неприводимого представления τ группы волнового вектора $\mathbf{k}$. Эти матрицы могут быть построены по таблицам нагруженных неприводимых представлений, приведенным в справочнике [10], и предполагаются известными. Матрицы $D^{\nu}_{l'l}(g)$ унитарны (такой выбор всегда возможен [11]), так что выполнено условие

$$\sum_{Lf} D^{(p\tau)*}_{L'f';Lf}(g)D^{(p\tau)}_{L''f'';Lf}(g) = \delta_{L'L''}\delta_{f'f''} \ . \qquad (29)$$

Базисные функции такого неприводимого представления ортонормированы, а функции, принадлежащие различным представлениям или одинаковым, но относящимся к разной энергии, ортогональны, поэтому

$$\int d\mathbf{x}\,\psi^*_{(p\tau)(Lf)m}(\mathbf{x})\psi_{(p'\tau')(L'f')m'}(\mathbf{x}) =$$

$$= \delta_{pp'}\delta_{\tau\tau'}\delta_{LL'}\delta_{ff'}\delta_{mm'} \ . \qquad (30)$$

Условия полноты системы собственных функций одночастичного гамильтониана (3) в рассматриваемой классификации выглядят следующим образом:

$$\sum_{p\tau Lfm}\psi^*_{(p\tau)(Lf)m}(\mathbf{x})\psi_{(p\tau)(Lf)m}(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \ . \qquad (31)$$

Часто возникает необходимость провести суммирование по волновым векторам первой зоны Бриллюэна. В предложенных обозначениях это можно сделать в два этапа. Вначале просуммировать по всем лучам каждой звезды, а потом взять сумму по всем звездам решетки данного типа, поэтому

$$\sum_{\mathbf{k}} = \sum_{pL} \ . \qquad (32)$$

Если осуществляется суммирование функции $f(\mathbf{k})$, которая принимает одинаковые значения для всех лучей звезды

$$f(\mathbf{k}_{p1}) = f(\mathbf{k}_{p2}) = \ldots = f(\mathbf{k}_{pn_p}) \ ,$$

то, очевидно, можно записать

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \sum_{pL} f(\mathbf{k}_{pL}) = \sum_{p} n_p f(\mathbf{k}_{pL}) \ , \qquad (33)$$

где n_p — число лучей p-звезды; $f(\mathbf{k}_{pL})$ — значение функции для произвольного луча p-звезды. Если необходимо осуществить суммирование по всем состояниям электрона в кристалле, то в случае обычной классификации состояний следует взять сумму по $\mathbf{k}$ первой зоны Бриллюэна и сумму по зонному индексу n. При более подробной классификации, введенной выше, помимо суммы по $\mathbf{k}$ необходимо просуммировать по индексу f, нумерующему базисные функции каждого представления τ группы волнового вектора, взять сумму по всем неприводимым представлениям τ группы $G_{\mathbf{k}}$, а также следует просуммировать по индексу m, нумерующему одинаковые неприводимые представления группы G с различной энергией. В итоге для сумм справедливы следующие соотношения:

$$\sum_{kn} = \sum_{pLtfm} = \sum_{\nu lm} . \qquad (34)$$

От второго, более подробного типа классификации можно перейти к первому, упорядочив в порядке возрастания энергии все зоны независимо от того, к какому представлению они относятся, и не указывая лучом какой звезды является вектор **k**. При этом, естественно, теряется часть информации о состоянии электрона. Первый тип классификации может быть более удобен при практических вычислениях, второй тип может оказаться существенным при проведении общих выкладок и доказательстве некоторых утверждений.

3. Возможность классификации состояний по неприводимым представлениям пространственной группы G в одноэлектронном подходе следует из инвариантности потенциала $U_0(\mathbf{x})$ относительно операций симметрии этой группы [11,12]. Последнее условие приводит к равенству нулю коммутаторов одночастичного гамильтониана (3) с операторами $T(g)$ ($g \in G$)

$$\left[T(g), H(\mathbf{x})\right] = 0 . \qquad (35)$$

Если бы самосогласованный потенциал (17) в хартри-фоковском подходе оказался инвариантным относительно таких же преобразований

$$T(g)W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') , \qquad (36)$$

то операторы группы симметрии $T(g)$ коммутировали бы с оператором $\hat{\Omega}$ (11), так что

$$\left[T(g), \hat{\Omega}\right] = 0 \qquad (37)$$

и все рассуждения, используемые в одноэлектронной теории для доказательства возможности систематизации электронных состояний по неприводимым представлениям группы симметрии решетки [12], остаются справедливыми и в теории ХФ. Так, собственные функции оператора $\hat{\Omega}$, отвечающие одному и тому же собственному значению, образуют базис неприводимого представления максимальной группы симметрии кристалла. Предположим, что условия (36), (37) выполнены. В этом случае состояние хартри-фоковского электрона характеризуется таким же набором квантовых чисел $j = \{(p\tau)(Lf)m\}$, как и в одночастичном подходе. Решения уравнений ХФ (20) можно записать в виде, аналогичном (26):

$$\varphi_j(\mathbf{x}) = \varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) = \varphi_{(p\tau)(Lf)m}(\mathbf{x}) . \qquad (38)$$

Соотношения (27), (30), (31) справедливы и для этой совокупности функций. Теперь убедимся, что предположение об инвариантности потенциала $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ действительно справедливо. Подействуем оператором $T(g)$ на самосогласованный потенциал, который, согласно (17), в новых обозначениях имеет вид

$$W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sum_{\nu lm} \varphi^*_{\nu lm}(\mathbf{x}')\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) f(\varepsilon_{\nu m}) + 2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{\nu lm} \int d\mathbf{x}'' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')\varphi^*_{\nu lm}(\mathbf{x}'')\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}'') f(\varepsilon_{\nu m}) , \qquad (39)$$

и, учитывая (24), (27), а также условие унитарности (29), убеждаемся в справедливости условия (36). Итак, инвариантность потенциала $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ относительно преобразований группы симметрии кристалла позволяет классифицировать электронные состояния по неприводимым представлениям этой группы и, наоборот, указанная классификация приводит к инвариантности потенциала (36). Таким образом, утверждения (36) и (38) взаимно согласованы. Проведенное рассмотрение позволяет сделать вывод, что учет взаимодействия не влияет на свойства спектра электронов, определяемые симметрией кристалла.

Уравнение ХФ (20) в новых обозначениях принимает вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_0(\mathbf{x})\right]\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) + \sum_{\nu' m'} n_{\nu'} \int d\mathbf{x}'\, U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\varepsilon_{\nu' m'}) \times$$

$$\times \left[2\Phi^{\nu'}_{m'm'}(\mathbf{x}', \mathbf{x}')\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) - \Phi^{\nu'}_{m'm'}(\mathbf{x}', \mathbf{x})\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}')\right] = \varepsilon_{\nu m}\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) , \qquad (40)$$

где введена функция

$$\Phi^{\nu}_{mm'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{n_\nu} \sum_l \varphi^*_{\nu lm}(\mathbf{x})\, \varphi_{\nu lm}(x') , \qquad (41)$$

преобразующаяся согласно (27), (29) по единичному представлению группы G:

$$T(g)\Phi^{\nu}_{mm'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \Phi^{\nu}_{mm'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') .$$

Энергия хартри-фоковской квазичастицы теперь запишется так:

$$\varepsilon_{\nu m} = \frac{1}{n_\nu}\sum_l \int d\mathbf{x}\, \varphi^*_{\nu lm}(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_0(\mathbf{x})\right]\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) + \sum_{\nu' m'} n_{\nu'} f(\varepsilon_{\nu' m'}) \left(2U^{\nu\nu'}_{mm';mm'} - V^{\nu\nu'}_{mm';mm'}\right), \quad (42)$$

где матричные элементы взаимодействия определены выражениями

$$U^{\nu\nu'}_{mm';m_1m_1'} = \int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Phi^{\nu}_{mm_1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \Phi^{\nu'}_{m'm_1'}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'), \quad (43а)$$

$$V^{\nu\nu'}_{mm';m_1m_1'} = \int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Phi^{\nu}_{mm_1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Phi^{\nu'}_{m'm_1'}(\mathbf{x}', \mathbf{x}). \quad (43б)$$

Для них справедливы условия симметрии

$$U^{\nu\nu'}_{mm';m_1m_1'} = U^{\nu'\nu}_{m'm;m_1'm_1} = U^{\nu\nu'*}_{m_1m_1';mm'} \quad (44)$$

и аналогично для $V^{\nu\nu'}_{mm';m_1m_1'}$. Решениями уравнения ХФ (40) являются блоховские функции, поэтому их можно представить в виде разложения в ряд Фурье

$$\varphi_{(p\tau)(Lf)m}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{b}} A_{\tau fm}(\mathbf{b} + \mathbf{k}_{pL})\, e^{i(\mathbf{b}+\mathbf{k}_{pL})\mathbf{x}}, \quad (45)$$

V — объем кристалла. Из условий ортонормированности (30) и полноты (31) следует

$$\sum_{\mathbf{b}} A^*_{\tau' f' m'}(\mathbf{b} + \mathbf{k}_{pL}) A^*_{\tau fm}(\mathbf{b} + \mathbf{k}_{pL}) = \delta_{\tau\tau'}\delta_{LL'}\delta_{mm'}, \quad (46а)$$

$$\sum_{\tau fm} A^*_{\tau fm}(\mathbf{b} + \mathbf{k}_{pL}) A_{\tau fm}(\mathbf{b}' + \mathbf{k}_{pL}) = \delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}. \quad (46б)$$

Функции $\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x})$ преобразуются по неприводимому представлению $\nu = (p\tau)$ согласно (27). Это накладывает следующие ограничения на коэффициенты в разложении (45):

$$A_{\tau fm}(\mathbf{b} + \mathbf{k}_{pL}) = e^{i[h(\mathbf{b}+\mathbf{k}_{pL})]\vec{\tau}} \sum_{L'f';\mathbf{b}'} A_{\tau f'm}\left(h\left(\mathbf{b} + \mathbf{k}_{pL}\right)\right) d^{(\mathbf{k}\tau)}_{f'f}\left(\left\{h^{-1}_{L'} hh_L \,\middle|\, h^{-1}_{L'}(\vec{\tau} - \vec{\tau}_{L'}) + h^{-1}_{L'}h\vec{\tau}\right\}\right) \delta_{h^{-1}_{L'}hh_L\mathbf{k};\mathbf{k}+\mathbf{b}'}. \quad (47)$$

Разложим в ряды Фурье потенциалы $U_0(\mathbf{x})$, $U(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$:

$$U_0(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{b}} U_0(\mathbf{b})\, e^{i\mathbf{b}\mathbf{x}}, \quad (48а)$$

$$U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{\mathbf{b},\mathbf{b}'} U(\mathbf{b}, \mathbf{b}')\, e^{i(\mathbf{b}\mathbf{x} + \mathbf{b}'\mathbf{x}')}. \quad (48б)$$

Требования вещественности и симметрии $U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = U(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ налагают условия на коэффициенты разложения:

$$U_0(\mathbf{b}) = U_0^*(-\mathbf{b}), \quad (49а)$$

$$U(\mathbf{b}, \mathbf{b}') = U(\mathbf{b}', \mathbf{b}) = U^*(-\mathbf{b}, -\mathbf{b}'). \quad (49б)$$

Требования инвариантности потенциалов относительно преобразований группы G приводят к соотношениям

$$U_0(\mathbf{b}) = U_0(h\mathbf{b})\, e^{i(h\mathbf{b})\vec{\tau}}, \quad (50а)$$

$$U(\mathbf{b}, \mathbf{b}') = U(h\mathbf{b}, h\mathbf{b}')\, e^{i[h(\mathbf{b}+\mathbf{b}')]\vec{\tau}}. \quad (50б)$$

Соотношения (47), (50) должны быть выполнены для всех элементов $g = \{h|\vec{\tau}\}$ нулевого блока (при $t = 0$). Из уравнений (40) с учетом разложений (45), (48) нетрудно получить систему нелинейных алгебраических уравнений, определяющих коэффициенты разложения $A_{\tau fm}(\mathbf{b} + \mathbf{k}_{pL})$, которую здесь выписывать не будем.

В некоторых случаях уравнения ХФ удобно представить следующим образом. Предположим, что известно решение одночастичной задачи

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_0(\mathbf{x})\right]\psi_{\nu lm}(\mathbf{x}) = E_{\nu m}\psi_{\nu lm}(\mathbf{x}). \quad (51)$$

Отметим, что решения задачи (51) $\psi_{\nu lm}(\mathbf{x})$, $E_{\nu m}$ естественно выбрать в качестве нулевого приближения при итерационном решении уравнений Хартри—Фока. Разложим хартри-фоковские

функции по полной системе функций, являющихся решениями уравнения (51):

$$\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) = \sum_{m'} C^{\nu}_{mm'}\psi_{\nu lm'}(\mathbf{x}) \ . \qquad (52)$$

Вид разложения (52) определяется тем, что трансформационные свойства функций, по которым производится разложение, должны совпадать с трансформационными свойствами разлагаемой функции. Условия ортонормированности (30) и полноты (31) налагают на коэффициенты в (52) следующие ограничения:

$$\sum_{m} C^{\nu *}_{m'm}C^{\nu}_{m''m} = \sum_{m} C^{\nu *}_{mm'}C^{\nu}_{mm''} = \delta_{m'm''} \ . \qquad (53)$$

Из уравнений ХФ (40) следуют уравнения, определяющие $C^{\nu}_{mm'}$:

$$\left(E_{\nu m'} - \varepsilon_{\nu m}\right) C^{\nu}_{mm'} + \sum_{\nu';\{m_i\}} n_{\nu'} f(\varepsilon_{\nu' m_1}) \times$$

$$\times \widetilde{\Theta}^{\nu\nu'}_{m'm_2;m_3m_4} C^{\nu' *}_{m_1m_2} C^{\nu'}_{m_1m_4} C^{\nu}_{mm_3} = 0 \ , \qquad (54)$$

где $\widetilde{\Theta} = 2\widetilde{U} - \widetilde{V}$, а матричные элементы с волнистыми линиями определены выражениями (41), (43), но с заменой хартри-фоковских функций на одночастичные, так что при $\varphi_{\nu lm}(\mathbf{x}) \to \psi_{\nu lm}(\mathbf{x})$

$$\widetilde{U}^{\nu\nu'} \to U^{\nu\nu'}, \qquad \widetilde{V}^{\nu\nu'} \to V^{\nu\nu'} \ .$$

Энергия квазичастицы в данном случае принимает вид

$$\varepsilon_{\nu m} = \sum_{m'} E_{\nu m'} C^{\nu *}_{mm'} C^{\nu}_{mm'} + \sum_{\nu';\{m_i\}} n_{\nu'} f(\varepsilon_{\nu' m_1}) \times$$

$$\times \widetilde{\Theta}^{\nu\nu'}_{m_2m_3;m_4m_5} C^{\nu' *}_{m_1m_3} C^{\nu'}_{m_1m_5} C^{\nu *}_{mm_2} C^{\nu}_{mm_4} \ . \qquad (55)$$

При слабом взаимодействии уравнения (54), (55) могут быть решены по теории возмущений, если положить

$$C^{\nu}_{mm'} = C^{\nu(0)}_{mm'} + C^{\nu(1)}_{mm'} + \ldots, \qquad (56а)$$

$$\varepsilon_{\nu m} = \varepsilon^{(0)}_{\nu m} + \varepsilon^{(1)}_{\nu m} + \ldots . \qquad (56б)$$

Очевидно, что в нулевом приближении $C^{\nu(0)}_{mm'} = \delta_{mm'}$. $\varepsilon^{(0)}_{\nu m} = E_{\nu m}$. В следующем приближении при $m \neq m'$

$$C^{\nu(1)}_{mm'} = \left(E_{\nu m} - E_{\nu m'}\right)^{-1} \sum_{\nu';m''} n_{\nu'} f(E_{\nu' m''}) \widetilde{\Theta}_{m'm'';mm''} \ , \qquad (57а)$$

$$\varepsilon^{(1)}_{\nu m} = \sum_{\nu';m''} n_{\nu'} f(E_{\nu' m''}) \widetilde{\Theta}_{mm'';mm''} \ . \qquad (57б)$$

В этом приближении к закону дисперсии свободного электрона в периодическом поле добавляется слагаемое, обусловленное взаимодействием. В общем случае разделить влияние взаимодействия и периодичности кристалла на закон дисперсии электрона невозможно.

4. В сокращенных $(n\mathbf{k})$-обозначениях зон энергия хартри-фоковской квазичастицы и полная энергия системы могут быть записаны в виде

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \widetilde{E}_n(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}';n'} f_{n'\mathbf{k}'} \Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \ , \qquad (58)$$

$$\mathcal{E} = 2\sum_{\mathbf{k},n} \widetilde{E}_n(\mathbf{k}) f_{n\mathbf{k}} + 2\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}';nn'} f_{n\mathbf{k}} f_{n'\mathbf{k}'} \Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \ , \qquad (59)$$

где

$$\widetilde{E}_n(\mathbf{k}) = \sum_{n'} E_{n'}(\mathbf{k}) C^{*}_{nn'}(\mathbf{k}) C_{nn'}(\mathbf{k}) \ . \qquad (60)$$

Очевидно, что выражения (58)–(60) фактически являются законом дисперсии электрона и полной энергией электронной жидкости в теории ферми-жидкости, обобщенной с учетом симметрии кристаллической решетки. Отметим, что феноменологические уравнения теории ферми-жидкости, учитывающие симметрию кристалла, использовались в [13] для исследования возможности нульзвуковых колебаний в металлах. Функция взаимодействия квазичастиц выражается через коэффициенты $C_{nn'}(\mathbf{k})$ в разложении (52), которые могут быть найдены в результате решения уравнений (54):

$$\Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\{n_i\}} C^{*}_{nn_1}(\mathbf{k}) C_{nn_2}(\mathbf{k}) \times$$

$$\times \widetilde{\Theta}_{n_1n_3;n_2n_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') C^{*}_{n'n_3}(\mathbf{k}') C_{n'n_4}(\mathbf{k}') \ . \qquad (61)$$

Функция $\Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ вещественна и симметрична относительно перестановки зонных индексов и волновых векторов

$$\Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \Theta^{*}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \Theta_{n'n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \ . \qquad (62)$$

Указанные свойства сразу следуют из (61), если учесть свойства симметрии матричных элементов (44). Таким образом, выражение (61) позволяет рассчитать амплитуду фермижидкостного взаимодействия в кристалле в рамках теории ХФ. Заметим, что полученное выше заключение о неизменности классификации электронных состояний при учете взаимодействия в хартри-фоковском приближении находится в соответствии с утверждением Ландау [8] о неизменности классификации

уровней в нормальной ферми-системе при включении взаимодействия.

Согласно известному рассуждению Ландау [8], представление о квазичастицах в фермижидкостной системе справедливо вблизи поверхности Ферми, а вдали от нее квазичастицы должны испытывать сильное затухание. В пределах приближения ХФ, которое, как показано, приводит к соотношениям теории ферми-жидкости, время жизни квазичастиц бесконечно при любых k, а следовательно, приближение ХФ, как и теория ферми-жидкости, применимо для твердых тел тем лучше, чем ниже температура, а квазичастичное описание электронов тем точнее, чем они ближе к поверхности Ферми.

Динамические свойства квазичастицы могут быть приближенно охарактеризованы ее эффективной массой. В приближении ХФ эффективная масса может быть выражена через решения хартри-фоковских уравнений. Закон дисперсии квазичастиц в анизотропном случае представим в виде

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} m^{-1}_{nij}(\mathbf{k}) k_i k_j \,. \qquad (63)$$

Предположим, что поверхность Ферми, которая определяется уравнением

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \mu \,, \qquad (64)$$

достаточно хорошо аппроксимируется поверхностью второго порядка. В этом случае компоненты тензора обратной эффективной массы можно считать не зависящими от волнового вектора: $m^{-1}_{nij}(\mathbf{k}) \simeq m^{-1}_{nij}$. Именно в таком приближении будет проведено дальнейшее рассмотрение. В зависимости от знака главных значений тензора m^{-1}_{nij} поверхность Ферми будет эллипсоидом (m_{xx}, m_{yy}, $m_{zz} > 0$), однополостным ($m_{xx} < 0$, m_{yy}, $m_{zz} > 0$) или двуполостным (m_{xx}, $m_{yy} < 0$, $m_{zz} > 0$) гиперболоидом.

В работе Ландау [8] в изотропном случае эффективная масса была найдена в результате приравнивания импульса единицы объема к плотности потока массы. Равенство между плотностью импульса (но не квазиимпульса!) и плотностью потока массы сохранится и для электронной жидкости во внешнем поле (в данном случае периодическом поле решетки). Присутствие поля влияет на вид закона сохранения импульса, в котором возникает плотность силы, описывающая влияние поля на движение электронов. Таким образом, справедливо равенство

$$\sum_{\mathbf{k},n} \mathbf{p}_n(\mathbf{k}) f_{n\mathbf{k}} = \frac{m}{\hbar} \sum_{\mathbf{k};n} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} \,, \qquad (65)$$

где $\partial\varepsilon_n(\mathbf{k})/\hbar\partial\mathbf{k}$ есть средняя скорость квазичастицы, а

$$\mathbf{p}_n(\mathbf{k}) = -i\hbar \int d\mathbf{x}\, \varphi^*_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \vec{\nabla} \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \qquad (66)$$

— средний импульс квазичастицы с квазиимпульсом k в n-зоне. Приравнивая вариационные производные по $f_{n\mathbf{k}}$ от обеих частей соотношения (65), получаем

$$p_{ni}(k) = \hbar m m^{-1}_{nij} k_j - \hbar \sum_{\mathbf{k}';n'} \Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\partial f_{n'\mathbf{k}'}}{\partial \varepsilon_{n'}(\mathbf{k}')} m^{-1}_{n'ij} k'_j \,. \qquad (67)$$

Выберем систему координат, диагонализующую тензор m^{-1}_{nij}. Умножим обе стороны равенства (67) на k_i (без суммирования по i) и просуммируем по k, лежащим на ферми-поверхности. В результате получаем систему линейных алгебраических уравнений для определения диагональных компонент тензора эффективной массы:

$$P^i_n = R^i_n \frac{m}{m_{nii}} + \sum_{n'} L^i_{nn'} \frac{m}{m_{n'ii}} \,, \quad i = x, y, z \,. \qquad (68)$$

Здесь

$$P^i_n = \sum_{\mathbf{k}} k_i\, p_i(\mathbf{k})\, \delta\left(\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu\right) \,, \qquad (69а)$$

$$R^i_n = \hbar \sum_{\mathbf{k}} k_i^2\, \delta\left(\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu\right) \,, \qquad (69б)$$

$$L^i_{nn'} = -\hbar \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\partial f_{n'\mathbf{k}'}}{\partial \varepsilon_{n'}(\mathbf{k}')} k'_i\, k_i\, \delta\left(\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu\right) ; \qquad (69в)$$

в формулах (68), (69) нет суммирования по i. Вследствие наличия недиагональных по зонным индексам функций взаимодействия $\Theta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ тензор эффективных масс в каждой зоне определяется совместно с тензорами эффективных масс других частично заполненных зон. В случае одной зоны и сферической поверхности Ферми формулы (68), (69) приводят к известному выражению Ландау [8] для эффективной массы квазичастицы в изотропной ферми-жидкости. Значения коэффициентов в системе уравнений (68) определяются как периодическим потенциалом решетки, так и взаимодействием квазичастиц, так что разделить вклад этих двух факторов в величину эффективной массы, строго говоря, невозможно.

Учет периодического потенциала решетки и его симметрии особенно существен при теоретическом исследовании свойств переходных и редкоземельных металлов и их соединений. Рассмотренный подход к хартри-фоковскому описанию электро-

нов может быть распространен на сверхпроводящие и магнитные состояния кристаллов.

1. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
2. О. Маделунг, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1980).
3. Дж. Слэтер, *Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел*, Мир, Москва (1978).
4. V. Fock, *Zs. Phys.* **61**, 126 (1930).
5. Д. Хартри, *Расчеты атомных структур*, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).
6. В. А. Фок, *Начала квантовой механики*, Наука, Москва (1976).
7. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).
8. Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ* **30**, 1058 (1956).
9. Г. Я. Любарский, *Теория групп и ее применение в физике*, ГИТТЛ, Москва (1957).
10. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
11. М. И. Петрашень, Е. Д. Трифонов, *Применение теории групп в квантовой механике*, Наука, Москва (1967).
12. Г. Штрайтвольф, *Теория групп в физике твердого тела*, Мир, Москва (1971).
13. Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **44**, 1650 (1963).

On the Hartree—Fock approximation taking into account the space symmetry of crystals

Yu. M. Poluektov

The Hartree—Fock approach to a description of electrons in solids at non-zero temperatures is generalized with account of the space symmetry of crystals. It is shown that a consideration of the inter-electronic interaction does not affect the classification of electronic states used in the single-electron approach. The Hartree—Fock approximation used at the finite temperatures yields the Fermi-liquid theory relations. In this theory, the effective mass of electron is defined by the lattice's periodical field and the electron-electron interaction as well.