СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P17 - 9125

В.Т.Хозяинов

ВНУТРЕННЯЯ ГЕОМЕТРИЯ ПРОСТРАНСТВА ОДНОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА

1975

P17 - 9125

В.Т.Хозяинов

ВНУТРЕННЯЯ ГЕОМЕТРИЯ ПРОСТРАНСТВА ОДНОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА

В работе [I] была предложена модель сегнетоэлектрика, согласно которой спонтанный электрический момент пространственно ограниченной корреляционной области кристалла (домена) выражается формулой

$$\vec{D} = -e\int_{Б} d\vec{k} \sum_{n} \vec{\xi}_n(\vec{k}) F_n(\vec{k}) \simeq -e\sum_{n} \langle \vec{\xi}_n \rangle_{Б} \sum_{j} F_{nj} . \quad (I)$$

Первая часть формулы записана в представлении квазиимпульса, вторая часть - в представлении Ваннье. Здесь $F_n(\vec{k})$ и F_{nj} - суммированные по спиновым состояниям одночастичные функции распределения электронов в соответствующих представлениях (n -номер зоны), а поле "смещения" $\vec{\xi}_n(\vec{k})$ есть

$$\vec{\xi}_n(\vec{k}) = \frac{(2\pi)^3}{v} \int_{v} U^{*}_{n\vec{k}}\, i\vec{\nabla}_k\, U_{n\vec{k}}\, dv \quad (2)$$

($U_{n\vec{k}}(\vec{x})$ - периодический множитель функции Блоха, интегрирование идет по элементарной ячейке кристалла v).

Величина $\vec{\xi}_n(\vec{k})$ входит в определение так называемой "общекристаллической" (однозонной) части оператора координаты в представлении квазиимпульса (см.[2] и цитированную в этом обзоре литературу) :

$$(\hat{\vec{x}}_c)_{nn'}(\vec{k},\vec{k}') = \delta_{nn'} \left(i\vec{\nabla}_k + \vec{\xi}_n(\vec{k}) \right) \delta(\vec{k}-\vec{k}'). \quad (3)$$

При фазовом преобразовании состояний $|n\vec{k}\rangle$ поле $\vec{\zeta}_n$ подвергается "градиентному" преобразованию $\vec{\zeta}_n' = \vec{\zeta}_n + \vec{\nabla}_k \varphi$. Компоненты x_c^α, вообще говоря, не коммутируют:

$$[x_c^\alpha, x_c^\beta]_n(\vec{k}) = i\,\omega_n^{\alpha\beta}(\vec{k}), \qquad (4)$$

а дуальный коммутатору вектор $\vec{\omega}_n(\vec{k}) = \mathrm{rot}\,\vec{\zeta}_n(\vec{k})$. Поле "вихря" $\vec{\omega}_n(\vec{k})$, инвариантное относительно фазовых преобразований состояний Блоха, характеризует внутреннюю структуру пространства одночастичных состояний для данного кристалла.

Известно, что представление квазиимпульса особенно удобно, когда мы имеем дело с любыми медленно меняющимися в пространстве возмущениями одночастичного кристаллического потенциала, что позволяет опустить все междузонные матричные элементы. Тогда в квазиклассическом приближении состояние частицы описывается гамильтонианом

$$H_n(\vec{k},\vec{x}) = \mathcal{E}_n(\vec{k}) + V(\vec{x}_c), \qquad (5)$$

где $\mathcal{E}_n(\vec{k})$ – энергия электрона Блоха, а $V(\vec{x}_c)$ – оператор потенциала возмущения, например, самосогласованный потенциал Хартри-Фока корреляционной области. Здесь оператор $V(\vec{x}_c)$ является функцией оператора $\vec{x}_c$, определенного формулой (3).

Пространственно ограниченная подсистема частиц, описываемая волновым пакетом $|\psi\rangle$, существование которой необходимо для самого определения среднего значения координаты, может возникнуть в однородном кристалле ввиду наличия потенциала типа (5), искажающего зонную структуру и саму ионную решетку. Моделью такой подсистемы может служить область, которая в каждой малой части представляет собой "почти" кристалл, параметры которого медленно меняются от точки к точке.

Наличие в (3) и (5) поля $\vec{\zeta}_n(\vec{k})$, играющего роль как бы некоторого "векторного потенциала", наводит на мысль рассматривать внутреннюю геометрию $\vec{k}$-пространства состояний в духе идей Германа Вейля. Хорошо известно, что Вейль в свое время пытался объединить в одной геометрической картине гравитационное и электромагнитное поля [3]. Эта программа в конечном счете не имела успеха, так как электромагнитное поле не имеет универсального характера и действует различно на разные частицы. Однако в нашем случае поле "смещения" $\vec{\zeta}_n(\vec{k})$ характеризует именно структуру пространства состояний одной зоны и поэтому идея Вейля может иметь смысл.

Рассмотрим периодическое $\vec{k}$-пространство состояний как пространство Вейля W_3. Пусть симметричный тензор $\gamma^{\alpha\beta} = \gamma^{\beta\alpha}$ задает метрику в каждой точке (k_1, k_2, k_3) и служит для поднятия и опускания индексов. Ковариантные производные определим формулами

$$\nabla^\beta v_\alpha = \partial^\beta v_\alpha + \Lambda_\alpha^{\beta\gamma} v_\gamma,$$
$$\nabla^\beta w^\alpha = \partial^\beta w^\alpha - \Lambda_\gamma^{\beta\alpha} w^\gamma, \qquad (6)$$

где $\Lambda_\alpha^{\beta\gamma}$ – соответствующие коэффициенты афинной связности, симметричные по верхним индексам. Пространство W_3 характеризуется так называемой полуметрической симметричной связью, так что ковариантная производная $\gamma^{\alpha\beta}$ есть

$$\nabla^\sigma \gamma^{\alpha\beta} = -2\,\zeta^\sigma \gamma^{\alpha\beta}; \qquad (7)$$

при этом

$$\Lambda_\alpha^{\beta\gamma} = \left\{ {\beta\gamma \atop \alpha} \right\} + \lambda_\alpha^{\beta\gamma}, \qquad (8)$$

где $\left\{ {\beta\gamma \atop \alpha} \right\}$ – обычные символы Кристоффеля риманова пространства, а

$$\lambda_\alpha^{\beta\gamma} = \delta_\alpha^\beta \zeta^\gamma + \delta_\alpha^\gamma \zeta^\beta - \gamma^{\beta\gamma}\zeta_\alpha . \qquad (9)$$

В римановом пространстве, как известно, ковариантная производная $\gamma^{\alpha\beta}$ равна нулю.

Тензор кривизны возникает либо в операции перемены порядка ковариантного дифференцирования

$$(\nabla^\beta\nabla^\gamma - \nabla^\gamma\nabla^\beta) v_\alpha = B_\alpha{}^{\sigma\beta\gamma} v_\sigma , \qquad (10)$$

либо при осуществлении операции бесконечно малого кругового замкнутого переноса вектора

$$\Delta v_\alpha = -\frac{1}{2} B_\alpha{}^{\sigma\beta\gamma} v_\sigma \Delta S_{\beta\gamma} , \qquad (11)$$

откуда

$$\Delta(v^2) = B^{\sigma\tau\beta\gamma} v_\sigma v_\tau \Delta S_{\beta\gamma} , \qquad (12)$$

где $\Delta S_{\beta\gamma}$ – элемент площади, натянутой на контур обхода. Здесь

$$B_\sigma{}^{\alpha\beta\gamma} = \partial^\beta \Lambda_\sigma^{\gamma\alpha} - \partial^\gamma \Lambda_\sigma^{\beta\alpha} + \Lambda_\sigma^{\beta\tau}\Lambda_\tau^{\gamma\alpha} - \Lambda_\sigma^{\gamma\tau}\Lambda_\tau^{\beta\alpha} . \qquad (13)$$

Тензор кривизны $B^{\sigma\tau\beta\gamma}$, конечно, антисимметричен по двум последним индексам, но, в отличие от риманова, он не антисимметричен по первым двум индексам. При этом симметричная часть, как нетрудно показать, есть

$$B^{(\sigma\tau)\beta\gamma} = \gamma^{\sigma\tau}\omega^{\beta\gamma} , \qquad (14)$$

при этом тензор $\omega^{\alpha\beta}$ определяется инвариантной дифференциальной

операцией $\omega^{\alpha\beta} = \nabla^\alpha\zeta^\beta - \nabla^\beta\zeta^\alpha = \partial^\alpha\zeta^\beta - \partial^\beta\zeta^\alpha$, т.е. есть тензор "вихря" поля ζ^γ. Следовательно, при обносе по круговому контуру всякой длины l выполняется соотношение

$$\frac{\Delta l}{l} = -\frac{1}{2}\,\omega^{\beta\gamma}\Delta S_{\beta\gamma} . \qquad (15)$$

Таким образом, длина при наличии $\omega^{\alpha\beta}$ не инвариантна относительно смещения, сравниваться между собой могут только длины в одной и той же точке.

Если тождество Бианки

$$\nabla^\tau B_\sigma{}^{\alpha\beta\gamma} + \nabla^\beta B_\sigma{}^{\alpha\gamma\tau} + \nabla^\gamma B_\sigma{}^{\alpha\tau\beta} = 0 \qquad (16)$$

свернуть по индексам σ и α, то, учитывая равенство $B_\sigma{}^{\sigma\beta\gamma} = 3\omega^{\beta\gamma}$, получим тождество

$$\nabla^\tau\omega^{\beta\gamma} + \nabla^\beta\omega^{\gamma\tau} + \nabla^\gamma\omega^{\tau\beta} = 0 . \qquad (17)$$

Геометрия W_3 базируется на двух различных группах преобразований – координатных и конформных. Если

$$\bar\gamma^{\alpha\beta} = e^{2\varphi}\gamma^{\alpha\beta} = \sigma\gamma^{\alpha\beta} , \qquad (18)$$

то

$$\nabla^\gamma \bar\gamma^{\alpha\beta} = (-2\zeta^\gamma + \partial^\gamma \ln\sigma)\,\bar\gamma^{\alpha\beta} = -2(\zeta^\gamma + \partial^\gamma\varphi)\,\bar\gamma^{\alpha\beta} , \qquad (19)$$

что соответствует градиентному преобразованию поля ζ^γ (и фазовому преобразованию волновой функции состояния). Следовательно, фундаментальный тензор $\gamma^{\alpha\beta}$ фиксирован только с точностью до произвольного скалярного множителя. Однако W_3 не является конформным пространством. Для каждого из возможных $\gamma^{\alpha\beta}$ требуется свой вектор ζ^γ. Исключением является тот случай, когда ζ^γ есть градиентный вектор. В этом случае его можно конформно исключить, выбирая соответствующую калибровку. Следовательно, постоянные $\gamma^{\alpha\beta}$ есть только один из возможных выборов калибровок.

Условие интегрируемости уравнений (7) можно записать в виде

$$\gamma^{\alpha\mu}B_{\mu}^{\beta\sigma\tau}+\gamma^{\beta\mu}B_{\mu}^{\alpha\sigma\tau}=2\gamma^{\alpha\beta}\omega^{\sigma\tau}; \qquad (20)$$

это есть условие на симметричную часть тензора $B^{\alpha\beta\sigma\tau}$:

$$\frac{1}{2}\left(B^{\alpha\beta\sigma\tau}+B^{\beta\alpha\sigma\tau}\right)=\gamma^{\alpha\beta}\omega^{\sigma\tau}. \qquad (21)$$

Вводя тензор $P_{\alpha}^{\beta\sigma\tau}=B_{\alpha}^{\beta\sigma\tau}-\frac{1}{3}\delta_{\alpha}^{\beta}B_{\rho}^{\rho\sigma\tau}$, получаем условие

$$P^{\alpha\beta\sigma\tau}+P^{\beta\alpha\sigma\tau}=0, \qquad (22)$$

где тензор $P^{\alpha\beta\sigma\tau}$ есть просто антисимметричная часть $B^{\alpha\beta\sigma\tau}$.

Необходимым и достаточным условием того, что уравнение (7) допускает решение, является, во-первых, то, что существует вектор ζ^{γ}, такой, что $B_{\mu}^{\mu\sigma\tau}=3\omega^{\sigma\tau}$ и, во-вторых, существует число N, такое, что уравнения

$$F_1=\gamma^{\alpha\mu}P_{\mu}^{\beta\sigma\tau}+\gamma^{\beta\mu}P_{\mu}^{\alpha\sigma\tau}=0,$$

$$F_2=\gamma^{\alpha\mu}\nabla^{\rho}P_{\mu}^{\beta\sigma\tau}+\gamma^{\beta\mu}\nabla^{\rho}P_{\mu}^{\alpha\sigma\tau}=0,$$

. . . .

допускают полную систему наборов решений, удовлетворяющих $F_{N+1}=0$ (см. [4]).

Если $F_1\equiv 0$, т.е. $P_{\alpha}^{\beta\sigma\tau}\equiv 0$, а значит тензор $B^{\alpha\beta\sigma\tau}=\gamma^{\alpha\beta}\omega^{\sigma\tau}$ (этот выбор был сделан Вейлем), мы имеем полностью интегрируемую систему, так что $\gamma^{\alpha\beta}=\gamma^{\alpha\beta}(\kappa_1,\kappa_2,\kappa_3;\gamma_0^{\alpha\beta})$ и решение зависит от 6 произвольных параметров.

Уравнение геодезических в W_3

$$\frac{d^2\kappa_\alpha}{d\tau^2}+\Lambda_{\alpha}^{\beta\gamma}\frac{d\kappa_\beta}{d\tau}\frac{d\kappa_\gamma}{d\tau}=0 \qquad (23)$$

допускает однородный первый интеграл второй степени, так что можно написать

$$\gamma^{\alpha\beta}\frac{d\kappa_\alpha}{d\tau}\frac{d\kappa_\beta}{d\tau}(\tau)=\gamma^{\alpha\beta}\frac{d\kappa_\alpha}{d\tau}\frac{d\kappa_\beta}{d\tau}(\tau_0)\,e^{-2\int_{\tau_0}^{\tau}\zeta^{\gamma}\frac{d\kappa_\gamma}{d\tau}d\tau}. \qquad (24)$$

Если ввести параметр θ по уравнению

$$\frac{d\theta}{d\tau}=e^{-\int_{\tau_0}^{\tau}\zeta^{\gamma}\frac{d\kappa_\gamma}{d\tau}d\tau}, \qquad (25)$$

тогда

$$\gamma^{\alpha\beta}\frac{d\kappa_\alpha}{d\theta}\frac{d\kappa_\beta}{d\theta}=\mathrm{Const}. \qquad (26)$$

Следовательно, неинвариантность длины полностью определяется неоднозначностью параметра $\theta=\theta(\tau)$. Когда линейная форма представляет собой полный дифференциал, то длина не зависит от пути, по которому она переносится, и мы приходим к геометрии Римана. Необходимым условием для этого является равенство нулю тензора $\omega^{\alpha\beta}$.

Отметим здесь, что даже если $\omega^{\alpha\beta}=0$ всюду, интеграл $\oint\zeta^{\gamma}d\kappa_{\gamma}$ отличен от нуля в тех случаях, когда имеются линии вырождения между зонами. Тогда циркуляция ζ^{γ} вокруг линии равна $(2n+1)\pi$ или $2n\pi$ в зависимости от степени расхождения зон. Такие линии по своим геометрическим свойствам эквивалентны линиям "вихря" $\omega^{\alpha\beta}$.

Таким образом, во всех случаях, когда линейный интеграл в (26) неоднозначен, определение длины в геометрии $\bar{W}_3$ неинвариантно. Но это значит, что не существует и инвариантного элемента объема $\sqrt{\gamma}\,dk_1dk_2dk_3$, пропорционального числу возможных состояний. Физически это эквивалентно тому, что невозможно определить состояние электрона в одной зоне, а следовательно, и однозонное приближение. Заметим в этой связи, что тензор $\omega^{\alpha\beta}$ выражается формулой [I]:

$$\omega_n^{\alpha\beta} = i\sum_{n'}\left(X^{\alpha}_{nn'}X^{\beta}_{n'n} - X^{\beta}_{nn'}X^{\alpha}_{n'n}\right), \qquad (27)$$

т.е. не может быть определен без учета влияния всех зон. В частном случае $\gamma^{\alpha\beta} = const$ уравнение (7) обращается в тождество, однако соотношение (I5) по-прежнему имеет место. Когда присутствуют линии вырождения зон или линии "вихря" $\omega^{\alpha\beta}$, это затруднение можно обойти, рассматривая эти линии как особые, превращающие риманово пространство в многосвязное.

Вообще величины, имеющие физический смысл в W_3, должны быть инвариантны относительно конформных преобразований. Такими величинами являются $\Lambda_\sigma^{\alpha\beta}$, $B_\sigma^{\alpha\beta\gamma}$, $\omega^{\beta\gamma}$, $B^{\alpha\beta}$. Обычный инвариантный объем $\int\sqrt{\gamma}\,dk_1dk_2dk_3$ не является конформно-инвариантным. Важным фактом является то, что при нечетном числе измерений, в частности, при числе измерений 3, в пространстве W_3 вообще нельзя построить конформно-инвариантных плотностей типа $\int\sqrt{\gamma}\,A\,dk_1dk_2dk_3$. Единственным инвариантом при трех измерениях является "обобщенный объем" (см., например, [5])

$$\int\sqrt{B}\,dk_1dk_2dk_3 = inv, \qquad (28)$$

где $B = |B^{\alpha\beta}|$ есть детерминант тензора Риччи.

При варьировании этого инварианта по ξ^γ можно получить уравнение

$$\frac{1}{\sqrt{B}}\partial^{\sigma}\sqrt{B}\,\omega_{\tau\sigma} = S_\tau, \qquad 29$$

где $S_\tau = \frac{4}{9}\left(G_{\tau\sigma} - \gamma_{\tau\sigma}G\right)\xi^\sigma$. Здесь $G_{\tau\sigma}$ – симметричная часть тензора Риччи, а G – скаляр, получающийся при полном свертывании этого тензора. Уравнение связывает $\omega^{\alpha\beta}$ с S_τ, зависящим только от симметричных частей тензоров.

Литература

I. В.Т.Хозяинов, Материалы Третьего рабочего совещания по статистической физике, ИТФ АН УССР, Киев 1972, стр. 53

2. E.I.Blount. Solid State Physics.vol.13, p.305 (1962).

3. H.Weyl.Raum,Zeit, Materie. Springer, Berlin, 1923, II, IV.

4. L.P.Eisenhart. Non-Riemanian Geometry. Am.Math.Soc.,N.Y., 1927.

5. А.С.Эддингтон, Теория относительности, ГТТИ, I934, гл.VII.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 июня I975 года.