Письма в ЖЭТФ, том 38, вып.4, стр. 188 – 191 *25 августа 1983 г.*

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК И МАГНИТНОЕ ПОЛЕ В ПРОВОДНИКАХ СО СТРУКТУРОЙ ЗЕРКАЛЬНЫХ ИЗОМЕРОВ

Г.М.Элиашберг

В проводниках со структурой зеркальных изомеров возможна линейная связь тока с магнитным полем. Получено явное выражение для соответствующего тензора и обсуждены некоторые физические следствия такой связи для термодинамики и электропроводности.

Точечные группы кристаллов, реализующихся в двух зеркально-изомерных (энантиоморфных) модификациях, не содержат несобственных элементов, переводящих правую систему координат в левую. В проводниках с такой симметрией допустима линейная связь между плотностью электрического тока $\mathbf{j}$ и напряженностью магнитного поля $\mathbf{H}$: $j_\mu = \kappa_{\mu\nu} H_\nu$. Существованию такого соотношения противоречат, на первый взгляд, энергетические соображения, если речь идет о макроскопических токах, возникающих под действием магнитного поля. Если же ток задается внешним источником, то эти соображения отпадают. Вопрос тем более заслуживает обсуждения, что, как будет показано, подобная связь действительно имеет место благодаря спин-орбитальному взаимодействию.

Запишем плотность тока в линейном приближении по не зависящему от времени векторному потенциалу $\mathbf{A}$, считая, что вещество немагнитно ($\mathbf{H} \cong \mathbf{B}$, rot $\mathbf{A} = \mathbf{H}$, div $\mathbf{A} = 0$):

$$j_\mu(\mathbf{r}) = \int d^3r'\, Q_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\, A_\nu(\mathbf{r}') - \frac{e^2}{mc} n(\mathbf{r}) A_\mu(\mathbf{r}) . \qquad (1)$$

Компонента Фурье ядра Q имеет следующий вид:

$$Q_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = -\frac{e^2}{c} T \sum_n \sum_{\alpha,\beta} \int\int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} \frac{\int d^3r e^{-i\mathbf{qr}} \bar{\psi}_{\beta k'} \hat{v}_\mu \psi_{\alpha k} \int d^3r' e^{-i\mathbf{qr}'} \bar{\psi}_{\alpha k} \hat{v}_\nu \psi_{\beta k'}}{(i\epsilon_n + \zeta - \epsilon_{\alpha k})(i\epsilon_n + \zeta - \epsilon_{\beta k'})} , \qquad (2)$$

Здесь α и β – зонные индексы, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ – волновые векторы в зоне Бриллюэна, T – температура, ζ – химический потенциал, $\epsilon_n = (2n+1)\pi T$ [1]. Дело сводится к преобразованию матричных элементов, в которых $\psi_{\alpha k} = e^{i\mathbf{qr}} u_{\alpha k}$ – собственные функции (двухкомпонентные спиноры) оператора энергии электрона в решетке в отсутствии поля: $\mathcal{H}\psi_{\alpha k} = \epsilon_{\alpha k}\psi_{\alpha k}$, $u_{\alpha k}$ нормированы на элементарную ячейку V_0 $\hbar\hat{\mathbf{v}} = i[\mathcal{H}, \mathbf{r}]$. Выкладки, требующие определенной аккуратности [2], приводят к выражению:

$$\int d^3r e^{-i\mathbf{qr}} \bar{\psi}_{\beta k'} \hat{v}_\mu \psi_{\alpha k} = \frac{1}{\hbar} \Big\{ \frac{\partial \epsilon_{\alpha k}}{\partial k_\mu} \int_{V_0} d^3r\, \bar{u}_{\beta k'} u_{\alpha k} +$$

$$+ \sum_\gamma (\epsilon_{\alpha k} - \epsilon_{\gamma k}) a^\mu_{\alpha\gamma} \int_{V_0} d^3r\, \bar{u}_{\beta k'} u_{\gamma k} \Big\} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}) \qquad (3)$$

и аналогично для второго матричного элемента. Таким образом, в (2) остается однократное интегрирование по $\mathbf{k}$, а $Q_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') Q_{\mu\nu}(\mathbf{q})$. Матричный вектор $a^\mu_{\alpha\beta}$ определяется соотношением

$$a^\mu_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \int_{V_0} d^3r \bar{u}_{\beta k} \frac{\partial u_{\alpha k}}{\partial k_\mu} \; ; \quad (a^\mu_{\beta\alpha})^* = -a^\mu_{\alpha\beta} . \qquad (4)$$

Разлагая $Q_{\mu\nu}(\mathbf{q})$ в ряд по $\mathbf{q}$ до линейных членов, можно убедиться, что $Q_{\mu\nu}(0)$ компенсирует второе слагаемое в (1). При вычислении линейных по $\mathbf{q}$ членов используется тождество

$$\frac{\partial a^{\mu}_{\alpha\beta}}{\partial k_{\nu}} - \frac{\partial a^{\nu}_{\alpha\beta}}{\partial k_{\mu}} = \sum_{\gamma} (a^{\nu}_{\alpha\gamma} a^{\mu}_{\gamma\beta} - a^{\mu}_{\alpha\gamma} a^{\nu}_{\gamma\beta}). \tag{5}$$

Элементарные вычисления приводят к простому результату:

$$j_{\mu} = -i\kappa e_{\mu\nu\lambda} q_{\lambda} A_{\nu} \; ; \quad \kappa = \frac{ie^2}{\hbar^2 c} \sum_{\alpha} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_{\alpha k} (\vec{\nabla}_k \epsilon_{\alpha k} \, \mathrm{rot}_k \, \mathbf{a}_{\alpha\alpha}), \tag{6}$$

где $e_{\mu\nu\lambda}$ – полностью антисимметричный единичный тензор, $n_{\alpha k}$ – фермиевские числа заполнения, $\mathrm{rot}_k \, \mathbf{a}_{\alpha\alpha}$ – ротор в $\mathbf{k}$-пространстве диагонального элемента матричного вектора (4) Важным (и несколько неожиданным) следствием (6) является то, что связь тока с полем оказывается изотропной, несмотря на кристаллическую анизотропию:

$$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{H}. \tag{7}$$

Так как коэффициент κ является псевдоскаляром, то равноправны оба его знака, и, таким образом он может быть отличен от нуля только при симметрии, соответствующей энантиоморфизму: изомеры отличаются знаком κ. С другой стороны, из (6), (4) и (5) видно, что $\kappa \neq 0$ только, если представление по которому преобразуются $u_{\alpha k}$ не может быть приведено к действительной форме. Этот случай и реализуется для рассматриваемой симметрии, когда заведомо нет центра инверсии, и вследствие спин-орбитального взаимодействия отсутствует вырождение в общей точке зоны Бриллюэна. При этом состояния с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ переходят друг в друга при инверсии времени (см., например, [3]).

Отметим, что структура (6) обеспечивает отсутствие вклада полностью заполненных зон.

На этом этапе можно дать лишь весьма грубую оценку величины коэффициента κ, имеющего, как и проводимость, размерность частоты. Записывая κ в соответствии с (6) в виде $\mathrm{const}\,(e^2/\hbar c)\,\Omega$, где Ω – частота атомного масштаба ($\hbar^{-1} \cdot$ ридберг), нетрудно понять на основании сказанного выше, что безразмерный множитель мал в меру слабости спин-орбитального взаимодействия электрона с асимметричной по отношению к несобственным преобразованиям частью потенциала решетки. Характер температурной зависимости κ ясен из того, что должно быть обеспечено различие заселенностей состояний, расщепленных упомянутым взаимодействием. Далее, так как (6) по своему происхождению имеет термодинамический характер (в отличие от проводимости), то эффекты рассеяния играют роль лишь постольку, поскольку они приводят к искажению спектра и волновых функций. Поэтому их влияние не является катастрофическим и может быть учтено по теории возмущений.

Рассмотрим теперь цилиндрический проводник с радиусом сечения ρ_0, замкнутый в кольцо большого радиуса $R \gg \rho_0$ и помещенный вдоль оси тороидального соленоида, создающего продольное поле H_0. Если распределение тока и поля внутри проводника регулируется соотношением (7), то, решая уравнение $\mathrm{rot}\,\mathbf{H} = (4\pi\kappa/c)\mathbf{H}$, с обычными граничными условиями, получим следующие выражения для компонент поля H_z вдоль оси цилиндра и H_{ϕ} по азимуту:

$$H_z = H_0 \frac{J_0(x)}{J_0(x_0)} \; ; \quad H_{\phi} = \frac{\kappa}{|\kappa|} H_0 \frac{J_1(x)}{J_0(x_0)}, \quad \rho < \rho_0$$

$$H_z = H_0 \; ; \qquad H_{\phi} = \frac{\kappa}{|\kappa|} H_0 \frac{x_0}{x} \frac{J_1(x_0)}{J_0(x_0)}, \quad R \gg \rho > \rho_0 \tag{8}$$

где $J_n(x)$ – функции Бесселя, $x = (4\pi\kappa/c)\rho$, $x_0 = (4\pi\kappa/c)\rho_0$. Разность энергий этого распределения поля и поля в отсутствии проводника равна:

$$\frac{1}{8\pi}\int d^3r(H^2 - H_0^2) = V\frac{H_0^2}{8\pi}\left\{2\left[\frac{J_1(x_0)}{J_0(x_0)}\right]^2 \ln\frac{R}{\rho_0} - \frac{J_2(x_0)}{J_0(x_0)}\right\} \qquad (9)$$

(V – объем проводника). Она, как видно, состоит из двух частей: первая часть, записанная с логарифмической точностью, есть энергия, связанная с самоиндукцией кольца, вторая – энергия магнитного момента тока j_ϕ в поле H_0. Отметим, что последняя при больших значечениях x_0 близка к $H_0^2/8\pi$, как в случае идеального диамагнетика. Вследствие осциллирующего характера $J_n(x_0)$ полученные выражения очень чувствительны к геометрическим факторам. Для нас, однако, существенно, что в рассмотренном примере эта энергия во всяком случае положительна и весьма велика по сравнению с энергией, определяемой обычной малой восприимчивостью χ. Поэтому естественно, что в процессе включения поля в проводнике рассматриваемого типа должна происходить некоторая перестройка термодинамически равновесного состояния, результатом которой будет отсутствие макроскопических токов и связанной с ними большой энергии поля. Это, тем более, относится к односвязным проводникам. Так как в плотности энергии проводника помимо части, связанной с восприимчивостью $-(1/2)\chi H^2$ имеется слагаемое, соответствующее току (7), – $(\kappa/2c)$ **A**·**H**, то разумной представляется постановка вопроса об образовании пространственно модулированного состояния [1]. К более подробному описанию структуры возникающего состояния мы надеемся вернуться в дальнейшем. Здесь же отметим только, что энергетический масштаб перестройки определяется малой восприимчивостью χ и потому весьма незначителен. Поэтому должна иметь место аномальная чувствительность к переменному полю.

Положение меняется, если проводник, характеризуемый отличным от нуля значением κ, включен в цепь с внешним источником тока. В этом случае заранее нет оснований „отключать" ток (7), и, кроме того, возникает электрическое поле **E**, так что $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E} + \kappa\mathbf{H}$. Для постоянного тока $\mathrm{rot}\,\mathbf{E} = 0$ и **E** однородно по проводнику. Причем выражение для полного тока в случае цилиндрического проводника при наличии внешнего продольного магнитного поля H_0 (обозначения такие же, как в (8)):

$$I_z = \frac{c\rho_0}{2\kappa}\frac{J_1(x_0)}{J_0(x_0)}(\sigma E + \kappa H_0). \qquad (10)$$

Мы видим, что картина электропроводности резко отличается от обычной. Помимо аномальной зависимости от внешнего магнитного поля, эффективная проводимость осциллирует с изменением x_0, что должно проявляться и в температурном поведении: при заданном сечении x_0 зависит от T вместе с κ. Изменяя H_0 и x_0 можно добиться резкого уменьшения E при заданном токе. Имеются участки с отрицательной проводимостью, на которых статическая картина должна терять устойчивость. Кроме того, в условиях, когда задан ток, можно ожидать на основании требования минимальности диссипации, что на участках, где эффективная проводимость меньше σ, будет происходить перестройка состояния, соответствующая „отключению" тока (7). Разумеется, проявления этих особенностей следует ожидать в области значений $x_0 \sim 1$.

Я благодарен Э.И.Рашба за многочисленные обсуждения и доброжелательную критику, Л.П.Горькову за обсуждение проблемы неоднородного состояния, Ю.А.Бычкову, С.В.Иорданскому, Ю.В.Назарову, Д.Э.Хмельницкому за критические дискуссии.

---

[1] Этим замечанием автор обязан Л.П.Горькову.

Литература

1. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике, Москва, 1962.
2. *Blount E.J.* Solid State Physics, V.B. Ed. F.Seitz, D. Turnbull (N.Y., London), 1962 p. 306.
3. *Хейне В.* Теория групп в квантовой механике, Москва, 1963.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
5 июля 1983 г.