УДК 535.343.2

К ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД. ОБОБЩЕННАЯ f-ТЕОРЕМА

В. Н. Писковой, Б. Е. Цеквава

Известные правила сумм сил осцилляторов обобщены на случай неоднородных сред с учетом вклада высших мультипольных моментов в поляризуемость среды.

Запись материальных уравнений Максвелла, связывающих электрическую и магнитную индукции **D** и **B** с напряженностями соответствующих полей **E** и **H**, не является однозначной. В кристаллооптике с пространственной дисперсией обычно полагают $\mathbf{B} \equiv \mathbf{H}$, а связь между **D** и **E** определяют через тензор диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$, зависящий от частоты ω и волнового вектора **k** электромагнитной волны [1–3]. Для однородных тел (или квазиоднородных, какими являются кристаллы), не обладающих магнитной структурой,

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = \left(1 - \frac{4\pi}{V\omega^2}\sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\right) 1 + \frac{8\pi V}{\omega^2}\sum_m \frac{\mathscr{E}_m \mathbf{I}_{0m}(\mathbf{k})\, \mathbf{I}_{m0}(-\mathbf{k})}{\mathscr{E}_m^2 - \hbar^2(\omega + i\Gamma_m)^2}, \tag{1}$$

где

$$\hat{\mathbf{I}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V}\int \hat{\mathbf{I}}(\mathbf{r})\, e^{-i\mathbf{kr}} d\mathbf{r} = \frac{1}{V}\sum_j \frac{e_j}{2m_j}\left(\hat{\mathbf{p}}_j e^{-\mathbf{kr}_j} + e^{-\mathbf{kr}_j}\hat{\mathbf{p}}_j\right) \tag{2}$$

— Фурье-компонента оператора $\hat{\mathbf{I}}(\mathbf{r})$, связанного с оператором плотности тока $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r})$ следующим соотношением:

$$\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{e_j}{2m_j}\left[\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)\left(\hat{\mathbf{p}}_j - \frac{e_j}{c}\mathbf{A}\right) + \left(\mathbf{p}_j - \frac{e_j}{c}\mathbf{A}\right)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)\right] \equiv$$
$$\equiv \hat{\mathbf{I}}(\mathbf{r}) - \sum_j \frac{e_j^2}{m_j c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \tag{3}$$

Здесь и ниже e_j, m_j, $\hat{\mathbf{p}}_j$ — соответственно заряд, масса и оператор импульса частоты j; V — объем основной области кристалла; $\mathscr{E}_m$ — разность энергий основного $|0$ и возбужденного $|m$ состояний (для указанных выше сред соответствующие волновые функции можно полагать вещественными); Γ_m определяется временем жизни возбужденных состояний [1]; $\mathbf{I}_{0m}(\mathbf{k})$ — соответствующий матричный элемент оператора (2); **A** — вектор-потенциал возмущающего поля, связанный с **E** и **B** соотношением

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \tag{4}$$

(Дополнительные пояснения см. в Приложении 1).

Тензор диэлектрической проницаемости (1), рассчитанный квантовомеханически через вектор-потенциал поля, содержит как электрическую, так и магнитную поляризацию среды. При этом возникают трудности с однозначным выделением соответствующих вкладов и исследованием важных свойств диэлектрической проницаемости, основанным непосредственно на выражении (1). Другого рода трудности связаны с выводом дисперсионных соотношений, для которых важно знать аналитические свойства компонент тензора $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ как функций ω и $\mathbf{k}$ и, в частности, их поведение при $\omega \to 0$. Как следует из (1), при $\omega \to 0$ имеется неопределенность вида $\infty - \infty$. Эту неопределенность легко раскрыть для $\mathbf{k} = 0$ (дипольное приближение), опираясь на известную теорему о сумме сил осцилляторов (f-теорема). В дипольном приближении оператор (2) принимает вид

$$\hat{\mathbf{I}} \equiv \hat{\mathbf{I}}(\mathbf{k} = 0) \frac{1}{V} \sum_j \frac{e_j}{m_j} \mathbf{p}_j = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{\mathbf{d}}], \tag{5}$$

где

$$\hat{\mathbf{d}} = \frac{1}{V} \sum_j e_j \mathbf{r}_j \tag{6}$$

— оператор удельного дипольного момента ($\mathbf{r}_j$ — радиус-вектор частицы j),

$$\hat{H}_0 = \sum_j \frac{1}{2m_j} \hat{\mathbf{p}}_j^2 + \hat{V} \tag{7}$$

— оператор энергии невозмущенного кристалла; $\hat{V}$ — оператор потенциальной энергии взаимодействия частиц кристалла.

Операторы $\hat{\mathbf{I}}$ и $\hat{\mathbf{d}}$ удовлетворяют известному коммутационному соотношению между импульсом и координатой

$$\frac{1}{V^2} \sum_j \frac{e_j^2}{m_j} \mathbf{1} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{d}}, \hat{\mathbf{I}}] = \frac{1}{\hbar^2} [\hat{\mathbf{d}}, [H_0, \mathbf{d}]]. \tag{8}$$

Усреднением этого операторного тождества по основному состоянию получается тензорный вариант знаменитого правила сумм Томаса—Райхе—Куна (ТРК)

$$\frac{1}{V^2} \sum_j \frac{e_j^2}{m_j} \mathbf{1} = \sum_m \frac{2\mathscr{E}_m}{\hbar^2} \mathbf{d}_{0m} \mathbf{d}_{m0}. \tag{9}$$

Подстановка (5), (6), (9) в (1) дает

$$\varepsilon(\omega, 0) = 1 + 8\pi V \sum_m \frac{\mathscr{E}_m \mathbf{d}_{0m} \mathbf{d}_{m0}}{\mathscr{E}_m^2 - \hbar^2 \omega^2}, \tag{10}$$

т. е. в дипольном приближении тензор ε стремится к конечной величине при $\omega \to 0$.

Рассмотрим теперь возможность раскрытия указанной выше неопределенности в $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ при учете пространственной дисперсии, т. е. при $\mathbf{k} \neq 0$. Рядом авторов высказывалась надежда, что и в этом случае происходит сокращение сингулярных членов согласно некоторой обобщенной теореме о сумме сил осцилляторов, построенной на соответствующем обобщении операторных уравнений (5), (8). Из вышеизложенного ясно, что для этого необходимо ввести векторный оператор $\hat{\mathbf{L}}$, который являлся бы обобщением оператора $\hat{\mathbf{d}}$ (в соответствии с обобщением, которое возникает при переходе от оператора $\hat{\mathbf{I}}$ (5) к оператору $\hat{\mathbf{I}}(\mathbf{k})$ (2)), т. е. имел бы следующие свойства

$$1l = [\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{I}}(\mathbf{k})],$$

$$\hat{\mathbf{I}}(\mathbf{k}) = \frac{i}{h}[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{L}}], \tag{11}$$

l — некоторый численный размерный множитель.

До последнего времени были известны немногие частные случаи, когда удавалось построить решение системы (11), т. е. найти соответствующий оператор $\hat{\mathbf{L}}$. Помимо рассмотренного выше дипольного приближения к таковым относятся:

1) скалярный вариант правила сумм ТРК, применяемый при анализе частотной дисперсии «продольного отклика» системы, равного $(\mathbf{k}\cdot\varepsilon\cdot\mathbf{k})$ (двусторонняя свертка тензора ε с волновым вектором $\mathbf{k}$) [1, 4, 5];

2) векторный вариант правила сумм (9) [1, 6]. Соответствующая f-теорема используется для анализа односторонней свертки тензора ε с вектором $\mathbf{k}$ (т. е. для величин $\varepsilon\cdot\mathbf{k}$ или $\mathbf{k}\cdot\varepsilon$).

Заметим, что во всех этих случаях члены, пропорциональные ω^{-2} в (1), сокращаются.

Все дальнейшие попытки решения системы (11) оказывались безуспешными. Причина этого стала понятна после того, как Пекаром была доказана общая теорема о том, что трехмерного оператора с такими свойствами, т. е. удовлетворяющии уравнения (11), не существует. Строгое математическое доказательство этого утверждения, приведенное в [1], подтверждается следующими физическими соображениями. Легко видеть, что при выполнении соотношений (11) и

$$l = \frac{ih}{V^2}\sum_j \frac{e_j^2}{m_j},$$

как и в перечисленных выше случаях, тензор ε не имел бы особенностей при $\omega \to 0$. Однако в пределе $\omega \to 0$ при фиксированном $\mathbf{k}$ и конечном магнитном поле (т. е. $\mathbf{k}\times\mathbf{A} \neq 0$) ток

$$J = \frac{\omega^2}{4\pi c}(\varepsilon - 1)\cdot\mathbf{A}$$

должен быть в общем случае отличным от нуля, так как среда намагничена (по крайней мере среда должна быть диамагнитной), т. е. в ε должен быть сингулярный член, пропорциональный ω^{-2}.

В [7] рассматриваемый вопрос был решен нами в ином варианте построения микротеории поляризации кристаллов, основанном на переходе от потенциалов к полям $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ непосредственно в операторе Гамильтона и плотности тока. В отличие от [7] в [8] было сформулировано некоторое операторное тождество, которое позволило получить обобщенную f-теорему для однородной системы. В настоящей работе определенная выше проблема решается в общем случае неоднородной (в частности, ограниченной) среды и произвольного электромагнитного поля вида

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\ t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t} + \text{к. с.} \tag{12}$$

Исходным при этом явилось а) отказ от поиска решений системы операторных уравнений (11), б) использование тех наводящих соображений, которые содержатся в классической электродинамике при представлении полного тока в виде

$$\mathbf{J} = \partial\mathbf{P}/\partial t + c\,\nabla \times \mathbf{M},$$

где векторы **P** и **M** связываются с электрической и магнитной поляризацией среды.

Для неоднородной среды общая связь макротока и электрического поля вида (12) в линейной электродинамике определяется ядром диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega,\ \mathbf{r},\ \mathbf{r}')$ согласно соотношению

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},\ t) = -\frac{i\omega}{4\pi}\int [\varepsilon(\omega,\ \mathbf{r},\ \mathbf{r}') - \mathbf{1}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}')\, e^{-i\omega t} d\mathbf{r} + \text{к. с.}, \tag{13}$$

где

$$\mathbf{J} = \langle \Psi | \hat{\mathbf{J}} | \Psi \rangle.$$

Гамильтониан для системы частиц в электромагнитном поле имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{c}\int \hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},\ t)\, d\mathbf{r} - \sum_j \frac{e_j^2}{2m_j c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_j,\ t). \tag{14}$$

Применяя стандартную теорию возмущения в линейном по полю приближении, из (13), (14), (3) получим

$$\varepsilon(\omega,\ \mathbf{r},\ \mathbf{r}') = \left[1 - \frac{4\pi}{\omega^2}\sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\langle 0|\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)|0\rangle\right]\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,\mathbf{1} + \frac{8\pi}{\omega^2}\sum_m \frac{\mathscr{E}_m \mathbf{I}_{0m}(\mathbf{r})\,\mathbf{I}_{m0}(\mathbf{r}')}{\varepsilon_m^2 - \hbar^2(\omega + i\Gamma_m)^2} \tag{15}$$

(ср. с (1)).

Для раскрытия возникающей при $\omega \to 0$ в (15) неопределенности вида $\infty - \infty$, о которой подробна шла речь выше, и формулировки обобщенной f-теоремы введем следующие операторы:

$$\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) = \sum_j e_j \mathbf{r}_j F_{1j}(\mathbf{r}), \tag{16}$$

$$\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{e_j}{2m_j c}[(\mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{p}}_j) F_{2j}(\mathbf{r}) + F_{2j}(\mathbf{r})(\mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{p}}_j)], \tag{17}$$

$$\hat{m}_d(\mathbf{r},\ \mathbf{r}') = \sum_j \frac{e_j^2}{m_j c^2}(\mathbf{r}_j\mathbf{r}_j - r_j^2\mathbf{1}) F_{2j}(\mathbf{r}) F_{2j}(\mathbf{r}'), \tag{18}$$

где

$$F_{1j}(\mathbf{r}) = \int_0^1 \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_j(1 - u)]\, du = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{r}_j \cdot \nabla)^n}{(n+1)!}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \sum_{\mathbf{k}} F_{1j}(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

$$F_{1j}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V}\,\frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}}{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}\,, \tag{19}$$

$$F_{2j}(\mathbf{r}) = \int_0^1 du \int_0^u du'\delta\,[\mathbf{r} - \mathbf{r}_j(1-u')] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{r}_j\cdot\boldsymbol{\nabla})^n}{(n+2)\,!}\,\delta\,(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) =$$
$$= \sum_k F_{2j}(\mathbf{k})\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

$$F_{2j}(\mathbf{k}) = \frac{F_{1j}(\mathbf{k}) - (1/V)\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}}{i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}\,. \tag{20}$$

Оператор $\hat{\mathbf{P}}\,(\mathbf{r})$ можно рассматривать как оператор удельного электрического момента, включающего в себя все мультиполи и т. д. Однако мы не будем здесь останавливаться на физическом смысле введенных выше операторов, подробное обсуждение которого содержится в [7].

Чтобы установить связь введенных выше операторов с оператором тока (3) и пр., воспользуемся формулами, приведенным в Приложении 2. Так, из (П 2.4) непосредственно следует

$$\hat{\mathbf{I}}\,(\mathbf{r}) = \frac{i}{h}\,[\hat{H}_0,\ \hat{\mathbf{P}}\,(\mathbf{r})\,] + c\boldsymbol{\nabla}\times\hat{\mathbf{m}}\,(\mathbf{r}). \tag{21}$$

Подставив (21) в (П 2.5) и сложив (П 2.5) и (П 2.7), получим следующее операторное тождество:

$$\sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\,\delta\,(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)\,\delta\,(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\mathbf{1} = \frac{1}{h^2}\,[\hat{\mathbf{P}}\,(\mathbf{r}),\ [\hat{H}_0,\ \hat{\mathbf{P}}^R\,(\mathbf{r}')\,]\,] -$$
$$- c^2\boldsymbol{\nabla}'\times(\boldsymbol{\nabla}'\times\widetilde{m}_d(\mathbf{r},\,\mathbf{r}')) - \frac{ic}{h}\,\{[\hat{\mathbf{P}}\,(\mathbf{r}),\ (\boldsymbol{\nabla}'\times\mathbf{m}\,(\mathbf{r}'))^R\,] + [\hat{\mathbf{P}}^R\,(\mathbf{r}'),\ \boldsymbol{\nabla}\times\hat{\mathbf{m}}\,(\mathbf{r})\,]\}. \tag{22}$$

Результат усреднения (22) по основному состоянию (при температуре $T=0$) или с помощью статистической матрицы (при $T\neq 0$) мы назовем обобщенной f-теоремой для неоднородной среды. Такое название оправдано тем, что из нее можно получить все известные частные случаи f-теорем, о которых шла речь выше. Кроме того, опираясь на эту теорему, удается, как будет видно из дальнейшего, раскрыть неопределенность $\infty-\infty$ ($\omega\to 0$) в ядре поляризуемости (15), т. е. она выполняет, в частности, ту же роль, что и известная теорема ТРК в дипольном приближении (см. (9), (10)).

Усредняя (22) по основному состоянию, для определенной в начале работы среды имеем

$$\sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\langle 0|\delta\,(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)|0\rangle\,\delta\,(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\mathbf{1} = \frac{2}{h}\sum_m\ \{\varepsilon_m\mathbf{P}_{0m}(\mathbf{r})\,\mathbf{P}_{m0}(\mathbf{r}') -$$
$$- ich\,[\mathbf{P}_{0m}(\mathbf{r})\,(\boldsymbol{\nabla}'\times\mathbf{m}_{m0}(\mathbf{r}')) - (\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{m}_{0m}(\mathbf{r}))\,\mathbf{P}_{m0}(\mathbf{r}')\,]\} -$$
$$- c^2\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}'\times\mathbf{m}_{d,\,00}(\mathbf{r},\,\mathbf{r}')). \tag{23}$$

Воспользуемся сформулированной теоремой для раскрытия указанной выше неопределенности $\infty-\infty$, возникающей в ядре диэлектрической проницаемости $\varepsilon\,(\omega,\,\mathbf{r},\,\mathbf{r}')$ при $\omega\to 0$. Подставим для этого (21) и (23) в (15). Окончательно получаем

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = 1\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + 8\pi \sum_m \frac{1}{\mathscr{E}_m^2 - \hbar^2(\omega + i\Gamma_m)^2} \times$$
$$\times \Big\{ \mathscr{E}_m \mathbf{P}_{0m}(\mathbf{r}) \mathbf{P}_{m0}(\mathbf{r}') - ic\hbar \left[\mathbf{P}_{0m}(\mathbf{r}) (\nabla' \times \mathbf{m}_{m0}(\mathbf{r}')) - \right.$$
$$\left. - (\nabla \times \mathbf{m}_{0m}(\mathbf{r})) \mathbf{P}_{m0}(\mathbf{r}') \right] + \frac{\hbar^2 c^2}{\varepsilon_m} (\nabla \times \mathbf{m}_{0m}(\mathbf{r})) (\nabla' \times \mathbf{m}_{m0}(\mathbf{r}')) \Big\} +$$
$$+ \frac{4\pi c^2}{\omega^2} \nabla \times (\nabla' \times \tilde{\chi}_{\text{ст}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')), \tag{24}$$

где

$$\chi_{\text{ст}} = \sum_m \frac{2\mathbf{m}_{0m}(\mathbf{r})\, \mathbf{m}_{m0}(\mathbf{r}')}{\varepsilon_m} + m_{d,00}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tag{25}$$

— тензор статической магнитной восприимчивости. Первое слагаемое в нем соответствует ванфлековскому парамагнетизму, второе — диамагнитной восприимчивости. Из сравнения (25) с (10) следует, что при учете вклада высших мультипольных моментов в диэлектрический отклик кристалла тензор $\varepsilon(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ содержит в принципе существенно сингулярный член, пропорциональный ω^{-2}, связанный с магнитной восприимчивостью кристалла.

Таким образом, мы выполнили задачу, поставленную в данной работе: рассчитали тензор диэлектрической проницаемости неоднородной среды, установили его аналитические свойства как функции ω, выделили вклады, соответствующие электрической и магнитной поляризации среды, а также сформулировали применительно (в общем случае) к неоднородной среде обобщенную f-теорему, которая, как известно (см. [4, 5, 9] и др.), имеет в физике и самостоятельный интерес.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

В работе используются следующие обозначения и правила тензорной алгебры относительно декартовой системы координат: 1 означает единичный тензор второго ранга; два рядом стоящих вектора AB означают тензор-диаду; свертка или скалярное произведение обозначается точкой, а векторное произведение — значком $\times$; значок тильда означает транспонирование тензора. Поскольку любой тензор второго ранга L можно представить в виде суммы диад, то из известных правил векторного произведения векторов a, b и диады AB : $\mathbf{a} \times \mathbf{AB} = (\mathbf{a} \times \mathbf{A})\mathbf{B}$, $\mathbf{AB} \times \mathbf{a} = \mathbf{A}(\mathbf{B} \times \mathbf{a})$, $\mathbf{a} \times \mathbf{AB} \times \mathbf{b} = (\mathbf{a} \times \mathbf{A})(\mathbf{B} \times \mathbf{b})$ следует

$$(\mathbf{a} \times L)_{ij} = e_{ipl} a_p L_{lj},$$
$$(L \times \mathbf{a})_{ij} = e_{jpl} a_l L_{ip},$$
$$(\mathbf{a} \times L \times \mathbf{b})_{ij} = e_{ipl} e_{jp'l'} a_p b_l' L_{lp},$$
$$(\mathbf{a} \times L) = -(\tilde{L} \times \mathbf{a}), \tag{П1.1}$$

где l — единичный аксиальный тензор третьего ранга. В частности, для $L = 1$ имеем

$$(\mathbf{a} \times 1) = (1 \times \mathbf{a}), \;\; \mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times 1) = \mathbf{a} \times 1 \times \mathbf{b} = (1 \times \mathbf{a}) \times \mathbf{b}, \tag{П1.2}$$

$$\mathbf{b} \times [\mathbf{a} \times (\mathbf{c} \times 1)] = (\mathbf{b} \times \mathbf{c})\, \mathbf{a} - (\mathbf{b} \times 1)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) = \mathbf{a}(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) - (1 \times \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}). \tag{П1.3}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

В (19), (20) операторы F_{1j}, F_{2j} представлены в нескольких эквивалентных формах. Это облегчает вывод различных соотношений между ними. В частности, нетрудно показать, что

$$F_{1j}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) + (\nabla \cdot \mathbf{r}_j) F_{2j}(\mathbf{r}), \tag{П2.1}$$

$$\hat{\mathbf{p}}_{j'}(F_{1j}(\mathbf{r})) = i\hbar\nabla(F_{2j}(\mathbf{r}))\,\delta_{jj'}. \tag{П2.2}$$

Из (П2.1) и (П2.2) следует

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{p}}_{j'}(\mathbf{r}_j F_{1j}(\mathbf{r})) &= \hat{\mathbf{p}}_{j'}(\mathbf{r}_j) F_{1j}(\mathbf{r}) + \hat{\mathbf{p}}_{j'}(F_{1j}(\mathbf{r}))\,\mathbf{r}_j = \\ &= -i\hbar\,[F_{1j}(\mathbf{r})\,\mathbf{1} - \nabla(F_{2j}(\mathbf{r}))\,\mathbf{r}_j]\,\delta_{jj'} = \\ &= -i\hbar\,\{[\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) + (\nabla \cdot \mathbf{r}_j) F_{2j}(\mathbf{r})]\,\mathbf{1} - \nabla\mathbf{r}_j F_{2j}(\mathbf{r})\}\,\delta_{jj'}.\end{aligned} \tag{П2.3}$$

Здесь и ниже запись $\hat{\mathbf{p}}_{-j}(\varphi(\mathbf{r}_j))$ означает применение оператора $\hat{\mathbf{p}}_{pj}$ исключительно к стоящей за ним в скобках функции, т. е. к $\varphi(\mathbf{r}_j)$.

Рассмотрим также следующие коммутаторы: $[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r})]$, $[\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{I}}]$, $[\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}'), \nabla \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})]$ (верхним индексом R будем отмечать правые векторы диад). Воспользовавшись формулами (3), (7), (16)—(20), (П2.3), а также правилами, изложенными в Приложении 1, получим

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r})] &= \frac{i}{\hbar}\sum_j \frac{e_j}{2m_j}[\hat{\mathbf{p}}_j^2, \mathbf{r}_j F_{1j}(\mathbf{r})] = \\ &= \frac{i}{\hbar}\sum_j \frac{e_j}{2m_j}\{\hat{\mathbf{p}}_j \cdot \hat{\mathbf{p}}_j(\mathbf{r}_j F_{1j}(\mathbf{r})) + \hat{\mathbf{p}}_j(\mathbf{r}_j F_{1j}(\mathbf{r})) \cdot \hat{p}_j\} = \\ &= \sum_j \frac{e_j}{2m_j}[\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)\,\hat{\mathbf{p}}_j + \hat{\mathbf{p}}_j\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)] - c\nabla \times \hat{\mathbf{m}},\end{aligned} \tag{П2.4}$$

$$\begin{aligned}-\frac{i}{\hbar}[\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{I}}^R(\mathbf{r}')] &= \frac{i}{\hbar}\sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j)\,\hat{\mathbf{p}}^{R}{}_j(\mathbf{r}_j F_{1j}(\mathbf{r})) = \\ = \sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j{}')\,\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\,\mathbf{1} &+ \sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j)\,[(\nabla \cdot \mathbf{r}_j)\,\mathbf{1} - \mathbf{r}_j\nabla]\,F_{2j}(\mathbf{r}),\end{aligned} \tag{П2.5}$$

$$\begin{aligned}\frac{-ic}{\hbar}[\hat{\mathbf{P}}^R(r'), \nabla \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})] &= \frac{i}{\hbar}\sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\{\nabla(F_{2j}(\mathbf{r})) \times [\mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{p}}_j(\mathbf{r}_j^R F_{1j}(\mathbf{r}'))]\} = \\ &= \sum_j \frac{e_j^2}{m_j}\{\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j)\,[\mathbf{r}_j\nabla - (\nabla \cdot \mathbf{r}_j)\,\mathbf{1}]\,F_{2j}(\mathbf{r}) - \\ &- \nabla \times [(\mathbf{r}_j \times \nabla')\,\mathbf{r}_j^R - (\mathbf{r}_j \times \mathbf{1})(\nabla' \cdot \mathbf{r}_j)]\,F_{2j}(\mathbf{r})\,F_{2j}(\mathbf{r}')\}.\end{aligned} \tag{П2.6}$$

Воспользовавшись соотношением (П1.3), полагая $\mathbf{b} = \mathbf{r}_j$, $\mathbf{a} = r_j^2$, $\mathbf{c} = \nabla'$, перепишем формулу (П2.6) в виде

$$\frac{-ic}{\hbar}\left[\hat{\mathbf{P}}^{R}(\mathbf{r}'),\ \nabla\times\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\right]=\sum_{j}\frac{e_j^2}{m_j}\{\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_j)\left[\mathbf{r}_j\nabla-(\nabla\cdot\mathbf{r}_j)\,\mathbf{1}\right]F_{2j}(\mathbf{r})-$$

$$-\nabla\times\left[\mathbf{r}_j\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_j^2\mathbf{1}\right]\times\nabla' F_{2j}(\mathbf{r})\,F_{2j}(\mathbf{r}')\}. \qquad (\Pi 2.7)$$

Список литературы

[1] Пекар С. И. Кристаллооптика и добавочные световые волны. Киев: Наукова думка, 1982. 295 с.
[2] Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М.: Наука, 1979. 432 с.
[3] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 620 с.
[4] Nozieries P., Pines D. // Phys. Rev. 1959. V. 113. N 5. P. 1254—1287.
[5] Ambegaokar V., Kohn W. // Phys. Rev. 1960. V. 117. N 2. P. 423—431.
[6] Константинов О. В., Перель В. И. // ЖЭТФ. 1959. Т. 37. № 3 (9), С. 786—798.
[7] Писковой В. Н., Цеквава Б. Е. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 7. С. 1938—1944.
[8] Писковой В. Н., Цеквава Б. Е. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 3. С. 875—877.
[9] Luttinger J. M., Kohn W. // Phys. Rev. 1955. V. 97. № 4. P. 869.

Институт полупроводников
АН Украины
Киев
Тбилисский государственный университет
им. И. В. Джавахишвили

Поступило в Редакцию
15 января 1992 г.