Аналог формулы Кубо для электропроводности в случае пространственно неоднородных сред и электрических полей

© С.Т. Павлов*,**, И.Г. Ланг, Л.И. Коровин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
* Esquela de Fisica dela UAZ, Apartado Postal c-580, 98060 Zacatecas, Mexico
** Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
117924 Москва, Россия

E-mail: korovin@mail.ioffe.ru, pavlov@ahobon.reduaz.mx

(Поступила в Редакцию 27 марта 2003 г.)

Вычислены средние величины плотностей тока и заряда, наведенных слабым электромагнитным полем в случае пространственно неоднородных систем при конечной температуре. Формула Кубо для тензора электропроводности обобщена на случай неоднородных в пространстве систем и полей. Выделены вклады, содержащие электрические поля и производные от полей по координатам. В качестве пространственно неоднородных систем могут выступать полупроводниковые квантовые ямы, проволоки и точки.

В связи с повышенным интересом к экспериментальному и теоретическому изучению полупроводниковых объектов пониженной размерности (квантовых ям, проволок и точек) становится актуальным построение фундаментальной теории взаимодействия электромагнитных полей с пространственно неоднородными системами.

В работе Кубо [1] получена формула для тензора электропроводности, применимая в случае однородных в пространстве систем и электрических полей, не зависящих от пространственных координат. Эта формула точно учитывает взаимодействие носителей тока со средой и поэтому является эффективным инструментом при решении конкретных задач об электропроводности в теории твердого тела. В настоящей работе мы обобщаем формулу Кубо на случай пространственно неоднородных систем и пространственно неоднородных полей. Предварительно вычислим средние значения наведенных электромагнитным полем плотностей тока и заряда в случае неоднородной среды.

При выводе формулы Кубо [1] был использован оператор взаимодействия носителей тока с электрическим полем в виде

$$U_K = -\sum_i e_i \mathbf{r}_i \mathbf{E}(t), \tag{1}$$

где e_i и $\mathbf{r}_i$ — соответственно заряд и радиус-вектор i-ой частицы, $\mathbf{E}(t)$ — зависящее от времени, но однородное в пространстве электрическое поле. Однако из уравнений Максвелла следует, что зависящее от времени электрическое поле обязательно зависит и от координат, так что использование (1) всегда является неким приближением, если поле $\mathbf{E}$ зависит от t. В случае пространственно неоднородных систем зависимость поля от координат может быть существенной.

Наша задача состоит в учете неоднородности среды и получении дополнительных членов в формуле Кубо, содержащих производные от электрического поля по координатам.

Оператор взаимодействия электромагнитного поля с системой заряженных частиц выражается через векторный $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ и скалярный $\varphi(\mathbf{r}, t)$ потенциалы (см., например, [2], стр. 68), но не выражается через электрическое $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и магнитное $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ поля (кроме частных случаев, например постоянного электрического поля). Соответственно операторы плотности тока $\mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t)$ и плотности заряда $\rho_1(\mathbf{r}, t)$ в линейном приближении по векторному и скалярному потенциалам не выражаются через $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$. Однако средние значения $\langle \mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t)\rangle$ и $\langle \rho_1(\mathbf{r}, t)\rangle$ должны выражаться через поля, поскольку это наблюдаемые величины. При конечной температуре T среднее определяется как [1,3,4]

$$\langle \ldots \rangle = \frac{\mathrm{Sp}\{\exp(-\beta\mathcal{H})\ldots\}}{\mathrm{Sp}\{\exp(-\beta\mathcal{H})\}}, \quad \beta = \frac{1}{kT}, \tag{2}$$

$\mathcal{H}$ — гамильтониан без учета взаимодействия частиц со слабым электромагнитным полем.

В [5] получены выражения для средних $\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r}, t)|0\rangle$ для случая $T = 0$, когда среднее $\langle \ldots \rangle$ переходит в среднее $\langle 0|\ldots|0\rangle$ по основному состоянию $|0\rangle$. Настоящее исследование является продолжением указанной работы: используются обозначения и многие результаты [5].

Проблема выражения средних $\langle \mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t)\rangle$ и $\langle \rho_1(\mathbf{r}, t)\rangle$ через электрические и магнитные поля актуальна еще и потому, что если выражать среднее $\langle \mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t)\rangle$ через векторный и скалярный потенциалы, то оно содержит вклад $-(e/mc)\langle\rho(\mathbf{r})\rangle\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, где $e = e_i$, $m = m_i$ — соответственно заряд и масса частиц, c — скорость света, $\rho(\mathbf{r})$ — оператор плотности заряда в нулевом приближении по полям (см. (9)). Этот вклад создает сложности при решении некоторых конкретных задач, например, об отражении и поглощении света полупроводниковыми квантовыми ямами. Эти сложности удается избежать, если выразить средние $\langle \mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t)\rangle$ и $\langle \rho_1(\mathbf{r}, t)\rangle$ через электрические поля и их производные по координатам.

Вопрос о том, какой вид взаимодействия использовать (содержащий векторный потенциал или электрическое поле), обсуждался ранее в [6] применительно к задаче о рассеянии света в объемных кристаллах. В [6], по-видимому, впервые используется прием перехода от операторов $\mathbf{v}_i$ скорости частиц к операторам $\mathbf{r}_i$ координат согласно квантовому соотношению $\mathbf{v}_i = (i/\hbar)[\mathscr{H}, \mathbf{r}_i]$, благодаря чему удается перейти от выражений, содержащих векторный потенциал, к выражениям, содержащим электрическое поле. Однако, поскольку мы должны решать другие задачи о пространственно неоднородных системах, приходится вновь возвращаться к этой теме.

Рассмотрим случай конечной температуры, будем использовать математические приемы, предложенные в [1,3]. Будем сравнивать наши результаты с выводами работы [4], посвященной построению квантовой теории пространственной дисперсии электрической и магнитной восприимчивости. Далее предполагается, что на бесконечно удаленных расстояниях отсутствуют заряды и токи, а на временах $t \to -\infty$ поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ равны нулю, что соответствует их адиабатическому включению.

1. Гамильтониан системы и операторы плотностей тока и заряда

Рассмотрим систему из N частиц с зарядом e и массой m в произвольном слабом электромагнитном поле, характеризуемом напряженностями $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$. Введем векторный $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ и скалярный $\varphi(\mathbf{r}, t)$ потенциалы, через которые выражаются поля

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c}\,\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \operatorname{grad}\varphi(\mathbf{r}, t),$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \operatorname{rot}\mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{t}). \tag{3}$$

Поля предполагаются классическими, калибровка потенциалов $\mathbf{A}$ и φ произвольна. Для полноты задачи будем считать, что система частиц может быть помещена в постоянное магнитное поле $\mathbf{H}_c$, которое может быть сильным. Этому полю соответствует векторный потенциал $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$, так что $\mathbf{H}_c = \operatorname{rot}\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$. Полный гамильтониан $\mathscr{H}_{\text{tot}}$ запишем в виде

$$\mathscr{H}_{\text{tot}} = \frac{1}{2m}\sum_i \left(\mathbf{P}_i - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}_c(\mathbf{r}_i) - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t)\right)^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + e\sum_i \varphi(\mathbf{r}_i, t), \tag{4}$$

где $\mathbf{P}_i = (\hbar/i)(\partial/\partial\mathbf{r}_i)$ — оператор обобщенного импульса, $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — потенциальная энергия, включающая взаимодействие между частицами и внешний потенциал. В (4) необходимо учитывать некоммутативность $\mathbf{P}_i$ и $A_c(\mathbf{r}_i)$, $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t)$. Выделим в (4) энергию U взаимодействия частиц с электромагнитым полем, включив взаимодействие с сильным магнитным полем в основной гамильтониан $\mathscr{H}$,

$$\mathscr{H}_{\text{tot}} = \mathscr{H} + U, \tag{5}$$

где

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}\sum_i \mathbf{p}_i^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad \mathbf{p}_i = \mathbf{P}_i - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}_c(r_i), \tag{6}$$

$$U = U_1 + U_2,$$
$$U_1 = -\frac{1}{c}\int d^3r\,\mathbf{j}(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \int d^3r\,\rho(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}, t),$$
$$U_2 = \frac{e}{2mc}\int d^3r\,\rho(\mathbf{r})\mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t), \tag{7}$$

а также введены операторы плотности тока

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{j}_i(\mathbf{r}), \quad \mathbf{j}_i(\mathbf{r}) = (e/2)\big[\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)\big],$$

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{p}_i/m,$$

и заряда

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \rho_i(\mathbf{r}), \quad \rho_i(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i).$$

Операторы $\mathbf{j}_i(\mathbf{r})$ и $\rho_i(\mathbf{r})$ связаны уравнением непрерывности

$$\operatorname{div}\mathbf{j}_i(\mathbf{r}) + \dot{\rho}_i(\mathbf{r}) = 0, \quad \dot{\rho}_i(\mathbf{r}) = (i/\hbar)\big[\mathscr{H}, \rho(\mathbf{r})\big], \tag{8}$$

которое будет использоваться при расчетах. Заметим, что оператор U_2 нигде далее не появляется, поскольку он квадратичен по векторному потенциалу и его учет выходит за рамки линейного приближения по полям.

Линейные по потенциалам $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ и $\varphi(\mathbf{r}, t)$ добавки к операторам плотности тока и заряда в представлении Гейзенберга равны

$$j_{1\alpha}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r}, t)A_\alpha(\mathbf{r}, t) + \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'[U_1(t'), j_\alpha(\mathbf{r}, t)],$$

$$\rho_1(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\big[U_1(t'), \rho(\mathbf{r}, t)\big], \tag{9}$$

где нижний индекс 1 означает линейное приближение по полям; $\rho(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ и $U_1(t)$ — операторы в представлении взваимодействия, например

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathscr{H}t/\hbar)\rho(\mathbf{r})\exp(-i\mathscr{H}t/\hbar),$$

$[F, Q] = FQ - QF$. Подставив в (9) выражение (7) для U_1, получаем

$$j_{1\alpha}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{mc}\,\rho(\mathbf{r}, t)A_\alpha(\mathbf{r}, t) + \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int_{-\infty}^{t} dt'\big[j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{r}', t')\big]A_\beta(\mathbf{r}', t') - \frac{i}{\hbar}\int d^3r'\int_{-\infty}^{t} dt'\big[j_\alpha(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t')\big]\varphi(\mathbf{r}', t'), \tag{10}$$

$$\rho_1(\mathbf{r},t) = \frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt' \big[\rho(\mathbf{r},t),\, j_\beta(\mathbf{r}',t')\big] A_\beta(\mathbf{r}',t')$$
$$- \frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt' \big[\rho(\mathbf{r},t), \rho(\mathbf{r}',t')\big]\varphi(\mathbf{r}',t'). \quad (11)$$

2. Средние значения наведенных плотностей тока и заряда

В [5] рассмотрен случай $T = 0$ и операторы (10) и (11) усреднены по основному состоянию системы. В [7] (стр. 84) показано, что при усреднении нужно использовать волновые функции $|0\rangle$ основного состояния без учета взаимодействия U. Преобразуя выражения для усредненных величин $\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$, в [5] мы получили

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle = \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_E + \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial \mathbf{r}},$$
$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle = \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_E + \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial \mathbf{r}}, \quad (12)$$

где индексы E и $\partial E/\partial \mathbf{r}$ соответственно обозначают вклады, содержащие электрическое поле и производные от поля по координате. Переходя к рассмотрению систем при конечной температуре, заменим в формулах (12) усреднение $\langle 0|\ldots|0\rangle$ по основному состоянию усреднением $\langle\ldots\rangle$, определенным (2). Законность замены одного типа усреднения другим доказана далее при сравнении с результатами работ [1,3,4].

В соответствии с [5] имеем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle_E = \frac{i}{\hbar}\int d^3r'$$
$$\times \int_{-\infty}^{t} dt' \langle [j_\alpha(\mathbf{r},t), d_\beta(\mathbf{r}',t')]\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \quad (13)$$

$$\langle \rho_1(\mathbf{r},t)\rangle_E = \frac{i}{\hbar}\int d^3r'$$
$$\times \int_{-\infty}^{t} dt' \langle [\rho_\alpha(\mathbf{r},t), d_\beta(\mathbf{r}',t')]\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \quad (14)$$

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle_{\partial E/\partial r} = \frac{e}{mc}\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha} - \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'$$
$$\times \int_{-\infty}^{t} dt' \langle [j_\alpha(\mathbf{r},t), Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}, \quad (15)$$

$$\langle \rho_1(\mathbf{r},t)\rangle_{\partial E/\partial \mathbf{r}} = -\frac{i}{\hbar c}\int d^3r'$$
$$\times \int_{-\infty}^{t} dt' \langle [\rho(\mathbf{r},t), Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}, \quad (16)$$

где введены обозначения

$$\mathbf{d}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\rho(\mathbf{r}), \quad Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}) = r_\beta j_\gamma(\mathbf{r}), \quad (17)$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{r},t) = -c\int_{-\infty}^{t} \mathbf{E}(\mathbf{r},t')dt'. \quad (18)$$

Преобразуем полученные выражения так, чтобы был виден переход к формуле Кубо в случае пространственно однородных систем и электрического поля, не зависящего от координат. Используем соотношение [1,3]

$$\frac{i}{\hbar}\langle [F(t), Q(t')]\rangle = \int_0^\beta d\lambda \left\langle \frac{dQ(t')}{dt'} F(t + i\hbar\lambda)\right\rangle, \quad (19)$$

справедливое для любой пары операторов F и Q. Используя (19), из (13) получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle_E = \int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt'$$
$$\times \int_0^\beta d\lambda \left\langle \frac{\partial d_\beta(\mathbf{r}',\mathbf{t}')}{dt'}\, j_\alpha(\mathbf{r}, t + i\hbar\lambda)\right\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'). \quad (20)$$

Можно показать, что

$$\partial d_\beta(\mathbf{r},t)/\partial t = -r_\beta\, \frac{\partial j_\gamma(\mathbf{r},t)}{\partial r_\gamma}. \quad (21)$$

Подставив (21) в (20) и интегрируя по $\mathbf{r}'$ по частям, получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle_E = \int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt' \int_0^\beta d\lambda \langle j_\beta(\mathbf{r}',t') j_\alpha(\mathbf{r}, t + i\hbar\lambda)\rangle$$
$$\times E_\beta(\mathbf{r}',t') + \int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt' \int_0^\beta d\lambda \langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t') j_\alpha(\mathbf{r}, t + i\hbar\lambda)\rangle$$
$$\times \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}. \quad (22)$$

Согласно (15), выражение для $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle_{\partial E/\partial \mathbf{r}}$ состоит из двух частей. Первую из них не преобразуем, а во второй выполняем интегрирование по t' по частям, а затем используем (19). В результате получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle_{\partial E/\partial \mathbf{r}} = \frac{e}{mc}\,\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\, \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha} - \frac{1}{c}\int d^3r'$$
$$\times \int_0^\beta d\lambda \langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda)\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma} - \int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt'$$
$$\times \int_0^\beta d\lambda \langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t') j_\alpha(\mathbf{r}, t + i\hbar\lambda)\rangle \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}. \quad (23)$$

Складывая (22) и (23), видим, что последние члены в правых частях обеих формул сокращаются. Суммарное выражение разобьем на две части

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle = \langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(1)} + \langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} \quad (24)$$

так, чтобы первая часть содержала электрическое поле, а вторая — производные от поля по координатам, т.е.

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(1)} = \int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt'$$
$$\times \int_0^\beta d\lambda \langle j_\beta(\mathbf{r}',t') j_\alpha(\mathbf{r}, t + i\hbar\lambda)\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \quad (25)$$

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = \frac{e}{mc}\,\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\,\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha} - \frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma}. \quad (26)$$

Очевидно, что разбиение (24) не совпадает с разбиением (12), удобным только при $T=0$.

Аналогично из (14) и (16) получаем

$$\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle = \langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(1)} + \langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}, \quad (27)$$

$$\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(1)} = \int d^3r'\int_{-\infty}^t dt' \times \int_0^\beta d\lambda\langle j_\beta(\mathbf{r}',t')\rho(\mathbf{r},t+i\hbar\lambda)\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \quad (28)$$

$$\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = -\frac{1}{c}\int d^3r' \times \int_0^\beta d\lambda\langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\,\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma}. \quad (29)$$

Получив выражения (24)–(29), мы достигли нашей главной цели: выделили основные вклады с индексом (1) в средние величины наведенных плотностей тока и заряда и показали, что дополнительные вклады с индексом (2) содержат производные от электрического поля по координатам. Смысл разбиения на основной и дополнительный вклады состоит в том, что при решении любых задач, в которых поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ неоднородно в пространстве, можно оценить величины дополнительных вкладов и определить, нужно ли их учитывать или можно отбросить. Как и в случае $T=0$, полученные выражения содержат операторы $\mathbf{r}_i$ координат частиц в отличие от исходных выражений (10) и (11), которые этих операторов не содержат.

3. Сравнение с результатами работы [4]

В [3,4] получены выражения для величин $\langle\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)\rangle$ при конечной температуре, но эти выражения отличаются от выведенных нами и приведенных выше. Параллельно мы проводили аналогичные вычисления величины $\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle$, которая в [1,3,4] не рассматривалась, но в уравнениях Максвелла выступает на равных правах со средней плотностью тока. Заметим, что в [1,3] рассматривалась однородная среда, а в [4] — неоднородная. Решая уравнение для матрицы плотности, авторы [3] и [4] приходят к формуле, которую можно получить из (10), если в правой и левой частях провести усреднение $\langle\ldots\rangle$, определенное (2). Очевидно, что аналогичное выражение для $\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle$ можно получить, усреднив обе стороны в (11).

Далее авторы [3] и [4] преобразуют выражение для средней наведенной плотности тока таким образом, что в нем появляется электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$, но сохраняется векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$. Проделав аналогичную процедуру в исходном выражении для средней наведенной плотности заряда, получаем результат вида (27), в котором вклад $\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(1)}$ определяется формулой (28), а вклад $\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$ равен

$$\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = \frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle j_\beta(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle A_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (30)$$

Для вклада $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(1)}$ из правой части (24) в [3,4] получен результат (25), а для дополнительного вклада — выражение

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = -\frac{e}{mc}\,\langle\rho(\mathbf{r})\rangle A_\alpha(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle j_\beta(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle A_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (31)$$

Авторы [4] пошли дальше. С помощью (31) они выразили производную от величины $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$ по времени через электрическое поле. Проинтегрировав эту производную по времени, получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = -\frac{e}{mc}\,\langle\rho(\mathbf{r})\rangle a_\alpha(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle j_\beta(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (32)$$

и аналогично

$$\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = \frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle j_\beta(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (33)$$

Итак, получены формулы для дополнительных вкладов двух видов: (26) и (29), содержащие только производные от электрического поля по координатам, и (32) и (33), содержащее само электрическое поле.

Продемонстрируем, как от (26) можно перейти к (32), а от (29) — к (33). В последнем члене из правой части (26) интегрируем по r'_γ по частям. Затем используем равенство

$$\frac{dY_{\beta\gamma}(\mathbf{r})}{dr_\gamma} = j_\beta(\mathbf{r}) + r_\beta\,\frac{\partial j_\gamma(\mathbf{r})}{\partial r_\gamma} = j_\beta(\mathbf{r}) - r_\beta\dot{\rho}(\mathbf{r}). \quad (34)$$

Тогда из (26) имеем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = \frac{e}{mc}\,\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha} + \frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle j_\beta(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t) - \frac{1}{c}\int d^3r'r'_\beta\int_0^\beta d\lambda\langle\dot{\rho}(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (35)$$

В последнем члене используем (19) и интегрируем по $\mathbf{r}'$. Получаем, что этот последний член равен

$$-\frac{ie}{\hbar c}\left\langle\left[j_\alpha(\mathbf{r}),\sum_i r_{i\beta}a_\beta(\mathbf{r}_i,t)\right]\right\rangle$$
$$=-\frac{e}{mc}\left[\langle\rho(\mathbf{r})\rangle a_\alpha(\mathbf{r},t)+\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}\right]. \quad (36)$$

Подставив полученное в (35), приходим к результату (32), что и требовалось доказать. Выражение (29) для $\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$ преобразуем аналогично. Разница состоит только в том, что вместо (36) имеем

$$-\frac{ie}{\hbar c}\left\langle\left[\rho(\mathbf{r}),\sum_i r_{i\beta}a_\beta(\mathbf{r}_i,t)\right]\right\rangle=0$$

и от (29) переходим к (33).

Итак, сравнивая наши результаты с результатами, полученными в [3,4] мы доказали применимость выражений (26) и (29) для дополнительных вкладов в средние значения наведенных плотностей тока и заряда, содержащих только производные по координатам от электрических полей.

4. Анализ формул для дополнительного вклада в среднюю плотность тока

Величина $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$ определена в трех формах: (26), (31) и (32). В [4] перечислены некоторые свойства этой величины. Продолжим ее исследование и получим четвертое выражение для $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$ через производные от векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ по координатам. Во втором члене формулы (31) для $j_\beta(\mathbf{r}')$ используем соотношение (34). В результате этот второй член разбивается на две части: в первой из них интегрируем по r'_γ по частям, во второй используем формулу

$$\frac{i}{\hbar}\langle[F,Q]\rangle=\int_0^\beta d\lambda\langle\dot{Q}F(i\hbar\lambda)\rangle, \quad (37)$$

которая следует из (19) при $t'=t$. Вычислив коммутатор, получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}=\frac{e}{mc}\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}$$
$$-\frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma}. \quad (38)$$

Для получения еще одного — пятого — выражения для дополнительного вклада в плотность тока используем (34) для $j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)$ из (31), а также следующую модификацию (37):

$$\frac{i}{\hbar}\langle[F,Q]\rangle=\int_0^\beta d\lambda\langle F\dot{Q}(i\hbar\lambda)\rangle. \quad (39)$$

В результате получаем

$$\langle j_{1\alpha}(r,t)\rangle^{(2)}=-\frac{e}{mc}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\{\langle d_\alpha(\mathbf{r})\rangle A_\beta(\mathbf{r},t)\}$$
$$+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial r_\gamma}\left\{\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle j_\beta(\mathbf{r}')Y_{\alpha\gamma}(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle A_\beta(\mathbf{r}',t)\right\}. \quad (40)$$

Из (40) следует, что интеграл по всему пространству от $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$ равен нулю [4].

5. Переход к выражениям, содержащим магнитное поле

Получим шестое выражение для $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$, в которое введем магнитное поле. Разобьем (38) на две части

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}=\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(-)}+\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}, \quad (41)$$

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}=\frac{e}{2mc}\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\left(\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}\pm\frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial r_\beta}\right)$$
$$-\frac{1}{2c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle$$
$$\times\left(\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma}\pm\frac{\partial A_\gamma(\mathbf{r},t)}{\partial r'_\beta}\right). \quad (42)$$

Поскольку $\mathbf{H}=\operatorname{rot}\mathbf{A}$, величина $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(-)}$ выражается через магнитное поле

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(-)}=-\frac{e}{2mc}(\mathbf{H}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{r})_\alpha\langle\rho(\mathbf{r})\rangle$$
$$+\frac{1}{2c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda(\mathbf{H}(\mathbf{r}',t)\times\mathbf{r}')_\beta\langle j_\beta(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle, \quad (43)$$

а величину $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}$ можно выразить через вторые производные от векторного потенциала по координатам

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}=-\frac{e}{2mc}\langle\rho(\mathbf{r})\rangle r_\beta r_\gamma\frac{\partial^2A_\beta}{\partial r_\alpha\partial r_\gamma}$$
$$+\frac{1}{2c}\int d^3r'r'_\beta r'_\delta\int_0^\beta d\lambda\langle j_\gamma(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\frac{\partial^2A_\beta}{\partial r'_\gamma\partial r'_\delta}. \quad (44)$$

Для вывода (44) из (42) мы поступили следующим образом: в формуле (42) использовали соотношение $Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')=r'_\beta j_\gamma(\mathbf{r}')$, а для $j_\gamma(\mathbf{r}')$ — формулу (34). Далее в члене, содержащем $\partial Y_{\gamma\delta}(\mathbf{r}')/\partial r'_\delta$, проинтегрировали по r'_δ по частям, а в члене, содержащем $\dot{d}_\gamma(\mathbf{r}')$, использовали (39), проинтегрировали по $\mathbf{r}'$ и вычислили коммутатор.

Можно показать, что величины $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}$ и $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(-)}$ по отдельности обладают свойствами

$$\operatorname{div}\langle\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}=0,\qquad\int d^3r\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}=0. \quad (45)$$

Покажем, что вклад $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}$ можно выразить через вторые производные от электрического поля по координатам. Для этого выражение

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\mathbf{a}(\mathbf{r},t)-c\int_{-\infty}^{t}dt'\partial\varphi(\mathbf{r},t')/\partial\mathbf{r} \tag{46}$$

для векторного потенциала (следующее из (3)) подставим в (42). Тогда в величинах $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}$ можно выделить вклады от скалярного потенциала, которым припишем индекс φ, т.е.

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}=\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}_{E}+\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}_{\varphi}. \tag{47}$$

Сразу получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(-)}_{\varphi}=0, \tag{48}$$

а также

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}_{\varphi}=\int_{-\infty}^{t}dt'\Bigg[-\frac{e}{m}\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{r},t')}{\partial r_\alpha\partial_\beta}$$
$$+\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\frac{\partial^2\varphi}{\partial r'_\beta\partial r'_\gamma}\Bigg]. \tag{49}$$

Во втором члене в формуле (49) дважды интегрируем по частям: сначала по переменной r'_γ, затем по переменной r'_β. Далее используем уравнение непрерывности (8) и соотношение (37). В результате получаем, что второй член из (49) равен первому с противоположным знаком и

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}_{\varphi}=0. \tag{50}$$

Учитывая (48) и (50), из (47) и (42) получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}=\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(\pm)}_{E}$$
$$=\frac{e}{2mc}\langle d_\beta(\mathbf{r})\rangle\left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}\pm\frac{\partial a_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial r_\beta}\right)-\frac{1}{2c}\int d^3r'$$
$$\times\int_0^\beta d\lambda\langle Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}')j_{1\alpha}(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma}\pm\frac{\partial a_\gamma(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\beta}\right). \tag{51}$$

Используя уравнение Максвелла $\operatorname{rot}\mathbf{E}=-(1/c)(\partial\mathbf{H}/\partial t)$ и определение (18) вектора $\mathbf{a}(\mathbf{r},t)$, снова приходим к выражению (43) для $\langle j_\alpha(\mathbf{r},t)\rangle^{(-)}$, а также получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}=-\frac{e}{2mc}\langle\rho(\mathbf{r})\rangle r_\beta r_\gamma\frac{\partial^2a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha\partial r_\gamma}$$
$$+\frac{1}{2c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda r'_\beta r'_\gamma\langle j_\gamma(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\frac{\partial^2a_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma\partial r'_\delta}. \tag{52}$$

Учитывая определение (18), находим, что величина $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}$ выражена через вторые производные от электрического поля по координатам. Итак, шестая (и последняя) формула для дополнительного вклада $\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}$ определяется суммой выражений (43) и (52).

6. Исключение диагональных элементов операторов $\mathbf{r}_i$

Выражения (26) и (29) для дополнительных вкладов в среднюю наведенную плотность тока и заряда в отличие от (32) и (33) содержат операторы $\mathbf{r}_i$ координат частиц. Действительно, определения (17) можно переписать в виде

$$\mathbf{d}(\mathbf{r})=e\sum_i\mathbf{r}_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i), \tag{53}$$

$$Y_{\beta\gamma}=(e/2)\sum_i\big(r_{i\beta}j_{i\gamma}+j_{i\gamma}r_{i\beta}\big). \tag{54}$$

Но средние значения $\langle\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)\rangle$ и $\langle\rho_1(\mathbf{r},t)\rangle$ не должны зависеть от положения точки отсчета координат $\mathbf{r}_i$. Это означает, что выражения (26) и (29) содержат только недиагональные элементы операторов $\mathbf{r}_i$, а диагональные элементы могут быть исключены. Покажем, что это действительно так.

Преобразуем (54) так, чтобы оператор $r_{i\beta}$ стоял только слева

$$Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r})=-(i\hbar/2m)\delta_{\beta\gamma}\rho(\mathbf{r})+\sum_i r_{i\beta}j_{i\gamma}(\mathbf{r}). \tag{55}$$

Подставляя (53) и (55) в (26), получим

$$\langle\mathbf{j}_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)}=\frac{i\hbar}{2mc}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\langle\rho(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\operatorname{div}\mathbf{a}(\mathbf{r}',t)$$
$$+\frac{e^2}{mc}\sum_i\langle r_{i\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\rangle\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}$$
$$-\frac{1}{c}\int d^3r'\int_0^\beta d\lambda\sum_i\langle r_{i\beta}j_{i\gamma}(\mathbf{r}')j_{1\alpha}(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma}. \tag{56}$$

Первые два члена в (56) пока оставим без изменений, а в последнем разобьем оператор $\mathbf{r}_i$ на две части

$$\mathbf{r}_i=\mathbf{r}_i^{\mathrm{d}}+\mathbf{r}_i^{\mathrm{nd}}, \tag{57}$$

где индексы d и nd означают соответственно диагональный и недиагональный вклады. Оператор $\mathbf{r}_i^{\mathrm{d}}$ определен через свои матричные элементы

$$\langle n|\mathbf{r}_i^{\mathrm{d}}|m\rangle=\langle n|\mathbf{r}_i|m\rangle\langle n|m\rangle, \tag{58}$$

где $|n\rangle$ — собственные функции гамильтониана $\mathscr{H}$. Очевидно свойство коммутативности

$$[\mathscr{H},\mathbf{r}_i^{\mathrm{d}}]=0.$$

Рассмотрим вклад от оператора r_i^{d} в последний член в формуле (56). Обозначим этот вклад как $I_\alpha(\mathbf{r},t)$. Выполним интегрирование по r'_γ по частям, затем используем соотношение непрерывности (8). Получаем

$$I_\alpha(\mathbf{r},t)=-(1/c)\int d^3r'$$
$$\times\int_0^\beta d\lambda\sum_i\langle r_{i\beta}^{\mathrm{d}}\dot\rho_i(\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t). \tag{59}$$

Поскольку оператор $\mathbf{r}_i^{\mathrm{d}}$ коммутирует с гамильтонианом $\mathscr{H}$, выражение (59) можно переписать в виде

$$I_\alpha(\mathbf{r},t) = -(1/c)\int d^3r' \times \int_0^\beta d\lambda \sum_i \langle \dot{\rho}_i(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda) r_{i\beta}^{\mathrm{d}}(i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (60)$$

Подставим в формулу (60) $r_{i\beta}^{\mathrm{d}} = r_{i\beta} - r_{i\beta}^{\mathrm{nd}}$, тогда величина $I_\alpha(\mathbf{r},t)$ разобьется на две части

$$I_\alpha(\mathbf{r},t) = I'_\alpha(\mathbf{r},t) + I^n_\alpha(\mathbf{r},t), \quad (61)$$

где

$$I'_\alpha(\mathbf{r},t) = -(1/c)\int d^3r' \times \int_0^\beta d\lambda \sum_i \langle \dot{\rho}_i(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda) r_{i\beta}(i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t), \quad (62)$$

$$I''_\alpha(\mathbf{r},t) = (1/c)\int d^3r' \times \int_0^\beta d\lambda \sum_i \langle \dot{\rho}_i(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda) r_{i\beta}^{\mathrm{nd}}(i\hbar\lambda)\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (63)$$

Формула (62) с учетом (37) превращается в

$$I'_\alpha(\mathbf{r},t) = -(i/\hbar c)\int d^3r' \sum_i \langle [j_\alpha(\mathbf{r}) r_{i\beta}, \rho(\mathbf{r}')]\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t). \quad (64)$$

Интегрируя по $\mathbf{r}'$ и вычисляя коммутатор, получаем выражение

$$I'_\alpha(\mathbf{r},t) = -\frac{e^2}{mc}\sum_i \langle r_{i\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}, \quad (65)$$

которое сокращается со вторым членом в (56). Остается величина $I''_\alpha(\mathbf{r},t)$, которую преобразуем, используя уравнение непрерывности (8) и интегрируя по переменной r'_γ по частям. В результате

$$I''_\alpha(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c}\int d^3r' \times \int_0^\beta d\lambda \sum_i \langle j_{i\gamma}(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda) r_{i\beta}^{\mathrm{nd}}(i\hbar\lambda)\rangle \frac{\partial a_\beta(r',t)}{\partial r'_\gamma}. \quad (66)$$

Используя (61), (65) и (66), получаем окончательное выражение для дополнительного вклада в среднюю наведенную плотность тока, не содержащее диагональных матричных элементов оператора $\mathbf{r}_i$,

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = \frac{i\hbar}{2mc}\int d^3r' \times \int_0^\beta d\lambda \langle \rho(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda)\rangle \operatorname{div}\mathbf{a}(\mathbf{r}',t) + \frac{1}{c}\int d^3r' \int_0^\beta d\lambda \sum_i \langle j_{i\gamma}(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda) r_{i\beta}^{\mathrm{nd}}(i\hbar\lambda) - r_{i\beta}^{\mathrm{nd}} j_{i\gamma}(\mathbf{r}') j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda)\rangle \frac{\partial a_\beta(r',t)}{\partial r'_\gamma}. \quad (67)$$

Аналогично получаем

$$\langle \rho(\mathbf{r},t)\rangle^{(2)} = \frac{i\hbar}{2mc}\int d^3r' \times \int_0^\beta d\lambda \langle \rho(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}, i\hbar\lambda)\rangle \operatorname{div}\mathbf{a}(\mathbf{r}',t) + \frac{1}{c}\int d^3r' \int_0^\beta d\lambda \sum_i \langle j_{i\gamma}(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}, i\hbar\lambda) r_{i\beta}^{\mathrm{nd}}(i\hbar\lambda) - r_{i\beta}^{\mathrm{nd}} j_{i\gamma}(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}, i\hbar\lambda)\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t)}{\partial r'_\gamma}. \quad (68)$$

7. Тензор электропроводности

Совершим Фурье-преобразование электрического поля

$$E_\alpha(\mathbf{k},\omega) = \int d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt\, E_\alpha(\mathbf{r},t) e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)}, \quad (69)$$

$$E_\alpha(\mathbf{r},t) = (2\pi)^{-4}\int d^3k \int_0^\infty d\omega\, E_\alpha(\mathbf{k},\omega) e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} + \text{c.c.} \quad (70)$$

Среднюю наведенную плотность тока можно записать в виде

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle = (2\pi)^{-4}\int d^3k \int_0^\infty d\omega \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) \times E_\beta(\mathbf{k},\omega) e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} + \text{c.c.}, \quad (71)$$

где $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r})$ — зависящий от пространственных координат тензор электропроводности (обозначение заимствовано из [8]).

Используя выражения (25) и (67) соответственно для основного и дополнительного вкладов в среднюю наведенную плотность тока, получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \sigma^{(1)}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) + \sigma^{(2)}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}), \quad (72)$$

где

$$\sigma^{(1)}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \int d^3r' \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \langle j_\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}', -i\hbar\lambda) \times j_\alpha(\mathbf{r},t)\rangle \exp[-i(\mathbf{kr}'-\omega t)], \quad (73)$$

$$\sigma^{(2)}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \frac{i\hbar k_\beta}{2m\omega}\int d^3r' e^{-i\mathbf{kr}'}\int_0^\beta d\lambda\langle\rho(\mathbf{r}-\mathbf{r}',-i\hbar\lambda)j_\alpha(\mathbf{r})\rangle + \frac{k_\gamma}{\omega}\int d^3r' e^{-i\mathbf{kr}'}\int_0^\beta d\lambda\sum_i\langle j_{i\gamma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}',-i\hbar\lambda)j_\alpha(\mathbf{r})r^{\mathrm{nd}}_{i\beta} - r^{nd}_{i\beta}(-i\hbar\lambda)j_{i\gamma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}',-i\hbar\lambda)j_\alpha(\mathbf{r})\rangle. \quad (74)$$

В случае $T=0$ вместо (72) имеем

$$\sigma_{\alpha\beta,0}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \sigma^{\mathrm{I}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) + \sigma^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) + \sigma^{\mathrm{III}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}), \quad (75)$$

где

$$\sigma^{\mathrm{I}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar}\int d^3r'\int_0^\infty dt e^{-i(\mathbf{kr}'-\omega t)} \times\sum_i\langle 0|j_\alpha(\mathbf{r},t)\rho_i(\mathbf{r}-\mathbf{r}')r^{\mathrm{nd}}_{i\beta} - r^{\mathrm{nd}}_{i\beta}\rho_i(\mathbf{r}-\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},t)|0\rangle, \quad (76)$$

$$\sigma^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \frac{e^2k_\alpha}{m\omega}\sum_i\langle 0|r^{\mathrm{nd}}_{i\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)|0\rangle - \frac{ik_\gamma}{\hbar\omega}\int d^3r'\int_0^\infty dt e^{-i(\mathbf{kr}'-\omega t)}\sum_i\langle 0|j_\alpha(\mathbf{r},t) \times j_{i\gamma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')r^{\mathrm{nd}}_{i\beta} - r^{\mathrm{nd}}_{i\beta}j_{i\gamma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')j_\alpha(\mathbf{r},t)|0\rangle, \quad (77)$$

$$\sigma^{\mathrm{III}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \frac{k_\beta}{2m\omega}\int d^3r' \times\int_0^\infty dt\, e^{-i(\mathbf{kr}'-\omega t)}\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t),\rho(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]_+|\rangle\rangle, \quad (78)$$

$[F,Q]_+ = FQ+QF$. От (75) к (72) можно перейти, если в выражениях (76)–(78) усреднение $\langle 0|\ldots|0\rangle$ заменить на $\langle\ldots\rangle$ и использовать формулу (37).[1]

8. Приближение электрического поля, однородного в пространстве

В некоторых случаях можно пренебречь вкладами в величины средних наведенных плотностей тока и заряда, содержащими производные от электрического поля по координатам, т. е. полагать

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\simeq\mathbf{E}(t), \quad (79)$$

как это сделано, например, в [1], хотя, строго говоря, однородным в пространстве может быть только поле $\mathbf{E}$, не зависящее также и от времени. В приближении (79) совершаем Фурье-преобразование

$$E_\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^\infty dt\, e^{i\omega t}E_\alpha(t), \quad (80)$$

тогда можно записать

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle_\hbar = (1/2\pi)\int_0^\infty d\omega\,\sigma_{\alpha\beta}(\omega|\mathbf{r})E_\beta(\omega)e^{-i\omega t} + \text{c.c.}, \quad (81)$$

где индекс h означает поле, однородное в пространстве. Видно, что

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega|\mathbf{r}) = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}=\mathbf{0},\omega|\mathbf{r}). \quad (82)$$

Тогда с помощью (72)–(74) получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega|\mathbf{r}) = \int_0^\infty dt\int_0^\beta d\lambda\langle J_\beta(-i\hbar\lambda)j_\alpha(\mathbf{r},t)\rangle e^{i\omega t}, \quad (83)$$

где введен оператор тока

$$J_\alpha = e\sum_i \dot{r}_{i\alpha}. \quad (84)$$

Выражение (83) является обобщением формулы Кубо на случай пространственно неоднородной среды, когда тензор электропроводности зависит от $\mathbf{r}$.

Далее рассмотрим случай пространственно однородной среды, в которой никакие средние величины не могут зависеть от координат $\mathbf{r}$. Тогда тензор $\sigma_{\alpha\beta}(\omega|\mathbf{r})$ не зависит от $\mathbf{r}$, и из (83) получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = V_0^{-1}\int_0^\infty dt\int_0^\beta d\lambda\langle J_\beta(-i\hbar\lambda)J_\alpha(t)\rangle e^{i\omega t}, \quad (85)$$

где V_0 — нормированный объем. Полученная формула совпадает с результатом Кубо [1], если заменить в правой части ω на $-\omega$ и учесть, что в [1] положено $V_0=1$.

9. Случай постоянного магнитного поля

Рассмотрим случай, когда внешнее слабое электромагнитное поле сводится к постоянному в пространстве и времени магнитному полю $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)=\mathbf{H}$, а электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)=0$. Напомним, что мы включили векторный потенциал $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$, соответствующий постоянному магнитному полю $\mathbf{H}_c$, в основной гамильтониан (6). Однако в настоящем разделе полагаем $\mathbf{H}_c=0$, $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})=0$, а поле $\mathbf{H}=\text{const}$ считаем настолько слабым, что можно ограничиться линейными по полю вкладами в наведенные плотности тока и заряда. Тогда, согласно (25), основной вклад в наведенную плотность тока $\langle\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(1)}=0$, поскольку $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)=0$. Выберем векторный потенциал в виде

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (1/2)(\mathbf{H}\times\mathbf{r}). \quad (86)$$

Тогда из (44) очевидно, что $\langle j_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(+)}=0$, поскольку содержит вторые производные от $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ по координатам. Остается только вклад $\langle\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)\rangle^{(-)}$, определенный в (43). Таким образом, в случае $\mathbf{H}=\text{const}$ в линейном приближении по полю удалось выразить плотность наведенного

[1] В [5] приведена формула для тензора электропроводности при $T=0$, не совпадающая с (75). Это связано с тем, что в [5] исключены только диагональные элементы $\langle 0|\mathbf{r}_i|0\rangle$ и введен оператор $\mathbf{r}_i=\mathbf{r}_i-\langle 0|\mathbf{r}_i|0\rangle$, отличающийся от r^{nd}_i.

тока через напряженность магнитного поля. Теперь исключим из выражения для $\langle \mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)\rangle$ при $\mathbf{H} = \text{const}$ диагональные матричные элементы операторов $\mathbf{r}_i$. Для этого воспользуемся формулой (67), в которой вектор $\mathbf{a}(\mathbf{r},t)$ может быть заменен векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$, поскольку исходное выражение (26) может быть заменено на (38). Подставив (86) в (67), получаем

$$\langle j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)\rangle = -\frac{e^2}{2mc}\sum_i \langle (\mathbf{H}\times\mathbf{r}_i^{\text{nd}})_\alpha \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\rangle - \frac{ie}{2\hbar c}\sum_i \left\langle j_\alpha(\mathbf{r}) H_\beta \left(\mathbf{r}_i^{\text{nd}}\times\mathbf{r}_i^{\text{nd}}\right)_\beta\right\rangle + \frac{e}{2c}\int_0^\beta d\lambda \sum_i \langle (\mathbf{H}\times\mathbf{r}_i^{\text{nd}})_\beta v_{i\beta} j_\alpha(\mathbf{r}, i\hbar\lambda)\rangle. \quad (87)$$

Заметим, что вектор $\mathbf{r}_i^{\text{nd}}\times\mathbf{r}_i^{\text{nd}} \neq 0$, так как проекции $r_{i\alpha}^{\text{nd}}$ с разными индексами α не коммутируют между собой, например

$$(\mathbf{r}_i^{\text{nd}}\times\mathbf{r}_i^{nd})_z = [\mathbf{r}_{ix}^{\text{nd}}, \mathbf{r}_{iy}^{\text{nd}}]. \quad (88)$$

Отметим основные результаты полученные в настоящей работе. Показано, что средние значения плотностей тока и заряда, наведенных слабым электромагнитым полем, в случае конечных температур и пространственно неоднородных систем выражаются через электрические поля и их производные по координатам. Вклады, выраженные через электрическое поле, были названы основными, а выраженные через производные — дополнительными.

Для дополнительных вкладов в средние значения наведенных плотностей тока и заряда получено шесть пар различных выражений. Два из этих выражений для плотности тока совпадают с полученными в [4]. Но выражения из [4] содержат электрические поля или векторные потенциалы, а не производные от этих величин по координатам, что затрудняет оценку величины дополнительных вкладов. Вообще говоря, интегрируя по $\mathbf{r}'$ по частям, можно избавиться от производных $\partial E_\beta(\mathbf{r}',t)/\partial r'_\gamma$, перейдя к формулам, содержащим только поля, а не производные от них. Однако обратная процедура — переход от поля к производным — возможна не всегда, в основных вкладах поля всегда сохраняются.

Шестое (полученное в разделе 5) выражение для дополнительного вклада в среднюю наведенную плотность тока распадается на две части. Первая из них с индексом $(-)$ выражается только через магнитное поле $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$, вторая с индексом $(+)$ — через вторые производные от электрического поля по координатам. Аналогичный результат получен для средней наведенной плотности заряда. Если дополнительные вклады выражены через производные от электрических полей, то в соответствующие формулы обязательно входят операторы $\mathbf{r}_i$ координат частиц. Может показаться, что этот результат абсурден, поскольку координата $\mathbf{r}_i$ зависит от точки начала отсчета. Однако оказывается, что диагональные матричные элементы $\langle n|\mathbf{r}_i|n\rangle$ не входят в средние наведенные плотности тока и заряда, что показано в разделе 6, а недиагональные элементы не зависят от точки начала отсчета.

В разделе 7 вычислены основной и дополнительный вклады в тензор электропроводности в случае пространственно неоднородных систем и неоднородных в пространстве полей. В приближении, когда электрическое поле однородно в пространстве, но зависит от времени (раздел 8), сохраняются только основные вклады. В этом случае для тензора электропроводности, зависящего от частоты ω и координат $\mathbf{r}$, получена модифицированная формула Кубо, которая переходит в формулу из [1] в случае пространственно однородных систем.

Наконец, в разделе 9 получено выражение для средней наведенной плотности тока в случае, когда слабое электромагнитное поле сводится к постоянному магнитному полю.

Из (74) следует, что дополнительные вклады в электропроводность содержат множитель k_γ/ω. Если поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ — плоская волна, распространяющаяся со скоростью света c (при монохроматическом облучении), или волновой пакет (при импульсном облучении), то $k \simeq \omega/c$ и дополнительные вклады по сравнению с основными содержат малый множитель v/c, где v — скорость частиц в системе. Однако эта оценка не всегда верна в случае пространственно неоднородных систем, например полупроводниковых квантовых ям, проволок или точек. Поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ можно считать внешним или возбуждающим полем только в том случае, если вычислять плотности наведенного тока и заряда в низшем порядке по взаимодействию поля с системой заряженных частиц. Такое приближение допустимо в случае квантовых ям при условии [9,10] $\gamma_r \ll \gamma$, где $\gamma_r(\gamma)$ — обратное радиационное (нерадиационное) время жизни электронного возбуждения.

В противоположном случае $\gamma_r \gg \gamma$ необходимо учитывать взаимодействие поля с частицами во всех порядках, и тогда $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ — истинное поле в пределах объекта пониженной размерности. Это поле уже нельзя представить в виде суперпозиции плоских волн, для которых $k = \omega/c$. Например, истинное поле сильно меняется по величине в пределах квантовой ямы вдоль оси z, перпендикулярной плоскости ямы, если падающий свет направлен вдоль оси z, а частота ω находится в резонансе с одним из дискретных уровней возбуждения электронной системы в яме [11,12]. Тогда существенны величины $kd \simeq 1$, где d — ширина ямы; вместо малого множителя v/c появляется множитель порядка

$$M \simeq \frac{v}{d\omega} = \frac{v\lambda}{2\pi c d}.$$

Если длина волны $\lambda \gg d$, может оказаться, что новый множитель M гораздо больше v/c. В конкретных случаях следует оценивать его величину. В [11,12] предполагалось, что $M \ll 1$ и пренебрегалось дополнительными вкладами в средние значения наведенных плотностей тока и заряда (был рассмотрен случай $T = 0$).

Подставив полученные выражения для средних плотностей тока и заряда в уравнения Максвелла, в принципе можно определить истинные поля как внутри, так и вне полупроводниковых объектов пониженной размерности. Таким образом можно вычислить коэффициенты отражения и поглощения света этими объектами (см., например, [11,12]).

Авторы благодарны М. Харкинс за критическое прочтение статьи.

Список литературы

[1] R.J. Kubo. Phys. Soc. Jap. **12**, *6*, 570 (1957); Р. Кубо. Вопросы квантовой теории необратимых процессов. Сб. статей / Под ред. В.Л. Бонч-Бруевича. ИЛ, М. (1961).

[2] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория поля. Наука, М. (1973).

[3] S. Nakajima. Proc. Phys. Soc. **69**, 441 (1965).

[4] О.В. Константинов, В.И. Перель. ЖЭТФ **37**, *3*(*9*), 786 (1959).

[5] И.Г. Ланг, Л.И. Коровин, Х.А. Круз-Алказ. С.Т. Павлов. ЖЭТФ **123**, *2*, 305 (2003); Cond-mat / 0212549.

[6] R. Zeyher, H. Bilz, M. Cardona. Solid State Commun. **19**, *1*, 57 (1967).

[7] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Добросвет, М. (1998).

[8] R. Enderlien, K. Peuker, F. Bechstedt. Phys. Stat. Sol. (b) **92**, *1*, 149 (1979).

[9] L.C. Andreani, F. Tassone, F. Bassani. Solid State Commun. **77**, *11*, 641 (1991).

[10] L.C. Andreani, G. Panzarini, A.V. Kavokin, M.R. Vladimirova. Phys. Rev. B **57**, *8*, 4670 (1998).

[11] Л.И. Коровин, И.Г. Ланг, Д.А. Контрерас-Солорио, С.Т. Павлов. ФТТ **43**, *11*, 2091 (2001); Cond-mat / 0104263.

[12] Л.И. Коровин, И.Г. Ланг, Д.А. Контрерас-Солорио, С.Т. Павлов. ФТТ **44**, *11*, 2084 (2001); Cond-mat / 0203390.