ЖЭТФ, 2003, том 123, вып. 2, стр. 305–324 © 2003

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМ

И. Г. Ланг, Л. И. Коровин*

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

Х. А. де ла Круз-Алкас**

Facultad de Fisica de la UAZ, Apartado Postal C-580
98060 Zacatecas, Zac., Mexico

С. Т. Павлов***

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 марта 2002 г.

Построена квантовая теория электропроводности полупроводниковых объектов низкой размерности, к которым относятся квантовые ямы, проволоки и точки. Вычислены средние значения плотностей тока и заряда, наведенных слабым электромагнитным полем. Показано, что средние значения плотностей тока и заряда содержат два вклада, первый из которых выражается через электрическое поле, а второй — через производные от электрического поля по пространственным координатам. Выведены соответствующие выражения для зависящего от координат тензора электропроводности, применимые к любым пространственно-неоднородным системам. Полученные результаты могут быть использованы в теории вторичного излучения от объектов пониженной размерности в случаях монохроматического или импульсного облучения.

PACS: 78.47.+p, 78.66.-w

1. ВВЕДЕНИЕ

В связи с повышенным интересом к эксперименту и теории, касающимся отражения и поглощения света полупроводниковыми объектами пониженной размерности — квантовыми ямами, проволоками и точками — при импульсном световом возбуждении (см., например, [1, 2]), вновь возникает вопрос о том, какой вид взаимодействия электронов с электромагнитной волной удобнее использовать — содержащий векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ или электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$.

Работа [3] посвящена исследованию того же вопроса применительно к вычислению дифференциального сечения неупругого рассеяния света бесконечными кристаллами. В [3] показано,что точные выражения для сечений рассеяния (с использованием наборов точных волновых функций электронов в кристалле), полученные с использованием двух различных видов взаимодействия электронов с электромагнитной волной, совпадают. Но набор точных волновых функций электронов в кристалле (учитывающих точно, например, взаимодействие электронов с фононами) неизвестен, поэтому при вычислении сечений используются приближенные методы, а именно, учитывается взаимодействие с фононами в низшем порядке и принимаются во внимание далеко не все промежуточные состояния электронной системы. Если использовать эти приближения, то различные виды взаимодействия электронов со светом (содержащие $\mathbf{A}$ или $\mathbf{E}$) приведут к различающимся результатам. Авторы работы [3] утверждают, что в случае нерезонансного рассеяния использование вза-

*E-mail: korovin@mail.ioffe.ru
**J. A. de la Cruz-Alcaz
***E-mail: pavlov@sci.lpi.ac.ru

имодействия, содержащего $\mathbf{E}$, дает лучшие (более близкие к точным) результаты.

Мы предполагаем построить общую теорию вторичного излучения света низкоразмерными полупроводниковыми объектами, к числу которых относятся квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки. Прежде всего теория должна описывать отражение и поглощение света такими объектами, а также различные виды рассеяния света (рамановское, рэлеевское). Теория должна быть применима в случаях как монохроматического, так и импульсного облучения. Ограничиваемся линейным приближением по интенсивности возбуждающего света. Из сказанного выше следует, что решаются иные задачи, чем в [3], где рассматривается рассеяние света в объемных кристаллах. Поэтому вопрос о выборе вида взаимодействия (через $\mathbf{A}$ или $\mathbf{E}$) приходится решать заново.

В настоящей работе мы вычисляем средние значения наведенных электромагнитным полем плотностей тока и заряда в случае неоднородной среды. К этому случаю относятся полупроводниковые объекты пониженной размерности. Вычислив линейные по электрическому и магнитному полям вклады в средние значения плотностей тока и заряда, мы можем затем определить эти поля внутри и вне полупроводниковых объектов, решая уравнения Максвелла. Таким образом могут быть получены выражения для полей, соответствующих отраженному и прошедшему сквозь объект свету. Такая процедура, учитывающая все порядки взаимодействия электронов со светом, проделана в [4], где вычислены интенсивности отраженного и поглощенного света при монохроматическом облучении квантовой ямы конечной толщины. В настоящей работе мы выводим выражение для средней наведенной плотности тока, использованное в [4].

Оператор взаимодействия заряженных частиц с электрическим и магнитным полями выражается через векторный $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и скалярный $\varphi(\mathbf{r},t)$ потенциалы. Поэтому средние значения наведенных плотностей тока и заряда также выражаются через эти потенциалы. Однако пользоваться этими выражениями неудобно из-за вклада

$$-\frac{e}{mc}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle A_\alpha(\mathbf{r},t)$$

в среднюю плотность тока, где e и m — соответственно заряд и масса частицы, $\rho(\mathbf{r})$ — оператор плотности заряда (см. ниже разд. 4). Поэтому выразим средние значения плотностей тока и заряда через электрическое и магнитное поля. Это возможно, поскольку все наблюдаемые величины выражаются через значения электрического $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и магнитного $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ полей. Наша задача будет состоять в переходе от выражений для физических величин, содержащих потенциалы, к выражениям, содержащим поля $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$. В настоящей работе рассматриваем случай равной нулю температуры $T=0$.

Статья организована следующим образом. В разд. 2–4 изложена постановка задачи, введены операторы плотности тока и заряда и их средние значения по основному состоянию системы. В разд. 5–9 решается задача о выражении средних значений через электрическое поле и его пространственные производные. Раздел 10 посвящен исключению из выражений для средних величин диагональных матричных элементов операторов $\mathbf{r}_i$. В разд. 11 приведено общее выражение для тензора электропроводности неоднородной системы. В разд. 12 и 13 рассмотрен случай нулевого электрического и постоянного магнитного полей.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим систему N частиц с массой m и зарядом e 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:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\varphi,\\ \mathbf{H}(\mathbf{r},t) &= \operatorname{rot}\mathbf{A}.\end{aligned} \tag{1}$$

Поля будем считать классическими. Калибровка потенциалов $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и $\varphi(\mathbf{r},t)$ 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 $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r})$, так что

$$\mathbf{H}_c = \operatorname{rot}\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}).$$

Полный гамильтониан $\mathcal{H}_{tot}$ запишем в виде

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{tot} = \frac{1}{2m}\sum_i\left(\boldsymbol{\mathcal{P}}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}_i) - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_i,t)\right)^2 +\\ + V(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) + e\sum_i\varphi(\mathbf{r}_i,t),\end{aligned} \tag{2}$$

где $\boldsymbol{\mathcal{P}}_i = -i\hbar(\partial/\partial\mathbf{r}_i)$ — оператор обобщенного импульса [5, 6], $V(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)$ — потенциальная энергия, включающая взаимодействие между частицами и внешний потенциал. В (2) необходимо учитывать некоммутативность $\boldsymbol{\mathcal{P}}_i$ и $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}_i), \mathbf{A}(\mathbf{r}_i,t)$. Выделим в (2) энергию U взаимодействия частиц с электромагнитным полем, включив взаимодействие с сильным магнитным полем в основной гамильтониан:

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H} + U, \tag{3}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\sum_i \mathbf{p}_i^2 + V(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N),$$

$$\mathbf{p}_i = \boldsymbol{\mathcal{P}}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}_i), \tag{4}$$

где

$$U = U_1 + U_2, \tag{5}$$

$$U_1 = -\frac{1}{c}\int d^3r\,\mathbf{j}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \int d^3r\rho(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r},t),$$

$$U_2 = \frac{e}{2mc}\int d^3r\rho(\mathbf{r})\mathbf{A}^2(\mathbf{r},t)$$

и введены операторы плотностей тока и заряда:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \sum_i \mathbf{j}_i(\mathbf{r},t),$$

$$\mathbf{j}_i(\mathbf{r},t) = \frac{e}{2}\{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\}, \quad \mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m}, \tag{6}$$

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

Наша задача состоит в том, чтобы вычислить средние по основному состоянию системы наведенные плотности тока и заряда в линейном приближении по внешним полям $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПЕРАТОРОВ

В представлении Шредингера оператор плотности заряда $\rho(\mathbf{r})$ не содержит добавок, пропорциональных полям, но оператор плотности тока при включении полей приобретает вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) + \Delta\mathbf{j}(\mathbf{r}),$$

где

$$\Delta\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{e}{2}\sum_i\{\Delta\mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\Delta\mathbf{v}_i\}, \tag{7}$$

$$\Delta\mathbf{v}_i = \frac{i}{\hbar}[U,\mathbf{r}_i] = -\frac{e}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r}_i,t), \tag{8}$$

$[F,Q]$ — коммутатор операторов F и Q, и, следовательно,

$$\Delta\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r},t). \tag{9}$$

В представлении взаимодействия имеем

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r},t) &= e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\rho(\mathbf{r})e^{-i\mathcal{H}t/\hbar},\\ \mathbf{j}(\mathbf{r},t) &= e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\mathbf{j}(\mathbf{r})e^{-i\mathcal{H}t/\hbar},\\ \Delta\mathbf{j}(\mathbf{r},t) &= -\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r},t)\mathbf{A}(\mathbf{r},t).\end{aligned} \tag{10}$$

Теперь определим операторы плотности тока и заряда в представлении Гейзенберга. В [7, с. 82] показано,что связь между оператором $F(t)$ в представлении взаимодействия и оператором $F_G(t)$ в представлении Гейзенберга выражается формулой

$$F_G(t) = S^{-1}(t)F(t)S(t), \tag{11}$$

где S-матрица определена как

$$S(t) = S(t,-\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1 U(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{t} dt_2 U(t_2)\int_{-\infty}^{t_2} dt_1 U(t_1) + \ldots, \tag{12}$$

$$U(t) = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}Ue^{-i\mathcal{H}t/\hbar}.$$

Используя (12), находим, что линейные по потенциалам $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и $\varphi(\mathbf{r},t)$ добавки к операторам плотностей тока и заряда в представлении Гейзенберга равны

$$\begin{aligned}j_{1\alpha}(\mathbf{r},t) &= \Delta j_\alpha(\mathbf{r},t) - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t),U_1(t')],\\ \rho_1(\mathbf{r},t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'[\rho(\mathbf{r},t),U_1(t')].\end{aligned} \tag{13}$$

Индекс «1» означает первый порядок по потенциалам $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и $\varphi(\mathbf{r},t)$. Подставляя в последние выражения соотношения (9) и (5), получаем

$$\begin{aligned}j_{1\alpha}(\mathbf{r},t) = &-\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r},t)A_\alpha(\mathbf{r},t) + \\ &+\frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t),j_\beta(\mathbf{r}',t')]A_\beta(\mathbf{r}',t') - \\ &-\frac{i}{\hbar}\int d^3r'\int_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t),\rho(\mathbf{r}',t')]\varphi(\mathbf{r}',t'),\end{aligned} \tag{14}$$

$$\rho_1(\mathbf{r},t) = \\ = \frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' [\rho(\mathbf{r},t), j_\beta(\mathbf{r}',t')] A_\beta(\mathbf{r}',t') - \\ - \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' [\rho(\mathbf{r},t), \rho(\mathbf{r}',t')] \varphi(\mathbf{r}',t'). \quad (15)$$

4. УСРЕДНЕНИЕ ПО ОСНОВНОМУ СОСТОЯНИЮ СИСТЕМЫ

Рассмотрим случай нулевой температуры и усредним операторы (14), (15) по основному состоянию системы. Во всех дальнейших вычислениях будем предполагать, что на бесконечно удаленных расстояниях отсутствуют заряды и токи, а также то, что на временах $t \to -\infty$ поля $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ равны нулю, что соответствует адиабатическому включению этих полей. В [7, с. 84] показано, что при усреднении нужно использовать волновые функции $|0\rangle$ основного состояния без учета взаимодействия U. Для усредненных величин плотностей тока и заряда введем обозначения $\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$. В (14) и (15) проведем замену переменной интегрирования t' на $t'' = t' - t$. При усреднении $\langle 0|\ldots|0\rangle$ примем во внимание, что

$$\langle 0|\hat F(t)|0\rangle = \langle 0|e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\hat F e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}|0\rangle = \langle 0|\hat F|0\rangle, \quad (16)$$

где $\hat F$ — любой оператор. Получим

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle = -\frac{e}{mc}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle A_\alpha(\mathbf{r},t) + \frac{i}{\hbar c}\times \\ \times \int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \, \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}), j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle A_\beta(\mathbf{r}',t+t') - \\ -\frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \varphi(\mathbf{r}',t+t'), \quad (17)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle = \frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle A_\beta(\mathbf{r}',t+t') - \\ -\frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \langle 0|[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \varphi(\mathbf{r}',t+t'). \quad (18)$$

Таким образом, мы получили выражения для средних по основному состоянию плотностей тока и заряда через векторный и скалярный потенциалы. Но средние значения любых величин должны выражаться через измеряемые величины — поля $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ и их производные. Ниже выразим величины $\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ через поля.

5. ПРОИЗВОДНЫЕ ПО ВРЕМЕНИ ОТ СРЕДНИХ ПЛОТНОСТЕЙ ТОКА И ЗАРЯДА

Вычислим производные по времени от величин (17) и (18):

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_A + \\ + \frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_\varphi, \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_A + \\ + \frac{\partial}{\partial t}\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_\varphi, \quad (19)$$

где индексами A и φ обозначены вклады соответственно от векторного и скалярного потенциалов, равные

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_A = -\frac{e}{mc}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle \frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \\ + \frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}), j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \\ \times \frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}',t+t')}{\partial t}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_A = \frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \langle 0|[\rho(\mathbf{r}), j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}',t+t')}{\partial t}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_\varphi = -\frac{i}{\hbar}\int d^3r' \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), \rho(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}',t+t')}{\partial t}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_\varphi = -\frac{i}{\hbar}\int d^3r' \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \langle 0|[\rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}',t+t')}{\partial t}. \quad (23)$$

Преобразуем выражения (22) и (23), содержащие скалярный потенциал φ. Используем тождество

$$\frac{\partial\varphi(\mathbf{r},t+t')}{\partial t}=\frac{\partial\varphi(\mathbf{r},t+t')}{\partial t'},$$

затем выполним интегрирование по t' по частям. Получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_\varphi = =-\frac{i}{\hbar}\int d^3r'\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}),\rho(\mathbf{r}')]|0\rangle\varphi(\mathbf{r}',t)+\frac{i}{\hbar}\int d^3r' \times \times\int\limits_{-\infty}^{0} dt'\left\langle 0\left|\left[j_\alpha(\mathbf{r}),\frac{\partial\rho(\mathbf{r}',t')}{\partial t'}\right]\right|0\right\rangle\varphi(\mathbf{r}',t+t'). \quad (24)$$

В первом члене в правой части выражения (24) выполним интегрирование по $\mathbf{r}'$ и используем явный вид (6) операторов $j(\mathbf{r})$ и $\rho(\mathbf{r})$. Для вычисления второго члена используем уравнение непрерывности

$$\nabla\mathbf{j}(\mathbf{r},t)+\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t}=0, \quad (25)$$

которое справедливо для операторов, определенных в (10) с учетом постоянного магнитного поля $\mathbf{H}_c$. Далее в этом члене проводим интегрирование по r'_β по частям, перенося производную на скалярный потенциал $\varphi(\mathbf{r}',t+t')$. В итоге получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_\varphi=-\frac{e}{m}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle\frac{\partial\varphi(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}+ +\frac{i}{\hbar}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{0}dt'\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}),j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle\times \times\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}',t+t')}{\partial r'_\beta}. \quad (26)$$

Складывая (20) и (26) и используя (1), получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle=\frac{e}{m}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle E_\alpha(\mathbf{r},t)-\frac{i}{\hbar}\int d^3r'\times \times\int\limits_{-\infty}^{0}dt'\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}),j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle E_\alpha(\mathbf{r}',t+t'). \quad (27)$$

Совершенно аналогично получаем

$$\frac{\partial\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\int d^3r'\times \times\int\limits_{-\infty}^{0}dt'\langle 0|[\rho(\mathbf{r}),j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t+t'). \quad (28)$$

Итак, нам удалось выразить производные по времени от средних плотностей тока и заряда через электрические поля, избавившись от векторного и скалярного потенциалов.

6. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ПЛОТНОСТЕЙ ТОКА И ЗАРЯДА, ВЫРАЖЕННЫЕ ЧЕРЕЗ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ

Проинтегрировав (27) и (28) по времени, получим выражения для средних плотностей тока и заряда

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle=\int\limits_{-\infty}^{t}dt'\frac{\partial\langle 0|[j_{1,\alpha}(\mathbf{r},t')|0\rangle}{\partial t'}+C_\alpha, \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle=\int\limits_{-\infty}^{t}dt'\frac{\partial\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t')|0\rangle}{\partial t'}+C', \quad (29)$$

полагаем $C_\alpha=C'=0$, что соответствует отсутствию наведенных токов и зарядов на бесконечно удаленных в прошлое временах.

Введем обозначение

$$\mathbf{a}(\mathbf{r},t)=-c\int\limits_{-\infty}^{t}dt'\mathbf{E}(\mathbf{r},t'). \quad (30)$$

Тогда с помощью (27)–(29) получаем

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle=-\frac{e}{mc}\langle 0|\rho(\mathbf{r},t)|0\rangle a_\alpha(\mathbf{r},t)+ +\frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{t}dt'\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t),j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t'), \quad (31)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle=\frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\times \times\int\limits_{-\infty}^{t}dt'\langle 0|[\rho(\mathbf{r},t),j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle a_\beta(\mathbf{r}',t'). \quad (32)$$

Сравнивая выражения (31) и (32) с (17) и (18), видим, что вторые отличаются от первых отсутствием скалярного потенциала φ и заменой векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ на вектор $\mathbf{a}(\mathbf{r},t)$, определенный в (30). Таким образом, удалось выразить средние значения наведенных плотностей тока и заряда только через электрические поля. Однако без дальнейших преобразований выражения (31) и (32) неприменимы при переходе к не зависящему от времени электрическому полю, поскольку при интегрировании по t в (30) возникает неопределенность: частота ω, стоящая в знаменателе, обращается в нуль. Это относится и к случаю $\mathbf{E}=0$, $\mathbf{H}\neq 0$. Мы вернемся к этому вопросу в разд. 12.

7. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ВЫРАЖЕНИЙ ДЛЯ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ ПЛОТНОСТЕЙ ТОКА И ЗАРЯДА

Перейдем к выражениям, явно соответствующим взаимодействию электронов с полем вида

$$\tilde{U}_1 = -e\sum_i r_{i\beta}E_\beta(t), \tag{33}$$

который, например, используется в работе Кубо [8] для случая не зависящего от координат электрического поля $\mathbf{E}(t)$. Преобразуем выражения (31) и (32). Введем фиктивные операторы $\mathbf{j}_1^f(\mathbf{r},t)$ и $\rho_1^f(\mathbf{r},t)$, для которых выполняются соотношения

$$\begin{aligned}\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle &= \langle 0|j_{1\alpha}^f(\mathbf{r},t)|0\rangle,\\ \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle &= \langle 0|\rho_1^f(\mathbf{r},t)|0\rangle.\end{aligned} \tag{34}$$

Из (31), (32) получаем

$$j_{1\alpha}^f(\mathbf{r},t) = -\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r},t)a_\alpha(\mathbf{r},t) + \\ + \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t), j_\beta(\mathbf{r}',t')]a_\beta(\mathbf{r}',t'), \tag{35}$$

$$\rho_1^f(\mathbf{r},t) = \\ = \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int_{-\infty}^{t} dt'[\rho(\mathbf{r},t), j_\beta(\mathbf{r}',t')]a_\beta(\mathbf{r}',t'). \tag{36}$$

Сравнивая «фиктивные» операторы (35), (36) с настоящими операторами (14), (15), находим, что для перехода от настоящих к фиктивным операторам следует положить $\varphi(\mathbf{r},t) = 0$ и заменить векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ величиной $\mathbf{a}(\mathbf{r},t)$, определенной в (30).

Введем также фиктивный оператор взаимодействия частиц с полем,

$$U_1^f = -\frac{1}{c}\int d^3r\,\mathbf{j}(\mathbf{r})\mathbf{a}(\mathbf{r},t), \tag{37}$$

который отличается от оператора U_1, определенного в (5), условием $\varphi(\mathbf{r},t) = 0$ и заменой $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ на $\mathbf{a}(\mathbf{r},t)$. Взаимодействию (37) соответствует линейная по полю добавка к оператору плотности тока,

$$\Delta j_\alpha^f = -\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r})a_\alpha(\mathbf{r},t). \tag{38}$$

Легко увидеть, что (35) и (36) можно записать как

$$j_{1\alpha}^f(\mathbf{r},t) = \Delta j_\alpha^f(\mathbf{r},t) - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t), U_1^f(t')], \tag{39}$$

$$\rho_1^f(\mathbf{r},t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'[\rho(\mathbf{r},t), U_1^f(t')], \tag{40}$$

что аналогично (13) с заменой настоящих операторов на фиктивные. Преобразуем выражения (39), (40) так, чтобы убрать первый член в правой части (39). Интеграл вида

$$\int_{-\infty}^{t} dt'[F(\mathbf{r},t), U_1^f(t')]$$

из правых частей (39) и (40) можно переписать в виде

$$\int_{-\infty}^{t} dt'[F(\mathbf{r},t), \tilde{U}_1(t')] - [F(\mathbf{r},t), R(t)], \tag{41}$$

если

$$\tilde{U}_1 = U_1^f(t) + \frac{dR(t)}{dt}, \tag{42}$$

где $F(\mathbf{r},t)$ — оператор, для (39) равный $j_\alpha(\mathbf{r},t)$, а для (40) — $\rho(\mathbf{r},t)$, а $R(t)$ — произвольный оператор в представлении взаимодействия,

$$R(t) = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}R_{Sch}(\mathbf{r})e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}, \tag{43}$$

R_{Sch} — оператор в представлении Шредингера. Можно показать, что если

$$R_{Sch} = R_{Sch}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t), \tag{44}$$

т. е. оператор R_{Sch} не содержит импульсов, то выполняется соотношение

$$\frac{i}{\hbar}[j_\alpha(\mathbf{r},t), R(t)] = \Delta j_{R\alpha}(\mathbf{r},t), \tag{45}$$

где

$$\Delta j_{R\alpha}(\mathbf{r},t) = \frac{e}{2}e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\sum_i[\Delta v_{iR\alpha}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) + \\ + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\Delta v_{iR\alpha}]e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}, \tag{46}$$

$$\Delta v_{iR\alpha} = \frac{i}{\hbar}[\dot{R}_{Sch}, r_{i\alpha}], \tag{47}$$

$$\dot{R}_{Sch} = \frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, R_{Sch}] + \frac{\partial R_{Sch}}{\partial t}. \tag{48}$$

Также очевидно, что при условии (44)

$$[\rho(\mathbf{r},t), R(t)] = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}[\rho(\mathbf{r}), R_{Sch}]e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} = 0. \tag{49}$$

Таким образом, доказано, что вместо $U_1^f(t)$ можно выбрать любой оператор, определенный в (42), если R_{Sch} не содержит импульсов, и вместо (39) и (40) записать

$$j_{1\alpha}^f(\mathbf{r},t) = \Delta\tilde{j}_\alpha(\mathbf{r},t) - \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t),\tilde{U}_1(t')], \quad (50)$$

$$\rho_1^f(\mathbf{r},t) = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[\rho(\mathbf{r},t),\tilde{U}_1(t')], \quad (51)$$

где

$$\Delta\tilde{j}_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{e}{2}\sum_i[\Delta\tilde{v}_{i\alpha}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\Delta\tilde{v}_{i\alpha}], \quad (52)$$

$$\Delta\tilde{v}_{i\alpha} = \frac{i}{\hbar}[\tilde{U}_1, r_{i\alpha}]. \quad (53)$$

Подставив (42) и (52) в (50) и (51), получаем

$$j_{1\alpha}^f(\mathbf{r},t) = -\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r},t)a_\alpha(\mathbf{r},t) + \frac{i}{\hbar}[j_\alpha(\mathbf{r},t),R(t)] + \\ + \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t),j_\beta(\mathbf{r}',t')]a_\beta(\mathbf{r}',t') - \\ - \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\left[j_\alpha(\mathbf{r},t),\frac{dR(t')}{dt'}\right], \quad (54)$$

$$\rho_{1\alpha}^f(\mathbf{r},t) = \\ = \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[\rho(\mathbf{r},t),j_\beta(\mathbf{r}',t')]a_\beta(\mathbf{r}',t') - \\ - \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\left[\rho(\mathbf{r},t),\frac{dR(t')}{dt'}\right]. \quad (55)$$

8. ВЫБОР ОПЕРАТОРА R_{Sch}

Выберем оператор R_{Sch} в виде

$$R_{Sch} = \frac{e}{c}\sum_i r_{i\beta}a_\beta(\mathbf{r}_i,t). \quad (56)$$

Тогда

$$R(t) = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}R_{Sch}(\mathbf{r})e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} = \\ = \frac{1}{c}\int d^3r\, d_\beta(\mathbf{r},t)a_\beta(\mathbf{r},t), \quad (57)$$

где введено обозначение

$$\mathbf{d}(\mathbf{r}) = e\sum_i \mathbf{r}_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) = \\ = e\mathbf{r}\sum_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) = \mathbf{r}\rho(\mathbf{r}). \quad (58)$$

Вычислим вклады в правых частях выражений (54) и (55), содержащие $R(t)$ и $dR(t)/dt$. Можно показать, что

$$\frac{i}{\hbar}[j_\alpha(\mathbf{r},t),R(t)] = \frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r},t)a_\alpha(\mathbf{r},t) + \\ + \frac{e}{mc}d_\beta(\mathbf{r},t)\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}. \quad (59)$$

Также можно получить результат

$$\frac{dR(t)}{dt} = \frac{1}{c}\int d^3r\, d_\beta(\mathbf{r},t)\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \\ + \frac{1}{c}\int d^3r j_\beta(\mathbf{r},t)a_\beta(\mathbf{r},t) + \\ + \frac{1}{c}\int d^3r Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r},t)\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\gamma}, \quad (60)$$

где

$$Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}) = r_\beta j_\gamma(\mathbf{r}). \quad (61)$$

Подставляя (59) и (60) в правые части уравнений (54) и (55), находим, что сокращаются члены, не содержащие производных $\partial a_\beta(\mathbf{r},t)/\partial t$ или $\partial a_\beta(\mathbf{r},t)/\partial r_\alpha$. В итоге имеем

$$j_{1\alpha}^f = \frac{e}{mc}d_\beta(\mathbf{r},t)\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha} - \\ - \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t),d_\beta(\mathbf{r}',t')]\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial t'} - \\ - \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[j_\alpha(\mathbf{r},t),Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')] \times \\ \times \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}, \quad (62)$$

$$\rho_1^f(\mathbf{r},t) = \\ = -\frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[\rho(\mathbf{r},t),d_\beta(\mathbf{r}',t')]\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial t'} - \\ - \frac{i}{\hbar c}\int d^3r'\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[\rho(\mathbf{r},t),Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}. \quad (63)$$

Усреднив фиктивные операторы (62) и (63) по основному состоянию, получим искомые выражения для средних значений наведенных плотностей тока и заряда.

Учитывая определение (30), находим, что члены в правых частях выражений (62) и (63) делятся на две категории: к первой относятся те, которые содержат электрическое поле, ко второй — те, которые содержат производные от этого поля по координатам. Поэтому удобно записать средние значения от (62) и (63) как

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle = \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_E + \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r'}, \quad (64)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle = \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_E + \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r}, \quad (65)$$

где

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_E = \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \times \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), d_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \quad (66)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_E = \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \times \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), d_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \quad (67)$$

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r} = -\frac{e}{m}\langle 0|d_\beta(\mathbf{r})|0\rangle \times \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r},t')}{\partial r_\alpha} + \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \int\limits_{-\infty}^{t'} dt'' \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}',t'')}{\partial r'_\gamma}, \quad (68)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r} = \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), Y_{\alpha\beta}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \int\limits_{-\infty}^{t'} dt'' \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}',t'')}{\partial r'_\gamma}. \quad (69)$$

Итак, задача о выражении средних по основному состоянию системы плотностей тока и заряда в линейном приближении по величинам электрического поля и его производных по координатам решена.

9. ПРЕОБРАЗОВАННЫЙ ФИКТИВНЫЙ ОПЕРАТОР ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Для полноты картины определим вид фиктивного оператора взаимодействия $\tilde{U}_1 = U_1^f + \dot{R}_{Sch}$. Используя (37) и (60), в представлении Шредингера получаем

$$\tilde{U}_1 = \tilde{U}_{1E} + \tilde{U}_{1\partial E/\partial r}, \quad (70)$$

$$\tilde{U}_{1E} = -\int d^3r\, d_\beta(\mathbf{r}) E_\beta(\mathbf{r},t), \quad (71)$$

$$\tilde{U}_{1\partial E/\partial r} = -\int d^3r Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}) \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r},t')}{\partial r_\gamma}. \quad (72)$$

Выполнив интегрирование по $\mathbf{r}$ в правых частях (71) и (72), получаем

$$\tilde{U}_{1E} = -e\sum_i r_{i\beta} E_\beta(\mathbf{r}_i,t), \quad (73)$$

$$\tilde{U}_{1\partial E/\partial r} = -\frac{e}{4}\int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \sum_i \left\{ \left(v_{i\gamma}\frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t')}{\partial r_{i\gamma}} + \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t')}{\partial r_{i\gamma}} v_{i\gamma} \right) r_{i\beta} + r_{i\beta}\left(v_{i\gamma}\frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t')}{\partial r_{i\gamma}} + \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t')}{\partial r_{i\gamma}} v_{i\gamma} \right) \right\} = -\frac{e}{2}\int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \sum_i \left\{ v_{i\gamma}\frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t')}{\partial r_{i\gamma}} r_{i\beta} + r_{i\beta}\frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t')}{\partial r_{i\gamma}} v_{i\gamma} \right\}. \quad (74)$$

Таким образом, величина $\tilde{U}_{1E}$ содержит электрическое поле, а $\tilde{U}_{1\partial E/\partial r}$ — производные от электрического поля по координате и интеграл по времени. В случае, когда члены, содержащие производные от электрического поля по координатам, по каким-либо причинам дают малый вклад[1)], можно использовать

[1)] Строго говоря, из уравнений Масквелла следует, что если электрическое поле зависит от времени, то оно также зависит от координаты, т. е. производные от компонент поля по координатам отличны от нуля.

выражение (73). Оно совпадает с формулой для взаимодействия заряженных частиц с полем в работе [8] (см. также [9, 10]). Заметим, что выражение (70) для фиктивного взаимодействия $\tilde{U}_1$ можно записать в компактном виде:

$$\tilde{U}_1 = \frac{e}{2c}\sum_i \left\{ \frac{da_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{dt} r_{i\beta} + r_{i\beta}\frac{da_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{dt}\right\}, \tag{75}$$

где $da_\beta(\mathbf{r}_i,t)/dt$ — полная производная по времени,

$$\frac{da_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{dt} = \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, a_\beta(\mathbf{r}_i,t)], \tag{76}$$

причем

$$\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, a_\beta(\mathbf{r}_i,t)] = = \frac{1}{2}\left\{ v_{i\gamma}\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\gamma}} + \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\gamma}} v_{i\gamma}\right\}. \tag{77}$$

Взаимодействию (70) соответствует следующая линейная по полю добавка к скорости:

$$\Delta\tilde{v}_{i\alpha} = \frac{e}{mc} r_{i\beta}\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\alpha}}, \tag{78}$$

что соответствует, согласно (52), добавке к плотности тока

$$\Delta\tilde{j}_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{e}{mc} d_\beta(\mathbf{r})\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}. \tag{79}$$

Переходя к представлению взаимодействия, получаем первый член в правой части выражения (62).

10. ИСКЛЮЧЕНИЕ ДИАГОНАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ОПЕРАТОРОВ КООРДИНАТ ЧАСТИЦ

Вернемся к выражениям (64)–(69) для средних наведенных плотностей тока и заряда при $T = 0$, полученных в разд. 8. Учитывая определение (58) оператора $\mathbf{d}(\mathbf{r})$, а также определение (61) оператора $Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r})$, которое можно переписать как

$$Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_i (j_{i\gamma} r_{i\beta} + r_{i\beta} j_{i\gamma}), \tag{80}$$

видим, что эти операторы содержат координаты $\mathbf{r}_i$ частиц. Но величины средних значений $\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ не должны зависеть от положения точки отсчета координат $\mathbf{r}_i$. Преобразуем выражения (64)–(69) так, чтобы последнее свойство стало очевидным. Разобьем вектор $\mathbf{r}_i$ на две части:

$$\mathbf{r}_i = \bar{\mathbf{r}}_i + \langle 0|\mathbf{r}_i|0\rangle. \tag{81}$$

Очевидно, что матричные элементы оператора $\bar{\mathbf{r}}_i$, как диагональные, так и недиагональные, не меняются при изменении точки отсчета координат $\mathbf{r}_i$. Покажем, что в выражениях для средних значений $\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ операторы $\mathbf{r}_i$ могут быть заменены на $\bar{\mathbf{r}}_i$. Запишем среднее $\langle 0|j_1\alpha(\mathbf{r},t)|0\rangle$ в виде

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle = \overline{\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle} + + \sum_i \langle 0|r_{i\beta}|0\rangle x_{i\alpha\beta}(\mathbf{r},t), \tag{82}$$

где $\overline{\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle}$ — вклад операторов $\bar{\mathbf{r}}_i$,

$$x_{i\alpha\beta}(\mathbf{r},t) = \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), \rho_i(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \times E_\beta(\mathbf{r}',t') + \frac{e}{mc}\langle 0|\rho_i(\mathbf{r})|0\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha} - - \frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \int_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), j_{i\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \times \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}. \tag{83}$$

Выполнив в первом и третьем членах правой части выражения (83) интегрирование по $\mathbf{r}'$, получаем

$$x_{i\alpha\beta}(\mathbf{r},t) = -\frac{ie}{\hbar c}\int_{-\infty}^{t} dt' \left\langle 0 \left| \left[j_\alpha(\mathbf{r},t), \frac{da_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t')}{dt'}\right]\right| 0\right\rangle + + \frac{e}{mc}\langle 0|\rho_i(\mathbf{r})|0\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}, \tag{84}$$

где использовано обозначение для полной производной по времени:

$$\frac{da_\beta(\mathbf{r}_i(t),t)}{dt} = \frac{d}{dt}\left(e^{i\mathcal{H}t/\hbar} a_\beta(\mathbf{r}_i,t) e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}\right) = = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\frac{da_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{dt} e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}, \tag{85}$$

а производная $da_\beta(\mathbf{r}_i,t)/dt$ определена в (76). Выполнив в первом члене правой части выражения (84) интегрирование по t' и вычислив коммутатор $[j_\alpha(\mathbf{r}), a_\beta(\mathbf{r}_i,t)]$, получаем

$$x_{i\alpha\beta}(\mathbf{r},t) = 0, \tag{86}$$

откуда следует, что

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle = \overline{\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle}. \tag{87}$$

Аналогично можно получить

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle = \overline{\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle}. \qquad (88)$$

Разобьем выражения (87) и (88) на две части:

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle = \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}} + \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{II}}, \qquad (89)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle = \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}} + \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{II}}, \qquad (90)$$

где

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}} = \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), \bar{d}_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \qquad (91)$$

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{II}} = \frac{e}{mc}\langle 0|\bar{d}_\beta(\mathbf{r})|0\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha} - \frac{i}{c\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t)\bar{Y}_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}, \qquad (92)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}} = \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), \bar{d}_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle E_\beta(\mathbf{r}',t'), \qquad (93)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{II}} = -\frac{i}{\hbar c}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), \bar{Y}_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}, \qquad (94)$$

причем

$$\bar{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) = e\sum_i \bar{\mathbf{r}}_i \rho(\mathbf{r}), \qquad (95)$$

$$\bar{Y}_{\beta\gamma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_i (j_{i\gamma}\bar{r}_{i\beta} + \bar{r}_{i\beta}j_{i\gamma}). \qquad (96)$$

Результаты (89)–(94) являются основными в настоящей работе. Подчеркнем, что разбиения (89) и (90) средних величин на две части не совпадают с разбиениями (64) и (65).

Вклады с индексом I будем называть основными, так как они не исчезают в случаях электрического поля, не зависящего от координат $\mathbf{r}$. Вклады с индексом II содержат производные от электрического поля по координатам.

11. ТЕНЗОР ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ЗАВИСЯЩИЙ ОТ КООРДИНАТ

Рассмотрим сначала только основную часть наведенной плотности тока, обозначенную в (89) индексом I. Запишем (91) в виде

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}} = \int d^3r \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' l_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t') E_\beta(\mathbf{r}',t'), \qquad (97)$$

где

$$l_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t') = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), \bar{d}_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle, \qquad (98)$$

а θ — ступенчатая функция. Введем тензор

$$\sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{r}',t'|\mathbf{r},t) = l_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t'). \qquad (99)$$

Обозначение с вертикальной чертой мы позаимствовали из [11]. Тогда (97) можно переписать как

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}} = \int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' \times \sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{r}',t'|\mathbf{r},t) E_\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t'), \qquad (100)$$

где

$$\sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{r}',t'|\mathbf{r},t) = \frac{i}{\hbar}\theta(t')\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), \bar{d}_\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')]|0\rangle. \qquad (101)$$

Из (101) видно, что тензор $\sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{r}',t'|\mathbf{r},t)$ от t не зависит.

Теперь совершим преобразование Фурье. Запишем электрическое поле в виде

$$E_\alpha(\mathbf{r},t) = E_\alpha^{(+)}(\mathbf{r},t) + E_\alpha^{(-)}(\mathbf{r},t), \qquad (102)$$

где

$$E_\alpha^{(+)}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3k \int\limits_0^{\infty} d\omega E_\alpha(\mathbf{k},\omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}, \qquad (103)$$

$$E_\alpha^{(-)}(\mathbf{r},t) = (E_\alpha^{(+)}(\mathbf{r},t))^*, \qquad (104)$$

$$E_\alpha(\mathbf{k},\omega) = \int d^3r \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt E_\alpha(\mathbf{r},t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega t}. \qquad (105)$$

Введем фурье-образ тензора $\sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{r}',t'|\mathbf{r},0)$ по переменным $\mathbf{r}',t'$:

$$\sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{\infty} \sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{r}',t'|\mathbf{r},0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'+i\omega t}. \quad (106)$$

Тогда

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}} = \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}}^{(+)} + \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}}^{(-)}, \quad (107)$$

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}}^{(+)} = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3k \int\limits_0^{\infty} d\omega \times \sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) E_\beta(\mathbf{k},\omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}, \quad (108)$$

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}}^{(-)} = (\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\mathrm{I}}^{(+)})^*. \quad (109)$$

Подставляя (101) в (106), получаем

$$\sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t') e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'+i\omega t'} \times \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}), \bar{d}_\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}',-t')]|0\rangle. \quad (110)$$

Подобным способом находим вклад в электропроводность с индексом II. Окончательно получаем

$$\langle 0|j_\alpha(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3k \int\limits_0^{\infty} d\omega \times \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) E_\beta(\mathbf{k},\omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}, \quad (111)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) + \sigma_{\mathrm{II}\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}). \quad (112)$$

Величина $\sigma_{\mathrm{I}\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r})$ определена в (110),

$$\sigma_{\mathrm{II}\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \frac{ek_\alpha}{m\omega}\langle 0|\bar{d}_\beta(\mathbf{r})|0\rangle - \frac{ik_\gamma}{m\omega}\int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\theta(t') e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'+i\omega t'} \times \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}), \bar{Y}_{\beta\gamma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}',-t')]|0\rangle. \quad (113)$$

Тензор электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r})$ не зависит от координат $\mathbf{r}$ только в случае пространственно-однородной системы. При рассмотрении полупроводниковых объектов пониженной размерности зависимость тензора электропроводности от $\mathbf{r}$ весьма существенна.

В наших предыдущих работах [4, 12–14] использовалась формула (91) для вычисления наведенной плотности тока.

12. ПЕРЕХОД К ВЫРАЖЕНИЯМ, СОДЕРЖАЩИМ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ

До сих пор мы оставляли за рамками нашего рассмотрения случай, когда электрическое поле $\mathbf{E}$ не зависит от времени, в частности случай $\mathbf{E}=0$, $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)=\mathrm{const}$. Для того чтобы рассмотреть последний случай, преобразуем выражения для средних наведенных плотностей тока и заряда, полученные в конце разд. 8, введя в них магнитное поле $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$. Для этого каждую из величин $\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r}$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r}$, определенных соответственно в (68) и (69), разобьем на две части следующим образом[2)]:

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r} = \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} + \langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)}, \quad (114)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_{\partial E/\partial r} = \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} + \langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)}, \quad (115)$$

где

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(\pm)} = \frac{e}{2mc}\langle 0|d_\beta(\mathbf{r})|0\rangle \times \left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}_\alpha} \pm \frac{\partial a_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}_\beta}\right) - \frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\gamma} \pm \frac{\partial a_\gamma(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\beta}\right), \quad (116)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(\pm)} = -\frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\gamma} \pm \frac{\partial a_\gamma(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\beta}\right). \quad (117)$$

Сначала рассмотрим вклады со знаком «минус». Вернемся к векторному $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и скалярному $\varphi(\mathbf{r},t)$ потенциалам. Учитывая определение (30) вектора $\mathbf{a}(\mathbf{r},t)$ и первую из формул (1), получаем

$$\mathbf{a}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + c\int\limits_{-\infty}^{t} dt' \frac{\partial\varphi(\mathbf{r},t')}{\partial\mathbf{r}}. \quad (118)$$

[2)] Здесь верхние индексы «плюс» и «минус» не имеют никакого отношения к таким же индексам в разд. 11.

Подставив (118) в правые части выражений для $\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)}$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)}$, находим, что вклады от скалярного потенциала φ обращаются в нуль, и

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)} = \frac{e}{2mc}\langle 0|d_\beta(\mathbf{r})|0\rangle \times \left(\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}_\alpha} - \frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}_\beta}\right) - \frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \left(\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\gamma} - \frac{\partial A_\gamma(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\beta}\right), \quad (119)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)} = -\frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \left(\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\gamma} - \frac{\partial A_\gamma(\mathbf{r}',t')}{\partial \mathbf{r}'_\beta}\right). \quad (120)$$

Учитывая, что $\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ (второе равенство из (1)), легко получаем

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)} = -\frac{e}{2mc}[\mathbf{H}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{r}]_\alpha \langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle + \frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' [\mathbf{H}(\mathbf{r}',t')\times\mathbf{r}']_\beta \times \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle, \quad (121)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)} = \frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times [\mathbf{H}(\mathbf{r}',t')\times\mathbf{r}']_\beta \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), j_\beta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle. \quad (122)$$

Таким образом, величины $\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)}$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(-)}$ удалось выразить через магнитное поле.

Теперь преобразуем выражения (116) и (117) для вкладов с индексом «плюс». Действуем по следующей схеме. Рассмотрим, например, (116). В правую часть входит

$$Y_{\beta\gamma}(\mathbf{r}') = r'_\beta\, j_\gamma(\mathbf{r}'). \quad (123)$$

Для $j_\gamma(\mathbf{r})$ легко вывести соотношение

$$j_\gamma(\mathbf{r}) = \dot{d}_\gamma(\mathbf{r}) + \partial Y_{\gamma\delta}(\mathbf{r})/\partial r_\delta. \quad (124)$$

Подставим (123) и (124) во второй член правой части выражения (116), который в результате распадается на два вклада, происходящих от $\partial Y_{\gamma\delta}(\mathbf{r}')/\partial r'_\delta$ и $\dot{d}_\gamma(\mathbf{r})$. В первом вкладе интегрируем по частям по r'_δ, во втором — по переменной t' также по частям. В итоге получаем

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} = -\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} - \frac{e}{mc}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle r_\beta r_\gamma \frac{\partial^2 a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha \partial r_\gamma} + \frac{i}{\hbar c}\int d\mathbf{r}' r'_\beta r'_\gamma \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), j_\delta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \frac{\partial^2 a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma \partial r'_\delta} + \frac{i}{\hbar c}\int d\mathbf{r}' r'_\beta \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), d_\gamma(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \frac{\partial^2 a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma \partial t'}. \quad (125)$$

Используя соотношение

$$-c^{-1}\partial a_\beta(\mathbf{r},t)/\partial t = E_\beta(\mathbf{r},t),$$

из (125) окончательно получаем

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} = -\frac{e}{2mc}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle r_\beta r_\gamma \frac{\partial^2 a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha \partial r_\gamma} + \frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' r'_\beta r'_\gamma \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), j_\delta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \frac{\partial^2 a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma \partial r'_\delta} - \frac{i}{2\hbar}\int d\mathbf{r}' r'_\beta r'_\gamma \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), \rho(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma} \quad (126)$$

и аналогично

$$\langle 0|\rho(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} = \frac{i}{2\hbar c} \times \int d\mathbf{r}' r'_\beta r'_\gamma \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), j_\delta(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \times \frac{\partial^2 a_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma \partial r'_\delta} - \frac{i}{2\hbar}\int d\mathbf{r}' r'_\beta r'_\gamma \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \times \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), \rho(\mathbf{r}',t')]|0\rangle \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}',t')}{\partial r'_\gamma}. \quad (127)$$

Заметим, что в отличие от выражений (68) и (69), формулы (126) и (127) содержат только вторые производные от вектора $\mathbf{a}(\mathbf{r},t)$. Полученные результаты можно записать в симметричной форме:

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} = -\frac{e}{4mc}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle r_\beta r_\gamma \times \\ \times \frac{\partial}{\partial r_\alpha}\left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\gamma} + \frac{\partial a_\gamma(\mathbf{r},t)}{\partial r_\beta}\right) + \frac{i}{4\hbar c} \times \\ \times \int d\mathbf{r}' r'_\beta r'_\gamma \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},t), \Omega_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle, \quad (128)$$

$$\langle 0|\rho(\mathbf{r},t)|0\rangle^{(+)} = \frac{i}{4\hbar c}\int d\mathbf{r}' r'_\beta r'_\gamma \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[\rho(\mathbf{r},t), \Omega_{\beta\gamma}(\mathbf{r}',t')]|0\rangle, \quad (129)$$

где симметричный тензор

$$\Omega_{\beta\gamma}(\mathbf{r},t) = j_\delta(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial r_\delta}\left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\gamma} + \frac{\partial a_\gamma(\mathbf{r},t)}{\partial r_\beta}\right) + \\ + \rho(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial a_\beta(\mathbf{r},t)}{\partial r_\gamma} + \frac{\partial a_\gamma(\mathbf{r},t)}{\partial r_\beta}\right). \quad (130)$$

13. СЛУЧАЙ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Рассмотрим случай постоянного во времени и пространстве магнитного поля $\mathbf{H} = \mathrm{const}$, $\mathbf{E} = 0$. Напомним, что мы включили постоянное магнитное поле в невозмущенный гамильтониан $\mathcal{H}$ (см. разд. 2). Но здесь мы не включаем поле в основной гамильтониан, а считаем его настолько слабым, чтобы можно было ограничиться линейными по полю вкладами в наведенные плотности тока и заряда. Поскольку $\mathbf{E} = 0$, вклады в средние наведенные плотности с индексом E равны нулю (см. (66) и (67)). Вклады с индексами $\partial E/\partial r$ разбиваются на две части, которые мы обозначили верхними индексами «плюс» и «минус». Части с индексами «плюс» равны нулю. В этом легко убедиться, если выбрать векторный и скалярный потенциалы, например, в калибровке [5]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[\mathbf{r}\times\mathbf{H}], \quad \varphi = 0 \quad (131)$$

и использовать (118), (126) и (127).

Итак, остаются только вклады с индексами «минус», определенные в (121) и (122). Положив $\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \mathbf{H}$ и проведя замену переменной t' на $t'' = t' - t$, получаем результаты, не зависящие от времени t:

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_H = -\frac{e}{2mc}[\mathbf{H}\times\mathbf{r}]_\alpha\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle + \frac{i}{2\hbar c} \times \\ \times \int d\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{0} dt'' [\mathbf{H}\times\mathbf{r}']_\beta \langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r}), j_\beta(\mathbf{r}',t'')]|0\rangle, \quad (132)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_H = \frac{i}{2\hbar c}\int d\mathbf{r}' \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{0} dt'' [\mathbf{H}\times\mathbf{r}']_\beta \langle 0|[\rho(\mathbf{r}), j_\beta(\mathbf{r}',t'')]|0\rangle. \quad (133)$$

Индексы H в левых частях означают $\mathbf{H} = \mathrm{const}$, $\mathbf{E} = 0$. В полученных выражениях перейдем от операторов $\mathbf{r}_i$ к операторам $\bar{\mathbf{r}}_i$, определенным в (81). Способом, похожим на изложенный в разд. 10, получаем

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_H = -\frac{e}{2mc}[\mathbf{H}\times\langle 0|\bar{\mathbf{d}}(\mathbf{r})|0\rangle]_\alpha + \\ + \frac{ie}{2\hbar c}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \\ \times \sum_i \{\langle 0|[j_\alpha(\mathbf{r},-t'), [\mathbf{H}\times\bar{\mathbf{r}}_i]_\beta v_{i\beta}]|0\rangle, \quad (134)$$

$$\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_H = \frac{ie}{2\hbar c}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \\ \times \sum_i \{\langle 0|[\rho(\mathbf{r},-t'), [\mathbf{H}\times\bar{\mathbf{r}}_i]_\beta v_{i\beta}]|0\rangle. \quad (135)$$

Заметим, что выполняются соотношения

$$\mathrm{div}\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_H = 0,$$

$$\int d\mathbf{r}\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)|0\rangle_H = 0.$$

14. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем основные итоги. Поскольку оператор взаимодействия заряженных частиц с электромагнитным полем выражается через потенциалы $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и $\varphi(\mathbf{r},t)$, но не через электрические $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и магнитные $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ поля, первоначальные выражения для средних значений наведенных плотностей тока и заряда также выражаются через потенциалы (см. (17) и (18)). Но выражение (17) для плотности тока неудобно, так как содержит вклад, пропорциональный среднему значению $\langle 0|\rho(\mathbf{r},t)|0\rangle$ плотности заряда, и этот вклад отнюдь не мал.

Поэтому мы поставили задачу выразить наведенные плотности через поля $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$, что безусловно выполнимо, поскольку средние плотности тока и заряда есть наблюдаемые величины.

В результате были получены формулы (31) и (32), содержащие только электрическое поле. Однако выражение (31) имеет тот же недостаток, что и (17) — содержит вклад, пропорциональный $\langle 0|\rho(\mathbf{r},t)|0\rangle$.

Если использовать приближение, в котором электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ не зависит от координат, а зависит только от времени, то вклад, пропорциональный $\langle 0|\rho(\mathbf{r},t)|0\rangle$, можно удалить, если ввести в выражение для средней плотности тока операторы $\mathbf{r}_i$ координаты i-й частицы, воспользовавшись соотношением $\mathbf{v}_i = (i/\hbar)[\mathcal{H},\mathbf{r}_i]$. Этот прием по существу использован в [3], где обсуждается теория рассеяния света в объемных кристаллах. В Приложении А показано, как тот же прием позволяет исключить концентрацию заряженных частиц из формулы для электропроводности собственных объемных полупроводников при $T=0$.

Тот же результат получается, если в приближении $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\approx\mathbf{E}(t)$ записать взаимодействие частиц с полем в виде $-e\sum_i r_{i\beta}E_\beta(t)$, как это сделал Кубо [8].

Однако задача усложняется, если учесть зависимость электрического поля от координат. Мы поставили себе целью получить такое выражение для наведенной плотности тока, которое переходило бы в формулу Кубо при переходе от $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ к $\mathbf{E}(t)$, и аналогичные выражения для наведенной плотности заряда. Для случая $T=0$ эта задача решена в разд. 7–9.

Суть использованного приема состоит в следующем. Оператор взаимодействия частиц с полем, выраженный через электрическое и магнитное поля, не существует. Но мы вводим фиктивный оператор взаимодействия, который приводит к правильным результатам для средних по основному состоянию системы величин наведенных плотностей тока и заряда. Этот фиктивный оператор U_1^f (37) выражается только через электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$, стоящее под знаком интеграла по времени. Затем проведено такое преобразование взаимодействия $U_1^f\to\tilde{U}_1$, которое не меняет величины средних плотностей, но в результате которого из выражения для средней наведенной плотности тока удаляется вклад, содержащий $\langle 0|\rho(\mathbf{r},t)|0\rangle$. В результате получены выражения (64)–(69) для $\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$, в которых основные вклады содержат электрическое поле, а дополнительные — производные от $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ по координатам. Преобразованное фиктивное взаимодействие $\tilde{U}_1$ также делится на основную и дополнительную части. Первая равна $-e\sum_i r_{i\beta}E_\beta(\mathbf{r}_i,t)$, вторая содержит производные $\partial E_\alpha(\mathbf{r},t)/\partial\mathbf{r}_\beta$ под знаком интеграла по времени.

В разд. 10 выражения (64)–(69) для средних плотностей наведенных токов и зарядов преобразованы так, что явно не зависят от выбора начала отсчета координат $\mathbf{r}_i$ частиц. Это — основной результат настоящей работы. В разд. 11 получены выражения для тензора электропроводности $\sigma(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r})$, зависящего от координат, в случае пространственно-неоднородных систем.

В разд. 12 от выражений для $\langle 0|\mathbf{j}_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$ и $\langle 0|\rho_1(\mathbf{r},t)|0\rangle$, содержащих только электрическое поле и производные от него по координатам, мы перешли к выражениям, содержащим также магнитное поле $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$. Это необходимо для получения результатов в случае $\mathbf{H}=\mathrm{const}$, $\mathbf{E}=0$, который рассматривается в разд. 13. В Приложении Б получено выражение для оператора суммарного ускорения системы заряженных частиц. Ускорение обусловлено внешним слабым электромагнитным полем. Показано, что усредненное по основному состоянию системы суммарное ускорение может быть выражено через величины электрического и магнитного полей. В случае свободных частиц полученный результат переходит к правильному пределу, содержащему силу, обусловленную электрическим полем, и силу Лоренца.

Работа частично поддержана РФФИ (грант № 00-02-16904), Программой МНТК «Физика полупроводниковых наноструктур» и Федеральной программой «Интеграция».

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Три выражения для тензора электропроводности в случае пространственно-однородной среды и не зависящего от координат электрического поля

Исходя из формулы (31) для средней плотности наведенного тока и учитывая следующую связь между фурье-компонентами:

$$\mathbf{a}(\mathbf{k},\omega)=(ic/\omega)\mathbf{E}(\mathbf{k},\omega), \tag{A.1}$$

вытекающую из определения (30), получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r}) = \frac{ie}{m\omega}\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{\hbar\omega}\int d\mathbf{r}'\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' \times$$
$$\times\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'+i\omega t'}\theta(t')\langle 0|j_\alpha(\mathbf{r}), j_\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}',-t')|0\rangle. \quad (\text{A.2})$$

В случае пространственно-однородной системы тензор $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega|\mathbf{r})$ не зависит от $\mathbf{r}$. В первом члене используем соотношение

$$\langle 0|\rho(\mathbf{r})|0\rangle = en, \quad (\text{A.3})$$

где n — концентрация заряженных частиц, во втором члене проинтегрируем по $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ и разделим результат на нормировочный объем V_0. Получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) = \frac{ie^2 n}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{4m^2\hbar\omega V_0}\sum_{i,j}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,\theta(t)e^{i\omega t}\times$$
$$\times\left\langle 0\left|\left[\left\{e^{i\mathcal{H}t/\hbar}(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}p_{i\alpha} + p_{i\alpha}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i})e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}\right\},\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}p_{j\beta} + p_{i\beta}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j})\right]\right|0\right\rangle, \quad (\text{A.4})$$

где $\mathbf{p}_i$ — оператор импульса, определенный в (4) с учетом постоянного сильного магнитного поля.

В случае электрического поля $\mathbf{E}(t)$, не зависящего от координат, вводим частотное представление

$$E_\alpha(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt E_\alpha(t)e^{i\omega t}, \quad (\text{A.5})$$

причем

$$E_\alpha(\mathbf{k},\omega) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{k})E_\alpha(\omega). \quad (\text{A.6})$$

Введем также электропроводность $\sigma_{\alpha\beta}(\omega|\mathbf{r})$, входящую в определение средней плотности тока

$$\langle 0|j_{1\alpha}(\mathbf{r},t)|0\rangle_h^{(+)} =$$
$$= \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{\infty} d\omega\sigma_{\alpha\beta}(\omega|\mathbf{r})E_\alpha(\omega)e^{-i\omega t}, \quad (\text{A.7})$$

где индекс h означает однородное в пространстве электрическое поле.

Используя результаты, полученные в разд. 11, легко показать, что

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega|\mathbf{r}) = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}=0,\omega|\mathbf{r}). \quad (\text{A.8})$$

Из (A.4) и (A.8) в случае пространственно-однородной среды и поля $\mathbf{E}(t)$ получаем

$$\sigma^{\mathrm{I}}_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{ie^2 n}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} +$$
$$+ \frac{e^2}{\hbar\omega V_0}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,\theta(t)e^{i\omega t}\langle 0|[V_\alpha(t),V_\beta]|\rangle, \quad (\text{A.9})$$

где $V_\alpha = (1/m)\sum_i p_{i\alpha}$ — оператор суммарной скорости заряженных частиц. Формула (A.9) является первой для тензора электропроводности. Для получения двух других используем соотношение

$$V_\alpha = (i/\hbar)[\mathcal{H}, R_\alpha], \quad (\text{A.10})$$

где $R_\alpha = \sum_i r_{i\alpha}$. Подставив (A.10) в (A.8), получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{ie^2 n}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{\hbar\omega V_0}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,\theta(t)\times$$
$$\times\, e^{i\omega t}\frac{d}{dt}\langle 0|[R_\alpha(t),V_\beta]|0\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Выполним интегрирование по t по частям. При $t\to\infty$

$$\theta(t)e^{i\omega t}\frac{d}{dt}\langle 0|[R_\alpha(t),V_\beta]|0\rangle \to 0$$

при замене ω на $\omega + i\delta$, $\delta\to 0$. Учтем также, что $d\theta(t)/dt = \delta(t)$ и

$$(1/V_0)[R_\alpha, V_\beta] = (i\hbar n/m)\delta_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.12})$$

Тогда получим

$$\sigma^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta}(\omega) =$$
$$= -\frac{ie}{\hbar V_0}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,\theta(t)e^{i\omega t}\langle 0|[D_\alpha(t),V_\beta]|0\rangle, \quad (\text{A.13})$$

где введено обозначение

$$\mathbf{D} = e\mathbf{R}. \quad (\text{A.14})$$

Формула (A.13) является вторым выражением для тензора электропроводности. Подчеркнем, что при переходе от (A.9) к (A.13) произошло сокращение первого члена из правой части (A.9), содержащего концентрацию n.

При переходе к третьему выражению используем (A.10) для оператора V_β из правой части выражения (A.13). Далее действуем по той же схеме, что и при переходе от (A.9) к (A.13). Учитывая, что коммутатор $[D_\alpha, D_\beta] = 0$, получаем третью формулу:

$$\sigma^{\mathrm{III}}_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\omega}{\hbar V_0}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,\theta(t)e^{i\omega t}\langle 0|[D_\alpha(t),D_\beta]|0\rangle. \quad (\text{A.15})$$

Для разных систем удобно применять какую-либо из формул (А.9), (А.13) и (А.15).

Для свободных частиц, когда $V(\mathbf{r}_1,\ldots\mathbf{r}_N)=0$, $\mathbf{H}_c=0$, оператор скорости $\mathbf{V}$ коммутирует с гамильтонианом $\mathcal{H}_{free}=m\sum_i v_i^2$. Используем (А.9), учитывая, что $V_\alpha(t)=V_\alpha$, $[V_\alpha,V_\beta]=0$, и получаем известный результат

$$\sigma_{\alpha\beta\,free}(\omega)=\frac{ie^2n}{m\omega}\delta_{\alpha\beta}. \qquad (\text{А.16})$$

В случае, когда возбужденные состояния отделены от основного состояния щелью, т. е. энергия этих состояний $E_n=\hbar\omega_n\neq 0$, удобнее использовать (А.13) или (А.15). Используя точные волновые функции $|n\rangle$ возбужденных состояний и вычисляя интеграл по времени, выразим (А.15) через матричные элементы оператора $\mathbf{D}$:

$$\sigma^{\rm III}_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{i\omega}{\hbar V_0}\sum_n\left\{\frac{\langle 0|D_\alpha|n\rangle\langle n|D_\beta|0\rangle}{\omega-\omega_n}-\right.$$
$$\left.-\frac{\langle 0|D_\beta|n\rangle\langle n|D_\alpha|0\rangle}{\omega+\omega_n}\right\}, \qquad (\text{А.17})$$

откуда следует, что при $\omega\to 0$ для систем со щелью $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)\to 0$ (случай сверхпроводимости не рассматривается). К числу систем со щелью в энергетическом спектре относятся объемные полупроводники без примесей и дефектов.

Тензор электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ связан с тензором диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)$ известным соотношением

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)=\delta_{\alpha\beta}+4\pi\chi_{\alpha\beta}(\omega),$$
$$\chi_{\alpha\beta}(\omega)=(i/\omega)\sigma_{\alpha\beta}(\omega),$$

так что из (А.17) получаем

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{1}{\hbar V_0}\sum_n\left\{\frac{\langle 0|D_\alpha|n\rangle\langle n|D_\beta|0\rangle}{\omega_n-\omega}+\right.$$
$$\left.+\frac{\langle 0|D_\beta|n\rangle\langle n|D_\alpha|0\rangle}{\omega_n+\omega}\right\}. \qquad (\text{А.18})$$

Используя соотношения между матричными элементами

$$\langle 0|D_\alpha|n\rangle=(i\,e/\omega_n)\langle 0|V_\alpha|n\rangle,$$
$$\langle n|D_\alpha|0\rangle=-(i\,e/\omega_n)\langle n|V_\alpha|0\rangle,$$

из (А.18) находим

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{e^2}{\hbar V_0}\sum_n\frac{1}{\omega_n^2}\left\{\frac{\langle 0|V_\alpha|n\rangle\langle n|V_\beta|0\rangle}{\omega_n-\omega}+\right.$$
$$\left.+\frac{\langle 0|V_\beta|n\rangle\langle n|V_\alpha|0\rangle}{\omega_n+\omega}\right\}. \qquad (\text{А.19})$$

Если $\omega\ll\omega_n$, то величина $\chi_{\alpha\beta}$ вещественна и не зависит от частоты ω, но при $\omega\approx\omega_n$ эта зависимость становится сильной и появляется отличная от нуля мнимая часть тензора $\chi_{\alpha\beta}$, определяющая резонансное поглощение света на частотах $\omega\approx\omega_n$. Для вычисления мнимой части необходимо заменить частоту ω на $\omega+i\delta$, $\delta\to 0$, считая включение поля адиабатическим, или учесть конечное время жизни системы в состоянии n.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Ускорение системы частиц

Для получения оператора $\mathbf{J}_1(t)$ наведенного тока системы частиц используем формулу (14), содержащую векторный и скалярный потенциалы. Выполнив интегрирование по $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, получаем

$$J_{1\alpha}(t)=-\frac{e^2}{mc}\sum_i A_\alpha(\mathbf{r}_i(t),t)+$$
$$+\frac{ie}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t}dt'\left[U_1(t'),\sum_i v_{i\alpha}(t)\right], \qquad (\text{Б.1})$$

где использовано обозначение

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}_i(t),t)=e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{r}_i,t)e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}.$$

Продифференцировав (Б.1) по времени и разделив на e, получим оператор $\mathbf{W}_1(t)$ наведенного суммарного ускорения:

$$W_{1\alpha}(t)=-\frac{e}{mc}\frac{d}{dt}\sum_i A_\alpha(\mathbf{r}_i(t),t)+$$
$$+\frac{i}{\hbar}\left[U_1(t),\sum_i v_{i\alpha}(t)\right]+$$
$$+\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t}dt'[U_1(t'),W_\alpha(t)], \qquad (\text{Б.2})$$

где $W_\alpha(t) = \sum_i w_{i\alpha}(t)$, $w_{i\alpha}(t) = dv_{i\alpha}(t)/dt$. Расшифровка первых двух членов дает

$$W_{1\alpha}(t) = -\frac{e}{mc}\sum_i \frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial t} - \\ - \frac{e}{m}\sum_i \frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial \mathbf{r}_{i\alpha}(t)} + \\ + \frac{e}{2mc}\sum_i \left\{ v_{i\alpha}(t)\left(\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial \mathbf{r}_{i\alpha}(t)} - \frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial \mathbf{r}_{i\beta}(t)}\right) + \\ + \left(\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial \mathbf{r}_{i\alpha}(t)} - \frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial \mathbf{r}_{i\beta}(t)}\right) v_{i\alpha}(t)\right\} - \\ - \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \sum_i [\mathbf{A}(\mathbf{r}_i(t),t)\times\mathbf{H}_c]_\alpha + \\ + \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[U_1(t'), W_\alpha(t)], \quad (\text{Б.3})$$

где использованы обозначения

$$\frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial t} = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i,t)}{\partial t}e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}, \\ \frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i(t),t)}{\partial \mathbf{r}_{i\alpha}(t)} = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i,t)}{\partial \mathbf{r}_{i\alpha}}e^{-i\mathcal{H}t/\hbar},$$

$\mathbf{H}_c$ — постоянное сильное магнитное поле, включенное в основной гамильтониан $\mathcal{H}$. При переходе от (Б.2) к (Б.3) использовано соотношение $\mathbf{v}_i\times\mathbf{v}_i = (i\hbar e/m^2c)\mathbf{H}_c$, причем левая часть не равна нулю из-за некоммутативности различных проекций оператора скорости, например

$$[\mathbf{v}_i\times\mathbf{v}_i]_z = [v_{ix}, v_{iy}] = (i\hbar e/m^2c)H_{cz}. \quad (\text{Б.4})$$

Оператор $\mathbf{w}_i(t)$ ускорения i-й частицы равен

$$w_{i\alpha} = \frac{i}{\hbar}e^{i\mathcal{H}t/\hbar}[\mathcal{H}, v_{i\alpha}]e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} = \\ = -\frac{1}{m}e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\frac{\partial V(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)}{\partial r_{i\alpha}}e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} + \\ + \frac{e[\mathbf{v}_i(t)\times\mathbf{H}_c]_\alpha}{mc}. \quad (\text{Б.5})$$

С помощью (1) легко видеть, что выражение в фигурных скобках в (Б.3) равно

$$e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\{[\mathbf{v}_i\times\mathbf{H}(\mathbf{r}_i,t)]_\alpha - [\mathbf{H}(\mathbf{r}_i,t)\times\mathbf{v}_i]_\alpha\}e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}.$$

Поэтому выражение (Б.3) преобразуется к виду

$$\mathbf{W}_1(t) = \frac{e}{m}\sum_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i(t),t) + \\ + \frac{e}{2mc}\sum_i\{\mathbf{v}_i(t)\times\mathbf{H}(\mathbf{r}_i(t),t) - \mathbf{H}_i(\mathbf{r}_i(t),t)\times\mathbf{v}_i(t)\} - \\ - \left(\frac{e}{mc}\right)^2\sum_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i(t),t)\times\mathbf{H}_c + \\ + \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[U_1(t'), \mathbf{W}(t)]. \quad (\text{Б.6})$$

Очевидно, что второй член соответствует силе Лоренца, при записи которой учтена некоммутативность операторов $\mathbf{v}_i$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i,t)$. Третий член, обусловленный $\mathbf{H}_c$, содержит добавку $\Delta\mathbf{v}_i$ к скорости, определенную в (8) и наведенную слабым электромагнитным полем.

В случае свободных частиц

$$\mathbf{H}_c = 0, \quad V(\mathbf{r}_1,\ldots\mathbf{r}_N) = 0, \quad \mathbf{W} = 0, \quad (\text{Б.7})$$

и в правой части выражения (Б.6) сохраняются только два первых члена, содержащих слабые электрическое и магнитное поля.

Но если частицы несвободны, то оператор (Б.6) не удается выразить только через поля, поскольку два последних члена содержат векторный и скалярный потенциалы. Среднее значение $\langle 0|\mathbf{W}_1(t)|0\rangle$ наведенного ускорения должно выражаться только через поля, что мы сейчас докажем. Для этого вычислим величину $\langle 0|\mathbf{W}_1(t)|0\rangle$ другим способом, а затем проверим, что оба способа дают совпадающие результаты. Воспользуемся выражением (27) и проинтегрируем обе его части по $\mathbf{r}$. Получаем

$$\langle 0|W_{1\alpha}(t)|0\rangle = \frac{e}{m}\sum_i\langle 0|E_\alpha(\mathbf{r}_i,t)|0\rangle - \frac{ie}{2\hbar}\times \\ \times\int\limits_{-\infty}^{0} dt'\left\langle 0\left|\left[\sum_j v_{j\beta}, \sum_i\{v_{i\beta}(t')E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t') + \right.\right.\right. \\ \left.\left.\left. + E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t')v_{j\beta}(t')\}\right]\right|0\right\rangle. \quad (\text{Б.8})$$

Это выражение содержит только электрические поля. С другой стороны, усреднив оператор (Б.6), получаем

$$\langle 0|W_{1\alpha}(t)|0\rangle = \frac{e}{m}\sum_i \langle 0|E_\alpha(\mathbf{r}_i,t)|0\rangle + \\ + \frac{e}{2mc}\sum_i \langle 0|[\mathbf{v}_i\times\mathbf{H}(\mathbf{r}_i,t)]_\alpha - [\mathbf{H}(\mathbf{r}_i,t)\times\mathbf{v}_i]_\alpha|0\rangle - \\ - \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \sum_i \langle 0|[\mathbf{A}(\mathbf{r}_i,t)\times\mathbf{H}_c]_\alpha|0\rangle + C_\alpha(t), \quad (\text{Б.9})$$

где

$$C_\alpha(t) = \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt' \langle 0|[U_1(t'), W_\alpha(t)]|0\rangle. \quad (\text{Б.10})$$

Преобразуем (Б.10). Интегрируя по частям, получаем

$$C_\alpha(t) = C_\alpha^1(t) + C_\alpha^2(t), \quad (\text{Б.11})$$

$$C_\alpha^1(t) = -\frac{i}{\hbar}\left\langle 0\left|\left[U_1, \sum_i v_{i\alpha}\right]\right|0\right\rangle, \quad (\text{Б.12})$$

$$C_\alpha^2(t) = \\ = \frac{i}{\hbar}\frac{d}{dt}\int\limits_{-\infty}^{t} dt' \left\langle 0\left|\left[U_1(t'), \sum_i v_{i\alpha}(t)\right]\right|0\right\rangle. \quad (\text{Б.13})$$

В правую часть выражения (Б.12) подставим выражение (5) для U_1 и вычислим коммутатор. Получаем

$$C_\alpha^1(t) = \frac{e}{m}\sum_i \left\langle 0\left|\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\alpha}}\right|0\right\rangle + \\ + \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \sum_i \langle 0|[\mathbf{A}(\mathbf{r}_i,t)\times\mathbf{H}_c]_\alpha|0\rangle - \frac{e}{2mc}\times \\ \times \sum_i \left\langle 0\left| v_{i\beta}\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\alpha}} + \frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\alpha}} v_{i\beta}\right|0\right\rangle. \quad (\text{Б.14})$$

В (Б.13) в интеграле переходим к $t'' = t - t'$ и разбиваем интеграл на две части, первая из которых содержит векторный потенциал, а вторая — скалярный:

$$C_\alpha^2(t) = C_{A\alpha}^2(t) + C_{\varphi\alpha}^2(t), \quad (\text{Б.15})$$

$$C_{A\alpha}^2(t) = \frac{ie}{2c\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \\ \times \left\langle 0\left|\left[\sum_j v_{j\alpha},\ \sum_i\left\{v_{i\beta}(t')\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t')}{\partial t} + \right.\right.\right.\right. \\ \left.\left.\left.\left. + \frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t')}{\partial t} v_{i\beta}(t')\right\}\right]\right|0\right\rangle, \quad (\text{Б.16})$$

$$C_{\varphi\alpha}^2(t) = -\frac{ie}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \\ \times \left\langle 0\left|\left[\sum_j v_{j\alpha}, \sum_i \frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i(t'),t+t')}{\partial t}\right]\right|0\right\rangle. \quad (\text{Б.17})$$

Выражение (Б.16) оставим пока без изменений, а в (Б.17) используем соотношение

$$\partial\varphi(\mathbf{r}_i(t'),t+t')/\partial t = e^{i\mathcal{H}t'/\hbar}\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial t}e^{-i\mathcal{H}t'/\hbar} = \\ = e^{i\mathcal{H}t'/\hbar}\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial t'}e^{-i\mathcal{H}t'/\hbar}.$$

Затем интегрируем по частям по t' и получаем

$$C_{\varphi\alpha}^2(t) = -\frac{ie}{\hbar}\sum_i \langle 0|[v_{i\alpha},\varphi(\mathbf{r}_i,t)]|0\rangle - \frac{e}{\hbar^2}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \\ \times \left\langle 0\left|\left[\sum_j v_{j\alpha}, e^{i\mathcal{H}t'/\hbar}\times\right.\right.\right. \\ \left.\left.\left. \times \sum_i [\mathcal{H},\varphi(\mathbf{r}_i,t+t')]e^{-i\mathcal{H}t'/\hbar}\right]\right|0\right\rangle. \quad (\text{Б.18})$$

Коммутатор в первом члене вычисляем, а для преобразования второго члена замечаем, что

$$\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H},\varphi(\mathbf{r}_i,t)] = \\ = \frac{1}{2}\left(v_{i\beta}\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}} + \frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}}v_{i\beta}\right). \quad (\text{Б.19})$$

Подставив (Б.19) в (Б.18), получаем

$$C_{\varphi\alpha}^2(t) = -\frac{e}{m}\sum_i\left\langle 0\left|\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\alpha}}\right|0\right\rangle + \frac{ie}{2\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \\ \times \left\langle 0\left|\left[\sum_j v_{j\alpha}, \sum_i\left\{v_{i\beta}(t')\ \frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i(t'),t+t')}{\partial r_{i\beta}(t')} + \right.\right.\right.\right. \\ \left.\left.\left.\left. + \ \frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_i(t'),t+t')}{\partial r_{i\beta}(t')}v_{i\beta}(t')\right\}\right]\right|0\right\rangle. \quad (\text{Б.20})$$

Складывая (Б.14), (Б.16) и (Б.20), получаем окончательно

$$C_\alpha(t) = = -\frac{e}{2mc}\left\langle 0\left| v_{i\beta}\frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\alpha}} + \frac{\partial A_\beta(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\alpha}} v_{i\beta}\right| 0\right\rangle + + \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \sum_i \langle 0|[\mathbf{A}(\mathbf{r}_i,t)\times\mathbf{H}_c]_\alpha|0\rangle - \frac{ie}{2\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \times\left\langle 0\left|\left[\sum_j v_{j\alpha}, \sum_i \{v_{i\beta}(t')E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t') + + E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t')v_{i\beta}(t')\}\right]\right| 0\right\rangle. \quad (\text{Б.21})$$

Подставив (Б.21) в (Б.9), получаем

$$\langle 0|W_{1\alpha}|0\rangle = \frac{e}{m}\sum_i \langle 0|E_\alpha(\mathbf{r}_i,t)|0\rangle - -\frac{ie}{2\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \left\langle 0\right|\left[\sum_j v_{j\alpha},\ \sum_i \{v_{i\beta}(t')E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t') + + E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t')v_{i\beta}(t')\}\right]|0\rangle - \frac{e}{2mc}\times \times\sum_i\left\langle 0\left| v_{i\beta}\frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}} + \frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}} v_{i\beta}\right| 0\right\rangle. \quad (\text{Б.22})$$

Это выражение совпадает с формулой (Б.8) за исключением последнего члена в правой части выражения (Б.22). Но можно показать, что этот член равен нулю. Действительно,

$$\frac{1}{2}\langle 0|v_{i\beta}\frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}} + \frac{\partial A_\alpha(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}}v_{i\beta}|0\rangle = = \frac{i}{\hbar}\langle 0|[\mathcal{H}, A_\alpha(\mathbf{r}_i,t)]|0\rangle = 0, \quad (\text{Б.23})$$

поскольку оператор $\mathcal{H}$ имеет только диагональные матричные элементы $\langle 0|\mathcal{H}|0\rangle$. Итак, мы проверили, что результаты (Б.8) и (Б.9), полученные разными способами, совпадают.

Рассмотрим случай свободных частиц, когда выполняются условия (Б.7). Тогда $C_\alpha(t) = 0$, предпоследний член в правой части выражения (Б.9) также равен нулю. Сравнивая (Б.8) и (Б.4), находим, что для средней силы Лоренца должно выполняться соотношение

$$\frac{e}{2c}\langle 0|[\mathbf{v}_i\times\mathbf{H}(\mathbf{r}_i,t)]_\alpha - [\mathbf{H}(\mathbf{r}_i,t)\times\mathbf{v}_i]_\alpha|0\rangle_{free} = = -\frac{iem}{2\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \times \times\left\langle 0\right|\left[\sum_j v_{j\alpha}, \sum_i \{v_{i\beta}(t')E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t') + + E_\beta(\mathbf{r}_i(t'),t+t')v_{i\beta}(t')\}\right]\left| 0\right\rangle_{free}, \quad (\text{Б.24})$$

где индекс «$free$» означает выполнение условий (Б.7). Проверим (Б.24) прямым расчетом, преобразуя правую часть. Поскольку

$$\mathcal{H}_{free} = \frac{m}{2}\sum_i v_i^2, v_{j\alpha}$$

коммутирует с $\mathcal{H}_{free}$, можно записать

$$v_{j\alpha} = e^{i\mathcal{H}_{free}t'/\hbar}v_{j\alpha}e^{-i\mathcal{H}_{free}t'/\hbar} = v_{j\alpha}(t'),$$

после чего «окаймление»

$$\exp(i\mathcal{H}_{free}t'/\hbar)\cdots - \exp(-i\mathcal{H}_{free}t'/\hbar)$$

из правой части (Б.24) удаляется. Правую часть выражения (Б.24) обозначим $\Psi_\alpha(t)$, и после вычисления коммутатора она оказывается равной

$$\Psi_\alpha(t) = -\frac{e}{2}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \sum_i \left\langle 0\left| v_{i\beta}\frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial r_{i\alpha}} + + \frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial r_{i\alpha}}v_{i\beta}\right| 0\right\rangle. \quad (\text{Б.25})$$

Заметим, что выполняется равенство

$$\frac{1}{2}\left\langle 0\left| v_{i\beta}\frac{\partial E_\alpha(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}} + \frac{\partial E_\alpha(\mathbf{r}_i,t)}{\partial r_{i\beta}}v_{i\beta}\right| 0\right\rangle = = (i/\hbar)\langle 0|[\mathcal{H}, E_\alpha(\mathbf{r}_i,t)]|0\rangle = 0,$$

аналогичное (Б.23), поэтому $\Psi_\alpha(t)$ можно записать как

$$\Psi_\alpha(t) = -\frac{e}{2}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \sum_i \left\langle 0\left| v_{i\beta}\left(\frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial r_{i\alpha}} - - \frac{\partial E_\alpha(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial r_{i\beta}}\right) + \left(\frac{\partial E_\beta(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial r_{i\alpha}} - - \frac{\partial E_\alpha(\mathbf{r}_i,t+t')}{\partial r_{i\beta}}\right) v_{i\beta}\right| 0\right\rangle_{free}, \quad (\text{Б.26})$$

что равно

$$\Psi_\alpha(t) = -\frac{e}{2}\int\limits_{-\infty}^{0} dt' \sum_i \langle 0|[\mathbf{v}_i \times \text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t+t')]_\alpha - \\ - [\text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t+t') \times \mathbf{v}_i]_\alpha |0\rangle. \quad (Б.27)$$

Используя уравнение Максвелла $\text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -(1/c)(\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)/\partial t)$ и вычисляя интеграл по t', получаем, что $\Psi_\alpha(t)$ равно левой части выражения (Б.24), что и требовалось доказать.

Заметим, что в случае $\mathbf{E} = 0$, $\mathbf{H} = \text{const}$ обе части уравнения (Б.24) обращаются в нуль. Для правой части это очевидно, а в левой фигурируют матричные элементы $\langle 0|v_{i\beta}|0\rangle = (i/\hbar)\langle 0|[\mathcal{H}, r_{i\beta}]|0\rangle = 0$ из-за того, что оператор $\mathcal{H}$ диагонален.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Stolz, *Time Resolved Light Scattering from Excitons*, Springer Tracts in Modern Physics, Springer-Verlag, Berlin (1994).
2. J. Shah, *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures*, Springer-Verlag, Berlin (1996).
3. R. Zeyher, H. Bilz, and M. Cardona, Sol. St. Comm. **19**, 57 (1967).
4. Л. И. Коровин, И. Г. Ланг, Д. А. Контрерас-Солорио, С. Т. Павлов, ФТТ **43**, 2091 (2001); L. I. Korovin, I. G. Lang, D. A. Contreras-Solorio, and S. T. Pavlov, E-print archives, cond-mat/0104262.
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1973), с. 68.
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974), с. 520.
7. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Добросвет, Москва (1998).
8. R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957). (Русский перевод: Р. Кубо, *Вопросы квантовой теории необратимых процессов*, Изд-во иностр. лит., Москва, (1961), с. 59.)
9. S. Nakajima, Proc. Phys. Soc. **69**, 441 (1956).
10. О. В. Константинов, В. И. Перель, ЖЭТФ **37**, 786 (1959).
11. R. Enderlein, K. Peuker, and F. Bechstedt, Phys. Stat. Sol. (b) **92**, 149 (1979).
12. D. A. Contreras-Solorio, S. T. Pavlov, L. I. Korovin, and I. G. Lang, Phys. Rev. B **62**, 16815 (2000); E-print archives, cond-mat/0002229.
13. Л. И. Коровин, И. Г. Ланг, В. А. Контрерас-Солорио, С. Т. Павлов, ФТТ **44**, 1681 (2002); L. I. Korovin, I. G. Lang, D. A. Contreras-Solorio, and S. T. Pavlov, E-print archives, cond-mat/0203390.
14. Л. И. Коровин, И. Г. Ланг, Д. А. Контрерас-Солорио, С. Т. Павлов, ФТТ **44**, 2084 (2002); L. I. Korovin, I. G. Lang, D. A. Contreras-Solorio, and S. T. Pavlov, E-print archives, cond-mat/0104262.