

В. М. АГРАНОВИЧ, В. Л. ГИНЗБУРГ

Му

28.12

КРИСТАЛЛООПТИКА
С УЧЕТОМ
ПРОСТРАНСТВЕННОЙ
ДИСПЕРСИИ
И ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

МОСКВА 1965

АННОТАЦИЯ

Настоящая монография является первой в мировой литературе книгой, посвященной последовательному изложению кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии в ее связи с теорией экситонов. Кроме того, в книге рассмотрен ряд общих вопросов электродинамики и оптики анизотропных сред. Оптический метод исследования, состоящий в изучении поглощения и дисперсии света в диэлектриках, полупроводниках, а также металлах, полимерах и т. п., стал одним из основных в физике твердого тела. Этим определяется важность выпуска книги.

Книга рассчитана на студентов старших курсов, аспирантов и научных работников, занимающихся теоретической физикой, а также оптикой, кристаллооптикой и оптической кристаллографией, изучением электрических свойств твердых тел и т. д.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Принятые обозначения	9
Введение	11

ГЛАВА I

Тензор комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и нормальные волны в среде

§ 1. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и его свойства	28
1.1. Уравнения электромагнитного поля и введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (28). 1.2. Общие свойства тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (38). 1.3. Приближение классической кристаллооптики. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в изотропной среде (49).	
§ 2. Нормальные электромагнитные волны в среде	53
2.1. Волновое и дисперсионное уравнения (53). 2.2. Поперечные и продольные волны, «фигтивные» продольные волны и «волны поляризации». Реальные, кулоновские и механические экситоны (59). 2.3. Случай кратных корней дисперсионного уравнения (71). 2.4. Выделение поперечного поля E_{\perp} и тензор $\epsilon_{\perp, ij}$ (78). 2.5. Дисперсионные соотношения для комплексного показателя преломления. Неравенства, вытекающие из дисперсионных соотношений в области прозрачности (82).	
§ 3. Энергетические и некоторые другие соотношения для волн в анизотропной среде	91
3.1. Закон сохранения энергии в электродинамике сред с пространственной дисперсией (91). 3.2. Связи между выражениями, квадратичными относительно амплитуд нормальных волн. Вектор групповой скорости. Пространственная дисперсия и ортогональность нормальных волн. Теорема взаимности (102). 3.3. Некоторые теоремы, касающиеся распространения волн и лучей в среде (122).	

ГЛАВА II

Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах

§ 4. Введение и использование тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в случае кристаллов	127
4.1. Введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах (127). 4.2. Случай слабой пространственной дисперсии (138).	
§ 5. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах разных классов	145
5.1. Введение. Гиротронные кристаллы (145). 5.2. Негиротронные кристаллы (152).	

ГЛАВА III

Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии

§ 6. Гиротропные кристаллы	161
6.1. Введение (161). 6.2. Нормальные волны в гиротропных кристаллах (162). 6.3. Новая волна вблизи линии поглощения в гиротропной среде (168).	
§ 7. Негиротропные кристаллы	173
7.1. Нормальные волны в негиротропных кристаллах (173). 7.2. Случай изотропной среды. Новые волны вблизи дипольных линий поглощения. Вектор групповой скорости (175).	
§ 8. Кубические негиротропные кристаллы	194
8.1. Оптическая анизотропия кубических кристаллов. Дипольные переходы (194). 8.2. Оптическая анизотропия кубических кристаллов. Квадрупольные переходы (199). 8.3. Классификация состояний механических экситонов с $k=0$ и правила отбора для квадрупольных переходов (202). 8.4. Новые волны вблизи квадрупольных линий поглощения. Продольные волны (216).	
§ 9. Влияние механических напряжений и внешних электрического и магнитного полей	219
9.1. Анизотропия оптических свойств и правила отбора при наличии внешних воздействий (219). 9.2. Явная зависимость тензора $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ от напряженности слабых внешних полей. Эффект инверсии магнитного поля (225). 9.3. Влияние магнитного и электрического полей в кристалле сульфида кадмия (CdS) (231).	
§ 10. Проблема граничных условий при учете пространственной дисперсии в окрестности отдельного резонанса (линии поглощения)	240
10.1. Введение (240). 10.2. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ в окрестности отдельного резонанса (243). 10.3. Некоторые примеры (247). 10.4. Граничные условия (253). 10.5. Отраженные и преломленные волны в окрестности частот дипольных и квадрупольных переходов в негиротропном кристалле (257). 10.6. Отраженные и преломленные волны в окрестности частот дипольного перехода в гиротропном кристалле (261). 10.7. Влияние неоднородного приповерхностного слоя на отражение света в окрестности экситонных полос поглощения (266). 10.8. Прохождение света через плоскопараллельную пластинку (негиротропная среда) (268). 10.9. Прохождение света через плоскопараллельную пластинку (гиротропная среда) (271). 10.10. О поверхностных экситонах (277).	
§ 11. Экспериментальные исследования эффектов пространственной дисперсии в кристаллах	283
11.1. Гиротропные кристаллы (283). 11.2. Негиротропные кристаллы (287).	

ГЛАВА IV

Микроскопическая теория (вычисление тензора $\epsilon_{ij}(\omega, k)$)

§ 12. Общие выражения для $\epsilon_{ij}(\omega, k)$	300
12.1. Квантовомеханический вывод выражения для $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ (300). 12.2. Вклад экситонных состояний в тензор $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ (309).	
§ 13. Механические экситоны и тензор $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ в молекулярных кристаллах и в случае классической модели осцилляторов	315
13.1. Молекулярные кристаллы. Механические экситоны (315). 13.2. Модель осцилляторов (322).	

§ 14. Механизм и расчеты поглощения	324
14.1. Механизм поглощения. Учет поглощения в первом приближении (324). 14.2. Поглощение нормальных электромагнитных волн в окрестности частоты экситонного перехода (331). 14.3. Длинноволновый край экситонных полос поглощения (334).	
§ 15. Некоторые вопросы электродинамики сред с пространственной дисперсией	339
15.1. Комбинационное рассеяние рентгеновских лучей и света с образованием экситонов (339). 15.2. Потери энергии и черенковское излучение заряда, равномерно движущегося в среде с пространственной дисперсией (346).	
Закключение	354

Приложения

I. Некоторые обозначения, касающиеся симметрии кристаллов	358
II. Некоторые сведения из теории пространственных групп	361
Литература	370

ПРЕДИСЛОВИЕ

В последние годы в электродинамике и оптике сплошных сред (в частности, в кристаллооптике) привлекает к себе все большее внимание учет пространственной дисперсии — зависимости тензора диэлектрической проницаемости от волнового вектора (т. е. от длины волны) — при фиксированной частоте. В отличие от частотной дисперсии — зависимости проницаемости от частоты, — пространственная дисперсия в оптике (кроме металлооптики) является слабой. Дело в том, что пространственная дисперсия в конденсированной неметаллической среде характеризуется отношением некоторой длины атомных масштабов (параметра решетки и т. п.) к длине электромагнитной волны в среде; это отношение в оптической области является малым параметром. В результате, пространственная дисперсия в оптике представляет интерес преимущественно лишь тогда, когда она приводит к качественно новым явлениям. Одно такое явление давно и хорошо известно — мы имеем в виду естественную оптическую активность (гиротропию). Имеются, однако, и другие интересные эффекты пространственной дисперсии; здесь в первую очередь можно указать на давно предсказанную, но обнаруженную лишь в 1960 г. оптическую анизотропию негиротропных кубических кристаллов.

Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии содержит, очевидно, как частный случай всю классическую кристаллооптику, в которой учитывается лишь частотная дисперсия. Как нам представляется, уже это обстоятельство оправдывает стремление развивать и излагать кристаллооптику с учетом пространственной дисперсии, несмотря на то, что влияние такой дисперсии в большинстве случаев мало и, если не говорить о гиротропии, может быть замечено лишь в довольно специальных условиях.

Кроме того, нужно подчеркнуть, что учет пространственной дисперсии в кристаллооптике представляет интерес также с другой точки зрения — в связи с изучением экситонов, которые могут возбуждаться светом. Более того, можно утверждать, что кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов в значительной мере переплетаются, а иногда и вообще не могут быть отделены друг от друга. Этот факт вместе с тем далеко не всегда в достаточной мере учитывается в литературе, и вообще, реальные связи между различными подходами, встречающимися в оптике кристаллов, часто остаются в тени. Именно стремление подчеркнуть такие связи, а также сочетать макроскопический и микроскопический подходы в кристаллооптике с учетом пространственной дисперсии и теории экситонов, в основном и побудило авторов написать настоящую монографию. Правда, ранее нами была написана большая статья того же названия и примерно с таким же общим планом (УФН **76**, 643; **77**, 663 (1962)). Материала, однако, оказалось так много, что в упомянутой статье нам пришлось отказаться от сколь угодно подробного изложения целого ряда вопросов. Кроме того, за последние два года выявились некоторые новые моменты, которые представляется целесообразным осветить. В результате в книге оказался отраженным довольно широкий круг вопросов, которые мы не будем сейчас перечислять, — для ознакомления с содержанием книги удобнее всего прочесть оглавление, а также введение.

Здесь же мы хотели бы подчеркнуть, что не претендуем на полноту изложения, а отбор материала, несомненно, в значительной мере отражает наши собственные научные интересы. Список литературы также не является полным. Другими словами, эта монография не представляет собой обзора имеющейся литературы. Скорее речь идет о другом — попытке осветить соответствующий круг проблем с указанных выше позиций, с которых авторы и ранее излагали материал в своих работах.

Отметим также, что, насколько нам известно, еще вообще не существует других книг, посвященных кристаллооптике с учетом пространственной дисперсии. Между тем в этой области имеется еще целый ряд нерешенных экспериментальных и теоретических вопросов, а осуществление соответствующих исследований может быть ускорено в результате

достаточно подробного освещения современного состояния проблемы. Все это позволяет нам надеяться, что опубликование настоящей книги будет оправдано.

Опыт показывает, что значительная часть читателей подобных книг интересуется лишь отдельными вопросами, другие встречают затруднения при ознакомлении с разделами, содержащими громоздкие расчеты, и т. д. В этой связи мы не стремились избегать некоторых повторений и элементарных пояснений.

Отмеченный характер книги, наличие двух авторов, а также стремление отразить самые последние известные результаты, вероятно, не позволили нам избежать некоторых неточностей и несогласованности между различными разделами. Поэтому мы были бы особенно благодарны за все критические замечания, которые мы можем надеяться в какой-то форме учесть в дальнейшем.

За полезные замечания авторы признательны Ю. В. Конобееву, А. Г. Молчанову, Л. П. Питаевскому и В. П. Силину.

В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург

Июль 1964 г.

ПРИНЯТЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ *)

$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}) + i\epsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}) =$
 $= \text{Re } \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) + i \text{Im } \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ — комплексный тензор диэлектрической проницаемости.

$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) \equiv \nu_{ij}$ — тензор, обратный $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

$\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ — комплексный тензор восприимчивости.

$\delta_{ij} = 1$ при $i = j$, $\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$.

ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} — эрмитовы тензоры.

$\text{Re } \epsilon_{ij}$ и $\text{Im } \epsilon_{ij}$ — вещественная и мнимая части ϵ_{ij} .

$\epsilon_{ij}(\omega)$ — комплексный тензор диэлектрической проницаемости при отсутствии пространственной дисперсии (классическая кристаллооптика).

$\hat{\epsilon}_{ij}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, $\hat{\epsilon}_{ij}(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}')$, $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$ — ядра интегральных соотношений (см. (1.3) — (1.6)).

$\epsilon_{\alpha\beta}$, $\epsilon_{\alpha\beta}^{-1} = \nu_{\alpha\beta}$ — двумерные тензоры ($\alpha, \beta = 1, 2$).

$\omega = \omega' + i\omega'' = \omega' + i\gamma$ — частота ($\omega' = \text{Re } \omega$, $\omega'' = \text{Im } \omega$); в подавляющем большинстве случаев частота ω в книге считается вещественной, т. е. $\omega = \omega'$.

$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$ — волновой вектор (векторы \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' вещественные).

$\mathbf{k} = (\mathbf{k}' + i\mathbf{k}'')\mathbf{s}$ — волновой вектор в случае однородных монохроматических плоских волн, которые за несколькими исключениями только и рассматриваются в книге.

*) Редко встречающиеся обозначения не приводятся; то же относится к таким обозначениям, как e , $\hbar = h/2\pi$ и c (элементарный заряд, квантовая постоянная и скорость света). Различные величины, обозначенные одной и той же буквой, как правило, встречаются в разных разделах.

$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}$ — волновой вектор для однородных нормальных волн.

\mathbf{s} — вещественный единичный вектор, характеризующий направление распространения однородных плоских волн.

$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(0)} + \mathbf{S}^{(1)}$ — поток энергии (см. (3.11), (3.12)).

$\tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) = n + i\kappa$ ($n = \text{Re } \tilde{n}$, $\kappa = \text{Im } \tilde{n}$) — комплексный показатель преломления.

n — показатель преломления.

κ — показатель поглощения.

$\mu = \frac{2\omega}{c} \kappa$ — коэффициент поглощения.

E — напряженность электрического поля.

$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ — электрическая индукция.

\mathbf{P} — поляризация.

\mathbf{B} — магнитная индукция.

\mathbf{j}_{ext} — плотность тока внешних источников.

ρ_{ext} — плотность заряда внешних источников.

\mathbf{B}_{ext} — индукция постоянного во времени магнитного поля (для краткости такое поле именуется внешним полем).

$\lambda = \frac{\lambda_0}{n}$ — длина волны в среде.

$\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega}$ — длина волны в вакууме.

a, a_s — постоянная решетки или длина атомных масштабов.

ω_s — собственная частота.

$\omega_m(\mathbf{k})$ — частота механических экситонов.

ω_{\parallel} — частота продольных волн.

ω'_{\parallel} — частота «фиктивных» продольных волн.

ω_P — частота «волн поляризации».

$|a_{ij}|$ — определитель матрицы a_{ij} .

E_{\perp} — поперечное поле, E_{\parallel} — продольное поле } (см. (2.56)).

$\epsilon_{\perp, ij}$ — см. (2.58).

$\chi_{\perp, ij}$ — см. (2.59).

$\eta_{ij} = \delta_{ij} - s_i s_j$ — тензор проектирования.

$\mathbf{v}_{гр} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$ — вектор групповой скорости.

ψ — угол между $\mathbf{v}_{гр}$ и \mathbf{k} .

ВВЕДЕНИЕ

Основной задачей кристаллооптики является исследование распространения в кристаллах плоских монохроматических волн, характеризующихся определенными значениями частоты ω и волнового вектора \mathbf{k} . Такие волны, если они удовлетворяют однородному волновому уравнению, называются «нормальными» электромагнитными волнами. Нормальные волны бывают нескольких типов, но сейчас мы будем иметь в виду лишь однородные волны, электрическое поле в которых имеет вид

$$\mathbf{E} = E_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}. \quad (1)$$

Здесь амплитуда поля E_0 — комплексный вектор, не зависящий от координат и времени (т. е. от \mathbf{r} и t), $\tilde{n} = n + i\kappa$ — комплексный показатель преломления и $\mathbf{s} = \frac{\mathbf{k}}{k}$ — единичный вещественный вектор. Векторы электрической и магнитной индукций \mathbf{D} и \mathbf{B} в нормальных волнах также имеют вид (1).

При заданных частоте ω и направлении распространения \mathbf{s} может существовать несколько нормальных волн (индекс l), отличающихся своей поляризацией (вектором $\mathbf{E}_{0l}(\omega, \mathbf{s})$) и показателем преломления $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$. Нормальные волны, которые могут распространяться в данной среде, весьма полно характеризуют электромагнитные свойства этой среды. Однако было бы нерационально, вообще говоря, выбрать именно величины \mathbf{E}_{0l} и \tilde{n}_l в качестве основных (первичных) характеристик в оптике кристаллов. Такими характеристиками среды являются компоненты комплексного тензора диэлектрической проницаемости

$$\epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij} + i\epsilon''_{ij}, \quad (2)$$

который, по определению, связывает векторы \mathbf{E} и \mathbf{D} в линейной электродинамике *):

$$D_i = \varepsilon_{ij} E_j. \quad (3)$$

В простейшем случае, встречающемся на практике лишь в сравнительно узких областях прозрачности, компоненты тензора ε_{ij} можно считать постоянными (не зависящими от ω и \mathbf{k}). В старой литературе (особенно если речь идет об энергетических соотношениях, когда постоянство ε_{ij} существенно) кристаллооптика обычно развивалась именно при этом предположении. Значительно шире приближение, в котором учитывается частотная дисперсия, т. е. полагают

$$\varepsilon_{ij}(\omega) = \varepsilon'_{ij}(\omega) + i\varepsilon''_{ij}(\omega), \quad D_i(\omega) = \varepsilon_{ij}(\omega) E_j(\omega), \quad (4)$$

где $D_i(\omega)$ и $E_i(\omega)$ — соответствующие фурье-компоненты полей \mathbf{E} и \mathbf{D} (например, $E_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} E_i(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega$,

$E_i(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} E_i(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} dt$; в (4) аргумент \mathbf{r} опущен, как несущественный в данном случае).

Физическая природа частотной дисперсии весьма проста. Если собственные частоты ω_s (или обратные времена релаксации) среды меньше или сравнимы с частотой поля ω , то установление электрической поляризации не происходит мгновенно. Другими словами, поляризация \mathbf{P} (а значит, и индукция $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$) в данный момент времени определяется значениями поля не только в тот же, но и в предшествующие моменты времени. При использовании фурье-компонент это и приводит к зависимости ε_{ij} от ω . Поскольку собственные частоты для большинства сред лежат и в оптическом диапазоне, ясно, что частотная дисперсия в кристаллооптике часто оказывается ярко выраженной (соответствующим пара-

*) Здесь и во всей книге по дважды встречающимся тензорным индексам проводится суммирование. В (2) и везде ниже тензоры ε'_{ij} и ε''_{ij} по определению являются эрмитовыми (запись произвольного тензора ε_{ij} в виде (2) однозначна в смысле определения эрмитовых тензоров ε'_{ij} и ε''_{ij} через ε_{ij} и наоборот).

метром, определяющим величину частотной дисперсии, является отношение ω/ω_s , где ω_s — существенная в данной области, собственная частота или обратное время релаксации; частотная дисперсия слаба лишь при $\omega/\omega_s \ll 1$.

Кристаллооптику, развиваемую на основе связей или, как иногда говорят, материальных уравнений (4), мы будем называть классической кристаллооптикой.

В силу принципа симметрии кинетических коэффициентов, при отсутствии магнитного поля тензор $\varepsilon_{ij}(\omega)$ симметричен (см. ниже п. 1.2). По этой причине эрмитовы тензоры $\varepsilon'_{ij}(\omega)$ и $\varepsilon''_{ij}(\omega)$ являются вещественными и естественная оптическая активность (гиротропия) объяснена быть не может. Таким образом, уже хорошо и давно известное явление гиروتропии лежит за рамками классической кристаллооптики. По ряду причин (например, в силу возможности чисто формально ввести несимметричный тензор $\varepsilon_{ij}(\omega)$ и описывать таким образом гиروتропию) этот факт в старой литературе часто оставался несколько в тени. Но по сути дела совершенно ясно, что в кристаллооптике уже при исследовании гиروتропии необходимо выйти за рамки приближения (4) и в пределах линейной теории учитывать, помимо частотной, также и пространственную дисперсию. Это отвечает использованию связей:

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}), \quad \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}) + i\varepsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}), \quad (5)$$

где, очевидно,

$$\left. \begin{aligned} E_i(\mathbf{r}, t) &= \int E_i(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d\omega d\mathbf{k}, \\ E_i(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int E_i(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{r} dt \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

и аналогично для \mathbf{D} .

Связи (5) отвечают кристаллооптике с учетом пространственной дисперсии (термин пространственная дисперсия употребляется на наличие зависимости ε_{ij} от \mathbf{k} *).

*) Ниже во введении мы стремились обрисовать тот круг вопросов, который составляет содержание кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии в ее связи с теорией экситонов. Нужно при этом иметь в виду, что все моменты, которые во введении

Пренебрежение пространственной дисперсией эквивалентно предположению, что электрическая поляризация в данной точке среды определяется значением электрического поля в той же точке. Часто такое приближение является достаточно хорошим. Но в общем случае, очевидно, поляризация в данной точке определяется полем в некоторой окрестности около этой точки. В терминах фурье-компонент это как раз и означает, что ϵ_{ij} зависит от длины волны или, что то же, волнового вектора поля. Величина пространственной дисперсии определяется параметром ak или несколько более наглядным параметром a/λ , где a — характерный размер (радиус «области влияния», радиус молекулярного действия и т. п.) и $\lambda = 2\pi/k$ — длина волны в среде*). В конденсированной неметаллической среде (кристаллы, жидкости) радиус a порядка постоянной решетки или размеров молекул, т. е. $a \sim 10^{-7} - 10^{-8}$ см. Поэтому даже в оптической области, не говоря уже о радиодиапазоне, параметр a/λ весьма мал. В самом деле, $\lambda = \lambda_0/n$, где $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ — длина волны излучения в вакууме. Даже при $\lambda_0 = 4000 \text{ \AA} = 4 \cdot 10^{-5}$ см и $n \sim 10$ параметры $a/\lambda_0 \sim 10^{-3}$ и $a/\lambda \sim 10^{-2}$. Таким образом, пространственная дисперсия в кристаллооптике может считаться слабой в том смысле, что параметр a/λ является малым:

$$\frac{a}{\lambda} \ll 1. \quad (7)$$

Именно по этой причине в кристаллооптике и оказывалось возможным или совсем пренебрегать пространственной диспер-

затронуты лишь бегом, будут подробно обсуждены в дальнейшем. Поэтому, быть может, следует посоветовать читателям, не занимавшимся ранее обсуждаемыми в книге проблемами, вначале лишь просмотреть введение, а затем вернуться к нему при втором чтении. Если читателей интересует в основном только содержание гл. III и IV, то пп. 2.3—2.5 и большую часть § 3 при первом чтении также можно опустить.

*) Правильнее, конечно, под λ понимать характерное расстояние, на котором изменяется поле, а о длине волны говорить лишь для прозрачной среды. Для краткости мы не будем проводить такого различия, что после сделанной оговорки не должно привести к недоразумениям. Заметим также, что вместо λ бывает удобнее пользоваться длиной $\lambda = \lambda/2\pi$, но мы решили не вводить этого обозначения.

сией, или учитывать ее в завуалированном виде, как это представлялось обычно достаточным в применении к исследованию гиротропии. Вместе с тем, конечно, малость характерного параметра (в данном случае отношения a/λ) далеко не всегда обеспечивает возможность пренебрегать эффектом, которому соответствует этот параметр. Особенно это очевидно, когда речь идет о новых явлениях, вообще отсутствующих при неучете обсуждаемого эффекта. В случае пространственной дисперсии примером такого нового явления как раз и может служить гиротропия. Слабость же пространственной дисперсии используется в данном случае таким путем: вместо тензора общего вида $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ обычно достаточно рассмотреть выражение, содержащее лишь члены, линейные по \mathbf{k} , т. е. положить

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega)k_l \quad (8)$$

или

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + i\delta_{ijl}(\omega)k_l, \quad (9)$$

где $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ — тензор, обратный $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (он фигурирует в соотношении $E_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})D_j(\omega, \mathbf{k})$), а $\gamma_{ijl}(\omega)$ и $\delta_{ijl}(\omega)$ — некоторые тензоры третьего ранга (обращаем внимание на необходимость в (8), (9) и других выражениях не путать индекса l с мнимой единицей i , стоящей в качестве множителя!).

Гиротропия есть эффект порядка a/λ (это ясно уже из (8) и (9)), но может наблюдаться только в средах, не имеющих центра симметрии (это хорошо известное обстоятельство доказывается, в частности, ниже, в п. 1.2). В существующих курсах и монографиях, в которых излагается оптика кристаллов (см., например, [1—4]), наряду с классической кристаллооптикой, рассматривается и явление гиротропии, но это делается недостаточно общим образом. Именно, гиротропия вводится и обсуждается в качестве некоторого изолированного явления, а не как частный и простейший случай учета пространственной дисперсии. Такой подход не препятствует анализу целого ряда свойств гиротропных сред (см. в особенности [3, 4]), но его ограниченность вряд ли может вызвать сомнения. Не говоря уже о том, что некоторые результаты, относящиеся к гиротропным средам,

проще и удобнее получать на основе исследования общих свойств тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, сказанное можно проиллюстрировать на таком примере. Достаточно, воспользовавшись связью (9), рассмотреть вопрос о распространении волн в гиротропной среде вблизи линии поглощения, чтобы убедиться в возможности появления не двух встречающихся обычно, а трех поперечных нормальных волн (при данной частоте ω и заданном направлении распространения \mathbf{s}). Насколько нам удалось установить, эта возможность для гиротропных сред была отмечена лишь сравнительно недавно в работе [5] (см. также п. 6.3). Между тем сам по себе тот факт, что при учете пространственной дисперсии могут появляться новые нормальные волны, вполне очевиден и давно известен. Таким образом, даже исследование гиротропии целесообразно проводить в рамках общей кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии. Но, разумеется, главная причина, побуждающая развивать такую кристаллооптику, состоит в необходимости исследовать кроме гиротропии и другие эффекты пространственной дисперсии.

Учет пространственной дисперсии совершенно необходим при рассмотрении продольных волн (достаточно напомнить, что при пренебрежении пространственной дисперсией групповая скорость продольных волн равна нулю [6] *). Продольные волны, которые особенно хорошо известны в случае плазмы (плазменные волны), могут существовать и в кристаллах, хотя в этом случае затухание волн является довольно значительным. С вопросом о продольных (плазменных) волнах в твердом теле связана проблема дискретных потерь энергии при прохождении заряженных частиц через тонкие пленки [5, 7]. Не останавливаясь здесь на этом вопросе, а также на значении пространственной дисперсии и использовании тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в физике плазмы [6, 7], в металллооптике [7, 8] и некоторых других областях [7, 9], сосредоточим внимание только на кристаллооптике.

Естественно поставить такой вопрос: какую роль пространственная дисперсия может играть в оптике для негиро-

*) В тех случаях, когда речь идет о вопросах, которые имеют достаточно общий характер или в настоящей книге подробно не затрагиваются, мы ссылаемся преимущественно на монографии и обзоры, а не на оригинальные работы.

тропной среды (например, в кристаллах с центром симметрии)? Прежде всего, ясно, что в этом случае члены порядка a/λ исчезают и могут наблюдаться лишь эффекты порядка $(a/\lambda)^2$. Разумеется, параметр $(a/\lambda)^2$ в оптической области очень мал, но это обстоятельство не является решающим, когда речь идет о качественно новых эффектах. Наиболее простым и важным эффектом такого типа является оптическая анизотропия негиротропных кубических кристаллов. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$ для кубических кристаллов сводится к скаляру, т. е. $\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon(\omega) \delta_{ij}$, и такая среда является оптически изотропной. Но достаточно учесть члены порядка $(a/\lambda)^2 \sim a^2 k^2$, чтобы появилась анизотропия, так как тензоры

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega) + \alpha_{ijlm}(\omega) k_l k_m, \quad (10)$$

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + \beta_{ijlm}(\omega) k_l k_m \quad (11)$$

и для кубической симметрии не сводятся к скалярам (подробнее см. п. 5.2 и § 7).

На появление анизотропии порядка $(a/\lambda)^2$ в кубических кристаллах Лоренц обратил внимание еще в 1878 г. (см. [10]). Это заключение было повторено в работе [11] на основе микроскопического рассмотрения квадрупольных переходов в кристаллах и в работе [5] на базе использования выражений (10) — (11). Только в 1960 г. оптическая анизотропия негиротропных кубических кристаллов была наблюдена [12] в заиси меди (Cu_2O) в области квадрупольной линии поглощения. При учете пространственной дисперсии кубический кристалл Cu_2O обладает семью оптическими осями (три оси 4-го порядка и четыре пространственные диагонали куба). Учет пространственной дисперсии сказывается, разумеется, и на оптических свойствах кристаллов с более низкой симметрией (например, одноосный кристалл при этом становится многоосным), а также существен при исследовании влияния внешних электрического и магнитного полей и напряжений.

В кристаллах, как известно, направление луча (для прозрачной среды это направление есть направление вектора групповой скорости $\mathbf{v}_{\text{гп}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$) в общем случае не совпадает с направлением волнового вектора \mathbf{k} . При этом, однако,

при отсутствии пространственной дисперсии угол между \mathbf{k} и $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ всегда меньше $\frac{\pi}{2}$ (см. [13]). Если же пространственная дисперсия существенна, то угол между \mathbf{k} и $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ может быть любым (в частности, он может быть равным π). Таким образом, в кристаллооптике с учетом пространственной дисперсии можно ожидать появления различных особенностей (по сравнению с классической кристаллооптикой) при рассмотрении хода лучей.

Роль пространственной дисперсии в благоприятных случаях возрастает вблизи линий поглощения (резонансов), так как при этом возрастает показатель преломления n , а значит и параметр $a/\lambda = an/\lambda_0$. Именно такой случай хорошо известен для магнитоактивной плазмы (см. [6], § 12). При этом возникают не только количественные изменения дисперсионных кривых, но и появляются новые нормальные волны (при отсутствии пространственной дисперсии в анизотропной среде в данном направлении распространяются лишь две нормальные волны с данной частотой; кроме того, в отдельных случаях может появляться продольная волна с определенной частотой и с равной нулю групповой скоростью). Появление новых волн возможно и в конденсированной среде. К их числу относятся уже упоминавшиеся продольные волны (для частот, на которых они отсутствуют, при пренебрежении пространственной дисперсией) и третья волна в гиротропной среде [5]. В негиротропной среде в принципе также могут появиться новые волны (помимо продольной), как это, по сути дела, следовало еще из теории нормальных электромагнитных волн в кристаллах, развитой Борном в 1915 г. (см. [14], стр. 108—122). В конкретной форме это заключение было сделано в работе [15] в применении к области экситонных линий. Однако в этой работе не учитывалось поглощение. Между тем вблизи дипольных линий, о которых только и шла речь в [15], поглощение в известных случаях столь сильно, что практически смазывает влияние пространственной дисперсии [5, 16, 17]. В этой связи попытки объяснить опыты с тонкими пленками антрацена [18, 19] влиянием новой волны, по всей вероятности, ошибочны [16, 17, 20]. Возможно, что наблюдавшиеся осцилляции интенсивности света, прошедшего через пленку, с изменением ее толщины объясняются зависимостью показателя

преломления очень тонкой пленки (толщина $d \leq 0,3 \text{ мк}$) от толщины пленки [20].

Вблизи квадрупольных линий поглощение может быть слабым. Кроме того, если разность показателей преломления новой и обычной волн оказывается малой, то это будет приводить к сравнительно медленным осцилляциям интенсивности с изменением толщины пленки. Поэтому появление новых волн вблизи квадрупольных линий [21] и их обнаружение по осцилляциям интенсивности в принципе возможно. Согласно работе [22] именно ролью новой волны объясняются осцилляции интенсивности с изменением толщины пленок записи меди при наблюдениях в области квадрупольной линии $\lambda_0 = 6125 \text{ \AA}$. Однако, по нашему мнению, в связи с рядом осложнений экспериментального характера (см. п. 11.2) вопрос о природе наблюдавшихся в [22] осцилляций еще нужно считать открытым. В этой области необходимы дальнейшие исследования.

Пространственная дисперсия сказывается, в частности, и на коэффициенте отражения волн от поверхности кристалла. Особое внимание привлекает при этом изучение частотной зависимости коэффициента отражения [22а]. К сожалению, изучение влияния пространственной дисперсии на отражение света связано с осложнениями как экспериментального, так и теоретического характера. Дело в том, что поверхность кристалла обычно далека от идеальной (шероховатости, поверхностные загрязнения). Кроме того, даже в случае идеальной поверхности при учете пространственной дисперсии для решения задачи об отражении нужно, вообще говоря, изменить или дополнить граничные условия. Тем самым анализу подлежит не только зависимость ϵ_{ij} от \mathbf{k} , но и характер граничных условий.

Правда, в отношении работы [22а] оба эти момента, быть может, не очень существенны, но, с другой стороны, в этом случае имеются неясности, касающиеся роли расщепления экситонных термов, а также выбора коэффициента поглощения и силы осциллятора перехода (см. п. 11.2).

В связи со сказанным важно подчеркнуть, что пространственную дисперсию и, в частности, появление новых волн можно в принципе обнаружить и изучать не только по прохождению света через пластинки, отражению от кристалла

и т. п. Именно, новые волны можно возбуждать, пропуская через кристалл рентгеновские лучи [22б] или заряженные частицы [22в] (см. § 15).

Итак, известен целый ряд явлений, исследование которых относится к области кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии. Задача теории состоит при этом в первую очередь в установлении связи между $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$ и $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и в использовании соответствующих формул для обработки экспериментальных данных. Дело в том, что на опыте определяется комплексный показатель преломления $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s}) = n + ix$, и, если не пользоваться кристаллооптикой, нужно было бы проводить измерения для очень большого числа направлений \mathbf{s} . В связи же с возможностью выразить $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$ через $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ достаточно измерить \tilde{n} лишь для некоторых направлений. При пренебрежении пространственной дисперсией это очевидно сразу, поскольку симметричный комплексный тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$ при заданной частоте характеризуется максимум шестью числами (предполагается, что тензоры ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} уже приведены к главным осям). При учете слабой пространственной дисперсии картина несколько усложняется, но по-прежнему нужно проводить измерения лишь для сравнительно немногих направлений, что связано с простой зависимостью $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ от \mathbf{k} .

Если тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в каком-то приближении известен, то можно считать известными все отвечающие этому приближению нормальные волны в кристалле (в частности, установление закона дисперсии $\omega_l = \omega_l(\mathbf{k})$ эквивалентно заданию функций $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s}) = \frac{ck}{\omega_l(\mathbf{k})}$). Кроме того, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ определяет потери энергии при движении частиц в среде, молекулярные силы между телами, флуктуации электромагнитного поля и вообще весьма полно характеризует среду (кристалл) [1,6—9].

Основной задачей настоящей книги является изложение основ кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии в рамках макроскопического подхода. Последнее означает, что тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ вводится общим образом, затем исследуются его некоторые свойства (свойства симметрии, дисперсионные соотношения, разложения в ряд) и, наконец, с по-

мощью уравнений поля находятся все нормальные волны. Кроме того, обсуждаются энергетические соотношения, вопрос о лучах, граничные задачи и т. п.

Не подлежит сомнению, что в целом ряде случаев целесообразно проводить исследование именно на таком макроскопическом пути и нет никаких оснований привлекать микроскопическую теорию. Что же касается этой последней, то ее использование и развитие, конечно, совершенно необходимо при вычислении самого тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в тех или иных приближениях или, если угодно, для различных моделей кристалла. Другими словами, в оптике кристаллов, как и в других областях, рациональный метод связан с правильным сочетанием макроскопического и микроскопического подходов. Это замечание, очевидное в наше время, здесь повторено потому, что в литературе по кристаллооптике до сих пор часто приходится сталкиваться с применением относительно громоздких микроскопических расчетов даже для получения очевидных или, во всяком случае, достаточно ясных с макроскопической точки зрения результатов.

Как по этой причине, так и из независимых соображений (в частности, для достижения большей полноты и установления соответствия между некоторыми экспериментальными данными и теоретическими расчетами) мы остановимся в книге и на микроскопической теории в ее связи с макроскопической кристаллооптикой. При этом, как легко видеть, микроскопическая теория оптических явлений в кристаллах тесно связана в первую очередь с тем направлением в физике твердого тела, которое часто называют теорией экситонов.

В связи с отсутствием общепринятой терминологии условимся называть экситонами «элементарные возбуждения» в кристаллах, подчиняющиеся статистике Бозе. При таком определении, очевидно, к числу экситонов относятся все нормальные электромагнитные волны в кристалле, которые на квантовом языке в случае достаточно слабого поглощения представляют собой не что иное, как «фотоны в среде» (включая сюда и продольные фотоны в среде — плазмоны)*).

*) Об использовании понятия о фотонах в среде (с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $(\hbar\omega n/c)\mathbf{s}$) в применении к другим задачам теории излучения см. [23] и § 15 настоящей книги. Заметим, что под указанное в тексте определению экситонов подпадают также акустические

Тем самым можно сказать, что общая теория экситонов включает в себя, с одной стороны, кристаллооптику с учетом пространственной дисперсии и, с другой стороны, все теоретические построения, имеющие своей целью вычисление тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в неметаллических кристаллах. Сказанное, разумеется, в значительной мере вытекает просто из определения понятий и терминов.

Переход к существу дела происходит при обсуждении способов вычисления $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и характера различных возможных в этой области приближений. Последние диктуются в первую очередь типом кристалла и природой рассматриваемых возбуждений. Так, в ионных кристаллах в инфракрасной области особенно существенными являются оптические ветви колебаний решетки [24]. Однако в тех же ионных кристаллах в области более высоких частот, а особенно в молекулярных кристаллах и некоторых полупроводниках, основную роль играют возбуждения электронного типа [25, 25а]. Наглядно эти возбуждения могут быть представлены как переходящее от узла к узлу возбужденное состояние молекулы (экситон Френкеля) или движущаяся связанная пара электрон—дырка (экситон Ванье — Мотта). Вместе с тем, в силу трансляционной симметрии кристалла, собственные функции, отвечающие возбуждениям, охватывают весь кристалл и имеют характер модулированных плоских волн с волновым вектором \mathbf{k} *). Если при этом ограничиться для простоты случаем идеальной неподвижной решетки, то волновая функция возбуждения может быть записана в виде (см., например, [25])

$$\Psi_{\mathbf{k}, m} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} u_{\mathbf{k}, m}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (12)$$

где $\mathbf{R} = \sum_i \mathbf{r}_i / NV$ — радиус-вектор центра тяжести всех NV электронов (радиус-вектор каждого электрона \mathbf{r}_i), функ-

волны, для которых, однако, целесообразно сохранить общепринятый термин — фононы. К числу экситонов относятся также магноты (спиновые волны) и подчиняющиеся статистике Бозе электронные возбуждения (экситоны) в сверхпроводниках (см., например, [134, 135]).

*) Поэтому локализованная электронно-дырочная пара или возбужденная молекула (последняя может рассматриваться также как пара с малым радиусом) описываются некоторым волновым пакетом. В некоторых случаях, однако, рассмотрение пакетов вполне оправдано и может служить даже для количественных расчетов.

ция $u_{\mathbf{k}, m}$ периодична (с периодом решетки) относительно \mathbf{R} и индекс m отвечает квантовым числам, не сводящимся к \mathbf{k} . Ограничиваясь в (12) учетом лишь координат частиц, мы тем самым имеем в виду механическую задачу, связанную с рассмотрением только кулоновского взаимодействия. Поэтому сразу же возникает вопрос о связи получающихся таким образом возбуждений (экситонов) с реальными экситонами, а также об их роли с точки зрения вычисления $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

Прежде чем коснуться этой проблемы по существу, уточним терминологию. Под «реальными экситонами» (или просто «экситонами») ниже понимаются нормальные волны — точные решения однородной задачи, получающиеся при учете как кулоновского, так и остального электромагнитного взаимодействия. Далее, «кулоновскими экситонами» будем называть все соответствующие точные решения однородной кулоновской задачи, получающейся при пренебрежении поперечным электромагнитным полем *).

Наконец, «механическими экситонами» мы именуем решения кулоновской задачи при отсутствии или пренебрежении влиянием длинноволнового продольного (кулоновского) электрического поля $E_{||}$.

О реальных, кулоновских и механических экситонах мы будем подробно говорить ниже (см. в особенности п. 2.2). Здесь же сделаем только несколько замечаний, которые должны пояснить смысл введения понятия об экситонах разного типа.

Продольные нормальные волны (плазмоны), в которых электрическое поле является безвихревым, а магнитное поле отсутствует, являются одновременно и реальными, и кулоновскими экситонами. Вместе с тем однородная кулоновская задача имеет и другие решения (в частности, решения, именуемые ниже «фиктивными» продольными волнами), которые не удовлетворяют полной системе уравнений поля. В «фиктивных» продольных волнах уже при малых волновых векторах \mathbf{k} имеется отличное от нуля безвихревое электрическое поле $E_{||}$. В то же время это кулоновское макроскопическое поле $E_{||}$,

*) Подчеркнем, что в случае реальных и кулоновских экситонов речь идет о решениях именно однородных уравнений поля. Другими словами, внешние источники поля (заданные токи и заряды находящиеся в самой среде; см. § 1) считаются отсутствующими.

помимо продольного характера поляризации ($\text{rot } \mathbf{E}_{\parallel} = 0$), ничем не отличается от произвольного макроскопического поля (разумеется, имеются в виду одинаковые значения ω и \mathbf{k}). Кроме того, деление поля на продольное и поперечное в общем случае анизотропной среды и произвольного направления волнового вектора ни в какой мере не является естественным, так как в соответствующих нормальных волнах поле \mathbf{E} не является ни поперечным, ни продольным. Наконец, если речь идет о рассмотрении длинноволнового поля, то это рассмотрение (даже если нормальные волны делятся на продольные и поперечные) производится единым образом для полного поля на основе использования уравнений электродинамики. В связи со сказанным и вводятся механические экситоны, которые при отсутствии внешних источников распространялись бы лишь при пренебрежении действием не только длинноволнового поперечного электромагнитного поля, но и безвихревого макроскопического (длинноволнового) электрического поля. С точки зрения решения механической задачи это означает, что в уравнениях движения частиц среды при отсутствии внешних источников безвихревое макроскопическое поле \mathbf{E}_{\parallel} (если оно не равно нулю) отбрасывается, и, таким образом, речь идет не о полном, а о приближенном учете кулоновского взаимодействия. Возможна, однако, и другая более четкая в математическом смысле интерпретация механических экситонов. Именно, рассмотрим неоднородную кулоновскую задачу, т. е. введем некоторые внешние источники. Тогда эти источники можно подобрать таким образом, чтобы для точных волновых решений рассматриваемой кулоновской задачи длинноволновое электрическое поле \mathbf{E}_{\parallel} равнялось нулю.

Итак, для механических экситонов (и в этом их единственное отличие от кулоновских экситонов) длинноволновое электрическое поле равно нулю или, во всяком случае, не учитывается при вычислении частот (уровней энергии) и волновых функций.

Существенным моментом при этом является именно пренебрежение действием длинноволнового поля (длина волны $\lambda \gg a$, где a — постоянная решетки). В отношении же учитываемого коротковолнового (микроскопического) поля ограничение лишь кулоновским взаимодействием, как это предполагается при использовании выражения (12), не имеет

принципиального значения. Более того, правильное всего считать, что при расчетах энергий и волновых функций механических экситонов учтено все коротковолновое взаимодействие, существенное в данных конкретных условиях (помимо кулоновского взаимодействия с учетом обмена, речь очевидно, может идти о магнитном взаимодействии). Поскольку на практике обычно все же ограничиваются рассмотрением лишь кулоновского взаимодействия, мы также будем упоминать только это взаимодействие, но исключительно для того, чтобы не загромождать изложение.

В анизотропной среде вектор электрической поляризации \mathbf{P} и вектор индукции $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ для большинства направлений не параллельны напряженности электрического поля \mathbf{E} . В этой связи, как легко убедиться (см. п. 2.2), для кулоновских экситонов с волновым вектором $\mathbf{k} = k\mathbf{s}$ поле $\mathbf{E}_{\parallel} = -4\pi s(\mathbf{sP})$ зависит от направления \mathbf{s} даже для сколь угодно длинных волн (т. е. при $k \rightarrow 0$). По этой причине частота кулоновских экситонов с $\mathbf{E}_{\parallel} \neq 0$ в анизотропной среде зависит от \mathbf{s} даже при $\mathbf{k} = k\mathbf{s} \rightarrow 0$. В случае же механических экситонов действие длинноволнового поля (т. е., в частности, поля с $k \rightarrow 0$) отсутствует, и поэтому частоты механических экситонов $\omega_m(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ от \mathbf{s} не зависят.

Именно механические экситоны, а не кулоновские играют роль состояний невозмущенной задачи при вычислении $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в первом приближении теории возмущений. Иначе говоря, волновые функции $\Psi_{k,m}$ типа (12) и частоты $\omega_m(\mathbf{k}) = \frac{W_m(\mathbf{k})}{\hbar}$ механических экситонов при вычислении ϵ_{ij} играют в кристалле ту же роль, что и волновые функции Ψ_s и частоты $\omega_s = \frac{W_s}{\hbar}$ уровней отдельных атомов в случае идеального газа. В таком газе вблизи дипольной линии в известном приближении можно записать $\epsilon_{ij}(\omega)$ в виде

$$\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon(\omega) \delta_{ij}, \quad \epsilon(\omega) = \epsilon_0 - \frac{4\pi e^2}{m} \frac{N f_{0s}}{\omega^2 - \omega_{0s}^2}, \quad (13)$$

где $\omega_{0s} = \omega_s - \omega_0$ — частота перехода из состояния s в состояние 0 и $f_{0s} = \text{const} \left| \int \Psi_s^* \mathbf{r} \Psi_0 d\mathbf{r} \right|^2$; при учете поглощения частота ω_{0s} является комплексной.

В более общем случае выражение $\int \Psi_s^* r \Psi_0 dr$ нужно заменить на $\int \Psi_s^* r e^{i\mathbf{k}r} \Psi_0 dr$; для квадрупольного перехода эта последняя величина сводится к $\int \Psi_s^* r(\mathbf{k}r) \Psi_0 dr$. Поэтому для квадрупольной линии, грубо говоря,

$$\epsilon(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_0 - \frac{\text{const} \cdot k^2}{\omega^2 - \omega_{0s}^2}. \quad (14)$$

Таким образом, как это ясно и из общих соображений, учет квадрупольных и более высоких мультипольных переходов представляет собой учет пространственной дисперсии в применении к атомам (в случае молекул без центра симметрии в числителе выражения для ϵ могут появляться члены первого порядка по k).

Переходя к кристаллам и стремясь сейчас лишь пояснить суть дела, мы можем сказать, что первое важное изменение по сравнению со случаем газа связано с зависимостью частот механических экситонов ω_m от \mathbf{k} . Поэтому в формулах типа (13) и (14) в твердом теле роль частот ω_{0s} играют частоты $\omega_{0m} = \omega_m(\mathbf{k})$ (рассматривается переход, соответствующий рождению одного экситона типа m) и вектор \mathbf{k} появляется и в числителе, и в знаменателе дисперсионной формулы. Вместе с тем в связи со слабостью пространственной дисперсии в оптическом диапазоне обычно можно и в числителе, и в знаменателе ограничиться учетом членов не выше k^2 , а в большинстве случаев пользоваться еще более простыми выражениями типа (10) и (11). Все это будет подробно и более точно изложено в гл. IV.

Здесь мы хотим только установить характер связи микро-теории экситонов с кристаллооптикой с учетом пространственной дисперсии. Как было сказано, механические экситоны играют в кристаллооптике такую же роль, как атомные уровни в теории дисперсии света в газах. Что же касается реальных экситонов, то это понятие по сути дела тождественно с понятием нормальных электромагнитных волн (речь, конечно, идет только о рассматриваемых в настоящей книге экситонах электромагнитного типа, в которых присутствует заметное макроскопическое поле \mathbf{E}). Кулоновские экситоны также имеют определенный физический смысл, и их бывает целесо-

образно рассматривать помимо реальных и механических экситонов в связи с существованием еще одного, второго, важного различия между газом и кристаллом. Это различие состоит в оптической анизотропии кристаллов. В силу анизотропии частоты линий поглощения, вообще говоря, не совпадают с разностями частот механических экситонов, т. е. полюсами ϵ_{ij} . Но, как мы увидим, частоты линий поглощения (полюсы показателя преломления \tilde{n}) в общем случае равны разности частот кулоновских экситонов.

В настоящей книге мы не будем подробно останавливаться на самой теории механических экситонов, т. е. расчетах, имеющих своей целью найти функции $\Psi_{\mathbf{k}, m}$ и частоты $\omega_m(\mathbf{k})$ механических экситонов*) в различных приближениях и моделях. Однако, как уже подчеркивалось, микротеории уделяется известное внимание, а именно будет получено квантовомеханическое выражение для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, изложена теория механических экситонов в молекулярных кристаллах, использована симметрия волновых функций экситонных состояний и т. д.

*) Частоты кулоновских и реальных экситонов могут быть найдены из уравнений поля при известном тензоре $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, который в первом приближении выражается через характеристики ($\Psi_{\mathbf{k}, m}$ и $\omega_m(\mathbf{k})$) механических экситонов.

ГЛАВА I

ТЕНЗОР КОМПЛЕКСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ
ПРОНИЦАЕМОСТИ $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ И НОРМАЛЬНЫЕ
ВОЛНЫ В СРЕДЕ§ 1. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ и его свойства

1.1. Уравнения электромагнитного поля и введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, k)$. Уравнения электромагнитного поля в среде запишем в виде

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{ext}, \\ \operatorname{div} \mathbf{D} &= 4\pi \rho_{ext}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.1)$$

Здесь \mathbf{E} — напряженность электрического поля, \mathbf{D} и \mathbf{B} — индукции электрического и магнитного полей, \mathbf{j}_{ext} и ρ_{ext} — плотности тока и заряда внешних источников (последнее означает, что величины \mathbf{j}_{ext} и ρ_{ext} считаются заданными и не зависящими от \mathbf{E} , \mathbf{D} и \mathbf{B}). Физический смысл полей \mathbf{E} и \mathbf{B} ясен из выражения для силы $\mathbf{F} = e \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right\}$, действующей на «точечную» частицу с зарядом e и скоростью \mathbf{v} . Что же касается индукции \mathbf{D} , то она определяется соотношением

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \mathbf{j},$$

где \mathbf{j} — плотность тока, индуцированного полями \mathbf{E} и \mathbf{B} ; кроме того, иногда удобно вводить вектор поляризации \mathbf{P} , причем $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$.

Все свойства среды отражены в выражении для \mathbf{D} или \mathbf{j} , а лучше сказать в связи между \mathbf{D} и векторами \mathbf{E} и \mathbf{B} . При этом речь идет о плотности тока \mathbf{j} (индукции \mathbf{D}) для системы, находящейся в каком-либо определенном состоянии (например, основном состоянии), или плотности тока, усредненной по состояниям с помощью статистической матрицы. Выражение, связывающее \mathbf{j} с микроскопическими характеристиками системы, будет указано в § 12. Сейчас достаточно подчеркнуть только то обстоятельство, что речь идет о средних величинах в том смысле, что флуктуации не учитываются. В то же время рассматриваемые поля могут как угодно изменяться в пространстве и времени — какое-либо дополнительное (помимо статистического) усреднение полей по \mathbf{r} и t не только не необходимо, но и неосуществимо в электродинамике сред, последовательно учитывающей пространственную дисперсию.

Уравнения (1.1), в которых все величины являются функциями \mathbf{r} и t , представляют собой обычные уравнения макроскопической электродинамики. Правда, чаще используются несколько иные величины и обозначения, но после сделанных замечаний это не должно повести к недоразумениям; кроме того, в п. 1.3 будет указана связь между принятыми здесь и некоторыми другими распространенными обозначениями.

При наличии резких границ раздела необходимо использовать граничные условия, получающиеся из (1.1) в результате предельного перехода. Эти условия имеют вид (\mathbf{n} — нормаль к границе раздела, направленная из среды 1 в среду 2; индексы n и t соответствуют нормальной и тангенциальной компонентам)

$$\left. \begin{aligned} E_{1t} &= E_{2t}, \quad [\mathbf{n}, \mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1] = \frac{4\pi}{c} (\mathbf{i} + \mathbf{i}_{ext}), \\ B_{1n} &= B_{2n}, \quad D_{2n} - D_{1n} = 4\pi (\sigma + \sigma_{ext}). \end{aligned} \right\} \quad (1.2)$$

Здесь \mathbf{i}_{ext} и σ_{ext} — соответственно поверхностные плотности внешних токов и зарядов, а плотности \mathbf{i} и σ выражаются через \mathbf{D} путем интегрирования по глубине поверхностного

слоя (например, $\mathbf{i} = -\frac{1}{4\pi} \int_1^2 \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} dl$; см. [7], § 1). Ниже нам придется иметь дело главным образом с безграничной

средой; поэтому мы обычно не будем упоминать о граничных условиях, за исключением специально им посвященного § 10.

Система (1.1) является, как известно, полной только тогда, когда указана связь (материальное уравнение), позволяющая выразить \mathbf{D} через \mathbf{E} , а если нужно, то и через \mathbf{B} . В конденсированной среде эта связь обычно может считаться линейной, поскольку рассматриваются поля несравненно более слабые, чем поле атомных масштабов $E_a \sim e/a^2 \sim 10^8$ в/см. По этой причине нелинейные явления (наблюдающиеся, например, в плазме в довольно легко достижимых условиях; см. [6], гл. VIII) в оптике конденсированных сред приобрели интерес лишь в последнее время в связи с использованием лазеров. Нелинейная оптика [26] остается, однако, несколько выделенной областью, непосредственно не связанной с интересующими нас проблемами (исключение составляет рассмотренный в п. 15.1 вопрос о комбинационном рассеянии света и рентгеновских лучей с образованием экситонов).

Считая, таким образом, материальное уравнение линейным, его можно записать в таком общем виде:

$$D_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \hat{\epsilon}_{ij}(t-t', \mathbf{r}-\mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t'). \quad (1.3)$$

Здесь принят во внимание еще лишь принцип причинности, в силу которого индукция в момент t определяется только полем в прошлом и настоящем, т. е. в моменты $t' \leq t$. Если свойства среды неизменны (однородны) во времени, то ядро $\hat{\epsilon}_{ij}$ может зависеть лишь от разности $t-t'$. Наконец, если среда пространственно однородна, так, что все ее точки (при учете флуктуаций) равноправны, то $\hat{\epsilon}_{ij}$ зависит только от разности $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$.

При этих условиях

$$D_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \hat{\epsilon}_{ij}(t-t', \mathbf{r}-\mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t'). \quad (1.4)$$

В вакууме $\mathbf{D}=\mathbf{E}$, а в общем случае \mathbf{D} есть сумма \mathbf{E} и $4\pi\mathbf{P}$. Поэтому, очевидно, ядро $\hat{\epsilon}_{ij}$ содержит член типа дельта-функции, и иногда удобно записать связь (1.4) в виде (то же,

конечно, относится к (1.3))

$$D_i(\mathbf{r}, t) = E_i(\mathbf{r}, t) + 4\pi \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \hat{\chi}_{ij}(t-t', \mathbf{r}-\mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t'). \quad (1.5)$$

В отличие от ядра $\hat{\epsilon}_{ij}$, содержащего указанную особенность, ядро $\hat{\chi}_{ij}$, как можно полагать из физических соображений, никаких особенностей не имеет.

Полезно заметить, что ядро $\hat{\epsilon}_{ij}$ можно интерпретировать как индукцию, возникающую в качестве «отклика» на дельта-функциональное поле \mathbf{E} . Действительно, при $\mathbf{E}(\mathbf{r}', t') = e\delta(t')\delta(\mathbf{r}')$, $e=1$ и $t' \leq t$ индукция $D_i(\mathbf{r}, t) = \hat{\epsilon}_{ij}(t, \mathbf{r}) e_j$ (см. (1.4)); в случае (1.3)

$$D_i(\mathbf{r}, t) = \hat{\epsilon}_{ij}(t, 0, \mathbf{r}, 0) e_j.$$

Перейдем в формулах (1.4) — (1.5) к изображениям Фурье, полагая $E_i(\mathbf{r}, t) = \int E_i(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} d\omega d\mathbf{k}$ (для изображений $E_i(\omega, \mathbf{k})$ и оригиналов $E_i(\mathbf{r}, t)$ используются одинаковые обозначения \mathbf{E} , что не должно привести к путанице в связи с указанием аргументов; аналогичные обозначения используются и для других величин). Впрочем, для получения $D_i(\omega, \mathbf{k})$ даже нет нужды проводить фурье-преобразование, а достаточно положить в (1.4) — (1.5)

$$E_j(\mathbf{r}', t') = E_j(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}'-\omega t')}$$

и аналогично для D_i . В результате ($\tau = t-t'$, $\mathbf{R} = \mathbf{r}-\mathbf{r}'$)

$$\left. \begin{aligned} D_i(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}), \\ \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \int_0^{\infty} d\tau \int d\mathbf{R} e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R}-\omega\tau)} \hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R}) = \\ &= \delta_{ij} + 4\pi\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}), \\ \chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \int_0^{\infty} d\tau \int d\mathbf{R} e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R}-\omega\tau)} \hat{\chi}_{ij}(\tau, \mathbf{R}). \end{aligned} \right\} \quad (1.6)$$

Важно подчеркнуть, что компонента $D_i(\omega, \mathbf{k})$ связана здесь только с компонентами $E_j(\omega, \mathbf{k})$ при тех же значениях ω

1181

и \mathbf{k} ; это имеет место только в силу временной и пространственной однородности среды, т. е. обусловлено зависимостью $\hat{\epsilon}_{ij}$ лишь от разностей $\tau = t - t'$ и $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

Величина $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ называется тензором комплексной диэлектрической проницаемости; тензор $\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ называют диэлектрической восприимчивостью.

Зависимость тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ от частоты соответствует частотной дисперсии, а зависимость от волнового вектора — пространственной дисперсии. Область, в которой ядро сколько-нибудь значительно, определяется характерными частотами среды ω_s (а также обратными временами релаксации) и характерными размерами a_s . Частоты ω_s обычно лежат в довольно широких пределах. Размеры a_s («радиус молекулярного действия» и т. п.), напротив, в целом ряде случаев могут считаться малыми. В жидкостях и твердых телах роль a_s обычно играют размеры молекул, расстояния между атомами или постоянные решетки — все эти величины обычно одного порядка и очень малы по сравнению с длиной волн, относящихся к оптическому диапазону частот *). Понятно поэтому, что пространственная дисперсия в оптике играет, вообще говоря, меньшую роль, чем частотная **).

*) В изотропной плазме характерным размером a является дебаевский радиус $D = \sqrt{\frac{\kappa T}{8\pi e^2 N}}$ (см., например, [6, 7]), а в проводящей среде при учете соударений также длина свободного пробега l . Параметры D и l вполне могут оказаться большими по сравнению с длиной волны или глубиной проникновения поля. Таким образом, не нужно думать, что пространственная дисперсия в оптике всегда является слабой.

**) При переходе от микроскопической к макроскопической электродинамике часто вводят (см., например, [27]) усреднение по «физически бесконечно малым» элементу объема и интервалу времени. Такая операция имеет смысл пренебрежения временными флуктуациями, но приводит к невозможности учета достаточно быстрых изменений полей в пространстве и во времени. В рамках обсуждаемого в тексте подхода проводится лишь статистическое усреднение, связанное с пренебрежением флуктуациями. Только по последней причине ядро $\hat{\epsilon}_{ij}$ в (1.4) можно считать зависящим от разностей $t - t'$ и $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Вместе с тем зависимость $\hat{\epsilon}_{ij}$ от $\tau = t - t'$ может в принципе быть сколь угодно «быстрой». Другими словами, при учете частотной дисперсии, когда нужно перейти к фурье-компонентам $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{r})$ и др., автоматически производится выделение полей с определенной частотой и нет никакой необходимости про-

Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ полностью описывает не только электрические, но и магнитные свойства среды, т. е. учитывает влияние индукции \mathbf{B} на \mathbf{D} (или, что то же, на индуцированный ток $\mathbf{j} = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{D} - \mathbf{E})$). В самом деле, в силу уравнения поля $\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$, для фурье-компонент $\mathbf{B}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{c}{\omega} [\mathbf{k} \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})]$ и связь между $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ и $\mathbf{B}(\omega, \mathbf{k})$ всегда может быть заменена соответствующей связью между $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ и $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$; конечно, сказанное справедливо и в рамках более общей связи (1.3). Правда, при пренебрежении пространственной дисперсией в общем случае нельзя положить $\epsilon_{ij}(\omega, 0) = \epsilon_{ij}(\omega)$, а нужно ввести также тензор магнитной проницаемости $\mu_{ij}(\omega)$. На этом вопросе мы еще остановимся в п. 1.3, но уже сейчас отметим, что в оптике неферромагнитных сред всегда можно и нужно положить $\mu_{ij}(\omega) = \delta_{ij}$ (см. [1], § 60 *). Поэтому в дальнейшем всегда будет приниматься, что

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0) = \epsilon_{ij}(\omega, 0) = \epsilon_{ij}(\omega), \quad (1.7)$$

где $\epsilon_{ij}(\omega)$ — тензор комплексной диэлектрической проницаемости при пренебрежении пространственной дисперсией.

Помимо тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, бывает удобно использовать обратный тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$. Очевидно,

$$\mathbf{E}_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D_j(\omega, \mathbf{k}), \quad (1.8)$$

причем

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{A_{ji}(\omega, \mathbf{k})}{| \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) |}, \quad \epsilon_{ii} \epsilon_{ij}^{-1} = \delta_{ij}, \quad (1.9)$$

где $| \epsilon_{ij} |$ — определитель тензора (матрицы) ϵ_{ij} , а $A_{ij} = (-1)^{i+j} \Delta_{ij}$ и Δ_{ij} — соответственно алгебраическое допол-

водить еще усреднение полей по интервалам времени $\Delta t \ll \frac{1}{\omega}$.

То же самое можно сказать об усреднении по физически бесконечно малому объему, если последовательно учитывается пространственная дисперсия, и поэтому используются величины $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$, $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$, $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и т. д.

*) Для ферромагнетиков тензор $\mu_{ij}(\omega)$ не всегда сводится к δ_{ij} даже в оптическом диапазоне частот (см. [27a]).

нение и минор, отвечающие элементу ϵ_{ij} в определителе $|\epsilon_{ij}|$ (напомним, что $A_{ii}\epsilon_{jj} = A_{ii}\epsilon_{ij} = |\epsilon_{im}|\delta_{ij}$). В тех случаях, когда $|\epsilon_{ij}| \neq 0$ и тензор ϵ_{ij}^{-1} существует, использование обоих тензоров ϵ_{ij} и ϵ_{ij}^{-1} , конечно, равноправно. Если же $|\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})| = 0$, то можно было бы ввести сингулярный тензор ϵ_{ij}^{-1} (при этом необходимо проявлять известную осторожность). В настоящей книге в качестве основного будет использоваться тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, а тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ вводится в согласии с определением (1.9); с сингулярным же тензором ϵ_{ij}^{-1} нам фактически иметь дело не придется.

Переменные ω и \mathbf{k} , от которых зависит тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, являются, вообще говоря, независимыми. Это обстоятельство ясно из самого определения (1.6), но все же иногда остается недостаточно очевидным. Дело в том, что в оптике особенно часто приходится сталкиваться с распространением волн при отсутствии внешних источников в самой среде, а в этом случае волновой вектор зависит от ω ; например, для нормальных однородных плоских волн $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s})\mathbf{s}$. Если же $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\omega)$, то пространственная дисперсия как бы сливается с частотной. Ответ на возникающий таким образом вопрос состоит в следующем. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ вводится для полей общего вида, когда источники \mathbf{j}_{ext} и ρ_{ext} в уравнениях (1.1) присутствуют и в самой среде*). В таких условиях можно создать поле \mathbf{E} с любыми, независимыми значениями ω и \mathbf{k} (компонента $E(\omega, \mathbf{k})$ в конечном счете выражается через $\mathbf{j}_{ext}(\omega, \mathbf{k})$ и $\rho_{ext}(\omega, \mathbf{k})$; подробнее см. п. 2.1). Уже отсюда ясно, что все вопросы, связанные с изучением распространения волн, могут быть рассмотрены, если известен тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Обратное же, насколько известно, неверно — восстановить тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ при всех ω и \mathbf{k} на основе исследования одного лишь распространения волн, вообще говоря, представляется невозможным.

Поскольку при переходе от $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ к $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ и $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ производилось преобразование Фурье, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ непосредственно был определен (см. (2.6)) только

*) В силу уравнения непрерывности, следующего из (1.1), $\text{div} \mathbf{j}_{ext} + \frac{\partial \rho_{ext}}{\partial t} = 0$ или $(\mathbf{k} \mathbf{j}_{ext}(\omega, \mathbf{k})) = \omega \rho_{ext}(\omega, \mathbf{k})$.

для вещественных значений ω и \mathbf{k} . Между тем ограничиться такими значениями в электродинамике сплошных сред никак нельзя. Правда, обычная постановка задачи в оптике приводит к тому, что частота ω является вещественной (задан внешний источник частоты ω). Но при этом вектор \mathbf{k} автоматически оказывается комплексным, поскольку свободно распространяющиеся волны в среде всегда затухают, по крайней мере если речь идет о равновесной среде (среде, находящейся в состоянии термодинамического равновесия). В областях прозрачности мнимая часть \mathbf{k} может оказаться малой или даже совсем несущественной, но, как хорошо известно, при изменении частоты неизбежен переход в область с заметным затуханием.

Из независимых физических соображений также ясно, что тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ должен иметь, вообще говоря, смысл и при комплексных значениях ω и \mathbf{k} . В самом деле, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ связывает поля типа $\text{const} \cdot e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$:

$$D_{0i} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_{0j} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (1.10)$$

Уже при вещественных ω и \mathbf{k} создание такого поля не отвечает реальности, поскольку фактически цуг волн всегда ограничен в пространстве и времени. Но если цуг достаточно длинен, причем в его разложении Фурье основную роль играют данные значения ω и \mathbf{k} , связь между \mathbf{D} и \mathbf{E} для цугов может быть заменена связью (1.10) для монохроматических волн. Конечно, делать это нужно с известной осторожностью, поскольку длинный цуг и монохроматическая волна не всегда эквивалентны, как это хорошо известно на примере введения групповой скорости или выражения для плотности энергии (см. п. 3.1). Но с такой же оговоркой связь (1.10) имеет смысл и при комплексных значениях ω и \mathbf{k} . В этом случае фактически речь также идет о конечных импульсах (пакетах) соответствующей формы (например, вида $E_0 e^{\omega^* t} e^{-i\omega' t}$, где $E_0 = \text{const}$ при $0 \leq t \leq T$ и $E_0 = 0$ вне этого интервала), которые аппроксимируются монохроматической волной типа (1.10).

Конкретный анализ вопроса о значениях $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в комплексной области должен производиться на базе исходного выражения (1.6). Если среда является термодинамически равновесной или хотя бы устойчивой, то ядро $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$ не

возрастает с ростом τ . Более того, для непроводящей среды это ядро убывает, т. е. $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau \rightarrow \infty, \mathbf{R}) \rightarrow 0$ (в проводящей среде $\epsilon_{ij}(\tau \rightarrow \infty, \mathbf{R}) \rightarrow \text{const}$, см. [1]). В этом случае не только в верхней полуплоскости комплексной переменной $\omega = \omega' + i\omega''$ (т. е. при $\omega'' > 0$), но и на вещественной оси $\omega = \omega'$ функция $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ не имеет полюсов — это сразу следует из выражения (1.6) и известных теорем теории интегралов Фурье. Отмеченное свойство $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ используется при получении дисперсионных соотношений (см. п. 1. 2). В нижней полуплоскости комплексной переменной ω функция $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ уже обладает особенностями, но в широкой области имеет смысл и может использоваться. Точно так же функция $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ является аналитической функцией в целой области комплексной переменной \mathbf{k} , если только ядро $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$ в (1.6) достаточно быстро спадает с ростом R , что и имеет место в действительности (к этому вопросу мы еще вернемся в § 14). Иными словами, функция $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, как и другие аналогичные выражения, встречающиеся в физике, является аналитической функцией своих аргументов в некоторой области их изменения*). Из теории аналитических функций известно, что такие функции, если они заданы на некотором конечном интервале (например, на участке вещественной оси), оказываются однозначно определенными и в некоторой окрестности вне этого интервала, в том числе в комплексной области. Тем самым существование функции $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ при вещественных ω и \mathbf{k} и предположение об ее аналитичности в некоторой области уже приводит к определенности ϵ_{ij} во всей этой комплексной области.

Итак, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ имеет смысл не только при вещественных ω и \mathbf{k} , но и в некоторой области комплексных значений этих переменных. Нахождение этой области — вопрос особый, который решается, например, при вычислении

*) Поскольку соответствующая терминология не всегда одинакова, заметим, что аналитической функцией часто называют функцию, не имеющую никаких особых точек, кроме полюсов. Аналитическую функцию, не имеющую также и полюсов, называют регулярной. Для того чтобы не усложнять изложения, мы не будем последовательно проводить такого разграничения и, если это не оговорено, будем называть аналитической регулярную функцию.

$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для определенной модели. Используя ниже тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ при комплексных ω и \mathbf{k} , мы будем, разумеется, предполагать, что в рассматриваемой области значений этот тензор существует (является регулярной функцией ω и \mathbf{k}).

Вектор \mathbf{k} определяется тремя числами (компонентами), и тем самым при переходе в комплексную область нужно в общем случае рассматривать три комплексные переменные, скажем, k_x, k_y и k_z . Другими словами, в комплексной области вектор \mathbf{k} имеет вид $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$, где \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' — вещественные векторы. Если эти векторы не параллельны, волны называются неоднородными. Большую роль играют, однако, однородные волны, для которых $\mathbf{k} = (k' + ik'')\mathbf{s} = k\mathbf{s}$, где \mathbf{s} — единичный вещественный вектор. В этом случае при заданном \mathbf{s} мы имеем дело лишь с одной комплексной переменной $k = k' + ik''$. Для нормальных волн $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\omega)$, и если волны однородны, $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s})\mathbf{s} = \frac{\omega}{c} (n + ix)\mathbf{s}$ (см. (1)), т. е. в этом случае $k' = \frac{\omega}{c} n(\omega, \mathbf{s})$ и $k'' = \frac{\omega}{c} x(\omega, \mathbf{s})$. Ниже

наиболее часто волновой вектор, хотя и будет обозначаться общим образом через \mathbf{k} , но иметь дело нам придется почти исключительно с однородными волнами. Чтобы не загромождать изложения, это обычно оговариваться не будет.

Как уже подчеркивалось, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ был введен лишь для однородной среды и, следовательно, к таким пространственно неоднородным средам, как кристаллы, выражение (1.6) непосредственно отношения не имеет. Если, однако, речь идет о длинных волнах (длина волны $\lambda \gg a$, где a — постоянная решетки), то использованию тензора типа $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ можно придать вполне определенный смысл и в кристаллах.

Более того, различия между кристаллами и однородной средой в этом отношении (в смысле использования тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в оптике) оказываются мало существенными. Этим вопросом мы займемся в п. 4.1, но и в §§ 1—3 будем часто говорить о кристаллах, хотя следовало бы, учитывая необходимость провести для кристаллов специальное рассмотрение, употреблять только термин «среда», рассматривая тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в качестве характеристики такой однородной среды.

1.2. Общие свойства тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ является, вообще говоря, комплексным даже при вещественных ω и \mathbf{k} . Кроме того, этот тензор в общем случае не может считаться ни эрмитовым, ни симметричным. Поэтому бывает удобно разделять ϵ_{ij} на вещественную (Re) и мнимую (Im) части, а также на два эрмитовых тензора ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} :

$$\epsilon_{ij} = \text{Re } \epsilon_{ij} + i \text{Im } \epsilon_{ij}, \quad (1.11)$$

$$\epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij} + i \epsilon''_{ij}. \quad (1.12)$$

В свою очередь ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} бывает удобно разделить на вещественную и мнимую части:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_{ij} &= \epsilon'_{ij,c} + i \epsilon'_{ij,a}, & \epsilon''_{ij} &= \epsilon''_{ij,c} + i \epsilon''_{ij,a}, \\ \epsilon'_{ij,c} &= \text{Re } \epsilon'_{ij} = \epsilon'_{ji,c}, & \epsilon'_{ij,a} &= \text{Im } \epsilon'_{ij} = -\epsilon'_{ji,a}, \\ \epsilon''_{ij,c} &= \text{Re } \epsilon''_{ij} = \epsilon''_{ji,c}, & \epsilon''_{ij,a} &= \text{Im } \epsilon''_{ij} = -\epsilon''_{ji,a} \end{aligned} \right\} (1.13)$$

Симметричность тензоров $\epsilon'_{ij,c}$ и $\epsilon''_{ij,c}$ и антисимметричность $\epsilon'_{ij,a}$ и $\epsilon''_{ij,a}$ вытекает, очевидно, из эрмитовости тензоров ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} . Далее,

$$\text{Re } \epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij,c} - \epsilon''_{ij,a}, \quad \text{Im } \epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij,a} + \epsilon''_{ij,c}. \quad (1.14)$$

При неучете пространственной дисперсии и отсутствии постоянного магнитного поля тензор ϵ_{ij} симметричен, в силу чего тензоры ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} являются вещественными и совпадают с $\text{Re } \epsilon_{ij}$ и $\text{Im } \epsilon_{ij}$. Поэтому обычно и не приходится разделять ϵ_{ij} двумя способами (см. также п. 1.3). Кроме того, нужно иметь в виду, что часто вместо проницаемости ϵ_{ij} вводится проводимость σ_{ij} . Наиболее распространено обозначение

$$\epsilon''_{ij} = \frac{4\pi\sigma_{ij}}{\omega}. \quad (1.15)$$

Довольно широко используется также комплексная неэрмитова проводимость*)

$$\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} + i \sigma''_{ij} = -\frac{i\omega}{4\pi} \{ \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} \} = -i\omega \chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}), \quad (1.16)$$

которая связывает индуцированный ток $\mathbf{j} = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{D} - \mathbf{E})$ с полем \mathbf{E} (см. (1.6)):

$$\begin{aligned} j_i(\omega, \mathbf{k}) &= \sigma_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{i\omega}{4\pi} \{ D_i(\omega, \mathbf{k}) - E_i(\omega, \mathbf{k}) \} = \\ &= -\frac{i\omega}{4\pi} \{ \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} \} E_j(\omega, \mathbf{k}) = -i\omega \chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Ниже величина σ_{ij} , как правило, употребляться не будет, и лишь в § 12 вводится проводимость, понимаемая в смысле (1.16). Нужно также заметить, что в литературе используется как экспоненциальная функция типа $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$, так и типа $e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$. Это приводит, например, в (1.16) к замене $-i$ на i и т. п. В настоящей книге, как ясно из изложенного, используется функция $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$.

Перейдем к обсуждению общих свойств тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Вещественное поле \mathbf{E} приводит, конечно, к вещественной индукции \mathbf{D} . Отсюда следует, что ядро $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$ в (1.6) является вещественным и, следовательно,

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^*(-\omega^*, -\mathbf{k}^*) \quad (1.18)$$

или, что то же,

$$\epsilon_{ij}(\omega^*, \mathbf{k}^*) = \epsilon_{ij}^*(-\omega, -\mathbf{k}). \quad (1.18a)$$

В тех случаях, когда нужно или желательно использовать вещественные поля, удобно записывать поле в виде

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \{ E_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + E_0^* e^{-i(\mathbf{k}^*\mathbf{r} - \omega^* t)} \}. \quad (1.19)$$

При этом по определению

$$\begin{aligned} D_i(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2} \left\{ \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_{0j} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \right. \\ &\quad \left. + \epsilon_{ij}(-\omega^*, -\mathbf{k}^*) E_{0j}^* e^{-i(\mathbf{k}^*\mathbf{r} - \omega^* t)} \right\}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

*) Выражение (1.16) непригодно при $\omega = 0$, на чем подробнее здесь останавливаться не будем (см. [7], § 2). Разумеется, в (1.15) и (1.16) через σ_{ij} обозначены разные величины.

Это выражение вещественно при условии (1.18), к которому мы, таким образом, приходим, хотя и совершенно эквивалентным, но, быть может, несколько более очевидным образом.

Использование принципа симметрии кинетических коэффициентов приводит к соотношению

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, B_{ext}) = \epsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k}, -B_{ext}). \quad (1.21)$$

Здесь B_{ext} — постоянная во времени индукция магнитного поля, отличная от нуля при наличии внешнего магнитного поля или магнитной структуры (ферро- и антиферромагнетики). Для простоты мы обычно в обоих этих случаях будем называть B_{ext} индукцией внешнего магнитного поля, что и отражено в обозначениях.

Для тензоров $\epsilon_{ij}(\omega)$ и $\epsilon_{ij}(\omega, B_{ext})$ доказательство соотношения (1.21) приведено в [1]. Обобщение на случай наличия пространственной дисперсии (см. [7], § 9) не связано с принципиально новыми моментами (поскольку векторы \mathbf{k} и B_{ext} одинаковым образом ведут себя при изменении знака времени, переход от соотношения $\epsilon_{ij}(\omega, B_{ext}) = \epsilon_{ji}(\omega, -B_{ext})$ к (1.21) может считаться почти очевидным*). Заметим также, что соотношения (1.21) непосредственно доказываются (см. [1, 7]) только для вещественных ω и \mathbf{k} . Однако в области аналитичности они автоматически сохраняются и при комплексных ω и \mathbf{k} .

Среда называется негиротропной, если

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ji}(\omega, \mathbf{k}), \quad (1.22)$$

причем считается, конечно, что это соотношение имеет место при всех ω и \mathbf{k} . При условии (1.22), как нетрудно проверить,

$$\operatorname{Re} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}), \quad \operatorname{Im} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}), \quad (1.22a)$$

т. е. эрмитовы тензоры ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} становятся вещественными (и симметричными).

*) Быть может, следует лишь пояснить, почему вектор \mathbf{k} изменяет знак при замене t на $-t$. По-видимому, проще всего это понять, если учесть, что при квантовании $\hbar \mathbf{k} = \mathbf{p}$, а импульс \mathbf{p} меняет знак при замене t на $-t$ уже по законам механики.

Аргумент B_{ext} в (1.22) опущен, так как во внешнем магнитном поле тензор ϵ_{ij} , строго говоря, всегда несимметричен, поскольку он равен ϵ_{ji} лишь при замене B_{ext} на $-B_{ext}$ (здесь имеется в виду именно внешнее поле, и мы не касаемся случая антиферромагнетиков при отсутствии внешнего поля, когда тензор ϵ_{ij} может оставаться симметричным при замене B_{ext} на $-B_{ext}$). Поэтому можно было бы говорить о гиротропии, вызванной магнитным полем. Но, чтобы не создавать путаницы, такая гиротропия будет называться магнитной активностью, а соответствующая среда — магнитоактивной. Ниже, если не оговорено обратное, будем считать, что $B_{ext} = 0$, а гиротропной называть только естественно гиротропную (активную) среду.

Из (1.21) — (1.22) ясно, что для негиротропной среды

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega, -\mathbf{k}). \quad (1.23)$$

Таким образом, в гиротропной среде должно существовать по крайней мере одно направление, не эквивалентное прямо противоположному направлению. Другими словами, только среда без центра симметрии может быть гиротропной. Обратное заключение неверно — среда может не иметь центра симметрии, но быть негиротропной, поскольку соблюдение соотношения (1.23) может обеспечиваться в силу наличия других элементов симметрии (см. п. 5.1).

При отсутствии пространственной дисперсии условие (1.23) выполняется автоматически и среда всегда негиротропна, о чем уже не раз упоминалось. Но, конечно, и в этом случае при $B_{ext} \neq 0$ появляется магнитная активность, поскольку

$$\epsilon_{ij}(\omega, B_{ext}) = \epsilon_{ji}(\omega, -B_{ext}) \quad (1.24)$$

и тензор ϵ_{ij} при данных ω и B_{ext} несимметричен (как и раньше, мы не касаемся сейчас возможности того, что $\epsilon_{ij}(\omega, B_{ext}) = \epsilon_{ij}(\omega, -B_{ext})$, как это может иметь место в антиферромагнетиках при отсутствии внешнего магнитного поля; в антиферромагнетиках B_{ext} есть среднее статистическое намагничение в данном микрообъеме кристалла, исчезающее лишь в среднем по всей элементарной ячейке магнитной структуры кристалла).

Определение гиротропной среды как среды с несимметричным тензором $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (при $B_{ext} = 0$) является, конечно,

несколько формальным. В § 6 можно будет, однако, убедиться в том, что именно несимметричность тензора ϵ_{ij} приводит к тем физическим особенностям (вращению плоскости поляризации в нормальных волнах при отсутствии поглощения), которые отличают гиротропные среды от негиротропных.

В п. 1.1 уже упоминалось, что функции $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ не имеют особенностей в верхней полуплоскости и на вещественной оси комплексной переменной ω (этот важный результат вытекает в первую очередь из принципа причинности, в силу которого в (1.6) интегрирование ведется лишь в интервале $0 \leq \tau \leq \infty$)*. Отсюда следует, что вещественная и мнимая части $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ на вещественной оси ω связаны между собой интегральным образом — с помощью так называемых дисперсионных соотношений.

Для их получения рассмотрим интеграл

$$\int_C \frac{\epsilon_{ij}(x, \mathbf{k}) - \delta_{ij}}{x - \omega} dx = -i\pi \{\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij}\} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon_{ij}(x, \mathbf{k}) - \delta_{ij}}{x - \omega} dx = 0, \quad (1.25)$$

где первый интеграл берется по контуру C , указанному на рис. 1, а второй интеграл берется по вещественной оси и понимается в смысле главного значения (такие интегралы обозначаются как \int). В (1.22) учтено, что в верхней полуплоскости **)

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij}. \quad (1.26)$$

*) Для нормальных проводников тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ имеет простой полюс при $\omega = 0$ (см., например, выражение (1.15)); для сверхпроводников при $\omega = 0$ появляется уже полюс $1/\omega^2$ (см. [28]). Кроме того, ядро $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, R)$ в (1.6) можно считать не возрастающим с ростом τ лишь для устойчивой (в частности, равновесной) среды. В тексте, если это не оговорено, речь будет идти только о непроводящей равновесной среде. Заметим также, что различие между нижней и верхней полуплоскостями переменной ω связано с неэквивалентностью полей типа $e^{\omega''t}$ при $\omega'' > 0$ и $\omega'' < 0$ (в последнем случае поле предполагается в прошлом бесконечным; см. [1], § 62).

**) Если функция $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в нижней полуплоскости ω однозначна и имеет конечное число полюсов, то свойство (1.26) имеет место и в этой области.

При вещественной частоте (при $\omega = \omega'$) соотношение (1.26) очевидно из теории дисперсии — на очень высокой частоте среда «не успевает» реагировать на внешнее воздействие и в этом отношении перестает отличаться от вакуума. В комплексной области при $\omega = \omega' + i\omega''$, $\omega'' > 0$, $|\omega| \rightarrow \infty$ поле также предельно резко меняется во времени, в силу чего среда не успевает на него реагировать. Кроме того, как следует из теории аналитических функций, если $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) \rightarrow \delta_{ij}$ при $\omega = \omega' \rightarrow \pm \infty$, то при $\omega = \omega' + i\omega'' \rightarrow \infty$, $\omega'' > 0$ (т. е. $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ либо тоже стремится к δ_{ij} , либо нарастает быстрее некоторой экспоненты. Последнее представляется из физических соображений совершенно невероятным и противоречит сделанному выше заключению об отсутствии у $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ особенностей в верхней полуплоскости (неограниченное возрастание $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в верхней полуплоскости означало бы наличие особой точки при $\omega'' \rightarrow \infty$); поэтому приведенная теорема подкрепляет [29] уверенность в справедливости соотношения (1.26).

Отделяя в (1.25) вещественную и мнимую части, получаем дисперсионные соотношения*)

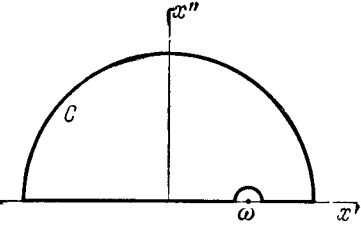


Рис. 1. Контур интегрирования C .

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{Re} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im} \epsilon_{ij}(x, \mathbf{k})}{x - \omega} dx, \\ \operatorname{Im} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Re} \epsilon_{ij}(x, \mathbf{k}) - \delta_{ij}}{x - \omega} dx. \end{aligned} \right\} \quad (1.27)$$

Формулы (1.27) относятся, очевидно, к каждой компоненте тензора в отдельности, т. е. всего в общем случае имеется 18

*) Напомним, что в (1.27) и используемых ниже дисперсионных формулах считается отсутствующим полюс у $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ при $\omega = 0$.

соотношений ($\text{Re } \epsilon_{ij}$ и $\text{Im } \epsilon_{ij}$ имеют по 9 компонент). Если ввести симметричные и антисимметричные тензоры $\epsilon'_{ij,c}$, $\epsilon''_{ij,c}$, $\epsilon'_{ij,a}$ и $\epsilon''_{ij,a}$ (см. (1.13) — (1.14)), то формулы (1.27) запишутся так:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_{ij,c}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon''_{ij,c}(x, \mathbf{k})}{x - \omega} dx, \\ \epsilon''_{ij,c}(\omega, \mathbf{k}) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon'_{ij,c}(x, \mathbf{k}) - \delta_{ij}}{x - \omega} dx, \\ \epsilon'_{ij,a}(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon''_{ij,a}(x, \mathbf{k})}{x - \omega} dx, \\ \epsilon''_{ij,a}(\omega, \mathbf{k}) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon'_{ij,a}(x, \mathbf{k})}{x - \omega} dx. \end{aligned} \right\} (1.28)$$

Если среда не гиротропна, т. е. соблюдается условие (1.23), то, согласно (1.18), для вещественных ω и \mathbf{k}

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}^*(-\omega, \mathbf{k}), \quad \text{Re } \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \text{Re } \epsilon_{ij}(-\omega, \mathbf{k}), \\ \text{Im } \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= -\text{Im } \epsilon_{ij}(-\omega, \mathbf{k}). \end{aligned}$$

В таких условиях соотношения (1.27) легко привести к виду

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{x \epsilon''_{ij}(x, \mathbf{k})}{x^2 - \omega^2} dx, \\ \epsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon'_{ij}(x, \mathbf{k}) - \delta_{ij}}{x^2 - \omega^2} dx, \end{aligned} \right\} (1.27a)$$

где учтены также равенства (1.22a).

Волновой вектор \mathbf{k} входит в (1.27) — (1.28) как параметр и остается произвольным (предполагается, конечно, что тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для рассматриваемых \mathbf{k} существует). Если помимо использованных свойств, важнейшее из которых связано с учетом причинности, принять во внимание факт

конечности скорости распространения взаимодействия, то это накладывает некоторые дополнительные ограничения на вид выражений (1.3) — (1.5) для $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$. В результате можно прийти (см. [30] и [7], приложение) к дисперсионным соотношениям, лишь в частном случае сводящимся к дисперсионным соотношениям (1.27) — (1.28).

Отметим, что все свойства симметрии, которыми обладает тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, переносятся и на обратный тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$, как это следует непосредственно из (1.9). В случае дисперсионных соотношений положение уже несколько иное. Отсутствие при $\omega'' \geq 0$ особенностей у $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, которое было использовано, отнюдь не обеспечивает автоматически отсутствия особенностей и у $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$, так как полюс ϵ_{ij}^{-1} появляется уже при $|\epsilon_{ij}| = 0$. Этот вопрос связан с более общей проблемой о некоторых аналитических свойствах $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, B_{ext})$, которые не были упомянуты выше.

Заключение о конечности $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ при $\omega'' \geq 0$ (за исключением, быть может, точки $\omega = 0$, в которой для статически проводящей среды у ϵ_{ij} имеется полюс) помимо причинности основывалось на предположении о невозрастании ядра $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$ в (1.6) с ростом τ . Если среда находится в состоянии термодинамического равновесия, то такое допущение физически совершенно очевидно*). Для широкого класса неравновесных состояний можно ожидать такого же результата, и только для неустойчивых состояний (сред) или при наличии внешних источников ядро $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$ может возрастать при $\tau \rightarrow \infty$. Вместе с тем, по крайней мере для равновесной среды, можно подойти к вопросу и с несколько иной точки зрения, а именно опираясь на принцип возрастания энтропии. Это значит, что в равновесной среде под влиянием любых воздействий на нее тепло должно обязательно выделяться, а не поглощаться или вообще отсутствовать.

*) Напомним, что при $E = E_0(\mathbf{r}') \delta(t')$ индукция $D_i(\mathbf{r}, t) = \int dr' \hat{\epsilon}_{ij}(t, \mathbf{r} - \mathbf{r}') E_{0j}(\mathbf{r}')$. В состоянии равновесия «отклик» D не может возрастать во времени (это значит, что индуцированный ток $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} (D - E)$ должен стремиться к нулю при $t \rightarrow \infty$).

Это требование для изотропной среды без пространственной дисперсии приводит к хорошо известному условию $\frac{\omega}{4\pi} \epsilon''(\omega) = \sigma(\omega) > 0$, т. е. при $\omega \neq 0$ к условию $\epsilon''(\omega) > 0$.

В п. 3.1 будет показано, что при вещественных ω и \mathbf{k} выделяющееся в единице объема тепло равно

$$q = \frac{i\omega}{16\pi} \{ \epsilon_{ij}^*(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) - \epsilon_{ji}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) \} E_{0i} E_{0j}^* = \\ = \frac{\omega}{8\pi} \epsilon_{ij}''(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) E_{0j} E_{0i}^*. \quad (1.29)$$

Здесь E_0 — амплитуда электрического поля $\mathbf{E} = E_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$, которая в общем случае (при наличии внешних источников) может считаться совершенно произвольной. По последней причине вытекающее из принципа возрастания энтропии условие $q(\omega) > 0$ можно записать в виде

$$\epsilon_{ij}''(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) a_i a_j^* > 0, \quad \omega = \omega' > 0, \quad (1.30)$$

где \mathbf{a} — произвольный комплексный вектор; в частности, можно положить $\mathbf{a} = \mathbf{s}$, где \mathbf{s} — единичный вещественный вектор.

Рассмотрим теперь функцию

$$u(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) a_i a_j^*. \quad (1.31)$$

В силу эрмитовости тензоров ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} из (1.30) следует, что

$$\text{Im } u = \epsilon_{ij}'' a_i a_j^* > 0, \quad \omega = \omega' > 0. \quad (1.32)$$

Легко показать [29], используя уже указанные в настоящем разделе свойства $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext})$, что

$$\text{Im } u(-\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) < 0, \quad \omega = \omega' < 0. \quad (1.33)$$

Более того, если пространственная дисперсия отсутствует или в случае, если она присутствует, но $\mathbf{B}_{ext} = 0$ (или ϵ_{ij} не зависит от знака \mathbf{B}_{ext}), то

$$\text{Im } u(-\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) = -\text{Im } u(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}). \quad (1.34)$$

Наконец, всегда $u \rightarrow 1$ при $\omega \rightarrow \infty$, поскольку в этом пределе $\epsilon_{ij} \rightarrow \delta_{ij}$ (см. (1.26)); здесь и ниже считаем, что $\mathbf{a} = \mathbf{s}$, $s = 1$).

Перечисленные свойства $u(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext})$ совпадают со свойствами функции $\epsilon(\omega)$ в изотропной равновесной среде и, как

и в этом последнем случае (см. [1], § 62), можно утверждать следующее. При указанных условиях (1.32) — (1.34) функция $u(\omega)$ не принимает вещественных значений ни в какой точке верхней полуплоскости, за исключением точек мнимой оси. На этой оси $u(\omega)$ монотонно убывает от некоторого значения $u > 1$ (диэлектрики) или $u = \infty$ (металлы) при $\omega = i\omega'' = i0$ до значения $u = 1$ при $\omega = i\infty$. Отсюда следует, в частности, что функция u не имеет нулей в верхней полуплоскости. Функция u не имеет нулей и на вещественной оси (см. исходные неравенства (1.32) и (1.33); в точке $\omega = 0$ для диэлектриков $\epsilon_{ij}''(\omega) = 0$, но и в этом случае $u = \epsilon'_{ij}(\omega = 0) a_i a_j^* > 1$, как это следует из термодинамики, см. [1], § 14).

Итак, в верхней полуплоскости и на вещественной оси *)

$$\left. \begin{aligned} u(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext}) a_i a_j^* \neq 0, \\ \omega = \omega' + i\omega'', \quad \omega'' \geq 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.35)$$

Это неравенство влечет за собой другое:

$$|\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext})| \neq 0, \quad \omega = \omega' + i\omega'', \quad \omega'' > 0. \quad (1.36)$$

Действительно, если $|\epsilon_{ij}| = 0$, то система уравнений $\epsilon_{ij} a_j = 0$ всегда имеет решение $a_j \neq 0$, для которого квадратичная форма (1.35) равна нулю. В условиях (1.36) существует и не имеет особенностей обратный тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext})$, причем

$$|\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext})| \neq 0, \quad \omega = \omega' + i\omega'', \quad \omega'' \geq 0, \quad (1.37)$$

где использован также факт отсутствия особенностей у $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{ext})$.

Если тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ не имеет особенностей при $\omega'' \geq 0$, то для этого тензора можно, конечно, написать такие же дисперсионные соотношения, как и для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

*) Соблюдение условия симметрии (1.34) для получения (1.35) не обязательно. Если неравенства (1.32) и (1.33) имеют место, но условие (1.34) не выполняется, то сформулированные свойства функции $u(\omega)$ изменяются лишь в том отношении, что при этом роль мнимой оси играет некоторая единственная кривая в верхней полуплоскости ω , выходящая из точки $\omega = 0$ (см. [29]).

Сделанные заключения обоснованы лишь в условиях, когда выражение (1.29) для q может интерпретироваться как тепло. Если это так, то по крайней мере для равновесной среды заведомо $q > 0$, что и использовалось. При вещественной частоте ω и отсутствии пространственной дисперсии или при ее наличии, но вещественных \mathbf{k} величина q действительно является теплом. Но в присутствии пространственной дисперсии для комплексных \mathbf{k} это уже не так (см. п. 3.1). Вопрос о виде выражения для тепла и использовании принципа возрастания энтропии в общем случае остается неясным. Более того, по всей вероятности, выразить тепло через $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ при комплексном \mathbf{k} невозможно (см. п. 3.1). В силу сказанного область применимости неравенств (1.35) — (1.37) при комплексных \mathbf{k} остается невыясненной. Тем не менее некоторые замечания на этот счет сделать все же возможно. Во-первых, в условиях слабой пространственной дисперсии соблюдения неравенств (1.35) — (1.37) можно ожидать и в некоторой области рассматриваемых в этом случае сравнительно небольших комплексных значений \mathbf{k} просто из тех соображений, что эти неравенства справедливы и при отсутствии пространственной дисперсии и при $\text{Im } \mathbf{k} = 0$. Во-вторых, как будет выяснено в п. 2.3, уравнения

$$\begin{aligned} u = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, B_{ext}) s_i s_j = 0, \quad |\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, B_{ext})| = 0, \\ |\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, B_{ext})| = 0 \end{aligned} \quad (1.38)$$

являются необходимыми условиями существования решений кулоновской задачи (речь идет о кулоновских экситонах соответственно типа продольных волн, «фиктивных» продольных волн и «волн поляризации»; см. п. 2.2). В равновесной среде кулоновские экситоны всегда должны хотя и слабо, но загухать (такое заключение представляется естественным из физических соображений). Но это значит, что для кулоновских экситонов мнимая часть частоты $\omega'' < 0$, а в области $\omega'' > 0$ уравнения (1.38) не имеют решений, отвечающих кулоновским экситонам. В этой связи представляется естественным предположение о справедливости неравенств (1.35) — (1.37) и для всех имеющих физический интерес комплексных значений волнового вектора \mathbf{k} . Если это верно, то тензоры $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ могут использоваться совершенно равноправным образом.

В заключение настоящего раздела подчеркнем возможность переноса целого ряда выводов, относящихся к электродинамике сплошных сред и оптике, на механику сплошных сред, акустику и вообще теорию линейных систем. Этот вывод вполне очевиден, поскольку непосредственный физический смысл величин D , E и т. д. выше в большинстве случаев не был существен, а использовалась лишь линейность связи (1.6), некоторые свойства симметрии и т. п. Если же говорить не о формальных аналогиях, то в механике сплошных сред также легко обнаружить точки соприкосновения с электродинамикой. Оносится это, например, и к вопросу о пространственной дисперсии. Тем не менее нам представилось нецелесообразным останавливаться здесь, например, на учете влияния пространственной дисперсии при распространении звука в жидкостях и твердых телах [31, 32], на дисперсионных соотношениях в акустике [33] и т. д.

1.3. Приближение классической кристаллооптики. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в изотропной среде. При пренебрежении пространственной дисперсией, как уже отмечалось, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для немагнитной среды (т. е. при $\mu_{ij} = \delta_{ij}$) переходит в тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$, используемый в классической кристаллооптике. Поскольку для рассматриваемого нами оптического диапазона среда (если речь не идет о ферромагнетиках) всегда немагнитна, ни о каком ограничении здесь нет речи (см. ниже). Нужно вместе с тем подчеркнуть, что существование предельного перехода

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0) = \epsilon_{ij}(\omega) \quad (1.7)$$

хотя и весьма естественно, но все же не тривиально. В самом деле, существуют величины, которые даже при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ продолжают зависеть от $\mathbf{s} = \frac{\mathbf{k}}{k}$ и тем самым не являются аналитическими функциями \mathbf{k} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. В случае же $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ регулярность при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ следует из физических соображений, поскольку не видно никаких оснований теоретического или экспериментального характера для того, чтобы в предельном случае достаточно длинных волн, т. е. при переходе к однородному полю, индукция $D(\omega, \mathbf{k})$ как функция поля $E(\omega, \mathbf{k})$ могла зависеть от величины или от направления \mathbf{k} .

В приближении классической кристаллооптики, согласно (1.18), имеем

$$\epsilon_{ij}(-\omega, \mathbf{B}_{ext}) = \epsilon_{ij}^*(\omega^*, \mathbf{B}_{ext}), \quad (1.39)$$

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext}) = \epsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{B}_{ext}). \quad (1.40)$$

Если, кроме того, внешнее магнитное поле отсутствует ($\mathbf{B}_{ext} = 0$), то

$$\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon_{ji}(\omega) = \epsilon'_{ij}(\omega) + i\epsilon''_{ij}(\omega). \quad (1.41)$$

При этом, очевидно, эрмитовы тензоры ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} являются вещественными и симметричными:

$$\epsilon'_{ij}(\omega) = \text{Re } \epsilon_{ij}(\omega), \quad \epsilon''_{ij}(\omega) = \text{Im } \epsilon_{ij}(\omega). \quad (1.42)$$

Согласно (1.39) на вещественной оси

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}(-\omega) &= \epsilon_{ij}^*(\omega); & \epsilon'_{ij}(-\omega) &= \epsilon'_{ij}(\omega), \\ \epsilon''_{ij}(-\omega) &= -\epsilon''_{ij}(\omega), & \omega'' &= \text{Im } \omega = 0. \end{aligned} \quad (1.43)$$

В силу (1.42) — (1.43) дисперсионные соотношения (1.27) в классической кристаллооптике (при $\mathbf{B}_{ext} = 0$) принимают вид

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_{ij}(\omega) - \delta_{ij} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{x \epsilon''_{ij}(x) dx}{x^2 - \omega^2}, \\ \epsilon''_{ij}(\omega) &= -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_{ij}(x) - \delta_{ij}}{x^2 - \omega^2} dx. \end{aligned} \right\} \quad (1.44)$$

Сделаем теперь замечание, касающееся обозначений. В электродинамике сплошных сред особенно распространена такая форма записи уравнений поля:

$$\left. \begin{aligned} \text{rot } \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{ext}, & \text{div } \mathbf{D} &= 4\pi \rho_{ext}, \\ \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.45)$$

Для немагнитной среды векторы напряженности магнитного поля \mathbf{H} и магнитной индукции \mathbf{B} совпадают (в этом и состоит определение немагнитной среды). Тогда системы (1.1) и (1.45) тождественны. Далее, вектор \mathbf{D} в (1.1) определен так, что

ток, индуцированный полями \mathbf{E} и \mathbf{B} , целиком связан с \mathbf{D} ; в (1.45) с \mathbf{D} связан только ток, создаваемый полем \mathbf{E} . Часто вводятся и другие обозначения; например, в (1.45) вместо $\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ пишут $\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{\text{пров}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$, где $\mathbf{j}_{\text{пров}}$ — плотность тока проводимости, а \mathbf{D} — часть индукции, находящаяся в фазе с полем \mathbf{E} (в условиях (1.41) при этом $D_i(\omega) = \epsilon'_{ij}(\omega) E_j(\omega)$). Если среда магнитна, то соответствие между (1.1) и (1.45) таково: $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ из (1.1) отвечает вектору $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + 4\pi c \text{rot } \mathbf{M}$ из

(1.45), причем $4\pi \mathbf{M} = \mathbf{B} - \mathbf{H}$. Итак, магнитные свойства среды, связанные с отличием \mathbf{B} от \mathbf{H} , в случае системы (1.1) целиком заключены в \mathbf{D} , как это и отмечалось в п. 1.1.

При использовании уравнений (1.45) в линейной электродинамике полагают

$$\mathbf{B}_i(\omega) = \mu_{ij}(\omega) H_j(\omega), \quad \mu_{ij}(\omega) = \delta_{ij} + 4\pi \chi_{ij}^{(M)}(\omega), \quad (1.46)$$

где μ_{ij} и $\chi_{ij}^{(M)}$ — соответственно магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость.

При пренебрежении пространственной дисперсией система (1.1) должна быть эквивалентна (1.45) и для магнитной среды. Отсюда следует, что для магнитной среды соотношение (1.7) несправедливо и с $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0)$ связаны оба тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ и $\mu_{ij}(\omega)$. Соответствующий предельный переход прослежен в [7], § 3; здесь нет необходимости обсуждать этот вопрос подробнее, поскольку введение функции μ_{ij} имеет смысл лишь в сравнительно небольшой области частот в окрестности точки $\omega/k = 0$, где $1/k$ — характерный размер неоднородности поля в среде. По этой причине в оптике, если не рассматривать ферромагнетики [27а], нужно полагать $\mu_{ij}(\omega) = \delta_{ij}$ (см. [1], § 60). Проще всего в оптике применять непосредственно систему уравнений (1.1) с использованием тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, учитывающего и влияние магнитного поля. С системой же (1.45) удобнее работать в области низких частот и длинных волн, когда свойства линейной среды можно полностью описать при введении тензоров $\epsilon_{ij}(\omega)$ и $\mu_{ij}(\omega)$.

Остановимся теперь на случае изотропной среды (газы, жидкости, а при некоторых условиях и поликристаллы). В такой среде, по определению, отсутствует какое-либо выделенное направление. При пренебрежении пространственной

дисперсией тензор ϵ_{ij} не может также зависеть от \mathbf{k} или $\mathbf{s} = \frac{\mathbf{k}}{k}$ (см. (1.7)). Поэтому приходится использовать лишь один единичный тензор 2-го ранга δ_{ij} и, следовательно,

$$\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon(\omega) \delta_{ij}. \quad (1.47)$$

Если же пространственная дисперсия учитывается, то для изотропной, но негиротропной среды

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{tr}(\omega, k^2) (\delta_{ij} - s_i s_j) + \epsilon_l(\omega, k^2) s_i s_j. \quad (1.48)$$

Здесь $k = k' + ik''$, $\mathbf{k} = k\mathbf{s}$ (однородные волны), а ϵ_{tr} и ϵ_l зависят, помимо ω , лишь от $k^2 = (k' + ik'')^2$ в силу условия отсутствия гиротропии (1.23); в (1.48) использован также тот факт, что привлечение вектора \mathbf{s} позволяет образовать еще один тензор 2-го ранга, а именно $s_i s_j$. Форма записи и обозначения, использованные в (1.48), становятся ясными, если рассмотреть продольное и поперечное электрические поля E_{\parallel} и E_{\perp} :

$$E_{\parallel} = E_{\parallel} \mathbf{s}, \quad \mathbf{s} E_{\perp} = 0. \quad (1.49)$$

Очевидно, для тензора (1.48)

$$\epsilon_{ij} E_{\parallel, j} = \epsilon_l E_{\parallel, i}, \quad \epsilon_{ij} E_{\perp, j} = \epsilon_{tr} E_{\perp, i}. \quad (1.50)$$

Итак, изотропная негиротропная среда характеризуется двумя функциями $\epsilon_{tr}(\omega, k^2)$ и $\epsilon_l(\omega, k^2)$ — поперечной и продольной диэлектрической проницаемостями.

В силу (1.7), очевидно,

$$\epsilon_{tr}(\omega, 0) = \epsilon_l(\omega, 0) = \epsilon(\omega), \quad (1.51)$$

в противном случае тензор $\epsilon_{ij}(\omega, 0)$ зависел бы от \mathbf{s} . В условиях слабой пространственной дисперсии в первом приближении

$$\epsilon_{tr}(\omega, k^2) = \epsilon(\omega) + \alpha_{tr}(\omega) k^2, \quad \epsilon_l(\omega) = \epsilon(\omega) + \alpha_l(\omega) k^2, \quad (1.52)$$

где α_{tr} и α_l порядка a^2 (a — характерный размер *).

В форме, аналогичной (1.48) и (1.52), можно для изотропной среды записать и тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$.

*) В конденсированной неметаллической среде a есть, например, межуатомное расстояние. В изотропной плазме роль a играет дебаевский радиус (см. [6], § 8), в газе и в металлах — длина свободного пробега молекул или электронов и т. д.

Отметим, что формулы (1.52) и аналогичные формулы для $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ отвечают связям (материальным уравнениям):

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{D}(\omega) &= \epsilon(\omega) \mathbf{E}(\omega) + a(\omega) \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E}(\omega) + b(\omega) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{E}(\omega), \\ \mathbf{E}(\omega) &= \frac{\mathbf{D}(\omega)}{\epsilon(\omega)} + c(\omega) \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{D}(\omega) + d(\omega) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{D}(\omega), \end{aligned} \right\} \quad (1.53)$$

где $\mathbf{D}(\omega)$ и $\mathbf{E}(\omega)$ зависят, конечно, также и от \mathbf{r} . Выражения (1.53) являются самыми общими связями между двумя векторами в изотропной и негиротропной среде при учете производных не выше второго порядка.

Изотропная среда может быть гиротропной, поскольку ее элементы (например, некоторые молекулы в газе или в растворе) могут не обладать центром симметрии. Изотропность при этом приводит к равноправности всех направлений в том смысле, что, например, нормальные волны данного типа при всех \mathbf{s} обладают одинаковыми значениями $\tilde{n}(\omega)$ и одинаковой поляризацией.

Формально наличие гиротропии в изотропной среде соответствует появление некоторого псевдоскаляра g , т. е. величины, изменяющей знак при зеркальном отражении. Такой псевдоскаляр эквивалентен полностью антисимметричному тензору 3-го ранга $\gamma_{ijl} = g e_{ijl}$, где e_{ijl} — известный полностью антисимметричный псевдотензор 3-го ранга ($e_{123} = 1$; $e_{132} = -1$, $e_{112} = 0$ и т. д.; при зеркальном отражении e_{ijl} не изменяется). Используя тензор γ_{ijl} к (1.48) можно добавить член

$$i \gamma_{ijl}(\omega, k^2) k_l, \quad \gamma_{ijl} = g(\omega, k^2) e_{ijl}. \quad (1.54)$$

Такое выражение (в силу $\gamma_{ijl} = -\gamma_{jil}$) удовлетворяет условию (1.21), а множитель i введен для удобства (см. п. 5.1). Несколько подробнее на случае изотропной гиротропной среды мы еще остановимся в п. 5.1, § 6 и п. 10.3 в связи с обсуждением свойств анизотропных гиротропных сред.

§ 2. Нормальные электромагнитные волны в среде

2.1. Волновое и дисперсионное уравнения. Нормальными электромагнитными волнами будем называть все пропорциональные множителю $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$ решения однородных

уравнений поля (1.1) (т. е. уравнений (1.1) с $J_{ext} = 0$ и $\rho_{ext} = 0$):

$$\left. \begin{aligned} \text{rot } \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{D} &= 0, \\ \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

Будем искать решения этой системы в виде (это эквивалентно переходу к изображениям Фурье)

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, & \mathbf{D} &= \mathbf{D}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \\ \mathbf{B} &= \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \\ E_0 &= \text{const}, & D_0 &= \text{const}, & B_0 &= \text{const}. \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

Такие решения иногда не образуют полной системы нормальных волн; именно, решений типа (2.2) недостаточно, когда дисперсионное уравнение (2.22) (см. ниже) имеет существенные кратные корни, вопрос о которых будет рассмотрен в п. 2.3. Сейчас же подставим в (2.1) выражение (2.2). В результате получим

$$\mathbf{D} = -\frac{c}{\omega} [\mathbf{k}\mathbf{B}], \quad (2.3)$$

$$\mathbf{k}\mathbf{D} = 0, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{B} = \frac{c}{\omega} [\mathbf{k}\mathbf{E}], \quad (2.5)$$

$$\mathbf{k}\mathbf{B} = 0. \quad (2.6)$$

Здесь и ниже можно с таким же успехом писать \mathbf{E}_0 , \mathbf{D}_0 и \mathbf{B}_0 или $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$, $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ и $\mathbf{B}(\omega, \mathbf{k})$ вместо \mathbf{E} , \mathbf{D} и \mathbf{B} . Очевидно, при $\omega \neq 0$ уравнения (2.4) и (2.6) являются следствием соответственно уравнений (2.3) и (2.5).

Исключая поле \mathbf{B} из уравнений (2.3) и (2.5), получаем «волновое уравнение»

$$\mathbf{D} = -\frac{c^2}{\omega^2} [\mathbf{k} [\mathbf{k}\mathbf{E}]] = \frac{c^2}{\omega^2} \{k^2 \mathbf{E} - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{E})\}. \quad (2.7)$$

Впрочем, волновым называют и более общее уравнение, получающееся непосредственно из (2.1):

$$\text{rot rot } \mathbf{E} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.8)$$

В результате подстановки выражений (2.2) уравнение (2.8) принимает, разумеется, вид (2.7). Важно подчеркнуть, не-

смотря на его очевидность, следующий факт: волны типа (2.2) с одним значением ω и \mathbf{k} могут быть решениями уравнений (2.1) лишь в том случае, когда вектор $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ связан только с $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ при одних и тех же ω и \mathbf{k} . Последнее как раз и имеет место в случае справедливости связи (1.6), т. е. возможности ввести тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

Подставляя (1.6) в (2.7), имеем

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - k^2 \delta_{ij} + k_i k_j \right) E_j(\omega, \mathbf{k}) = 0. \quad (2.9)$$

Эта однородная система алгебраических уравнений имеет нетривиальное решение $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) \neq 0$ только при условии равенства нулю определителя:

$$\left| \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - k^2 \delta_{ij} + k_i k_j \right| = 0. \quad (2.10)$$

При использовании вместо ϵ_{ij} тензора ϵ_{ij}^{-1} получаем

$$\left| \frac{\omega^2}{c^2} \delta_{ij} - k^2 \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) + k_i k_j \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) \right| = 0. \quad (2.11)$$

В тех случаях, когда $|\epsilon_{ij}| \neq 0$ и, следовательно, тензор ϵ_{ij}^{-1} существует, уравнения (2.10) и (2.11) эквивалентны. Условие $|\epsilon_{ij}| = 0$ отвечает, однако, весьма интересному классу решений — продольным волнам, для которых $\mathbf{D} = 0$ при $\mathbf{E} \neq 0$ (см. п. 2.2). Поэтому при анализе общих вопросов использование уравнений (2.9) и (2.10) представляется предпочтительным. С другой стороны, при исследовании непродольных волн удобно пользоваться уравнением (2.11) и системой (2.7), где вектор \mathbf{E} выражен через \mathbf{D} . Дело в том, что в силу условия (2.4), которое сразу следует и из (2.7), в системе координат, направленной по $\mathbf{s} = \frac{\mathbf{k}}{k}$ (рассматриваем однородные волны), вектор \mathbf{D} имеет лишь две компоненты. В результате уравнения (2.7) и (2.11) заметно упрощаются (см. п. 2.3, уравнения (2.45) и (2.46)).

Дисперсионное уравнение устанавливает связь между ω и \mathbf{k} — его решения имеют вид

$$\omega_l = \omega_l(\mathbf{k}), \quad l = 1, 2, \dots, \quad (2.12)$$

где индекс l отвечает различным нормальным волнам,

Если решения типа (2.2) подставить не в (2.1), а в исходную систему (1.1), то вместо (2.3) — (2.5) и (2.9) получаем

$$\left. \begin{aligned} D &= -\frac{c}{\omega} [\mathbf{k}B] - i\frac{4\pi}{\omega} J_{ext}, & (\mathbf{k}D) &= 4\pi\rho_{ext}, \\ B &= \frac{c}{\omega} [\mathbf{k}E], & (\mathbf{k}B) &= 0; \end{aligned} \right\} \quad (2.13)$$

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - k^2\delta_{ij} + k_i k_j\right) E_j = -i\frac{4\pi\omega}{c^2} J_{ext, i}, \quad (2.14)$$

где под E , J_{ext} , ρ_{ext} и т. д. понимаются изображения Фурье $E(\omega, \mathbf{k})$, $J_{ext}(\omega, \mathbf{k})$, $\rho_{ext}(\omega, \mathbf{k})$ и т. д.

При наличии внешних источников J_{ext} система (2.14) уже неоднородна и имеет решения типа (2.2) при ω и \mathbf{k} , не удовлетворяющих дисперсионному уравнению (2.10). Именно это обстоятельство, как отмечалось в п. 1.1, позволяет рассматривать ω и \mathbf{k} в $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в качестве независимых переменных. Если плотность $J_{ext}(\omega, \mathbf{k})$ отлична от нуля для ω и \mathbf{k} , удовлетворяющих дисперсионному уравнению (2.10), то система (2.14) не имеет смысла. Это и понятно, поскольку такой случай отвечает строгому резонансу между внешним воздействием и нормальными колебаниями (волнами) в среде*). Полная ясность в отношении поведения среды при наличии резонансов может быть достигнута при исследовании задачи с начальными или граничными условиями, что и отвечает физической постановке вопроса (см., например, [7], § 5).

В кристаллооптике, как правило, приходится иметь дело только с решениями однородных уравнений (2.1), в силу чего сосредоточим внимание лишь на нормальных волнах. В условиях, когда найдена полная система нормальных волн, по ним может быть разложено любое другое решение уравнений (2.1),

*) В этой связи может возникнуть вопрос о том, как же создать поле $E(\omega, \mathbf{k})$ с ω и \mathbf{k} , связанными дисперсионным уравнением. В подобных условиях можно, например, положить $J_{ext}(\omega, \mathbf{k}) = 0$ и $\rho_{ext}(\omega, \mathbf{k}) = 0$, а поле считать созданным источниками вне среды (строго говоря, это соответствует переходу к пространственно ограниченной задаче). Другой подход связан с использованием аналитичности $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ от своих аргументов. По последней причине вполне достаточно знать ϵ_{ij} для значений ω и \mathbf{k} , не удовлетворяющих дисперсионному уравнению, чтобы однозначно определить ϵ_{ij} и для значений $\omega_l = \omega_l(\mathbf{k})$, удовлетворяющих этому уравнению.

в частности, представляющие физический интерес волновые пакеты или импульсы (цуги) волн.

Для неоднородных плоских волн типа (2.2)

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{k} &= \mathbf{k}' + i\mathbf{k}'', & \mathbf{k}' &= \mathbf{k}'s', & \mathbf{k}'' &= \mathbf{k}''s'', \\ s' &= 1, & s'' &= 1, \end{aligned} \right\} \quad (2.15)$$

где векторы s' , s'' , \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' являются вещественными, причем векторы s' и s'' имеют различное направление.

В однородных же плоских волнах

$$\left. \begin{aligned} s' &= s'' = s, \\ \mathbf{k} &= (\mathbf{k}' + i\mathbf{k}'')s, & s &= 1. \end{aligned} \right\} \quad (2.16)$$

Для неоднородных волн поле имеет вид

$$E = E_0 e^{-\mathbf{k}''r} e^{i(\mathbf{k}'r - \omega t)}, \quad (2.17)$$

очевидно, в этом случае плоскости равных амплитуд $\mathbf{k}''r = \text{const}$ и плоскости равных фаз $\mathbf{k}'r = \text{const}$ не совпадают. Неоднородные волны естественным образом появляются при решении задач с граничными условиями. Например, при наклонном падении плоской волны на поглощающую пластинку (или полупространство) волна в пластинке (преломленная волна) будет неоднородной: направление \mathbf{k}' определяется при этом законом преломления, а вектор \mathbf{k}'' направлен по нормали к границе раздела.

В изотропной среде без пространственной дисперсии $\epsilon_{ij} = \epsilon(\omega)\delta_{ij}$, и дисперсионное уравнение (2.10) для продольных волн принимает вид

$$\epsilon(\omega) = 0, \quad k_i k_j E_j = k^2 E_i; \quad (2.18)$$

для поперечных волн имеем

$$\left. \begin{aligned} \epsilon(\omega) &= \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega) = \frac{c^2 k^2}{\omega^2} \equiv \frac{c^2}{\omega^2} (\mathbf{k}' + i\mathbf{k}'')^2, \\ \mathbf{k}E &\equiv (\mathbf{k}' + i\mathbf{k}'')E = 0, & E &= E' + iE'' \end{aligned} \right\} \quad (2.19)$$

или

$$\left. \begin{aligned} \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon'(\omega) &= k'^2 - k''^2, & \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon''(\omega) &= \mathbf{k}'\mathbf{k}'', \\ \mathbf{k}'E' - \mathbf{k}''E'' &= 0, & \mathbf{k}'E'' + \mathbf{k}''E' &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.20)$$

Если направления s' и s'' (см. (2.16)) фиксированы, то \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' выражаются через $\epsilon'(\omega)$ и $\epsilon''(\omega)$; при этом на вектор

$\mathbf{E}' + i\mathbf{E}''$ наложены два условия, позволяющие говорить о поперечных волнах лишь в весьма условном смысле. Только при пренебрежении поглощением, когда можно положить $\epsilon''=0$, векторы \mathbf{s}' и \mathbf{s}'' ортогональны и имеются решения $\mathbf{E}' \neq 0$, $\mathbf{E}''=0$ и $\mathbf{E}'=0$, $\mathbf{E}'' \neq 0$, для которых вектор \mathbf{E} перпендикулярен обоим векторам \mathbf{s}' и \mathbf{s}'' .

Уже на приведенном простейшем примере изотропной среды без пространственной дисперсии видно, с какими осложнениями может быть связано рассмотрение неоднородных волн. Но для этого случая вопрос все еще остается достаточно элементарным. При переходе же к анизотропной среде даже при $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega)$ дисперсионное уравнение (2.10) становится для неоднородных волн, вообще говоря, очень громоздким. Наконец, при учете пространственной дисперсии ситуация еще больше усложняется. В этом случае, насколько нам известно, неоднородные волны не исследовались даже для анизотропной негиротропной среды*).

К счастью, использование неоднородных волн, необходимое при решении ряда граничных задач, не представляет интереса с точки зрения изучения физических свойств самой среды. Поэтому в настоящей книге, как уже отмечалось, используются практически только однородные волны (2.16). Для таких волн, если они являются нормальными,

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{k} &= \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}, \\ \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) &= k' + ik'' \equiv n(\omega, \mathbf{s}) + i\kappa(\omega, \mathbf{s}) \end{aligned} \right\} \quad (2.21)$$

*) Выражение (1.48) написано для однородных волн. Если записать его для вещественных \mathbf{k} в виде

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ir}(\omega, k^2) \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) + \epsilon_l(\omega, k^2) \frac{k_i k_j}{k^2}, \quad k^2 \equiv k_r k_r,$$

то при аналитическом продолжении в область комплексных значений k_i оно сохраняет такой же вид для неоднородных волн, когда компоненты k_i вектора \mathbf{k} являются в широких пределах произвольными комплексными числами (для комплексного \mathbf{k} величина $k^2 = k_r k_r$ может обратиться в нуль при $\mathbf{k} \neq 0$; разумеется, мы здесь считаем, что $k^2 \neq 0$). Если же не исходить из принципа аналитичности, то можно было бы написать и другие выражения для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, переходящие в (1.48) при вещественных \mathbf{k} или для однородных волн.

и дисперсионное уравнение (2.10) удобно записать в форме

$$\left| \tilde{n}^2(\omega, \mathbf{s}) (\delta_{ij} - s_i s_j) - \epsilon_{ij} \left(\omega, \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s} \right) \right| = \epsilon_{ij} s_i s_j \tilde{n}^4 -$$

$$- [(\epsilon_{ij} s_i s_j) \epsilon_{ii} - \epsilon_{ii} \epsilon_{ij} s_i s_j] \tilde{n}^2 + |\epsilon_{ij}| = 0. \quad (2.22)$$

Это уравнение является в кристаллооптике основным. В классической кристаллооптике $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(\omega)$ и уравнение (2.22) становится квадратным относительно \tilde{n}^2 ; часто его называют уравнением Френеля.

Для решений дисперсионного уравнения $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$ существует связь между \mathbf{k} и ω , но эта связь, конечно, неоднозначна. Более точное утверждение состоит в том, что для нормальных волн при заданных ω , \mathbf{s} и l вектор $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}$ фиксирован. Обратное, если задан вектор $\mathbf{k} = k\mathbf{s} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}$, то, значит, задана величина $\omega \tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$ с фиксированным \mathbf{s} . Отсюда определяются частоты нормальных волн $\omega_l(k\mathbf{s})$, т. е. решение дисперсионного уравнения выражается в форме (2.12).

Для однородных нормальных волн (2.21) уравнения (2.3) — (2.7) имеют вид*)

$$\mathbf{D} = -\tilde{n}[\mathbf{sB}], \quad (2.23)$$

$$(\mathbf{sD}) = 0, \quad (2.24)$$

$$\mathbf{B} = \tilde{n}[\mathbf{sE}], \quad (\mathbf{sB}) = 0, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{D} = \tilde{n}^2(\omega, \mathbf{s}) [\mathbf{E} - \mathbf{s}(\mathbf{sE})]. \quad (2.26)$$

2.2. Поперечные и продольные волны, «фиктивные» продольные волны и «волны поляризации». Реальные, кулоновские и механические экситоны. Нормальные волны в анизотропной среде, для которых показатель преломления \tilde{n}

*) Из (2.4) непосредственно получаем уравнение $\omega \tilde{n}(\mathbf{sD}) = 0$. Множитель $\omega \tilde{n}$ при переходе к (2.24) и аналогично к уравнению $(\mathbf{sB}) = 0$ опущен, так как мы считаем, что $\omega \neq 0$, а при $\tilde{n} = 0$ индукции \mathbf{D} и \mathbf{B} равны нулю уже в силу уравнений (2.2) и (2.25). Кроме того, как уже отмечалось, при $\omega \neq 0$ исходные уравнения (2.4) и (2.6) являются следствием двух других уравнений поля (2.3) и (2.5); однако удобнее уравнения (2.4) и (2.6), а также уравнения $(\mathbf{sD}) = 0$ и $(\mathbf{sB}) = 0$ выписать отдельно.

является решением дисперсионного уравнения (2.22), вообще говоря, не являются ни поперечными ни продольными*). Тем не менее поперечные и продольные волны, существующие для некоторых направлений, играют большую роль.

Для поперечных волн, согласно (2.24) и (2.26),

$$\left. \begin{aligned} D &= \tilde{n}^2(\omega, \mathbf{s})\mathbf{E}, & \mathbf{sE} &= 0, \\ \mathbf{sD} &= 0, & D_i &= \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})E_j, \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

где условие $\mathbf{sE} = 0$ является определением поперечных волн (очевидно, если $\mathbf{sE} = 0$, то при конечном \tilde{n}^2 из первого уравнения (2.27) следует и условие $\mathbf{sD} = 0$).

Уравнения (2.27) накладывают четыре условия на три величины E_i и поэтому-то в общем случае не имеют решения. В этом особенно легко убедиться, выбирая направление распространения \mathbf{s} за ось 3 (ось z). Тогда, согласно (2.27), для поперечных волн $E_3 = 0$, $D_3 = \epsilon_{31}E_1 + \epsilon_{32}E_2 = 0$, $D_1 = \epsilon_{11}E_1 + \epsilon_{12}E_2 = \tilde{n}^2E_1$ и $D_2 = \epsilon_{21}E_1 + \epsilon_{22}E_2 = \tilde{n}^2E_2$. Иначе говоря, векторы \mathbf{D} и \mathbf{E} в произвольной анизотропной среде параллельны лишь в исключительных случаях, между тем как для поперечных волн именно это должно иметь место (см. первое уравнение (2.27)).

Таким образом, отыскание поперечных волн связано с нахождением собственных векторов матрицы (тензора) ϵ_{ij} . Те из этих собственных векторов e_i , которые ортогональны к \mathbf{s} , удовлетворяют системе (2.27). При отсутствии пространственной дисперсии ϵ_{ij} не зависят от \mathbf{s} , и все сводится просто к приведению тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ к главным осям. Рассмотрим для примера ромбический кристалл. В этом случае главные оси тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ при любых ω совпадают с кристаллическими осями 2-го порядка x , y , z (имеем в виду кристаллические классы D_2 и D_{2h} ; в классе C_{2v} ось z направлена по оси 2-го порядка, а оси x и y перпендикулярны

*) Термины «поперечные» и «продольные» волны характеризуют направление электрического вектора \mathbf{E} относительно направления распространения \mathbf{s} . Что же касается вектора индукции \mathbf{D} , то он в нормальных волнах всегда поперечен в силу уравнения $\mathbf{sD} = 0$ (см. уравнение поля (2.24)).

к плоскостям симметрии*). В этой системе осей x , y , z диагональные элементы ϵ_{ij} , равные ϵ_x , ϵ_y и ϵ_z , различны (при отсутствии случайного вырождения, что предполагается). Поперечными являются все волны с вектором \mathbf{E} , направленным по любой из осей x , y , z ; вектор \mathbf{s} лежит при этом в одной из координатных плоскостей. Далее, для этих поперечных волн

$$\tilde{n}_{1,2,3}^2 = \epsilon_{x,y,z}(\omega). \quad (2.28)$$

Для тетрагональных кристаллов при выборе оси z в направлении кристаллической оси 4-го порядка (если это не оговорено, то мы не отличаем поворотные оси от зеркально-поворотных) $\epsilon_x(\omega) = \epsilon_y(\omega) = \epsilon_{\perp}(\omega)$ и вектор \mathbf{E} в поперечных волнах с $s_x = s_y = 0$, $s_z = 1$ может быть направлен произвольным образом в плоскости xy (вырождение). Для кубических кристаллов $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon_z = \epsilon(\omega)$ и поперечные волны с любой поляризацией распространяются в любом направлении. На распространении поперечных волн при наличии пространственной дисперсии мы остановимся в §§ 6, 7, 8.

В продольных волнах, по определению,

$$\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) = E(\omega, \mathbf{k})\mathbf{s}. \quad (2.29)$$

Поэтому, согласно уравнениям поля (2.23) и (2.25), в таких волнах

$$\mathbf{D} = 0, \quad \mathbf{B} = 0. \quad (2.30)$$

Если записать уравнение $\mathbf{D} = 0$ в развернутом виде

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})E_j(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (2.31)$$

то становится очевидным, что продольные волны $E \neq 0$ могут существовать лишь при условии

$$|\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})| = \frac{1}{|\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})|} = 0. \quad (2.32)$$

Это условие необходимо для появления продольной волны. Однако оно может соблюдаться и для волн, которые нельзя

*) В настоящей книге используются обозначения классов по Шенфлису, как более привычные для физиков (см., например, [1]). Связь этих обозначений с интернациональными указана в приложении I (см. также [34]).

назвать продольными. Действительно, как это ясно из дисперсионного уравнения (2.22), при условии $|\epsilon_{ij}|=0$ появляется корень $\tilde{n}^2=0$ (это очевидно, например, и из уравнения $\mathbf{D}=\tilde{n}^2\mathbf{E}$ для поперечных волн, см. (2.27)). Конечно, при $\tilde{n}=0$ вектор $\mathbf{k}=\frac{\omega}{c}\tilde{n}\mathbf{s}=0$, и говорить о поляризации волны (направлении \mathbf{E} по отношению к \mathbf{s}) непосредственно нельзя. Но достаточно рассмотреть слабо неоднородную среду, чтобы деление волн на продольные и поперечные приобрело ясный смысл и при $\tilde{n}=0$ (направление вектора \mathbf{E} в точке с $\tilde{n}=0$ определяется его направлением вблизи этой точки; подробнее см. [6]). Иначе говоря, поляризацию и при $\tilde{n}=0$ можно ввести в результате некоторого предельного перехода или путем уточнения физической постановки задачи (введение слабой неоднородности, учет границ и поляризации падающей на эту границу волны, и т. п.). Более существен другой момент. Поскольку тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, вообще говоря, не является эрмитовым, решения системы уравнений $\epsilon_{ij}E_j=0$ не должны быть вещественными. Это значит, что нужно рассматривать неоднородные продольные волны

$$\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})=A(\omega, \mathbf{k})\mathbf{k}, \quad \mathbf{k}=\mathbf{k}'+i\mathbf{k}''.$$

В силу (2.13) в таких волнах $\mathbf{D}=0$, $\mathbf{B}=0$ (см. (2.30)), но называть их продольными можно лишь в условном смысле. Ниже, если это не оговорено, продольными будем называть только однородные волны (2.29). Для их появления, как ясно из сказанного, условие (2.32) необходимо, но еще не достаточно.

В произвольной анизотропной среде продольные волны, как и поперечные, могут распространяться только в исключительных направлениях. Это ясно уже в рамках классической кристаллооптики. Например, для ромбического кристалла в системе главных осей x, y, z

$$D_x=\epsilon_x(\omega)E_x, \quad D_y=\epsilon_y(\omega)E_y, \quad D_z=\epsilon_z(\omega)E_z. \quad (2.33)$$

Очевидно, продольные волны ($\mathbf{D}=0$) могут при этом существовать лишь в случае равенства нулю одного из значений $\epsilon_i(\omega)$, ибо при отсутствии случайного вырождения все эти величины для данной частоты различны (сказанное, конечно,

эквивалентно условию (2.32), поскольку $|\epsilon_{ij}|=\epsilon_x\epsilon_y\epsilon_z$). Тем самым вектор \mathbf{E} в продольных волнах автоматически оказывается направленным по той из главных осей, для которой $\epsilon_i(\omega)=0$. Если имеется вырождение, то появляются новые возможности. Например, для кубических кристаллов $\epsilon_x=\epsilon_y=\epsilon_z$, и, очевидно, продольные волны могут распространяться в любом направлении, если только

$$\epsilon(\omega_{\parallel})=0.$$

Это уравнение определяет частоты продольных волн ω_{\parallel} ; значение же $k=\omega_{\parallel}/c$ остается при пренебрежении пространственной дисперсией произвольным. Поскольку в таких условиях частота ω_{\parallel} не зависит от \mathbf{k} , групповая скорость $d\omega/d\mathbf{k}=0$ и скорее нужно говорить о колебаниях, чем о бегущих волнах.

В кристаллах триклинной и моноклинной систем главные оси тензора 2-го ранга из соображений симметрии относительно решетки не фиксированы (в моноклинном кристалле это относится только к двум осям, а третья ось фиксирована). В подобных условиях нужно помнить, что тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$ эквивалентен двум симметричным вещественным тензорам ϵ''_{ij} и ϵ'_{ij} (см. (1.42)). Каждый из этих тензоров имеет вещественные и ортогональные собственные векторы (главные оси), но их направления для ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} , вообще говоря, не совпадают и зависят от частоты (дисперсия осей). Если нет ни одной главной оси, общей для ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} , то продольные волны существовать вообще не могут*).

Напомним также, что при $B_{ext}\neq 0$ (магнитоактивная среда) тензоры $\epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext})$ и $\epsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext})$ эрмитовы, но не вещественны. Поэтому собственные векторы этих тензоров, вообще говоря, являются комплексными и, следовательно, тензоры не приводятся к диагональному виду ни в какой системе координат x, y, z . Появление продольных волн в таких условиях является исключением, а не правилом (в магнитоактивной плазме, где поле \mathbf{B}_{ext} является осью симметрии,

*) Допустим, что продольная волна существует. Направим тогда ось z по направлению поля \mathbf{E} в этой волне. В такой системе $D_x=\epsilon_{xz}E_z=0$, $D_y=\epsilon_{yz}E_z=0$, $D_z=\epsilon_{zz}E_z=0$ и направление оси z можно считать главной осью ϵ_{ij} с собственным значением, равным нулю.

продольная волна может существовать, только если она распространяется по направлению поля). Уже эти примеры показывают, что в общем случае (при использовании $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$) существование продольных волн отнюдь не гарантировано и они появляются главным образом для выделенных направлений *). Для ряда пространственно диспергирующих сред в этом можно будет убедиться в §§ 6, 7 и 8.

В силу сказанного ясно, что в пределах классической кристаллооптики в анизотропной среде в данном произвольном направлении, вообще говоря, могут распространяться только две нормальные волны. Это заключение в общем случае следует, и непосредственно из дисперсионного уравнения (2.22), которое при $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(\omega)$ является квадратным уравнением относительно \tilde{n}^2 . Корни этого уравнения $\tilde{n}_1^2, \tilde{n}_2^2$ и отвечают упомянутым двум волнам, которые в ряде случаев называют обыкновенной и необыкновенной (решения с $\tilde{n}_{1,2}$ и $-\tilde{n}_{1,2}$ относятся к волнам, распространяющимся в противоположных направлениях, в силу чего мы при данном \mathbf{s} и говорим о двух нормальных волнах). Третья же (продольная) волна, при отсутствии вырождения, если и появляется, то только в отдельных направлениях.

До сих пор речь шла о поперечных и продольных нормальных волнах, т. е. волнах, удовлетворяющих уравнениям поля (2.1) и, более конкретно, уравнениям (2.23) — (2.26). Как эти, так и все другие нормальные волны (не являющиеся ни продольными, ни поперечными) могут существовать в действительности. Если иметь в виду оптический диапазон, то нормальные волны, за исключением чисто продольных, есть не что иное, как световые волны в среде. При квантовании и пренебрежении поглощением им отвечают «фотоны в среде» с частотой $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\mathbf{k} = \frac{\hbar\omega}{c} n\mathbf{s}$. Кванты продольных (плазменных) волн обычно называют плазмонами. По другой терминологии, которой мы будем придерживаться (см. введение), все нормальные волны (в том числе продольные) будут

*) Довольно любопытен вопрос о распространении волн в направлениях, очень близких к тем, для которых могут существовать продольные волны. Этот вопрос проанализирован для магнитоактивной плазмы [6], а ниже будет лишь затронут в п. 10.3.

называться «реальными экситонами» или просто «экситонами» *).

По различным причинам могут представлять интерес также волны, являющиеся решениями не полной системы уравнений поля (2.1) или (2.23) — (2.26), а решениями только однородных уравнений кулоновской задачи:

$$\text{rot } \mathbf{E} = 0, \quad \text{div } \mathbf{D} = 0.$$

В применении к однородным плоским волнам (2.16) это значит, что (при $\mathbf{k} \neq 0$)

$$\mathbf{E} = E\mathbf{s}, \quad \mathbf{sD} = 0. \quad (2.34)$$

Решения, удовлетворяющие этим условиям, будем называть «кулоновскими экситонами».

Кулоновские экситоны можно разделить на три типа. Первый тип — это уже рассмотренные продольные волны (2.29), (2.30), (2.32), которые одновременно являются и решением полной системы уравнений поля и удовлетворяют кулоновским условиям (2.34). Причину такого совпадения реальных экситонов с кулоновскими можно считать тривиальной — в продольных волнах $\mathbf{D} = 0$ и $\mathbf{B} = 0$ (см. (2.30)). Но для кулоновских экситонов второго и третьего типов

$$\mathbf{D} \neq 0. \quad (2.35)$$

Из уравнения поля **)

$$\mathbf{D} = -\frac{c}{\omega} [\mathbf{kB}] = -\tilde{n} [\mathbf{sB}]$$

(см. (2.3) и (2.23)) ясно, что при $\mathbf{D} \neq 0$ и конечном \mathbf{k} (или \tilde{n}) магнитная индукция $\mathbf{B} \neq 0$, а поэтому в силу уравнения поля $\mathbf{B} = \frac{c}{\omega} [\mathbf{kE}] = \tilde{n} [\mathbf{sE}]$ электрическое поле \mathbf{E} не

*) По существу понятие экситонов (возбуждений бозевского типа) шире используемого здесь, поскольку к их числу относятся также возбуждения другого типа — фононы, магноны и т. п. В настоящей книге принятая терминология представляется нам наиболее удобной и, во всяком случае, не приведет к недоразумениям.

***) Показатель преломления \tilde{n} введен, согласно (2.21), таким образом, что $\mathbf{k} = k\mathbf{s} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}\mathbf{s}$ для нормальных волн (волн, удовлетворяющих дисперсионному уравнению (2.22)). Здесь и в других местах, когда это не приведет к недоразумениям, мы будем обозначать через \tilde{n} также величину $\tilde{n} = \frac{c}{\omega} k$ для любых однородных волн $\mathbf{k} = k\mathbf{s}$.

является продольным. Итак, кулоновские экситоны типа (2.34), (2.35) не удовлетворяют всем уравнениям поля, т. е. не совпадают с реальными экситонами, за исключением предельного случая $\mathbf{k} \rightarrow \infty$. Последнее обстоятельство является отражением того факта, что при отсутствии внешних источников и $\frac{\mathbf{k}}{\omega} \rightarrow \infty$ магнитная индукция \mathbf{B} и поперечное электрическое поле \mathbf{E}_\perp стремятся к нулю, в противном случае индукция \mathbf{D} неограниченно возрастала бы (см. (2.3), (2.5)). Разумеется, при наличии соответствующих источников \mathbf{j}_{ext} и ρ_{ext} это уже не так, и можно создать сколь угодно коротковолновые поля \mathbf{B} и \mathbf{E}_\perp .

Кулоновские экситоны второго типа — назовем их «фиктивными» продольными волнами, как сказано, удовлетворяют условиям (2.34), (2.35) и, кроме того, по определению, в них электрическое поле $\mathbf{E} \neq 0$:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}s \neq 0, \quad \mathbf{sD} = 0, \quad \mathbf{D} \neq 0. \quad (2.36)$$

Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ связывает \mathbf{D} с \mathbf{E} для любых полей, которые можно создать внешними источниками *). В частности, это относится к кулоновскому полю $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$, даже когда оно и не удовлетворяет однородным уравнениям поля. Поэтому мы можем для «фиктивных» продольных волн (2.36) написать

$$s_i D_i = s_i \epsilon_{ij} E_j = \epsilon_{ij} s_i s_j E = 0,$$

что при $E \neq 0$ приводит к соотношению

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) s_i s_j = 0, \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}s. \quad (2.37)$$

Поскольку это условие связывает между собой ω и \mathbf{k} , его можно с полным основанием назвать дисперсионным уравнением для «фиктивных» продольных волн. Решение этого уравнения будем обозначать через $\omega'_\parallel(\mathbf{k})$. В пределе классической кристаллооптики уравнение (2.37) принимает вид

$$\epsilon_{ij}(\omega) s_i s_j = 0. \quad (2.38)$$

Решение этого уравнения $\omega'_\parallel(s)$, вообще говоря, зависит от направления s . Это значит, что частота $\omega'_\parallel(\mathbf{k})$, удовлетво-

*) Сказанное относится к однородной среде. Для кристаллов положение несколько более сложное, поскольку и само понятие о тензоре $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в этом случае нужно уточнить (см. § 4).

ряющая уравнению (2.37), является неаналитической функцией \mathbf{k} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Такой результат физически вполне понятен. В анизотропной среде индукция \mathbf{D} и поляризация $\mathbf{P} = \frac{\mathbf{D} - \mathbf{E}}{4\pi}$ для большинства направлений не параллельны вектору \mathbf{E} , причем это справедливо и для сколь угодно длинных волн. Вместе с тем для кулоновского поля без источников

$$\mathbf{D} = \mathbf{E}_\parallel + 4\pi\mathbf{P}, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}s, \quad \mathbf{sD} = \mathbf{E} + 4\pi(\mathbf{sP}) = 0,$$

т. е.

$$\mathbf{E}_\parallel = -4\pi\mathbf{s}(\mathbf{sP}). \quad (2.39)$$

Таким образом, поле \mathbf{E}_\parallel и при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ не параллельно \mathbf{P} и, следовательно, зависит от s (см. (2.39)). Но с полем \mathbf{E}_\parallel связана определенная энергия, и поэтому частота колебаний в волне ω'_\parallel зависит от \mathbf{E}_\parallel , а значит и от s .

Подчеркнем, что условие (2.37) необходимо для того, чтобы волна была «фиктивной» продольной волной, в которой $\mathbf{D} \neq 0$. Но, очевидно, для продольных волн с $\mathbf{D} = 0$ условие (2.37) также всегда удовлетворяется. Например, для ромбического кристалла в классической кристаллооптике в системе главных осей тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ вместо (2.38) имеем

$$\epsilon_1(\omega) s_1^2 + \epsilon_2(\omega) s_2^2 + \epsilon_3(\omega) s_3^2 = 0. \quad (2.38a)$$

Продольные волны в этом случае могут распространяться (при $\epsilon_1 \neq \epsilon_2 \neq \epsilon_3 \neq \epsilon_1$) только по главным осям, но тогда удовлетворяется и уравнение (2.38a).

Доказательство сделанного утверждения в общем случае также очевидно. Если продольная волна существует, то удовлетворяется условие $\epsilon_{ij} s_j = 0$ (напоминаем, что в однородной продольной волне $\mathbf{E} = \mathbf{E}s$ и $D_i = \epsilon_{ij} E_j = 0$). Значит удовлетворяется и более слабое соотношение (2.37). Вообще можно было бы сказать, что продольные волны есть частный случай «фиктивных» продольных волн (в этом случае $\mathbf{D} = 0$).

Как из (2.37) и (2.38), так и особенно наглядным образом из (2.38a) ясно, что направление «фиктивных» продольных волн s может в принципе быть любым. Но для этого должны соблюдаться некоторые не столь уж легкие условия. Например, из (2.38a) очевидно, что знак хотя бы одного из значений ϵ_i должен быть отрицательным. Заметим также, что

помимо однородных можно рассматривать неоднородные «фиктивные» продольные волны, но мы на этом останавливаться не будем.

Для кулоновских экситонов третьего, и последнего, типа

$$\mathbf{D} \neq 0, \quad \mathbf{sD} = 0, \quad \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) = 0. \quad (2.40)$$

Такие кулоновские экситоны назовем «волнами поляризации», ибо в них поляризация $\mathbf{P} = \frac{\mathbf{D}}{4\pi} \neq 0$. Поскольку $E_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D_j(\omega, \mathbf{k})$, необходимым условием существования «волн поляризации» (2.40) является условие

$$|\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})| = \frac{1}{|\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})|} = 0. \quad (2.41)$$

Как было указано, «волны поляризации» удовлетворяют полной системе однородных уравнений поля лишь в пределе $\mathbf{k} \rightarrow \infty$. Тот факт, что такие волны могут существовать для кулоновской задачи особенно ясен, например, из выражения (2.39) — при $(\mathbf{sP}) = 0$ поле $\mathbf{E}_{\parallel} = 0$, но поляризация \mathbf{P} может быть отлична от нуля. Простой смысл «волны поляризации» имеют и с микроскопической точки зрения, скажем, для модели осцилляторов (см. § 13).

Условие (2.41) необходимо и достаточно для того, чтобы существовало решение

$$\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k}) \neq 0, \quad \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) = 0. \quad (2.42)$$

«Волны поляризации» (2.40) суть частный случай таких решений — для них, кроме того, $\mathbf{sD} = 4\pi(\mathbf{sP}) = 0$. Таким образом, условие (2.41) отнюдь не является достаточным для того, чтобы решения были «волнами поляризации».

Волны, удовлетворяющие условиям (2.42), будем называть «механическими экситонами». Этот термин будет применяться ко всем тем решениям (точным или приближенным) для рассматриваемой среды или той же среды при температуре $T = 0$, которые получаются при отсутствии или пренебрежении действием макроскопических (длинноволновых) полей $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ и $\mathbf{B}(\omega, \mathbf{k})$. Более подробно на механических экситонах мы остановимся в гл. IV. Физический смысл этого понятия состоит именно в том, что рассматриваются волны (решения), не связанные с макроскопическими полями $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ и $\mathbf{B}(\omega, \mathbf{k})$. По последней причине механические экситоны могут играть роль состояний «невозмущенной задачи» при вычисле-

нии индуцированного тока, возникающего в системе под действием макроскопического поля.

На первый взгляд может показаться, что понятие механического экситона не имеет точного смысла, поскольку не указана система уравнений, решения которой отвечают механическим экситонам. Но такое заключение неверно. В отношении частного типа механических экситонов — «волн поляризации», это ясно уже из вполне определенных условий (2.40), (2.41). Для механических экситонов (2.42) речь также идет о кулоновской задаче, но уже неоднородной. В самом деле, ищется нетривиальное решение $\mathbf{D} \neq 0$ системы уравнений

$$E_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D_j(\omega, \mathbf{k}) = 0,$$

которое всегда может считаться решением кулоновского уравнения

$$i\mathbf{kD} = 4\pi\rho_{ext}(\omega, \mathbf{k}),$$

поскольку плотность внешних источников ρ_{ext} может задаваться произвольным образом. В общем случае механические экситоны (их частоты ω_m и поляризация) также получаются, если известен тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для среды или для какой-то приближенной модели этой среды как при данной температуре, так и при $T = 0$.

Для ромбического кристалла при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ условие (2.41) принимает вид (см. (2.33))

$$|\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})| = \frac{1}{\epsilon_x(\omega)\epsilon_y(\omega)\epsilon_z(\omega)} = 0. \quad (2.43)$$

Таким образом, частоты «волн поляризации» ω_p в этом случае отвечают полюсам главных значений $\epsilon_i(\omega)$; вектор $\mathbf{D} = 4\pi\mathbf{P}$ в «волнах поляризации» направлен (см. (2.33)) по той из главных осей, для которой $\epsilon_i(\omega_p) = \infty$. В силу условия $\mathbf{sD} = 0$ отсюда следует, что существуют лишь «волны поляризации» с вектором \mathbf{s} , лежащим в одной из координатных плоскостей xy , xz или yz . Что же касается механических экситонов типа (2.42), то их частоты и поляризация в рассматриваемом примере такие же, как и для «волн поляризации», но вектор \mathbf{s} может быть направлен как угодно. При этом, конечно, такие механические экситоны в рамках кулоновской задачи могут существовать (являются решениями) только при наличии внешних зарядов с плотностью

$$\rho_{ext}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{i}{4\pi} (\mathbf{kD}(\omega, \mathbf{k})) = \frac{ik}{4\pi} (\mathbf{sD}).$$

Частоты ω_m и собственные функции $\Psi_{\mathbf{k}, m}$ механических экситонов используются при вычислении $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. При этом оказывается, что полюсы выражения для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, полученного в первом приближении, лежат при частотах ω , равных ω_m или сумме двух частот ω_m и т. д. (см. § 12).

Значение кулоновских экситонов состоит в том, что их частоты $\omega_{\parallel}(\mathbf{k})$, $\omega'_{\parallel}(\mathbf{k})$ и $\omega_p(\mathbf{k})$ тесно связаны с некоторыми характерными частотами реальных экситонов $\omega_l(\mathbf{k})$, т. е. с ходом соответствующих дисперсионных кривых $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$.

В отношении продольных волн, являющихся одновременно и кулоновскими, и реальными экситонами, это очевидно (показатель преломления для продольных волн $\tilde{n}_{\parallel}(\omega_{\parallel}, \mathbf{s}) = \frac{ck}{\omega_{\parallel}}$,

т. е. является результатом разрешения связи

$$\omega_{\parallel} = \omega_{\parallel}(ks) = \omega_{\parallel} \left\{ \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s} \right\}$$

относительно $k = \frac{\omega_{\parallel}}{c} \tilde{n}(\omega_{\parallel}, \mathbf{s})$). Уравнение (2.37), определяющее частоты ω'_{\parallel} «фиктивных» продольных волн, есть вместе с тем условие обращения $\tilde{n}(\omega, \mathbf{s})$ в бесконечность при конечных компонентах тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Это ясно из дисперсионного уравнения (2.22), поскольку $\epsilon_{ij}s_i s_j$ есть коэффициент при \tilde{n}^4 . Впрочем, тот же вывод можно сразу сделать из исходного волнового уравнения (2.26): если $D \neq 0$, а поле \mathbf{E} по своей поляризации приближается к продольному полю $\mathbf{E} = \mathbf{E}s$, то $\tilde{n}^2 \rightarrow \infty$. «Волны поляризации» также отвечают полюсу \tilde{n}^2 , но уже при $|\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})| \rightarrow \infty$ (см. (2.26), (2.40), (2.41)). Подчеркнем, что область резкого возрастания (резонанса) $n = \text{Re } \tilde{n}$ отвечает, вообще говоря, полосе поглощения — области роста $\chi = \text{Im } \tilde{n}$. Поэтому нахождение полюсов \tilde{n}^2 имеет непосредственное физическое значение. Итак, если известны частоты кулоновских экситонов, то имеется существенная информация не только о продольных волнах, но и о нулях и полюсах дисперсионных кривых для непродольных реальных экситонов (нормальных волн).

Однородные волны различного типа и принятые для них названия сопоставлены в табл. I.

Т а б л и ц а I

Волны типа $D = D_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$, $\mathbf{E} = E_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$, $\mathbf{k} = k\mathbf{s} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}$, $s = 1$ (монохроматические однородные волны) в анизотропной среде

<p>Общий случай нормальных волн $D = \tilde{n}^2 \{E - s(sE)\}$, $sD = 0$, $\tilde{n}^2(\delta_{ij} - s_i s_j) - \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = 0$.</p> <p>Поперечные нормальные волны $D = \tilde{n}^2 E$, $sE = 0$, $sD = 0$.</p> <p>Продольные нормальные волны $D = 0$, $E = Es \neq 0$, $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = 0$.</p> <p>«Фиктивные» продольные волны $D \neq 0$, $sD = 0$, $E = Es \neq 0$, $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) s_i s_j = 0$.</p> <p>«Волны поляризации» $D \neq 0$, $sD = 0$, $E = 0$, $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = 0$.</p> <p>Механические экситоны общего вида $D \neq 0$, $E = 0$, $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = 0$.</p>	<p>Нормальные электромагнитные волны (реальные экситоны) — решения однородных уравнений поля</p> <p>Кулоновские экситоны — решения уравнения однородной кулоновской задачи $sD = 0$, $E = Es$</p> <p>Механические экситоны — решения кулоновской задачи при отсутствии или пренебрежении действием макроскопического (длинноволнового) поля $E(\omega, \mathbf{k})$.</p>
---	---

2.3. Случай кратных корней дисперсионного уравнения. До сих пор рассматривались только монохроматические решения однородных уравнений поля (2.1), зависящие от \mathbf{r} и t по закону $\text{const } e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$ (см. (2.2)). В вакууме никаких других решений такого типа не существует, и обычно предполагается, что ситуация остается такой же при распространении волн в среде (по крайней мере ни в одном курсе электродинамики нам не приходилось встречать указаний на необходимость рассматривать также и другие решения). Между тем в действительности уже в классической кристаллооптике решения типа (2.2) с постоянной амплитудой не всегда образуют полную систему нормальных волн. Именно, решений типа (2.2) недостаточно в случае распространения

волн вдоль так называемых сингулярных оптических осей [4, 35, 36].

В классической кристаллооптике, если отвлечься от возможности появления продольных волн, в данном направлении \mathbf{s} могут распространяться две нормальные волны с показателями преломления \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 . При этом \tilde{n}_1^2 и \tilde{n}_2^2 суть корни квадратного (относительно \tilde{n}^2) уравнения (2.22), а поляризация волн определяется системой уравнений (см. (2.9))

$$\{\epsilon_{ij}(\omega) - \tilde{n}^2(\omega, \mathbf{s})(\delta_{ij} - s_i s_j)\} E_j = 0, \quad j = 1, 2, 3, \quad (2.44)$$

где под E_j можно понимать компоненты самого поля $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\frac{\omega}{c} \tilde{n} \mathbf{s} r - \omega t)}$ или компоненты его амплитуды \mathbf{E}_0 .

Подставляя в (2.44) значения \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 , получаем с точностью до множителя два линейно независимых решения \mathbf{E}_1 и \mathbf{E}_2 . Как из формальных, так и из физических соображений ясно, что какие-то два линейно независимых решения \mathbf{E}_1 и \mathbf{E}_2 должны существовать при любых \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 . В то же время для кратного корня $\tilde{n}_1 = \tilde{n}_2$ двух решений типа (2.2) у системы (2.44) может и не быть.

При обсуждении этого вопроса, как и в ряде других случаев, более удобно воспользоваться уравнениями не для \mathbf{E} , а для \mathbf{D} . Это связано с тем, что в системе координат с осью z , направленной по \mathbf{s} , вектор \mathbf{D} имеет лишь две компоненты D_x и D_y в силу условия $\mathbf{sD} = 0$ (речь идет о решениях однородных уравнений поля; см. (2.23) — (2.26)).

В указанной системе координат волновое и дисперсионное уравнения имеют вид (см. (2.26), $s_1 = s_2 = 0$, $s_3 = 1$)

$$D_\alpha = \tilde{n}^2 \epsilon_{\alpha\beta}^{-1} D_\beta \equiv \frac{1}{\tilde{m}^2} \nu_{\alpha\beta} D_\beta, \quad (2.45)$$

$|\tilde{m}^2 \delta_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}| = \tilde{m}^4 - (\nu_{11} + \nu_{22}) \tilde{m}^2 + \nu_{11} \nu_{22} - \nu_{12} \nu_{21} = 0$, (2.46)
где введены обозначения

$$\epsilon_{\alpha\beta}^{-1} = \nu_{\alpha\beta}, \quad \frac{1}{\tilde{n}^2} = \tilde{m}^2, \quad \alpha, \beta = 1, 2 = x, y \quad (2.47)$$

(напомним еще раз, что система координат выбрана так, что ось z (ось 3) направлена по \mathbf{s}).

Дисперсионное уравнение (2.46) имеет кратный корень $\tilde{m}_1^2 = \tilde{m}_2^2$, если

$$(\nu_{11} - \nu_{22})^2 + 4\nu_{12}^2 = 0, \quad (2.48)$$

где учтена симметричность тензора $\nu_{\alpha\beta}$ ($\nu_{\alpha\beta} = \nu_{\beta\alpha}$).

Могут иметь место два случая. Так, если матрица $\nu_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta}^{-1}$ приводится к диагональному виду, то при условии (2.48) для соответствующих осей x_0, y_0

$$\nu_{12,0} = \nu_{21,0} = 0, \quad \nu_{11,0} = \nu_{22,0} = \nu_0, \quad (2.49)$$

т. е. имеет место вырождение. При этом, очевидно, $\tilde{m}^2 = \nu_0$ и можно положить

$$E_{1,x_0} = 1, \quad E_{1,y_0} = 0; \quad E_{2,x_0} = 0, \quad E_{2,y_0} = 1, \quad \tilde{m}_{1,2}^2 = \nu_0. \quad (2.50)$$

Физически в этом случае речь идет просто о том, что в данном направлении среда оптически изотропна, причем существуют два линейно независимых решения \mathbf{E}_1 и \mathbf{E}_2 (конечно, эти векторы можно считать не только линейно поляризованными, как это принято в (2.50), но и эллиптически поляризованными).

Допустим теперь, что матрица $\nu_{\alpha\beta}$ не приводится к диагональному виду. Тогда для кратного корня (будем его называть существенным кратным корнем)

$$\tilde{m}_{1,2}^2 = \frac{1}{\tilde{n}_0^2} = \frac{\nu_{11} + \nu_{22}}{2}, \quad \nu_{11} - \nu_{22} = \pm 2i\nu_{12} \quad (2.51)$$

и система (2.45) имеет лишь одно решение; это решение отвечает круговой поляризации, поскольку

$$\frac{D_2}{D_1} = \frac{\frac{1}{\tilde{n}_0^2} - \nu_{11}}{\nu_{12}} = \mp i, \quad \frac{E_2}{E_1} = \mp i,$$

где знак определяется в зависимости от того, о каком из решений $\nu_{11} - \nu_{12} = \pm 2i\nu_{12}$ уравнения (2.48) идет речь. В рассматриваемом случае (классическая кристаллооптика)

$$\nu_{\alpha\beta}(\omega) = \nu_{\beta\alpha}(\omega) = \nu'_{\alpha\beta}(\omega) + i\nu''_{\alpha\beta}, \quad \nu'_{\alpha\beta} = \text{Re } \nu_{\alpha\beta}, \quad \nu''_{\alpha\beta} = \text{Im } \nu_{\alpha\beta}. \quad (2.52)$$

Поэтому при отсутствии поглощения (при $\nu''_{\alpha\beta} = 0$ *) симметричная и вещественная матрица $\nu_{\alpha\beta} = \nu'_{\alpha\beta}$ всегда приводится к диагональному виду и случай (2.51) невозможен. То же можно утверждать, когда матрицы $\nu'_{\alpha\beta}$ и $\nu''_{\alpha\beta}$ имеют общие главные оси. Ситуация именно такова для кристаллов всех систем (сингоний), кроме низших — ромбической, моноклинной и триклинной. В самом деле, для кристаллов с более высокой симметрией (тетрагональной, гексагональной и тригональной) трехмерные тензоры 2-го ранга имеют два равных главных значения (одноосные кристаллы) и им соответствуют эллипсоиды вращения. В подобных условиях, как легко убедиться, двумерные тензоры $\nu'_{\alpha\beta}$ и $\nu''_{\alpha\beta}$ имеют общие оси. Для кристаллов низших сингоний, напротив, главные оси этих двумерных тензоров, вообще говоря, не совпадают. Следовательно, для таких кристаллов при учете поглощения в некоторых направлениях может оказаться выполненным условие (2.48) и будет существовать только одно поляризованное по кругу решение типа $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\frac{\omega}{c} \tilde{n} sr - \omega t)}$.

Подобное направление, для которого имеется существенный кратный корень (2.51), называется сингулярной, или круговой, оптической осью.

Сингулярные оптические оси могут появиться и в магнитоактивной среде, для которой

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext}) = \epsilon'_{ij} + i\epsilon''_{ij} = \epsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{B}_{ext}),$$

и при данном \mathbf{B}_{ext} эрмитовы тензоры ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} не должны быть вещественными. То же относится к тензорам $\nu'_{\alpha\beta}$ и $\nu''_{\alpha\beta}$. Теперь даже при отсутствии поглощения (при $\nu''_{\alpha\beta} = 0$) тензор $\nu'_{\alpha\beta}$ не приводится к диагональному виду (в какой-либо системе координат x_0, y_0). Тем не менее при $\nu''_{ij} = 0$ существенный кратный корень не может появиться, так как для кратного корня

$$(\nu_{11} - \nu_{22})^2 + \nu_{12}\nu_{21} = (\nu'_{11} - \nu'_{22})^2 + 4|\nu'_{12}|^2 = 0$$

*) Здесь и ниже для магнитоактивной среды мы считаем, что частота ω является вещественной, и поэтому условие $\nu''_{\alpha\beta} = 0$ действительной отвечает отсутствию выделения тепла (см. (1.29)).

(при переходе к (2.48) было принято, что $\nu_{12} = \nu_{21}$, в данном же случае $\nu'_{12} = (\nu'_{21})^*$); очевидно, такое условие удовлетворяется лишь при вырождении (см. (2.49)). В поглощающей магнитоактивной среде существенные кратные корни уже могут появляться; более того, для магнитоактивной плазмы такая возможность при некоторых значениях параметров действительно реализуется (см. [6, 29]).

В нашу задачу не входит исследование распространения волн вдоль сингулярных осей в кристаллах [4, 35, 36] или плазме [6, 29]. Здесь важно лишь подчеркнуть, что даже без учета пространственной дисперсии могут появляться существенные кратные корни дисперсионного уравнения, которым отвечает лишь одно решение типа (2.2). Второе линейно независимое решение легко найти, если решать исходные дифференциальные уравнения (2.1).

Суть дела, однако, совершенно ясна на примере собственных колебаний осциллятора, описываемых уравнением

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_i^2 x = 0.$$

Подстановка решения $x = Ae^{i\omega t}$ приводит к значению

$$\omega_{1,2} = i\gamma \pm \sqrt{\omega_i^2 - \gamma^2}.$$

Для кратного корня, когда $\omega_{1,2} = i\gamma$, $\omega_i = \pm\gamma$, помимо решения $x_1 = Ae^{-\gamma t}$, имеется также решение $x_2 = Bte^{-\gamma t}$, которое получается также из решений $x_1 = A_1 e^{i\omega_1 t}$ и $x_2 = B_1 e^{i\omega_2 t}$ путем предельного перехода

$$\lim_{\omega_1 \rightarrow \omega_2} C \frac{e^{i\omega_1 t} - e^{i\omega_2 t}}{\omega_1 - \omega_2} = \frac{d}{d\omega} C e^{i\omega t} = iCte^{i\omega t}.$$

Именно последний прием удобнее всего использовать для нахождения второго линейно независимого решения для существенного кратного корня дисперсионного уравнения. Вблизи кратного корня (т. е. для соответствующих значений параметров) рассмотрим, наряду с решениями

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{01,2} e^{i(\frac{\omega}{c} \tilde{n}_{1,2} sr - \omega t)},$$

также линейно зависящее от них решение

$$\mathbf{E} = \frac{e^{-i\omega t}}{\tilde{n}_2 - \tilde{n}_1} \left\{ \mathbf{E}_{0,2} e^{i\frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 sr} - \mathbf{E}_{0,1} e^{i\frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 sr} \right\}. \quad (2.53)$$

Вблизи сингулярной оптической оси можно положить

$$\tilde{n}_{1,2} = \tilde{n} + \delta\tilde{n}_{1,2}, \quad E_{0,1,2} = E_0 + \delta E_{1,2},$$

где $\delta\tilde{n}_{1,2}$ и $\delta E_{1,2}$ — малые величины, равные нулю для самой оси. Тогда в пределе (при стремлении к сингулярной оси) выражение (2.53) оказывается суммой решения старого типа

$$E_1 = E_{0,1} e^{i\left(\frac{\omega}{c} \tilde{n} sr - \omega t\right)}$$

и второго (нового) решения типа

$$E_2 = E_{0,2} \cdot (sr) e^{i\left(\frac{\omega}{c} \tilde{n} sr - \omega t\right)}. \quad (2.54)$$

Как для кристаллов низших сингоний, так и для магнитоактивной среды существенный кратный корень появляется только при наличии поглощения (см. выше)*). Такой результат при отсутствии пространственной дисперсии физически вполне понятен уже в силу характера решения (2.54). Для ясности рассмотрим конкретную задачу: пусть волна нормально падает из области $z < 0$ на среду, занимающую полупространство $z \geq 0$. Тогда решение (2.54) имеет вид

$$E_2 = E_{02} z e^{i\left(\frac{\omega}{c} \tilde{n} z - \omega t\right)}$$

и при вещественном \tilde{n} оно нарастает в глубь среды. Но это невозможно, поскольку в области $z \geq 0$, по предположению, нет никаких источников поля. Считать, что волна типа E_2 на границе совсем не возбуждается, тоже нельзя — это противоречит, вообще говоря, граничным условиям. Если же

*) Правда, с одним случаем появления кратных корней при данной поляризации приходится столкнуться уже в простейшей задаче о распространении поперечных волн в непоглощающей изотропной среде. Волновое уравнение при этом имеет вид

$$\frac{d^2 E_{x,y}}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) E_{x,y} = 0$$

и при $n^2 = \epsilon = 0$ поле

$$E = E_{0,x,y}^{(1)} + E_{0,x,y}^{(2)},$$

Здесь, однако, сливаются корни для волн, распространяющихся (при $n \neq 0$) в разном направлении. Кроме того, при учете поглощения уже $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon'' = \tilde{n}^2 \neq 0$.

имеется поглощение, то $\tilde{n} = n + ik$ и при отсутствии пространственной дисперсии $\kappa > 0$ (при $n > 0$; см. п. 3.3). По-

этому в (2.54) появляется множитель $e^{-\frac{\omega}{c} \kappa z}$, который при достаточно больших z всегда приводит к уменьшению амплитуды решения типа E_2 , несмотря на наличие множителя z .

При учете пространственной дисперсии, помимо двух рассмотренных корней (решений) дисперсионного уравнения, могут существовать новые корни. Тем самым открывается возможность и для появления новых существенных кратных корней, причем они могут появляться и при отсутствии поглощения. Этот вопрос будет затронут в §§ 6 и 7. Сейчас же заметим, что в известных нам условиях придется сталкиваться лишь с двукратными корнями — это связано просто со слабостью пространственной дисперсии в кристаллооптике. Для двукратных корней, если речь идет о волнах, пропорциональных экспоненциальному множителю $e^{i\left(\frac{\omega}{c} \tilde{n} sr - \omega t\right)}$, достаточно учитывать новые решения типа (2.54).

Тот факт, что в кристаллооптике нужно иногда использовать решения типа (2.54), довольно любопытен и сравнительно мало известен, хотя такая возможность отмечалась уже очень давно [36a]. Поэтому мы довольно подробно остановились на этом вопросе. Нужно вместе с тем подчеркнуть, что с сингулярными оптическими осями можно столкнуться лишь в исключительных случаях, так как они появляются только при определенном подборе параметров, в том числе частоты*).

В заключение сделаем одно замечание общего характера. Когда говорят, что решения типа $E_0 e^{i(kr - \omega t)}$, за исключением случая существенного кратного корня, образуют полную систему решений, то имеют, разумеется, в виду систему однородных уравнений (2.1) и однородную в пространстве

*) Здесь имеются в виду вещественные значения частоты, которые только и представляют интерес в оптических задачах. При комплексных частотах появление кратных корней в определенных условиях более вероятно, и этот момент существен для получения дисперсионных соотношений для \tilde{n} (см. п. 2.5). Отметим, что решения типа (2.54) встречаются не только в случае сингулярных оптических осей, но и для неоднородных волн (см. [35a]).

и во времени среду. Такой подход, как известно, весьма плодотворен и оправдан, но и очевидным образом ограничен. Если же нужно учитывать граничные или начальные условия, то решение задачи отнюдь не сводится к монохроматическим волнам. Вблизи границы или при малых временах после начала процесса имеются и другие решения, и только асимптотически, когда поле «забывает» о граничных или начальных условиях, можно ограничиться рассмотрением монохроматических волн. Учитывать влияние начальных условий нам не придется (см. [7], §, 5), вопрос же о роли границ будет обсуждаться в § 10.

2.4. Выделение поперечного поля E_{\perp} и тензор $\epsilon_{\perp, ij}$. Нормальные волны в анизотропной среде не являются в общем случае ни продольными, ни поперечными. Поэтому какое-то разделение поля на поперечное и продольное при исследовании большинства вопросов электродинамики и оптики анизотропных сплошных сред нерационально*). Разумеется, такое разделение не диктуется и какой-либо необходимостью. С другой стороны, разделение поля на продольное и поперечное имеет четкий физический и математический смысл, а иногда бывает удобно и в анизотропной среде. Так или иначе такое разделение в литературе производится довольно часто, и поэтому нужно на нем остановиться.

Электрическое поле E делится на продольную и поперечную части E_{\parallel} и E_{\perp} следующим образом:

$$E = E_{\parallel} + E_{\perp}, \quad \text{rot } E_{\parallel} = 0, \quad \text{div } E_{\perp} = 0 \quad (2.55)$$

или для монохроматических однородных плоских волн:

$$\left. \begin{aligned} E(\omega, \mathbf{k}) &= E_{\parallel}(\omega, \mathbf{k}) + E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}), \\ E_{\parallel} &= E_{\parallel} s = (Es) s = (E_{\parallel} s) s, \quad s E_{\perp} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.56)$$

Магнитная индукция B всегда поперечна ($\text{div } B = 0$). Что же касается электрической индукции D , то она поперечна при отсутствии внешних источников, когда $\text{div } D = 0$, т. е. $sD = 0$. Именно в последнем случае и представляется иногда заманчивым вообще исключить поле E_{\parallel} . Действительно, для

*) Заметим, кроме того, что для длинных волн физическое различие между поперечным и продольным полями играет в известном смысле второстепенную роль, поскольку при $k \rightarrow 0$ (бесконечно длинные волны) понятие о поляризации волны вообще теряет смысл.

однородных волн в среде имеем

$$sD = \epsilon_{ij} s_i E_j = \epsilon_{ij} s_i E_{\parallel, j} + \epsilon_{ij} s_i E_{\perp, j} = 0. \quad (2.57)$$

В силу (2.56) и (2.57)

$$\epsilon_{ij} s_i E_{\parallel, j} = \epsilon_{ij} s_i s_j (s_i E_i) = \epsilon_{ij} s_i s_j E_{\parallel}$$

и

$$E_{\parallel, i} = - \frac{\epsilon_{ij} s_i E_{\perp, j}}{(\epsilon_{rt} s_r s_t)} s_i, \quad E_i = E_{\perp, i} - \frac{(\epsilon_{ij} s_i E_{\perp, j})}{\epsilon_{rt} s_r s_t} s_i, \quad (2.57a)$$

где $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и под E , E_{\parallel} и E_{\perp} нужно понимать фурье-изображения $E(\omega, \mathbf{k})$ и т. д.

С помощью (2.57) волновое уравнение можно записать только для двух поперечных компонент поля E , и это удобно, например, когда речь идет об исследовании распространения волн в неоднородной среде с известным тензором ϵ_{ij} , скажем, в магнитоактивной плазме (см. [6]).

В общем же случае исключение поля E_{\parallel} вносит только неоправданные усложнения. Это ясно на примере введения и использования тензора $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$. Определение его связано с возможностью написать для полей типа (2.57) такую связь:

$$\begin{aligned} D_i &= \epsilon_{ij} E_{\parallel, j} + \epsilon_{ij} E_{\perp, j} = \left(\epsilon_{ij} - \frac{\epsilon_{il} \epsilon_{mj} s_l s_m}{(\epsilon_{rt} s_r s_t)} \right) E_{\perp, j} \equiv \\ &= \epsilon_{\perp, ij} E_{\perp, j} = E_i + 4\pi \chi_{\perp, ij} E_{\perp, j}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

где введена еще одна величина $\chi_{\perp, ij}$:

$$\left. \begin{aligned} 4\pi \chi_{\perp, ij} &= \epsilon_{ij} - \delta_{ij} - \frac{\epsilon_{il} \epsilon_{mj} s_l s_m - \epsilon_{ij} s_l s_l}{\epsilon_{rt} s_r s_t} = \\ &= \epsilon_{\perp, ij} - \delta_{ij} + \frac{\epsilon_{ij} s_l s_l}{(\epsilon_{rt} s_r s_t)}, \\ P_i &= \frac{D_i - E_i}{4\pi} = \chi_{\perp, ij} E_{\perp, j}. \end{aligned} \right\} \quad (2.59)$$

Очевидно,

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{\perp, ij} s_j &= 0, \quad \epsilon_{\perp, il} \eta_{lj} = \epsilon_{\perp, ij}, \\ E_{\perp, i} &= \eta_{ij} E_j, \quad \chi_{\perp, ij} s_j = 0, \end{aligned} \right\} \quad (2.60)$$

где тензор проектирования

$$\eta_{ij} = \delta_{ij} - s_i s_j. \quad (2.61)$$

В силу (2.58) — (2.61) можно написать

$$\begin{aligned} D_i &= \epsilon_{\perp, ij} E_{\perp, j} = \epsilon_{\perp, ij} E_j = (\delta_{ij} + 4\pi\chi_{\perp, ij} \eta_{ij}) E_j = \\ &= (\delta_{ij} + 4\pi\chi_{\perp, ij}) E_j. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Конечно, необходимо помнить, что эти соотношения справедливы только для полей типа (2.57), для которых $\epsilon_{ij} s_i E_j = 0$. Для таких полей роль ϵ_{ij} играет, таким образом, тензор

$$\tilde{\epsilon}_{ij} = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{\perp, ij} \eta_{ij} \quad D_i = \tilde{\epsilon}_{ij} E_j, \quad (2.63)$$

где тильда над ϵ_{ij} указывает именно на ограничение класса полей.

Вместо выражения (2.63), используемого в [19], в статье [37] выписано следующее:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{ij} &= \delta_{ij} + 4\pi\chi_{\perp, ij} \left\{ \delta_{ij} + \frac{4\pi\chi_{\perp, mj} s_l s_m}{1 - 4\pi\chi_{\perp, rl} s_r s_l} \right\}, \\ P_i &= \chi_{\perp, ij} E_{\perp, j}. \end{aligned} \right\} \quad (2.64)$$

К этому выражению можно прийти, если записать условие (2.57) в виде (см. (2.56) и (2.59))

$$s_i D_i = s_i E_i + 4\pi s_i P_i = s_i E_{\parallel, i} + 4\pi\chi_{\perp, ij} s_i E_{\perp, j} = 0 \quad (2.65)$$

или

$$\left. \begin{aligned} E_{\parallel, i} &= E_i - E_{\perp, i} = -4\pi\chi_{\perp, ij} s_l s_l E_{\perp, j}, \\ E_i &= (\delta_{ij} - 4\pi\chi_{\perp, ij} s_l s_l) E_{\perp, j}. \end{aligned} \right\} \quad (2.66)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \chi_{\perp, lj} s_l s_i E_{\perp, j} &= \chi_{\perp, lj} s_l s_i E_j - s_i (\chi_{\perp, lm} s_l s_m) (s_j E_j) = \\ &= \{\chi_{\perp, lj} s_l s_i - \delta_{ij} (\chi_{\perp, lm} s_l s_m)\} E_j + (\chi_{\perp, lm} s_l s_m) E_{\perp, l}. \end{aligned}$$

В комбинации с (2.66) отсюда получаем

$$E_{\perp, i} = \eta_{ij} E_j = \left\{ \delta_{ij} + \frac{4\pi\chi_{\perp, lj} s_l s_i}{1 - 4\pi(\chi_{\perp, rl} s_r s_l)} \right\} E_j \quad (2.67)$$

и, следовательно, после подстановки и переобозначения индексов

$$D_i = (\delta_{ij} E_j + 4\pi\chi_{\perp, ij} E_{\perp, j}) = \tilde{\epsilon}_{ij} E_j, \quad (2.68)$$

где $\tilde{\epsilon}_{ij}$ определяется выражением (2.64). Но одновременно из (2.67) ясно, что в рассматриваемых условиях тензор

$$\delta_{ij} + \frac{4\pi\chi_{\perp, lj} s_l s_i}{1 - 4\pi(\chi_{\perp, rl} s_r s_l)}$$

эквивалентен тензору проектирования $\eta_{ij} = \delta_{ij} - s_i s_j$.

В этом легко убедиться и непосредственно, если подействовать обоими тензорами на поле

$$E_i = (\delta_{ij} - 4\pi\chi_{\perp, lj} s_l s_i) E_{\perp, j},$$

удовлетворяющее исходному условию (2.57), (2.65).

Итак, в применении к полям типа (2.57), (2.65) $\tilde{\epsilon}_{ij} = \tilde{\epsilon}_{ij}$ (см. (2.63) и (2.64)). Более того, если под $\chi_{\perp, ij}$ в (2.64) понимать выражение (2.59), то $\chi_{\perp, ij} s_j = 0$ и $\chi_{\perp, ij} = \chi_{\perp, il} \eta_{lj}$ (см. (2.60)); очевидно, в этом случае

$$\tilde{\epsilon}_{ij} = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{\perp, ij} = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{\perp, il} \eta_{lj} = \tilde{\epsilon}_{ij}.$$

Поэтому введение тензора $\tilde{\epsilon}_{ij}$ имеет какой-то смысл, лишь если понимать под $\chi_{\perp, ij}$ выражение, отличное от (2.59). Такая возможность существует, поскольку тензор

$$\chi_{\perp, ij} = \chi_{\perp, ij} + a(\omega, \mathbf{k}) s_i s_j, \quad \chi_{\perp, ij} s_i = 0, \quad (2.64a)$$

действуя на \mathbf{E}_{\perp} , дает тот же результат, что тензор $\chi_{\perp, ij}$; тензор $\tilde{\epsilon}_{ij}$ также, конечно, одинаков для $\chi_{\perp, ij}$ и $\chi'_{\perp, ij}$. Как мы увидим в § 12, в микротемории действительно можно получить тензор $\chi'_{\perp, ij}$, отличный от $\chi_{\perp, ij}$. Нам неизвестны, однако, какие-либо основания для выбора того или иного значения $\chi'_{\perp, ij}$ в (2.64a), т. е. для однозначного выбора скалярной функции $a(\omega, \mathbf{k})$. Действительно, для полей класса (2.57), (2.65) тензор $\tilde{\epsilon}_{ij}$ не зависит от вида a . Для полей же общего типа с $\mathbf{sD} \neq 0$ не видно оснований для того, чтобы отдать предпочтение тому или иному выражению для $a(\omega, \mathbf{k})$. Другими словами, тензор $\tilde{\epsilon}_{ij}$ действует в некотором подпространстве векторов \mathbf{E} и \mathbf{D} , и его обобщение для всего векторного пространства неоднозначно или, во всяком случае, требует дополнительных соображений. Напротив, зная ϵ_{ij} ,

мы приходим к однозначному выражению для $\epsilon_{\perp, ij}$ и $\tilde{\epsilon}_{ij}$ (см. (2.58), (2.63)). Таким образом, нам неизвестны какие-либо основания, позволяющие осмысленным образом применять тензоры $\tilde{\epsilon}_{ij}$ или $\tilde{\epsilon}_{ij}$ к полям более общего характера, чем поля с $\mathbf{sD} = 0$. Чтобы не создавать путаницы, мы ограничимся введенными тензорами $\epsilon_{\perp, ij}$ и $\chi_{\perp, ij}$.

Тензоры $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\chi_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$ позволяют выразить \mathbf{D} или \mathbf{P} через поперечное поле \mathbf{E}_{\perp} , но только для полей типа (2.57) — полей с поперечным вектором \mathbf{D} . Тем самым очевидно, что тензоры $\epsilon_{\perp, ij}$ и $\chi_{\perp, ij}$ имеют менее общий характер, чем тензор $\epsilon_{ij} = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{ij}$, связывающий \mathbf{D} с \mathbf{E} для любых полей.

Еще более существен другой момент — относительная сложность структуры тензоров $\epsilon_{\perp, ij}$ и $\chi_{\perp, ij}$ и возможность появления у них особенностей. В самом деле, пусть тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ является регулярной функцией своих переменных. Тем не менее тензоры $\epsilon_{\perp, ij}$ и $\chi_{\perp, ij}$ будут иметь особенности (полюсы) при значениях ω и \mathbf{k} , удовлетворяющих условию $\epsilon_{r_i s_i} = 0$, т. е. условию (2.37) для появления «фиктивных» продольных волн. Это и понятно, так как в «фиктивных» продольных волнах $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\parallel}$ и $\mathbf{D} \neq 0$, что для конечного поля \mathbf{E}_{\perp} возможно лишь при $\epsilon_{\perp, ij} \rightarrow \infty$.

Условие (2.37) может соблюдаться даже при отсутствии пространственной дисперсии и отсутствии поглощения. Наконец, $\epsilon_{\perp, ij}$ и $\chi_{\perp, ij}$, вообще говоря, зависят от \mathbf{s} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$, т. е. являются неаналитическими функциями \mathbf{k} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Все это делает по меньшей мере нерациональным использование тензоров $\epsilon_{\perp, ij}$ и $\chi_{\perp, ij}$ вместо ϵ_{ij} и χ_{ij} (это делается, например, в [15, 19, 37]) для каких-либо исследований общего характера, да и в большинстве других случаев.

2.5. Дисперсионные соотношения для комплексного показателя преломления. Неравенства, вытекающие из дисперсионных соотношений в области прозрачности. В п. 1.2 были рассмотрены дисперсионные соотношения для компонент тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Между тем в оптике непосредственно определяется не ϵ_{ij} , а комплексный показатель

преломления

$$\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s}) = n_l(\omega, \mathbf{s}) + ix_l(\omega, \mathbf{s})$$

для нормальных волн различного типа (индекс l). Возникает, таким образом, вопрос [17, 29] о получении дисперсионных соотношений для \tilde{n} .

Для изотропной среды без пространственной дисперсии $\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon(\omega)\delta_{ij}$, $\tilde{n}^2 = \epsilon(\omega)$, $n^2 - x^2 = \epsilon'(\omega)$, $2\pi x = \epsilon''(\omega)$, (2.69)

и дисперсионные соотношения (1.44) принимают вид

$$\left. \begin{aligned} n^2(\omega) - x^2(\omega) - 1 &= \frac{4}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{x n(x) x(x) dx}{x^2 - \omega^2}, \\ n(\omega) x(\omega) &= -\frac{\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{n^2(x) - x^2(x) - 1}{x^2 - \omega^2} dx. \end{aligned} \right\} (2.70)$$

В этом случае переход от ϵ_{ij} к \tilde{n}^2 происходит, можно сказать, автоматически. Но в анизотропной среде это уже не так, и возможность писать соотношения (2.70) для n_l и x_l заранее не ясна и, как мы увидим, фактически не всегда имеет место даже при отсутствии пространственной дисперсии. Остановимся на этом вопросе подробнее (см. [29]).

Дисперсионные соотношения (2.70) для некоторой функции $f(\omega) = u + iv$ можно написать тогда, когда эта функция не имеет особенностей в верхней полуплоскости и на вещественной оси комплексной переменной ω . При $f = \epsilon_{ij}$ отсутствие особенностей следует из весьма общих соображений, указанных в п. 1.2. Если же, скажем, $\epsilon(\omega)$ не имеет особенностей, то их не имеет и, например, функция $\epsilon^2(\omega)$; однако дисперсионные соотношения для ϵ^2 и аналогичных функций ϵ не дают ничего нового по сравнению с соотношениями для ϵ . Уже в случае функции $\sqrt{\epsilon(\omega)} = \tilde{n}(\omega)$ возможность писать дисперсионные соотношения не гарантирована в связи с возможностью появления точки ветвления. Но для термодинамически равновесной среды $\epsilon(\omega)$ не имеет нулей в верхней полуплоскости и на вещественной оси (см. [1] и п. 1.2). Поэтому в той же области $\sqrt{\epsilon(\omega)}$ не

имеет точек ветвления, и можно написать дисперсионные соотношения для $\tilde{n} = n + ix$, а не только для \tilde{n}^2 . Эти соотношения, очевидно, имеют вид (2.70) с заменой $n^2 - x^2$ на n и $2nx$ на x .

В силу сказанного ясно, что дисперсионные соотношения (2.70) будут справедливы для $\tilde{n}_i^2(\omega, \mathbf{s})$, если эта функция не имеет особенностей при $\omega = \omega' + i\omega''$, $\omega'' \geq 0$.

Функция $\tilde{n}_i^2(\omega, \mathbf{s})$ есть корень дисперсионного уравнения (2.22). При наличии пространственной дисперсии в (2.22)

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij} \left(\omega, \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s} \right)$$

и корни уравнения могут в принципе иметь различные особенности. Выяснить здесь что-либо невозможно, если не задаться видом зависимости ϵ_{ij} от \tilde{n} . Тем самым ясно, что при учете пространственной дисперсии пользоваться дисперсионными соотношениями типа (2.70) без специального анализа нельзя.

В пределах классической кристаллооптики задача очень упрощается, так как ϵ_{ij} в (2.22) уже не зависит от \tilde{n} и это уравнение является просто квадратным уравнением для \tilde{n}^2 . Поэтому можно выяснить, имеют ли корни этого уравнения особенности — полюсы или точки ветвления.

Отсутствие особенностей у ϵ_{ij} гарантирует аналитичность коэффициентов уравнения (2.22). Поэтому корень \tilde{n}^2 может обратиться в бесконечность лишь в случае обращения в нуль коэффициента при \tilde{n}^4 , т. е. при хорошо знакомом нам условии $\epsilon_{ij}s_i s_j = 0$ (см. (2.37), (2.38)). Согласно (1.35) для равновесной среды без пространственной дисперсии это условие соблюдаться не может (при $\omega'' \geq 0$). Поэтому у \tilde{n}^2 могут появиться особенности лишь типа точек ветвления. Это и имеет место при наличии существенного кратного корня \tilde{n}^2 (см. п. 2.4). Для кристаллов, кроме кристаллов низших сингоний (ромбической, моноклинной и триклинной), существенные кратные корни появиться не могут. Таким образом, для всех кристаллов, не принадлежащих к низшим сингониям, т. е. для оптически изотропных и одноосных кристаллов, для каждой из нормальных волн 1 и 2 (обыкновенной и необыкновенной) справедливы диспер-

сионные соотношения (2.70). Для кристаллов низших сингоний (для оптически двуосных кристаллов) справедливость этих дисперсионных соотношений уже в общем случае не гарантирована, так как могут появиться сингулярные оптические оси, отвечающие существенным кратным корням. Важно при этом подчеркнуть, что речь идет о возможности появления кратного корня в полуплоскости $\omega'' \geq 0$, а не только на вещественной оси $\omega'' = 0$. Поэтому убедиться в отсутствии кратного корня в результате измерений вряд ли возможно*).

Существенный кратный корень при $\omega'' \geq 0$ заведомо является в магнитоактивной плазме для большой области значений параметров (концентрации электронов и т. д.) и играет в этом случае заметную роль при рассмотрении распространения волн в неоднородной среде под малым углом к направлению магнитного поля (см. [29] и [6], § 28).

При наличии кратного корня также можно было бы написать дисперсионные соотношения, но с интегрированием по контуру, обходящему точки ветвления (см. [29]). Но такие соотношения, вероятно, не представляют реального интереса.

При учете пространственной дисперсии возможности появления особенностей у \tilde{n}_i^2 несомненно существенно расширяются (это следует, в частности, из замечаний, сделанных в п.п. 1.2 и 2.4). Вместе с тем не нужно думать, что при наличии пространственной дисперсии соотношения (2.70) становятся заведомо неверными или неточными. Напротив, для тех или иных нормальных волн эти соотношения могут полностью сохраняться. Так, в области слабой пространственной дисперсии, которая только нас и интересует, для двух нормальных волн 1 и 2, которые существуют и при

*) Функцию $\tilde{n}(\omega, \mathbf{s})$ в принципе можно определить на опыте и для комплексных частот ω ; для этого нужно использовать поле типа

$$E = E_0 e^{\omega'' t} e^{-i\omega' t},$$

или, точнее, импульс, форма которого близка к указанной на достаточно большом интервале значений t . Такие измерения, однако, не представляются практически осуществимыми в достаточно большой области значений переменной ω .

отсутствии пространственной дисперсии, соотношения (2.70) с $n = n_{1,2}$ и $x = x_{1,2}$ вполне могут оказаться полностью приемлемыми [17, 29].

В этом плане экспериментальное подтверждение соотношений (2.70) для той или иной нормальной волны типа I свидетельствует об отсутствии (или, точнее, малом вкладе) особенностей у $\tilde{n}_i^2(\omega, \mathbf{s})$ при $\omega'' \geq 0$. Напротив, нарушение соотношений (2.70) указывает на наличие таких особенностей. Нам не кажется, однако, что на пути проверки соотношений (2.70) открываются сколько-нибудь широкие перспективы, поскольку эти соотношения являются интегральными и при неизбежно ограниченной точности измерений оказываются обычно мало чувствительными. Впрочем, этого вопроса мы еще коснемся в § 11.

Остановимся теперь на другом вопросе — некоторых неравенствах, вытекающих из дисперсионных соотношений для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в области прозрачности.

Приводимые ниже неравенства для анизотропной негиротропной среды [13] являются обобщением результатов, известных для изотропной среды без пространственной дисперсии (см. [1], § 64). В последнем случае *)

$$\frac{\partial \epsilon(\omega)}{\partial \omega} > 0, \quad \frac{\partial \epsilon(\omega)}{\partial \omega} > \frac{2(1 - \epsilon(\omega))}{\omega}, \quad \epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega), \quad \epsilon''(\omega) = 0. \quad (2.71)$$

Из (2.71) следует такое неравенство для групповой скорости:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{c}{d(\omega n)} < c. \quad (2.72)$$

Доказательство этих неравенств и несколько замечаний в этой связи последуют в дальнейшем сразу для более общей задачи.

В области прозрачности, по самому ее определению, можно пренебречь поглощением, а вектор

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{\mathbf{n}}(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}$$

*) Ниже везде используется знак неравенства, хотя в пределе (при переходе к вакууму) имеет место равенство, т. е. с самого начала в (2.71) и (2.72) можно было бы использовать знаки \geq и \leq .

для рассматриваемых волн считать вещественным. В подобных условиях, по крайней мере для интересующих нас компонент ϵ_{ij} ,

$$\text{Im } \epsilon_{ij}(x, \mathbf{k}) = 0.$$

В самом деле, из дисперсионного уравнения (2.22) ясно, что данный корень этого уравнения \tilde{n} может быть вещественным лишь при вещественных $\epsilon_{ij}\left(\omega, \frac{\omega}{c} \tilde{\mathbf{n}} \mathbf{s}\right)$, определяющих значение \tilde{n} .

Обратимся теперь к первому из дисперсионных соотношений (1.27):

$$\text{Re } \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \epsilon_{ij}(x, \mathbf{k})}{x - \omega} dx. \quad (2.73)$$

Поскольку для частот ω , отвечающих области прозрачности, $\text{Im } \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = 0$, обращение в нуль знаменателя под интегралом в (2.73) не может иметь значения, т. е. сам этот интеграл в области прозрачности не является несобственным. Строго говоря, такая аргументация неточна, так как какое-то (пусть очень малое) поглощение всегда имеется и это было использовано в п. 1.2 для получения ряда соотношений. С другой стороны, вклад в интеграл (2.73) от области прозрачности все равно должен быть очень мал. Нужны же приведенные рассуждения только для обоснования возможности дифференцировать интеграл (2.73) в области прозрачности по параметру — частоте ω . Поступая таким образом, что в итоге представляется вполне законным (это следует и из сказанного и из характера результатов, одним из которых является неравенство (2.72)), имеем

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re } \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \epsilon_{ij}(x, \mathbf{k})}{(x - \omega)^2} dx. \quad (2.74)$$

Аналогично для негиротропной прозрачной среды, дифференцируя первое из соотношений (1.27а), получаем

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{x \epsilon''_{ij}(x, \mathbf{k})}{(x^2 - \omega^2)^2} dx. \quad (2.75)$$

В равновесной среде под действием поля тепло обязательно должно выделяться, а не поглощаться. Поэтому в произвольном монохроматическом поле (ω и \mathbf{k} — вещественные, см. (1.29))

$$q = \frac{\omega}{8\pi} \epsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_{0j} E_{0i}^* > 0. \quad (2.76)$$

В обсуждаемом случае (2.75) тензор ϵ''_{ij} является вещественным и симметричным (см. (1.22а)). Но это обстоятельство сейчас нет нужды принимать во внимание, так как уже для эрмитового тензора ϵ''_{ij} можно утверждать, что квадратичная форма (2.76) приводится к виду

$$q = \lambda_1 |E_1|^2 + \lambda_2 |E_2|^2 + \lambda_3 |E_3|^2 > 0.$$

Отсюда следует (поле E произвольное), что все коэффициенты $\lambda_i > 0$. Вводя определитель

$$D(\lambda) = |\epsilon''_{ij} - \lambda \delta_{ij}|$$

(для простоты сразу полагаем $\omega > 0$), мы можем сформулировать условие (2.76) в виде требования положительности всех корней уравнения $D(\lambda) = 0$. Отсюда получаем следующие необходимые и достаточные условия, приводящие к (2.76):

$$D(\lambda = 0) = |\epsilon''_{ij}| > 0, \quad \Delta_{ii} > 0, \quad \epsilon''_{ii} > 0, \quad (2.77)$$

где Δ_{ij} — минор элемента ϵ''_{ij} в определителе $|\epsilon''_{ij}|$. Вместо (2.77) можно было бы использовать и другие, эквивалентные условия, например часто пользуются неравенствами

$$\epsilon''_{11} > 0, \quad \begin{vmatrix} \epsilon''_{11} & \epsilon''_{12} \\ \epsilon''_{21} & \epsilon''_{22} \end{vmatrix} > 0, \quad |\epsilon''_{ij}| > 0.$$

Учитывая последнее из неравенств (2.77) в применении к соотношению (2.75), получаем

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \epsilon'_{ii}(\omega, \mathbf{k}) > 0, \quad (2.78)$$

поскольку подынтегральная функция в (2.75) после суммирования диагональных элементов всегда положительна.

Еще одно неравенство получается аналогичным путем, если умножить первое из соотношений (1.27а) на ω^2 , а уже

затем дифференцировать по ω . В результате находим

$$\frac{\partial}{\partial \omega} [\omega^2 (\epsilon'_{ii} - \delta_{ii})] > 0$$

или

$$\frac{\partial \epsilon'_{ii}(\omega, \mathbf{k})}{\partial \omega} > \frac{2(3 - \epsilon'_{ii}(\omega, \mathbf{k}))}{\omega}. \quad (2.79)$$

Использование первых двух неравенств (2.77) в сочетании с (2.75) приводит в общем случае к громоздким соотношениям. Ограничимся здесь лишь одним замечанием. В определенных условиях (при отсутствии пространственной дисперсии это относится ко всем кристаллам, кроме триклинных и моноклинных) главные оси тензоров ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} совпадают при всех частотах, а эти тензоры являются вещественными и тем самым в некоторой системе координат приводятся к главным осям. В таких условиях из (2.75), из аналогичного выражения для

$$\frac{\partial}{\partial \omega} [\omega^2 (\epsilon'_{ij} - \delta_{ij})]$$

и неравенств (2.77) следуют неравенства (2.71) для каждого из главных значений ϵ_1 , ϵ_2 и ϵ_3 тензора $\epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij}$.

Для изотропной среды при отсутствии пространственной дисперсии и поглощения

$$\epsilon_{ij} = \epsilon(\omega) \delta_{ij} = \epsilon'(\omega) \delta_{ij},$$

и неравенства (2.78) и (2.79) переходят в (2.71). При этом показатель преломления поперечных волн $n^2(\omega) = \epsilon(\omega)$ и, следовательно,

$$2n \frac{dn}{d\omega} = \frac{d\epsilon}{d\omega};$$

поэтому вместо (2.71) можно написать

$$\frac{dn}{d\omega} > 0, \quad \omega \frac{dn}{d\omega} > \left(\frac{1}{n} - n \right). \quad (2.71а)$$

Здесь уже учтено, что показатель преломления n можно считать положительным, поскольку рассматривается распространение волны в положительном направлении (при $\omega > 0$ и распространении волны вдоль оси z поля пропорциональны

множителю $e^{i(\frac{\omega}{c}nz - \omega t)}$). Если $n > 1$, то в силу первого из неравенств (2.71a)

$$\frac{d\omega n}{d\omega} = n + \omega \frac{dn}{d\omega} > 1;$$

если же $0 < n < 1$, то теперь уже из второго неравенства (2.71a) опять следует, что

$$\frac{d\omega n}{d\omega} > 1.$$

Отсюда сразу получается неравенство (2.72).

Разумеется, вывод о том, что групповая скорость волн

$$v_{гр} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{c}{\frac{d\omega n}{d\omega}}$$

не превосходит скорость света в вакууме c , указывает лишь на возможность без противоречий использовать выражение $\frac{d\omega}{dk}$ в качестве скорости распространения сигнала в реальной прозрачной среде. Вместе с тем может возникнуть такой вопрос. Дисперсионные соотношения получаются в результате учета принципа причинности, но никак не связаны с требованием релятивистской инвариантности. Почему же в таком случае получается некоторое ограничение на скорость сигнала? Дело в том, что выше использовано также дисперсионное уравнение $n^2 = \epsilon$, что в данном случае эквивалентно учету уравнений поля. Но уравнения поля релятивистски инвариантны. В сочетании с требованием соблюдения принципа причинности *) это как раз и приводит к неравенству $v_{гр} \leq c$.

*) Как это ни странно, довольно распространено заблуждение, состоящее в том, что из требования релятивистской инвариантности следует, что скорость любых сигналов не превосходит c . Между тем легко построить релятивистски инвариантные уравнения, для которых сигнал имеет любую скорость. Для этого, например, можно взять уравнения электродинамики сплошной среды (они, как известно, релятивистски инвариантны или, лучше сказать, ковариантны) для изотропной недиспергирующей среды с $0 < \epsilon < 1$. В этом случае $n = \sqrt{\epsilon} < 1$ и $v_{гр} = v_{ф} = c/n > c$ ($v_{ф}$ — фазовая скорость волн).

Такая среда, однако, не может существовать как раз потому, что сигнал в ней распространялся бы быстрее скорости света

В анизотропной среде, даже при отсутствии пространственной дисперсии, перейти от неравенств (2.78), (2.79) и им подобных к неравенству для $v_{гр}$ не так-то просто. Для одноосных кристаллов доказательство неравенства (2.72) приведено в [13]. Трудно сомневаться в возможности получить и более общий результат, но это еще не сделано и вряд ли представляло бы особый интерес. Вопрос о векторе групповой скорости и некоторых его свойствах будет еще обсужден в п. 3.2.

§ 3. Энергетические и некоторые другие соотношения для волн в анизотропной среде

3.1. Закон сохранения энергии в электродинамике сред с пространственной дисперсией. В электродинамике при обсуждении энергетических вопросов в центре внимания находится соотношение (теорема) Пойнтинга. Для получения этого соотношения умножим первое из уравнений (1.1) на \mathbf{E} , а третье уравнение — на \mathbf{B} , после чего вычтем одно выражение из другого. Тогда, при использовании тождества

$$\operatorname{div}[\mathbf{EB}] = \mathbf{B} \operatorname{rot} \mathbf{E} - \mathbf{E} \operatorname{rot} \mathbf{B}$$

имеем

$$\frac{1}{4\pi} \mathbf{E} \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{1}{4\pi} \mathbf{B} \frac{\partial B}{\partial t} = -\frac{c}{4\pi} \operatorname{div}[\mathbf{EB}] - \mathbf{j}_{ext} \mathbf{E}. \quad (3.1)$$

Интегрируя это выражение по объему V , ограниченному поверхностью S , получаем

$$\frac{1}{4\pi} \int_V \left\{ \mathbf{E} \frac{\partial D}{\partial t} + \mathbf{B} \frac{\partial B}{\partial t} \right\} dV = -\frac{c}{4\pi} \oint_S [\mathbf{EB}]_n dS - \int_V \mathbf{j}_{ext} \mathbf{E} dV. \quad (3.2)$$

Рассмотрим теперь поле, которое убывает на бесконечности, так что с увеличением объема (при $V \rightarrow \infty$) поверхностным интегралом в (3.2) можно пренебречь. Тогда

$$\frac{1}{4\pi} \int_V \left\{ \mathbf{E} \frac{\partial D}{\partial t} + \mathbf{B} \frac{\partial B}{\partial t} \right\} dV$$

в вакууме, что в силу релятивистского закона сложения скоростей приводит к нарушению принципа причинности (можно указать систему отсчета, в которой следствие происходит раньше его причины; см. [38] и [39], § 6).

представляет собой отнесенную к единице времени сумму изменения энергии поля и выделяющегося тепла*), которая как раз равна мощности $-\int j_{ext} E dV$, затрачиваемой источниками.

Поверхностным интегралом в (3.2) при $V \rightarrow \infty$ можно фактически пренебречь и в случае монохроматического поля

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{1}{2} (E_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + E_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}), \\ \mathbf{B} &= \frac{1}{2} (B_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + B_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}) \end{aligned} \right\} \quad (3.3)$$

с вещественными ω и \mathbf{k} . В самом деле, для поля (3.3) поверхностный интеграл не исчезает, но и не возрастает с увеличением объема V . Между тем объемные интегралы при этом возрастают. Далее, для поля (3.3) после усреднения по «высокой частоте» ω (т. е. для интервалов времени, значительно больших, чем $2\pi/\omega$) картина стационарна и энергия поля не изменяется. В силу всего сказанного ясно, что в поле (3.3) в среднем в единицу времени в единице объема среды выделяется тепло**)

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{4\pi V} \int_V \mathbf{E} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} dV = \\ &= \frac{i\omega}{16\pi} \{ \epsilon_{ij}^*(\omega, \mathbf{k}) E_{0j} E_{0i} - \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_{0j} E_{0i}^* \} = \\ &= \frac{i\omega}{16\pi} \{ \epsilon_{ij}^*(\omega, \mathbf{k}) - \epsilon_{ji}(\omega, \mathbf{k}) \} E_{0j} E_{0i} = \frac{\omega}{8\pi} \epsilon_{ij}''(\omega, \mathbf{k}) E_{0j} E_{0i}^*. \end{aligned} \quad (3.4)$$

*) В переменном поле при наличии поглощения (диссипации) вопрос об энергетическом смысле тех или иных членов в соотношении Пойнтинга, вообще говоря, неоднозначен (см. ниже). В данном случае, однако, мы исходим лишь из того, что работа внешних источников идет на изменение упорядоченного движения (энергии) и неупорядоченного движения (тепла в среде).

***) Усреднение по времени, которое здесь отмечается чертой сверху, эквивалентно отбрасыванию всех членов, содержащих множители $e^{\pm 2i\omega t}$; кроме того, в силу постоянства E_0 и B_0

$$\frac{\partial E_0}{\partial t} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial B_0}{\partial t} = 0.$$

Ниже, когда это не поведет к недоразумениям, черта сверху над средними выражениями будет опущена.

где использованы свойство симметрии (1.18) и эрмитовость тензоров ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} (см. п. 1.2; что касается замены индексов ij на ji и т. п., то это всегда делалось и будет делаться дальше без дополнительных пояснений).

Итак, при вещественных ω и \mathbf{k} получается выражение для тепла (3.4) такое же, как при отсутствии пространственной дисперсии. В последнем случае ϵ''_{ij} вообще не зависит от \mathbf{k} и, следовательно, этот вектор можно считать также и комплексным.

Возникает, естественно, вопрос о возможности получения выражения для q в области комплексных \mathbf{k} при наличии пространственной дисперсии. Кроме того, приведенное рассмотрение носит довольно частный характер (проведено интегрирование по объему и т. д.) и мы начали с него только для того, чтобы простейшим путем (см. [7]) прийти к формуле (3.4).

Обратимся теперь к существенно более общей задаче, а именно рассмотрим соотношение (3.1) для квазимонохроматического поля [40]. Строго говоря, именно с таким полем имеют дело в действительности, даже когда говорят о монохроматическом поле. Введение этого последнего оправдано лишь тогда, когда соответствующие результаты справедливы и для достаточно «длинного» импульса волн, т. е. как раз для квазимонохроматического поля, имеющего вид

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2} \{ E_{00}(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + E_{00}^*(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}^*\mathbf{r}-\omega t)} \} = \\ &= \frac{1}{2} \{ E_0(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k}'\mathbf{r}-\omega t)} + E_0^*(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}''\mathbf{r}-\omega t)} \} = \\ &= \int \{ \mathbf{g}(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}}) e^{i(\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r}-\tilde{\omega}t)} + \mathbf{g}^*(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}}) e^{-i(\tilde{\mathbf{k}}^*\mathbf{r}-\tilde{\omega}t)} \} d\tilde{\omega} d\tilde{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Здесь $E_0 = E_{00} e^{-\mathbf{k}''\mathbf{r}}$, причем функция $E_{00}(\mathbf{r}, t)$ медленно меняется за время порядка $2\pi/\omega$ и на пути порядка $2\pi/k'$ и $2\pi/k''$, где $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$, а частота ω считается вещественной (последнее отвечает обычной постановке задачи в оптике; можно было бы, конечно, отказаться от этого ограничения**)).

*) Кроме того, нужно иметь в виду, что выражение (3.5) отнюдь не означает, что поле меняется по закону $e^{\pm i\omega t}$; напротив, это выражение вполне пригодно и, например, при $E_0 = E_{00} e^{i\mathbf{k}''\mathbf{r}}$, если только $|\gamma| \ll \omega$.

Медленность изменения $E_{00}(\mathbf{r}, t)$ означает, что функция $\mathbf{g}(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}})$ имеет острый максимум вблизи значений $\tilde{\omega} = \omega$ и $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k}$. По последней причине под знаком интегралов обычно можно, например, полагать

$$\tilde{\omega}\varepsilon_{ij}(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}}) = \omega(\varepsilon_{ij})_0 + \left(\frac{\partial\omega\varepsilon_{ij}}{\partial\omega}\right)_0 \Omega + \omega\left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial k_l}\right)_0 q_l \equiv a_{ij}, \quad (3.6)$$

где $\tilde{\omega} = \omega + \Omega$, $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ и индекс 0 означает, что величина берется при $\tilde{\omega} = \omega$ и $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k}$.

Интегрирование по $\tilde{\omega}$ в (3.5) проводится по вещественной оси от 0 до ∞ , а интеграл по $\tilde{\mathbf{k}}$ нужно брать по контуру или области, содержащих точку \mathbf{k} . Уточнение этого контура для дальнейшего несущественно. Нужно только иметь в виду, что функция $\varepsilon_{ij}(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}})$ считается существующей и разлагающейся в ряд вблизи значений ω и \mathbf{k} ; кроме того, все рассматриваемые интегралы предполагаются существующими, а при их вычислении считается достаточным ограничиться учетом выписанных членов разложения (3.6).

Очевидно, учитывая свойство (1.18),

$$\frac{\partial D_i}{\partial t} = \int \left\{ -i\tilde{\omega}\varepsilon_{ij}(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}})g_i(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}})e^{i(\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r} - \tilde{\omega}t)} + i\tilde{\omega}\varepsilon_{ij}^*(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}})g_i^*(\tilde{\omega}, \tilde{\mathbf{k}})e^{-i(\tilde{\mathbf{k}}^*\mathbf{r} - \tilde{\omega}t)} \right\} d\tilde{\omega} d\tilde{\mathbf{k}}. \quad (3.7)$$

Подставим теперь (3.5) и (3.7) в выражение $E \frac{\partial D}{\partial t}$ и произведем усреднение по времени по интервалу, большому по сравнению с $2\pi/\omega$, но малому по сравнению с характерным временем изменения амплитуды $E_{00}(\mathbf{r}, t)$. В результате, используя также (3.6), имеем

$$E \frac{\partial D}{\partial t} = \int e^{-2k^*r} \left\{ -ia_{ij}g_j(\Omega, \mathbf{q})g_i^*(\Omega', \mathbf{q}')e^{i[(q-q^*)r - (\Omega - \Omega')t]} + ia_{ij}^*g_j^*(\Omega, \mathbf{q})g_i(\Omega', \mathbf{q}')e^{-i[(q^*-q)r - (\Omega - \Omega')t]} \right\} d\Omega d\Omega' d\mathbf{q} d\mathbf{q}'. \quad (3.8)$$

Далее, легко видеть, что (см. [40, 41])

$$\left. \begin{aligned} E_{ji}E_{0j}^* &= 4 \int g_i(\Omega, \mathbf{q})g_j^*(\Omega', \mathbf{q}')e^{-2k^*r} \times \\ &\quad \times e^{i[(q-q^*)r - (\Omega - \Omega')t]} d\Omega d\Omega' d\mathbf{q} d\mathbf{q}', \\ E_{0i} \frac{\partial E_{0j}^*}{\partial t} &= 4i \int \Omega' g_i(\Omega, \mathbf{q})g_j^*(\Omega', \mathbf{q}')e^{-2k^*r} \times \\ &\quad \times e^{i[(q-q^*)r - (\Omega - \Omega')t]} d\Omega d\Omega' d\mathbf{q} d\mathbf{q}'. \end{aligned} \right\} (3.9)$$

Аналогичных выражений для $\frac{\partial}{\partial t}(E_{0i}E_{0j}^*)$ и $\frac{\partial}{\partial x_l}(E_{0i}E_{0j}^*)$ приводить здесь не будем, так как они сразу же получаются путем дифференцирования указанного в (3.9) интегрального представления произведения $E_{0i}E_{0j}^*$.

Учитывая (3.8) и (3.9), можно привести результат усреднения выражения (3.1) по высокой частоте к такому виду:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{16\pi} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \left(\frac{\partial(\omega\varepsilon'_{ij})}{\partial\omega} \right)_0 E_{0j}E_{0i}^* + B_{0i}B_{0i}^* \right\} + \\ &+ \frac{1}{8\pi} (\omega\varepsilon''_{ij})_0 E_{ij}E_{ji}^* + \frac{i}{16\pi} \left(\frac{\partial\omega\varepsilon'_{ij}}{\partial\omega} \right)_0 \left(\frac{\partial E_{0i}}{\partial t} E_{0j}^* - \frac{\partial E_{0i}^*}{\partial t} E_{0j} \right) - \\ &\quad - \frac{i\omega}{16\pi} \left(\frac{\partial\varepsilon''_{ij}}{\partial k_l} \right)_0 \left(\frac{\partial E_{0i}}{\partial x_l} E_{0j}^* - \frac{\partial E_{0i}^*}{\partial x_l} E_{0j} \right) = \\ &= -\frac{c}{16\pi} \operatorname{div} \{ [E_0^*B_0] + [E_0B_0^*] \} + \\ &+ \frac{\omega}{16\pi} \left(\frac{\partial\varepsilon'_{ij}}{\partial k_l} \right)_0 \left\{ \frac{\partial}{\partial x_l} (E_{0j}E_{0i}^*) + 2k_l'' E_{0j}E_{0i}^* \right\} - A. \quad (3.10) \end{aligned}$$

Здесь $A = \overline{j_{ext}E}$ и введены обозначения $\left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial k_l}\right)_0 = \left(\frac{\partial\varepsilon'_{ij}}{\partial k_l}\right)_0 + i\left(\frac{\partial\varepsilon''_{ij}}{\partial k_l}\right)_0$, причем оба тензора $\left(\frac{\partial\varepsilon'_{ij}}{\partial k_l}\right)_0$ и $\left(\frac{\partial\varepsilon''_{ij}}{\partial k_l}\right)_0$ являются эрмитовыми. Очевидно, только при вещественном \mathbf{k} можно считать, что, например, $\left(\frac{\partial\varepsilon'_{ij}}{\partial k_l}\right)_0$ есть результат дифференцирования тензора $\varepsilon'_{ij} = \varepsilon_{ij} - i\varepsilon''_{ij}$. Однако для простоты записи мы не вводим новых обозначений, что после сказан-

ного не должно повести к недоразумениям (к тому же можно выразить результат непосредственно через $\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial k_l}$; см. (3.11)).

Заметим, что предпоследний член в (3.10) приводится к виду (напомним, что $E_{0,i}(\mathbf{r}, t) = E_{00,i}(\mathbf{r}, t) e^{-\mathbf{k}'\mathbf{r}}$)

$$-\frac{\partial}{\partial x_l} S_l^{(1)}, \quad S_l^{(1)} = -\frac{\omega}{16\pi} \left(\frac{\partial \varepsilon'_{ij}}{\partial k_l} \right)_0 (E_{00,j} E_{00,i}^*) = \\ = -\frac{\omega}{16\pi} \operatorname{Re} \left\{ \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial k_l} \right)_0 (E_{00,j} \cdot E_{00,i}^*) \right\}. \quad (3.11)$$

Вектор $\mathbf{S}^{(1)}$ фигурирует в (3.10) на равных правах с усредненным по высокой частоте вектором Пойнтинга *)

$$\mathbf{S}^{(0)} = \frac{c}{16\pi} \{ [E_0^* B_0] + [E_0 B_0^*] \} = \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} [E_0 B_0^*]. \quad (3.12)$$

При наличии поглощения в (3.10) имеется много членов и выяснение их физического смысла, вообще говоря, отнюдь не просто даже при отсутствии пространственной дисперсии [41]. В этой связи особенно важно остановиться сначала на случае непоглощающей прозрачной среды, в которой распространяется некоторая волна с вещественными ω и \mathbf{k} .

Как ясно из (3.4), в непоглощающей прозрачной среде **)

$$\varepsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (3.13)$$

поскольку амплитуды E_{0j} в (3.4) произвольны (при переходе к (3.4) не делалось предположения, что речь идет о нормальных волнах).

Из неравенств (1.30) и (1.33) ясно, что при вещественной частоте $\omega \neq 0$ тензор $\varepsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ не может обращаться в нуль

*) Для гиротропной или магнитоактивной среды усреднение по высокой частоте очень существенно, так как сам вектор $\mathbf{S}^{(0)} = \frac{c}{4\pi} [E\mathbf{B}]$ при этом вращается в пространстве и его мгновенное направление не имеет особого физического смысла (см. [6], § 24).

**) Непоглощающая среда, конечно, может не быть прозрачной (примером может служить изотропная среда с $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) < 0$, $\varepsilon''(\omega) = 0$; в этом случае $\tilde{n} = i\mathbf{x} = i\sqrt{|\varepsilon'|}$).

(другими словами, какое-то, пусть очень малое, поглощение всегда имеется; именно, исходя из этих соображений, и получены сами неравенства (1.30) и (1.33)). Поглощение может, однако, быть столь слабым, что в данных конкретных физических условиях (например, при заданной толщине образца) среду можно практически считать прозрачной. Именно это и подразумевается, когда речь идет об использовании условия (3.13).

При условии (3.13) соотношение (3.10) принимает вид

$$\frac{1}{16\pi} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \left(\frac{\partial \omega \varepsilon'_{ij}}{\partial \omega} \right)_0 E_{0i} E_{0j}^* + B_0 B_0^* \right\} = -\operatorname{div} (\mathbf{S}^{(0)} + \mathbf{S}^{(1)}), \quad (3.14)$$

где

$$S_l^{(1)} = -\frac{\omega}{16\pi} \left(\frac{\partial \varepsilon'_{ij}}{\partial k_l} \right)_0 E_{0j} E_{0i}^*, \quad (3.15)$$

поскольку при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ амплитуды E_{00} и E_0 совпадают. Уравнение (3.14) представляет собой закон сохранения энергии, причем средняя по высокой частоте плотность энергии равна *)

$$W = \frac{1}{16\pi} \left\{ \frac{\partial [\omega \varepsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k})]}{\partial \omega} E_{0j} E_{0i}^* + B_{0i} B_{0i}^* \right\}. \quad (3.16)$$

) Если рассматриваемое поле представляет собой пакет нормальных волн, т. е. источники отсутствуют, то производные от $E_{0j} E_{0i}^$ и других величин по t и x_l связаны между собой. Действительно, при $\mathbf{k}'' = 0$, исходя из (3.9), легко показать, что $\frac{\partial}{\partial t} (E_{0i} E_{0j}^*) = -\left(\frac{\partial \omega}{\partial k_i} \right)_0 \frac{\partial}{\partial x_l} (E_{0i} E_{0j}^*)$. Поскольку $\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}$ есть вектор групповой скорости, полученное соотношение имеет совершенно ясный смысл. Именно, в приближении (3.6) пакет нормальных волн движется без искажений со скоростью $\mathbf{v}_{\text{гр}}$. Поэтому $E_{0i} E_{0j}^*$ зависит от t и x_l по закону $f(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{\text{гр}} t)$. Дифференцирование такого выражения сразу же приводит к указанной связи. Если имеется пакет, для которого $\tilde{\mathbf{k}} = \tilde{\mathbf{k}}(\omega)$, $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, то аналогичным образом $\frac{\partial}{\partial x_l} (E_{0j} E_{0i}^*) = -\left(\frac{\partial k_l}{\partial \omega} \right)_0 \frac{\partial}{\partial t} (E_{0j} E_{0i}^*)$. В таких условиях объединение в уравнении (3.14) членов с $\frac{\partial}{\partial t} (E_{0j} E_{0i}^*)$ и $\operatorname{div} \mathbf{S}^{(1)}$ в сумме дает

$\frac{1}{16\pi} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \left(\frac{\partial \omega \varepsilon'_{ij}}{\partial \omega} \right)_0 + \omega \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial k_l} \right) \left(\frac{\partial k_l}{\partial \omega} \right)_0 \right\} E_{0i} E_{0j}^*$. Такое же

В то же время, как ясно из (3.14), $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(0)} + \mathbf{S}^{(1)}$ (см. (3.12) и (3.15)) есть средний поток энергии. При этом вектор Пойнтинга $\mathbf{S}^{(0)}$ есть средний поток энергии электромагнитного поля, а связанный с учетом пространственной дисперсии [13, 40, 42] вектор $\mathbf{S}^{(1)}$ представляет собой средний поток энергии, переносимый частицами среды. При пренебрежении пространственной дисперсией поток $\mathbf{S}^{(1)}$ обращается в нуль, так как это пренебрежение эквивалентно отбрасыванию градиентных членов в уравнениях движения для частиц *).

выражение получается [43], конечно, если плотность энергии электрического поля считать равной

$$\frac{1}{16\pi} \left\{ \frac{d}{d\omega} [\omega \epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}(\omega))] \right\}_0 E_{0i} E_{0j}^*.$$

Однако в силу сказанного представляется ясным, что и для пакета нормальных волн в качестве плотности энергии нужно рассматривать выражение (3.16), а не какое-либо другое. Отметим, что средние по времени величины выше мы отмечали чертой сверху. Однако в применении к таким величинам, как W , $S^{(0)}$ и $S^{(1)}$, которые уже определены в качестве средних по времени (точнее, средних по высокой частоте), в этом нет нужды.

*) Поясним сказанное на примере плазмы, когда роль уравнения движения играет кинетическое уравнение для функции распределения $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{e}{m} \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \nabla_{\mathbf{v}} f + I = 0, \quad (\text{A})$$

где I есть интеграл столкновений, и ниже используется нормировка $\int f d\mathbf{v} = N$. Пренебрежение пространственной дисперсией при вы-

числении плотности тока $\mathbf{j} = e \int \mathbf{v} f d\mathbf{v}$ отвечает пренебрежению

членом $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f$ в (A); это сразу ясно, если учесть, что для монохроматической волны $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f = i \mathbf{k} \mathbf{v} f$ и нигде больше \mathbf{k} не входит.

Закон сохранения энергии получается из (A) в результате умножения на $(m\mathbf{v}^2)/2$ и интегрирования по скоростям. Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{E^2 + B^2}{8\pi} + \int \frac{m\mathbf{v}^2}{2} f d\mathbf{v} \right) = \\ = - \operatorname{div} \left\{ \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \mathbf{B}] + \int \frac{m\mathbf{v}^2}{2} \mathbf{v} f d\mathbf{v} \right\} - \int \frac{m\mathbf{v}^2}{2} I d\mathbf{v}. \quad (\text{B}) \end{aligned}$$

Вывода этого уравнения мы не приводим (см. [13, 41]), поскольку

В следующем п. 3.2 будет установлена связь между потоком энергии \mathbf{S} и групповой скоростью $\mathbf{v}_{\text{гр}} = d\omega/d\mathbf{k}$ в прозрачной среде.

Возвращаясь к общему случаю поглощающей среды, запишем соотношение (3.10) для монохроматического поля с вещественными ω и \mathbf{k} , когда в (3.5) $\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_{00} = \text{const}$. Такое поле можно создать и в поглощающей среде при наличии источников. При этом

$$q \equiv \frac{1}{8\pi} (\omega \epsilon''_{ij})_0 E_{0j} E_{0i}^* = -A \equiv -\overline{j_{\text{ext}} \mathbf{E}}. \quad (\text{3.17})$$

Таким образом, мы приходим к результату, эквивалентному (3.4). Если же поле не является монохроматическим, то картина усложняется даже при пренебрежении пространственной дисперсией, когда уравнение (3.10) принимает вид (см. (3.12), (3.16))

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{8\pi} (\omega \epsilon''_{ij})_0 E_{0j} E_{0i}^* + \frac{i}{16\pi} \left(\frac{\partial \omega \epsilon''_{ij}}{\partial \omega} \right)_0 \left(\frac{\partial E_{0i}^*}{\partial t} E_{0j} \right) = \\ = -\operatorname{div} \mathbf{S}^{(0)} - A. \quad (\text{3.18}) \end{aligned}$$

Интерпретировать отдельные члены левой части этого уравнения как изменение энергии и диссипацию уже нельзя. Достаточно сказать, что величина W при наличии поглощения может быть отрицательной, а выражение $q = \frac{1}{8\pi} (\omega \epsilon''_{ij})_0 E_{0j} E_{0i}^*$, вообще говоря, не равно работе сил трения, т. е. не может отождествляться с выделяющимся теплом. В сказанном легко его характер (закон сохранения энергии) сразу же ясен. Здесь важно лишь подчеркнуть, что поток энергии частиц

$$S^{(1)}(f) = \int \frac{m\mathbf{v}^2}{2} \mathbf{v} f d\mathbf{v}$$

появляется в (B) только при учете члена $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f$ в (A). Как раз это и утверждалось в тексте. Аналогичные выводы можно сделать при рассмотрении сплошной среды, например, с помощью уравнений гидродинамики или теории упругости. Во избежание недоразумений подчеркнем также следующее. Вектор $\mathbf{S}^{(1)}$, определяемый выражением (3.15), мы интерпретируем как поток энергии, опираясь на уравнение (3.14). Последнее относится к случаю прозрачной среды ($\epsilon'_{ij} = 0$, вектор \mathbf{k} вещественный). Поэтому вектор $\mathbf{S}^{(1)}(f)$, получающийся из уравнения (B), должен совпадать с $S^{(1)}$ (см. (3.15)) только в указанных условиях.

убедиться [41] на примере плазмы*) или для какой либо другой модели, но здесь достаточно сделать одно общее замечание. В феноменологическое уравнение (3.10) или (3.18) в качестве характеристик среды входит только прои-

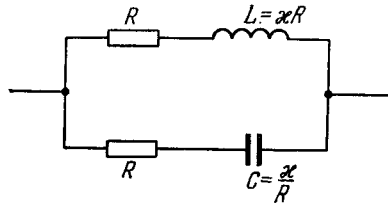


Рис. 2. Электрическая цепь с импедансом $Z = R$ при любом χ .

цаемость $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и ее производные по ω и \mathbf{k} . Но ϵ_{ij} определяет «отклик» системы на электромагнитное поле, а этот «отклик» может быть одинаковым и в условиях, когда запас энергии в системе различен. Действительно, уже на таком простейшем примере линейной системы, как электрическая цепь с емкостью C , самоиндукцией L и сопротивлением R , можно убедиться в том, что импеданс электрической цепи $Z(\omega) = R + iX$ может быть (при $R \neq 0$) одинаковым при различных L и C , т. е. разным запасе энергии в цепи (см. рис. 2, где $Z = R$ при $L = \chi R$ и $C = \frac{\chi}{R}$ для любого χ). Неоднозначность пропадает при отсутствии поглощения —

*) Рассмотрим, например, изотропную плазму в рамках элементарной теории, когда упорядоченная скорость электронов описывается уравнением $m \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = e\mathbf{E} - m\mathbf{u}$. Тогда [41] $\epsilon = 1 - \frac{4\pi e^2 N}{m\omega(\omega + i\nu)}$,

$$W_E = \left(\frac{\partial \omega \epsilon'}{\partial \omega} \right)_0 \frac{E_0 E_0^*}{16\pi} = \left(1 + \frac{4\pi e^2 N (\omega_0^2 - \nu^2)}{m(\omega^2 + \nu^2)^2} \right) \frac{E_0 E_0^*}{16\pi}$$

и как W_E , так и $W = W_E + \frac{B_0 B_0^*}{16\pi}$ могут быть отрицательными.

Работа силы трения

$$mN\bar{u}^2 = q - \frac{8\pi e^2 N \nu^2}{m(\omega^2 + \nu^2)^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{E_0 E_0^*}{16\pi} \right) + \\ + i \frac{e^2 N \omega \nu}{2m(\omega^2 + \nu^2)^2} \left(\frac{\partial E_0}{\partial t} E_0^* - \frac{\partial E_0^*}{\partial t} E_0 \right), \\ q = \frac{e^2 N \nu}{2m(\omega^2 + \nu^2)} E_0 E_0^* = \frac{1}{8\pi} (\omega \epsilon'')_0 E_0 E_0^*.$$

в случае (3.14) это следует просто из того факта, что в уравнении остаются только два члена разной природы. Физически это тоже ясно, так как для консервативной системы энергетические соотношения следуют из динамических. Такая же ситуация имеет место в случае монохроматического поля с вещественными ω и \mathbf{k} — здесь в уравнении остаются только два члена, фигурирующие в (3.17). Однако картина меняется даже для монохроматического поля с вещественной частотой ω , но комплексным \mathbf{k} . Тогда $E_0 = E_{00} e^{-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, $E_{00} = \text{const}$ и уравнение (3.10) принимает вид

$$q \equiv \frac{1}{8\pi} (\omega \epsilon''_{ij})_0 E_{0j} E_{0i}^* = -\text{div } \mathcal{S}^{(0)} - A. \quad (3.19)$$

Интерпретировать выражение q как тепло теперь тоже нет оснований. Дело в том, что даже при отсутствии поглощения, но при учете пространственной дисперсии для комплексных \mathbf{k} тензор ϵ_{ij} не является эрмитовым и тем самым $\epsilon''_{ij} \neq 0$. Допустим, например, что $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{(0)}(\omega) + \alpha_{ijklm}(\omega) k_l k_m$ с вещественными $\epsilon_{ij}^{(0)}$ и α_{ijklm} (при вещественной частоте ω). Тогда для вещественных \mathbf{k} , очевидно, $\epsilon''_{ij} = 0$, и если вещественность \mathbf{k} совместима с уравнениями поля, то среда прозрачна. Но при комплексном \mathbf{k} уже $\epsilon''_{ij} \neq 0$, хотя никакого механизма диссипации не появилось, а поле с комплексным \mathbf{k} создается внешними источниками.

Итак, при наличии пространственной дисперсии только при вещественных ω и \mathbf{k} выражения (3.4), (3.17) заведомо можно считать теплом, выделяющимся в единице объема. Далее, лишь для прозрачной среды W (см. (3.16)) есть плотность энергии и \mathcal{S} (см. (3.12) и (3.15)) есть поток энергии. При отсутствии поглощения, но комплексном \mathbf{k} , как это имеет место при полном внутреннем отражении, вопрос об энергетическом балансе также достаточно прост (см. пп. 3.3, 10.5 и 10.6), но при наличии поглощения и комплексном \mathbf{k} (это имеет место для нормальных волн при наличии поглощения) энергетические соотношения усложняются. Мы имеем лишь закон сохранения (3.10), но не можем дать энергетическую интерпретацию отдельных членов этого уравнения. Причина

такого положения уже была разъяснена выше*). Сейчас же важно подчеркнуть, что незнание плотности энергии, потока энергии и количества тепла, относящихся к областям внутри среды, ни в какой мере не препятствует анализу широкого класса экспериментов. В самом деле, в оптике речь обычно идет о коэффициентах отражения и пропускания или изменении фазы волны при прохождении ею пластинки и т. п. Всегда при этом измерения ведутся вне среды и тем самым ни о каких локальных энергетических соотношениях внутри среды нет и речи.

3.2. Связи между выражениями, квадратичными относительно амплитуд нормальных волн. Вектор групповой скорости. Пространственная дисперсия и ортогональность нормальных волн. Теорема взаимности. Между амплитудами нормальных волн можно установить целый ряд соотношений, квадратичных относительно этих амплитуд. Исходными при этом являются уравнения поля (2.3) и (2.5). Для удобства приведем здесь еще раз эти уравнения, а также комплексно сопряженные выражения (частота ω считается вещественной):

$$D_0 = -\frac{c}{\omega} [k B_0], \quad (2.3)$$

$$B_0 = \frac{c}{\omega} [k E_0], \quad (2.5)$$

$$D_0^* = -\frac{c}{\omega} [k^* B_0^*], \quad (2.3a)$$

$$B_0^* = \frac{c}{\omega} [k^* E_0^*]. \quad (2.5a)$$

*) В дополнение можно отметить, что для диссипативной системы неприменимы термодинамические понятия, такие, как внутренняя или свободная энергия. В этой связи с самого начала можно было ожидать невозможности придать простой энергетический смысл отдельным членам в феноменологическом законе сохранения энергии. В силу сказанного становится понятным, почему в п. 1.2 принцип возрастания энтропии при исследовании тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ удавалось учесть только при вещественных ω и \mathbf{k} . Сделать то же самое и вообще детальнее исследовать энергетические соотношения для диссипативной системы (или для непоглощающей среды, но при комплексном \mathbf{k}) можно только в результате более полного анализа свойств системы, требующего знания не только проницаемости $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Результат такого анализа был в качестве примера приведен выше для простейшей модели плазмы (подробнее см. [41]).

Эти соотношения справедливы для полей вида

$$E = E_0 e^{i(kr - \omega t)}, \quad D = D_0 e^{i(kr - \omega t)}, \quad B = B_0 e^{i(kr - \omega t)},$$

для амплитуд этих полей E_0 , D_0 , B_0 , а также для амплитуд E_0 , D_0 и B_0 вещественных полей вида

$$E(r, t) = \frac{1}{2} \{ E_0 e^{i(kr - \omega t)} + E_0^* e^{-i(k^*r - \omega t)} \}. \quad (3.20)$$

Как уже отмечалось, при исследовании квадратичных (в частности, энергетических) соотношений удобнее с самого начала использовать вещественные поля, что мы и будем делать (в п. 3.1 проводилось различие между амплитудами E_0 и E_{00} , но далее для простоты мы воспользуемся лишь выражениями типа (3.20) с амплитудами, не зависящими от r и t).

Умножая уравнения (2.3) и (2.5) соответственно на E_0 и B_0 , получаем (при $\omega \neq 0$)

$$D_0 E_0 = B_0 B_0 = \frac{c}{\omega} k [E_0 B_0]. \quad (3.21)$$

В прозрачной среде, т. е. для вещественного \mathbf{k} , кроме того*),

$$D_0 E_0^* = B_0 B_0^* \quad (\mathbf{k} = \mathbf{k}^* = \mathbf{k}'). \quad (3.22)$$

Это равенство следует из (2.3) и (2.5a). Из (2.3) и (2.5) после умножения на E_0^* или B_0^* и последующего сложения или вычитания имеем

$$\omega (D_0 E_0^* \pm B_0 B_0^*) = c k \{ [E_0 B_0^*] \pm [E_0^* B_0] \}. \quad (3.23)$$

Для прозрачной среды отсюда и из (3.22) следует, что

$$[E_0 B_0^*] = [E_0^* B_0] \quad (\mathbf{k} = \mathbf{k}^* = \mathbf{k}'). \quad (3.24)$$

Из (2.3), (2.5), (2.3a) и (2.5a) аналогичным путем находим

$$\omega \{ [D_0 B_0^*] \pm [D_0^* B_0] \} = -c \{ [k B_0] B_0^* \pm [k E_0] D_0^* \}, \quad (3.25)$$

$$\omega (D_{0i} B_{0j}^* \pm B_{0i} D_{0j}^*) = \{ [k B_0]_i B_{0j}^* \pm [k E_0]_i D_{0j}^* \}. \quad (3.26)$$

) Соотношения, относящиеся лишь к прозрачной среде, мы будем часто снабжать равенством $\mathbf{k} = \mathbf{k}^ = \mathbf{k}'$ — это как раз указывает на вещественность вектора (в общем случае $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$, где \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' — вещественные векторы).

Для полноты картины выпишем и другие очевидные соотношения, вытекающие из (2.3) и (2.5):

$$\mathbf{k}D_0 = 0, \quad \mathbf{k}B_0 = 0, \quad B_0D_0 = 0, \quad B_0E_0 = 0. \quad (3.27)$$

Кроме того, конечно, равенства типа (3.21), (3.23) и другие имеют место для комплексно сопряженных выражений.

Если имеется не монохроматическое поле (3.20), а волновой пакет, то связи (3.21) — (3.27) относятся к каждой фурье-компоненте пакета. При этом амплитуды E_0 , D_0 и B_0 зависят от $\omega(\mathbf{k})$ и \mathbf{k} . Поэтому соотношения, получающиеся из (3.21) — (3.27) в результате дифференцирования по \mathbf{k} (т. е. по k_l , $l = 1, 2, 3$), можно относить к произвольному квазимонохроматическому пакету только в условиях, когда производные от амплитуд по \mathbf{k} сокращаются. Такого рода соотношения действительно существуют [13, 42, 44].

Продифференцируем (3.23) по k_l , учитывая, что

$$\left. \begin{aligned} D_{0i}(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_{0j}(\omega, \mathbf{k}), \\ D_{0i}^*(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}^*(\omega, \mathbf{k}) E_{0j}^*(\omega, \mathbf{k}), \\ \epsilon_{ij}^*(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}(-\omega, -\mathbf{k}^*), \quad \omega = \omega(\mathbf{k}). \end{aligned} \right\} \quad (3.28)$$

В результате

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial k_l} \left\{ \frac{\partial [\omega \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})]}{\partial \omega} E_{0j} E_{0i}^* \pm B_{0i} B_{0i}^* \right\} = \\ = c \left\{ [E_0 B_0^*]_l \pm [E_0^* B_0]_l \right\} - \omega \frac{\partial \epsilon_{ij}}{\partial k_l} E_{0j} E_{0i}^* + \\ + \left\{ (c [k E_0] \mp \omega B_0) \frac{dB_0^*}{dk_l} \pm (c [k E_0^*] - \omega B_0^*) \frac{dB_0}{dk_l} \right\} - \\ - \left\{ (c [k B_0]_j + \omega \epsilon_{ij} E_{0i}^*) \frac{dE_{0j}}{dk_l} + (\pm c [k B_0]_i + \omega \epsilon_{ij} E_{0j}) \frac{dE_{0i}^*}{dk_l} \right\}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Для прозрачной среды $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$ и $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^* = \epsilon_{ji}^*$. В этом случае при учете уравнений поля (2.3), (2.5), (2.3а) и (2.5а) соотношение (3.29) с верхним знаком принимает вид

$$W \mathbf{v}_{\text{гp}} = S, \quad (3.30)$$

где

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{16\pi} \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} [\omega \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})] E_{0j} E_{0i}^* + B_{0i} B_{0i}^* \right\}, \\ \mathbf{v}_{\text{гp}} &= \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}, \quad S = S^{(0)} + S^{(1)}, \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}^* = \mathbf{k}', \quad \epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij}, \\ S^{(0)} &= \frac{c}{16\pi} ([E_0 B_0^*] + [E_0^* B_0]), \quad S_l^{(1)} = -\frac{\omega}{16\pi} \frac{\partial \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})}{\partial k_l} E_{0i}^* E_{0j}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Смысл величин W , $S^{(0)}$ и $S^{(1)}$ был установлен еще в п. 3.1 — они представляют собой соответственно средние по высокой частоте плотность энергии и потоки энергии для квазимонохроматического пакета. Равенство (3.30) с этой точки зрения вполне естественно: квазимонохроматический пакет нормальных волн в первом приближении (при учете лишь первых производных по ω и \mathbf{k}) движется как целое, т. е. без расплывания, с групповой скоростью $\mathbf{v}_{\text{гp}}$. Очевидно, при этом полный поток энергии S , который складывается из электромагнитного потока $S^{(0)}$ и потока $S^{(1)}$, должен быть равен произведению плотности энергии на групповую скорость $\mathbf{v}_{\text{гp}}$. Нужно, быть может, лишь из независимых соображений доказать, что групповая скорость

$$\mathbf{v}_{\text{гp}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \quad (3.32)$$

(это значит, что $\mathbf{v}_{\text{гp}, i} = \frac{\partial \omega(\mathbf{k})}{\partial k_i}$).

Вывод этого выражения хорошо известен (см., например, [6], § 24), но все же целесообразно на нем остановиться и получить, кроме того, несколько полезных соотношений.

Представим электрическое поле квазимонохроматического пакета нормальных волн в виде (в данном случае нет нужды рассматривать вещественное поле)

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) &= \int \mathbf{g}(\tilde{\mathbf{k}}) e^{i(\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r} - \tilde{\omega}(\tilde{\mathbf{k}})t)} d\tilde{\mathbf{k}} = \\ &= e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \int \mathbf{g}(\mathbf{q}) e^{i\left(r - \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} t\right) \mathbf{q}} d\mathbf{q} = A\left(\mathbf{r} - \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} t\right) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Здесь \mathbf{k} и $\omega(\mathbf{k})$ — «несущие» волновой вектор и частота импульса, $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, $\tilde{\omega} = \omega + \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \mathbf{q}$, $q \ll k$, $\left(\frac{d\omega}{d\mathbf{k}}\right)_i \equiv \frac{\partial\omega}{\partial k_i} \equiv \left(\frac{\partial\omega}{\partial \tilde{k}_i}\right)_{\tilde{\mathbf{k}}=\mathbf{k}}$ и в (3.33) учтены лишь первые производные от ω по k_i . Последнее как раз и означает, что рассматривается квазимонохроматический импульс (длительность импульса $T \gg 2\pi/\omega$) при пренебрежении его расплыванием (изменением формы). Очевидно, амплитуда A в выражении (3.33) постоянна, если $\mathbf{r} - \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} t = \text{const}$, т. е. импульс движется с групповой скоростью (3.32).

Для того чтобы быть уверенным в возможности пренебрежения расплыванием импульса, нужно выяснить характер этого расплывания. Такой анализ представляет и самостоятельный интерес. Здесь, однако, мы ограничимся лишь одним замечанием (подробнее см. [6], § 21). Из общих соображений ясно, что импульс расплывается тем сильнее, чем больший путь L он проходит. В случае однородной среды, очевидно, время прохождения импульсом пути L равно *)

$$\Delta t_{\text{гр}} = \frac{L}{v_{\text{гр}}} = \frac{L}{d\omega/d\mathbf{k}} = L \frac{d\mathbf{k}}{d\omega} = \frac{d\varphi}{d\omega}, \quad (3.34)$$

*) К выражению (3.34) сразу же приходим в результате рассмотрения одномерного импульса, поле которого при $z=0$ равно

$$E(z=0, t) = \int g(\tilde{\omega}) e^{-i\tilde{\omega}t} d\tilde{\omega},$$

а после прохождения пути L равно

$$E(z=L, t) = \int R(\tilde{\omega}) g(\tilde{\omega}) e^{-i(\tilde{\omega}t - \varphi(\tilde{\omega}))} d\tilde{\omega}.$$

При отсутствии поглощения $R(\tilde{\omega})=1$ и для квазимонохроматического импульса

$$E(z=0, t) = A(t) e^{-i\omega t},$$

$$\varphi(\tilde{\omega}) = \varphi(\omega) + \frac{d\varphi}{d\omega} \Omega.$$

Тогда, как легко видеть, в рассматриваемом приближении

$$E(z=L, t) = A(t - d\varphi/d\omega) e^{-i(\omega t - \varphi(\omega))}.$$

Это значит, что импульс как целое проходит путь L за время

$$\Delta t_{\text{гр}} = d\varphi/d\omega.$$

где для простоты рассматривается одномерный импульс (пакет), движущийся с групповой скоростью $\frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$; очевидно, $\varphi = kL$ есть изменение фазы волны на пути L . Если бы время $\Delta t_{\text{гр}} = \frac{d\varphi}{d\omega}$ не зависело от несущей частоты ω , то импульс не расплывался бы. Но, вообще говоря, $\Delta t_{\text{гр}} = \Delta t_{\text{гр}}(\omega) = \frac{d\varphi(\omega)}{d\omega}$ и расплывание импульса характеризуется производной $\frac{d^2\varphi}{d\omega^2}$. Как следует из более детального анализа, передний и задний края длинного импульса (цуга волн) с длительностью $T \gg \frac{2\pi}{\omega}$ расширяются на величину порядка *)

$$\tau = \sqrt{\frac{d^2\varphi}{d\omega^2}} = \sqrt{L \frac{d^2k}{d\omega^2}}, \quad k = \frac{\omega}{c} n(\omega). \quad (3.35)$$

До тех пор пока $\tau \ll T$, сигнал в первом приближении можно считать не расплывающимся. С помощью выражения (3.35) легко выяснить, достаточно ли мало расплывание импульса, и тем самым можно без дополнительных оговорок пользоваться понятием о групповой скорости.

Сложнее обстоит дело при наличии поглощения или для непоглощающей, но непрозрачной среды, т. е. при комплексных или мнимых значениях \mathbf{k} . В этом случае не только несправедливо соотношение (3.30) и нельзя дать простую интерпретацию энергетических соотношений, но и не имеет смысла, вообще говоря, понятие о групповой скорости. Раньше всего заметим, что вектор $\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$ при комплексном \mathbf{k} и вещественной частоте ω является комплексным, в то время как групповая скорость по самому ее смыслу представляет собой вещественный вектор. По аналогии со случаем прозрачной среды можно пытаться определить групповую скорость

*) Ширина размытия длинного импульса не должна зависеть от T или $d\varphi/d\omega$; период колебаний $2\pi/\omega$ также не играет роли, хотя это и менее очевидно. В результате τ может зависеть только от $d^2\varphi/d\omega^2$. Коль скоро это так, к связи (3.35) приходим просто из соображений размерности. Форма, которую приобретает импульс в результате расплывания, зависит от его начальной формы. Для прямоугольного импульса («оборванной» синусоиды) вычисления проведены в [6], § 21 (см. также [45]).

в непрозрачной среде таким образом:

$$\mathbf{v}'_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}'}, \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''. \quad (3.36a)$$

Тогда для изотропной среды в случае пакета однородных волн

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{v}'_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}'} \mathbf{s} = \frac{c}{n + \omega \frac{dn}{d\omega}} \mathbf{s}, \quad \mathbf{k} = \frac{\omega}{c} [n(\omega) + i\kappa(\omega)] \mathbf{s}, \\ k' = \frac{\omega}{c} n(\omega). \end{aligned} \right\} (3.37a)$$

Выражения (3.36a), (3.37a), конечно, переходят в соответствующие выражения при отсутствии поглощения. Однако такому требованию удовлетворяет и такое выражение:

$$\mathbf{v}''_{\text{гр}} = \text{Re} \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}, \quad (3.36b)$$

или для изотропной среды

$$\mathbf{v}''_{\text{гр}} = \text{Re} \frac{c}{\frac{d(\omega n)}{d\omega}} \mathbf{s} = \frac{c \frac{d(\omega n)}{d\omega}}{\left(\frac{d\omega n}{d\omega}\right)^2 + \left(\frac{d\omega \kappa}{d\omega}\right)^2} \mathbf{s}. \quad (3.37b)$$

Подобные определения групповой скорости не только необоснованы, но и явно ограничены. Достаточно сказать, что величина $\mathbf{v}'_{\text{гр}}$ может превосходить скорость света в вакууме c .

В самом деле, $\mathbf{v}'_{\text{гр}} > c$ при $n + \omega \frac{dn}{d\omega} = \frac{d\omega n}{d\omega} < 1$, что может иметь место в области аномальной дисперсии. Но в этой области как раз существенно поглощение и импульс сильно искажается, так что понятие о групповой скорости — скорости движения сигнала как целого — неприменимо*). Это

*) Точнее, понятие о групповой скорости при наличии поглощения обычно неприменимо. Если же, например, в пределах спектральной ширины импульса коэффициент поглощения не зависит от частоты, а значит $\omega(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k}')$, то импульс ослабляется, но расплывается так же, как без поглощения. В этом случае, как можно убедиться из (3.33), скорость импульса равна $\mathbf{v}'_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}'}$. Напомним также, что при отсутствии поглощения и вещественном \mathbf{k} , как показано в п. 2.5, всегда $v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \leq c$.

означает лишь, что в поглощающей среде (и вообще при комплексном \mathbf{k}) вопрос о движении импульса нуждается в более детальном анализе даже в приближении типа (3.33), не говоря уже о более общей задаче, которая решается путем исследования интеграла Фурье. Такое исследование в случае поглощающей изотропной среды для частного вида импульса (для «оборванной» синусоиды) было проведено в статьях [45]. При этом для изотропной среды вопрос о направлении симметричного импульса, или луча, конечно, не возникает, ибо это направление совпадает с \mathbf{s} уже из соображений симметрии (речь идет об однородных волнах, когда для «несущего» волнового вектора $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} (n + i\kappa) \mathbf{s}$). Для анизотропной среды нужно выяснить не только характер движения импульса в известном направлении, но и найти само это направление.

В случае достаточно длинных импульсов (больших по сравнению с длиной волны), которым отвечает «острая» функция $g(\tilde{\mathbf{k}})$, в первом приближении по-прежнему можно воспользоваться [45a] выражением (3.33), где функция

$$A\left(\mathbf{r} - \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} t\right) = \int g(\mathbf{q}) e^{i\left(\mathbf{r} - \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} t\right) \cdot \mathbf{q}} d\mathbf{q}$$

считается имеющей смысл (или проще всего аналитической) в области комплексных значений $\mathbf{r} - \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} t$. В силу комплексности вектора $\frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$, аргумент $\mathbf{r} - \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} t$, вообще говоря, не обращается в нуль, ибо \mathbf{r} и t по смыслу являются вещественными величинами. Это обстоятельство и определяет в данном случае специфику поглощающей среды — импульс «перемещается как целое» в комплексном направлении, т. е. при вещественном \mathbf{r} изменяет свою форму уже в приближении (3.33). В этом приближении или в аналогичном приближении (3.40), используемом ниже для определения направления луча в прозрачной среде, можно выяснить, в принципе без особого труда, характер движения импульса и, в частности, направление луча в поглощающей среде (см. [45a] и ниже замечание после формулы (3.40)).

Впрочем, во многих случаях, когда поглощение является относительно слабым, можно в хорошем приближении

определять групповую скорость и направление луча просто при пренебрежении поглощением или, как это более удобно, с помощью выражений (3.36) и (3.37).

Для прозрачной среды (т. е. при вещественном \mathbf{k})

$$\omega = \omega(\mathbf{k}) = \omega(k_x, k_y, k_z) = \omega(k, \alpha, \beta), \quad \alpha \equiv s_x = \frac{k_x}{k}, \quad \beta \equiv s_y = \frac{k_y}{k}, \quad \gamma \equiv s_z = \frac{k_z}{k}, \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1. \quad (3.38)$$

Отсюда

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial k_x} &= \frac{\partial \omega}{\partial k} \alpha + \frac{\partial \omega}{\partial \alpha} \frac{1 - \alpha^2}{k} - \frac{\partial \omega}{\partial \beta} \frac{\alpha \beta}{k}, \\ \frac{\partial \omega}{\partial k_y} &= \frac{\partial \omega}{\partial k} \beta + \frac{\partial \omega}{\partial \beta} \frac{1 - \beta^2}{k} - \frac{\partial \omega}{\partial \alpha} \frac{\alpha \beta}{k}, \\ \frac{\partial \omega}{\partial k_z} &= \frac{\partial \omega}{\partial k} \gamma - \frac{\partial \omega}{\partial \alpha} \frac{\alpha \gamma}{k} - \frac{\partial \omega}{\partial \beta} \frac{\beta \gamma}{k}. \end{aligned} \right\} \quad (3.39)$$

Удобнее, однако, выразить $\frac{\partial \omega}{\partial k_l}$ через n , учитывая, что

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} n(\omega, \alpha, \beta) \mathbf{s},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial k_x} &= \alpha \equiv s_x \equiv \frac{k_x}{k} = \frac{1}{c} \frac{\partial \omega}{\partial k_x} n + \frac{\omega}{c} \frac{\partial n}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial k_x} + \frac{\omega}{c} \frac{\partial n}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial k_x} + \\ &+ \frac{\omega}{c} \frac{\partial n}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial k_x} = \frac{1}{c} \frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial k_x} + \frac{\omega}{c} \frac{\partial n}{\partial \alpha} \frac{1 - \alpha^2}{k} - \frac{\omega}{c} \frac{\partial n}{\partial \beta} \frac{\alpha \beta}{k} \end{aligned} \quad (3.39a)$$

и аналогично для $\frac{\partial k}{\partial k_y}$ и $\frac{\partial k}{\partial k_z}$. Отсюда, поскольку $\frac{ck}{\omega} = n$, получаем

$$\left. \begin{aligned} v_{гр, x} &= \frac{\partial \omega}{\partial k_x} = \frac{\alpha + \frac{1}{n} \left[-\frac{\partial n}{\partial \alpha} (1 - \alpha^2) + \frac{\partial n}{\partial \beta} \alpha \beta \right]}{\frac{1}{c} \frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}}, \\ v_{гр, y} &= \frac{\partial \omega}{\partial k_y} = \frac{\beta + \frac{1}{n} \left[\frac{\partial n}{\partial \alpha} \alpha \beta - \frac{\partial n}{\partial \beta} (1 - \beta^2) \right]}{\frac{1}{c} \frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}}, \\ v_{гр, z} &= \frac{\partial \omega}{\partial k_z} = \frac{\gamma + \frac{1}{n} \left[\frac{\partial n}{\partial \alpha} \alpha \gamma + \frac{\partial n}{\partial \beta} \beta \gamma \right]}{\frac{1}{c} \frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}}. \end{aligned} \right\} \quad (3.39б)$$

Далее, как легко убедиться,

$$\begin{aligned} v_{гр} &= \\ &= \frac{c}{\frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}} \sqrt{1 + \frac{1}{n^2} \left[\left(\frac{\partial n}{\partial \alpha} \right)^2 (1 - \alpha^2) + \left(\frac{\partial n}{\partial \beta} \right)^2 (1 - \beta^2) - 2\alpha\beta \frac{\partial n}{\partial \alpha} \frac{\partial n}{\partial \beta} \right]}. \end{aligned} \quad (3.39в)$$

Из (3.39б) и (3.39в) ясно, что направление групповой скорости, т. е. отношение $v_{гр, i}/v_{гр}$, не зависит от $\frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}$ и определяется только значениями α , β , n , $\frac{\partial n}{\partial \alpha}$ и $\frac{\partial n}{\partial \beta}$.

Особенно простой вид выражения для $v_{гр, i}$ имеют в системе координат, где $\alpha = \beta = 0$ и $\gamma = 1$, т. е. ось z направлена по волновой нормали. При этом

$$\begin{aligned} v_{гр, x} &= -\frac{\frac{\partial n}{\partial \alpha}}{\frac{n}{c} \frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}}, \quad v_{гр, y} = -\frac{\frac{\partial n}{\partial \beta}}{\frac{n}{c} \frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}}, \\ v_{гр, z} &= \frac{c}{\frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}}, \quad v_{гр} = \frac{c}{\frac{\partial(\omega n)}{\partial \omega}} \sqrt{1 + \frac{1}{n^2} \left[\left(\frac{\partial n}{\partial \alpha} \right)^2 + \left(\frac{\partial n}{\partial \beta} \right)^2 \right]}, \\ \frac{v_{гр, x}}{v_{гр, z}} &= -\frac{\frac{\partial n}{\partial \alpha}}{n}, \quad \frac{v_{гр, y}}{v_{гр, z}} = -\frac{\frac{\partial n}{\partial \beta}}{n}. \end{aligned} \quad (3.39г)$$

Поскольку направление $v_{гр}$ не зависит от $\partial n/\partial \omega$, ясно, что это направление можно найти и при иной постановке вопроса. Именно, рассмотрим достаточно широкий по сравнению с длиной волны пучок (луч) света с фиксированной частотой ω , так что поле \mathbf{E} можно записать в виде

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t} \int \mathbf{g}(\alpha, \beta) e^{i \frac{\omega}{c} n(\omega, \alpha, \beta)(\alpha x + \beta y + \gamma z)} d\alpha d\beta.$$

Выбирая теперь ось z за направление «несущего» волнового вектора в пучке, мы можем считать, что в направлениях x и y поле меняется медленно (широкий пучок), и поэтому

написать

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) &= \\ &= e^{i\left(\frac{\omega}{c}nz - \omega t\right)} \int g(\Delta\alpha, \Delta\beta) e^{i\frac{\omega}{c}\left\{\left(nx + \frac{\partial n}{\partial\alpha}z\right)\Delta\alpha + \left(ny + \frac{\partial n}{\partial\beta}z\right)\Delta\beta\right\}} d\Delta\alpha d\Delta\beta = \\ &= e^{i\left(\frac{\omega}{c}nz - \omega t\right)} A\left(nx + \frac{\partial n}{\partial\alpha}z, ny + \frac{\partial n}{\partial\beta}z\right), \quad (3.40) \end{aligned}$$

где n , $\frac{\partial n}{\partial\alpha}$ и $\frac{\partial n}{\partial\beta}$ берутся при значениях $\alpha = \beta = 0$ и $\gamma = 1$. Отсюда ясно, что направление луча, вдоль которого поле отлично от нуля, определяется отношениями

$$\frac{x}{z} = -\frac{\partial n/\partial\alpha}{n} \quad \text{и} \quad \frac{y}{z} = -\frac{\partial n/\partial\beta}{n}.$$

Этот результат совпадает с (3.39г).

Для поглощающей среды и вообще при комплексном $\tilde{n} = n + ix$ формула (3.40) в соответствующем приближении также справедлива [45а, 137]. При этом, очевидно,

$$|E_i| = e^{-\frac{\omega}{c}xz} \left| A_i\left(\tilde{n}x + \frac{\partial\tilde{n}}{\partial\alpha}z, \tilde{n}y + \frac{\partial\tilde{n}}{\partial\beta}z\right) \right|.$$

Поскольку при комплексном \tilde{n} даже в этом приближении функции $|A_i|$, вообще говоря, не остаются постоянными вдоль какого-то направления, постановка задачи о направлении луча должна быть уточнена. Конкретно, будем иметь в виду кристаллическую пластинку, расположенную в области между плоскостями $z = 0$ и $z = l$. На пластинку нормально к ней падает пучок света, причем на входе (при $z = +0$) поле

$$E_i = e^{-i\omega t} A_i(\tilde{n}x, \tilde{n}y)$$

и на выходе (при $z = l$, но внутри пластинки, так как отражения от границ мы здесь не рассматриваем), например, амплитуда

$$|E_i| = e^{-\frac{\omega}{c}xl} \left| A_i\left(\tilde{n}x + \frac{\partial\tilde{n}}{\partial\alpha}l, \tilde{n}y + \frac{\partial\tilde{n}}{\partial\beta}l\right) \right|.$$

Пучку света отвечает функция $|A_i(\tilde{n}x, \tilde{n}y)|$, которая не мала лишь в некоторой области изменения координат x и y , например, имеет вид

$$|A_i(x, y, 0)| = e^{-\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2}}.$$

На выходе функция $|A_i(x, y, l)|$ уже иная и она максимальна при условии, что

$$\frac{\partial |A_i|}{\partial x} = \frac{\partial |A_i|}{\partial y} = 0.$$

Именно этими последними выражениями и можно несколько условно определить точку x, y выхода луча из пластинки. Подобный метод с соответствующим обобщением можно применить и для пучка, содержащего фурье-компоненты, отвечающие неоднородным волнам.

Вернемся к прозрачной среде. В то время как направление вектора $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ не зависит от $\frac{\partial n}{\partial\omega}$, проекция $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ на $\mathbf{k} = \mathbf{k}\mathbf{s}$ не зависит от $\frac{\partial n}{\partial\alpha}$ и $\frac{\partial n}{\partial\beta}$, а полностью определяется значением $\frac{\partial(\omega n)}{\partial\omega}$. Это сразу же ясно из (3.39г), где $\mathbf{v}_{\text{гр}, z} = \mathbf{v}_{\text{гр}}\mathbf{s}$. В общем виде тот же результат получаем из (3.39б) после умножения $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ на $\mathbf{s} = \frac{\mathbf{k}}{k} = \{x, \beta, \gamma\}$.

$$\mathbf{v}_{\text{гр}, \mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k} \frac{d\omega}{dk} = \mathbf{v}_{\text{гр}} \cos\psi = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{c}{\frac{\partial(\omega n)}{\partial\omega}}, \quad (3.41)$$

где ψ — угол между $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ и $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c}n\frac{\mathbf{k}}{k}$ и, очевидно, $n = n(\omega, \mathbf{s})$ — показатель преломления для рассматриваемой волны; напомним также принятое обозначение

$$\frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = \text{grad}_{\mathbf{k}} \omega = \left\{ \frac{\partial\omega}{\partial k_x}, \frac{\partial\omega}{\partial k_y}, \frac{\partial\omega}{\partial k_z} \right\}.$$

Разумеется, формула (3.41) сразу же следует в силу самого определения производной от $\omega(\mathbf{k}\mathbf{s})$ по направлению единичного вектора \mathbf{s} .

Как следует из ее смысла (а формально ясно из (3.30)), групповая скорость $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ есть скорость распространения энергии (скорость сигнала), и поэтому $\mathbf{v}_{\text{гр}} \leq c$, а значит, и

$$\frac{c}{|\mathbf{v}_{\text{гр}, \mathbf{k}}|} = \left| \frac{\partial(\omega n)}{\partial\omega} \right| > 1. \quad (3.42)$$

С несколько другой точки зрения вопрос об этом неравенстве обсуждался в п. 2.5 (там же отмечалось, что знак \gg или \leq мы в соотношениях типа (3.42) заменяем на $>$ или $<$,

имея в виду, что точное равенство относится лишь к вакууму). В п. 3.3 будет показано, что при отсутствии пространственной дисперсии угол ψ между $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ и \mathbf{k} является острым. В этом случае, как ясно из (3.41) и (3.42),

$$\frac{\partial(\omega n)}{\partial\omega} < 1, \quad \epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(\omega). \quad (3.43)$$

Соотношение (3.30) было получено из (3.29) и в силу отсутствия производных по k_i является универсальным в том смысле, что оно справедливо для любого квазимонохроматического пакета нормальных волн *). Для комплексного \mathbf{k} или даже при вещественном \mathbf{k} , но выборе нижнего знака в (3.29) производные по k_i не сокращаются и полученные соотношения, видимо, не представляют какой-либо ценности.

Помимо формулы (3.30), отражающей закон сохранения энергии, известно еще одно аналогичное соотношение [13, 42, 44], связанное с законом сохранения импульса. Для его получения нужно продифференцировать по k_i выражение (3.25) и комплексно к нему сопряженное с выбором верхнего знака. Тогда для вещественного \mathbf{k} можно прийти к такому результату:

$$T_{ij} = -g_i v_{\text{гр}, j} \quad (3.44)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{где} \\ g_i = \frac{1}{16\pi c} ([D_0 B_0^*]_i + [D_0^* B_0]_i) + \frac{k_i}{16\pi} \frac{\partial \epsilon_{jl}(\omega, \mathbf{k})}{\partial \omega} E_{0j} E_{0l}, \\ T_{ij} = T_{ij}^{(0)} + T_{ij}^{(1)}, \quad T_{ij}^{(0)} = \frac{B_{0i} B_{0j}^* + B_{0i}^* B_{0j} + E_{0i} D_{0j}^* + E_{0i}^* D_{0j}}{16\pi} - \\ - \frac{\delta_{ij}}{32\pi} (2B_0 B_0^* + E_0 D_0^* + E_0^* D_0), \quad T_{ij}^{(1)} = -\frac{k_i}{16\pi} \frac{\partial \epsilon_{ml}(\omega, \mathbf{k})}{\partial k_j} E_{0m} E_{0l}. \end{aligned} \right\} \quad (3.45)$$

Вектор g_i и тензор T_{ij} часто считаются соответственно усредненными по времени плотностью электромагнитного импульса и тензором напряжений. В настоящее время ясно,

*) Квазимонохроматичность пакета используется, так как учитываются лишь первые производные по ω и k_i ; тот факт, что рассматривается пакет нормальных волн, принят во внимание в исходных уравнениях (2.3) и (2.5), в которых отсутствуют источники, а также отражено в (3.29), где $\omega = \omega(\mathbf{k})$.

однако, что такой выбор для четырехмерного тензора энергии — импульса электромагнитного поля — неправилен (см. [1], §§ 16 и 56, а также [46]). Вместе с тем при определенных условиях (при распространении волны в среде) вектор \mathbf{g} имеет смысл средней плотности суммарного импульса электромагнитного поля и среды [23, 46]. Таким образом, соотношение (3.44), несомненно, связывает поток импульса с тензором напряжений, характеризующими импульс нормальных волн, распространяющийся в среде. Более детально вопрос об импульсе и силах, возникающих при распространении волн в среде, насколько нам известно, не исследовался. Это связано с тем, что такие вопросы в кристаллооптике обычно не возникают.

Заметим, что соотношения (3.30) и (3.44) были получены в работах [42, 44] при использовании четырехмерной формы записи уравнений поля и при этом сразу для прозрачной среды. Последнее, как ясно из сказанного, вполне оправдано. Что же касается использования в макроскопической электродинамике четырехмерных, т. е. явно релятивистски-инвариантных обозначений, то против этого также, конечно, нельзя возражать. Однако, как нам представляется, переход к четырехмерным обозначениям в электродинамике сплошных сред сложнее самого приведенного вывода [13] интересующих нас формул. В этой связи в настоящей книге мы совсем не пользуемся четырехмерными обозначениями.

Остановимся теперь на двух частных случаях. В п. 1.3 были установлены следующие выражения, характеризующие изотропную негиротропную среду со слабой пространственной дисперсией:

$$\left. \begin{aligned} D &= \epsilon(\omega) \mathbf{E} + a(\omega) \text{rot rot } \mathbf{E} + b(\omega) \text{grad div } \mathbf{E}, \\ D &= D(\omega, \mathbf{r}), \quad E = E(\omega, \mathbf{r}), \quad \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \\ &= (\epsilon + ak^2) \delta_{ij} - (a + b) k_i k_j. \end{aligned} \right\} \quad (3.46)$$

Предположим, кроме того, для простоты, что ϵ , a и b не зависят от ω или, точнее, этой зависимостью можно пренебречь. При этом величины ϵ , a и b нужно считать вещественными (иначе вещественность \mathbf{E} не гарантирует вещественности \mathbf{D}). Тогда соотношение Пойнтинга (3.1) принимает

ВИД

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} &= -\operatorname{div} \mathbf{S} - \mathbf{j}_{ext} \mathbf{E}, \\ 8\pi W &= \varepsilon E^2 + B^2 + a(\operatorname{rot} \mathbf{E})^2 - b(\operatorname{div} \mathbf{E})^2, \\ \mathbf{S} &= \mathbf{S}^{(0)} - \frac{a}{4\pi} \left[\mathbf{E} \operatorname{rot} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right] + \frac{b}{4\pi} \mathbf{E} \operatorname{div} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \mathbf{S}^{(0)} &= \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \mathbf{B}]. \end{aligned} \right\} (3.47)$$

Для монохроматического поля (3.3) с вещественными ω и \mathbf{k} после усреднения по высокой частоте имеем (указывающая на усреднение черта над W и \mathbf{S} опущена)

$$\left. \begin{aligned} 16\pi W &= \varepsilon \mathbf{E}_0 \mathbf{E}_0^* + \mathbf{B}_0 \mathbf{B}_0^* + a [\mathbf{k} \mathbf{E}_0] [\mathbf{k} \mathbf{E}_0^*] - b (\mathbf{k} \mathbf{E}_0) (\mathbf{k}_0 \mathbf{E}_0^*), \\ 16\pi \mathbf{S} &= c \{ [\mathbf{E}_0^* \mathbf{B}_0] + [\mathbf{E}_0 \mathbf{B}_0^*] - \\ &\quad - 2a\omega \mathbf{k} (\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_0^*) + (a+b)\omega \{ \mathbf{E}_0 (\mathbf{k} \mathbf{E}_0^*) + \mathbf{E}_0^* (\mathbf{k} \mathbf{E}_0) \}. \end{aligned} \right\} (3.48)$$

С другой стороны, согласно (3.15) и (3.46),

$$\begin{aligned} 16\pi \mathbf{S}^{(1)} &= -\omega \left(\frac{\partial \varepsilon'_{ij}}{\partial \mathbf{k}} \right) E_{0j} E_{0i}^* = \\ &= -2a\omega \mathbf{k} (\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_0^*) + (a+b)\omega \{ \mathbf{E}_0 (\mathbf{k} \mathbf{E}_0^*) + \mathbf{E}_0^* (\mathbf{k} \mathbf{E}_0) \}. \end{aligned} (3.49)$$

Выражения (3.48) и (3.49), как этого и следовало ожидать, согласуются между собой.

Равенство (3.23) при выборе верхнего знака можно записать в виде (см. (3.31))

$$W_0 = \frac{D_0 \mathbf{E}_0^* + B_0 \mathbf{B}_0^*}{16\pi} = \frac{\mathbf{k} \mathbf{S}^{(0)}}{\omega}. (3.50)$$

При отсутствии частотной дисперсии

$$\begin{aligned} W_0 &= \frac{D_0 \mathbf{E}_0^* + B_0 \mathbf{B}_0^*}{16\pi} = W = \\ &= \frac{1}{16\pi} \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})) E_{0j} E_{0i}^* + B_0 \mathbf{B}_0^* \right\} \end{aligned}$$

и, следовательно, согласно (3.50),

$$W = W_0 = \frac{\mathbf{k} \mathbf{S}^{(0)}}{\omega}.$$

С другой стороны, при отсутствии и частотной и пространственной дисперсии, согласно (3.30), $W_0 \mathbf{v}_{\text{гр}} = \mathbf{S}^{(0)}$. Таким образом, в этом случае

$$\frac{\mathbf{k} \mathbf{v}_{\text{гр}}}{\omega} = 1, \quad \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}. (3.51)$$

Поскольку $\frac{\mathbf{k}}{\omega} = \mathbf{v}_\phi$ есть фазовая скорость, а $\frac{\mathbf{k} \mathbf{v}_{\text{гр}}}{k} = \mathbf{v}_{\text{гр}, \mathbf{k}}$, соотношение (3.51) имеет смысл равенства $\mathbf{v}_{\text{гр}, \mathbf{k}} = \mathbf{v}_\phi$.

Выше рассматривались выражения, квадратичные относительно амплитуд нормальных волн, причем обе амплитуды относились к одной и той же волне. Между тем существуют также важные соотношения, связывающие амплитуды и сами поля для различных волн.

Рассмотрим две нормальные волны, которые будем отличать индексами 1 и 2 (обе волны распространяются в направлении \mathbf{s}):

$$\left. \begin{aligned} D_{1,2} &= D_{0,1,2} e^{i \left(\frac{\omega_{1,2}}{c} \tilde{n}_{1,2} s r - \omega_{1,2} t \right)}, \\ E_{1,2} &= E_{0,1,2} e^{i \left(\frac{\omega_{1,2}}{c} \tilde{n}_{1,2} s r - \omega_{1,2} t \right)}, \\ D_{1,2} &= \tilde{n}_{1,2}^2 \{ E_{1,2} - \mathbf{s} (\mathbf{s} E_{1,2}) \}, \quad \mathbf{s} D_{1,2} = 0. \end{aligned} \right\} (3.52)$$

Отсюда сразу же следует, что

$$D_1 D_2 = \tilde{n}_1^2 E_1 D_2 = \tilde{n}_2^2 E_2 D_1. (3.53)$$

Если $\tilde{n}_1^2 \neq \tilde{n}_2^2$, то после использования свойства симметрии (1.21) при $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n} \mathbf{s}$ и $\mathbf{B}_{ext} = 0$, т. е. свойства $\varepsilon_{ij}(\omega, \frac{\omega}{c} \tilde{n} \mathbf{s}) = \varepsilon_{ji}(\omega, -\frac{\omega}{c} \tilde{n} \mathbf{s})$ и аналогично для ε_{ij}^{-1} , из (3.53)

получаем

$$\begin{aligned} D_1 D_2 \left(\frac{1}{\tilde{n}_1^2} - \frac{1}{\tilde{n}_2^2} \right) &= \\ &= \left\{ \epsilon_{ij} \left(\omega_2, \frac{\omega_2}{c} \tilde{n}_2 \mathbf{s} \right) - \epsilon_{ij} \left(\omega_1, -\frac{\omega_1}{c} \tilde{n}_1 \mathbf{s} \right) \right\} E_{1i} E_{2j} = \\ &= \left\{ \epsilon_{ij}^{-1} \left(\omega_1, \frac{\omega_1}{c} \tilde{n}_1 \mathbf{s} \right) - \epsilon_{ij}^{-1} \left(\omega_2, -\frac{\omega_2}{c} \tilde{n}_2 \mathbf{s} \right) \right\} D_{1j} D_{2i}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

При отсутствии пространственной дисперсии и $\omega_1 = \omega_2$ из (3.54) следует, что

$$D_1 D_2 = 0 \quad (\text{при } \omega_1 = \omega_2, \epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(\omega)). \quad (3.55)$$

При этом не следует забывать, что вектор \mathbf{D} является, вообще говоря, комплексным, т. е. $\mathbf{D} = \mathbf{D}' + i\mathbf{D}''$.

Аналогично тому, как было получено выражение (3.54), приходим к соотношению ($\mathbf{D} = \mathbf{D}' + i\mathbf{D}''$, $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}' - i\mathbf{D}''$)

$$\begin{aligned} D_1 D_2^* \left(\frac{1}{\tilde{n}_1^2} - \frac{1}{(\tilde{n}_2^2)^*} \right) &= \\ &= \left\{ \epsilon_{ij}^* \left(\omega_2, \frac{\omega_2}{c} \tilde{n}_2 \mathbf{s} \right) - \epsilon_{ij} \left(\omega_1, \frac{\omega_1}{c} \tilde{n}_1 \mathbf{s} \right) \right\} E_{1i} E_{2j}^* = \\ &= \left\{ \epsilon_{ij}^{-1} \left(\omega_1, \frac{\omega_1}{c} \tilde{n}_1 \mathbf{s} \right) - \left[\epsilon_{ji}^{-1} \left(\omega_2, \frac{\omega_2}{c} \tilde{n}_2 \mathbf{s} \right) \right]^* \right\} D_{1j} D_{2i}^*. \end{aligned} \quad (3.56)$$

При $\omega_1 = \omega_2$, отсутствии пространственной дисперсии и пренебрежении поглощением тензор ϵ_{ij} эрмитов и не зависит от \tilde{n} . В подобных условиях

$$D_1 D_2^* = 0 \quad (\text{при } \omega_1 = \omega_2, \epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij}(\omega)). \quad (3.57)$$

Если же учитывать пространственную дисперсию, то даже для прозрачной среды (показатель $\tilde{n} = n$ веществен, тензор $\epsilon_{ij} = \epsilon'_{ij}$ — эрмитов) условие $D_1 D_2^* = 0$ нарушается (в (3.56) считаем, что $\tilde{n}_1^2 \neq \tilde{n}_2^2$).

Несоблюдение равенств $D_1 D_2 = 0$ и $D_1 D_2^* = 0$ является одной из характерных черт кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии (см. § 6).

В заключение настоящего раздела укажем на теорему взаимности, связывающую поля $\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega)$ и $\mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r}, \omega)$, со-

здаваемые внешними источниками, которым отвечают плотности тока $\mathbf{j}_{ext}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega)$ и $\mathbf{j}_{ext}^{(2)}(\mathbf{r}, \omega)$.

Создаваемые источниками $\mathbf{j}_{ext}^{(1)}$ и $\mathbf{j}_{ext}^{(2)}$ поля подчиняются уравнениям

$$\text{rot } \mathbf{B}^{(1)} = i \frac{\omega}{c} \mathbf{D}^{(1)} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{ext}^{(1)}, \quad \text{rot } \mathbf{E}^{(1)} = -\frac{i\omega}{c} \mathbf{B}^{(1)}, \quad (3.58a)$$

$$\text{rot } \mathbf{B}^{(2)} = i \frac{\omega}{c} \mathbf{D}^{(2)} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{ext}^{(2)}, \quad \text{rot } \mathbf{E}^{(2)} = -\frac{i\omega}{c} \mathbf{B}^{(2)}. \quad (3.58б)$$

Здесь, очевидно, используются фурье-компоненты по ω , но зависимость всех величин от \mathbf{r} сохраняется.

Умножая уравнения (3.58a) соответственно на $\mathbf{E}^{(2)}$ и $\mathbf{B}^{(2)}$, а уравнения (3.58б) на $-\mathbf{E}^{(1)}$ и $-\mathbf{B}^{(1)}$, складывая все эти уравнения и используя тождество

$$\text{div} [\mathbf{AB}] = \mathbf{B} \text{ rot } \mathbf{A} - \mathbf{A} \text{ rot } \mathbf{B},$$

получаем

$$\begin{aligned} \text{div} \{ [\mathbf{E}^{(1)} \mathbf{B}^{(2)}] - [\mathbf{E}^{(2)} \mathbf{B}^{(1)}] \} &= \frac{4\pi}{c} (\mathbf{j}_{ext}^{(1)} \mathbf{E}^{(2)} - \mathbf{j}_{ext}^{(2)} \mathbf{E}^{(1)}) + \\ &+ \frac{i\omega}{c} \{ \mathbf{D}^{(1)} \mathbf{E}^{(2)} - \mathbf{E}^{(1)} \mathbf{D}^{(2)} \}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

При интегрировании этого выражения по объему первый член преобразуется в интеграл по поверхности и исчезает (поля считаются достаточно быстро убывающими на бесконечности; легко видеть, что поверхности разрыва также не дают вклада в интеграл). В результате приходим к теореме взаимности

$$\int \mathbf{j}_{ext}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r}, \omega) d\mathbf{r} = \int \mathbf{j}_{ext}^{(2)}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) d\mathbf{r}, \quad (3.60)$$

если только

$$\int \{ \mathbf{D}^{(1)} \mathbf{E}^{(2)} - \mathbf{E}^{(1)} \mathbf{D}^{(2)} \} d\mathbf{r} = 0. \quad (3.61)$$

При отсутствии пространственной дисперсии и внешнего поля \mathbf{B}_{ext} тензор $\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon_{ji}(\omega)$, и соблюдение равенства (3.61) сразу же ясно, поскольку

$$\mathbf{E}^{(1)} \mathbf{D}^{(2)} = \epsilon_{ij} \mathbf{j}_{ext}^{(2)} E_i^{(1)} = \epsilon_{ji} E_j^{(2)} E_i^{(1)} = \mathbf{D}^{(1)} \mathbf{E}^{(2)};$$

среда здесь считается при отсутствии пространственной дисперсии немагнитной, но обобщение на магнитную среду не составляет труда (см., например, [6], § 29). Если $B_{ext} = 0$, но пространственная дисперсия учитывается, то равенство (3.61) также имеет место, ибо именно это равенство является выражением принципа симметрии кинетических коэффициентов в макроскопической электродинамике (см. [1], § 83). Однако для полноты картины мы приведем доказательство равенства (3.61) непосредственно из условия (1.21) с $B_{ext} = 0$, т. е. условия $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k})$. Согласно (1.4) и (1.6)

$$D_i(\mathbf{r}, \omega) = \int \hat{\epsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{r} - \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}'$$

$$\hat{\epsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_0^{\infty} \hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\omega\tau} d\tau$$

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \int \hat{\epsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{R}$$

Отсюда ясно, что условие $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k})$ означает, что

$$\hat{\epsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{R}) = \hat{\epsilon}_{ji}(\omega, -\mathbf{R}), \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' \quad (3.62)$$

Заметим сразу же, что для неоднородной среды, когда нужно пользоваться связью (1.3), из принципа симметрии кинетических коэффициентов следует условие симметрии

$$\hat{\epsilon}_{ij}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\epsilon}_{ji}(t, t', \mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad (3.63)$$

или для среды, однородной во времени, условие

$$\hat{\epsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\epsilon}_{ji}(\omega, \mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad (3.64)$$

Для пространственно однородной среды (3.64) переходит в (3.62). Из (3.64) и определения

$$D_i(\mathbf{r}, \omega) = \int \hat{\epsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}'$$

легко убедиться в соблюдении равенства (3.61). Но, как уже отмечалось, фактически именно равенство (3.61) является исходным и из него получается условие (3.64).

Если присутствует магнитное поле B_{ext} , то равенство (3.61), а значит и теорема взаимности (3.60), вообще говоря, не-

справедливы. В самом деле, при $B_{ext} \neq 0$ условия симметрии имеют вид (см. (1.21))

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, B_{ext}) = \epsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k}, -B_{ext}),$$

$$\hat{\epsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}', B_{ext}) = \hat{\epsilon}_{ji}(\omega, \mathbf{r}', \mathbf{r}, -B_{ext}). \quad (3.65)$$

Поэтому справедливы соотношения (см. [6], § 29)

$$\int \{D^{(1)}(\mathbf{r}, \omega, B_{ext}) E^{(2)}(\mathbf{r}, \omega, B_{ext}) - E^{(1)}(\mathbf{r}, \omega, -B_{ext}) D^{(2)}(\mathbf{r}, \omega, -B_{ext})\} d\mathbf{r} = 0, \quad (3.66)$$

$$\int j_{ext}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) E^{(2)}(\mathbf{r}, \omega, B_{ext}) d\mathbf{r} = \int j_{ext}^{(2)}(\mathbf{r}, \omega) E^{(1)}(\mathbf{r}, \omega, -B_{ext}) d\mathbf{r}. \quad (3.67)$$

Обобщенная теорема взаимности (3.67) слабее обычной теоремы взаимности (3.61) в том смысле, что для соблюдения теоремы (3.67) нужно рассматривать поле $E^{(1)}$ в среде, в которой знак B_{ext} изменен на обратный (по сравнению со случаем, когда вычислялось поле $E^{(2)}$ от источников $j_{ext}^{(2)}$)*. Именно нарушение теоремы взаимности (3.60) позволяет создать в магнитоактивной среде оптический вентиль, пропускающий электромагнитные волны лишь в одном направлении.

Теорему взаимности обычно применяют к диполям. Так, если имеются только точечные электрические диполи, то

$$j_{ext}^{(1,2)} = i\omega p^{(1,2)} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{1,2})$$

и из (3.67) имеем

$$p^{(1)} E^{(2)}(\mathbf{r}_1, B_{ext}) = p^{(2)} E^{(1)}(\mathbf{r}_2, -B_{ext}), \quad (3.68)$$

где, например, $E^{(2)}(\mathbf{r}_1, B_{ext})$ есть поле E , создаваемое в точке \mathbf{r}_1 диполем 2, расположенным в точке \mathbf{r}_2 и имеющим момент $p^{(2)}$; при этом внешнее магнитное поле равно B_{ext} . В ряде случаев использование теоремы взаимности чрезвычайно облегчает решение электродинамических задач (см., например, [6, 23, 47, 48]).

* Разумеется, в некоторых частных случаях и при $B_{ext} \neq 0$ теорема (3.67) совпадает с (3.60); см., например, [6], § 29.

3.3. Некоторые теоремы, касающиеся распространения волн и лучей в среде. Поскольку в кристаллооптике влияние пространственной дисперсии характеризуется малым параметром, весьма важно, как это уже не раз подчеркивалось, сосредоточить внимание на качественно новых моментах. В этой связи мы сейчас укажем на три теоремы, справедливые при отсутствии пространственной дисперсии, но могущие нарушаться при ее наличии [13].

Первая теорема такова: в отсутствие пространственной дисперсии угол ψ между $\mathbf{v}_{гр}$ и волновым вектором \mathbf{k} (направлением фазовой скорости) является острым, т. е. $|\psi| < \pi/2$. Речь при этом идет, конечно, о прозрачной среде, когда вектор $\mathbf{v}_{гр}$ имеет смысл скорости сигнала.

Поскольку при отсутствии пространственной дисперсии поток энергии $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(0)}$, соотношение (3.30) имеет в этом случае вид (см. также (3.34))

$$W\mathbf{v}_{гр} = \mathbf{S}^{(0)}, \quad \mathbf{S}^{(0)} = \frac{c}{16\pi} \{ [E_0\mathbf{B}_0^*] + [E_0^*\mathbf{B}_0] \} = \frac{c}{8\pi} [E_0\mathbf{B}_0^*]. \quad (3.68)$$

С помощью уравнений поля (2.5) и (2.5а) для рассматриваемых нормальных волн можно написать

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^{(0)} &= \frac{c}{16\pi} \{ [E_0\mathbf{B}_0^*] + [E_0^*\mathbf{B}_0] \} = \\ &= \frac{c^2}{16\pi\omega} \{ (\mathbf{k}^* + \mathbf{k})(E_0E_0^*) - E_0(\mathbf{k}E_0^*) - E_0^*(\mathbf{k}^*E_0) \}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Здесь, конечно, вектор $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$ вещественным не считается. Проектируя (3.69) на \mathbf{k}' , получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{k}'\mathbf{S}^{(0)} &= \frac{c^2}{16\pi\omega} \{ 2(\mathbf{k}')^2(E_0E_0^*) - 2(\mathbf{k}'E_0)(\mathbf{k}'E_0^*) - \\ &\quad - i(\mathbf{k}'E_0)(\mathbf{k}''E_0^*) + i(\mathbf{k}'E_0^*)(\mathbf{k}''E_0) \}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Если векторы \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' параллельны (коллинеарны), т. е. мы имеем дело с однородными плоскими волнами, то $\mathbf{k} = \mathbf{k}s = = (\mathbf{k}' + i\mathbf{k}'')s = \frac{\omega}{c}\tilde{\mathbf{n}}s = \frac{\omega}{c}(n + i\kappa)s$ и из (3.70) ясно, что (при $\omega n \neq 0$)

$$s\mathbf{S}^{(0)} > 0. \quad (3.71)$$

Равенство $s\mathbf{S}^{(0)} = 0$ отвечало бы продольному полю $E_0 = E_0s$, когда $\mathbf{S}^{(0)} = 0$.

Итак, средний по времени вектор Пойнтинга $\mathbf{S}^{(0)}$ всегда составляет острый угол с направлением волнового вектора $\mathbf{k} = \mathbf{k}s$ в однородных плоских волнах. В области прозрачности при отсутствии пространственной дисперсии векторы $\mathbf{v}_{гр}$ и $\mathbf{S}^{(0)}$ параллельны (см. (3.68)), и тем самым доказано сделанное утверждение о том, что угол ψ между $\mathbf{v}_{гр}$ и $\mathbf{k} = \mathbf{k}s$ является острым.

Вторая теорема гласит: при отсутствии пространственной дисперсии в равновесной среде произведение $n\kappa > 0$, т. е. $n = \text{Re } \tilde{n}$ и $\kappa = \text{Im } \tilde{n}$ имеют один знак (речь идет о случае вещественной частоты $\omega = \omega' > 0$). Это означает, что в волне, распространяющейся в каком-либо направлении \mathbf{z} и имеющей вид

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\left(\frac{\omega}{c}nz - \omega t\right)} e^{-\frac{\omega}{c}\kappa z},$$

амплитуда убывает в том же направлении, в котором бежит волна. В изотропной среде $(n + i\kappa)^2 = \epsilon' + i\epsilon''$, причем в состоянии термодинамического равновесия заведомо $\epsilon'' > 0$. Отсюда $2n\kappa = \epsilon'' > 0$, т. е. сделанное утверждение очевидно. В анизотропном случае рассмотрим квадратичную форму

$$\{ \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext}) - \tilde{n}^2(\delta_{ij} - s_i s_j) \} a_i a_j^*, \quad (3.72)$$

где a_i — произвольный комплексный вектор. Равенство нулю определителя, отвечающего этой форме, представляет собой дисперсионное уравнение (2.10), (2.22). Поэтому решения дисперсионного уравнения можно представить в виде

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_{ij} a_i a_j^*}{(\delta_{ij} - s_i s_j) a_i a_j^*}.$$

Далее, как было показано в § 1, в равновесной среде

$$\text{Im } u = \text{Im } \epsilon_{ij} a_i a_j^* > 0$$

при $\omega = \omega' > 0$ (см. (1.32)). Очевидно также, что

$$(\delta_{ij} - s_i s_j) a_i a_j^*$$

есть вещественная величина. Таким образом [13, 29],

$$\text{Im } \tilde{n}^2 = 2n\kappa > 0, \quad \omega = \omega' > 0. \quad (3.73)$$

Этот вывод может быть несправедлив при наличии пространственной дисперсии, так как в этом случае для комплексного \mathbf{k} (при наличии поглощения вектор \mathbf{k} в нормальных волнах в равновесной среде всегда комплексный при вещественной частоте ω) нельзя гарантировать справедливость неравенства $\text{Im} u > 0$ (см. п. 1.2). В неравновесной среде это неравенство также может нарушаться, так как в такой среде тепло при распространении волны может не выделяться, а поглощаться (для изотропной среды это значит, что $\epsilon'' < 0$, что и имеет место в лазерах и лазерах).

Третья теорема касается распространения нормальных волн в среде без пространственной дисперсии и без поглощения. В этом случае величина

$$\tilde{n}^2 = (n + ix)^2 \quad (3.74)$$

всегда вещественна. Это значит, что для прозрачной среды $\tilde{n}^2 = n^2$ и $x = 0$, а для непоглощающей непрозрачной среды $\tilde{n}^2 = -x^2$, $n = 0$ (в последнем случае поле пропорционально множителю $e^{-\frac{\omega}{c}xz}$, т. е. затухает без осцилляций).

Свойство (3.74) можно доказать различными способами, но в основе всегда лежит тот факт, что в оговоренных условиях тензор

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext}) = \epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext})$$

является эрмитовым. Поэтому, как было указано в связи с обсуждением формы (3.72), величина

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{B}_{ext}) a_i a_j^*}{(\delta_{ij} - s_i s_j) a_i a_j^*}$$

вещественна. К тому же заключению приходим при рассмотрении дисперсионного уравнения в форме (2.46), поскольку эрмитовость тензора ϵ_{ij} влечет за собой эрмитовость обратного тензора ϵ_{ij}^{-1} . Из квадратного уравнения (2.46) при эрмитовом тензоре $\nu_{\alpha\beta} \equiv \epsilon_{\alpha\beta}^{-1}$ легко заключить, что величина \tilde{n}^2 действительно всегда вещественна.

Все три доказанные теоремы, по сути дела, связаны между собой, а причина их возможного нарушения при учете

пространственной дисперсии имеет одну и ту же, и при этом вполне ясную физическую природу.

Поток электромагнитной энергии (вектор Пойнтинга) $\mathbf{S}^{(0)}$ всегда составляет острый угол с волновым вектором $\mathbf{k} = k\mathbf{s}$ (см. (3.71)). В то же время при отсутствии пространственной дисперсии поток энергии целиком сводится к $\mathbf{S}^{(0)}$. Поэтому вполне естественно, что волна затухает в том же направлении, в каком направлен вектор \mathbf{k} (см. (3.73)). Если же пространственная дисперсия существенна, то в прозрачной среде, когда вводится вектор групповой скорости \mathbf{v}_{gr} , этот вектор может быть направлен как угодно — его направление совпадает с направлением полного потока энергии $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(0)} + \mathbf{S}^{(1)}$. При наличии поглощения нельзя, вообще говоря, пользоваться понятием о групповой скорости, но в пространственно диспергирующей среде поток энергии, разумеется, по-прежнему не сводится к $\mathbf{S}^{(0)}$. Поэтому и может нарушаться неравенство (3.73).

Особенно нагляден при этом случай изотропной среды, когда при учете пространственной дисперсии групповая скорость $\mathbf{v}_{gr} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$ может иметь любой знак (если $\mathbf{v}_{gr} < 0$, то это означает, что она антипараллельна $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{ns}$). При достаточно слабом поглощении групповая скорость сохраняет свой смысл и в то же время при $\mathbf{v}_{gr} < 0$ энергия течет против \mathbf{k} , а значит, затухание волны тоже должно происходить в направлении, противоположном направлению фазовой скорости, т. е. вектора \mathbf{k} . Другими словами, в этом случае $n\mathbf{k} < 0$.

При отсутствии поглощения для монохроматической нормальной волны средний поток энергии должен быть постоянен в пространстве; при пренебрежении пространственной дисперсией это значит, что

$$\mathbf{S}^{(0)} = \frac{c}{16\pi} \{[\mathbf{E}_0^* \mathbf{B}_0] + [\mathbf{E}_0 \mathbf{B}_0^*]\} = \text{const}, \quad \text{div} \mathbf{S}^{(0)} = 0, \quad (3.75)$$

где

$$\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_{00} e^{-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_{00} e^{-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{E}_{00} = \text{const}, \quad \mathbf{B}_{00} = \text{const}$$

(речь идет о нормальных волнах, зависящих от \mathbf{r} и t по закону $e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = e^{-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$; см. (3.5)).

Формула (3.75) получается из закона сохранения (3.10), если пренебречь пространственной дисперсией и поглощением, а также считать равной нулю работу внешних источников. Условие (3.75) выполняется либо в прозрачной среде (при этом $\mathbf{k}' = 0$ и $\tilde{n}^2 = n^2 > 0$), либо при $S^{(0)} = 0$. Последнее осуществляется, как ясно из (3.69), при $\mathbf{k} = i\mathbf{k}'$ и линейно поляризованном векторе \mathbf{E}_0 (это значит, что $\mathbf{E}_0 = \mathbf{a}e^{i\varphi}$, где \mathbf{a} — вещественный вектор). Мнимость вектора \mathbf{k} означает, что $\tilde{n} = i\kappa$, т. е. $\tilde{n}^2 = -\kappa^2$ есть вещественная величина.

Поскольку при наличии пространственной дисперсии поток энергии не сводится к $S^{(0)}$, условие постоянства потока не означает постоянства $S^{(0)}$. В этой связи и при отсутствии поглощения показатель \tilde{n}^2 может быть комплексным*). Такие случаи известны и для магнитоактивной плазмы [6], и для кристаллов [5, 15]; о них еще будет упомянуто в §§ 6 и 7.

В задаче о полном внутреннем отражении при нормальном падении волны на среду, занимающую полупространство $z \geq 0$, поле при $z \rightarrow \infty$ должно исчезать, а поток энергии равняться нулю. Поэтому средний по высокой частоте полный поток энергии в такой задаче равен нулю. Если при этом величина \tilde{n}^2 является комплексной, то $S^{(0)} \neq 0$ и поток неэлектромагнитного происхождения, связанный с учетом пространственной дисперсии, должен в точности компенсировать поток $S^{(0)}$. Для плазмы, как мы видели в п. 3.1, неэлектромагнитный поток энергии представляет собой просто поток кинетической энергии частиц. Для прозрачной среды (правильнее сказать, для распространяющихся в данной среде нормальных волн) дополнительный поток энергии определяется выражениями (3.15), (3.31) для $S^{(1)}$; однако при комплексном \mathbf{k} картина усложняется, и именно потому мы здесь не пользуемся обозначением $S^{(1)}$. Вопрос о полном внутреннем отражении при учете пространственной дисперсии будет еще обсужден в пп. 10.5 и 10.6.

*) Приведенное ранее доказательство вещественности \tilde{n}^2 при наличии пространственной дисперсии несправедливо, так как в этом случае $\varepsilon_{ij}(\omega, \frac{\omega}{c}\tilde{n}\mathbf{s})$, и мы имеем дело с дисперсионным уравнением, корни которого \tilde{n}^2 вовсе не обязаны быть вещественными.

ГЛАВА II

ТЕНЗОР $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ В КРИСТАЛЛАХ§ 4. Введение и использование тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в случае кристаллов

4.1. Введение тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах. Кристаллы не являются пространственно однородными, поскольку, например, узлы решетки не эквивалентны другим точкам. Поэтому использование тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, введенного в предположении об однородности среды, в применении к кристаллам заведомо должно быть ограничено.

Прежде чем перейти к кристаллам, запишем в другом виде соотношение (1.3), относящееся к произвольной линейной среде. При этом будем считать среду однородной во времени, т. е. ядро $\hat{\varepsilon}_{ij}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в (1.3) зависящим лишь от разности $t - t'$. Тогда, совершая преобразования Фурье

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{E}(\omega, \tilde{\mathbf{k}}) e^{i(\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r} - \omega t)} d\omega d\tilde{\mathbf{k}}$$

и аналогично для $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$, из (1.3) получаем

$$D_i(\mathbf{r}, \omega) = \int \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}',$$

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_0^\infty \hat{\varepsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\omega\tau} d\tau,$$

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int D_i(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} =$$

$$= \int \hat{\varepsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \tilde{\mathbf{k}}) E_j(\omega, \tilde{\mathbf{k}}) d\tilde{\mathbf{k}},$$

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \tilde{\mathbf{k}}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \hat{\varepsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i(-\mathbf{k}\mathbf{r} + \tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r}')} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

(4.1)

Для безграничной однородной среды

$$\widehat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \widehat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

и так как

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' = \delta(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}),$$

видим, что

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \tilde{\mathbf{k}}) = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}).$$

Другими словами, как это и должно быть, для однородной среды приходим к (1.6).

Кристалл представляет собой неоднородную среду, свойства которой неизменны при сдвиге на любой вектор решетки \mathbf{a} (трансляционная симметрия*). Поэтому в кристалле

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{r}' + \mathbf{a}). \quad (4.2)$$

Функция, обладающая свойством (4.2), может быть записана в виде

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{b}} g_{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i2\pi \mathbf{b} \cdot \mathbf{r}'},$$

где $\mathbf{b} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3$ — произвольный вектор обратной решетки (n_j — целые числа, \mathbf{b}_j — три основных вектора обратной решетки, т. е. $e^{i2\pi \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}} = 1$). Подставляя такое выражение для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в (4.1), получаем

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{b}} \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}) \delta(\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k} - 2\pi \mathbf{b}), \quad (4.3)$$

где

$$\epsilon_{ij}^{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}) = \int g_{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{R}$$

и $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Очевидно, если учитывать только член с $\mathbf{b} = 0$, то

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \tilde{\mathbf{k}}) = \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}=0}(\omega, \mathbf{k}) \delta(\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k})$$

*) С неоднородными средами другого типа также, разумеется, приходится встречаться. Неоднородной является, например, плазма, параметры которой зависят от координат [6]. Вопрос об использовании тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в неоднородной плазме обсуждается в [49]. Об учете пространственной дисперсии при распространении γ -лучей в кристаллах см. работу [136].

и

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}=0}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k}, \omega).$$

Ясно, что тензором диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в электродинамике кристаллов можно пользоваться тогда, когда в правой части формулы (4.3) достаточно оставить одно слагаемое с $\mathbf{b} = 0$ или же в соответствующих соотношениях можно выразить все остальные члены через этот первый член. Как мы сейчас увидим, в кристаллооптике ситуация именно такова.

Согласно формулам (4.1) и (4.3) электрическое поле и индукция \mathbf{D} связаны соотношением

$$D_i(\omega, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{b}} \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}') E_j(\omega, \mathbf{k}' + 2\pi \mathbf{b}) = \epsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k}') E_j(\omega, \mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{b}' \neq 0} \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}'}(\omega, \mathbf{k}') E_j(\omega, \mathbf{k}' + 2\pi \mathbf{b}'), \quad (4.4)$$

где волновой вектор записан через \mathbf{k}' (не путать с $\mathbf{k} = \text{Re } \mathbf{k}$), так как обозначение \mathbf{k} желательно сохранить лишь в применении к длинным волнам. Именно такие длинные волны (с длиной волны λ , значительно большей постоянной решетки a) и рассматриваются в кристаллооптике. Это значит, что в кристаллооптике интересуются волновыми векторами \mathbf{k} , удовлетворяющими условию

$$k \ll 2\pi b \gg \frac{2\pi}{a}. \quad (4.5)$$

Даже для длинных волн (т. е. полагая в (4.4) $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$) все равно $D_i(\omega, \mathbf{k})$ зависит и от $E_j(\omega, \mathbf{k})$ и от $E_j(\omega, \mathbf{k} + 2\pi \mathbf{b}')$. Нам нужно выяснить, в каких условиях все-таки и в кристаллах можно считать, что

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}). \quad (4.6)$$

Поставленный вопрос обсуждался уже давно (см. [14] и [24], § 44), но как и многие другие проблемы, связанные с учетом пространственной дисперсии, вновь возник в последние годы [16, 50]*). Переход от (4.4) к (4.6) был бы осуществлен

*) К сожалению, в [16, 50] не было обращено внимание на книги [14, 24]. Кроме того, в [16] рассматривалась лишь поперечная часть коротковолнового поля, а в примечании к стр. 669 была допущена ошибка.

более или менее автоматически, если бы соблюдалось неравенство

$$\varepsilon_{ij}^{b' \neq 0}(\omega, \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}') \ll \varepsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k}).$$

Для кристаллов такое предположение, однако, не отвечает действительности. Допустим, например, что поле E_j имеет лишь одну длинноволновую компоненту $E_j(\omega, \mathbf{k})$. Тогда, согласно (4.4),

$$\left. \begin{aligned} D_i(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}), \\ D_i(\omega, \mathbf{k}') &= \varepsilon_{ij}^b(\omega, \mathbf{k}') E_j(\omega, \mathbf{k}), \\ \mathbf{k} &= \mathbf{k}' + 2\pi\mathbf{b}. \end{aligned} \right\} \quad (4.7)$$

Далее, при $b \sim 2\pi/a$ (но не при $b \gg 2\pi/a$) фурье-компоненты $D(\omega, \mathbf{k}')$ отнюдь не малы, как это ясно из простых физических соображений. В самом деле, представим себе конденсатор, который заполнен диэлектрическими шариками радиуса a . Если на конденсатор подано постоянное напряжение, то поляризация и индукция в конденсаторе будут иметь постоянную составляющую (аналог длинноволновых компонент поля) и большие коротковолновые составляющие с пространственным периодом l порядка a . Составляющие с периодом $l \ll a$ будут иметь малый удельный вес. Кроме того, составляющие с периодом $l \sim a$ также могут быть малыми (по сравнению с постоянной составляющей), если диэлектрическая проницаемость шариков ε близка к проницаемости окружающей среды (т. е. в случае шариков в вакууме, когда ε близко к единице). Кристалл подобен такой модели, причем составляющие его «шарики» (атомы) обладают, вообще говоря, относительно большой поляризуемостью. Таким образом, нужно думать, что величины $\varepsilon_{ij}^{b \neq 0}(\omega, \mathbf{k}')$ отнюдь не малы по сравнению с

$$\varepsilon_{ij}^{b=0}(\omega, \mathbf{k}') \equiv \varepsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k}'),$$

если не говорить о значениях $b \gg 2\pi/a$ (как будет показано в п. 12.1, компоненты ε_{ij}^b с ростом b быстро убывают).

В конденсаторе, о котором шла речь выше, помимо коротковолновых компонент $D(\omega, \mathbf{k}')$ будут присутствовать и коротковолновые компоненты поля $E(\omega, \mathbf{k}')$. Добиться же

существования поля только с одной фурье-компонентой D или E можно, лишь соответствующим образом подбирая внешние (сторонние) токи и заряды (величины j_{ext} и ρ_{ext} в (1.1)).

Продвинуться дальше в теории диэлектрической проницаемости кристаллов можно, только как-то конкретизировав задачу, сделав определенные предположения о внешних источниках поля. Так мы и поступим, а именно в полном соответствии с постановкой вопроса как в кристаллооптике, так и вообще в электродинамике сплошных сред будем считать, что в среде нет внешних зарядов и токов с коротковолновыми фурье-компонентами. Таким образом, полагаем

$$j_{ext}(\omega, \mathbf{k}') = 0, \quad \rho_{ext}(\omega, \mathbf{k}') = 0, \quad \mathbf{k}' \gtrsim 2\pi\mathbf{b} \gg \mathbf{k}. \quad (4.8)$$

В кристаллооптике, т. е. при рассмотрении нормальных волн, кроме того

$$j_{ext}(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad \rho_{ext}(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad \mathbf{k} \ll 2\pi\mathbf{b}, \quad \mathbf{b} \gtrsim 1/a. \quad (4.9)$$

Однако для введения тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах, как и в однородной среде, условие (4.9) использовать не нужно.

В силу (4.8) для коротковолновых фурье-компонент имеем (см. (2.4) и (2.7); $\mathbf{k}' = \mathbf{k}'s'$, $s' = 1$)

$$\frac{\omega^2}{c^2} D_i(\omega, \mathbf{k}') - (k')^2 E_i(\omega, \mathbf{k}') + k'_i k'_j E_j(\omega, \mathbf{k}') = 0, \quad (4.10)$$

$$s'_i D_i(\omega, \mathbf{k}') = 0, \quad k' \simeq 2\pi b \gg k, \quad \frac{k}{2\pi b} \leq \frac{ka}{2\pi} \ll 1. \quad (4.11)$$

Покажем теперь [16, 24, 50], что поперечная часть $E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}')$ поля $E(\omega, \mathbf{k}')$ мала по сравнению с $E(\omega, \mathbf{k})$. В самом деле, для однородных волн (см. (2.60), (2.61))

$$(k')^2 E_i - k'_i k'_j E_j = (k')^2 (\delta_{ij} - s'_i s'_j) E_j \equiv (k')^2 \eta_{ij} E_j = (k')^2 E_{\perp,i}$$

и, как следует из (4.10) и (4.4),

$$\begin{aligned} E_{\perp,i}(\omega, \mathbf{k}') &= \frac{\omega^2}{c^2 (k')^2} D_i(\omega, \mathbf{k}') \sim \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2 b^2} D_i(\omega, \mathbf{k}') \sim \\ &\sim \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2 b^2} \varepsilon_{ij}^{-b}(\omega, \mathbf{k}') E_j(\omega, \mathbf{k}), \\ \mathbf{k}' &= \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b} \simeq 2\pi\mathbf{b}, \quad \mathbf{k} \ll 2\pi\mathbf{b}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Здесь учтено, что коротковолновое поле $E_{\parallel}(\omega, \mathbf{k}')$, порождаемое длинноволновым полем $E(\omega, \mathbf{k})$ и вносящее свой вклад в $D(\omega, \mathbf{k}')$, по порядку величины не сильнее поля $E(\omega, \mathbf{k})$.

В кристаллооптике

$$\frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2 b^2} \left| \varepsilon_{ij}^{-b}(\omega, \mathbf{k}') \right| \leq \frac{\omega^2 a^2}{4\pi^2 c^2} \left| \varepsilon_{ij}^{-b} \right| = \frac{a^2}{\lambda_0^2} \left| \varepsilon_{ij}^{-b} \right| \ll 1, \quad (4.13)$$

поскольку отношение параметра решетки $a \sim 3 \cdot 10^{-8}$ см к длине волны в вакууме $\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega} \sim 5 \cdot 10^{-5}$ очень мало (параметр $a^2/\lambda_0^2 \leq 10^{-6}$), а величина $|\varepsilon_{ij}^{-b}(\omega, \mathbf{k}')|$, вероятно, порядка единицы (во всяком случае, нет никаких оснований считать ее очень большой). В силу (4.12) и (4.13)

$$E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}') \ll E(\omega, \mathbf{k}), \quad k \ll k' \simeq 2\pi b. \quad (4.14)$$

Таким образом, при пренебрежении малыми членами порядка $(a/\lambda_0)^2 \leq 10^{-6}$ в кристаллооптике можно не принимать во внимание поперечное коротковолновое поле $E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}')$.

Пренебрегая полем $E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}')$, запишем уравнение (4.11) и связь (4.4) в виде

$$s'_i D_i(\omega, \mathbf{k}') = s'_i \varepsilon_{ij}^{-b}(\omega, \mathbf{k}') E_j(\omega, \mathbf{k}) + \sum_{b' \neq -b} s'_i \varepsilon_{ij}^{b'}(\omega, \mathbf{k}') E_{\parallel, j}(\omega, \mathbf{k}' + 2\pi b') = 0, \quad (4.15)$$

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}) + \sum_{b \neq 0} \varepsilon_{ij}^b(\omega, \mathbf{k}) E_{\parallel, j}(\omega, \mathbf{k} + 2\pi b), \quad (4.16)$$

где

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + 2\pi \mathbf{b}, \quad k \ll 2\pi b, \quad k' = k' s'.$$

Система (4.15) формально является бесконечной (напомним, что $\mathbf{b} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3$, $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$), но фактически ее можно оборвать, поскольку при достаточно больших векторах обратной решетки \mathbf{b} коэффициенты ε_{ij}^b быстро убывают с ростом b . Линейная система (4.15) позволяет, вообще говоря, выразить компоненты $E_{\parallel, j}(\mathbf{k}' + 2\pi \mathbf{b}') = E_{\parallel, j}(\mathbf{k} + 2\pi(\mathbf{b} + \mathbf{b}'))$, $\mathbf{b} + \mathbf{b}' \neq 0$ через $E_j(\omega, \mathbf{k})$.

Таким образом, все векторы $E_{\parallel, j}(\omega, \mathbf{k} + 2\pi \mathbf{b})$, $\mathbf{b} \neq 0$, фигурирующие в (4.16), линейным образом связаны с $E_j(\omega, \mathbf{k})$,

а значит, выражение (4.16) можно свести к виду (4.6). Единственное условие, которое при этом должно соблюдаться, состоит в отсутствии нетривиальных решений *) у однородной системы (4.15), в которой неоднородный член пропорционален $E_j(\omega, \mathbf{k})$. Если бы такие решения существовали, т. е. определитель однородной системы (4.15) был бы равен нулю, то это отвечало бы возможности появления в кристалле своеобразных коротковолновых возмущений. Такие возмущения могли бы либо совсем не быть связанными с $E_j(\omega, \mathbf{k})$, т. е. не возбуждаться длинноволновым полем, либо раскачивались бы этим полем (в рамках системы (4.15) второй случай отвечает бесконечным решениям для $E_{\parallel, j}(\omega, \mathbf{k}' + 2\pi \mathbf{b}')$). Первая возможность, независимо от того реальна она или нет, с обсуждаемой точки зрения не представляет интереса, поскольку мы хотим найти индукцию, создаваемую полем $E_j(\omega, \mathbf{k})$. Вторая возможность отвечала бы какой-то неустойчивости и явно не может иметь места по крайней мере в равновесной среде. Итак, мы имеем все основания считать, что коротковолновое поле в кристаллооптике исключается и может использоваться [связь (4.6), аналогичная применяемой в однородной среде.

Выше (в формулах (4.15) и (4.16)) коротковолновое поле $E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}')$ было совсем выброшено. Поступать так не обязательно, если можно как-то выразить $E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}')$ через $E(\omega, \mathbf{k})$ и $E_{\parallel}(\omega, \mathbf{k}')$. Последняя возможность открывается при условиях (4.13), (4.14) в результате применения метода последовательных приближений — поле $E_{\perp}(\omega, \mathbf{k}')$ определяется при этом из уравнения (4.10) (см. также (4.11), (4.12)).

*) Весьма важен тот факт, что в (4.15) фигурирует лишь продольное коротковолновое поле $E_{\parallel, j}$. Если бы поперечным полем нельзя было пренебречь или нельзя было бы как-то приближенно его учесть (см. ниже), система типа (4.15) при $E_j(\omega, \mathbf{k}) = 0$ связывала бы между собой коротковолновые поля $E_{\parallel, j}$ и $E_{\perp, j}$ (см. в этой связи п. 2.4), а при $E_j(\omega, \mathbf{k}) \neq 0$ не позволяла бы выразить все коротковолновое поле E_j через $E_j(\omega, \mathbf{k})$. Другими словами, в случае замены в (4.15) поля $E_{\parallel, j}$ на $E_j(\omega, \mathbf{k}' + 2\pi \mathbf{b}')$ эта система содержала бы вдвое больше неизвестных ($E_{\parallel, j}$ и $E_{\perp, j}$) при том же числе уравнений и, таким образом, не могла бы служить для однозначного определения $E_j(\omega, \mathbf{k} + 2\pi \mathbf{b})$ через $E_j(\omega, \mathbf{k})$.

Для того чтобы картина была более ясной, сделаем еще несколько замечаний.

Кристалл, в смысле его поведения в электромагнитном поле, во многом аналогичен уже упомянутой модели диэлектрических шариков. Под действием длинноволнового электрического поля \mathbf{E} (длина волны $\lambda \gg a$, где a — размер шариков) в такой «среде», как это сразу ясно, возникает не только длинноволновая индукция \mathbf{D} , но и коротковолновая поляризация (и индукция), порождающая коротковолновое электрическое поле. Но коротковолновое поле \mathbf{E} в неоднородной среде в свою очередь может вызывать длинноволновую поляризацию (именно это и отражено в (4.4) и (4.16)*). Поэтому уравнения поля в общем случае как раз и не распадаются на уравнения для отдельных фурье-компонент. Если составляющие среду «шарики» (атомы) распределены в среднем (в среднем по ансамблю или в среднем за длительное время) равномерным в пространстве образом, то при рассмотрении средних величин коротковолновые составляющие исчезают. Это и отвечает однородной в пространстве среде, причем однородность понимается в статистическом смысле. Данная однородная в среднем среда в определенный момент времени всегда, конечно, пространственно неоднородна, но соответствующие отклонения от среднего считаются флуктуациями. При учете флуктуаций длинноволновое поле порождает коротковолновое поле и в однородной (в среднем) среде.

В кристаллах, в силу теплового движения или неидеальности структуры также имеются флуктуации, но в отличие от однородных сред даже после усреднения сохраняется неоднородность. При высоких температурах эта неоднородность может играть сравнительно небольшую роль и твердый кристалл будет мало отличаться от жидкого кристалла (анизотропной, но в среднем пространственно однородной среды). Сказанное, разумеется, хорошо известно, но мы

* В качестве иллюстрации рассмотрим среду, в которой $\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 \cos bz$, и подействуем на нее полем $E = E_0 e^{ik'z}$. Тогда

$$D = \varepsilon E = \varepsilon_0 E_0 e^{ik'z} + \frac{\varepsilon_1}{2} (e^{i(k'+b)z} + e^{i(k'-b)z}) E_0$$

и, очевидно, индукция \mathbf{D} имеет длинноволновую фурье-составляющую, если $k' - b = k \ll b$.

остановились здесь на этих моментах, чтобы подчеркнуть отсутствие непреодолимых различий между кристаллами и такими однородными средами, как жидкости.

Возвращаясь к кристаллам или модели упорядоченно расположенных «шариков», можно и без особого анализа утверждать, что продольное (кулоновское) коротковолновое поле, порождаемое длинноволновым полем, а не создаваемое какими-то источниками (т. е. при условии (4.8)), в рамках линейной теории пропорционально этому длинноволновому полю. Поэтому и длинноволновая индукция, создаваемая таким коротковолновым полем, будет пропорциональна напряженности длинноволнового поля — именно к такому выводу мы пришли выше более формальным и строгим путем.

Итак, при отсутствии внешних источников коротковолнового поля длинноволновые индукция и поле в кристалле связаны между собой линейным соотношением (4.6)

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}),$$

причем $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ играет роль тензора диэлектрической проницаемости кристалла. Этим соотношением можно пользоваться как при наличии источников длинноволнового поля $\mathbf{j}_{ext}(\omega, \mathbf{k})$ и $\rho_{ext}(\omega, \mathbf{k})$, так и при их отсутствии, когда речь идет о распространении совокупности нормальных волн.

В силу неоднородности среды длинноволновое поле как бы промодулировано коротковолновым полем, причем в конденсированной среде глубина модуляции, вообще говоря, велика. Отличие кристаллов от жидкостей состоит в этом отношении в том, что в жидкостях модуляция носит нерегулярный (флуктуационный) характер, а в кристаллах помимо флуктуационной части имеется и регулярная модуляция с пространственными периодами, равными и меньшими постоянной (или постоянных) решетки.

Нужно также подчеркнуть, что постоянная решетки a играет двоякую роль. С одной стороны, параметр a характеризует пространственную неоднородность среды и эта неоднородность при переходе к $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в указанном смысле несущественна. С другой же стороны, тот же параметр a определяет «радиус молекулярного действия» R_0 — интервал значений R , при которых ядро $\hat{\varepsilon}_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{R})$ в (4.1) существенно отлично от нуля. Стремление радиуса R_0 к нулю соответствует пренебрежению пространственной дисперсией,

как это уже отмечалось ранее. Если с самого начала ввести два формально независимых параметра a (постоянная решетки) и R_0 («радиус молекулярного действия»), то картина станет, может быть, более ясной. Однако фактически в кристалле обычно $a \sim R_0$ или для сложных кристаллов с аномально большим параметром решетки $a \gg R_0$. Поэтому неравенство $a \ll R_0$ (или, формально, стремление a к нулю при $R_0 \neq 0$), по-видимому, для реального кристалла невозможно.

Возникает важный вопрос о том, в какой мере тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для кристаллов обладает общими свойствами, установленными для тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в однородной среде (см. в особенности п. 1.2).

В тех случаях, когда используется принцип причинности, симметрия кинетических коэффициентов или вещественность D при вещественном E , представляется ясным, что для кристаллов не возникает каких-либо отличий. Если же речь идет об энергетических соотношениях, то ситуация на первый взгляд кажется более сложной. Коротковолновое поле, порожденное рассматриваемым длинноволновым полем, обладает какой-то энергией и вносит свой вклад в выделяющееся тепло и т. д.

Возникает, таким образом, вопрос о том, была ли в § 3 при анализе энергетических соотношений учтена роль коротковолнового поля. Ответ на этот вопрос является положительным. В самом деле, теорема Пойнтинга (3.1), служащая основой при рассмотрении выражений для энергии, количества тепла и потока энергии, следует непосредственно из уравнений поля (1.1) без всяких предположений о вкладе коротковолновых компонент поля. Отсюда ясно, что этот вклад при использовании соответствующих макроскопических выражений учитывается в известном смысле автоматически. В последнем можно убедиться и непосредственно на основе микротеории (см. [27], § 31)*. Кроме того, как это ясно из сказанного ранее, между кристаллами и такими однородными средами, как жидкости в вопросе о коротковолновом поле (или по другой терминологии, о микрополе) разница не

*) В [27] рассматривается, правда, лишь определенная простая модель среды. В этой связи более детальный анализ вопроса об энергетических соотношениях в электродинамике сред с пространственной дисперсией на базе микротеории не представляется излишним.

столь уже глубока. Поэтому если бы энергетические соотношения, обсуждающиеся в § 3, не учитывали роли коротковолнового поля, то их вообще почти никогда нельзя было бы применять. Фактически же эти соотношения применимы и к жидкостям, и к кристаллам, но в последнем случае, вообще говоря, только при условии (4.6). Но это условие, т. е. возможность ввести тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, как раз и считается имеющим место при рассмотрении всех вопросов, которым посвящена настоящая книга. Итак, с тензором $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, связывающим поля $D(\omega, \mathbf{k})$ и $E(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах (см. (4.6)), мы будем ниже, с полным на то основанием, обращаться так же, как в однородной среде.

Как мы видели (см. (4.15), (4.16)), тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах должен довольно сложным образом выражаться через тензоры $\epsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{b \neq 0}(\omega, \mathbf{k})$. В этой связи может возникнуть подозрение, что вычисление $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах значительно сложнее, чем в однородной среде. Однако подобное заключение было бы неверным, поскольку для нахождения $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ вовсе нет нужды предварительно определять тензоры $\epsilon_{ij}^b(\omega, \mathbf{k})$. Более того, обычные методы расчета в применении к кристаллам сразу же приводят к определению именно тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, а не тензоров $\epsilon_{ij}^b(\omega, \mathbf{k})$ или $\epsilon_{ij}^{b=0}(\omega, \mathbf{k}) \equiv \epsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k})$. Подробнее это будет ясно из самих расчетов (см. п. 12.1), но уже сейчас полезно пояснить существо дела.

Как классический, так и квантовомеханический расчет $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ сводится к вычислению плотности индуцированного тока (или, что то же, индукции D), возникающего под действием длинноволнового поля $E(\omega, \mathbf{k})$. При этом роль невозмущенных состояний (собственных колебаний) системы играют «механические экситоны» — волны с $D \neq 0$, в которых $E(\omega, \mathbf{k}) = 0$. Но коротковолновое кулоновское поле учтено уже в невозмущенной задаче, и под влиянием возмущающего действия поля $E(\omega, \mathbf{k})$ возникает индукция $D(\omega, \mathbf{k})$, которая отражает и учитывает действие коротковолнового поля. Иначе говоря, определяется значение $D(\omega, \mathbf{k})$ в условиях, когда не только $E(\omega, \mathbf{k}) \neq 0$, но и $E(\omega, \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}) \neq 0$. Если же вычислялась бы, например, величина $\epsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k})$, то нужно было бы найти $D(\omega, \mathbf{k})$ при $E(\omega, \mathbf{k}) \neq 0$, но $E(\omega, \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}) = 0$ (см. (4.4)). Уничтожить же кулоновское

поле $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b})$ с $\mathbf{b} \neq 0$ при данном $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) \neq 0$ можно лишь специальным подбором коротковолновых фурье-компонент плотности внешних зарядов $\rho_{ext}(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b})$. Между тем обычные расчеты $\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k})$ производятся при $\rho_{ext}(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}) = 0$ (условие (4.8) *). Таким образом, и в смысле вычисления $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в рамках микротемории, случай кристаллов аналогичен случаю однородной среды.

4.2. Случай слабой пространственной дисперсии. Введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и его использование в волновом уравнении (2.9) возможно для кристаллов, вообще говоря, лишь при условии (см. (4.13))

$$(\lambda/\lambda_0)^2 \ll 1. \quad (4.17)$$

Условие (4.17) в оптике может считаться всегда выполненным, но оно, вместе с тем, еще не свидетельствует о малости пространственной дисперсии. Дело в том, как это уже не раз подчеркивалось, что пространственная дисперсия характеризуется параметром $a/\lambda = an/\lambda_0$. Очевидно, при больших значениях показателя преломления n этот параметр an/λ_0 и, следовательно, пространственная дисперсия могут быть значительными, несмотря на соблюдение неравенства (4.17). В подобных условиях $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ может оказаться весьма сложной функцией \mathbf{k} , и если представить себе функцию $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ разложенной в ряд по \mathbf{k} , этот ряд будет содержать много членов (параметром разложения является как раз величина an/λ_0). Волновое уравнение (2.9) в таком случае может иметь много решений, т. е. дисперсионное уравнение (2.10) будет иметь много корней $\omega_l(\mathbf{k})$. При пренебрежении же пространственной дисперсией имеются только два корня дисперсионного уравнения, отвечающие обыкновенной и необыкновенной волнам, а также в определенных условиях корень $\omega_{||} = \text{const}$ для продольной волны.

В связи со сказанным представляется чрезвычайно важным тот факт, что в оптике кристаллов пространственная дисперсия

*) Аналогичная ситуация имеет место при вычислении тензора $\epsilon_{\perp ij}$ с использованием волновых функций кулоновских экситонов (см. п. 12.2). Действительно, в этом случае под действием поперечного поля \mathbf{E}_{\perp} возникает также поляризация, обусловленная действием того продольного поля $\mathbf{E}_{||}$, которое обеспечивает соблюдение условия $s\mathbf{D} = 0$ (см. п. 2.4).

является слабой, т. е. соблюдается также неравенство

$$ka \sim a/\lambda = \frac{an}{\lambda_0} \ll 1. \quad (4.18)$$

При условии (4.18) в большинстве случаев можно и нужно пользоваться разложением тензоров $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ или $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ в ряд по \mathbf{k} с сохранением двух-трех первых членов [5].

Итак, воспользуемся разложением

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega)k_l + \alpha_{ijlm}(\omega)k_l k_m \quad (4.19)$$

или для однородных плоских волн, когда $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}\mathbf{s}$:

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega) \frac{\omega}{c} \tilde{n}s_l + \alpha_{ijlm}(\omega) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \tilde{n}^2 s_l s_m. \quad (4.20)$$

Аналогично для обратного тензора

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + i\delta_{ijl}(\omega)k_l + \beta_{ijlm}(\omega)k_l k_m, \quad (4.21)$$

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + i\delta_{ijl}(\omega) \frac{\omega}{c} \tilde{n}s_l + \beta_{ijlm}(\omega) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \tilde{n}^2 s_l s_m. \quad (4.22)$$

Использование тензоров ϵ_{ij} и ϵ_{ij}^{-1} как вообще, так и в форме (4.19) — (4.21) в широких пределах эквивалентно, и выбор одного из них определяется соображениями удобства. Исключения составляют случаи, когда некоторые компоненты тензоров $\epsilon_{ij}(\omega)$ или $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ стремятся к бесконечности (сильно возрастают). Например, если какая-то компонента $\epsilon_{ij}(\omega)$ стремится к бесконечности, то разложения (4.19) — (4.21) для соответствующей компоненты $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ недостаточно, поскольку все члены исчезающе малы по сравнению с $\epsilon_{ij}(\omega)$. В то же время с возрастанием ϵ_{ij} обычно растет и \tilde{n} , т. е. роль пространственной дисперсии повышается. В подобном случае нужно использовать разложение (4.21), (4.22), которое при уменьшении $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ особенно эффективно.

Аналогично, разумеется, в области сильного возрастания $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ нужно пользоваться разложением (4.19), (4.20), а не (4.21), (4.22).

В дальнейшем мы будем широко применять разложения (4.19) — (4.22). Поэтому важно обсудить вопрос об условиях их использования, помимо исходного требования (4.18).

Выражения (4.19) — (4.22) имеют смысл, только если функции $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ вообще допускают разложение в ряд вблизи точки $\mathbf{k} = 0$. Этот вопрос был уже затронут в § 1. Напомним, что функции $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ стремятся соответственно к $\epsilon_{ij}(\omega)$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ и не зависят ни от модуля, ни от направления \mathbf{k} . Далее, $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ являются интегральными величинами — они получаются путем суммирования по спектру (см. § 12). Поэтому даже при наличии некоторых достаточно слабых особенностей в подинтегральном выражении (например, у собственных частот невозмущенной задачи) компоненты ϵ_{ij} особенностей иметь не будут. Кроме того, как говорилось во введении и еще будет указано в § 13, в известных нам случаях собственные частоты корректно выбранной невозмущенной задачи при отсутствии вырождения не имеют особенностей при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. При наличии вырождения собственные частоты могут быть неаналитическими функциями \mathbf{k} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ (см., например, п. 10.3, где рассмотрена изотропная гиротропная среда). Однако ϵ_{ij} и в этом случае остается аналитической функцией \mathbf{k} (при $\mathbf{k} \rightarrow 0$).

Итак, нет никаких оснований сомневаться в аналитичности функций ϵ_{ij} и ϵ_{ij}^{-1} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Разложения типа (4.19) — (4.22) с учетом лишь нескольких членов могут оказаться недостаточными в следующей своеобразной ситуации. Пусть, например, $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon(\omega, \mathbf{k})\delta_{ij}$, причем

$$\epsilon(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon(\omega) + \frac{\nu k^2}{\omega - \omega_l - \mu k^2} \quad (4.23)$$

(такое выражение в некоторых условиях приближенно описывает ход $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ вблизи квадрупольной линии поглощения). Пока член разложения μk^2 несуществен, мы имеем здесь дело с разложением типа (4.19). Но в противном случае

$$[\epsilon(\omega, \mathbf{k}) - \epsilon(\omega)]^{-1} = \frac{\omega - \omega_l - \mu k^2}{\omega_l \nu k^2},$$

что не соответствует ни (4.19), ни (4.21). Легко написать выражение, обобщающее формулу (4.23) для любого кристалла, в духе феноменологического разложения (4.19):

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega)k_l + \alpha_{ijlm}(\omega, \mathbf{k})k_l k_m, \\ \alpha_{ijlm}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) &= \xi_{ijlm}(\omega) + i\eta_{ijklmn}(\omega)k_n + \zeta_{ijklmnp}(\omega)k_n k_p. \end{aligned} \right\} \quad (4.24)$$

Аналогичным образом можно заменить в (4.19) $\gamma_{ijl}(\omega)$ на $\gamma_{ijl}(\omega, \mathbf{k})$, причем

$$\gamma_{ijl}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \gamma_{ijl}^{-1}(\omega) + i\mu_{ijlm}(\omega)k_m + \nu_{ijklmn}(\omega)k_m k_n. \quad (4.25)$$

Формула (4.24) эквивалентна (4.23) для негиротропного кубического кристалла, причем

$$\alpha_{ijlm}k_l k_m = \delta_{ij} \frac{\nu(\omega)k^2}{\omega - \omega_l - \mu k^2}.$$

В более сложном случае использование комбинированного разложения (4.24) приводит к громоздким выражениям, вряд ли могущим представить практический интерес. Более существенно, однако, то обстоятельство, что формулами типа (4.23) или (4.24), (4.25) нужно пользоваться лишь в исключительных случаях*). В самом деле, разложения (4.19) — (4.22) ведутся по параметру a/λ , т. е. коэффициенты γ и δ порядка a и коэффициенты α , β , ν и μ порядка a^2 . Поэтому, как ясно из (4.23), член μk^2 в знаменателе нужно учитывать только при

$$\frac{|\omega - \omega_l|}{\omega_l} \sim \mu k^2 \sim \left(\frac{2\pi a}{\lambda}\right)^2,$$

*) Если несколько обобщить формулу (4.23) и записать ее в виде

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega) + \frac{\alpha_{ijlm}k_l k_m}{\omega - \omega_l + i\nu' - \mu_{lm}k_l k_m}, \quad (4.23a)$$

то при $\nu' = 0$ и $\mathbf{k} \rightarrow 0$ тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ может зависеть от $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$. Фактически, однако, при вещественной частоте ω всегда имеется некоторое поглощение (т. е. в (4.23a) параметр $\nu' \neq 0$). Поэтому $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0) = \epsilon_{ij}(\omega)$ и никакой особенности не возникает (то же следует из микрорасчетов, см. [51] и § 14).

когда вместе с тем

$$\frac{\sqrt{k^2}}{\omega - \omega_l} \sim \mu k^2 \sim \epsilon(\omega) \sim 1.$$

Последнее означает, что квадрупольная линия вносит в ϵ вклад, сравнимый с вкладом дипольных линий. Соответствующее значение отношения $\frac{|\omega - \omega_l|}{\omega_l} \sim 10^{-5} \pm 10^{-6}$, что отвечает приближению к центру линии на $\Delta\lambda \sim 10^{-2} \text{ \AA}$ при слабом поглощении. Даже в случае реализации подобных условий учитывать член μk^2 в (4.23) или зависимость α_{ijklm} от \mathbf{k} в (4.24) все равно нужно лишь в очень узкой области вблизи центра линии. Вне этой области пригодны разложения (4.19) — (4.22), причем весь «квадрупольный эффект» отражен в членах $\beta_{ijklm} k_j k_m$ или $\alpha_{ijklm} k_j k_m$, которые, таким образом, играют основную роль.

Итак, переход к выражениям типа (4.23) и (4.24), (4.25) в известном смысле отвечает рассмотрению эффектов более высокого порядка. Соответствующее ограничение области применимости выражений (4.19) — (4.22) носит, таким образом, совершенно естественный характер. Возможно, что с таким эффектом высшего порядка приходится сталкиваться на опыте (см. п. 11.2).

Резюмируя, можно сказать, что использование формул (4.19) — (4.22) в кристаллооптике с пространственной дисперсией является вполне последовательным*), хотя иногда, быть может, и нуждается в обобщении типа (4.23), (4.24). Заметим, что в литературе используются также выражения

*) При подстановке рядов типа (4.19) — (4.22) в дисперсионное уравнение (2.10), (2.22), как это и делалось в [5], для показателя преломления \tilde{n} получаются алгебраические уравнения, порядок которых растет с числом учитываемых членов ряда. Однако новые корни \tilde{n} лежат при все больших значениях k , а при несоблюдении условия $ka \ll 1$ (см. (4.18)) макроскопический подход непригоден. Поэтому при нахождении первых нескольких корней \tilde{n} , которые только и можно рассматривать в связи с условием (4.18) и в силу поглощения (см. §§ 6 и 7) ограничение первыми членами ряда опять-таки совершенно оправдано и последовательно. Противоположное по содержанию замечание [52] представляется нам, таким образом, неправильным.

для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах, которые кажутся более общими, чем (4.19) — (4.22). Так, в [53] употребляется выражение типа

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{(0)} + \frac{g_{ij}}{\omega - \omega_l - F(\mathbf{k})}, \quad (4.26)$$

где $\epsilon_{ij}^{(0)}$, ω_l , g_{ij} — постоянные. Фактически, однако, в (4.26) нужно положить $F(\mathbf{k}) = f + g_i k_i + h_{ilm} k_i k_m$, так как учет более высоких членов по \mathbf{k} лежит, вообще говоря, за пределами исходного приближения. С учетом этого обстоятельства выражение (4.26) сводится к (4.21), причем пригодно лишь вблизи центра линии. Для широкого интервала частот удобны формулы, приведенные в [54] и п. 10.2, но вне пределов справедливости разложения (4.19) — (4.22) и эти формулы носят лишь экстраполяционный характер. Нам представляется, что в большинстве случаев лучше не прибегать к экстраполяционным формулам для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, явно учитывая тем самым слабость пространственной дисперсии. Напротив, для $\epsilon_{ij}(\omega)$ вблизи линии поглощения удобно пользоваться экстраполяционными формулами, например, полагая в системе главных осей

$$\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon'_{ij} + i\epsilon''_{ij} = \epsilon_{0j} - \frac{\omega_{0j}^2}{\omega^2 - \omega_{\infty j}^2 + i\nu_j \omega}. \quad (4.27)$$

Тензоры, фигурирующие в формулах (4.19) — (4.22), удовлетворяют ряду соотношений, являющихся следствием общих свойств симметрии тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, обсуждавшихся в п. 1.2. Так, в силу (1.21)

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{ij}(\omega) &= \epsilon_{ji}(\omega), & \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) &= \epsilon_{ji}^{-1}(\omega), & \alpha_{ijklm}(\omega) &= \alpha_{jilm}(\omega), \\ \gamma_{ijl}(\omega) &= -\gamma_{jil}(\omega), & \delta_{ijl}(\omega) &= -\delta_{jil}(\omega), & \beta_{ijklm}(\omega) &= \beta_{jilm}(\omega). \end{aligned} \right\} \quad (4.28)$$

Кроме того, тензоры α_{ijklm} и β_{ijklm} всегда можно выбрать так, что $\alpha_{ijklm} = \alpha_{ijml}$ и $\beta_{ijklm} = \beta_{ijml}$ (ниже предполагается, что сделан именно такой выбор). Напомним также, что магнитная индукция внешнего поля B_{ext} везде, если это не оговорено, считается равной нулю.

При наличии центра симметрии, и вообще для негиротропной среды, из (1.22) следует, что

$$\gamma_{ijl} = 0, \quad \delta_{ijl} = 0. \quad (4.29)$$

При отсутствии поглощения и вещественном \mathbf{k} тензор $\epsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = 0$ (см. п. 3.1) и, следовательно, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ является эрмитовым. В этом случае в силу (4.28) все тензоры: $\epsilon_{ij}(\omega)$, $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega)$, γ_{ijl} , α_{ijlm} , δ_{ijl} и β_{ijlm} — вещественные.

Выше, в связи с использованием выражений типа (4.19) — (4.25), упоминалось о дипольных и квадрупольных линиях поглощения. Действительно, вблизи дипольных линий обычно достаточно использовать разложения (4.19), (4.20) или (4.21), (4.22), а выражения (4.23) — (4.25) в первую очередь могут встретиться для квадрупольных линий. Вместе с тем нужно подчеркнуть, что сами упомянутые разложения в ряд по \mathbf{k} не являются разложениями по мультиполям. Более того, использование выражений (4.19) — (4.22) вовсе не ограничено областью каких-либо линий. Нужно также иметь в виду, что в произвольной оптически анизотропной среде при произвольном направлении распространения света появление линии поглощения (или полюса $\tilde{n}^2 = n^2$ при пренебрежении поглощением) не связано с резонансным возрастанием компонент $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, как это ясно уже из формул классической кристаллооптики*).

Во введении мы уже указывали на ту роль, которую играет феноменологический подход к кристаллооптике; одним из элементов этого подхода является широкое использование разложений типа (4.19) — (4.22) и других, основанное на слабости пространственной дисперсии (условие (4.18)). В настоящее время вопрос о сочетании феноменологического (макро) и микроскопического путей в физике настолько ясен,

*) Полюс \tilde{n}^2 появляется при условии (2.37), (2.38), но еще проще в сказанном убедиться из хорошо известного выражения для \tilde{n}^2 в случае необыкновенной волны в одноосном кристалле:

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} = \frac{s_x^2 + s_y^2}{\epsilon_z(\omega)} + \frac{s_z^2}{\epsilon_{\perp}(\omega)}.$$

что здесь вряд ли нужны дополнительные комментарии. Поэтому мы не будем останавливаться на доказательстве полной несостоятельности встречающихся в литературе утверждений [55] о «необоснованности феноменологического введения пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости» и имеющем будто бы место «непримиримом противоречии» между результатами феноменологической теории и экспериментальными фактами.

§ 5. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах разных классов

5.1. Введение. Гиротропные кристаллы. Тензоры $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ и, разумеется, фигурирующие в (4.19) — (4.22) тензоры $\epsilon_{ij}(\omega)$, $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega)$, $\gamma_{ijl}(\omega)$, $\delta_{ijl}(\omega)$, $\alpha_{ijlm}(\omega)$ и $\beta_{ijlm}(\omega)$ существенно упрощаются при наличии ряда элементов симметрии. Так, при наличии центра симметрии $\gamma_{ijl} = \delta_{ijl} = 0$ (см. (4.29)), а в изотропной негиротропной среде тензор α_{ijlm} имеет лишь две независимые компоненты, так как (см. (1.48) и (1.52))

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon(\omega) + \alpha_{tr}(\omega)(\delta_{ij} - s_i s_j)k^2 + \alpha_l(\omega)s_i s_j k^2. \quad (5.1)$$

Полагая здесь $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2(\omega)$ и обозначая $\frac{\omega^2}{c^2} \alpha_{tr}(\omega) = \alpha_{\perp}$ и $\frac{\omega^2}{c^2} \alpha_l(\omega) = \alpha_{\parallel}$, из (5.1) и волнового уравнения (2.26) для поперечных и продольных нормальных волн имеем (см. также (1.50))

$$\tilde{n}_{\perp}^2 = \frac{\epsilon(\omega)}{1 + \alpha_{\perp}(\omega)}, \quad \tilde{n}_{\parallel}^2 = \frac{\epsilon(\omega)}{\alpha_{\parallel}(\omega)}. \quad (5.2)$$

Вблизи полюса $\epsilon(\omega)$ в этом случае (изотропная негиротропная среда со слабой пространственной дисперсией) нужно использовать разложение типа (4.21), (4.22), т. е. положить

$$\epsilon_{ij}^{-1} = \epsilon^{-1}(\omega) \delta_{ij} + \beta_{\perp}(\omega) \tilde{n}^2 (\delta_{ij} - s_i s_j) + \beta_{\parallel}(\omega) \tilde{n}^2 s_i s_j. \quad (5.3)$$

При условии $sD = 0$, очевидно,

$$E = \left(\frac{1}{\epsilon} + \beta_{\perp}(\omega) \tilde{n}_{\perp}^2 \right) D$$

и из волнового уравнения (2.26) получаем

$$\beta_{\perp} \tilde{n}_{\perp}^4 + \frac{\tilde{n}_{\perp}^2}{\epsilon} - 1 = 0, \quad n_{\perp}^2 = -\frac{1}{2\beta_{\perp}\epsilon} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2\beta_{\perp}\epsilon}\right)^2 + \frac{1}{\beta_{\perp}}}. \quad (5.4)$$

Об этом решении еще пойдет речь в п. 7.2. Что же касается продольной волны, то из (5.3) для нее получается условие $\epsilon(\omega_{\parallel}) = 0$. Пространственная же дисперсия для продольной волны при использовании разложения (5.3) не учитывается.

Как было отмечено в п. 1.3, связи (5.1) и (5.2) соответствуют самым общим связям между векторами \mathbf{D} и \mathbf{E} в изотропной негиротропной среде при учете производных не выше второго порядка.

Следствия, которые связаны с учетом симметрии кристаллов, в отношении тензоров ϵ_{ij} и γ_{ijl} хорошо известны (см., например, [1, 3, 4, 34]). Тем не менее для удобства напомним соответствующие результаты (свойства симметрии для обратных тензоров, очевидно, такие же, как и для исходных тензоров, и поэтому компоненты обратных тензоров ниже не выписываются).

Симметричный тензор второго ранга, в частности, тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$ имеет максимум шесть независимых компонент. Для характеристической поверхности второго порядка $\epsilon_{ij}x_ix_j = 1$ — это соответствует длине трех осей и трем параметрам (углам), определяющим ориентацию этих осей. Симметрия тензора ϵ_{ij} одинакова для всех кристаллических классов данной кристаллической системы (сингонии).

В этом легко убедиться, определяя ϵ_{ij} для наименее симметричного класса каждой системы. При этом полезно иметь в виду следующий факт, ясный из свойств поверхности второго порядка: в плоскости, перпендикулярной осям 3-го и более высокого порядка, сечение поверхности вырождается в окружность. Поэтому, например, уже для наименее симметричного в кубической системе кристаллического класса T характеристическая поверхность вырождается в сферу, т. е. $\epsilon_{ij} = \epsilon \delta_{ij}$ (кристаллы класса T имеют четыре оси 3-го порядка, соответствующие пространственным диагоналям куба).

В тетрагональной, тригональной (ромбоэдрической) и гексагональной системах, направляя ось z соответственно по осям

4-го, 3-го или 6-го порядков, приводим тензор ϵ_{ij} к виду

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\parallel} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$$

и т. д. (см. табл. II*). В столбце «Главные оси» указаны оси тензора ϵ_{ij} , которые фиксируются симметрией кристалла. Но, разумеется, при вырождении оси тензора 2-го ранга ϵ_{ij} могут быть направлены и иначе. Например, в кубических кристаллах $\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon(\omega)\delta_{ij}$ в любой системе осей.

В силу соотношений (4.28) тензор γ_{ijl} (и δ_{ijl}) обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} \gamma_{xx,l} &= \gamma_{yy,l} = \gamma_{zz,l} = 0, \\ \gamma_{xy,l} &= -\gamma_{yx,l}, \quad \gamma_{yz,l} = -\gamma_{zy,l}, \quad \gamma_{zx,l} = -\gamma_{xz,l} \\ &(l = 1, 2, 3 \equiv x, y, z). \end{aligned}$$

Таким образом, тензоры γ_{ijl} и δ_{ijl} в общем случае имеют девять независимых компонент и их можно записать в виде

$$\gamma_{ijl} = e_{ijm}g'_{ml}, \quad \delta_{ijl} = e_{ijm}f'_{ml}, \quad (5.5)$$

где e_{ijm} — единичный псевдотензор 3-го ранга ($e_{123} = 1$, $e_{213} = -1$, $e_{112} = 0$ и т. д.; при зеркальном отражении e_{ijm} не изменяется) и f'_{ml} и g'_{ml} — псевдотензоры 2-го ранга. Далее можно записать

$$\gamma_{ijl}k_l = e_{ijm}g'_{ml}k_l = e_{ijm}g'_m, \quad \delta_{ijl}k_l = e_{ijm}f'_{ml}k_l = e_{ijm}f'_m, \quad (5.6)$$

где введены псевдовекторы (т. е. аксиальные векторы) \mathbf{g}' и \mathbf{f}' — векторы гирации.

При пренебрежении в (4.19) — (4.22) членами, квадратичными по \mathbf{k} , имеем

$$\left. \begin{aligned} D_i &= \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})E_j = \epsilon_{ij}(\omega)E_j - i[\mathbf{g}'\mathbf{E}]_i, \\ E_i &= \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})D_j = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega)D_j - i[\mathbf{f}'\mathbf{D}]_i. \end{aligned} \right\} \quad (5.7)$$

*) Упрощение тензоров, связанное с симметрией, особенно подробно излагается в книге [34]. Для обозначения кристаллических классов, как уже указывалось, мы пользуемся символами Шенфлиса (соответствие между этими обозначениями и интернациональными см. в приложении I).

Таблица II

Свойства тензора $\varepsilon_{ij}(\omega)$ и псевдотензора $f'_{ij}(\omega)$
 $(\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}, f'_{ij} = f'_{ji}, \delta_{ijl} = e_{ijm} f'_{ml})$

Система	Главные оси	Тензор ε_{ij}	Псевдотензор f'_{ij}
Триклинная	Не фиксированы	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ в классе C_i $\begin{pmatrix} f'_{11} & f'_{12} & f'_{13} \\ f'_{12} & f'_{22} & f'_{23} \\ f'_{13} & f'_{23} & f'_{33} \end{pmatrix}$ в классе C_1
Моноклинная	Ось y направлена по оси 2-го порядка или перпендикулярно плоскости симметрии	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & \varepsilon_{13} \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ \varepsilon_{13} & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ в классе C_{2h} $\begin{pmatrix} f'_{11} & 0 & f'_{13} \\ 0 & f'_{22} & 0 \\ f'_{13} & 0 & f'_{33} \end{pmatrix}$ в классе C_2 $\begin{pmatrix} 0 & f'_{12} & 0 \\ f'_{12} & 0 & f'_{23} \\ 0 & f'_{23} & 0 \end{pmatrix}$ в классе C_s
Ромбическая	Оси x, y, z направлены по осям 2-го порядка, а в классе C_{2v} оси x и y перпендикулярны плоскостям симметрии	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ в классе D_{2h} $\begin{pmatrix} f'_{11} & 0 & 0 \\ 0 & f'_{22} & 0 \\ 0 & 0 & f'_{33} \end{pmatrix}$ в классе D_2 $\begin{pmatrix} 0 & f'_{12} & 0 \\ f'_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ в классе C_{2v}

Продолжение табл. II

Система	Главные оси	Тензор ε_{ij}	Псевдотензор f'_{ij}
Тетрагональная	В классах C_4, S_4 и C_{4h} фиксирована лишь ось z (ось 4-го порядка). В классах D_4, C_{4v}, D_{2d} и D_{4h} фиксированы все оси	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ в классах C_{4h}, C_{4v} и D_{4h} . $\begin{pmatrix} f'_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & f'_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & f'_{\parallel} \end{pmatrix}$ в классах C_4 и D_4 $\begin{pmatrix} f'_{11} & f'_{12} & 0 \\ f'_{12} - f'_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ в классе S_4 $\begin{pmatrix} 0 & f'_{12} & 0 \\ f'_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ в классе D_{2d}
Тригональная	В классах C_3 и C_{3i} фиксирована лишь ось z (ось 3-го порядка). В классах D_3, C_{3v} и D_{3d} фиксированы все оси	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ в классах C_{3i}, C_{3v} и D_{3d} . $\begin{pmatrix} f'_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & f'_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & f'_{\parallel} \end{pmatrix}$ в классах C_3 и D_3
Гексагональная	В классах C_6, C_{3h} и C_{6h} фиксирована лишь ось z (ось 6-го порядка)	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ в классах $C_{3h}, C_{6h}, C_{6v}, D_{3h}, D_{6h}$. $\begin{pmatrix} f'_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & f'_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & f'_{\parallel} \end{pmatrix}$ в классах C_6 и D_6

Продолжение табл. II

Система	Главные оси	Тензор ϵ_{ij}	Псевдотензор f'_{ij}
Кубическая	Фиксированы все оси (оси x, y, z — оси 2-го порядка в классах T и T_h и оси 4-го порядка в классах O, T_d и O_h)	$\begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ в классах T_h, T_d и O_h $\begin{pmatrix} f' & 0 & 0 \\ 0 & f' & 0 \\ 0 & 0 & f' \end{pmatrix}$ в классах T и O
Изотропная среда	Выбор осей произволен	$\begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix}$	$f'_{ij} = 0$ при наличии центра симметрии при отсутствии центра симметрии

Подставляя эти связи в волновое уравнение (2.7), (2.26), можно убедиться (см. § 6), что в этом уравнении играет роль лишь скалярное произведение $f'_{ij}s_i s_j$ или $f'_i s_i$. Поэтому, очевидно, показатели преломления и отношения компонент вектора \mathbf{D} не зависят от антисимметричной части f'_{ij} , т. е. при нахождении \tilde{n}^2 этот тензор можно выбирать в симметричной форме (см. вместе с тем ниже). Для изотропной среды и кубических кристаллов (разумеется, без центра симметрии, так как иначе $g'_{ij} = f'_{ij} = 0$; кроме того, нужно иметь в виду, что тензоры g'_{ij} и f'_{ij} могут быть равны нулю и при отсутствии центра симметрии, как это имеет место, например, для кубических кристаллов класса T_d):

$$\left. \begin{aligned} g'_{ij} &= g' \delta_{ij}, & f'_{ij} &= f' \delta_{ij}, & \mathbf{g}' &= g' \mathbf{s}, & \mathbf{f}' &= f' \mathbf{s}, \\ \mathbf{D} &= \epsilon \mathbf{E} - i g' [\mathbf{sE}], & \mathbf{E} &= \frac{D'}{\epsilon} - i f' [\mathbf{sD}]. \end{aligned} \right\} (5.8)$$

В этом случае не только $\mathbf{sD} = 0$, но при $\mathbf{D} \neq 0$ также и $\mathbf{sE} = 0$. Если же $\mathbf{D} = 0$ и $\mathbf{E} = \mathbf{E}s$ (продольные волны),

то гиротропия оказывается несущественной. Вид симметричного тензора f'_{ij} (или, точнее, симметричной части тензора f'_{ij}) для различных кристаллических классов указан в табл. II.

Из сказанного не следует, что антисимметричные части тензоров g'_{ij} и f'_{ij} не представляют интереса. Эти части (обозначим их через $g'_{ij,a}$ и $f'_{ij,a}$) приводят (см. (5.6)) к псевдовекторам \mathbf{g}'_a и \mathbf{f}'_a , которые имеют вид $[\mathbf{h}\mathbf{k}]$, где \mathbf{h} — некоторый вектор, связанный с кристаллом. Очевидно, такой вектор может существовать только для кристаллов, в которых имеется направление, сохраняющееся (в том числе не меняющееся на обратное) при всех преобразованиях симметрии. Другими словами, вектор \mathbf{h} существует только для пьезоэлектрических кристаллов (классы $C_1, C_s, C_2, C_{2v}, C_4, C_{4v}, C_3, C_{3v}, C_6, C_{6v}$; см., например, [1], § 13). Ст. юда и из табл. II ясно, что для кристаллов классов C_{3v}, C_{4v} и C_{6v} весь тензор f'_{ij} является антисимметричным, но эти кристаллы обычно не относят к числу гиротропных (в табл. II указана только симметричная часть тензора f'_{ij}). Действительно, из (5.7) следует, что вектор \mathbf{f}'_a ведет к появлению

лишь продольной составляющей \mathbf{E} (считаем, что $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{ns}$). Поэтому при решении волнового уравнения для гиротропного кристалла (см., например, § 6) тензор $f'_{ij,a}$, как упоминалось, не вносит никакого вклада в значение показателей преломления и соотношение между компонентами вектора \mathbf{D} . Вместе с тем вектор \mathbf{E} в нормальных волнах, вообще говоря, имеет эллиптическую поляризацию и при $f'_{ij} = f'_{ij,a}$. Однако в этом случае степень эллиптичности пропорциональна k , т. е. речь идет об эффекте порядка a/λ . Итак, при рассмотрении лишь круговой или близкой к ней поляризации кристаллы классов C_{3v}, C_{4v} и C_{6v} являются негиротропными, а для всех других кристаллов тензор f'_{ij} может считаться симметричным.

Так мы и будем поступать ниже (это относится и к табл. II). Кроме того, при рассмотрении эффектов второго порядка по k в дальнейшем будут обычно считаться отсутствующими в (4.19) — (4.22) линейные по k члены, хотя эти члены могут приводить и к эффектам второго порядка.

«Слабая» гиротропия (степень эллиптичности $\sim a/\lambda$), которая в чистом виде должна наблюдаться в кристаллах классов C_{3v} , C_{4v} и C_{6v} (на это ранее указывалось в статье [56]), вместе с тем представляется нам вполне заслуживающей внимания.

5.2. Негиротропные кристаллы. В негиротропных кристаллах для учета пространственной дисперсии нужно рассматривать члены порядка k^2 , т. е. члены $\alpha_{ijklm}(\omega)k_l k_m$ или $\beta_{ijklm}(\omega)k_l k_m$ в разложениях (4.19) — (4.22).

Перейдем к рассмотрению тензоров α_{ijklm} для кристаллов с различной симметрией (симметрия тензора β_{ijklm} такая же, как тензора α_{ijklm}). В силу симметричности тензора по индексам lj и отдельно по индексам l, m (см. (4.28)) в общем случае этот тензор имеет 36 компонент (вместо 81 компоненты у произвольного тензора 4-го ранга). Дальнейшее уменьшение числа независимых компонент связано с конкретным учетом симметрии кристаллов. Общий принцип при этом сводится, как известно, к требованию, чтобы компоненты тензоров (физические величины) оставались неизменными при преобразованиях, допускаемых симметрией кристалла (подробнее см. [34, 57]).

Кристаллы триклинной системы либо не имеют элементов симметрии (класс C_1), либо имеют центр симметрии (класс C_i). Но наличие или отсутствие центра симметрии не накладывает никаких условий на тензор 4-го ранга. Следовательно, в триклинной системе остается 36 независимых коэффициентов α_{ijklm} .

Правда, выбором осей, который в данном случае произволен, можно фиксировать три коэффициента. Нам представляется, однако, более рациональным подсчитывать число независимых компонент без учета возможности свободного выбора осей. При этом достаточно сослаться на пример тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ (или любого другого тензора второго ранга). Число независимых компонент тензора ϵ_{ij} в триклинной, моноклинной и ромбической системах равно соответственно шести, четырем и трем (см. табл. II). В то же время во всех этих случаях в системе главных осей тензор ϵ_{ij} имеет три независимых компоненты. Разница же между кристаллами указанных классов очень большая, поскольку в ромбическом кристалле главные оси фиксированы, а в триклинном кри-

сталле все главные оси нужно находить, что эквивалентно еще трем параметрам. Ниже возможность выбора главных осей указывается (т. е. отмечаются случаи, когда этот выбор не фиксирован на основании соображений, связанных с симметрией кристалла), но при подчете числа независимых компонент это обстоятельство не учитывается*).

В моноклинных кристаллах классов C_2 и C_{2h} имеется ось 2-го порядка, обычно выбираемая за ось y . При повороте вокруг такой оси происходит преобразование координат $x \rightarrow -x$, $z \rightarrow -z$. Компоненты тензоров с нечетной суммой числа индексов x и числа индексов z при преобразовании меняют знак, физически же обе системы координат совершенно равноправны — в этом и состоит смысл утверждения о наличии оси 2-го порядка. Следовательно, соответствующие 16 компонент тензора α_{ijklm} равны нулю:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{xyyy}, \alpha_{zyyy}, \alpha_{yuyx}, \alpha_{yuyz}, \alpha_{xxxy}, \alpha_{yxxx}, \\ \alpha_{zzzy}, \alpha_{yzzz}, \alpha_{zxxy}, \alpha_{xyxz}, \alpha_{xxyz}, \alpha_{yzxx}, \\ \alpha_{zxzy}, \alpha_{zyzx}, \alpha_{zzxy}, \alpha_{xyzz} \end{aligned} \right\} = 0. \quad (5.9)$$

Класс C_s имеет только плоскость симметрии, перпендикулярную оси y , и в силу симметрии должны исчезать компоненты α_{ijklm} с нечетным числом индексов y . Это требование приводит к тому же результату, что и для классов C_2 и C_{2h} . Таким образом, в моноклинных кристаллах тензор α_{ijklm} имеет 20 независимых компонент. В кристаллах моноклинной системы свойства симметрии фиксируют лишь одну главную ось (ось y) и выбором других осей можно уменьшить число компонент тензора α_{ijklm} на единицу.

Классы D_2 и D_{2h} ромбической системы имеют три оси 2-го порядка. Легко видеть, что в этом случае отличны от нуля следующие 12 компонент с четным числом каждого из индексов x, y и z (оси x, y, z — оси 2-го порядка):

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{xxxx}, \alpha_{xxyy}, \alpha_{xxzz}, \alpha_{yyxx}, \alpha_{zzxx}, \alpha_{xuyy}, \\ \alpha_{xxzz}, \alpha_{yuyy}, \alpha_{yuyz}, \alpha_{zyyy}, \alpha_{yzyz}, \alpha_{zzzz} \end{aligned} \right\} \quad (5.10)$$

(кроме того, конечно, $\alpha_{xuyy} = \alpha_{yxyx} = \alpha_{xyyy}$ и т. д.).

*) В [57] при подчете числа независимых компонент тензора модулей упругости возможность выбора осей учитывается. Этим и объясняются различия между числами независимых компонент в [57] и [34].

Третий класс ромбической системы — класс C_{2v} имеет одну ось 2-го порядка (ось z) и две проходящие через нее взаимно перпендикулярные плоскости симметрии. Отражение в этих плоскостях, т. е. преобразования $x \rightarrow -x$ или $y \rightarrow -y$ оставляют неизменными только компоненты тензора с четным числом индексов x и одновременно четным числом индексов y . Но отсюда для тензора 4-го ранга вытекает требование о четности числа индексов z , т. е. опять приходим к схеме (5.10). Итак, кристаллы ромбической системы имеют 12 независимых компонент α_{ijlm} .

Для классов D_4 , C_{4v} , D_{2d} и D_{4h} тетрагональной системы, помимо элементов симметрии, отвечающих одному из классов ромбической системы, ось z является поворотной или зеркально-поворотной осью 4-го порядка. При повороте на угол $\pi/2$ вокруг этой оси компоненты тензора (физические свойства) не должны изменяться, и в то же время происходит преобразование $x \rightarrow y$, $y \rightarrow -x$. Отсюда следует, что некоторые из коэффициентов (5.10) равны между собой, и независимы только семь из них (остальные α_{ijlm} , кроме получающихся в силу условий $\alpha_{ijlm} = \alpha_{jilm} = \alpha_{ijml}$, в выбранной системе отсчета равны нулю):

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{xxxx} &= \alpha_{yyyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xxyy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz}, \\ \alpha_{zzxx} &= \alpha_{zzyy}, \alpha_{xzzz} = \alpha_{yzyz}, \alpha_{xyxy} \end{aligned} \right\} (5.11)$$

Для классов C_4 , S_4 и C_{4h} тетрагональной системы, имеющих только поворотную или зеркально-поворотную ось 4-го порядка (а также перпендикулярную ей плоскость симметрии в случае класса C_{4h}), исходить из (5.10) нельзя. Так же как это проиллюстрировано выше, приходим к выводу, что для этих классов, помимо коэффициентов (5.11), отличны от нуля коэффициенты

$$\alpha_{xyxx} = -\alpha_{xyyy}, \alpha_{xxxx} = -\alpha_{yyyy}, \alpha_{xzyz} = -\alpha_{yzxz}. (5.12)$$

Таким образом, для классов C_4 , S_4 и C_{4h} имеется десять независимых компонент. Вместе с тем для этих классов симметрия кристалла выделяет лишь ось z , и таким образом, имеется одна степень свободы в выборе координатной системы.

Кристаллические классы кубической системы не имеют отличных от нуля компонент, кроме тех, которые имеются

для ромбических кристаллов (см. (5.10))*). Число независимых компонент, однако, сильно уменьшается. Так, уж наличие четырех осей 3-го порядка, имеющихся для всех классов кубической системы (пространственные диагонали куба), приводит к эквивалентности всех компонент тензора при замене $xuz \rightarrow yzx \rightarrow zxy$. Поэтому остаются только четыре независимые компоненты:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy} = \alpha_{zzzz}, & \alpha_2 &= \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyxx} = \alpha_{zzyy}, \\ \alpha_3 &= \alpha_{xyxy} = \alpha_{yzyz} = \alpha_{zxzx}, & \alpha_4 &= \alpha_{zzxx} = \alpha_{xxyy} = \alpha_{yyzz}. \end{aligned} \right\} (5.13)$$

Для классов T и T_h дальнейших упрощений не возникает. В классах T_d , O и O_h , кроме того,

$$\alpha_2 = \alpha_4 \text{ (классы } T_d, O, O_h). (5.14)$$

Равенство (5.14) сразу очевидно из (5.13), если учесть, что оси куба xuz являются зеркально-поворотными (класс T_d) или поворотными (классы O и O_h) осями 4-го порядка.

В изотропной среде, как ясно из (5.1), имеются только две независимые компоненты α_{ijlm} . В тензорной записи для произвольной декартовой системы координат:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{xxxx} &= \alpha_{yyyy} = \alpha_{zzzz} = \alpha_1 \equiv \alpha_1(\omega), \\ \alpha_{xxyy} &= \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyxx} = \alpha_{yyzz} = \alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy} = \\ &= \alpha_2 = \alpha_4 \equiv \alpha_{tr}(\omega), \\ \alpha_{xyxy} &= \alpha_{xzzz} = \alpha_{yzyz} = \alpha_3 = \alpha_1 - \alpha_2 \equiv \alpha_l - \alpha_{tr}. \end{aligned} \right\} (5.15)$$

Отличие от кубических кристаллов классов T_d , O и O_h состоит, очевидно, только в существовании связи $\alpha_3 = \alpha_1 - \alpha_2$.

В кристаллах триклинной и гексагональной систем учет свойств симметрии требует простых аналитических преобразований, проводить которые мы здесь не будем (такие преобразования в применении к некоторым другим тензо-

*) Сделанное утверждение связано с тем, что все классы кубической системы имеют (в числе прочих) элементы симметрии, по крайней мере одного из классов ромбической системы (см., например, табл. 21 в [34]). Напомним также, что оси x , y , z для всех классов кубической системы фиксируются (оси 2-го порядка для классов T , T_h и T_d ; оси 4-го порядка для классов O и O_h).

рам см., например, в [34, 57]). В этом тем более нет необходимости, что свойства симметрии тензора α_{ijklm} (включая и приведенные выше) фактически могут считаться известными из литературы. Дело в том, что симметрия тензора α_{ijklm} такая же, как давно используемого тензора пьезооптических коэффициентов π_{ijklm} , связывающего изменение ϵ_{ij}^{-1} с тензором напряжений σ_{lm} (таким образом, $\delta\epsilon_{ij}^{-1} = \pi_{ijklm}\sigma_{lm}$; см. [34]). Совершенно такой же, естественно, является также симметрия тензора упругооптических коэффициентов p_{ijklm} (здесь $\delta\epsilon_{ij}^{-1} = p_{ijklm}u_{lm}$, где u_{lm} — тензор деформаций). Поэтому свойства симметрии тензора α_{ijklm} для тригональной и гексагональной систем мы возьмем из [34] (см. табл. 15 в [34]). Это не было сделано для других систем в связи с простой вывода и желанием подчеркнуть некоторые моменты. Сводка всех значений α_{ijklm} приведена в табл. III.

Ниже мы не будем одновременно учитывать члены 1-го и 2-го порядка по \mathbf{k} в соответствии с уже сделанным замечанием о малости пространственной дисперсии. Поэтому нас будут интересовать не общие выражения (4.19) — (4.22), а выражения (5.7) для гиротропной среды и нижеследующие выражения для негиротропной среды:

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \alpha_{ijklm}(\omega) \tilde{n}^2 s_l s_m, \quad (5.16)$$

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \beta_{ijklm}(\omega) \tilde{n}^2 s_l s_m. \quad (5.17)$$

Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, разумеется, всегда можно привести к диагональному виду, выбирая соответствующие (главные) оси *). Направление этих осей при произвольном \mathbf{s} не совпадает ни с \mathbf{s} , ни с осями тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$; в тех случаях, когда оси тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ фиксированы (т. е. при отсутствии вырождения, имеющего место в кубических и одноосных кристаллах), оси тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ близки к осям $\epsilon_{ij}(\omega)$ в связи с малостью зависящих от \mathbf{s} членов в (5.16), (5.17).

*) Если тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ не эрмитов, то нужно независимо рассматривать ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} , причем главные оси (точнее, собственные векторы, которые в общем случае комплексны) этих тензоров могут не совпадать. Если не оговорено противное, мы в тексте для краткости имеем в виду только тензор ϵ_{ij} , считая его вещественным.

Таблица III

Свойства тензора α_{ijklm} ($\alpha_{ijklm} = \alpha_{jilm} = \alpha_{ijml}$)

Система	Компоненты α_{ijklm} *)
Триклинная	Отличны от нуля все 36 компонент α_{ijklm}
Моноклинная	Отличны от нуля 20 компонент (компоненты $\alpha_{xyyy}, \alpha_{zyyy}, \alpha_{yuyx}, \alpha_{yuyz}, \alpha_{xxxy}, \alpha_{yxxy}, \alpha_{zzzy}, \alpha_{yzzz}, \alpha_{xzxz}, \alpha_{xyxz}, \alpha_{xxyx}, \alpha_{yzzx}, \alpha_{zyzx}, \alpha_{zzxy}, \alpha_{xyzz}$ равны нулю)
Ромбическая	Отличны от нуля 12 независимых компонент: $\alpha_{xxxx}, \alpha_{yyyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xxyy}, \alpha_{xxzz}, \alpha_{yyxx}, \alpha_{zzxx}, \alpha_{xyxy}, \alpha_{xzxz}, \alpha_{yuyz}, \alpha_{zyyz}, \alpha_{yzyz}$
Тетрагональная	В классах C_4, C_{4v}, D_{2d} и D_{4h} отличны от нуля 7 независимых компонент: $\alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xxyy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yzzz}, \alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy}, \alpha_{xzzz} = \alpha_{yzzz}, \alpha_{xyxy}.$ В классах C_4, C_{4h}, S_4 отличны от нуля еще три независимые компоненты: $\alpha_{xyxx} = -\alpha_{xyyy}, \alpha_{xxxy} = -\alpha_{yuyx}, \alpha_{xzyz} = -\alpha_{yzzz}$
Тригональная	В классах C_3 и C_{3i} имеется 12 независимых компонент: $\alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy}, \alpha_{xxyy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yzzz}, \alpha_{xxyz} = \alpha_{xyxz} = -\alpha_{yuyz}, \alpha_{xxxy} = -\alpha_{yuyx} = \alpha_{xyyy} = -\alpha_{xyxx}, \alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{yzxx} = -\alpha_{yzyy} = \alpha_{xzxy}, \alpha_{xzxx} = -\alpha_{xzyy} = -\alpha_{yzxy}, \alpha_{yzyz} = \alpha_{xzxz}, \alpha_{yzzz} = -\alpha_{xzyz}$ кроме того, $\alpha_{xyxy} = \alpha_{xxxx} - \alpha_{xxyy}.$ В классах D_3, C_{3v} и D_{3d} , кроме того, $\alpha_{xxxz} = \alpha_{xxyy} = \alpha_{yzzz} = \alpha_{xzxx} = 0$

Продолжение табл. III

Система	Компоненты α_{ijlm} *)
Гексагональная	<p>В классах C_6, C_{3h} и C_{6h} имеется 8 независимых компонент (все не перечисленные компоненты равны нулю):</p> $\alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy}, \alpha_{xxyy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz},$ $\alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xyyy} = \alpha_{xxyy} = -\alpha_{yyxy} =$ $= -\alpha_{yxxy}, \alpha_{yzyz} = \alpha_{zzyz}, \alpha_{yzxz} = -\alpha_{xzyz};$ <p>кроме того, $\alpha_{xyxy} = \alpha_{xxxx} - \alpha_{xyyy}$.</p> <p>В классах D_6, C_{6v}, D_{3h} и D_{6h}, кроме того, $\alpha_{xxyy} = \alpha_{yyzz} = 0$ (равны нулю и другие компоненты, связанные с указанными в силу приведенных выше соотношений)</p>
Кубическая	<p>В классах T и T_h отличны от нуля 4 независимые компоненты:</p> $\alpha_1 = \alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy} = \alpha_{zzzz}, \alpha_2 = \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyxx} =$ $= \alpha_{zzyy}, \alpha_3 = \alpha_{xyxy} = \alpha_{yzyz} = \alpha_{zxxz},$ $\alpha_4 = \alpha_{zzxx} = \alpha_{xyyy} = \alpha_{yyzz}.$ <p>Для классов O, T_d и O_h, кроме того, $\alpha_2 = \alpha_4$</p>
Изотропная среда	<p>Отличны от нуля те же компоненты, что и в кубической системе, но помимо $\alpha_2 = \alpha_4$ еще $\alpha_3 = \alpha_1 - \alpha_2$ (всего, таким образом, имеется 2 независимые компоненты)</p>

*) Кроме указанных компонент, отличны от нуля компоненты, получающиеся в силу условий $\alpha_{ijlm} = \alpha_{jilm} = \alpha_{ijml}$. Возможность фиксации осей в таблице не учитывается; см. текст и табл. II.

В кристаллооптике с пространственной дисперсией, естественно, представляют большой интерес те главные оси $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, направление которых совпадает с \mathbf{s} . Для ромбических кристаллов такими осями являются оси x , y , z (см. (5.10) и табл. III). Если, например, вектор \mathbf{s} направлен по оси x , то главные значения тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ равны

$$\epsilon_1 \equiv \epsilon_{xx}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{xx}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_{xxxx},$$

$$\epsilon_2 \equiv \epsilon_{yy}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{yy}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_{yyxx},$$

$$\epsilon_3 \equiv \epsilon_{zz}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{zz}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_{zzxx}.$$

В тетрагональных кристаллах классов D_4 , C_{4v} , D_{2d} и D_{4h} для вектора \mathbf{s} , направленного по осям x и y , тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ оказывается приведенным к главным осям, причем главные значения различны. Если же вектор \mathbf{s} направлен по оси z (по оси 4-го порядка), то

$$\left\{ \begin{aligned} \epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_{\perp}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_{xxzz}, \quad \epsilon_3 = \epsilon_{\parallel}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_{zzzz}. \end{aligned} \right.$$

Не останавливаясь на кристаллах других систем, перейдем к кубическим кристаллам. В этом случае (см. табл. III)

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \epsilon + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \{ \alpha_1 s_x^2 + \alpha_4 s_y^2 + \alpha_2 s_z^2 \}, \\ \epsilon_{xy} &= 2 \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_3 s_x s_y, \\ \epsilon_{yy} &= \epsilon + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \{ \alpha_2 s_x^2 + \alpha_1 s_y^2 + \alpha_4 s_z^2 \}, \\ \epsilon_{xz} &= 2 \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_3 s_x s_z, \\ \epsilon_{zz} &= \epsilon + \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \{ \alpha_4 s_x^2 + \alpha_2 s_y^2 + \alpha_1 s_z^2 \}, \\ \epsilon_{yz} &= 2 \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n}\right)^2 \alpha_3 s_y s_z \end{aligned} \right\} \quad (5.18)$$

(для классов O , T_d и O_h , кроме того, $\alpha_2 = \alpha_4$; двойка в выражениях для ϵ_{xy} , ϵ_{xz} и ϵ_{yz} появляется в связи с суммированием в (5.16) членов, пропорциональных $s_x s_y$ и $s_y s_x$). Отсюда

очевидно, что оси куба x, y, z являются главными осями тензора, если вектор \mathbf{s} направлен по любой из осей x, y, z . При этом соответствующая поверхность 2-го порядка при $\alpha_2 = \alpha_4$ вырождается в поверхность (эллипсоид или гиперболоид) вращения. Если вектор \mathbf{s} направлен по пространственным диагоналям куба ($|s_x| = |s_y| = |s_z| = \frac{1}{\sqrt{3}}$), то

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} &= \epsilon + \frac{1}{3} \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n} \right)^2 (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_4) \\ |\epsilon_{xy}| = |\epsilon_{xz}| = |\epsilon_{yz}| &= 2 \left(\frac{\omega}{c} \tilde{n} \right)^2 \frac{\alpha_3}{3}. \end{aligned} \right\} (5.19)$$

ГЛАВА III

КРИСТАЛЛООПТИКА С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ

§ 6. Гиротропные кристаллы

6.1. Введение. Задача кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии, как уже указывалось выше, состоит в изучении распространения, отражения и преломления различных нормальных волн в кристаллах на основе использования тензора $\epsilon_{ij}(\omega, k)$.

Формально говоря, объем исследования здесь шире, чем в случае классической кристаллооптики, поскольку появляется ряд новых проблем и вопросов (например, возникает необходимость исследовать оптическую анизотропию кубических кристаллов). Фактически, однако, положение иное, в первую очередь в связи с малостью пространственной дисперсии. По последней причине представляет интерес рассматривать лишь задачи, в которых пространственная дисперсия приводит к качественно новым эффектам или, во всяком случае, не обусловливает появления лишь ничтожных поправок к формулам классической кристаллооптики. В соответствии со сказанным ниже следующее изложение ряда вопросов носит фрагментарный характер и сводится в основном к обсуждению тех известных нам явлений, для анализа которых учет пространственной дисперсии оказывается существенным.

При этом нужно иметь в виду также следующие обстоятельства. Во-первых, феноменологическое рассмотрение естественной оптической активности (гиротропии), хотя и относится к области кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии, проводится уже давно и детально освещено в соответствующих монографиях (см. в особенности [2, 3, 4]).

Поэтому в отношении гиротропных кристаллов мы остановимся только на вопросе о дисперсии оптической активности [54, 58, 59], а также на вопросе о новых волнах, который в применении как к гиротропным, так и к негиротропным кристаллам, насколько нам известно, стал подробно обсуждаться лишь в последнее время [5, 15]. Во-вторых, даже без учета пространственной дисперсии (в том числе и гиротропии) анализ распространения света в поглощающих кристаллах, особенно в случае низкой симметрии, оказывается весьма громоздким [3, 4]. Кроме того, здесь имеются особые случаи. К их числу относится распространение света вдоль сингулярных оптических осей (см. п. 2.3 и [4, 35, 36]), когда нельзя ограничиться рассмотрением плоских волн типа (2.2). Что же касается роли пространственной дисперсии, то ее подробное обсуждение для поглощающих кристаллов и вообще при комплексном \mathbf{k} ранее не производилось. Исследование отдельных вопросов этой обширной проблемы проводится в §§ 10 и 14.

Наконец, в-третьих, нужно подчеркнуть, что учету пространственной дисперсии в негиротропной среде (или, точнее, учету эффектов 2-го порядка, пропорциональных $(a/\lambda)^2$) в применении к оптике кристаллов даже для прозрачной или почти прозрачной среды посвящено еще сравнительно небольшое число работ. В этой связи можно думать, что далеко не все интересные моменты, возникающие в кристаллооптике с учетом пространственной дисперсии, уже замечены и обсуждены. Таким образом, сравнительно узкие рамки, которыми ограничивается изложение кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии, связаны не только с малостью такой дисперсии, но и с современным состоянием исследований в этой области.

6.2. Нормальные волны в гиротропных кристаллах.

Как уже указывалось ранее, в гиротропных кристаллах пространственная дисперсия проявляется в членах 1-го порядка малости по a/λ . Поэтому в разложениях тензоров $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ в ряд по степеням волнового вектора в первом

приближении можно опустить слагаемые, квадратичные по степеням отношения a/λ . Имея в виду в дальнейшем исследовать распространение волн в окрестности полосы поглощения, будем использовать разложения для обратного тензора диэлек-

трической проницаемости. При этом роль квадратичных по a/λ слагаемых, а также особенности распространения нормальных волн в окрестности частот, где разложение (6.1) неприменимо (область продольных волн см. п. 2.2), должны быть рассмотрены особо. Итак, в соответствии со сказанным, воспользуемся следующим разложением:

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + i\tilde{n} \frac{\omega}{c} \delta_{ij} s_i. \quad (6.1)$$

В рассматриваемой области спектра, как это следует из анализа, проведенного в п. 2.2, в нормальных волнах вектор индукции $\mathbf{D} \neq 0$. Поэтому исследование дисперсии этих волн удобно проводить в такой системе координат, где ось z направлена вдоль \mathbf{s} , а для вектора индукции, в силу условия $(\mathbf{sD}) = 0$, имеет место равенство $D_3 \equiv D_z = 0$. В этой системе координат уравнения, которым удовлетворяют отличные от нуля компоненты вектора индукции (см. (2.26), (2.45), (6.1)), имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \epsilon_{xx}^{-1}(\omega) \right) D_x - \epsilon_{xy}^{-1}(\omega) D_y &= i\tilde{n} \delta_{123} \frac{\omega}{c} D_y, \\ -\epsilon_{xy}^{-1}(\omega) D_x + \left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \epsilon_{yy}^{-1}(\omega) \right) D_y &= -i\tilde{n} \delta_{123} \frac{\omega}{c} D_x \end{aligned} \right\} (6.2)$$

(здесь можно, конечно, заменить δ_{123} на $f_{33} = f_{33} s_3^2$, или, при инвариантной записи, на $f_{ij} s_i s_j$). Направления осей x и y выберем вдоль главных осей двумерного тензора $\epsilon_{\alpha\beta}^{-1}(\alpha, \beta = x, y)$ и обозначим главные значения этого тензора через $\frac{1}{n_{01}^2}$ и $\frac{1}{n_{02}^2}$ *). Тогда уравнения (6.2) упрощаются и принимают следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{1}{n_{01}^2} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \right) D_x + i\delta_{123} \tilde{n} \frac{\omega}{c} D_y &= 0, \\ -i\delta_{123} \tilde{n} \frac{\omega}{c} D_x + \left(\frac{1}{n_{02}^2} - \frac{1}{\tilde{n}^2} \right) D_y &= 0. \end{aligned} \right\} (6.3)$$

*) При этом, как это ясно из сказанного, предполагается, что рассматриваемый тензор может быть приведен к диагональному виду. Кроме того, для простоты записи опускаем тильду над $n_{01, 2}$, хотя в общем случае $n_{01, 2}$ представляет собой комплексную величину $\tilde{n}_{01, 2}$.

Условие равенства нулю определителя этой системы дает уравнение 3-го порядка относительно \tilde{n}^2 :

$$\left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \frac{1}{n_{01}^2}\right) \left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \frac{1}{n_{02}^2}\right) = \delta_{123}^2 \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2. \quad (6.4)$$

Если в уравнении (6.3) положить $\delta_{123} = 0$, то решения этого уравнения $\tilde{n}_{1,2}^2 = n_{01,2}^2$ являются решениями уравнения Френеля (2.22) с $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(\omega)$, которое, таким образом, в используемой системе координат оказывается особенно простым. Если же $\delta_{123} \neq 0$, то корни уравнения (6.4) для заданного направления \mathbf{s} определяют уже не два, а три значения коэффициента преломления: $\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3$ (всегда из двух значений $\pm \sqrt{\tilde{n}^2}$ выбираем то, которое соответствует затуханию волны в направлении распространения энергии, причем выбор значения \tilde{n} с другим знаком отвечает просто изменению знака \mathbf{s}).

При исследовании уравнения (6.4) будем различать области частот, далеких и близких к резонансу. В области частот, достаточно удаленных от резонанса, правая часть уравнения (6.4) мала. Поэтому для одного из корней (например, \tilde{n}_3) величина $\text{Re } \tilde{n}_3 = n_3$ будет очень большой

$$n_3^2 \approx \frac{c^2}{\omega^2 \delta_{123}^2 n_{01}^2 n_{02}^2} \gg 1.$$

Действительно, поскольку $\delta_{123} \sim a \sim 10^{-3} \lambda_0$, в рассматриваемой области частот, где значения n_{01}, n_{02} порядка единицы, n_3 оказывается порядка 10^3 , и соответствующая длина волны в среде $\lambda = \frac{\lambda_0}{n_3} \sim 10^{-7} \div 10^{-8}$ см. Это означает, что в кристаллах в оптическом диапазоне частот волны с коэффициентом преломления \tilde{n}_3 , вообще говоря, не могут рассматриваться на основе использования тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Поэтому соответствующим решениям не следует придавать реального значения. Что же касается корней \tilde{n}_1, \tilde{n}_2 , то для их определения можно в правой части (6.4) величину \tilde{n}^2 с достаточной степенью точности заменить на n_{01}^2 , если рассматриваемый корень уравнения (6.4) близок к n_{01}^2 , и на n_{02}^2 , если этот корень близок к n_{02}^2 . Вычислим, например, поправку к корню n_{01}^2 .

Предполагая, что эта поправка $\Delta \tilde{n}_1^2$ значительно меньше величины $|n_{01}^2 - n_{02}^2| \sim 1$, будем искать ее в виде

$$\tilde{n}_1^2 = n_{01}^2 + \Delta \tilde{n}_1^2. \quad (6.5)$$

Подставляя это соотношение в (6.4), находим, что

$$\Delta \tilde{n}_1^2 = \delta_{123}^2 \frac{\omega^2}{c^2} \frac{n_{01}^8}{n_{01}^2 - n_{02}^2} n_{02}^2. \quad (6.6a)$$

Аналогично можно показать, что поправка

$$\Delta \tilde{n}_2^2 = \delta_{123}^2 \frac{\omega^2}{c^2} \frac{n_{02}^8}{n_{02}^2 - n_{01}^2} n_{01}^2. \quad (6.6b)$$

Таким образом, в рассматриваемом случае изменение коэффициентов преломления, вызванное наличием гиротропии, оказывается порядка $(a/\lambda)^2$. Однако изменения такого же порядка величины возникают при учете в разложении для тензоров $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ или $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ слагаемых, квадратичных по волновому вектору. Поскольку эффекты 2-го порядка по $(a/\lambda)^2$ очень малы, экспериментальное изучение гиротропии в рассматриваемом случае больших $|n_{01}^2 - n_{02}^2|$ оказывается, вообще говоря, затрудненным. Однако если мы интересуемся не изменением \tilde{n}^2 , а поляризацией нормальных волн, ситуация изменяется. Дело в том, что при $\delta_{123} = 0$ нормальные волны являются линейно поляризованными, тогда как при $\delta_{123} \neq 0$ они становятся эллиптически поляризованными, причем отношение меньшей оси эллипса к большей оказывается уже порядка (a/λ) . Действительно, рассмотрим, например, распространение волны с $\tilde{n}^2 = \tilde{n}_1^2$. В этой волне, как это следует из (6.3),

$$D_y^{(1)} = \rho_1 D_x^{(1)}, \quad (6.7a)$$

где

$$\rho_1 = \delta_{123} \frac{\omega}{c} n_{01}^3 n_{02}^2 \frac{1}{n_{01}^2 - n_{02}^2}. \quad (6.7b)$$

Аналогично в волне с $\tilde{n}^2 = \tilde{n}_2^2$

$$D_y^{(2)} = -i \frac{1}{\rho_2} D_x^{(2)}, \quad (6.8a)$$

где

$$\rho_2 = \delta_{123} \frac{\omega}{c} n_{02}^3 n_{01}^2 \frac{1}{n_{01}^2 - n_{02}^2}. \quad (6.8б)$$

Из соотношений (6.7a) и (6.8a), таким образом, действительно следует, что нормальные волны, если пренебречь поглощением*), оказываются поляризованными по эллипсам, главные оси которых совпадают с осями x и y . Эти эллипсы повернуты друг относительно друга на 90° , а направления вращения в них противоположны. Величины $\rho_{1,2} \sim a/\lambda_0$ определяют отношение полуосей эллипсов. Из соотношений (6.7б) и (6.8б) следует, что

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{n_{01}}{n_{02}} \neq 1, \quad (6.9)$$

т. е. в эллипсах отношения полуосей несколько различаются. Используя теперь (6.7a) и (6.8a), находим, что

$$(D^{(1)} D^{*(2)}) = D_x^{(1)} D_x^{*(2)} + D_y^{(1)} D_y^{*(2)} = \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2^*}\right) D_x^{(1)} D_x^{*(2)} \neq 0. \quad (6.10)$$

Таким образом, в рассматриваемых нормальных волнах векторы индукции $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ при учете гиротронии, вообще говоря, перестают быть ортогональными. Это обстоятельство является следствием более общего заключения, которое было сделано в п. 3.2 и состояло в том, что при учете пространственной дисперсии векторы индукции в нормальных электромагнитных волнах в среде перестают быть ортогональными друг другу.

*) При наличии поглощения величины n_{01} , n_{02} и δ_{123} являются комплексными. Поэтому при учете поглощения параметры $\rho_{1,2}$ также комплексны, что приводит к повороту главных осей эллипсов относительно направлений x и y .

Исключение, в этом смысле, составляет случай, когда вектор \mathbf{s} направлен вдоль оптической оси и $n_{01} = n_{02} \equiv n_0$. При этом

$$\tilde{n}_{1,2}^2 = n_0^2 \pm \frac{\omega}{c} \delta_{123} n_0^5, \quad (6.11a)$$

$$D_y^{(1)} = i D_x^{(1)}, \quad (6.11б)$$

$$D_y^{(2)} = -i D_x^{(2)}, \quad (6.11в)$$

так что эллипсы вырождаются в окружности, а векторы индукции $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ остаются ортогональными:

$$D_x^{(1)} D_x^{*(2)} + D_y^{(1)} D_y^{*(2)} = 0.$$

До сих пор мы рассматривали скалярное произведение вида $(D^{(1)} D^{*(2)})$. В п. 3.2 указывалось, что если не учитывать пространственную дисперсию, то обращается в нуль при $n_{01} \neq n_{02}$ также произведение вида $(D^{(1)} D^{(2)})$. Используя соотношения (6.7a) и (6.8a), а также (6.11б) и (6.11в), легко убедиться, что в гиротропной среде, независимо от направления распространения света,

$$(D^{(1)} D^{(2)}) = D_x^{(1)} D_x^{(2)} + D_y^{(1)} D_y^{(2)} = \left(1 + \frac{\rho_1}{\rho_2}\right) D_x^{(1)} D_x^{(2)} \neq 0 \quad (6.10a)$$

(если вектор \mathbf{s} направлен вдоль оптической оси, то $\rho_1 = \rho_2 = 1$; см. (6.11б) и (6.11в)). Таким образом, в указанном смысле ортогональность векторов $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ при учете пространственной дисперсии нарушается. Все сделанные здесь заключения, разумеется, следуют также и из соотношений (3.54) и (3.56). Действительно, используя выражение (6.1), находим, что, с точностью до слагаемых порядка a/λ ,

$$\epsilon_{ij}^{-1} \left(\omega, \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 \mathbf{s} \right) - \epsilon_{ij}^{-1} \left(\omega, -\frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 \mathbf{s} \right) = i \delta_{ijl} s_l \frac{\omega}{c} (n_{01} + n_{02}),$$

$$\epsilon_{ij}^{-1} \left(\omega, \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 \mathbf{s} \right) - \left[\epsilon_{ij}^{-1} \left(\omega, \frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 \mathbf{s} \right) \right]^* = i \delta_{ijl} s_l \frac{\omega}{c} (n_{01} - n_{02}).$$

Подставляя теперь эти выражения в формулы (3.54) и (3.56), видим, что $(D^{(1)} D^{(2)}) \neq 0$ независимо от направления \mathbf{s} . Что же касается скалярного произведения $(D^{(1)} D^{*(2)})$, то это произведение, в согласии с ранее изложенным, обращается в нуль только при $n_{01} = n_{02}$.

Согласно (6.11а) при распространении света вдоль оптической оси изменения коэффициентов преломления света оказываются порядка a/λ_0 , причем угол вращения плоскости поляризации φ_l при прохождении пути l определяется выражением

$$\varphi_l = \frac{\pi}{\lambda_0} (\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2) l = \frac{\omega^2}{2c^2} n_0^4 \delta_{123} l. \quad (6.12)$$

Не следует забывать, что это выражение получено в предположении $\frac{\omega}{c} |\delta_{123}| n_0^3 \ll 1$.

Результаты, относящиеся к тому случаю, когда можно принимать во внимание только два корня \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 уравнения (6.4), за исключением, возможно, вопроса об неортогональности решений $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ (см. (6.9) и (6.10)), хорошо известны, и мы их здесь коснулись только для того, чтобы подчеркнуть границы применимости этих результатов, а также с целью сопоставить с более сложной ситуацией, которая может иметь место вблизи резонансов.

Заметим, что, вообще говоря, может представить интерес также гиротропия, обусловленная слагаемыми порядка $(a/\lambda)^3$. Именно, речь идет об использовании разложения

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega) k_l + \\ + \alpha_{ijklm}(\omega) k_l k_m + i\gamma_{ijklmn}(\omega) k_l k_m k_n + \dots$$

с учетом последнего члена (ср. (4.19)). Для некоторых кристаллов, несмотря на отсутствие центра симметрии, тензор $\gamma_{ijl}(\omega) = 0$, на что мы уже ранее указывали. В подобных случаях все вращение плоскости поляризации определяется членом $\gamma_{ijklmn}(\omega) k_l k_m k_n$, т. е. членом порядка $(a/\lambda)^3$. Кроме того, вблизи квадрупольных линий коэффициенты $\gamma_{ijl}(\omega)$ не являются резонансными, тогда как коэффициенты $\gamma_{ijklmn}(\omega)$ могут резонансным образом зависеть от ω . В этом случае роль членов порядка $(a/\lambda)^3$, очевидно, возрастает (подробнее см. [137]).

6.3. Новая волна вблизи линии поглощения в гиротропной среде. Вблизи резонансов в определенной области частот значения n_{01}^2 и n_{02}^2 (или одно из них) могут стать сравнительно большими, так что правую часть в (6.4) сле-

дует при нахождении корней этого уравнения вычислять более точно. В частности, может оказаться, что всем трем корням уравнения (6.4) отвечают относительно большие длины волн, так что все три решения (как это было отмечено в работе [5]) могут быть рассмотрены в рамках макроскопического подхода. Обсудим этот случай более подробно и предположим сначала, что поглощение отсутствует, так что n_{01}^2 , n_{02}^2 и δ_{123} имеют вещественные значения. Тогда уравнение (6.4) становится уравнением 3-го порядка с вещественными коэффициентами и в зависимости от частоты оно имеет либо три вещественных, либо один вещественный и два комплексно сопряженных корня. Для определенности будем считать, что $\delta_{123} > 0$ и волна распространяется вдоль оптической оси, т. е. $n_{01} = n_{02} = n_0$. Ограничим рассмотрение окрестностью одного какого-либо резонанса $\omega \approx \omega_l$ и положим, что в этой области частот, т. е. при $|\omega - \omega_l| \ll \omega_l$,

$$n_0^2(\omega) = \epsilon_0(\omega) = \epsilon_{00} - \frac{2A\omega_l^2}{\omega^2 - \omega_l^2} \approx \epsilon_{00} - \frac{A}{\xi}, \quad (6.13)$$

где $\xi = (\omega - \omega_l)/\omega_l$, $A = \frac{2\pi e^2 N_{\text{эфф}}}{m\omega_l^2}$. Здесь e и m — заряд и масса свободного электрона, $N_{\text{эфф}}/N$ — сила осциллятора, где N — полное число электронов в единице объема, а $N_{\text{эфф}}$ — та часть этих электронов, которая «эффективно» определяет оптические свойства среды в рассматриваемой области спектра. Для этого случая ход кривых $n^2(\xi)$ ($\xi = (\omega - \omega_l)/\omega_l$),

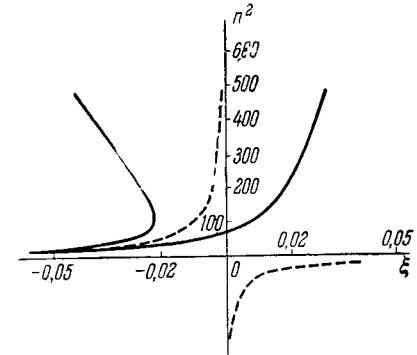


Рис. 3. Зависимость n^2 от $\xi = (\omega - \omega_l)/\omega_l$ в окрестности частоты $\omega = \omega_l$ в гиротропной среде без учета поглощения ($\delta = 0$). Использованы следующие значения параметров:

$$A = 1, \quad \epsilon_{00} = n_{00}^2 = 1, \quad \frac{\omega_l}{c} \delta_{123} = 10^{-3}.$$

полученных в результате решения уравнения (6.4), представлен на рис. 3 (см. также рис. 4, где показаны кривые зависимости n и x от ξ). Если затухание не учитывается и используется соотношение (6.13), то в зависимости от величины ω

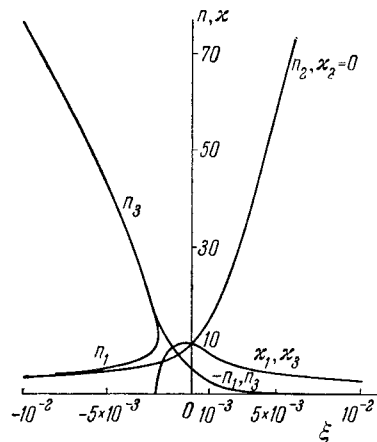


Рис. 4. Зависимость n и x ($\tilde{n} = n + ix$) от $\xi = (\omega - \omega_l)/\omega_l$ в окрестности частоты $\omega = \omega_l$ в гиротропной среде без учета поглощения ($\delta = 0$). Используются следующие значения параметров: $A = 0,1$, $\epsilon_{00} = n_{00}^2 = 3$, $\frac{\omega_l}{c} \delta_{123} = 10^{-3}$.

как это следует из уравнений (6.3) и (6.4), для верхней ветви выполняются соотношения

$$\frac{D_x}{D_y} = - \frac{i\delta_{123} \frac{\omega}{c} n}{\left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2}\right)} = -i.$$

Таким образом, верхней ветви решений n^2 соответствует правая круговая поляризация и, наоборот, нижней ветви решений n^2 соответствует левая круговая поляризация. Если $\delta_{123} < 0$, рис. 3 не изменяется, однако поляризации для реше-

ния имеется либо три вещественных решения $\tilde{n}_{1,2,3}^2 = n_{1,2,3}^2$, либо одно вещественное решение $\tilde{n}_2^2 = n_2^2$, а два других являются комплексно сопряженными $\tilde{n}_1^2 = \tilde{n}_3^{*2}$. Уравнение (6.4) определяет величину \tilde{n} только с точностью до знака. Этот знак следует выбирать таким, чтобы мнимая часть \tilde{n} была положительной и отвечала затуханию волны в направлении s . Поэтому для комплексно сопряженных решений $n_1 = -n_3$, $x_1 = x_3$. На рис. 3 пунктиром обозначен ход кривой $n_0^2(\omega)$. Из этого рисунка следует, что значения n^2 на верхней ветви удовлетворяют неравенству $n^2 > n_0^2$. Поэтому,

как это следует из уравне-

ний, соответствующих верхней и нижней ветвям, следует изменить на обратные. Интересная особенность кривых дисперсии, изображенных на рис. 3, состоит в том, что правее точки поворота существует только одно вещественное решение уравнения (6.4), тогда как левее этой точки — три вещественных решения. Далее, наличие точки поворота и, следовательно, кратных корней уравнения (6.4) представляет особый интерес в свете изложенного в п. 2.3. В связи со сказанным подчеркнем, однако, что рис. 3 был построен без учета поглощения, которое в рассматриваемой области частот может быть особенно существенным. При этом картина дисперсионных кривых изменяется, особенно в том случае, когда точка поворота, отвечающая кратному корню, попадает в область существенного поглощения. Отметим, что кратным корням (т. е. точке поворота) отвечает значение частоты ω_m , которая удовлетворяет уравнению

$$n_0^2(\omega_m) = \frac{2^{2/3}}{3 \left(\frac{\omega_m}{c} \delta_{123}\right)^{2/3}}.$$

При этом кратный корень *) $n_m^2 = \left(\frac{2}{\frac{\omega}{c} \delta_{123}}\right)^{2/3}$, а меньший корень $n^2 = \frac{1}{4} n_m^2$. Отсюда при $n_0^2(\omega) \approx \frac{0,2\omega_l}{|\omega - \omega_l|}$ и $\frac{\omega}{c} \delta_{123} \sim 10^{-3}$ получаем **):

$$|\omega_m - \omega_l|/\omega_l \approx 4 \cdot 10^{-3},$$

что при $\omega_l \approx 3 \cdot 10^4$ см⁻¹ соответствует $|\omega_m - \omega_l| \sim 100$ см⁻¹. Поскольку при водородных и гелиевых температурах ширины экситонных линий поглощения в целом ряде, например, молекулярных кристаллов [60] составляют величину порядка

*) Напомним, что кратным корням кубического уравнения $x^3 + ax^2 + bx + c = 0$ отвечает условие $p^3 = -q^2$, где $3p = b - \frac{a^2}{3}$, $2q = \frac{2a^3}{27} - \frac{ab}{3} + c$.

***) Об оценке величины $\frac{\omega}{c} \delta_{123}$ непосредственно из экспериментальных данных см. § 11.

нескольких десятков обратных сантиметров, можно надеяться, что «эффект трех волн» в таких кристаллах при низких

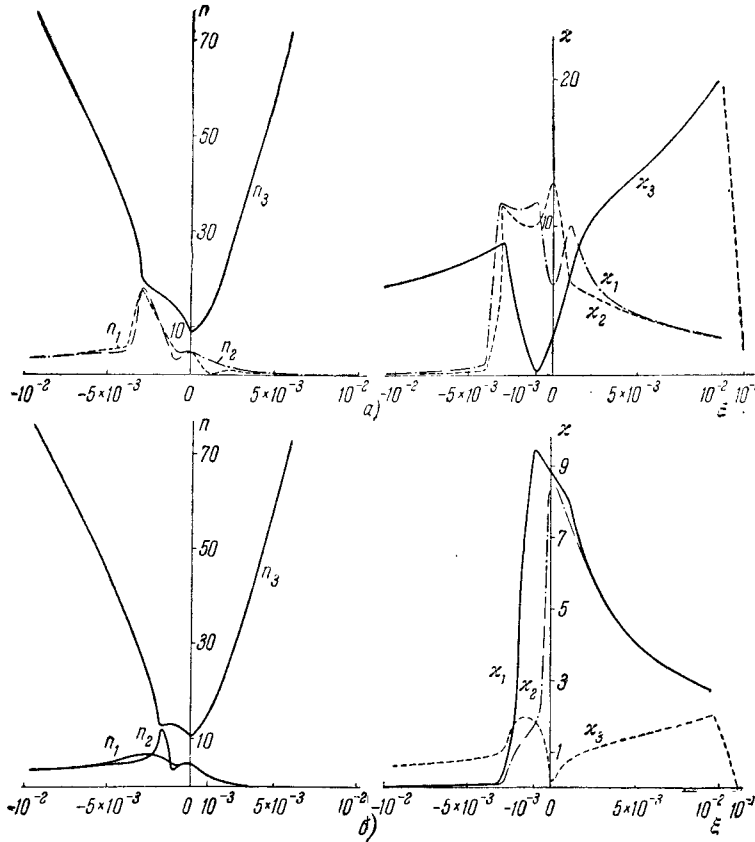


Рис. 5. Зависимость n и κ от ξ в окрестности частоты $\omega = \omega_l$ в гиротропной среде при учете поглощения. Использованы следующие значения параметров: $A = 0,1$, $\epsilon_{00} = n_{00}^2 = 3$, $\frac{\omega_l}{c} \delta_{123} = 10^{-3}$, причем $\delta = 10^{-3}$ (а) и $\delta = 10^{-4}$ (б).

температурах должен проявляться достаточно отчетливо. Что же касается области частот, расположенной правее точки

поворота (см. рис. 3), то характер дисперсии здесь при учете поглощения существенно изменяется.

Чтобы проиллюстрировать сказанное, положим в уравнении (6.4) вместо (6.13)

$$n_0^2(\omega) = \epsilon_0(\omega) = \epsilon_{00} - \frac{2A\omega_l^2}{\omega^2 - \omega_l^2 + i\nu\omega} \cong n_{00}^2 - \frac{A}{\xi + i\delta}, \quad n_{00}^2 \equiv \epsilon_{00}, \quad (6.13a)$$

где ν — «эффективная» частота столкновений, приводящих к затуханию волн в среде, $\delta = \nu/2\omega_l$. Результаты расчетов с использованием выражения (6.13a) при $\delta \neq 0$ приведены на рис. 5 и более подробно обсуждаются в п. 11.1.

§ 7. Негиротропные кристаллы

7.1. Нормальные волны в негиротропных кристаллах.

В негиротропных кристаллах эффекты пространственной дисперсии определяются тензором β_{ijlm} , поскольку в таких кристаллах тензор $\delta_{ijl} = 0$ и, следовательно (см. (4.21)), обратный тензор диэлектрической проницаемости

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + \beta_{ijlm}(\omega) k_l k_m. \quad (7.1)$$

Как и при исследовании гиротропных кристаллов (см. § 6), направим ось z вдоль направления волнового вектора \mathbf{k} . Тогда в новой системе координат, где $k_1 = k_2 = 0$, $k_3 = k$, тензор

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + \beta_{ij33}(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2 \quad (7.2)$$

и, следовательно, уравнения (2.45) для поперечных компонент вектора индукции, принимающие для гиротропной среды форму (6.2), могут быть записаны в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \left[\frac{1}{\tilde{n}^2} - \epsilon_{11}^{-1}(\omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2 \beta_{1133}(\omega) \right] D_1 - \\ - \left[\epsilon_{12}^{-1}(\omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2 \beta_{1233}(\omega) \right] D_2 = 0, \\ - \left[\epsilon_{21}^{-1}(\omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2 \beta_{2133}(\omega) \right] D_1 + \\ + \left[\frac{1}{\tilde{n}^2} - \epsilon_{22}^{-1}(\omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2 \beta_{2233}(\omega) \right] D_2 = 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.3)$$

Предположим теперь, как и в § 6, что двумерный тензор $\epsilon_{\alpha\beta}^{-1}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$) может быть приведен к диагональному виду. Тогда дальнейшее упрощение может быть достигнуто, если оси x и y направить вдоль главных осей этого тензора. При этом обращается в нуль величина $\epsilon_{21}^{-1}(\omega) = \epsilon_{12}^{-1}(\omega)$, а величины $\epsilon_{11}^{-1}(\omega)$ и $\epsilon_{22}^{-1}(\omega)$ оказываются просто связанными с решениями дисперсионного уравнения Френеля (2.22) при пренебрежении пространственной дисперсией. Действительно, при $\beta_{ijklm} = 0$ корни n_{01}^2 и n_{02}^2 дисперсионного уравнения, отвечающего системе (7.3), имеют вид (при $\epsilon_{12}^{-1}(\omega) = 0$):

$$\epsilon_{11}^{-1}(\omega) = \frac{1}{n_{01}^2}, \quad \epsilon_{22}^{-1}(\omega) = \frac{1}{n_{02}^2}.$$

При этом дисперсионное уравнение для определения величин \tilde{n}^2 , соответствующих нормальным электромагнитным волнам с $\mathbf{D} \neq 0$, получающееся как условие обращения в нуль детерминанта системы уравнений (7.3), имеет следующий вид:

$$\left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \frac{1}{n_{01}^2}\right) \left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \frac{1}{n_{02}^2}\right) - \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2 \beta_{1133} \left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \frac{1}{n_{02}^2}\right) - \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{n}^2 \beta_{2233} \left(\frac{1}{\tilde{n}^2} - \frac{1}{n_{01}^2}\right) + \frac{\omega^4}{c^4} \tilde{n}^4 (\beta_{1133}\beta_{2233} - \beta_{1233}\beta_{2133}) = 0. \quad (7.4)$$

Это уравнение является, вообще говоря, уравнением четвертой степени для величины \tilde{n}^2 , откуда следует, что в рассматриваемой области частот возможно распространение четырех волн с одной частотой, но с различными длинами волн и различными поляризациями. Существенно, что все эти нормальные волны не являются взаимно ортогональными (см. п. 3.2) и в общем случае их нельзя разделить на две группы взаимно ортогональных волн одной поляризации. Более подробное изучение поляризации нормальных волн удобнее проводить, конкретизируя симметрию кристалла.

Если двумерный тензор $\epsilon_{\alpha\beta}^{-1}$ не может быть приведен к диагональному виду, как это может иметь место для двусосных кристаллов (кристаллов триклинной, моноклинной и ромбической сингоний), то уравнение для определения величины \tilde{n}^2 также, конечно, может быть получено аналогично тому, как было получено уравнение (7.4). Оно, однако,

оказывается более громоздким, и мы его здесь не выписываем. Отметим только, что анализ этого уравнения может представить при учете пространственной дисперсии особый интерес только в том случае, когда без учета пространственной дисперсии появляются кратные корни дисперсионного уравнения (см. п. 2.3).

7.2. Случай изотропной среды. Новые волны вблизи дипольных линий поглощения. Вектор групповой скорости. Рассмотрим прежде всего простейший случай изотропной среды, когда $\beta_{1233} = \beta_{2133} = 0$, $\beta_{1133} = \beta_{2233} = \beta$ и, независимо от направления \mathbf{s} , $n_{01} = n_{02} = n_0$ (см. п. 5.2). При этом уравнение (7.4) распадается на два одинаковых, каждое из которых имеет вид

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} - \frac{1}{n_0^2} - \frac{\omega^2}{c^2} \beta \tilde{n}^2 = 0. \quad (7.5)$$

Отсюда сразу находим, что

$$\tilde{n}_{1,2}^2 = (n + ix)_{1,2}^2 = -\frac{1}{2\epsilon_0\beta'} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2\epsilon_0\beta'}\right)^2 + \frac{1}{\beta'}}, \quad (7.6)$$

где

$$\epsilon_0(\omega) = n_0^2, \quad \beta' = \frac{\omega^2}{c^2} \beta.$$

Имея в виду область частот, близких к какой-либо одной линии поглощения, используем для n_0^2 выражения (6.13) и (6.13а). Из (7.6) ясно, что при

$$|\epsilon_0^{2\beta'}| \ll 1 \quad (7.7)$$

можно положить

$$\tilde{n}_1^2 = \epsilon_0(1 - \epsilon_0^{2\beta'} + \dots), \quad \tilde{n}_2^2 = -\frac{1}{\epsilon_0\beta'} - \epsilon_0 + \dots \quad (7.8)$$

При $\beta' \sim 10^{-6}$ и отсутствии поглощения условие (7.7) принимает вид $\epsilon_0 = n_0^2 \ll 10^3$, что при $\epsilon_{00} \sim 1$ и $A \sim 0,1$ (см. (6.13)) сводится к неравенству $|\xi| = |\omega - \omega_l|/\omega_l \gg 10^{-4}$. В оптической (видимой) части спектра, где $\omega_l \sim 10^{15} \text{ сек}^{-1} \sim 2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, это означает, что выражения (7.8) пригодны уже на расстоянии $\Delta\omega = |\omega - \omega_l| \gg 10^{-4} \omega_l \sim 2 \text{ см}^{-1}$ от центра линии поглощения. Если же положить $A \sim 1$ (это, по-видимому, нереально), приходим к неравенству $\Delta\omega \gg 20 \text{ см}^{-1}$,

В этой области частот, как это следует из (7.8), очевидно, $\tilde{n}_1^2 \approx n_0^2$. Корень же \tilde{n}_2^2 очень велик и при $\epsilon_0 \sim 1$, как это имеет место вдали от линии, $|\tilde{n}_2^2| \approx 1/|\beta'| \sim 10^6$. При этом $\lambda = \lambda_0/n_2 \sim 5 \cdot 10^{-8}$ см и разложение (7.1), в котором мы ограничились членом порядка k^2 , уже теряет силу. Поэтому новый корень дисперсионного уравнения \tilde{n}_2 имеет реальное

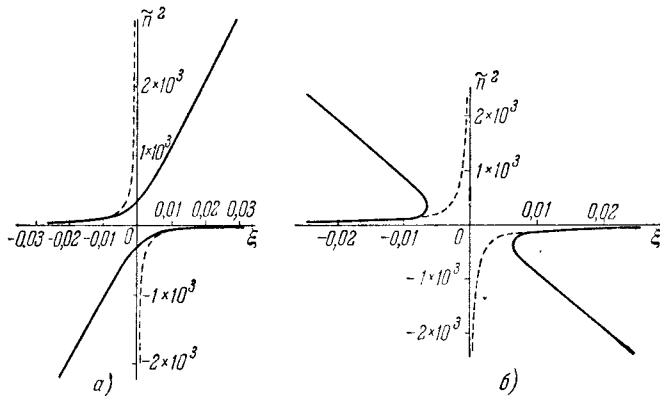


Рис. 6. Зависимость \tilde{n}^2 от ξ в окрестности частоты $\omega = \omega_1$ в неигротропной среде без учета поглощения ($\delta = 0$). Использованы следующие значения параметров: $A = 1$, $\epsilon_{00} = 0$, причем $\beta' = 10^{-5}$ (а) и $\beta' = -10^{-5}$ (б).

значение лишь вблизи линии, в области, где $\lambda = \lambda_0/|\tilde{n}_2| \gg \gg a \sim 3 \cdot 10^{-8}$ см, т. е. пока $|\tilde{n}_2| \ll \lambda_0/a$.

Вблизи линии поглощения учет пространственной дисперсии в некоторых случаях даже качественно меняет ход кривых $\tilde{n}^2(\omega)$. Последнее особенно сильно проявляется в том случае, когда поглощение ничтожно мало и можно положить $\delta = 0$. Сказанное ясно из рис. 6, а, б [5, 15]. Пунктиром в обоих случаях нанесена предельная кривая (6.13) с $A = 1$ (поскольку обычно $\epsilon_{00} \sim 1$, а нас интересует область $|\epsilon_0| \gg 1$, для простоты на рис. 6, а, б везде положено $\epsilon_{00} = 0$). Из вида кривых на рис. 6, а, б следует, что характер дисперсии при отсутствии поглощения оказывается различным в зависимости от знака β' . Если $\beta' = 0$ или $\beta' > 0$ величина \tilde{n}^2 везде

имеет вещественное значение, так что при $\tilde{n}^2 > 0$ среда прозрачна, а при $\tilde{n}^2 = -x^2 < 0$ имеет место полное отражение волны от среды. Если же $\beta' < 0$, то в области $|\epsilon_0| > \frac{1}{2\sqrt{|\beta'|}}$ значения $\tilde{n}^2 = (n + ix)^2$ комплексны даже при

отсутствии поглощения. Таким образом, при $\beta' > 0$ наличие пространственной дисперсии при отсутствии поглощения приводит к появлению новой волны, распространяющейся в области, где при $\beta' = 0$ имеется полное внутреннее отражение (см. § 10). Если же $\beta' < 0$, то левее точки поворота могут распространяться две волны с одинаковыми частотой и поляризацией, но различающиеся значениями коэффициентов преломления и, следовательно, значениями длины волны (см. [5, 15])*).

Отметим, что использованные при построении рис. 6, а, б значения параметров A , $|\beta'|$, вообще говоря, существенно завышены. Поэтому ниже рассмотрены более реальные примеры.

В тех случаях, когда речь идет об экситонной линии поглощения, знак β' определяется знаком «эффективной массы» экситона. Для того чтобы в этом убедиться, достаточно вместо (6.13), (6.13а) рассмотреть более общее выражение для ϵ при учете не только временной, ϵ_0 и

* В работе [15] известное уже много десятилетий заключение о существовании пространственной дисперсии было повторено на основе квантовой теории возмущений при вычислении электрической поляризации для некоторой модели кристалла. Возможность же появления новых волн вблизи дипольных экситонных линий в работе [15] также считалась каким-то специфическим явлением, неизвестным ранее. Между тем речь идет об одном из простых и известных эффектов пространственной дисперсии, а результат, полученный в [15] громоздким путем, как мы видели выше, сразу же следует из обычного дисперсионного уравнения при использовании связи (7.1). Несмотря на отмеченные и другие ее недостатки (например, полное игнорирование роли поглощения), работа Пекара [15] оказалась полезной. Поэтому мы не считали бы уместным останавливаться здесь на критике работы [15], если бы Пекар в своих последующих статьях [19, 53, 55] не продолжал делать утверждений, представляющих нам совершенно неверными. В последнем читатели смогут убедиться, если ознакомятся со статьями [5, 15, 16, 50, 55]. Кроме того, разумеется, в настоящей книге все вопросы, о которых идет речь, подробно разъяснены в соответствующих разделах.

пространственной дисперсии

$$\varepsilon(\omega, k) = \varepsilon_{00} + \frac{4\pi e^2 N_{\text{эфф}}/m}{\omega_l^2(k) - \omega^2 - i\omega\gamma}. \quad (7.9a)$$

Именно такое выражение получается при простых предположениях, если исходить из микротемории (см. §§ 12, 13, 14). Разлагая энергию «механического» экситона $\hbar\omega_l(k)$ в ряд по степеням волнового вектора, в случае изотропной негиротропной среды имеем

$$\hbar\omega_l(k) = \hbar\omega_l(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{экс}}} + \dots,$$

где $m_{\text{экс}}$ — эффективная масса механического экситона. Поэтому при $|\omega_l(0) - \omega| \ll \omega_0$, $\omega\gamma \ll \omega_0^2$, где $\omega_0^2 = 4\pi e^2 N_{\text{эфф}}/m$,

$$\frac{1}{\varepsilon(\omega, k)} \approx \frac{1}{\varepsilon_0(\omega)} + \frac{\hbar\omega_l(0)}{4\pi e^2 N_{\text{эфф}}/m} \frac{k^2}{m_{\text{экс}}}$$

и в соответствии с (7.2) (см. также п. 5.2) и обозначениями (6.13)

$$\beta = \frac{\hbar\omega_l(0)}{4\pi e^2 N_{\text{эфф}}} \frac{m}{m_{\text{экс}}} = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{Am_{\text{экс}}\omega_l(0)}. \quad (7.9)$$

Таким образом, знак β (или β' , см. (7.6)) в приближении (7.9a) действительно совпадает со знаком эффективной массы механического экситона.

Отметим также, что в то время, как величина A (см. (6.13)) прямо пропорциональна силе осциллятора, величина β в некоторых случаях может практически от силы осциллятора не зависеть. Дело в том, что иногда эффективная масса механического экситона оказывается обратно пропорциональной силе осциллятора, так что $\frac{N_{\text{эфф}} m_{\text{экс}}}{m} \sim N$, где N — концентрация валентных электронов. Такая ситуация, как это было показано в [61], осуществляется в областях спектра, где основной вклад во взаимодействие между отдельными молекулами (или ячейками) кристалла вносит электростатическое диполь-дипольное взаимодействие, интенсивность которого при этом определяет ширину зоны механического экситона и, следовательно, его эффективную массу. В этих условиях величина

$$\beta' = \beta \frac{\omega^2}{c^2} = \frac{\hbar\omega_l(0)\omega^2}{\omega_0^2 mc^2},$$

где $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi e^2 N}{m}}$ — «плазменная» частота. Например, в молекулярных кристаллах $N \simeq 3 \cdot 10^{22} \div 3 \cdot 10^{23}$, $\omega_0^2 \simeq 8 \cdot 10^{31} \div 8 \cdot 10^{32} \text{ сек}^{-2}$ и при $\omega_l(0) \sim 3 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}$ параметр $\beta' \simeq 10^{-6} \div 10^{-7}$. Из сказанного ясно также, что параметр β' мог бы оказаться бóльшим, чем приведенные значения в том случае, если бы дипольные взаимодействия были слабы, и основной, но не малый, вклад в ширину экситонной зоны вносили не диполь-дипольные, а иные взаимодействия, соответствующие, например, обменному взаимодействию. В этом случае величина A , пропорциональная квадрату матричного элемента дипольного момента, могла бы быть малой, тогда как величина $m_{\text{экс}}$ могла бы быть порядка m .

Параметр β' (см. (7.9) при $m_{\text{экс}} = m$ и $\omega_l(0) \approx 3 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}$) был бы равен $\beta' \approx 2 \cdot \frac{10^{-6}}{A}$ и при $A \approx 0,1$ мы бы имели $\beta' \approx 10^{-5}$, а при $A \approx 10^{-2}$ даже $\beta' \approx 10^{-4}$. Поскольку нам не известны случаи, когда в кристаллах для «механических» экситонов, для которых значение A мало и не равно нулю, эффективная масса $m_{\text{экс}}$ одного порядка с m , в последующих оценках будем полагать параметр $|\beta'|$ лежащим в пределах $|\beta'| \sim 10^{-5} \div 10^{-7}$. Кроме того, во всех известных нам случаях величина $A \ll 1$; именно отсюда ясно, что использованные при построении рис. 6, а, б значения параметров A и $|\beta'|$, вообще говоря, существенно завышены. При более реальных значениях параметров A и $|\beta'|$ возможность проявления новой волны вблизи резонанса в еще большей мере зависит от величины затухания.

При отсутствии поглощения влияние пространственной дисперсии уже велико при $4\varepsilon_0^2 |\beta'| \sim 1$, т. е. при $|\xi| \sim |\xi_k| \equiv \equiv 2A \sqrt{|\beta'|}$. Поэтому если,

$$\delta = \frac{\gamma}{2\omega_l} \ll |\xi_k| \equiv 2A \sqrt{|\beta'|}, \quad (7.10)$$

то для частот с $|\xi| = |\omega - \omega_l|/\omega_l \gg |\xi_k|$ поглощение несущественно, поскольку его учет мало изменяет величину $\text{Re } \varepsilon_0$ и в то же время $|\text{Im } \varepsilon_0| \ll |\text{Re } \varepsilon_0|$. При $A \leq 0,1 \div 0,01$ и $|\beta'| \sim 10^{-5} \div 10^{-7}$ величина $|\xi_k| \sim 10^{-3} \div 10^{-6}$. В то же время, вблизи резонанса величина δ , как это следует, например,

из результатов экспериментального исследования молекулярных кристаллов при низких температурах, лежит обычно в интервале значений $\delta \sim 10^{-2} \div 10^{-3}$. Поэтому, как правило, вместо (7.10) имеет место обратное неравенство $\delta \gg |\xi_k| = 2A \sqrt{|\beta'|}$.

Из сказанного следует, что при учете пространственной дисперсии анализ распространения света в окрестности резонансов $\epsilon_0(\omega)$ необходимо проводить, принимая во внимание поглощение, которое, как мы увидим, существенно уменьшает роль пространственной дисперсии.

Используя формулу (7.6) и предполагая, что величина $\epsilon_0(\omega)$ комплексна и выражается соотношением (6.13а), получаем

$$\tilde{n} = n + i\kappa,$$

где

$$\left. \begin{aligned} n_{\pm}^2 &= \frac{I_1^{\pm}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(I_1^{\pm})^2 + (I_2^{\pm})^2}, \\ \kappa_{\pm}^2 &= -\frac{I_1^{\pm}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(I_1^{\pm})^2 + (I_2^{\pm})^2}, \\ I_1^{\pm} &= \frac{[A\xi - \epsilon_{00}(\xi^2 + \delta^2)] \pm M}{2\beta'[(\epsilon_{00}\xi - A)^2 + \epsilon_{00}^2\delta^2]}, \\ I_2^{\pm} &= \frac{A\delta \pm M}{2\beta'[(\epsilon_{00}\xi - A)^2 + \epsilon_{00}^2\delta^2]}, \\ M + iN &= \\ &= \sqrt{[(\xi^2 + \delta^2)\epsilon_{00} - A\xi - iA\delta]^2 + 4\beta'[(\epsilon_{00}\xi - A)^2 + \epsilon_{00}^2\delta^2]^2}. \end{aligned} \right\} (7.11)$$

В формулах (7.11) следует брать положительное значение корня. Результаты расчета величин $n(\omega)$ и $\kappa(\omega)$ для различных значений β' , A и δ ясны из рис. 7—14. Из кривых, приведенных на этих рисунках, следует, что при реальных значениях δ новой волне всегда отвечает затухание, большее, чем затухание, отвечающее обычной волне (при этом под новыми волнами мы понимаем волны, отвечающие тем ветвям кривых $n^2(\omega)$, для которых $n^2(\omega)$ не стремится к ϵ_{00} при удалении ω от области резонанса). С другой стороны, из этих рисунков следует также, что при малых значениях δ и больших значениях $|\beta'|$ частотная зависимость коэффициента поглощения даже для обычных волн при учете пространственной

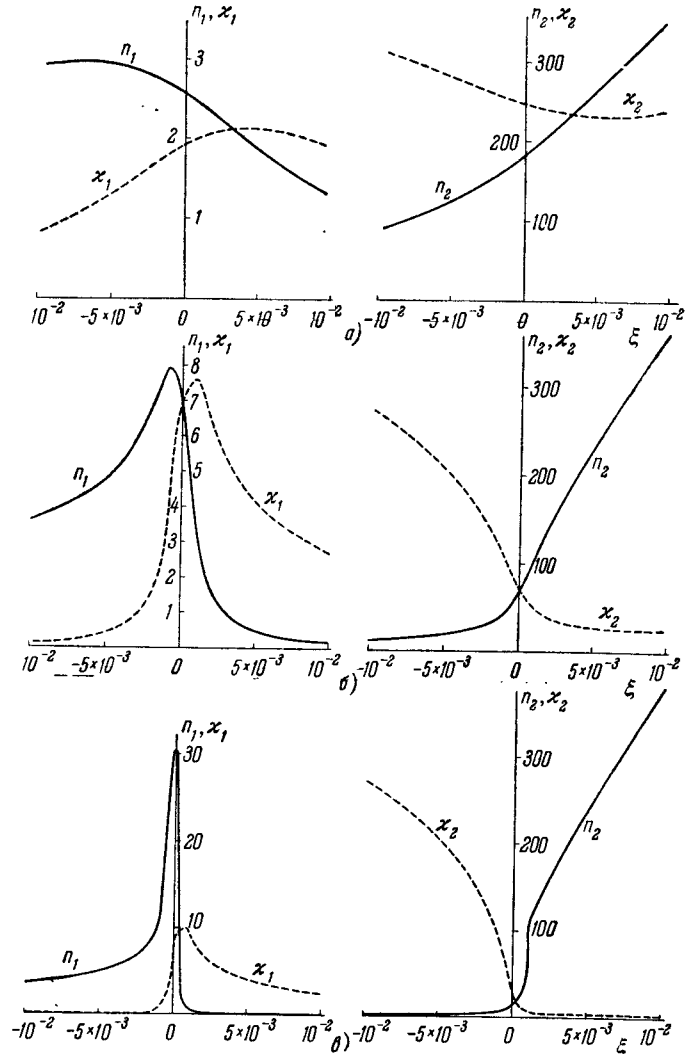


Рис. 7. Зависимость n и κ от ξ в окрестности частоты $\omega = \omega_1$ в негиротропной среде при учете поглощения. Используются следующие значения параметров: $A = 0,1$, $\beta' = 10^{-6}$, $\epsilon_{00} = 3$, причем $\delta = 10^{-2}$ (а), $\delta = 10^{-3}$ (б) и $\delta = 10^{-1}$ (в).

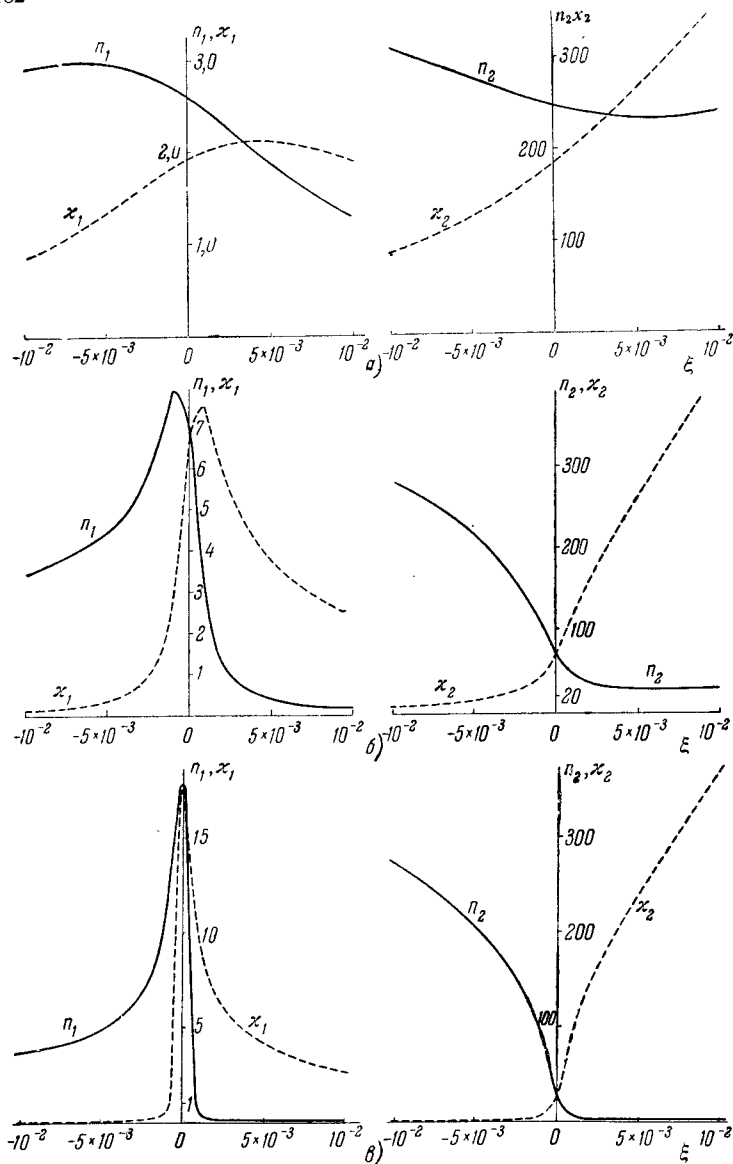


Рис. 8. То же, что и на рис. 7, только изменен параметр β' : $\beta' = -10^{-6}$.

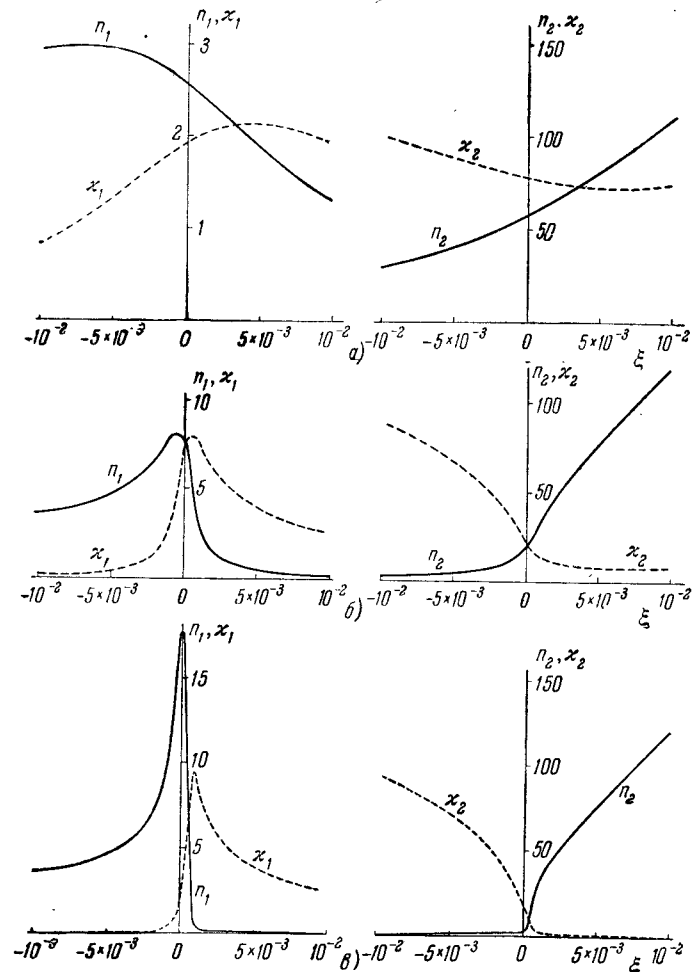


Рис. 9. То же, что и на рис. 7, только $\beta' = 10^{-5}$.

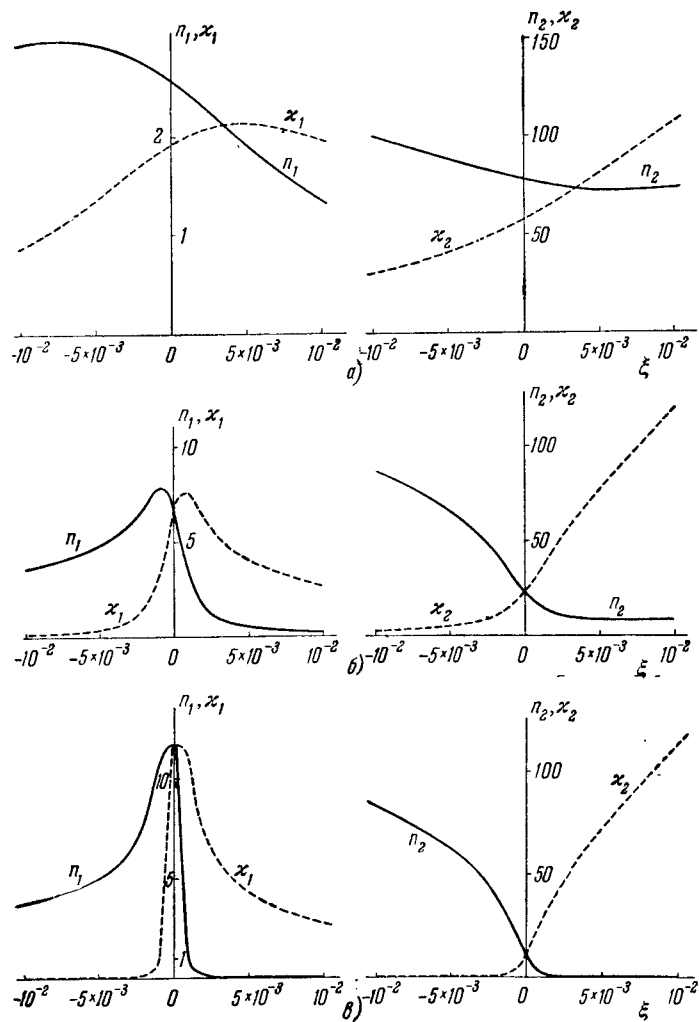


Рис. 10. То же, что и на рис. 7, только $\beta' = -10^{-5}$.

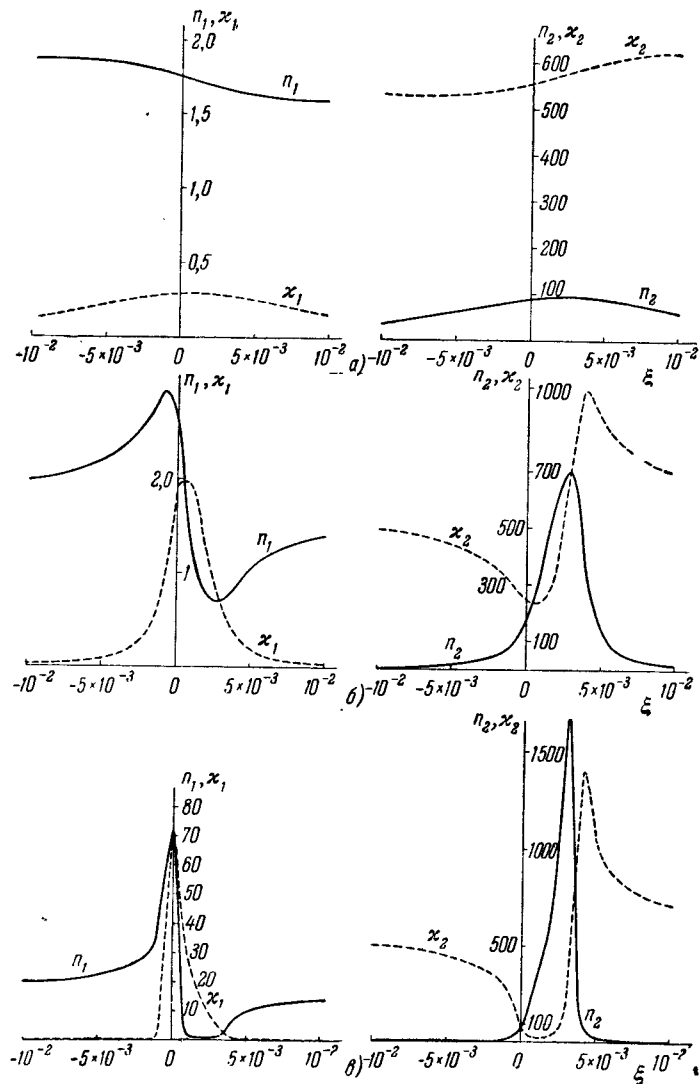


Рис. 11. Зависимость n и x от ξ при следующих параметрах: $A = 0,01$, $\epsilon_{00} = 3$, $\beta' = 10^{-6}$, причем $\delta = 10^{-2}$ (а), $\delta = 10^{-3}$ (б) и $\delta = 10^{-4}$ (в).

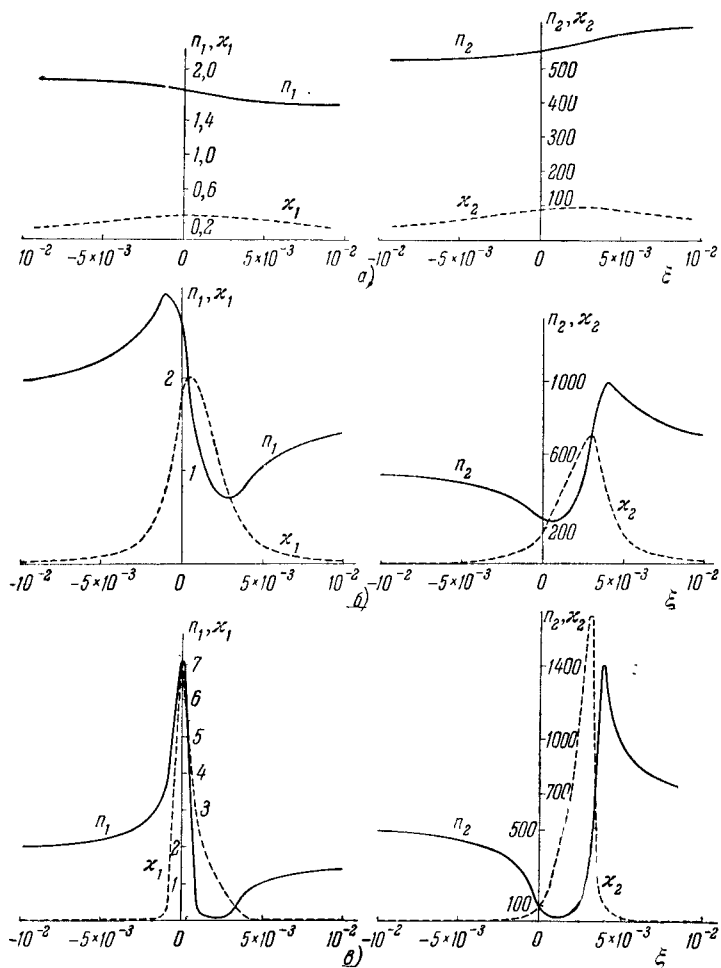


Рис. 12. То же, что и на рис. 11, только изменен параметр β' :
 $\beta' = -10^{-6}$.

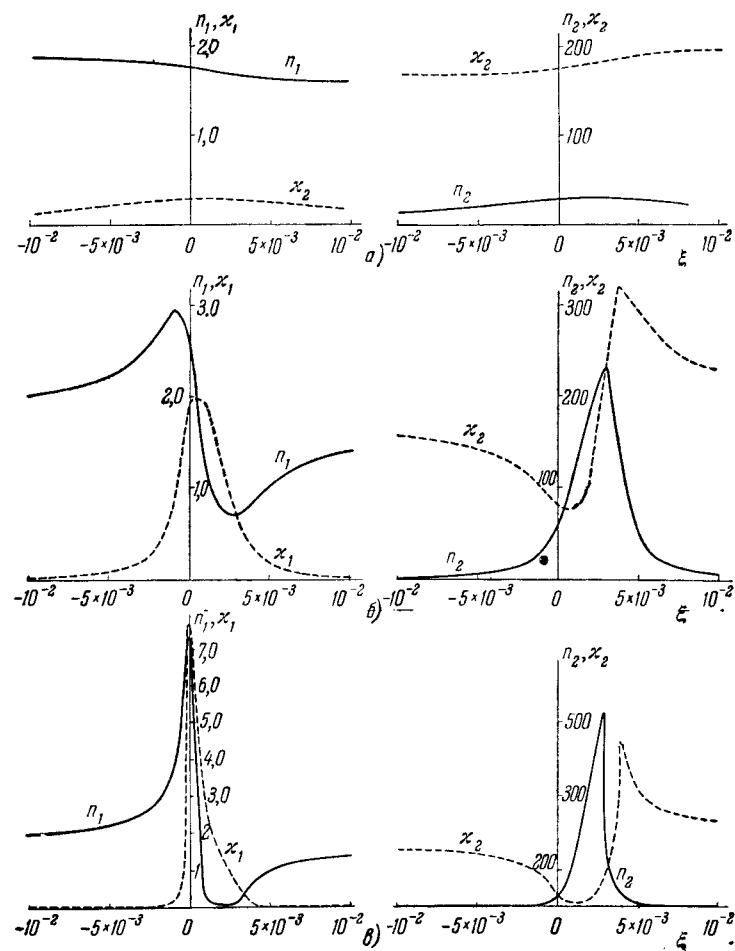


Рис. 13. То же, что и на рис. 11, только $\beta' = 10^{-5}$.

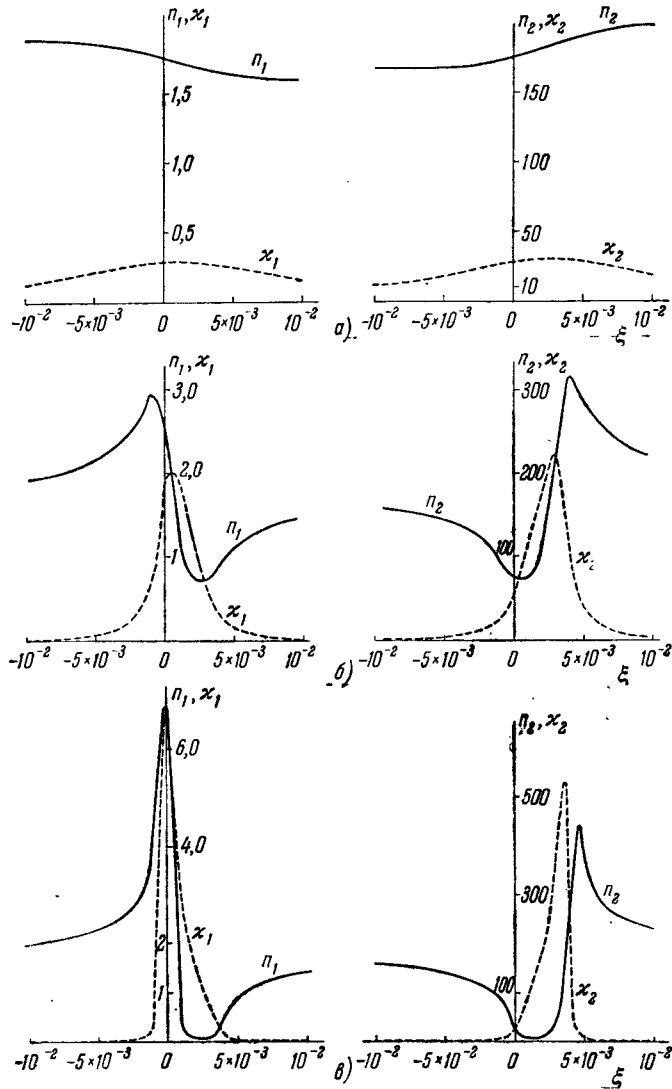


Рис. 14. То же, что и на рис. 11, только $\beta' = -10^{-5}$.

дисперсии, точно так же, как и зависимость $n^2(\omega)$, уже не следует известным формулам (см., например, [101]), которые получаются для $n(\omega)$ и $x(\omega)$ при использовании выражения (6.13а). Однако при малых значениях $|\beta'|$ и достаточно больших значениях параметра δ вид зависимости $n(\omega)$ и $x(\omega)$ для обычной волны восстанавливается. Что же касается новой волны, то для нее либо величина $n(\omega)$, либо $x(\omega)$ становятся настолько большими, что рассмотрение этой волны становится неоправданным.

Из сказанного, таким образом, следует, что для наблюдения эффектов пространственной дисперсии вблизи дипольных линий поглощения (т. е. линий, которым в формуле (6.13) отвечает значение $A \neq 0$) в негиротропных средах нужны весьма специальные и особенно благоприятные условия. Отметим, что наблюдение эффектов пространственной дисперсии вблизи квадрупольных линий может существенно облегчиться в связи с тем, что ширина этих линий иногда бывает при достаточно низких температурах на несколько порядков меньше ширины дипольных линий поглощения.

Заметим, кроме того, что при сравнении кривых, представленных на рис. 7—14, с экспериментальными кривыми следует иметь в виду, что в кристаллах «эффективная частота» столкновений ν и, следовательно, величина δ в действительности являются функциями частоты (см. п. 14.1, а также [62], где зависимость $\nu(\omega)$ вычислялась для классической модели кристалла, и [63], где расчеты $\nu(\omega)$ проводились для молекулярных кристаллов). Например, в тех случаях, когда затухание света обусловлено электрон-фононным взаимодействием, характер зависимости $\delta(\omega)$ оказывается существенно связанным с формой энергетической зоны механического экситона и спектром фононов. При этом во всех случаях величина $\delta(\omega)$ резко падает при увеличении $|\omega - \omega_l(0)|$. Вид функции $\delta(\omega)$ становится особенно существенным при низких температурах. Так, например, при положительной эффективной массе механического экситона величина $\delta(\omega)$ в окрестности экситонной зоны при $\omega \leq \omega_l(0)$ значительно меньше величины $\delta(\omega)$ при $\omega \geq \omega_l(0)$ (см. п. 14.2). Из сказанного, таким образом, ясно, что экспериментальные кривые $n(\omega)$ и $x(\omega)$ для кристаллов могут существенно отличаться от представленных на рис. 7—14, где величина δ предполагалась не зависящей от ω . С целью проиллюстрировать влияние

зависимости $\delta(\omega)$ на вид дисперсионных кривых на рис. 15 приведены кривые, соответствующие скачкообразной функции $\delta(\xi)$.

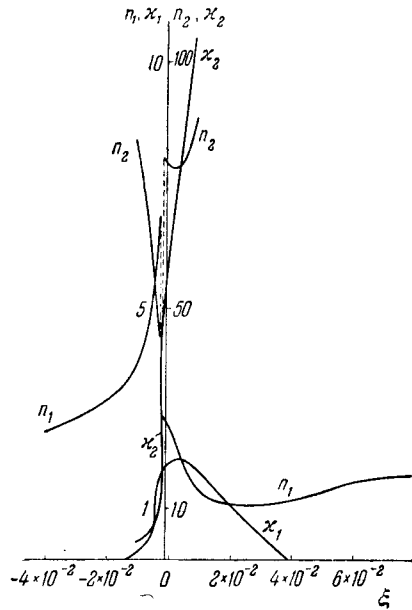


Рис. 15. Зависимость n и x от ξ в окрестности частоты $\omega = \omega_l$ в негиротропной среде при учете поглощения. Используются следующие значения параметров: $A = 0,1$, $\epsilon_{00} = 4$, $\beta' = -10^{-5}$, $\delta(\xi) = 10^{-3}$ при $\xi \leq -2 \cdot 10^{-3}$, $\delta(\xi) = 10^{-2}$ при $2 \cdot 10^{-3} \leq \xi \leq 10^{-2}$ и $\delta(\xi) = 10^{-3}$ при $\xi \geq 10^{-2}$.

Предполагая сначала, что величина δ не зависит от ω и проведя интегрирование по ω от $-\infty$ до $+\infty$, находим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} 2n(\omega) x(\omega) d\omega = A\omega_l \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta d\xi}{\xi^2 + \delta^2} = A\pi\omega_l. \quad (7.12)$$

Полученные кривые характерны своей асимметрией (относительно большие n при $\xi < 0$ и малые n при $\xi > 0$) и этим весьма напоминают экспериментальные кривые для ряда кристаллов (см., например, экспериментальную работу [96] и др.). Дальнейший анализ опытных данных будет проведен в § 11 в связи с проблемой экспериментального обнаружения новых волн. Здесь же остановимся еще на одном эффекте, который обусловлен зависимостью величины δ от частоты ω и который проявляется даже при отсутствии учета пространственной дисперсии. Используя соотношения (6.13а) для величины $\epsilon_0(\omega) = (n + ix)^2$, находим, что

$$2nx = \frac{A\delta}{\xi^2 + \delta^2},$$

$$\xi = (\omega - \omega_l)/\omega_l.$$

Это соотношение означает, что площадь под кривой $2n(\omega)x(\omega)$ для изолированной линии определяется главным образом силой осциллятора и от величины δ не зависит. Такой вывод более или менее справедлив для газов, но в области экситонного поглощения может существенно нарушиться. Дело в том, что в окрестности изолированного экситонного перехода функция $\delta(\omega)$ при низких температурах, как правило, резко изменяется с частотой, принимая, как указывалось, сравнительно большие значения только в непосредственной окрестности частоты $\omega \approx \omega_l$. Поэтому левая часть соотношения (7.12) должна, вообще говоря, зависеть не только от A , но также и от характера зависимости $\delta(\omega)$.

Проиллюстрируем сказанное примером. Допустим ради простоты, что

$$\delta(\omega) = 0 \text{ при } |\xi| > \xi_0 \text{ и } \delta(\omega) = \delta_0 \text{ при } |\xi| < \xi_0,$$

где $2\xi_0\omega_l(0)$ — ширина линии поглощения. Тогда, очевидно,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} 2n(\omega)x(\omega) d\omega = 2A\omega_l \arctg \frac{\xi_0}{\delta_0}.$$

При низких температурах величина ξ_0 может быть порядка δ_0 , так что значение $\arctg \frac{\xi_0}{\delta_0}$ может заметно отличаться от $\frac{\pi}{2}$. Однако с повышением температуры, когда величина отношения $\frac{\xi_0}{\delta_0}$ возрастает, значение $\arctg \frac{\xi_0}{\delta_0}$ может стать близким к $\frac{\pi}{2}$, в силу чего площадь кривой $2n(\omega)x(\omega)$ практически перестает изменяться с изменением температуры и, как и в случае газов, становится не зависящей от величины δ .

Из сказанного выше следует, что зависимость $\delta(\omega)$, во-первых, приводит к асимметрии кривых дисперсии и, во-вторых, может привести к изменению площади под кривой $2n(\omega)x(\omega)$ при изменении температуры. Оба эти эффекта совершенно не связаны с учетом пространственной дисперсии, что и следует иметь в виду при анализе экспериментальных данных.

В заключение этого параграфа остановимся на вопросе о направлении групповой скорости нормальных волн

в прозрачной среде при учете пространственной дисперсии. В п. 3.3 уже указывалось, что, поскольку направление групповой скорости совпадает с направлением полного потока энергии $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(0)} + \mathbf{S}^{(1)}$, при учете пространственной дисперсии вектор $\mathbf{v}_{гр}$ может в принципе образовывать с направлением вектора \mathbf{k} любой угол.

В случае изотропной среды, как ясно уже из соображений симметрии, это значит, что групповая скорость может быть направлена как параллельно, так и антипараллельно направлению волнового вектора $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$. То же заключение очевидно из выражения для вектора $\mathbf{v}_{гр}$ в изотропной среде (см. (3.37)):

$$\mathbf{v}_{гр} \equiv \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = \frac{d\omega}{dk} \mathbf{s} = \frac{c}{n + \omega \frac{dn}{d\omega}} \mathbf{s}.$$

Разумеется вектор $\mathbf{v}_{гр}$ может быть направлен антипараллельно \mathbf{s} только при $\frac{dn}{d\omega} < 0$. Как ясно, например, из рис. 3—14, это и имеет место для новых волн. Нужно, однако, еще выяснить, каков знак суммы $n + \omega \frac{dn}{d\omega}$. Для этой цели проведем расчет, опираясь на формулу (7.6).

В области частот, где $|\varepsilon_0^2 \beta'| \ll 1$, коэффициенты преломления для обычной и новой волн равны соответственно $\tilde{n}_1^2(\omega) \approx \varepsilon_0(\omega)$, $\tilde{n}_2^2(\omega) \approx -1/\varepsilon_0(\omega) \beta'$ (см. (7.7) и (7.8)). Независимо от знака β' для обычной волны при отсутствии поглощения $n_1 + \omega \frac{dn_1}{d\omega} > 0$, так что вектор $\mathbf{v}_{гр}$ направлен вдоль \mathbf{s} . В то же время для новой волны при $\beta' < 0$, когда $\tilde{n}_2 = n_2$, может выполняться неравенство $\mathbf{v}_{гр} \cdot \mathbf{s} < 0$. Действительно, полагая $n_2^2(\omega) = -1/\varepsilon_0 \beta'$, имеем

$$\begin{aligned} n_2 + \omega \frac{dn_2}{d\omega} &\equiv \frac{1}{n_2} \left(n_2^2 + \frac{1}{2} \omega \frac{dn_2^2}{d\omega} \right) = \\ &= \frac{1}{n_2 |\beta'| \varepsilon_0^2} \left[\varepsilon_0(\omega) - \frac{\omega}{2} \frac{d\varepsilon_0(\omega)}{d\omega} \right]. \end{aligned}$$

Поэтому, используя для $\varepsilon_0(\omega)$ выражение (6.13),

$$\varepsilon_0(\omega) = \varepsilon_{00} - \frac{A}{\xi} \approx -\frac{A}{\xi}, \quad \xi = (\omega - \omega_l)/\omega_l,$$

находим, что при $\xi < 0$

$$\varepsilon_0(\omega) - \frac{\omega}{2} \frac{d\varepsilon_0(\omega)}{d\omega} = \frac{A}{|\xi|} - \frac{1}{2} \frac{\omega}{\omega_l} \frac{A}{\xi^2} \approx -\frac{1}{2} \frac{A}{\xi^2} < 0,$$

ибо в рассматриваемой области частот $|\xi| \ll \frac{1}{2}$ и $\frac{\omega}{\omega_l} \approx 1$.

Итак, в изотропной среде при учете пространственной дисперсии угол ψ между $\mathbf{v}_{гр}$ и волновым вектором \mathbf{k} для новой волны, вообще говоря, равен π .

В случае анизотропной среды вычисления $\mathbf{v}_{гр}$ могут быть проведены по формулам (3.39). Но мы на этом вопросе здесь останавливаться не будем. Отметим только, что в случае анизотропной среды при учете пространственной дисперсии угол ψ для разных направлений распространения волн может, вообще говоря, принимать все значения от $\psi = 0$ до $\psi = \pi$.

В дополнение к сказанному в пп. 3.2 и 3.3 сделаем еще одно замечание, касающееся связи между направлением $\mathbf{v}_{гр}$ и знаком коэффициента поглощения κ (речь, конечно, идет о слабопоглощающей среде, когда еще можно пользоваться понятием о групповой скорости). При этом ограничимся, ради простоты, случаем изотропной среды.

При отсутствии пространственной дисперсии в равновесной среде произведение $n\kappa > 0$, и поэтому в распространяющейся волне амплитуда убывает в том же направлении, в котором бежит волна. Это обстоятельство тесно связано с тем фактом, что при отсутствии пространственной дисперсии в изотропной среде вектор групповой скорости $\mathbf{v}_{гр}$ обязательно направлен вдоль \mathbf{k} ; в то же время энергия волны в равновесной среде также должна убывать в направлении распространения импульса. Иная ситуация возникает для волн, групповая скорость которых антипараллельна \mathbf{k} , как это может иметь место при учете пространственной дисперсии. В этом случае амплитуда волны должна убывать в направлении, обратном направлению \mathbf{k} , так что в волне

$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\left(\frac{\omega}{c} n z - \omega t\right) - \frac{\omega}{c} \kappa z}$ при $n > 0$ должно быть $\kappa < 0$, а при $n < 0$ показатель поглощения $\kappa > 0$. Это обстоятельство оказывается весьма существенным при рассмотрении преломления и отражения волн на границе кристалла с учетом пространственной дисперсии. Поскольку, однако, уравнение для определения \tilde{n}_l позволяет найти сразу комплексную

величину $\tilde{n}_i = n_i + ix_i$, произвола в выборе знака отношения x_i/n_i не возникает, так что вычислять $\varphi_{гр}$ для нормальных волн в этой связи нет необходимости (о том, как следует поступать при отсутствии поглощения, см. п. 10.9).

§ 8. Кубические негиротропные кристаллы

8.1. Оптическая анизотропия кубических кристаллов.

Дипольные переходы. Во введении уже указывалось, что оптическая анизотропия кубических кристаллов*), рассмотренная теоретически в работах [10, 11], а также [5, 34], наблюдалась на опыте [12] (исследовался кристалл Cu_2O при низкой температуре в области квадрупольного перехода $\lambda = 6125 \text{ \AA}$). Оптическая анизотропия в кубических кристаллах может проявляться не только в области квадрупольных переходов, но также и в области дипольных переходов и вообще вдали от всяких переходов. При этом под дипольным переходом мы, как обычно, понимаем такой переход, на частоте которого диэлектрическая проницаемость без учета поглощения и пространственной дисперсии (для кубического кристалла речь идет о скаляре $\epsilon_0(\omega)$) обращается в бесконечность. Из этого определения следует, что дипольным переходам всегда соответствуют отличные от нуля силы осциллятора (см., например, выражение (6.13)). Что же касается квадрупольных переходов, то на частоте этих переходов тензор диэлектрической проницаемости обращается в бесконечность только при учете пространственной дисперсии. В п. 4.2 уже было подчеркнуто, что разложения тензоров $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ в ряд по k_i , вообще говоря, не являются разложениями по мультиполям. Поэтому при исследовании таких разложений характер перехода сказывается в первую очередь на частотной зависимости коэффициентов. Вдали от перехо-

*) Мы здесь не рассматриваем так называемую «скрытую анизотропию» кубических кристаллов, возникающую благодаря присутствию в кристаллах анизотропных центров, связанных с локальными нарушениями решетки (например, различного рода центрами окраски и пр.). При пренебрежении пространственной дисперсией и отсутствии направленных внешних воздействий кубические кристаллы с анизотропными центрами (примесями) остаются оптически изотропными (подробнее см. [65]).

дов частотная зависимость является слабой и можно с равным правом использовать ϵ_{ij} и ϵ_{ij}^{-1} . Но вблизи частоты дипольного перехода в кубических кристаллах, когда $\epsilon_0(\omega)$ может принимать большие значения, для учета роли пространственной дисперсии следует, естественно, воспользоваться разложением для обратного тензора $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$, т. е. разложением типа (4.21). Поскольку в негиротропных кристаллах тензор $\delta_{ijl}(\omega) = 0$, то

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} \epsilon_0^{-1}(\omega) + \beta'_{ijlm}(\omega) \tilde{n}^2 s_l s_m \quad (8.1)$$

(в (4.21) фигурирует тензор $\beta_{ijlm} = \frac{c^2}{\omega^2} \beta'_{ijlm}$; тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ записан в (8.1) сразу с учетом кубической симметрии). Как указывалось в п. 5.2, тензор β'_{ijlm} существенно упрощается, если направить оси x, y, z вдоль осей 4-го порядка. В этом случае для кристаллов классов T и T_h тензор β'_{ijlm} определяется четырьмя числами $\beta'_1, \beta'_2, \beta'_3, \beta'_4$, причем

$$\left. \begin{aligned} \beta'_1 &= \beta'_{xxxx} = \beta'_{yyyy} = \beta'_{zzzz}; & \beta'_2 &= \beta'_{yyxx} = \beta'_{xxzz} = \beta'_{zzyy}; \\ \beta'_3 &= \beta'_{xyxy} = \beta'_{yzyz} = \beta'_{zxzx}; & \beta'_4 &= \beta'_{zzxx} = \beta'_{xxyy} = \beta'_{yyzz}. \end{aligned} \right\} \quad (8.2)$$

В классах T_d, O и O_h , кроме того, $\beta'_2 = \beta'_4$.

Ради простоты мы ниже рассмотрим характер поляризации и дисперсию электромагнитных волн в кубических кристаллах, которые относятся к наиболее симметричным классам T_d и O_h *). Получающиеся результаты можно использовать не только вблизи дипольных переходов, но и вдали от всяких переходов (область прозрачности). В последнем случае, однако, оптическая анизотропия меньше, чем вблизи от резонансов. Как это следует из уравнений (2.26), а также (8.1) и (8.2), уравнения для компонент вектора \mathbf{D} имеют

*) Кристаллы, относящиеся к классу O , являются гиротропными. Поэтому в таких кристаллах тензор $\delta_{ijl} \neq 0$ (см. (6.1)), и исследование анизотропии следует, вообще говоря, вести при одновременном учете тензоров δ_{ijl} и β_{ijlm} .

в этом случае следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\tilde{n}^2} D_1 &= \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) D_1 - s_1 s_i D_i \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) + \\ &\quad + \tilde{\beta} \tilde{n}^2 s_1^2 D_1 - \tilde{\beta} \tilde{n}^2 s_1 D_i s_i^3, \\ \frac{1}{\tilde{n}^2} D_2 &= \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) D_2 - s_2 s_i D_i \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) + \\ &\quad + \tilde{\beta} \tilde{n}^2 s_2^2 D_2 - \tilde{\beta} \tilde{n}^2 s_2 D_i s_i^3, \\ \frac{1}{\tilde{n}^2} D_3 &= \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) D_3 - s_3 s_i D_i \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) + \\ &\quad + \tilde{\beta} \tilde{n}^2 s_3^2 D_3 - \tilde{\beta} \tilde{n}^2 s_3 D_i s_i^3, \end{aligned} \right\} (8.3)$$

где

$$\tilde{\beta} = \beta_1' - \beta_2' - 2\beta_3'. \quad (8.4)$$

Из системы уравнений (8.3), как, впрочем, и из исходного уравнения (2.26), естественно следует, что решения этой системы уравнений удовлетворяют условию поперечности вектора \mathbf{D} , т. е. условию $\mathbf{sD} = 0$. Этим обстоятельством можно воспользоваться и сразу же опустить в уравнениях (8.3) слагаемые, пропорциональные сумме $s_i D_i$. Но тогда упрощенную систему уравнений следует рассматривать при дополнительном условии $s_i D_i = 0$, что не приводит к каким-либо преимуществам по сравнению с применением системы (8.3).

Представляет интерес рассмотреть ряд частных случаев.

а) Предположим, что вектор \mathbf{s} направлен вдоль одного из ребер куба, например вдоль оси z . Тогда уравнения для компонент вектора \mathbf{D} упрощаются:

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} D_1 = \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) D_1, \quad \frac{1}{\tilde{n}^2} D_2 = \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) D_2, \quad D_3 = 0,$$

откуда следует, что в рассматриваемом случае величина \tilde{n}^2 не зависит от поляризации, т. е. от направления вектора \mathbf{D} , и определяется из уравнения

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} = \frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2. \quad (8.5)$$

Уравнение такого типа уже было рассмотрено ранее при анализе дисперсии электромагнитных волн в изотропной среде с учетом пространственной дисперсии (см. п. 7.2).

б) Предположим теперь, что вектор \mathbf{s} направлен вдоль какой-либо главной диагонали куба: $|s_1| = |s_2| = |s_3| = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

Тогда из (8.3) получаем (при условии $s_i D_i = 0$):

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} D_i = \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 + \frac{1}{3} \tilde{\beta} \tilde{n}^2 \right) D_i, \quad i = 1, 2, 3.$$

Следовательно, и в этом случае величина \tilde{n}^2 не зависит от поляризации, причем, как и в случае а), каждой из двух независимых поляризаций соответствует два значения \tilde{n}^2 , определяемые из уравнения

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} = \frac{1}{\varepsilon_0} + \left(\beta_2' + \frac{\tilde{\beta}}{3} \right) \tilde{n}^2. \quad (8.6)$$

Из сказанного в пунктах а) и б) следует, что семь рассмотренных направлений (три оси 4-го порядка — ребра куба и четыре оси 3-го порядка — пространственные диагонали куба) являются оптическими осями кристалла.

в) Пусть вектор \mathbf{s} направлен вдоль диагонали грани и, например, $|s_1| = |s_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $s_3 = 0$. Тогда, как это следует из (8.3), уравнения для D_i , $i = 1, 2, 3$, имеют следующий вид:

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} D_1 = \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 + \frac{1}{2} \tilde{\beta} \tilde{n}^2 \right) D_1, \quad D_2 = -D_1,$$

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} D_3 = \left(\frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2 \right) D_3.$$

Таким образом, в рассматриваемом направлении значения \tilde{n}^2 существенно зависят от поляризации. Если $D_3 \neq 0$ и $\tilde{\beta} \neq 0$, то $D_1 = D_2 = 0$ и, следовательно,

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} = \frac{1}{\varepsilon_0} + \beta_2' \tilde{n}^2. \quad (8.7)$$

Попутно отметим, что и в более общем случае, когда $|s_1| \neq |s_2|$, но по-прежнему $s_3 = 0$, указанное уравнение для

определения \tilde{n}^2 остается справедливым, причем выполняется также соотношение $D_1 = D_2 = 0$. Если же, наоборот, $D_3 = 0$, то при $|s_1| = |s_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ уравнение для определения \tilde{n}^2 таково:

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} = \frac{1}{\epsilon_0} + \left(\beta'_2 + \frac{1}{2} \tilde{\beta} \right) \tilde{n}^2. \quad (8.8)$$

Легко установить уравнение для определения \tilde{n}^2 у волны с $D_3 = 0$ и в случае, когда при $s_3 = 0$ $|s_1| \neq |s_2|$. Действительно, из условия поперечности вектора \mathbf{D} в этом случае получаем, что

$$D_2 = -\frac{s_1 D_1}{s_2}.$$

Путем подстановки этого значения D_2 в первое из уравнений (8.3) находим, что уравнение для определения \tilde{n}^2 имеет вид

$$\frac{1}{\tilde{n}^2} = \frac{1}{\epsilon_0} + (\beta'_2 + 2\tilde{\beta}s_1^2s_2^2) \tilde{n}^2 \quad (8.9)$$

и переходит в (8.8) при $s_1^2 = s_2^2 = \frac{1}{2}$.

Таким образом, для каждой из поляризаций имеется, вообще говоря, два значения показателя преломления. Исключение из этого правила может возникнуть только в том случае, если, например, при некоторых значениях величин s_1^2 , s_2^2 и $s_3 = 0$ обратится в нуль выражение $\beta'_2 + 2\tilde{\beta}s_1^2s_2^2$. Отметим, кроме того, что для волн с $D_3 = 0$ показатель преломления \tilde{n} в случае в) совпадает с таковым для случая а).

Полученные формулы для \tilde{n}^2 ясно свидетельствуют о том, что в зависимости от направления \mathbf{s} и поляризации влияние пространственной дисперсии оказывается весьма различным. В рамках используемого здесь феноменологического под-

*) Для этого необходимо, чтобы величины β'_2 и $\tilde{\beta}$ были разных знаков и чтобы выполнялось неравенство $\left| \frac{\beta'_2}{\tilde{\beta}} \right| < 2$. Тогда при $\beta'_2 + 2\tilde{\beta}s_1^2s_2^2 \rightarrow 0$ одно из решений уравнения (8.9) (решение, соответствующее новой волне) уходит на бесконечность ($\tilde{n}_2 \rightarrow \infty$).

хода [5] значения величин β'_2 и $\tilde{\beta}$ вычислены быть не могут. Однако проведенное рассмотрение оптической анизотропии в кубических кристаллах классов T_d и O_h вдали от линий поглощения и вблизи линий дипольных переходов оказывается не только достаточно полным, но и значительно более простым, чем соответствующие расчеты с использованием волновых функций экситонов [64]. Это, разумеется, относится и к кристаллам других классов.

В непосредственной близости от резонанса (полюса) величину $\epsilon_0(\omega)$ нужно считать комплексной и, как это следует из предыдущего, учет пространственной дисперсии приводит к тому, что в этой области частот оказываются зависящими от направления \mathbf{s} и поляризации не только вещественная, но и мнимая часть показателя преломления. Таким образом, в кубических кристаллах в окрестности дипольных линий поглощения может иметь место не только анизотропия дисперсии, но и анизотропия поглощения. Этот более или менее очевидный факт мы подчеркнули просто потому, что он естественно следует из всего ранее сказанного.

Итак, вблизи дипольных линий в кубических кристаллах учет пространственной дисперсии, подобно тому как это имеет место в изотропной среде (см. п. 7.2), в ряде случаев может привести к заметному изменению хода дисперсионных кривых (что связано с появлением новой волны), а также к резкой анизотропии оптических свойств; следовательно, эти эффекты пространственной дисперсии отнюдь не малы.

8.2. Оптическая анизотропия кубических кристаллов. Квадрупольные переходы. Перейдем теперь к рассмотрению анизотропии дисперсии и поглощения света вблизи квадрупольных линий поглощения, в окрестности которых $\epsilon_0(\omega)$ изменяется плавно, но по крайней мере одна из компонент тензора $\alpha_{ijklm}(\omega)$ имеет резонанс (полюс). С этой целью воспользуемся разложением тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (см. (4.20)):

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij}\epsilon_0(\omega) + \alpha_{ijklm}(\omega) s_l s_m \tilde{n}^2. \quad (8.10)$$

Здесь тензор $\alpha_{ijklm}(\omega)$ отличается от обозначенного той же буквой в (4.20) множителем $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$. Кроме того, было учтено, что в негиротропных кристаллах тензор $\gamma_{ijl} = 0$. Предполагая, что основное поглощение света в кристалле связано

с квадрупольными линиями поглощения, будем величину $\epsilon_0(\omega)$ считать вещественной, а тензор $\alpha_{ijlm}(\omega)$ — комплексным:

$$\alpha_{ijlm}(\omega) = \alpha'_{ijlm}(\omega) + i\alpha''_{ijlm}(\omega).$$

Поскольку в кубических кристаллах оба тензора α'_{ijlm} и α''_{ijlm} упрощаются одновременно, если только оси координат выбрать вдоль осей 4-го порядка, наличие поглощения ($\alpha''_{ijlm} \neq 0$) не усложняет рассмотрения. Отличные от нуля компоненты тензора α_{ijlm} указаны в (5.13). Как и в п. 8.1, ограничимся ради простоты рассмотрением анизотропии поглощения и дисперсии в окрестности квадрупольных линий поглощения в тех кубических кристаллах, которые относятся к классам T_d и O_h . В этих кристаллах отличные от нуля компоненты тензора $\alpha_{ijlm}(\omega)$ определяются заданием трех чисел $\alpha_1, \alpha_3, \alpha_2 = \alpha_4$ (см. п. 5.2, в частности, обозначения в (5.13)). Поэтому, в соответствии с (2.9), используя (8.10), получаем для компонент вектора \mathbf{E} следующую систему уравнений (см. также (5.18) при $\alpha_2 = \alpha_4$):

$$\tilde{n}^2 E_1 = [\epsilon_0 + \alpha_2 \tilde{n}^2] E_1 + \tilde{\alpha} \tilde{n}^2 s_1^2 E_1 + 2\alpha_3 (\mathbf{E}\mathbf{s}) \tilde{n}^2 s_1 + (\mathbf{E}\mathbf{s}) \tilde{n}^2 s_1 \quad (8.11)$$

и т. д., где

$$\tilde{\alpha} = \alpha_1 - \alpha_2 - 2\alpha_3. \quad (8.12)$$

Рассмотрим и здесь ряд частных случаев.

а) Допустим, что вектор \mathbf{s} направлен вдоль одного из ребер куба, например вдоль оси z ($s_3 = 1, s_1 = s_2 = 0$). В этом случае система уравнений (8.11) имеет следующий вид:

$$\tilde{n}^2 E_1 = (\epsilon_0 + \alpha_2 \tilde{n}^2) E_1, \quad \tilde{n}^2 E_2 = (\epsilon_0 + \alpha_2 \tilde{n}^2) E_2, \quad (\epsilon_0 + \alpha_1 \tilde{n}^2) E_3 = 0.$$

Таким образом, в этом случае имеется поперечная волна ($E_3 = 0$), для которой независимо от поляризации

$$\tilde{n}^2 = (n + ix)^2 = \frac{\epsilon_0}{1 - \alpha'_2 - i\alpha''_2}. \quad (8.13)$$

Может существовать также и продольная волна ($E_1 = E_2 = 0, E_3 \neq 0$), для которой

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_0}{\alpha'_1 + i\alpha''_1}. \quad (8.14)$$

б) Предположим теперь, что вектор \mathbf{s} направлен вдоль одной из главных диагоналей куба: $|s_1| = |s_2| = |s_3| = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

В этом случае, используя (8.11), находим следующее уравнение для компонент вектора \mathbf{E} :

$$\tilde{n}^2 E_i = \left(\epsilon_0 + \alpha_2 \tilde{n}^2 + \frac{1}{3} \tilde{\alpha} \tilde{n}^2 \right) E_i + (1 + 2\alpha_3) (\mathbf{E}\mathbf{s}) \tilde{n}^2 s_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (8.15)$$

При $\mathbf{E} = \mathbf{E}\mathbf{s}$ (продольная волна) $E_i = s_i (\mathbf{E}\mathbf{s})$ и, следовательно,

$$\tilde{n}^2 = - \frac{3\epsilon_0}{\alpha_1 + 2\alpha_2 + 4\alpha_3}. \quad (8.16)$$

Для поперечных волн $\mathbf{E}\mathbf{s} = 0$. В этом случае независимо от поляризации

$$\tilde{n}^2 = (n + ix)^2 = \frac{\epsilon_0}{1 - \frac{\tilde{\alpha}}{3} - \alpha_2}, \quad \alpha_2 = \alpha'_2 + i\alpha''_2, \quad \tilde{\alpha} = \tilde{\alpha}' + i\tilde{\alpha}'' \quad (8.17)$$

в) Пусть теперь вектор \mathbf{s} направлен вдоль диагонали грани куба. Например, пусть $|s_1| = |s_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}, s_3 = 0$. В этом случае на основании (8.11) имеем

$$\tilde{n}^2 E_i = (\epsilon_0 + \alpha_2 \tilde{n}^2) E_i + \frac{\tilde{\alpha}}{2} \tilde{n}^2 E_i + (2\alpha_3 + 1) \tilde{n}^2 (\mathbf{E}\mathbf{s}) s_i \quad (8.18a)$$

и

$$\tilde{n}^2 E_3 = (\epsilon_0 + \alpha_2 \tilde{n}^2) E_3. \quad (8.18b)$$

При этом значения \tilde{n}^2 существенно зависят от поляризации и для поперечных волн. Действительно, как это следует из (8.18), имеем:

1) Для волны с $E_3 = 0$ и $\mathbf{E}\mathbf{s} = 0$, т. е. поперечной волны, поляризованной в плоскости грани,

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_0}{1 - \alpha_2 - \tilde{\alpha}/2}. \quad (8.19)$$

2) Для волны с $E_3 \neq 0$ и $\mathbf{E}\mathbf{s} = 0$, т. е. поперечной волны, поляризованной перпендикулярно плоскости грани,

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_2}{1 - \alpha_2}. \quad (8.20)$$

Это соотношение для волны с $E_3 \neq 0$, $E_s = 0$ остается в силе и в том случае, когда $|s_1| \neq |s_2|$, $s_3 = 0$, поскольку при этом уравнение для E_3 по-прежнему имеет вид (8.18б).

3) В случае продольной волны, когда $E_3 = 0$, $E = E_s$,

$$\tilde{n}^2 = -\frac{\epsilon_0}{\tilde{\alpha}/2 + \alpha_2 + 2\alpha_3}. \quad (8.21)$$

Проведенное феноменологическое рассмотрение анизотропии кубических кристаллов в области квадрупольного поглощения показывает, что оптические свойства кристаллов классов T_d и O_h характеризуются, наряду с ϵ_0 , значениями трех величин: α_1 , α_2 , α_3 , связанных непосредственно с учетом пространственной дисперсии. Однако до сих пор мы не конкретизировали характера тех возбужденных состояний в кристалле, наличие которых приводит к резонансному поведению функций $\epsilon_0(\omega)$ и $\alpha_{ijlm}(\omega)$. Между тем такая конкретизация позволяет указать ряд правил типа правил отбора, устанавливающих для отдельных переходов некоторые дополнительные соотношения между величинами α_1 , α_2 и α_3 .

Поскольку нас здесь интересуют прежде всего экситонные состояния, перед тем как развить дальше теорию оптической анизотропии кубических кристаллов, остановимся на классификации состояний, с которыми приходится иметь дело при анализе квадрупольных переходов*).

8.3. Классификация состояний механических экситонов с $k=0$ и правила отбора для квадрупольных переходов. Хорошо известно, что стационарные состояния в кристалле и, в частности, экситонные возбужденные состояния можно классифицировать по неприводимым представлениям пространственной группы кристалла (см., например, [66—68]). Каждая пространственная группа содержит подгруппу параллельных переносов, заключающих в себе все возможные

*) Переходы, вероятность которых пропорциональна k^2 , разумеется, можно классифицировать, и не прибегая к представлению об экситонах и волновых функциях. Действительно, указанные переходы отвечают излучению скалярного источника (в этом случае могут излучаться лишь продольные волны; см. (8.27) и ниже), квадруполья и магнитного диполя. Другими словами, как и в случае дипольного излучения, здесь нет никакой особой необходимости прибегать к квантовому языку. Однако здесь мы воспользуемся им, так как он понадобится при рассмотрении экситонных линий.

параллельные переносы (трансляции), которые совмещают решетку саму с собой. Полная пространственная группа получается из этой подгруппы добавлением к ней N элементов («поворотных» элементов), содержащих повороты или отражения, причем N равно числу элементов группы соответствующего кристаллического класса. Всякий элемент пространственной группы можно рассматривать как произведение одного из элементов трансляционной подгруппы на один из «поворотных» элементов. Если пространственная группа не содержит существенных винтовых осей и плоскостей скольжения, совокупность «поворотных» элементов образует точечную группу, а именно группу соответствующего кристаллического класса (см. [68] и приложение II).

Поскольку мы здесь рассматриваем лишь слабую пространственную дисперсию, чему и отвечает метод разложения по степеням волнового вектора, входящие в разложения типа (4.19) тензоры $\epsilon_{ij}(\omega)$, $\alpha_{ijlm}(\omega)$ и т. д. определяются свойствами состояний механических экситонов при $k=0$. Волновые функции этих экситонных состояний с $k=0$ инвариантны относительно элементов подгруппы трансляций, т. е. кристалл в данном случае можно считать однородным (см. выражение (12) во введении, а также приложение I). Поэтому соответствующие экситонные состояния могут быть классифицированы по неприводимым представлениям точечной группы кристаллического класса*), которая характеризует симметрию направлений в кристалле. Именно такого рода классификацию экситонных состояний мы ниже и будем использовать.

Рассмотрим более подробно в качестве примера кристаллы типа Si_2O , которые относятся к наиболее симметричному классу O_h кубической сингонии. Характеры неприводимых представлений группы O_h указаны в табл. IV (в обозначениях [69], см. приложение I). Во втором столбце этой таблицы указано, как преобразуются соответствующие волновые функции под действием операций симметрии из группы O_h . Так, например, из таблицы следует, что три волновые функции, соответствующие трижды вырожденному (при $k=0$)

*) Последнее связано с тем, что точечная группа кристаллического класса изоморфна фактор-группе подгруппы трансляций. По этому поводу более подробно см., например, [67, 68] и приложение II, где приведены основные определения.

экситонному терму и имеющие симметрию неприводимого представления F_2 , преобразуются как симметризованные произведения разноименных компонент двух полярных векторов (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) . В табл. IV указано, как преобразуются лишь линейные и квадратичные комбинации компонент полярных векторов. Остальным неприводимым представлениям отвечают комбинации трех или более компонент полярных векторов. Например, представление A'_2 отвечает псевдоскаляру, т. е. ему соответствует выражение $(r_1[r_2r_3])$ и т. д.

Таблица IV
Характеры неприводимых представлений группы O_h

Неприводимые представления	Выражения, преобразующиеся по неприводимым представлениям $(x, y, z$ — компоненты полярного вектора r)	Операции симметрии									
		E	$3C_2^4$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	I	$3C_2^4$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$
A_1	$x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$ (скаляр)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2	$x_1x_2 - z_1z_2$	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
E	$2y_1y_2 - x_1x_2 - z_1z_2$	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1
F_1	$[r_1r_2]$ (псевдовектор)	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
F_2	$x_1y_2 + x_2y_1, x_1z_2 + x_2z_1, y_1z_2 + y_2z_1$	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
A'_1		1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A'_2		1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
E'		2	2	0	0	-1	-2	-2	0	0	1
F'_1	x, y, z (вектор)	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0
F'_2		3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0

Подобно тому как это имеет место для нижайших электронных термов многоатомных молекул (см. [69], § 98), для кристаллов обычно используется эмпирическое правило, под-

тверждаемое расчетами моделей кристалла (см., например, [66], а также § 13 этой книги), согласно которому волновая функция основного состояния кристалла обладает полной симметрией по отношению к преобразованиям симметрии кристалла. В рассматриваемом случае, например, это означает, что основное состояние имеет симметрию неприводимого представления A_1 , что и будет предполагаться. Поэтому, учитывая, что оператор дипольного момента преобразуется как полярный вектор, матричный элемент оператора дипольного момента будет отличен от нуля только для переходов из основного в такие экситонные состояния, волновые функции которых при $k=0$ преобразуются по неприводимому представлению F'_1 (см. табл. IV)*. Отличным от нуля матричным элементами оператора дипольного момента соответствуют отличные от нуля силы осциллятора перехода, так что на частоте перехода диэлектрическая проницаемость $\epsilon_0(\omega)$ без учета поглощения и пространственной дисперсии обращается в бесконечность. Таким образом, результаты, полученные в п. 8.1 на основании использования разложения (8.1) для тензора ϵ_{ij}^{-1} , позволяют учесть пространственную дисперсию, связанную с вкладом таких экситонных зон, волновые функции которых при $k=0$ преобразуются по неприводимому представлению F'_1 . Что же касается тех экситонных зон, волновые функции которых при $k=0$ преобразуются по неприводимым представлениям, отличным от представления F'_1 , то эти зоны в выражении для $\epsilon_{ij}(\omega, k)$ проявляются только при учете

*) Отметим, что используемая здесь классификация состояний механических экситонов является более простой и отличается от классификации состояний кулоновских экситонов. В частности, при классификации состояний кулоновских экситонов даже при $k=0$ оказывается существенным направление $s = k'/k$, причем классификацию состояний таких экситонов по их симметрии приходится проводить, вообще говоря, особо для каждого направления s .

Последнее связано с тем, что при полном учете кулоновского взаимодействия, т. е. учете также и влияния длинноволнового поля, например в случае группы O_h , представление F'_1 расщепляется, поскольку из этого представления отделяется представление, соответствующее продольным экситонам. Что же касается экситонных состояний, соответствующих остальным представлениям группы O_h , то их энергии при $k=0$ и при полном учете кулоновского взаимодействия остаются неизменными (см. § 13).

пространственной дисперсии. Так, например, подобно тому как это имеет место для атомов и молекул (см., например, [68]), вклад в квадрупольное поглощение и испускание света дают только такие экситонные зоны, волновые функции которых при $\mathbf{k} = 0$ преобразуются как произведения компонент двух полярных векторов. Совокупность этих произведений в группе O_h порождает приводимое представление V^2 , распадающееся на сумму неприводимых представлений *) (табл. IV и [68]):

$$V^2 = A_1 + E + F_1 + F_2. \quad (8.22)$$

При этом по представлению A_1 преобразуется скалярное произведение двух полярных векторов: $I = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$, по дважды вырожденному представлению E преобразуются две линейно независимые комбинации: $II = x_1x_2 - z_1z_2$ и $III = 2y_1y_2 - x_1x_2 - z_1z_2$, по трижды вырожденному представлению F_1 преобразуются три компоненты векторного произведения двух полярных векторов: $IV = y_1z_2 - y_2z_1$, $V = z_1x_2 - z_2x_1$, $VI = x_1y_2 - x_2y_1$, а по трижды вырожденному представлению F_2 преобразуются три симметричные комбинации: $VII = y_1z_2 + y_2z_1$, $VIII = z_1x_2 + z_2x_1$, $IX = x_1y_2 + x_2y_1$.

Каждое из этих квадрупольных экситонных состояний может, вообще говоря, давать вклад в квадрупольное поглощение света кристаллом. Однако в области частот, которая соответствует окрестности отдельного резонанса, можно принять во внимание только одну зону экситонных состояний. В этом приближении, как будет показано в § 12, при использовании матричных элементов перехода из основного состояния 0 в возбужденные состояния L -й зоны (при $\mathbf{k} = 0$), находим

$$\alpha_{ijlm}(\omega) \sim \frac{1}{2} \sum_p \{ \langle 0, L_p | \hat{T}_{il} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{T}_{jm} | 0, L_p \rangle + \langle 0, L_p | \hat{T}_{im} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{T}_{jl} | 0, L_p \rangle \}. \quad (8.23)$$

*) Представлениям A_1', A_2', A_2', E' и F_2' (см. табл. IV) отвечают более высокие мультиполи, не представляющие, видимо, интереса. Заметим также, что так как квадрупольным мы называем здесь все поглощение, вероятность которого пропорциональна k^2 , то, помимо истинно квадрупольных (представления E и F_2), сюда же относятся магнитодипольные (представление F_1) и скалярные (представление A_1) переходы.

Здесь оператор

$$\hat{T}_{ij} = \sum_{\alpha=1}^N (p_i^{\alpha} r_j^{\alpha} + r_j^{\alpha} p_i^{\alpha}), \quad (8.24)$$

ρ — номер вырожденного экситонного состояния (при $\mathbf{k} = 0$) в L -й зоне, а r^{α} и p^{α} — операторы координаты и импульса α -го электрона в кристалле. То обстоятельство, что величины \hat{T}_{ij} преобразуются как произведения компонент двух полярных векторов, и приводит к тому, что тензор $\alpha_{ijlm}(\omega)$ определяется вкладом только тех экситонных состояний, волновые функции которых преобразуются по одному из неприводимых представлений A_1, E, F_1 или F_2 .

Совершенно очевидно, что, применяя выражения (8.23) — (8.29), мы выходим за пределы чисто феноменологического описания. Вместе с тем здесь не используется само квантовомеханическое выражение для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, а учитывается лишь довольно ясное уже из общих соображений появление в этом выражении множителя типа (8.23). В случае вырожденного экситонного термина будем выбирать волновые функции так, чтобы они преобразовывались с точностью до численного коэффициента, так же, как указанные в табл. IV соответствующие линейные комбинации произведений компонент полярного вектора. Так, например, в случае дважды вырожденного термина волновые функции Ψ_E^{II} и Ψ_E^{III} выберем так, чтобы при преобразованиях симметрии группы O_h они преобразовались, как $\sqrt{3}II = \sqrt{3}(x_1x_2 - z_1z_2)$ и $III = 2y_1y_2 - x_1x_2 - z_1z_2$ *).

Ясно, что скалярное произведение $\int \Psi_E^{II} \Psi_E^{III} dr$ таких функций Ψ_E^{II} и Ψ_E^{III} равно нулю. (При $\mathbf{k} = 0$ все функции будем считать вещественными, что учтено выше при записи скалярного произведения; при повороте системы координат на угол $\pi/2$ вокруг оси y функция Ψ_E^{II} меняет знак, а функция Ψ_E^{III} остается неизменной. Поэтому инвариантная величина — скалярное произведение — при таком преобразовании координат должна была бы изменить знак и, следовательно, равна нулю.) Аналогично можно доказать взаимную ортогональность

*) Множитель $\sqrt{3}$ следует из гребования нормировки базисных функций.

функций $\Psi_{F_1}^{IV}$, $\Psi_{F_1}^V$, $\Psi_{F_1}^{VI}$ и т. д. В дальнейшем будут использованы следующие тождественные соотношения:

$$\left. \begin{aligned} x_1 x_2 &= \frac{1}{2} \text{II} - \frac{1}{6} \text{III} + \frac{1}{3} \text{I}, & y_1 y_2 &= \frac{1}{3} \text{III} + \frac{1}{3} \text{I}, \\ z_1 z_2 &= -\frac{1}{2} \text{II} - \frac{1}{6} \text{III} + \frac{1}{3} \text{I}, & x_1 y_2 &= \frac{1}{2} \text{IX} + \frac{1}{2} \text{VI}, \\ y_1 z_2 &= \frac{1}{2} \text{VII} + \frac{1}{2} \text{IV}, & y_1 x_2 &= \frac{1}{2} \text{IX} - \frac{1}{2} \text{VI}, \\ z_1 y_2 &= \frac{1}{2} \text{VII} - \frac{1}{2} \text{IV}, & x_1 z_2 &= \frac{1}{2} \text{VIII} - \frac{1}{2} \text{V}. \end{aligned} \right\} (8.25)$$

Эти очевидные соотношения выражают любое из произведений координат двух полярных векторов через такие линейные комбинации этих произведений, которые, в соответствии с нашим выбором волновых функций экситонов при $\mathbf{k} = 0$, преобразуются так же, как эти волновые функции (речь, разумеется, идет о волновых функциях, соответствующих представлениям A_1 , E , F_1 и F_2).

Перейдем теперь непосредственно к вычислению компонент тензора $\alpha_{ijlm}(\omega)$, определяемых вкладом отдельных экситонных состояний.

1) Предположим, например, что экситонное состояние L при $\mathbf{k} = 0$ преобразуется по невырожденному представлению A_1 , по которому преобразуется также и основное состояние системы. Тогда, используя (8.24) и (8.25), получаем

$$\left\langle 0, L \left| \sum_{\alpha=1}^N r_i^{\alpha} p_j^{\alpha} \right| 0 \right\rangle = \frac{\delta_{ij}}{3} \left\langle 0, L \left| \sum_{\alpha=1}^N \hat{r}^{\alpha} \hat{p}^{\alpha} \right| 0 \right\rangle. \quad (8.26)$$

Отсюда с помощью (8.23) и (8.24) сразу находим (см. также (5.13) и (5.14))

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &\equiv \alpha^{A_1} \neq 0, & \alpha_2 &= 0, & \alpha_3 &= \frac{\alpha^{A_1}}{2}, \\ \tilde{\alpha} &\equiv \alpha_1 - \alpha_2 - 2\alpha_3 = 0. \end{aligned} \right\} (8.27)$$

При этом, согласно (8.11),

$$(\tilde{n}^2 - \epsilon_0) E = (1 + \alpha^{A_1}) \tilde{n}^2 (E\mathbf{s}) \mathbf{s}.$$

Ясно, что рассматриваемое возбужденное состояние оказывается существенным только при исследовании продольной волны, для которой независимо от направления \mathbf{s} имеем $\tilde{n}^2 = -\epsilon_0/\alpha^{A_1}$, тогда как для поперечных волн $E\mathbf{s} = 0$ и $\tilde{n}^2 = \epsilon_0$.

2) Рассмотрим теперь случай дважды вырожденного терма E . Для волновых функций, соответствующих представлению E ,

$$\int \Psi_E^{II} (2\hat{T}_{22} - \hat{T}_{11} - \hat{T}_{33}) \Psi_0 \, dr = \int \Psi_E^{III} (\hat{T}_{11} - \hat{T}_{33}) \Psi_0 \, dr = 0.$$

Поэтому, в соответствии с (8.25),

$$\langle \Psi_E | \hat{T}_{ij} | \Psi_0 \rangle = \delta_{ij} M_{jj}, \quad (8.28)$$

где M_{jj} есть диагональный элемент, а не шпур, причем

$$\left. \begin{aligned} M_{11}(\text{II}) &\equiv \langle \Psi_E^{II} | \hat{T}_{11} | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi_E^{II} | \hat{T}_{11} - \hat{T}_{33} | \Psi_0 \rangle \equiv \frac{1}{2} M_1, \\ M_{22}(\text{II}) &= 0, & M_{33}(\text{II}) &= -\frac{1}{2} M_1, \\ M_{11}(\text{III}) &\equiv \langle \Psi_E^{III} | \hat{T}_{11} | \Psi_0 \rangle = \\ &= -\frac{1}{6} \langle \Psi_E^{III} | 2\hat{T}_{22} - \hat{T}_{11} - \hat{T}_{33} | \Psi_0 \rangle \equiv -\frac{1}{6} M_2, \\ M_{22}(\text{III}) &= \frac{1}{3} M_2, & M_{33}(\text{III}) &= -\frac{1}{6} M_2. \end{aligned} \right\} (8.29)$$

При выводе соотношений (8.29) мы воспользовались также соотношением

$$\langle \Psi_E^{II, III} | \hat{T}_{11} + \hat{T}_{22} + \hat{T}_{33} | \Psi_0 \rangle = 0,$$

которое выполняется в силу того, что оператор $(\hat{T}_{11} + \hat{T}_{22} + \hat{T}_{33})$ и функции $\Psi_E^{II, III}$ преобразуются по разным неприводимым представлениям группы O_h .

Легко убедиться в том, что

$$M_2 = \sqrt{3} M_1. \quad (8.30)$$

Действительно, совершая под знаком интеграла

$$M_1 = \langle \Psi_E^{II} | \hat{T}_{11} - \hat{T}_{33} | \Psi_0 \rangle$$

операцию g — поворот вокруг оси z на угол $\pi/2$, учитывая инвариантность интеграла и принимая во внимание соотношения

$$g\Psi_0 = \Psi_0, \\ g(\hat{T}_{11} - \hat{T}_{33}) = (\hat{T}_{22} - \hat{T}_{33}) \equiv \frac{1}{2}(\hat{T}_{11} - \hat{T}_{33}) + \frac{1}{2}(2\hat{T}_{22} - \hat{T}_{11} - \hat{T}_{33}),$$

а также соотношение

$$g\Psi_E^{\text{II}} = \frac{1}{2}\Psi_E^{\text{II}} + \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_E^{\text{III}},$$

получаем, что

$$M_1 = \frac{1}{4}(M_1 + \sqrt{3}M_2), \quad \text{т. е.} \quad M_2 = \sqrt{3}M_1.$$

Используя теперь (8.23), а также (8.29) и (8.30), находим

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &\equiv \alpha^E \neq 0, & \alpha_2 &= 0, & \alpha_3 &= -\frac{1}{4}\alpha^E, \\ \tilde{\alpha} &\equiv \alpha_1 - \alpha_2 - 2\alpha_3 = \frac{3}{2}\alpha^E. \end{aligned} \right\} \quad (8.31)$$

В этом случае система уравнений (8.11) все еще остается громоздкой:

$$\frac{\tilde{n}^2 - \epsilon_0}{\tilde{n}^2} E_1 = \frac{3\alpha^E}{2} E_1 s_1^2 + \left(1 - \frac{\alpha^E}{2}\right) (Es) s_1 \quad (8.32)$$

и т. д.

Поэтому выражение для \tilde{n}^2 при произвольном s будет получено ниже методом теории возмущений. Сейчас же отметим лишь одно следствие соотношений (8.13), (8.17), (8.19) и (8.20). Именно, наличие в кристалле квадрупольного экситонного состояния рассматриваемого типа не проявляется ни в дисперсии, ни в поглощении в том случае, когда свет распространяется вдоль ребер куба, и, наоборот, проявляется при любой поляризации, когда свет распространяется вдоль главных диагоналей куба. В том случае, когда вектор s направлен вдоль диагонали граней куба, экситонное состояние типа E проявляется только тогда, когда электрический вектор лежит в плоскости грани*).

*) Эти выводы применительно к поглощению совпадают со сделанными в работе [70]. Вопрос об анизотропии дисперсии, т. е. о зависимости n от s в работе [70], не был рассмотрен.

3) Остановимся теперь на случае трижды вырожденного термина F_1 , волновые функции которого преобразуются, как компоненты псевдовектора. В этом случае, в соответствии со сделанным выбором базиса, а также в силу (8.25)

$$\langle \Psi_{F_1} | \hat{T}_{ij} | \Psi_0 \rangle = (1 - \delta_{ij}) M_{ij}, \quad (8.33)$$

где, разумеется, не производится суммирование по i и j и

$$\left. \begin{aligned} M_{23}(\text{IV}) &\equiv \langle \Psi_{F_1}^{\text{IV}} | \hat{T}_{23} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_{F_1}^{\text{IV}} | \hat{T}_{23} - \hat{T}_{32} | \Psi_0 \rangle = -M_{32}(\text{IV}), \\ M_{12}(\text{IV}) &= M_{21}(\text{IV}) = M_{13}(\text{IV}) = M_{31}(\text{IV}) = 0, \\ M_{13}(\text{V}) &\equiv \langle \Psi_{F_1}^{\text{V}} | \hat{T}_{13} | \Psi_0 \rangle = \\ &= -\frac{1}{2} \langle \Psi_{F_1}^{\text{V}} | \hat{T}_{31} - \hat{T}_{13} | \Psi_0 \rangle = -M_{31}(\text{V}), \\ M_{12}(\text{V}) &= M_{21}(\text{V}) = M_{23}(\text{V}) = M_{32}(\text{V}) = 0, \\ M_{12}(\text{VI}) &\equiv \langle \Psi_{F_1}^{\text{VI}} | \hat{T}_{12} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_{F_1}^{\text{VI}} | \hat{T}_{12} - \hat{T}_{21} | \Psi_0 \rangle = -M_{21}(\text{VI}), \\ M_{23}(\text{VI}) &= M_{32}(\text{VI}) = M_{13}(\text{VI}) = M_{31}(\text{VI}) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (8.34)$$

Кроме того, нетрудно убедиться в том, что

$$M_{23}(\text{IV}) = M_{31}(\text{V}) = M_{12}(\text{VI}) \equiv M(F_1). \quad (8.35)$$

Докажем, например, справедливость первого из приведенных равенств. Для этого совершим под знаком интеграла

$$M_{23}(\text{IV}) = \frac{1}{2} \langle \Psi_{F_1}^{\text{IV}} | \hat{T}_{23} - \hat{T}_{32} | \Psi_0 \rangle$$

ту же операцию g , что и в случае 2, т. е. поворот вокруг оси z на угол $\pi/2$. Тогда, опять же принимая во внимание инвариантность интеграла и соотношения

$$g\Psi_0 = \Psi_0, \quad g(\hat{T}_{23} - \hat{T}_{32}) = (\hat{T}_{31} - \hat{T}_{13}), \quad g\Psi_{F_1}^{\text{IV}} = \Psi_{F_1}^{\text{V}},$$

сразу получаем искомое соотношение. Используя теперь (8.23), а также (8.33), (8.34) и (8.35), находим, что

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = \alpha^{F_1} \neq 0, \quad \alpha_3 = -\frac{\alpha^{F_1}}{2}, \\ \tilde{\alpha} = \alpha_1 - \alpha_2 - 2\alpha_3 = 0. \end{aligned} \right\} \quad (8.36)$$

Поскольку при этом, согласно (8.11),

$$(\tilde{n}^2 - \epsilon_0) E_i = \alpha^{F_1} \tilde{n}^2 E_i + (1 - \alpha^{F_1}) \tilde{n}^2 (\mathbf{E}\mathbf{s}) s_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

приходим к выводу о полной изотропии поглощения и дисперсии. Для поперечных волн $\mathbf{E}\mathbf{s} = 0$ и

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_0}{1 - \alpha^{F_1} - i\alpha^{F_1}}. \quad (8.37)$$

Что же касается решения для продольной волны, то в исследуемой области частот, где $\epsilon_0 \neq 0$, таких решений в окрестности F_1 -переходов не возникает.

4) Рассмотрим, наконец, ситуацию, возникающую в том случае, когда экситонный терм при $\mathbf{k} = 0$ является трижды вырожденным и соответствует представлению F_2 (см. табл. IV).

В этом случае аналогично соотношению (8.33)

$$\langle \Psi_{F_2} | \hat{T}_{ij} | \Psi_0 \rangle = (1 - \delta_{ij}) M_{ij}, \quad (8.38)$$

где

$$\left. \begin{aligned} M_{23}(\text{VII}) &\equiv \langle \Psi_{F_2}^{\text{VII}} | \hat{T}_{23} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_{F_2}^{\text{VII}} | \hat{T}_{23} + \hat{T}_{32} | \Psi_0 \rangle = M_{32}(\text{VII}), \\ M_{12}(\text{VII}) &= M_{21}(\text{VII}) = M_{13}(\text{VII}) = M_{31}(\text{VII}) = 0, \\ M_{31}(\text{VIII}) &\equiv \langle \Psi_{F_2}^{\text{VIII}} | \hat{T}_{31} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_{F_2}^{\text{VIII}} | \hat{T}_{31} + \hat{T}_{13} | \Psi_0 \rangle = M_{13}(\text{VIII}), \\ M_{12}(\text{VIII}) &= M_{21}(\text{VIII}) = M_{23}(\text{VIII}) = M_{32}(\text{VIII}) = 0, \\ M_{12}(\text{IX}) &\equiv \langle \Psi_{F_2}^{\text{IX}} | \hat{T}_{12} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_{F_2}^{\text{IX}} | \hat{T}_{12} + \hat{T}_{21} | \Psi_0 \rangle = M_{21}(\text{IX}), \\ M_{23}(\text{IX}) &= M_{32}(\text{IX}) = M_{13}(\text{IX}) = M_{31}(\text{IX}) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (8.39)$$

Кроме того, подобно (8.35), выполняются равенства

$$M_{23}(\text{VII}) = M_{31}(\text{VIII}) = M_{12}(\text{IX}) \equiv M(F_2). \quad (8.40)$$

Отсюда, а также на основании (8.23) и (8.24) находим, что

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = \alpha^{F_2} \neq 0, \quad \alpha_3 = \frac{\alpha^{F_2}}{2}, \\ \tilde{\alpha} = \alpha_1 - \alpha_2 - 2\alpha_3 = -2\alpha^{F_2}. \end{aligned} \right\} \quad (8.41)$$

Поэтому, как это следует из соотношений (8.13), (8.17), (8.19) и (8.20), рассматриваемый квадрупольный переход приводит к заметной анизотропии в дисперсии и поглощении света. При этом, если вектор \mathbf{s} направлен вдоль ребер куба, то независимо от поляризации

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_0}{1 - \alpha^{F_2} - i\alpha^{F_2}}.$$

Для вектора \mathbf{s} , направленного вдоль главной диагонали куба, независимо от поляризации

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_0}{1 - (\alpha^{F_2} + i\alpha^{F_2})/3}.$$

Если же вектор \mathbf{s} направлен вдоль диагонали грани куба, то для волны, поляризованной в плоскости грани,

$$\tilde{n}^2 = \epsilon_0$$

и, следовательно, квадрупольное поглощение отсутствует, тогда как для волны, поляризованной перпендикулярно плоскости грани,

$$\tilde{n}^2 = \frac{\epsilon_0}{1 - \alpha^{F_2} - i\alpha^{F_2}}.$$

В общем случае произвольного \mathbf{s} для определения \tilde{n}^2 следует решать систему уравнений (8.11), которая в условиях (8.41) принимает следующий вид:

$$\frac{\tilde{n}^2 - \epsilon_0}{\tilde{n}^2} E_1 = \alpha^{F_2} E_1 - 2\alpha^{F_2} E_1 s_1^2 + (1 + \alpha^{F_2}) (\mathbf{E}\mathbf{s}) s_1 \quad (8.42)$$

и т. д.

Точное вычисление величины \tilde{n}^2 из (8.42) с учетом членов α^2 , α^3 и т. д. довольно громоздко и, вообще говоря,

отвечало бы превышению точности исходных выражений, поскольку в рассматриваемом приближении для непродольных волн имеет смысл в большинстве случаев определять только линейные по α поправки к \tilde{n}^2 . Для этого же достаточно воспользоваться теорией возмущений. Действительно, введем обозначения

$$L_{ij}^{(0)} = \alpha^{F_2} \delta_{ij} + (1 + \alpha^{F_2}) s_i s_j, \quad L_{ij}^{(1)} = -2\alpha^{F_2} s_i^2 \delta_{ij}$$

и перепишем систему уравнений (8.42) в следующем виде

$$(L^{(0)} + L^{(1)}) \mathbf{E} = \rho \mathbf{E}, \quad \rho = \frac{\tilde{n}^2 - \epsilon_0}{\tilde{n}^2}.$$

В нулевом приближении

$$(L^{(0)} - \rho) \mathbf{E} = 0$$

и имеет место полная изотропия, волны могут быть только либо строго поперечными (для них $\rho_0^\perp = \alpha^{F_2}$), либо строго продольными (для них $\rho_0^\parallel = 1 + 2\alpha^{F_2}$).

Поправка первого приближения

$$\rho_1 = \frac{1}{|\mathbf{E}_0|^2} (\mathbf{E}_0, L^{(1)} \mathbf{E}_0) = -2\alpha^{F_2} (s_1^2 e_1^2 + s_2^2 e_2^2 + s_3^2 e_3^2),$$

где вектор поляризации волны $\mathbf{e} = \mathbf{E}_0 / |\mathbf{E}_0|$. Таким образом, для поперечных волн с точностью до малых первого порядка малости по α

$$\frac{\tilde{n}^2 - \epsilon_0}{\tilde{n}^2} = \alpha^{F_2} - 2\alpha^{F_2} s_i^2 e_i^2$$

или

$$\tilde{n}_\perp^2 = \epsilon_0 + \alpha^{F_2} \epsilon_0 (1 - 2s_i^2 e_i^2). \quad (8.43)$$

Для продольных волн ($\mathbf{e} = \pm \mathbf{s}$)

$$\frac{\tilde{n}^2 - \epsilon_0}{\tilde{n}^2} = 1 + 2\alpha^{F_2} - 2\alpha^{F_2} (s_1^4 + s_2^4 + s_3^4)$$

или *)

$$\tilde{n}_\parallel^2 = -\frac{\epsilon_0}{2\alpha^{F_2} (1 - s_1^4 - s_2^4 - s_3^4)}.$$

*) Обращение величины \tilde{n}_\parallel^2 в бесконечность, когда вектор \mathbf{s} направлен вдоль одного из ребер куба, отвечает в этом случае отсутствию продольной волны в области частот, где $\epsilon_0 \neq 0$.

Оптические свойства среды иногда бывает удобно рассматривать в сферической системе координат (рис. 16) для двух взаимно перпендикулярных направлений поляризации \mathbf{e}^p и \mathbf{e}^s , причем \mathbf{e}^p соответствует поляризации в меридиональной плоскости, содержащей ось z и направление распространения света *).

Компоненты векторов \mathbf{e}^p и \mathbf{e}^s определяются соотношениями

$$\left. \begin{aligned} e_1^s &= \sin \varphi, \\ e_2^s &= -\cos \varphi, \\ e_3^s &= 0, \\ e_1^p &= -\cos \theta \cos \varphi, \\ e_2^p &= -\cos \theta \sin \varphi, \\ e_3^p &= \sin \theta. \end{aligned} \right\} (8.44)$$

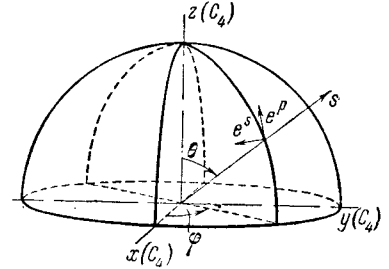


Рис. 16. Сферическая система координат.

В то же время компоненты вектора $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$, очевидно, таковы:

$$s_1 = \sin \theta \cos \varphi, \quad s_2 = \sin \theta \sin \varphi, \quad s_3 = \cos \theta. \quad (8.45)$$

Подставляя (8.44) в (8.43), для поляризаций s и p получаем

$$\left. \begin{aligned} \tilde{n}_s^2 &= \epsilon_0 + \alpha^{F_2} \epsilon_0 (1 - \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi), \\ \tilde{n}_p^2 &= \epsilon_0 + \frac{\alpha^{F_2} \epsilon_0}{4} (\sin^2 2\theta \sin^2 2\varphi + 4 \cos^2 2\theta). \end{aligned} \right\} (8.46)$$

Учитывая теперь, что $\tilde{n} = n + ix$, в первом порядке по α находим (напомним, что эти формулы относятся к уровню, преобразующемуся по представлению F_2):

$$\left. \begin{aligned} n_s^2 &= \epsilon_0 + \alpha^{F_2} \epsilon_0 (1 - \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi), \\ x_s &= \frac{1}{2} \alpha^{F_2} \sqrt{\epsilon_0} (1 - \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi), \\ n_p^2 &= \epsilon_0 + \frac{\alpha^{F_2} \epsilon_0}{4} (\sin^2 2\theta \sin^2 2\varphi + 4 \cos^2 2\theta), \\ x_p &= \frac{\alpha^{F_2} \sqrt{\epsilon_0}}{8} (\sin^2 2\theta \sin^2 2\varphi + 4 \cos^2 2\theta). \end{aligned} \right\} (8.47)$$

*) Индекс s , отвечающий поляризации \mathbf{e}^s , здесь и ниже не имеет никакого отношения к вектору $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$.

Совершенно аналогично можно с точностью до первых степеней α получить выражение для комплексного показателя преломления \tilde{n} в ранее рассмотренном случае дважды вырожденного экситонного терма (представление E). Используя (8.32), для квазипоперечных волн (т. е. для волн, являющихся поперечными при $\alpha = 0$) получаем

$$\tilde{n}^2 = \epsilon_0 + \frac{3\alpha^E \epsilon_0}{2} (s_1^2 e_1^2 + s_2^2 e_2^2 + s_3^2 e_3^2) \quad (8.48)$$

или

$$\left. \begin{aligned} \tilde{n}_s^2 &= \epsilon_0 + \frac{3\alpha^E \epsilon_0}{4} \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi, \\ \tilde{n}_p^2 &= \epsilon_0 + \frac{3\alpha^E \epsilon_0}{16} \sin^2 2\theta (3 + \cos^2 2\varphi). \end{aligned} \right\} \quad (8.49)$$

Отсюда

$$\left. \begin{aligned} n_s^2 &= \epsilon_0 + \frac{3\alpha^E \epsilon_0}{4} \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi, \\ \kappa_s &= \epsilon_0 + \frac{3\alpha^E \sqrt{\epsilon_0}}{8} \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi, \\ n_p^2 &= \epsilon_0 + \frac{3\alpha^E \epsilon_0}{16} \sin^2 2\theta (3 + \cos^2 2\varphi), \\ \kappa_p &= \frac{3\alpha^E \sqrt{\epsilon_0}}{32} \sin^2 2\theta (3 + \cos^2 2\varphi). \end{aligned} \right\} \quad (8.50)$$

8.4. Новые волны вблизи квадрупольных линий поглощения. Продольные волны. До сих пор, используя разложение (8.10), мы неявно предполагали, что компоненты тензора α_{ijlm} зависят только от частоты световой волны, но не зависят от ее волнового вектора \mathbf{k} . Как уже указывалось в п. 4.2, более общим является разложение (см. (4.24))

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} \epsilon_0(\omega) + \alpha_{ijlm}(\omega, \mathbf{k}) s_i s_j \tilde{n}^2. \quad (8.51)$$

Можно, однако, показать (см. § 12), что и в этом более общем случае сохраняется соотношение (8.23), лежащее в основе вывода правил отбора для квадрупольных переходов (см. п. 8.3). Это обстоятельство позволяет без особого труда проанализировать следствия, возникающие при учете пространственной дисперсии с использованием разложения (8.51). Действительно, поскольку соотношение (8.23) остается

справедливым, для разных квадрупольных переходов отличные от нуля компоненты тензора $\alpha_{ijlm}(\omega, \mathbf{k})$ оказываются теми же, что и в случае, рассмотренном в п. 8.3. Поэтому остаются неизменными все выводы о характере анизотропии вблизи линий различных квадрупольных переходов, а также все соотношения для величины \tilde{n}^2 (см. формулы вида (8.13), (8.14) и т. д.). Однако, поскольку в рассматриваемом случае соответствующие величины α_1 , α_2 и α_3 сами оказываются функциями \tilde{n}^2 (см. (4.24)), упомянутые соотношения принимают характер уравнений для величины \tilde{n}^2 .

Для того чтобы пояснить сказанное, рассмотрим конкретный пример. Пусть, например, речь идет об окрестности квадрупольного перехода симметрии E , и предположим сначала, что вектор \mathbf{s} направлен вдоль одной из главных диагоналей куба. В этом случае величина \tilde{n}^2 не зависит от поляризации света и удовлетворяет уравнению (8.17)

$$\tilde{n}^2 = \epsilon_0 + \frac{1}{2} \tilde{n}^2 \alpha^E(\omega, \mathbf{k}). \quad (8.52)$$

Примем теперь, в соответствии с (4.23), что

$$\alpha^E(\omega, \mathbf{k}) = \frac{2\nu}{\omega - \omega_l - \mu \tilde{n}^2} \equiv \frac{2\nu}{\xi - \mu \tilde{n}^2}. \quad (8.52a)$$

Тогда из (8.52) находим, что в рассматриваемом случае при одной частоте и поляризации в кристалле могут распространяться два типа поперечных волн с различными значениями коэффициентов преломления \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 :

$$\tilde{n}_{1,2}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi}{\mu} + \epsilon_0 - \frac{\nu}{\mu} \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\xi}{\mu} + \epsilon_0 - \frac{\nu}{\mu} \right)^2 - 4\epsilon_0 \frac{\xi}{\mu}}. \quad (8.53)$$

Соотношение вида (8.53) сохраняется и для квадрупольных экситонов, относящихся к представлениям F_1 и F_2 , и только значения величин ν и μ оказываются иными.

Таким образом, вблизи квадрупольных линий поглощения также, вообще говоря, возможно появление добавочных волн [71]. Вопрос о возможности их экспериментального обнаружения, а в этой связи и о роли поглощения, не учтенного в (8.53), будет обсуждаться в § 11. Здесь же отметим, что появление добавочных решений для \tilde{n}^2 в окрестности квадрупольных

линий возможно только при поляризациях волн, когда имеет место их квадрупольное поглощение. Так, например, для волны, распространяющейся вдоль диагонали грани куба, новая волна в окрестности экситонного перехода, соответствующего представлению F_2 , может появиться, только если вектор \mathbf{E} перпендикулярен грани куба (см. п. 8.3) (если вектор \mathbf{E} лежит в плоскости грани, то $\nu = 0$, см. (8.52)). Некоторые результаты рассмотрения анизотропии оптических свойств в кристаллах класса O_h в окрестности квадрупольных линий поглощения сведены в табл. V. Ее содержание иллюстрирует также сказанное об условиях появления добавочных волн.

Таблица V

Анизотропия поглощения и дисперсии в окрестности квадрупольных переходов в кубических кристаллах класса O_h

Направление \mathbf{s}	Симметрия квадрупольного экситона			
	A_1	E	F_1	F_2
По ребру куба	На характер распространения поперечных волн этот переход не влияет	Поглощения и добавочных волн нет	Независимо от поляризации и направления распространения волн имеются поглощение и добавочные волны	Независимо от поляризации имеются поглощение и добавочные волны
По главной диагонали куба		Поглощения и добавочные волны имеются независимо от поляризации		Независимо от поляризации имеются поглощение и добавочные волны
По диагонали грани		Поглощения и добавочная волна имеются, если электрическое поле \mathbf{E} лежит в плоскости грани		Поглощения и добавочная волна имеются, если электрическое поле \mathbf{E} перпендикулярно плоскости грани

В заключение этого параграфа остановимся вкратце на вопросе о продольных волнах, которые могут распространяться в окрестности некоторых квадрупольных линий поглощения. Как это следует уже из системы уравнений (8.11), в окрестности тех экситонных состояний, волновые функции которых преобразуются по неприводимому представлению A_1 (см. табл. IV), продольные волны могут распространяться при любом направлении \mathbf{s} . Действительно, для таких экситонных состояний (см. (8.27)) величина $\tilde{\alpha} = 0$ и система уравнений (8.11) допускает решение $\mathbf{E} = E\mathbf{s}$, если только

$$\tilde{n}^2 = -\frac{\epsilon_0}{(\alpha_2 + 2\alpha_3)} = -\frac{\epsilon_0}{(2\alpha_3)} = -\frac{\epsilon_0}{\tilde{\alpha}^{A_1}}.$$

Для экситонных состояний симметрии F_1 также $\tilde{\alpha} = 0$ (см. (8.36)). Однако в этом случае одновременно выполняется соотношение $\alpha_2 = 2\alpha_3 = 0$. Поэтому в этой области частот при любых \mathbf{s} продольных волн нет (мы предполагаем, что $\epsilon_0(\omega) \neq 0$). Что же касается окрестности частот экситонных состояний симметрии E и F_2 , то здесь продольные волны могут распространяться лишь в отдельных направлениях. Именно для экситонных состояний симметрии E , как это следует из (8.32),

$$\tilde{n}_{\parallel}^2 = -\epsilon_0/\alpha^E, \quad \mathbf{s} \text{ параллелен ребру куба,}$$

$$\tilde{n}_{\parallel}^2 = -4\epsilon_0/\alpha^E, \quad \mathbf{s} \text{ параллелен диагонали грани куба.}$$

Для экситонных состояний симметрии F_2 , как это следует из (8.42),

$$\tilde{n}_{\parallel}^2 = -\epsilon_0/\alpha^{F_2}, \quad \mathbf{s} \text{ параллелен диагонали грани куба,}$$

$$\tilde{n}_{\parallel}^2 = -3\epsilon_0/4\alpha^{F_2}, \quad \mathbf{s} \text{ параллелен главной диагонали куба,}$$

§ 9. Влияние механических напряжений и внешних электрического и магнитного полей

9.1. Анизотропия оптических свойств и правила отбора при наличии внешних воздействий. Необходимость теоретического изучения влияния внешних воздействий на вид тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и на экситонные состояния в кристаллах становится особенно ясной, если учесть, что этому вопросу

посвящен целый ряд экспериментальных работ [72—75]. При этом в применении к кубическим кристаллам объектом исследования является искусственная анизотропия оптических свойств кристалла вблизи экситонных линий поглощения в зависимости от характера деформации, направления магнитного или электрического поля и т. д.

Применительно к кристаллам типа Cu_2O ряд упомянутых вопросов был рассмотрен в работах [75—79] в рамках теории экситонов.

В рамках развиваемой здесь феноменологической кристаллооптики с пространственной дисперсией влияние внешних воздействий может быть рассмотрено при учете зависимости тензоров, фигурирующих в (4.19) и (4.21), от внешних полей и механических напряжений. По постановке вопроса здесь нет существенных различий по сравнению с обычной кристаллооптикой, где влияние внешних воздействий на тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$ изучено достаточно полно (см., например, [34]). Для нас же наибольший интерес представляет исследование тех новых особенностей, которые возникают именно при учете пространственной дисперсии. Тем не менее ради иллюстрации мы коснемся также эффектов, которые возникают и без учета пространственной дисперсии.

При наличии статических или квазистатических воздействий симметрия кристалла, вообще говоря, понижается, и в результате ограничения, накладываемые условиями симметрии на компоненты тензоров $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}, \sigma_{lm}^{(0)})$ или сразу же на $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}, \sigma_{lm}^{(0)})$, $\gamma_{ijl}(\omega, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}, \sigma_{lm}^{(0)})$, $\alpha_{ijlm}(\omega, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}, \sigma_{lm}^{(0)})$ и т. д., оказываются иными, чем ограничения, имеющие место при $\mathbf{E}^{(0)} = \mathbf{H}^{(0)} = \sigma_{lm}^{(0)} = 0$. (Здесь $\mathbf{E}^{(0)}$ и $\mathbf{H}^{(0)}$ — напряженности внешнего электрического и магнитного полей, $\sigma_{ij}^{(0)}$ — тензор напряжений; среду считаем немагнитной, в силу чего не делаем различия между индукцией $\mathbf{B}^{(0)}$ и полем $\mathbf{H}^{(0)}$).

Учет зависимости ϵ_{ij} от $\mathbf{E}^{(0)}$, $\mathbf{H}^{(0)}$, $\sigma_{lm}^{(0)}$ позволяет, подобно тому как это было сделано в § 8, определить поляризацию нормальных электромагнитных волн, а также анизотропию дисперсии и поглощения в области экситонных линий поглощения при наличии внешних воздействий. Рассмотрение этой проблемы для кристаллов различных классов является

простой, но достаточно громоздкой задачей. Поэтому мы ограничимся лишь несколькими относящимися сюда вопросами.

Рассмотрим, например, влияние постоянного электрического поля на экситонные линии в кристалле Cu_2O (класс O_h). Будем при этом ради простоты считать, что электрическое поле направлено вдоль оси симметрии 4-го порядка. Если ось z направить вдоль поля, то оператор возмущения кристалла полем в 1-м порядке по полю имеет вид $\hat{H}' = -E^{(0)}\hat{P}_z$, где \hat{P} — оператор дипольного момента кристалла. Из вида оператора \hat{H}' сразу следует, что в присутствии поля симметрия кристалла понижается до группы C_{4v} , для которой характеры неприводимых представлений указаны в табл. VI. Сравнивая характеры группы C_{4v} с характерами группы O_h (табл. IV), нетрудно обычным образом установить, что под влиянием электрического поля вместо дипольной линии поглощения должен возникнуть дублет (представление F'_1 , неприводимое в группе O_h , в группе C_{4v} становится приводимым, так что $F'_1 = A_1 + E$).

В соответствии с табл. VI одна из компонент дублета должна быть поляризована вдоль поля, а другая — перпендикулярно полю, так что кристалл становится анизотропным (одноосным) даже при пренебрежении пространственной дисперсией. При этом отличные от нуля компоненты тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ следующие: $\epsilon_{11} = \epsilon_{22}$, ϵ_{33} .

Таблица VI

Характеры неприводимых представлений группы C_{4v}

Неприводимые представления	Выражения, преобразующиеся по неприводимым представлениям (x, y, z) — компоненты полярного вектора \mathbf{r})	Операции симметрии				
		E	C_4^2	$2C_4$	$2iC_4^2$	$2iC_4$
A_1	$z; z_1z_2; x_1x_2 + y_1y_2$	1	1	1	1	1
A_2	$x_1y_2 - x_2y_1$	1	1	1	-1	-1
B_1	$x_1x_2 - y_1y_2$	1	1	-1	1	-1
B_2	$x_1y_2 + x_2y_1$	1	1	-1	-1	1
E	$x; y$	2	-2	0	0	0

Интересные превращения претерпевают и квадрупольные экситонные состояния*). В частности, невырожденное экситонное состояние, имеющее симметрию представления A_1 группы O_h , при наличии электрического поля, направленного вдоль оси z , имеет симметрию представления A_1 группы C_{4v} и его волновая функция преобразуется так же, как z -я компонента полярного вектора; в результате переходы в это состояние из основного состояния (симметрии A_1) становятся разрешенными**) в дипольном приближении (см. табл. VI), и компонента ϵ_{33} становится комплексной. Независимо от величины пространственной дисперсии, с ростом электрического поля интенсивность такого рода линий должна расти. Ясно, что в окрестности этих экситонных линий, когда без учета пространственной дисперсии кристалл ведет себя как одноосный, имеем ($\epsilon_{33} = \epsilon_{11} + \Delta\epsilon_{33}$)

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{E}^{(0)}) = \epsilon_{11}(\omega, \mathbf{E}^{(0)}) \delta_{ij} + \Delta\epsilon_{33}(\omega, \mathbf{E}^{(0)}) \delta_{i3} \delta_{j3}.$$

Поэтому уравнения для компонент электрического поля в световой волне в соответствии с (2.9) принимают следующий вид:

$$\tilde{n}^2 E_i = \epsilon_{11} E_i + \Delta\epsilon_{33} \delta_{i3} E_3 + \tilde{n}^2 (\mathbf{E}\mathbf{s}) s_i.$$

Отсюда сразу следует, что в любом направлении \mathbf{s} могут распространяться два типа волн, как это обычно и имеет место для одноосных кристаллов. Для одной из них электрический вектор \mathbf{E} перпендикулярен плоскости, проходящей через ось z и вектор \mathbf{s} , причем $\tilde{n}^2 = n_s^2 = \epsilon_{11}$ и $\kappa_s \equiv \kappa_s = 0$. Для другой волны

$$\tilde{n}^2 = \tilde{n}_p^2 = \epsilon_{11} \frac{1 + \Delta\epsilon_{33}/\epsilon_{11}}{1 + \Delta\epsilon_{33} \cos^2 \theta / \epsilon_{11}}.$$

Вводя обозначение $\Delta\epsilon_{33} = \Delta\epsilon'_{33} + i \Delta\epsilon''_{33}$, находим

$$n_p^2 = \epsilon_{11} + \Delta\epsilon'_{33} \sin^2 \theta, \quad \kappa_p = \frac{\Delta\epsilon''_{33}}{2V\epsilon_{11}} \sin^2 \theta,$$

*) Ряд вопросов, связанных с влиянием постоянного электрического поля на квадрупольные экситонные линии в Cu_2O , был рассмотрен в работе [76].

**) На возможность «возгорания» экситонных линий в Cu_2O в присутствии электрического поля указано в [79].

причем в этих формулах уже учтено, что при слабых внешних полях $\mathbf{E}^{(0)} \kappa_p^2 \ll n_p^2$. Во всех этих формулах нет множителя k^2 , откуда также ясно, что речь идет о дипольных переходах.

Аналогичная ситуация («возгорание») имеет место для квадрупольных линий, волновые функции которых при отсутствии поля имеют симметрию представлений E , F_1 и F_2 , поскольку под влиянием электрического поля эти термы расщепляются (см. приложение II):

$$E \rightarrow A_1 + B_1, \quad F_1 \rightarrow E + A_2, \quad F_2 \rightarrow E + B_2,$$

и в то же время переходы в экситонные состояния, имеющие симметрию представлений A_1 и E , из основного состояния кристалла (представление A_1), согласно табл. VI, разрешены в дипольном приближении.

Что же касается переходов в экситонные состояния, имеющие в присутствии электрического поля симметрию неприводимых представлений B_1 , B_2 и A_2 группы C_{4v} , то эти переходы остаются квадрупольными, и для анализа соответствующей им анизотропии оптических свойств достаточно воспользоваться методом, изложенным в предыдущем параграфе.

В группе C_{4v} по представлению A_2 преобразуются величины типа $x_1 y_2 - x_2 y_1$, по B_1 — типа $x_1 x_2 - y_1 y_2$, а по B_2 — типа $x_1 y_2 + x_2 y_1$. Поэтому, используя (8.23), можно легко убедиться, что в окрестности экситонной линии типа A_2 единственно отличными от нуля компонентами тензора α_{ijlm} являются компоненты

$$\alpha_{1122} = \alpha_{2211} \equiv \alpha(A_2), \quad \alpha_{1212} = \alpha_{2121} = \alpha_{2112} = \alpha_{1221} = -\frac{1}{2} \alpha(A_2),$$

в окрестности экситонной линии B_1 имеем

$$\alpha_{1111} = \alpha_{2222} \equiv \alpha(B_1); \quad \alpha_{1212} = \alpha_{2121} = \alpha_{1221} = \alpha_{2112} = -\frac{1}{2} \alpha(B_1);$$

в окрестности линии B_2 — компоненты

$$\alpha_{1122} = \alpha_{2211} = \alpha(B_2), \quad \alpha_{1212} = \alpha_{2112} = \alpha_{2121} = \alpha_{1221} = \frac{1}{2} \alpha(B_2).$$

Знание этих, отличных от нуля компонент тензора α_{ijlm} позволяет полностью рассмотреть анизотропию оптических

свойств кристалла в окрестности линий типа A_2 , B_1 и B_2 . Поскольку соответствующие расчеты аналогичны имеющимся в п. 8.3, мы здесь ограничимся тем, что приведем только результаты, полученные методом теории возмущений (см. п. 8.4).

Для квазипоперечных волн (т. е. волн, поперечных при $\alpha_{ijklm} = 0$) имеют место формулы

$$\tilde{n}^2 = \epsilon_0 + \epsilon_0 \alpha (A_2) [es]_z^2 \quad \text{для перехода типа } A_2,$$

$$\tilde{n}^2 = \epsilon_0 + \epsilon_0 \alpha (B_1) (e_x s_x - e_y s_y)^2 \quad \text{для перехода типа } B_1,$$

$$\tilde{n}^2 = \epsilon_0 + \epsilon_0 \alpha (B_2) (e_x s_y + e_y s_x)^2 \quad \text{для перехода типа } B_2.$$

Отсюда, в частности, следует:

1) для перехода типа A_2 :

$$n_s^2 = \epsilon_0 + \epsilon_0 \alpha' (A_2) \sin^2 \theta, \quad \chi_s = \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon_0} \alpha'' (A_2) \sin^2 \theta,$$

$$n_p^2 = \epsilon_0, \quad \chi_p = 0.$$

2) Для перехода типа B_1 :

$$n_s^2 = \epsilon_0 + \epsilon_0 \alpha' (B_1) \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi,$$

$$\chi_s = \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon_0} \alpha'' (B_1) \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi,$$

$$n_p^2 = \epsilon_0 + \frac{1}{4} \epsilon_0 \alpha' (B_1) \sin^2 2\theta \cos^2 2\varphi,$$

$$\chi_p = \frac{1}{8} \sqrt{\epsilon_0} \alpha'' (B_1) \sin^2 2\theta \cos^2 2\varphi.$$

3) Для перехода типа B_2 :

$$n_s^2 = \epsilon_0 + \epsilon_0 \alpha' (B_2) \sin^2 \theta \cos^2 2\varphi,$$

$$\chi_s = \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon_0} \alpha'' (B_2) \sin^2 \theta \cos^2 2\varphi,$$

$$n_p^2 = \epsilon_0 + \frac{1}{4} \epsilon_0 \alpha' (B_2) \sin^2 2\theta \sin^2 2\varphi,$$

$$\chi_p = \frac{1}{8} \sqrt{\epsilon_0} \alpha'' (B_2) \sin^2 2\theta \sin^2 2\varphi.$$

В приведенных выше выражениях $\alpha = \alpha' + i\alpha''$, а аргумент у α (например, $\alpha(A_2)$) указывает состояние, которому отве-

чает значение α . Выбор углов и направлений ясен из рис. 16. Совершенно аналогичным образом могут быть изучены эффекты, возникающие под влиянием постоянного магнитного поля или механических напряжений. При этом для определения новой группы симметрии кристалла нужно воспользоваться следующим принципом: кристалл, находящийся под влиянием внешнего воздействия, будет обладать только теми элементами симметрии, которые являются общими для гамильтониана кристалла при отсутствии воздействия и части гамильтониана, зависящей от воздействия (магнитного поля, напряжений и т. д.).

9.2. Явная зависимость тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ от напряженности слабых внешних полей. Эффект инверсии магнитного поля. До сих пор мы не рассматривали вопроса о явной зависимости оптических эффектов от величины приложенных внешних воздействий. В том случае, когда внешние воздействия достаточно слабы, явная зависимость от величины внешних воздействий может быть установлена путем разложения фигурирующих в (4.19) — (4.22) тензоров в ряд по степеням величин $\mathbf{E}^{(0)}$, $\mathbf{H}^{(0)}$, $\sigma_{ij}^{(0)}$ — в полном соответствии с тем, как это делается в обычной кристаллооптике (см., например, [34]). Поскольку при этом учет пространственной дисперсии вносит известные особенности, мы сейчас остановимся на некоторых из них, ограничившись рассмотрением влияния внешних электрического и магнитного полей, а также того и другого одновременно.

При наличии внешних слабых электрического и магнитного полей вместо (4.19) воспользуемся разложением

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}) = \epsilon_{0ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega) k_l + \alpha_{ijklm}(\omega) k_l k_m +$$

$$+ A_{ijl}(\omega) E_l^{(0)} + A_{ijl}^{(1)}(\omega) H_l^{(0)} + A_{ijlm}^{(1)}(\omega) H_l^{(0)} k_m +$$

$$+ A_{ijlm}^{(2)}(\omega) H_l^{(0)} E_m^{(0)} + A_{ijlm}^{(3)}(\omega) E_l^{(0)} k_m + A_{ijlm}^{(4)}(\omega) H_l^{(0)} H_m^{(0)} +$$

$$+ A_{ijlm}^{(5)}(\omega) E_l^{(0)} E_m^{(0)} + A_{ijklmn}(\omega) E_l^{(0)} H_m^{(0)} k_n + \dots \quad (9.1)$$

При этом, поскольку $\mathbf{H}^{(0)}$ — аксиальный, а \mathbf{k} и $\mathbf{E}^{(0)}$ — полярные векторы, A_{ijl} , $A_{ijlm}^{(3)}$, $A_{ijlm}^{(4)}$ и $A_{ijlm}^{(5)}$ есть обычные тензоры, а $A_{ijl}^{(1)}$, $A_{ijlm}^{(2)}$ и A_{ijklmn} — псевдотензоры.

Принцип симметрии кинетических коэффициентов требует (см. (1.21)), чтобы тензор (9.1) удовлетворял следующему соотношению (как уже указывалось, мы не делаем здесь различия между $\mathbf{B}^{(0)}$ и $\mathbf{H}^{(0)}$, считая среду немагнитной):

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}) = \epsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, -\mathbf{H}^{(0)}). \quad (9.2)$$

Отсюда сразу следует, что

$$\left. \begin{aligned} \gamma_{ijl} &= -\gamma_{jil}, & A_{ijl} &= A_{jil}, & A_{ijl}^{(1)} &= -A_{jil}^{(1)}, \\ A_{ijlm}^{(2)} &= -A_{jilm}^{(2)}, & A_{ijlm}^{(3)} &= -A_{jilm}^{(3)}, \\ A_{ijlm}^{(4)} &= A_{jilm}^{(4)}, & A_{ijlm}^{(5)} &= A_{jilm}^{(5)}, \\ A_{ijklmn} &= A_{jilmn}. \end{aligned} \right\} \quad (9.3)$$

Условие отсутствия поглощения требует эрмитовости тензора диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}^*$. В этом случае антисимметричные по ij тензоры, фигурирующие в (9.1), являются чисто мнимыми.

Отметим также, что псевдотензор $A_{ijl}^{(1)}$ (а также $B_{ijl}^{(1)}$ в (9.5)) обуславливает у кристаллов наличие магнитооптических эффектов [1], причем

$$\left. \begin{aligned} A_{ijl}^{(1)} &= e_{ijm} A_{nl}, \\ B_{ijl}^{(1)} &= e_{ijm} B_{ml}, \end{aligned} \right\} \quad (9.4)$$

где A_{ml} и B_{ml} — тензоры второго ранга, вообще говоря, несимметричные и, как всегда, e_{ijm} — полностью антисимметричный единичный псевдотензор 3-го ранга.

Симметрия кристалла существенно уменьшает число независимых компонент тензоров, фигурирующих в соотношении (9.1). Компоненты этих тензоров должны быть инвариантны относительно замены системы координат, соответствующей любой из операций симметрии кристалла. Отсюда, в частности, следует, что в кристаллах с центром инверсии тензоры 3-го ранга $\gamma_{ijl} = A_{ijl} = 0$. Аналогичным образом приходим к выводу, что в таких кристаллах обращаются в нуль псевдотензоры 4-го ранга $A_{ijlm}^{(1)}$ и $A_{ijlm}^{(2)}$, поскольку при инверсии эти величины изменяют свой знак. Соотношение, аналогичное (9.1), можно написать также и для обратного тензора

диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)})$:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}) &= \epsilon_{0ij}^{-1}(\omega) + i\delta_{ijl}(\omega) k_l + \beta_{ijlm}(\omega) k_l k_m + \\ &+ B_{ijl}(\omega) E_l^{(0)} + B_{ijl}^{(1)}(\omega) H_l^{(0)} + B_{ijlm}^{(1)}(\omega) H_l^{(0)} k_m + \\ &+ B_{ijlm}^{(2)}(\omega) H_l^{(0)} E_m^{(0)} + B_{ijlm}^{(3)}(\omega) E_l^{(0)} k_m + B_{ijlm}^{(4)}(\omega) H_l^{(0)} H_m^{(0)} + \\ &+ B_{ijlm}^{(5)}(\omega) E_l^{(0)} E_m^{(0)} + B_{ijklmn} H_l^{(0)} k_m E_n^{(0)} \dots \end{aligned} \quad (9.5)$$

При этом, разумеется, остаются в силе все изложенные выше соображения об ограничениях, связанных с принципом симметрии кинетических коэффициентов и симметрией кристалла.

Вместе с тем необходимо сделать следующее замечание. Разложения типа (9.1) или (9.5) справедливы лишь при условии достаточной малости коэффициентов $A_{ij} \dots(\omega)$ и $B_{ij} \dots(\omega)$, когда тензоры ϵ_{ij} или ϵ_{ij}^{-1} являются аналитическими функциями напряженностей электрического и магнитного внешних полей. В противном случае ограничиться членами с низшими степенями поля $\mathbf{E}^{(0)}$ или $\mathbf{H}^{(0)}$ уже нельзя. Именно такая ситуация может возникнуть в окрестности вырожденного терма в том случае, когда внешние поля приводят к снятию этого вырождения. Последнее, например, имеет место для кубических кристаллов с центром симметрии в окрестности вырожденного уровня, для которого реализуется линейный эффект Штарка*). Ниже предполагается, разумеется, что используемые разложения применимы.

*) Чтобы пояснить сказанное, рассмотрим среду, для которой при $E^{(0)} = 0$

$$\epsilon = 1 - 2a/(\omega^2 - \omega_l^2(0)),$$

а в присутствии поля

$$\omega_l = \omega_l(0) \pm \mu |E^{(0)}| / 2\omega_l(0).$$

Тогда в первом приближении

$$\epsilon(E^{(0)}) = 1 - a/(\omega^2 - \omega_l^2(0) + \mu |E^{(0)}|) - a/(\omega^2 - \omega_l^2(0) - \mu |E^{(0)}|).$$

Отсюда

$$\epsilon^{-1}(\omega, E^{(0)}) \approx 1 + \frac{2a}{\omega^2 - \omega_l^2(0) + 2a} + \frac{2a\mu^2 |E^{(0)}|^2}{[\omega^2 - \omega_l^2(0) - 2a]^2 [\omega^2 - \omega_l^2(0)]}.$$

Очевидно, что член с $|E^{(0)}|^2$ в этом разложении неограниченно возрастает при $\omega \rightarrow \omega_l(0)$.

В условиях, когда тензоры $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^0)$ или $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^0)$ нельзя просто разлагать в ряд по соответствующей переменной, во всех известных нам случаях существенные особые точки отсутствуют, и можно представить эти тензоры как отношение полиномов (в случае разложения по \mathbf{k} см., например, (4.23)). Для приведенного примера (см. сноску) нужно, очевидно, базироваться на соотношении

$$\epsilon(\omega, \mathbf{E}^{(0)}) = \frac{[\omega^2 - \omega_l^2(0)]^2 - 2a[\omega^2 - \omega_l^2(0)] - \mu^2 |E^{(0)}|^2}{[\omega^2 - \omega_l^2(0)]^2 - \mu^2 |E^{(0)}|^2}.$$

Как уже указывалось в п. 2.2, знание тензора диэлектрической проницаемости позволяет определить зависимость от \mathbf{k} собственных частот в кулоновской задаче, которые, если не учитывать поглощение и пространственную дисперсию, соответствуют полюсам $n^2(\omega)$ и, следовательно, определяют положение линии в спектре поглощения. При учете поглощения и пространственной дисперсии линии поглощения размываются в более или менее широкие полосы. Однако если ширина линии поглощения значительно меньше ширины экситонной зоны (см. п. 13.1), то положение линии в спектре приближенно определяется значением собственной частоты в кулоновской задаче, взятой при значении волнового вектора, равном волновому вектору света в пустоте*) $\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} \mathbf{s}$ (более подробно см. § 14).

В присутствии рассматриваемых внешних воздействий зависимости частот «фиктивных» продольных волн и частот «волн поляризации» от волнового вектора, в соответствии с (2.37) и (2.41), определяются из уравнений

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)}) s_i s_j = 0, \quad \mathbf{E} \neq 0 \quad (9.6)$$

и

$$|\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}, \mathbf{H}^{(0)})| = 0, \quad (\mathbf{kD}) = 0, \quad \mathbf{D} \neq 0 \quad (9.7)$$

соответственно.

Если имеется только внешнее магнитное поле ($\mathbf{H}^{(0)} \neq 0$, $\mathbf{E}^{(0)} = 0$), то в кристаллах с центром инверсии $A_{ijlm}^{(1)} =$

*) Здесь мы ради простоты не учитываем влияния других резонансов.

$= B_{ijlm}^{(1)} = 0$ (напомним, что эти псевдотензоры при инверсии меняют знак и, следовательно, равны нулю), и пространственная дисперсия, как это следует из (9.1) и (9.5), проявляется только во втором порядке по \mathbf{k} , тогда как в кристаллах без центра инверсии в разложениях (9.1) и (9.5) присутствуют также слагаемые, линейные по \mathbf{k} . Наличие в (9.1) и (9.5) линейных по $\mathbf{H}^{(0)}$ слагаемых приводит, вообще говоря, к «эффекту инверсии магнитного поля» — в этом случае

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}^{(0)}) \neq \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, -\mathbf{H}^{(0)}).$$

Впрочем, такая возможность ясна и из (9.2). Эффект инверсии магнитного поля проявляется в том, что частоты в кулоновской задаче, а следовательно, и положение линий поглощения в спектре изменяются при инверсии магнитного поля. Поскольку, однако, результаты исследования оптических эффектов, связанных с членами $A_{ijl}^{(1)} H_l^{(0)}$ или $B_{ijl}^{(1)} H_l^{(0)}$, хорошо известны (см., например, [1], § 82), мы здесь более подробно рассмотрим роль тех слагаемых в (9.1) и (9.5), которые связаны с учетом пространственной дисперсии.

С этой целью представим тензоры $A_{ijlm}^{(1)}$ и $B_{ijlm}^{(1)}$ в виде суммы

$$A_{ijlm}^{(1)} = A_{ijlm}^{(1)c} + A_{ijlm}^{(1)a}, \quad (9.8a)$$

$$B_{ijlm}^{(1)} = B_{ijlm}^{(1)c} + B_{ijlm}^{(1)a}, \quad (9.8б)$$

где $A_{ijlm}^{(1)c} = A_{ijlm}^{(1)c}$, $A_{ijlm}^{(1)a} = -A_{ijml}^{(1)a}$ и т. д.

Псевдотензоры $A_{ijlm}^{(1)c}$ и $B_{ijlm}^{(1)c}$ по своим свойствам симметрии относительно вращений и перестановки индексов совершенно аналогичны тензору α_{ijlm} (см. § 4, табл. III для кристаллических классов без центра инверсии).

Что касается псевдотензоров $A_{ijlm}^{(1)a}$ и $B_{ijlm}^{(1)a}$, то их можно представить в следующем виде:

$$A_{ijlm}^{(1)a} = e_{lmn} C_{nlj}, \quad (9.9a)$$

$$B_{ijlm}^{(1)a} = e_{lmn} D_{nlj}^{(1)}. \quad (9.9б)$$

Поскольку полностью антисимметричная единичная матрица e_{lmn} является псевдотензором, C_{nlj} и D_{nlj} суть обычные тензоры 3-го ранга, причем $C_{nlj} = C_{njl}$ и $D_{nlj}^{(1)} = D_{njl}^{(1)}$. Следовательно, свойства симметрии тензоров C_{nlj} и $D_{nlj}^{(1)}$ полностью

совпадают со свойствами симметрии у тензора, определяющего величину пьезоэлектрического эффекта (см. [34], гл. VII). В связи с тем, что в [34] указаны отличные от нуля компоненты тензора указанного типа для разных кристаллических классов, мы здесь на этом вопросе более подробно останавливаться не будем.

Используя (9.8) и (9.9), находим, что

$$A_{ijlm}^{(1)} H_l^{(0)} k_m = C_{nij} [H^{(0)} \mathbf{k}]_n + A_{ijlm}^{(1)c} H_l^{(0)} k_m, \quad (9.10a)$$

$$B_{ijlm}^{(1)} H_l^{(0)} k_m = D_{nij}^{(1)} [H^{(0)} \mathbf{k}]_n + B_{ijlm}^{(1)c} H_l^{(0)} k_m. \quad (9.10б)$$

Рассмотрим теперь влияние внешнего магнитного поля на частоты «фиктивных» продольных волн. С этой целью, подставляя в (9.6) выражение (9.1) при $\mathbf{E}^{(0)} = 0$, приходим к выводу, что искомые частоты удовлетворяют следующему уравнению:

$$s_i \varepsilon_{0ij}(\omega) s_j + s_i s_j \alpha_{ijlm} k_l k_m + (C[H^{(0)} \mathbf{k}]) + s_i s_j A_{ijlm}^{(1)c} H_l^{(0)} k_m + s_i s_j A_{ijlm}^{(4)} H_l^{(0)} H_m^{(0)} = 0, \quad (9.11)$$

где компоненты вектора \mathbf{C}

$$C_n = C_{nij} s_i s_j, \quad n = 1, 2, 3. \quad (9.12)$$

Ограничившись окрестностью одного из резонансов, положим

$$\varepsilon_{0ij}(\omega) = \varepsilon_{0ij}^0 + \frac{g_{ij}}{\omega^2 - \omega_L^2(0)}, \quad (9.13)$$

где $\hbar\omega_L(0)$ — энергия механического экситона в L -й зоне при $\mathbf{k} = 0$. Подставляя теперь (9.13) в (9.11) и ограничившись линейными по $H^{(0)}$ слагаемыми, находим, что искомая частота «фиктивной» продольной волны (т. е. одного из кулоновских экситонов) определяется соотношением

$$\omega(\mathbf{k}, H^{(0)}) = \omega_L(0) - \frac{g(\mathbf{s})}{2\omega_L(0)\varepsilon_0^2(\mathbf{s})} [\varepsilon_0(\mathbf{s}) - (C[H^{(0)} \mathbf{k}]) - A_{ijlm}^{(1)c} s_i s_j H_l^{(0)} k_m - \alpha_{ijlm} s_i s_j k_l k_m], \quad (9.14)$$

где $g(\mathbf{s}) = g_{ij} s_i s_j$, $\varepsilon_0(\mathbf{s}) = \varepsilon_{0ij}^0 s_i s_j$. Из формулы (9.14) следует, что $\omega(\mathbf{k}, H^{(0)}) \neq \omega(\mathbf{k}, -H^{(0)})$, причем этот эффект («эффект инверсии магнитного поля») обусловлен именно учетом пространственной дисперсии. Дело в том, что при полу-

чении (9.14) слагаемые, пропорциональные тензору $A_{ijl}^{(1)}$ (см. (9.1)), выпали, ибо $s_i s_j A_{ijl}^{(1)} H_l^{(0)} = 0$ в силу соотношений (9.4).

9.3. Влияние магнитного и электрического полей в кристалле сульфида кадмия (CdS). Рассмотрим более подробно влияние инверсии магнитного поля на частоты «фиктивных» продольных волн в кристаллах типа CdS (пространственная группа C_{6v}^4). Характеры точечной группы C_{6v} представлены в табл. VII (в обозначениях [69]).

Таблица VII

Характеры неприводимых представлений группы C_{6v}

Неприводимые представления	Операция симметрии					
	E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_v$	$3\sigma_v'$
$A_1; z$	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_2	1	-1	1	-1	1	-1
B_1	1	-1	1	-1	-1	1
E_2	2	2	-1	-1	0	0
$E_1; x, y$	2	-2	-1	1	0	0

Из этой таблицы следует, что состояния механических экситонов при $\mathbf{k} = 0$, которые из основного состояния могут возбуждаться светом в дипольном приближении, имеют симметрию представлений A_1 и E_1 группы C_{6v} . Поэтому, если волновые функции экситона в L -й зоне при $\mathbf{k} = 0$ преобразуются по представлению A_1 , то $g_{ij} = g_{A_1} \delta_{i3} \delta_{j3}$, если же они преобразуются по E_1 , то $g_{ij} = g_{E_1} (\delta_{i1} \delta_{j1} + \delta_{i2} \delta_{j2})$. Для кристаллов, принадлежащих к классу C_{6v} , отличные от нуля компоненты тензора C_{nij} следующие (см. [34]):

$$C_{333}, \quad C_{223} = C_{232} = C_{113} = C_{131}, \quad C_{311} = C_{322}. \quad (9.15)$$

Поэтому, как это следует из соотношения (9.12), компоненты вектора \mathbf{C} определяются так:

$$C_1 = 2C_{113} s_1 s_3, \quad C_2 = 2C_{223} s_2 s_3, \quad C_3 = C_{311} (s_1^2 + s_2^2) + C_{333} s_3^2. \quad (9.16)$$

Таким образом, вектор \mathbf{C} , являясь, подобно вектору гирации $f_i' = f_{ij}' s_j$ (см. п. 5.1), функцией направления вектора \mathbf{s} ,

вообще говоря, не направлен вдоль оптической оси. Последнее имеет место только в том случае, когда вектор $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$ либо перпендикулярен оптической оси, либо ей параллелен. Отметим также, что для отдельных экситонных термов некоторые из компонент, указанных в (9.15), могут обратиться в нуль. Для выяснения этого вопроса необходима соответствующая теория, которая позволила бы выразить компоненты тензора C_{nij} через волновые функции механических экситонов при $\mathbf{k} = 0$. Поскольку в настоящее время такая теория только начинает развиваться, ограничимся здесь еще только одним замечанием. Для тех экситонных термов, для которых обращаются в нуль компоненты $C_{113} = C_{223} = 0$, вектор \mathbf{C} при любых направлениях \mathbf{s} направлен вдоль оптической оси. И наоборот, если $C_{311} = C_{333} = 0$, то вектор \mathbf{C} при любых \mathbf{s} оказывается перпендикулярным оптической оси.

Перейдем теперь к анализу того слагаемого в (9.14), которое связано с псевдотензором $A_{ijlm}^{(1)c}$. С этой целью определим отличные от нуля компоненты псевдотензора $A_{ijlm}^{(1)c}$ в кристаллах класса C_{6v} . При нахождении дополнительных связей, которые накладываются симметрией на компоненты псевдотензора $A_{ijlm}^{(1)c}$, следует помнить, что при всяких поворотах псевдотензор $A_{ijlm}^{(1)c}$ ведет себя, как истинный тензор. Поэтому прежде всего можно использовать те ограничения, которые накладываются на тензор $A_{ijlm}^{(1)c}$ наличием оси 6-го порядка. Поскольку относительно перестановки индексов тензор $A_{ijlm}^{(1)c}$ подобен тензору α_{ijlm} , отличные от нуля компоненты псевдотензора $A_{ijlm}^{(1)c}$ могут находиться только среди тех компонент, которые одноименны отличным от нуля компонентам тензора α_{ijlm} в кристаллическом классе C_6 . Окончательный же выбор отличных от нуля компонент псевдотензора $A_{ijlm}^{(1)c}$ основан на том, что эти компоненты в классе C_{6v} соответствуют тем отличным от нуля компонентам тензора α_{ijlm} в классе C_6 , которые при отражении в плоскостях симметрии σ_v и σ_v' группы C_{6v} изменяют знак. Последнее связано с тем, что компоненты псевдотензора $A_{ijlm}^{(1)c}$ остаются при этом неизменными.

На основании приведенных соображений, предполагая, что оси x и y лежат во взаимно ортогональных плоскостях симметрии σ_v и σ_v' , и используя табл. III, находим следующие

щие отличные от нуля компоненты псевдотензора $A_{ijlm}^{(1)c}$:

$$A_{1112}^{(1)c} = A_{1222}^{(1)c} = -A_{2212}^{(1)c} = -A_{1211}^{(1)c}, \quad A_{2313}^{(1)c} = -A_{1323}^{(1)c}. \quad (9.17)$$

Поэтому

$$A_{ijlm}^{(1)c} s_i s_j H_l^{(0)} k_m = -[A_{1112}^{(1)c} (s_3^2 - 1) + 2A_{2313}^{(1)c} s_3^2] [kH^{(0)}]_3. \quad (9.18)$$

Из соотношений (9.14) и (9.18), в частности, следует, что линейные по $H^{(0)}$ слагаемые в выражении для энергии кулоновского экситона обращаются в нуль, если вектор \mathbf{s} направлен вдоль магнитного поля.

В работе [80] для интерпретации эффекта инверсии магнитного поля предполагается, что при наличии внешнего магнитного поля в выражении для энергии экситона возникает дополнительное слагаемое $\frac{\hbar}{cm_{\text{экс}}} (d[H^{(0)}\mathbf{k}])$, соответствующее взаимодействию дипольного момента экситона \mathbf{d} с электрическим полем $\frac{\hbar}{cm_{\text{экс}}} [kH^{(0)}]$. По мнению авторов работы [80] (см. также [81, 82]), именно такое электрическое поле возникает в присутствии внешнего магнитного поля в системе координат, связанной с движущимся экситоном.

Однако в действительности, такой подход недостаточно точен, даже если не учитывать тот факт, что групповая скорость экситона $\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$ и лишь в частном случае равна $\hbar\mathbf{k}/m_{\text{экс}}$. В самом деле, в выражении (9.14) сумма линейных по $H^{(0)}$ слагаемых, если учесть (9.18), может быть представлена в следующем компактном виде:

$$(C[H^{(0)}\mathbf{k}]) + A_{ijlm}^{(1)c} s_i s_j H_l^{(0)} k_m = (\tilde{C}[H^{(0)}\mathbf{k}]),$$

где компоненты вектора \tilde{C}

$$\tilde{C}_1 = C_1, \quad \tilde{C}_2 = C_2, \quad \tilde{C}_3 = C_3 - [A_{1112}^{(1)c} (1 - s_3^2) - 2A_{2313}^{(1)c} s_3^2].$$

Поэтому, как это видно из (9.14), в выражении для энергии экситона $\hbar\omega(kH^{(0)})$ действительно возникает слагаемое типа $(\tilde{C}[H^{(0)}\mathbf{k}])$, однако вектор $\tilde{C}(\mathbf{s})$ даже в одноосном кристалле не обязательно направлен вдоль оптической оси.

Напомним, что частоты рассматривавшихся выше «фиктивных» продольных волн определяют положение линий

поглощения света, распространяющегося только в таких направлениях, в которых световые волны (реальные экситоны) не являются строго поперечными. Для кристаллов типа CdS это осуществляется, если волновой вектор \mathbf{k} не направлен ни вдоль, ни перпендикулярно к оптической оси (только в этом случае пригодно выражение (9.14)). В противном случае положение линий поглощения определяется значениями частот «волн поляризации». Поэтому следует рассмотреть также влияние внешнего магнитного поля на дисперсию частот «волн поляризации».

Ограничимся здесь обсуждением лишь одного частного случая кристаллов типа CdS, предполагая, что векторы $\mathbf{H}^{(0)}$, \mathbf{k} и оптическая ось образуют тройку взаимно ортогональных направлений. Пусть, например, в соответствии с этим выбором $k_2 = k_3 = 0$, $H_1^{(0)} = H_3^{(0)} = 0$. Поскольку нас интересует вопрос о том, содержатся ли в выражениях для частот волн поляризации слагаемые порядка $H^{(0)}$ и $\mathbf{k}H^{(0)}$, в окрестности дипольных линий ограничимся следующим выражением для тензора ϵ_{ij}^{-1} :

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}^{(0)}) &= \\ &= \epsilon_{0ij}^{-1} + e_{ijm} [\mathbf{h}\mathbf{k}]_m + e_{ijm} B_{mi} H_l^{(0)} + B_{ijlm}^{(1)} H_l^{(0)} k_n. \end{aligned} \quad (9.19)$$

В этом выражении мы уже учли второе из соотношений (9.4), а также тот факт, что в кристаллах, относящихся к классу C_{6v} , вектор гирации \mathbf{f}_1 (см. п. 5.1) равен $[\mathbf{h}\mathbf{k}]$, где \mathbf{h} — вектор, направленный вдоль оптической оси. Используя это обстоятельство, а также то, что в рассматриваемых кристаллах тензор B_{mi} диагонален, соотношение (9.19) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}^{(0)}) &= \\ &= \epsilon_{0ij}^{-1} + e_{ij2} h k + e_{ij2} B_{22} H^{(0)} - D_{3lj}^{(1)} H^{(0)} k + B_{ij2l}^{(1)} H^{(0)} k. \end{aligned} \quad (9.20)$$

Как уже указывалось в п. 2.2, для «волн поляризации» напряженность электрического поля $\mathbf{E} = 0$, однако вектор индукции $\mathbf{D} \neq 0$, причем $(\mathbf{k}\mathbf{D}) = 0$. В рассматриваемом случае все эти условия означают, что для частот ω , равных частотам волн поляризации, должно существовать нетривиальное

решение однородной системы уравнений

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{H}^{(0)}) D_j = 0 \quad (9.21)$$

при дополнительном условии $D_1 = 0$. Поскольку тензор $D_{nij}^{(1)}$ по своим свойствам совершенно аналогичен тензору C_{nij} , а псевдотензор $B_{ijlm}^{(1)c}$ — тензору $A_{ijlm}^{(1)c}$ (см. (9.10)), используя (9.15) и (9.17), приходим к выводу, что в рассматриваемых кристаллах класса C_{6v} компоненты $D_{3ij}^{(1)} \neq 0$, если только $i = j = 1, 2$ или 3 , а компоненты $B_{ij12}^{(1)c} \neq 0$, если только $i = j = 1$ или 2 . Поэтому (учитывая, что, кроме того, $\epsilon_{0ij}^{-1} = \delta_{ij} \epsilon_{0ii}^{-1}$) система уравнений (9.21) при дополнительном условии $D_1 = 0$ может быть записана в виде

$$\left. \begin{aligned} &-(hk + B_{22} H^{(0)}) D_3 = 0, \\ &[\epsilon_{022}^{-1}(\omega) - D_{322}^{(1)} H^{(0)} k + B_{2212}^{(1)c} H^{(0)} k] D_2 = 0, \\ &[\epsilon_{033}^{-1}(\omega) - D_{333}^{(1)} H^{(0)} k] D_3 = 0. \end{aligned} \right\} \quad (9.22)$$

Из (9.22) следует, что всегда имеется решение системы уравнений (9.21), соответствующее $D_3 = 0$, $D_2 \neq 0$. Это означает, что среди решений кулоновской задачи всегда имеется решение — волна поляризации, распространяющаяся перпендикулярно оптической оси и поляризованная также перпендикулярно оптической оси ($D_1 = D_3 = 0$, $D_2 \neq 0$, $k_1 \neq 0$, $k_2 = k_3 = 0$). Положение линии поглощения, соответствующее этому решению кулоновской задачи, как это видно из (9.22), определяется из уравнения

$$\epsilon_{022}^{-1}(\omega) - D_{322}^{(1)} H^{(0)} k + B_{2212}^{(1)c} H^{(0)} k = 0. \quad (9.23)$$

В окрестности резонанса (речь идет о резонансе, который соответствует экситонному состоянию, преобразующемуся при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ по представлению E_1 группы C_{6v} ; см. табл. VII)

$$\epsilon_{022}^{-1}(\omega) \approx \frac{\omega^2 - \omega_L^2(0)}{g_2}.$$

Поэтому, согласно (9.23), в рассматриваемом случае

$$\omega_L(\mathbf{k}, \mathbf{H}^{(0)}) = \omega_L(0) + \frac{g_2}{2\omega_L(0)} [D_{322}^{(1)} H^{(0)} k - B_{2212}^{(1)c} H^{(0)} k],$$

причем, как и в случае «фиктивных» продольных волн (см. (9.14)), «эффект инверсии магнитного поля» имеет место и связан с учетом пространственной дисперсии.

Перейдем теперь к анализу зависимости от \mathbf{k} и $H^{(0)}$ частот волн с $D_2 = 0$. Из (9.22) следует, что волны поляризации с $D_1 = D_2 = 0$, $D_3 \neq 0$ и $k_2 = k_3 = 0$, $k_1 \neq 0$ могли бы существовать, если бы величины h и B_{22} либо обращались в нуль, либо по какой-то причине были очень малы, так что первое из уравнений (9.22) выполнялось при $D_3 \neq 0$. В этом случае соответствующая частота волны поляризации, у которой вектор $\mathbf{D} = 4\pi\mathbf{P}$ (см. п. 2.2) направлен вдоль оптической оси, определялась бы из уравнения

$$\epsilon_{033}^{-1}(\omega) - D_{333}H^{(0)}k = 0.$$

Если же справедливо $h \neq 0$ и $B_{22} \neq 0$, то, как это следует из (9.22), волн поляризации с $D_1 = D_2 = 0$, $D_3 \neq 0$ в рассматриваемом случае не существует. Поэтому в окрестности частот механических экситонов, поляризованных при $\mathbf{k} = 0$ вдоль оптической оси (представления A_1 , см. табл. VII), при учете пространственной дисперсии или магнитного поля и любом направлении \mathbf{k} мы имеем дело не с волнами поляризации, а «фиктивными» продольными волнами, частоты которых выражаются соотношением (9.6). Таким образом, эффект инверсии магнитного поля, вообще говоря, может иметь место в окрестности любого из резонансов тензора $\epsilon_{0ij}(\omega)$ (как указывалось ранее, эти резонансы соответствуют частотам механических экситонов при $\mathbf{k} = 0$, преобразующихся по представлениям A_1 и E_1 группы C_{6v}).

Предположим теперь, что одновременно присутствуют внешние электрическое и магнитное поля. Рассмотрим, как и раньше, кристалл типа CdS и будем считать, что магнитное поле направлено вдоль оси y , вектор \mathbf{k} — вдоль оси x , а внешнее электрическое поле — вдоль оптической оси — оси z . В этом случае, согласно (9.5), вместо (9.20), с точностью до линейных по $H^{(0)}$ слагаемых, имеем

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{E}^{(0)}H^{(0)}) &= \epsilon_{0ij}^{-1} + e_{ij2}hk + e_{ij2}B_{22}H^{(0)} - \\ &- (D_{3ij}^{(1)} - B_{ij21}^{(1)c})H^{(0)}k + B_{ij3}E^{(0)} + B_{ij23}^{(2)}H^{(0)}E^{(0)} + B_{ij31}^{(3)}E^{(0)}k + \\ &+ B_{ij33}^{(5)}(E^{(0)})^2 + B_{ij213}H^{(0)}kE^{(0)} + \dots \end{aligned} \quad (9.24)$$

Отметим, что тензор B_{iji} по своим свойствам симметрии подобен тензору C_{ijj} , а тензор $B_{ijlm}^{(5)}$ — тензору α_{ijlm} . Как и в случае $A_{ijlm}^{(1)}$ (см. (9.8)), представим псевдотензор $B_{ijlm}^{(2)}$ в следующем виде:

$$B_{ijlm}^{(2)} = B_{ijlm}^{(2)c} + B_{ijlm}^{(2)a} \quad (9.25)$$

Поскольку, однако, псевдотензор $B_{ijlm}^{(2)}$ подобно $A_{ijlm}^{(2)}$ антисимметричен относительно первой пары индексов (см. (9.3)), то

$$\left. \begin{aligned} B_{ijlm}^{(2)c} &= e_{ijn}D_{nlm}^{(2)}, \\ B_{ijlm}^{(2)a} &= e_{ijn}e_{lmn'}B_{nn'}^{(2)}, \end{aligned} \right\} \quad (9.26)$$

где тензор $D_{nij}^{(2)} = D_{nji}^{(2)}$ и, таким образом, по своим свойствам симметрии вполне подобен тензору C_{nij} , а $B_{nn'}^{(2)}$ — псевдотензору 2-го ранга. Подобно псевдотензору f' (см. п. 5.1), для рассматриваемых кристаллов, относящихся к классу C_{6v} , псевдотензор $B_{nn'}^{(2)}$ полностью антисимметричен:

$$B_{nn'}^{(2)} = e_{nn'n''}B_{n''}^{(2)},$$

где вектор $B^{(2)}$, как и \mathbf{h} (см. (9.19)), направлен вдоль оптической оси. Таким образом,

$$B_{nn'}^{(2)} = e_{nn'3}B^{(2)}$$

и, следовательно,

$$B_{ijlm}^{(2)a} = e_{ijn}e_{lmn'}e_{nn'3}B^{(2)} \equiv (e_{ij1}e_{lm2} - e_{ij2}e_{lm1})B^{(2)}.$$

Из этого соотношения сразу ясно, что единственными отличными от нуля компонентами тензора $B_{ijlm}^{(2)a}$ в рассматриваемом случае являются следующие компоненты:

$$\begin{aligned} B_{2331}^{(2)a} &= -B_{3123}^{(2)a} = -B_{3231}^{(2)a} = -B_{2313}^{(2)a} = B_{1323}^{(2)a} = \\ &= B_{3132}^{(2)a} = B_{3213}^{(2)a} = -B_{1332}^{(2)a}. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Таким образом, учитывая сделанные ранее замечания и используя (9.26), (9.27) и (9.15), находим, что

$$B_{ijlm}^{(2)}H_l^{(0)}E_m^{(0)} = e_{ij2}\tilde{B}H^{(0)}E^{(0)}, \quad (9.28)$$

где

$$\tilde{B} = D_{223}^{(2)} - B_{3123}^{(2)a}.$$

Отметим, что для рассматриваемого нами частного случая соотношение (9.28) можно получить значительно более коротким путем, если учесть, что при наложении внешнего электрического поля вдоль гексагональной оси симметрии кристалла CdS не изменяется, так что отличные от нуля компоненты псевдотензора B'_{ijl3} соответствуют отличным от нуля компонентам псевдотензора 3-го ранга B'_{ijl} . Сделанное замечание может быть использовано также для нахождения отличных от нуля компонент тензоров B_{ij3} , B'_{ij3l} , B_{ij33} , а также псевдотензора B_{ijlm3} , поскольку тензоры B_{ij3} , B'_{ij3l} подобны симметричному тензору 2-го ранга, тензор B'_{ij3l} подобен тензору 3-го ранга, ответственному за наличие гиротропии, а псевдотензор B_{ijlm3} совершенно аналогичен псевдотензору 4-го ранга $B^{(1)}_{ijlm}$.

На основании всего здесь сказанного не составляет труда написать уравнения, определяющие частоты волн поляризации в присутствии внешних электрического и магнитного полей. Ради простоты, рассмотрим здесь только один случай волн, поляризованных перпендикулярно оптической оси ($D_1 = D_3 = 0$, $D_2 \neq 0$). В этом случае уравнение для нахождения частот имеет следующий вид:

$$\epsilon_{022}^{-1}(\omega) - (D_{322}^{(1)} - B_{2221}^{(1)\epsilon}) H^{(0)} k + B_{223} E^{(0)} + B_{2233}^{(5)} (E^{(0)})^2 + B_{22213} H^{(0)} E^{(0)} k = 0. \quad (9.29)$$

В окрестности частоты механического экситона, поляризованного перпендикулярно оптической оси (представление E_1),

$$\epsilon_{022}^{-1}(\omega) \simeq \frac{\omega^2 - \omega_L^2(0)}{g_{E_1}}.$$

Поэтому, как это следует из (9.29), положение линии поглощения определяется следующим соотношением:

$$\omega(\mathbf{k}, H^{(0)}, E^{(0)}) = \omega_L(0) - \frac{g_{E_1}}{2\omega_L(0)} \{ (D_{322}^{(1)} - B_{2221}^{(1)\epsilon}) H^{(0)} k - B_{223} E^{(0)} - B_{2233}^{(5)} (E^{(0)})^2 - B_{22213} H^{(0)} k E^{(0)} \}. \quad (9.30)$$

Из (9.30) следует, что при фиксированных значениях \mathbf{k} , $H^{(0)}$ и $E^{(0)}/E^{(0)}$, но при изменении $E^{(0)}$ частота линии поглощения смещается по параболе, положение которой зависит от напряженности магнитного поля и изменяется, в частности, при инверсии его направления. Такого рода эффект действительно наблюдался на кристалле CdS [81, 82] и, несомненно, может иметь место и в ряде других случаев.

Согласно [81, 82], эффект сдвига частот поглощения интерпретируется уже упоминавшимся способом, основанным на том, что в присутствии магнитного поля в системе координат, связанной с движущимся экситоном, возникает дополнительное электрическое поле, напряженность которого равна $\frac{\hbar}{cm_{\text{экс}}} [\mathbf{k}H^{(0)}]$. Поэтому действующее в экситоне на электрон и дырку внешнее поле равно $E^{(0)} + \frac{\hbar}{cm_{\text{экс}}} [\mathbf{k}H^{(0)}]$, что и должно приводить (в средах, где имеет место квадратичный эффект Штарка) при изменении $E^{(0)}$ к сдвигу частоты вдоль параболы, подобной (9.30).

Если такую интерпретацию эффекта понимать буквально, то определение положения параболы (см. выше) позволило бы по известным $H^{(0)}$ и \mathbf{k} определить «эффективную» массу кулоновского экситона. В действительности, как это следует из (9.30), из эксперимента можно определить не «эффективную» массу экситона, а лишь соотношение между коэффициентами, входящими в (9.30), и, в частности, отношение B_{22213}/B_{2233} или в окрестности переходов, поляризованных вдоль оптической оси (представление A_1), отношение B_{33213}/B_{3333} . Эти отношения, хотя и имеют размерность величины $\hbar/cm_{\text{экс}}$, но, вообще говоря, вовсе к ней не сводятся. Ясно, что для установления связей между измеряемыми в экспериментах [81, 82] отношениями параметров и такими характеристиками механического экситона, как его «эффективная» масса, необходима микротеория. Вариант такой теории изложен в работе [83], где показано, что величины вида B_{22213}/B_{2233} , определяемые в экспериментах по влиянию внешних электрического и магнитного полей на энергию кулоновского и механического экситонов, выражаются не только через его эффективную массу, но также через компоненты тензора ϵ_{0ij} .

§ 10. Проблема граничных условий при учете пространственной дисперсии в окрестности отдельного резонанса (линии поглощения)

10.1. Введение. До сих пор мы рассматривали распространение волн только в безграничной среде или, во всяком случае, совершенно не учитывали наличия границ. Между тем, разумеется, в кристаллооптике всегда приходится иметь дело с ограниченной средой. В некоторых случаях, правда, это обстоятельство мало существенно, как, например, при исследовании вопроса о возбуждении реальных экситонов проходящими через кристалл рентгеновскими лучами или заряженными частицами (см. § 15). Однако в типичных для кристаллооптики задачах — при отражении света от кристалла, прохождении света через кристаллическую пластинку и т. д. — учет влияния границ имеет первостепенное значение.

При наличии резких границ раздела помимо уравнений поля (1.1) нужно использовать получающиеся из этих уравнений путем предельного перехода граничные условия (1.2). Этих условий и общей связи (1.3) между $D(\mathbf{r}, t)$ и $E(\mathbf{r}, t)$

$$D_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int dr' \hat{\epsilon}_{ij}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t') \quad (1.3)$$

достаточно для решения любых граничных задач. Но связь (1.3), как мы подчеркивали в п. 1.1, еще не эквивалентна введению тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. В самом деле, при переходе от (1.3) к (1.4)–(1.6) предполагается, что ядро $\hat{\epsilon}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в интеграле (1.3) зависит лишь от разностей $t - t'$ и $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Первое из этих допущений справедливо, если задача однородна во времени, и наличие границ в этом отношении не существенно. Напротив, в ограниченной среде уже нельзя, строго говоря, считать, что ядро $\hat{\epsilon}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ зависит только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, ибо это ядро должно зависеть также от расстояния до границы.

Ядро $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ при фиксированной точке \mathbf{r} обычно сколько-нибудь значительно лишь в области с размерами порядка $a \sim 3 \cdot 10^{-8} \div 10^{-7}$ см около точки \mathbf{r} (речь, конечно, идет о неметаллической конденсированной среде; см. введение, п. 4.1 и п. 7.1). Поэтому, очевидно, считать

функцию $\hat{\epsilon}_{ij}$ в (1.3) зависящей от $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ нельзя, вообще говоря, лишь в слое толщиной порядка a около границы раздела (поверхности кристалла). Если же самым приповерхностным слоем и полем в нем мы не интересуемся, то можно поступить следующим образом: считать ядро $\hat{\epsilon}_{ij}$ в (1.3) зависящим только от $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ (или же для кристаллов поступать, как в п. 4.1) и использовать, таким образом, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, но учесть роль границы, как-то дополнив, если это нужно, обычные граничные условия (1.2). В том, что при учете пространственной дисперсии такие дополнительные граничные условия (д. г. у.) действительно могут понадобиться, легко убедиться уже из простых соображений.

Во-первых, использование связей (4.19)–(4.22) эквивалентно повышению порядка дифференциальных уравнений для поля, что находит свое отражение в возможности появления новых волн. Между тем для уравнений более высокого порядка, очевидно, нужно иметь и больше граничных условий. Во-вторых, к тому же выводу можно прийти и непосредственно, учитывая лишь сам факт появления «новых» волн, например продольной (плазменной) волны. В самом деле, граничных условий (1.2), как хорошо известно, достаточно как раз для того, чтобы решить задачу об отражении и преломлении «обычных» волн на границе раздела между средами, скажем, кристаллом и вакуумом. Поэтому, если в кристалле может распространяться еще хотя бы одна новая волна, то задача об отражении и преломлении становится, при использовании обычных граничных условий (1.2), недостаточно определенной. Напротив, добавив соответствующие д. г. у., любую граничную задачу можно сделать вполне определенной. Но при этом, как ясно из сказанного, учитываются только, так сказать, объемные волны типа (2.2) или (2.54). Решения же поверхностного типа (и вообще поле, связанное с поверхностью) при этом не рассматриваются*). Для обычной в кристаллооптике постановки задачи такой подход вполне естествен, хотя и связан с известными ограничениями.

*) Точнее, не рассматриваются решения поверхностного типа, для которых поле заметно изменяется на расстояниях порядка a . Поверхностные же решения «макроскопического типа» (см. п. 10.10) в рамках излагаемого подхода могут быть получены так же, как и объемные волны.

Например, в задаче о кристаллооптической пластинке при использовании д. г. у. и отсутствии учета чисто поверхностных эффектов толщину пластинки нужно считать достаточно большой по сравнению с параметром решетки a .

Характер дополнительных граничных условий (д. г. у.) определяется физическими свойствами среды и ее поверхности и, следовательно, не универсален. Полное решение вопроса о д. г. у. возможно поэтому лишь при конкретизации свойств среды и ее поверхности. Так, например, для полубесконечной плазмы в условиях зеркального отражения электронов от поверхности, использование кинетического уравнения [102] для плазмы позволяет найти д. г. у., дающие возможность решить задачу об отражении и преломлении волн с применением для описания плазмы тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Именно, д. г. у. в этом случае имеет вид $E_n = 0$, где E_n — нормальная составляющая поля \mathbf{E} на внутренней границе раздела (имеется в виду случай падения на плазму волны с полем \mathbf{E} , лежащим в плоскости падения)*).

Этот пример, относящийся к такой сравнительно простой среде, как плазма, показывает, что нахождение д. г. у. является задачей такого же порядка сложности, как вычисление $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Но как раз эта сложность заставляет, или, точнее, указывает на целесообразность разделения проблемы граничных условий на две части. Именно, сначала нужно попытаться получить некоторые общие соотношения или выяснить вид д. г. у., вводя неизвестные коэффициенты, а затем уже можно как-то конкретизировать эти коэффициенты. Речь идет, другими словами, о таком же обычном приеме, каким является феноменологическое введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, роль же конкретизации коэффициентов аналогична вычислению или выявлению каких-то свойств тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в рамках микротехории.

В рамках линейной электродинамики общий характер д. г. у. сразу же ясен. Эти условия должны линейным образом связывать между собой поля \mathbf{E} и \mathbf{D} на поверхности. Связь должна быть, далее, однородной (поверхностные источ-

*) В работе [102] показано, кроме того, что вблизи поверхности плазмы уравнения поля допускают не сводящиеся к (2.2) и (2.54) дополнительные решения, которые нельзя, конечно, учесть при использовании тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

ники поля предполагаются отсутствующими), а число д. г. у. должно быть как раз таким, чтобы задача об отражении и преломлении волн была полностью определенной. Последнее означает, что число д. г. у. зависит от числа рассматриваемых новых волн.

Исходя из этих соображений, можно, если не учитывать производных, написать д. г. у. в виде

$$D_i(0) + \Gamma'_{ij} E_j(0) = 0, \quad (10.1)$$

где Γ'_{ij} — некоторый тензор, а аргумент 0 указывает на то, что значение полей берется на поверхности. Условия (10.1) представляют собой сразу три д. г. у. Если же число новых волн меньше трех, то нужно использовать, как это показано в п.10.2, только одну или две из компонент векторного равенства (10.1). В случае же, когда трех д. г. у. недостаточно, пришлось бы использовать д. г. у., содержащие производные. Подробнее все это будет обсуждено ниже. Сейчас же для нас более важно подчеркнуть другой момент, а именно недостаточную определенность д. г. у. типа (10.1), которые в той или иной форме указывались и использовались в статьях [5, 15, 16, 108, 109]. Действительно, возникает вопрос о зависимости Γ'_{ij} от ω и \mathbf{k} и вообще о конкретизации этого тензора. Полностью ответить на такие вопросы может только микротехория*), но представляется возможным существенно продвинуться вперед также и на значительно более простом пути, рассматривая феноменологически или, если угодно, полуфеноменологически [54, 84] окрестность отдельного резонанса (линии поглощения). Именно так мы и поступим.

10.2. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в окрестности отдельного резонанса. Для решения поставленной задачи используем уравнение движения анизотропного гармонического осциллятора

$$\rho_{ij} \frac{d^2 x_j}{dt^2} + r_{ij} \frac{dx_j}{dt} + k_{ij} x_j = e_{ij} E_j,$$

где, записывая эффективный заряд в виде тензора e_{ij} , мы хотим учесть, например, отличие действующего на осциллятор поля $\mathbf{E}_{эфф}$ от поля \mathbf{E} . Далее, для модели твердого тела

*) В этой связи см. работы [101, 112], где задача сформулирована в рамках микротехории.

как совокупности независимых осцилляторов электрическая поляризация $P_i = eNx_i$, где N — концентрация осцилляторов. Поэтому уравнение для поляризации в такой модели записывается в виде

$$\rho_{ij} \frac{\partial^2 P_j}{\partial t^2} + r_{ij} \frac{\partial P_j}{\partial t} + k_{ij} P_j = eNe_{ij} E_j. \quad (10.2)$$

Реальный кристалл существенно отличается от модели независимых осцилляторов в первую очередь в том отношении, что упругая сила и сила, создаваемая полем E , не сводятся просто к $k_{ij} P_j$ и $eNe_{ij} E_j$. Что же касается первых двух членов в (10.2), то они конкретизируют зависимость поляризации от времени, и если речь идет об отдельном резонансе, эти члены менять не нужно. По сути дела мы именно так определяем область отдельного резонанса, а соблюдается ли соответствующая временная или эквивалентная ей частотная зависимость — это уже вопрос о возможности ограничиться рассмотрением одного резонанса. Как из опыта, так и из микротехники известно (см. § 12), что в ряде случаев говорить об отдельном резонансе вполне допустимо.

В силу сказанного естественно записать связь между $P(\mathbf{r}, t)$ и $E(\mathbf{r}, t)$ в области отдельного резонанса в виде

$$\rho_{ij} \frac{\partial^2 P_j(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} + \int \mathcal{K}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P_j(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' = \\ = \int \Lambda_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}', \quad (10.3)$$

где для простоты мы опустили диссипативный член $r_{ij} \frac{\partial P_j}{\partial t}$.

Уравнение (10.3) является, конечно, некоторым частным случаем общей линейной связи (1.3) между $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ и \mathbf{E} .

Поскольку функции $\mathcal{K}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и $\Lambda_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, вообще говоря, не сводятся к $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, величина «силы» в точке \mathbf{r} определяется значением векторов электрического и магнитного полей не только в точке \mathbf{r} , но и в ее окрестности. Следовательно, в уравнениях (10.3) учтена пространственная дисперсия. В кристаллах, как мы видели в § 4, пространственную дисперсию можно считать слабой, и вдали от границ (т. е. для неограниченной среды) полагать $\mathcal{K}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{K}_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ и аналогично $\Lambda_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Lambda_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. По-

этому, разлагая $P_j(\mathbf{r}', t)$ и $E_j(\mathbf{r}', t)$ в ряд вблизи точки $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ и ограничиваясь главными слагаемыми, вместо (10.3) находим

$$\rho_{ij} \frac{\partial^2 P_j(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} + \beta_{ij} P_j(\mathbf{r}, t) + \gamma_{ijl} \frac{\partial P_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_l} + \alpha_{ijklm} \frac{\partial^2 P_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_l \partial x_m} = \\ = \Lambda_{ij}^{(0)} E_j(\mathbf{r}, t) + \Lambda_{ijl}^{(1)} \frac{\partial E_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_l} + \Lambda_{ijklm}^{(2)} \frac{\partial^2 E_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_l \partial x_m}. \quad (10.4)$$

Фигурирующие в этом уравнении тензоры ρ_{ij} , β_{ij} , γ_{ijl} и т. д. в рассматриваемой области частот от ω практически не зависят; они определяются типом экситонного перехода и симметрией кристалла*). Ясно, что в негиротропных кристаллах тензоры $\gamma_{ijl} = \Lambda_{ijl}^{(1)} = 0$, тогда как в гиротропных кристаллах в первом приближении можно положить $\alpha_{ijklm} = \Lambda_{ijklm}^{(2)} = 0$.

Решение системы уравнений (10.4) можно искать в виде плоских волн

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{P}(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \end{aligned} \right\} \quad (10.5)$$

Подставляя (10.5) в (10.4), находим, что

$$P_i(\omega, \mathbf{k}) = \Lambda_{il}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) \Lambda_{lj}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\omega, \mathbf{k}), \quad (10.6)$$

где

$$\Lambda_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = -\rho_{ij}\omega^2 + \beta_{ij} + i\gamma_{ijl}k_l - \alpha_{ijklm}k_l k_m, \quad (10.7a)$$

$$\Lambda_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \Lambda_{ij}^{(0)} + i\Lambda_{ijl}^{(1)}k_l - \Lambda_{ijklm}^{(2)}k_l k_m. \quad (10.7b)$$

Соотношение (10.6) определяет ту часть поляризации, которая обусловлена вкладом рассматриваемого экситонного перехода. Поэтому в рассматриваемой области частот вектор индукции может быть представлен в следующем виде:

$$D_i(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{00, ij} E_j(\omega, \mathbf{k}) + 4\pi P_i(\omega, \mathbf{k}). \quad (10.8)$$

В исследуемой области частот тензор ϵ_{00ij} можно, как и тензоры ρ_{ij} , β_{ij} , γ_{ijl} и т. д., считать не зависящим от частоты ω . Тензор $\epsilon_{00ij} = \delta_{ij}$ учитывает вклад в полный тензор диэлектрической проницаемости тех собственных

*) Развиваемый здесь подход является, практически, обобщением модели [24, 85] на случай анизотропных сред при учете пространственной дисперсии (см. [54], а также [84]).

колебаний, частоты которых расположены вне рассматриваемого интервала частот. Подставляя (10.6) в (10.8), находим, что полный тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ определяется следующим соотношением:

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{00ij} + 4\pi\Delta_{il}^{-1}(\omega, \mathbf{k})\Lambda_{lj}(\omega, \mathbf{k}). \quad (10.9)$$

Из этого соотношения можно определить и тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$, который равен

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = (\widehat{\epsilon}_{00})_{ij}^{-1} - 4\pi(\widehat{\Delta}^{-1}\widehat{\epsilon}_{00} + 4\pi\widehat{\Lambda})_{il}^{-1}\Lambda_{lm}(\widehat{\epsilon}_{00})_{mj}^{-1}. \quad (10.9a)$$

Из приведенных выражений следует, что полюсы тензора диэлектрической проницаемости соответствуют корням уравнения

$$|\Delta_{il}(\omega, \mathbf{k})| = 0. \quad (10.10)$$

Этот результат вполне естествен. Действительно, если в уравнениях (10.4) положить $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0$, то полученные таким образом уравнения будут, по определению (см. п. 2.2), описывать собственные колебания дипольного момента механических экситонов. Условие же (10.10) определяет собственные частоты этих механических экситонов, которым, таким образом, как раз и соответствуют полюсы тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

Уравнение (10.10), вообще говоря, определяет три ветви частот $\omega_l(\mathbf{k})$, $l = 1, 2, 3$. Поэтому выражение (10.9) в этом случае содержит сумму трех резонансов. Такое описание оправдано, если эти резонансы близки или если при $\mathbf{k} = 0$ имеет место вырождение состояний механических экситонов (кубический кристалл и т. п.). В противном случае более удобно рассматривать вклад в тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, обусловленный одной невырожденной зоной механического экситона. Предположим, например, что при $\mathbf{k} = 0$ этой зоне соответствует линейно поляризованное колебание, так что $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}P(\mathbf{r}, t)$. Тогда вместо (10.3) следует использовать соотношение

$$\rho \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \int \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' = \int \Lambda_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'. \quad (10.11)$$

В этом соотношении ρ — скаляр, \mathcal{H} — скалярная функция, а Λ — векторная функция от \mathbf{r} и \mathbf{r}' . Поскольку в рассмат-

риваемом приближении единственным не зависящим от \mathbf{r} и \mathbf{r}' вектором является вектор \mathbf{e} , $\Lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{e}\Lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Прodelывая выкладки, вполне аналогичные предыдущим, находим вместо (10.6), что

$$\mathbf{P}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\mathbf{e}\Lambda(\omega, \mathbf{k})}{\Delta(\omega, \mathbf{k})} (\mathbf{e}\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})),$$

где

$$\Delta(\omega, \mathbf{k}) = -\rho\omega^2 + \beta + i\gamma_m k_m - \alpha_{mn} k_m k_n,$$

$$\Lambda(\omega, \mathbf{k}) = \Lambda^{(0)} + i\Lambda_m^{(1)} k_m - \Lambda_{mn}^{(2)} k_m k_n.$$

Таким образом, в окрестности одной невырожденной зоны механического экситона

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{00ij} + \frac{4\pi\Lambda(\omega, \mathbf{k}) e_i e_j}{\Delta(\omega, \mathbf{k})}.$$

10.3. Некоторые примеры. Для иллюстрации вышеизложенного рассмотрим сначала тензоры $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ в гиротропных кубических кристаллах. В кубических кристаллах (см. п. 5.1)

$$\rho_{ij} = \rho\delta_{ij}, \quad \beta_{ij} = \beta\delta_{ij}, \quad \Lambda_{ij} = \Lambda^{(0)}\delta_{ij}, \quad \gamma_{ijl} = \gamma e_{ijl}, \quad \Lambda_{ijl}^{(1)} = \Lambda^{(1)} e_{ijl}, \quad (10.12)$$

где e_{ijl} полностью антисимметричный единичный псевдотензор 3-го ранга. Полагая $\alpha_{ijlm} = \Lambda_{ijlm}^{(2)} = 0$, находим, что

$$\Delta_{ij}^{-1} = \frac{\beta - \rho\omega^2}{(\beta - \rho\omega^2)^2 - \gamma^2 k^2} \delta_{ij} - i\gamma \frac{e_{ijl} k_l}{(\beta - \rho\omega^2)^2 - \gamma^2 k^2} - \frac{\gamma^2 k_i k_j}{(\beta - \rho\omega^2) [(\beta - \rho\omega^2)^2 - \gamma^2 k^2]}. \quad (10.12a)$$

В той области частот, где

$$|\beta - \rho\omega^2| \gg |\gamma| k, \quad (10.13)$$

получаем вместо (10.12)

$$\Delta_{ij}^{-1}(-\omega, \mathbf{k}) = \frac{\delta_{ij}}{\beta - \rho\omega^2} - i\gamma \frac{e_{ijl} k_l}{(\beta - \rho\omega^2)^2}. \quad (10.13a)$$

Следовательно, в этом случае тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (см. (10.7) и (10.5)) имеет вид

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \left(\epsilon_{00} + \frac{4\pi\Lambda^{(0)}/\rho}{\omega_L^2 - \omega^2} \right) \delta_{ij} + i \left[\frac{4\pi\Lambda^{(1)}/\rho}{\omega_L^2 - \omega^2} - \frac{4\pi\gamma\Lambda^{(0)}/\rho^2}{(\omega_L^2 - \omega^2)^2} \right] e_{ijl} k_l, \quad (10.13b)$$

где $\hbar\omega_L \equiv \hbar \sqrt{\frac{\beta}{\rho}} \equiv \hbar\omega_L(0)$ — энергия механического экситона в L -й зоне при $\mathbf{k}=0$. При этом, поскольку мы предполагаем $\Lambda^{(0)} \neq 0$, ясно, что речь идет о трижды вырожденном при $\mathbf{k}=0$ экситонном терме, волновые функции которого преобразуются как компоненты полярного вектора (см., например, табл. IV). В непосредственной окрестности частоты $\omega = \omega_L(0)$ следует вместо (10.13б) использовать разложение для тензора $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$. Проводя такое разложение, не будем по-прежнему принимать во внимание квадратичные по \mathbf{k} слагаемые.

В этом приближении, учитывая (10.12), находим, что

$$\left(\hat{\Delta} + \frac{4\pi}{\epsilon_{00}} \hat{\Lambda}\right)_{ij}^{-1} = \frac{\delta_{ij}}{\beta - \rho\omega^2 + \frac{4\pi\Lambda^{(0)}}{\epsilon_{00}}} - i \frac{\left(\gamma + \frac{4\pi\Lambda^{(1)}}{\epsilon_{00}}\right) e_{ijl}k_l}{\left(\beta - \rho\omega^2 + \frac{4\pi\Lambda^{(0)}}{\epsilon_{00}}\right)^2}. \quad (10.14)$$

Поэтому на основании (10.9а) для тензора $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ имеем

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \left(\epsilon_{00} + \frac{4\pi\Lambda^{(0)}/\rho}{\omega_L^2 - \omega^2}\right)^{-1} \delta_{ij} - \frac{1}{(\epsilon_{00})^2} \frac{\frac{4\pi\Lambda^{(1)}}{\rho} (\omega_L^2 - \omega^2) - \frac{4\pi}{\rho} \frac{\Lambda^{(0)}}{\rho} \gamma}{\left(\omega_L^2 - \omega^2 + \frac{4\pi\Lambda^{(0)}}{\rho\epsilon_{00}}\right)^2} e_{ijl}k_l, \quad (10.15)$$

или

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\delta_{ij}}{\epsilon_0(\omega)} - \frac{i}{\epsilon_0^2(\omega)} \left[\frac{\frac{4\pi\Lambda^{(1)}}{\rho}}{(\omega_L^2 - \omega^2)} - \frac{4\pi\gamma\Lambda^{(0)}/\rho^2}{(\omega_L^2 - \omega^2)^2} \right] e_{ijl}k_l, \quad (10.15a)$$

где

$$\epsilon_0(\omega) = \epsilon_{00} + \frac{4\pi\Lambda^{(0)}/\rho}{\omega_L^2 - \omega^2}. \quad (10.15б)$$

Если $|\omega_L^2 - \omega^2| \ll \frac{4\pi\Lambda^{(0)}}{\rho\epsilon_{00}}$, то выражение (10.15) упрощается и принимает следующий вид:

$$\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{4\pi\Lambda^{(0)}/\rho} \delta_{ij} + \left(\frac{\gamma/\rho}{4\pi\Lambda^{(0)}/\rho}\right) e_{ijl}k_l. \quad (10.16)$$

Сравнивая соотношения (10.15) и (6.1), а также (6.12), мы видим, что величина, стоящая при тензоре $e_{ijl}k_l$ в (10.15), прямо пропорциональна вращению плоскости поляризации света в кристалле и описывает ее зависимость от ω . Если $\Lambda^{(1)} = 0$, то при условии $|\omega^2 - \omega_L^2| \gg 4\pi\Lambda^{(0)}/(\rho\epsilon_{00})$ величина вращения $\varphi(\omega)$ по обе стороны от частоты ω_L имеет один и тот же знак. В этом случае справедлива установленная эмпирически [86] формула (ее иногда называют формулой Чандрасекара)

$$\varphi(\omega) = \frac{K\omega^2}{(\omega^2 - \omega_L^2)^2}, \quad (10.17)$$

где K — коэффициент пропорциональности

$$K = \frac{2\pi}{c^2} \frac{\Lambda^{(0)}\gamma}{\rho^2}. \quad (10.17a)$$

По крайней мере в некоторых случаях можно считать, что величина $\Lambda^{(1)}$ обращается в нуль для таких кристаллов, которые теряют оптическую активность при растворении. Так, для молекулярных кристаллов доказательство этого утверждения приведено в [87]. Этот вывод в определенном смысле следует и для рассматриваемой здесь модели среды. Для того чтобы в этом убедиться, предположим, что мы увеличиваем постоянную решетки кристалла, так что взаимодействие между молекулами кристалла стремится к нулю. В этом случае зона механического экситона сужается и в пределе превращается в один уровень, причем зависимость от волнового вектора \mathbf{k} исчезает. Последнее означает, что стремится к нулю величины γ_{ijl} и α_{ijklm} . В этом случае величина вращения не связана с взаимодействием между молекулами и полностью определяется коэффициентом $\Lambda_{ijl}^{(1)}$. Таким образом, этот коэффициент характеризует вращательную способность отдельных молекул, из которых образован кристалл.

Вместе с тем, конечно, при наличии достаточно сильного взаимодействия между ячейками кристалла величина $\Lambda_{ijl}^{(1)}$ могла бы быть отличной от нуля и для среды, состоящей из негиротропных молекул.

Отметим, что коэффициент K в (10.17) связан с силой осциллятора перехода и формой энергетической зоны механического экситона при малых \mathbf{k} . Для того чтобы в этом убедиться, учтем, что, как это следует из (10.13б) и (6.13),

$$\frac{4\pi\Lambda^{(0)}}{\rho} = \omega_0^2 f,$$

где f — сила осциллятора, а ω_0^2 — квадрат «плазменной» частоты (см. п. 7.2). Что же касается величины γ/ρ , то для выяснения ее смысла рассмотрим с точностью до линейных по \mathbf{k} членов зависимость частот механических экситонов от \mathbf{k} . Полагая в (10.2) $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0$ и учитывая (10.12), находим, что в кубических кристаллах для механических экситонов имеет место следующее соотношение:

$$(\beta - \rho\omega^2)\mathbf{P} + i\gamma[\mathbf{P}\mathbf{k}] = 0. \quad (10.18)$$

Из этого уравнения находим, что для продольной волны ($\mathbf{P} = P \frac{\mathbf{k}}{k}$) частота механического экситона

$$\omega_{\parallel}(\mathbf{k}) = \omega_L(0) = \sqrt{\beta/\rho}. \quad (10.19)$$

Если ось z направлена вдоль \mathbf{k} , то для поперечных волн $P_z = 0$, и, следовательно, на основании (10.18) имеем

$$(\beta - \rho\omega^2)P_x + i\gamma P_y k = 0, \quad -i\gamma P_x k + (\beta - \rho\omega^2)P_y = 0.$$

Приравняв нулю детерминант этой системы уравнений, для частот поперечных механических экситонов получаем следующее выражение:

$$\omega_{\pm}(\mathbf{k}) = \omega_L(0) \pm \frac{\gamma}{2\rho\omega_L(0)} |\mathbf{k}| + \text{квадратичные по } \mathbf{k} \text{ слагаемые}, \quad (10.20)$$

причем знаки $+$ и $-$ отвечают соответственно право- и левополяризованным по кругу волнам поляризации (в зависимости от знака γ):

$$\frac{P_x}{P_y} = \mp i \frac{\gamma}{|\gamma|}.$$

Таким образом, несмотря на то, что тензор $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ для $\omega \approx \omega_L$ аналитичен при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ (см. (10.15)), частоты механических экситонов (10.20) оказываются неаналитическими функциями \mathbf{k} . Последнее связано, разумеется, с тем, что рассматриваемое состояние механического экситона при $\mathbf{k} = 0$ является вырожденным. В то же время при отсутствии вырождения частоты механических экситонов при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ являются аналитическими функциями \mathbf{k} (см., например, п. 13.1).

Отметим также, что в одноосных кристаллах, когда вектор \mathbf{k} направлен вдоль оптической оси, уравнение для частот $\omega_{\pm}(\mathbf{k})$ сохраняет вид (10.20), причем соответствующие механические экситоны являются поперечными, поляризованными по кругу волнами — волнами «поляризации». При этом имеется также решение, соответствующее продольной волне. Однако уже при малом отклонении \mathbf{k} от направления оптической оси линейные по $|\mathbf{k}|$ слагаемые в выражении для частот нормальных волн исчезают. Если в выражении (10.20) опустить квадратичные по \mathbf{k} слагаемые, то оставшееся выражение для частот $\omega_{\pm}(\mathbf{k})$ с точностью до линейных по \mathbf{k} слагаемых оказывается пригодным как для изотропной среды, так и для кубических кристаллов, которые в этом приближении являются полностью изотропными.

Из сказанного, таким образом, следует, что фигурирующий в (10.17) коэффициент K , определяющий величину вращения плоскости поляризации света в гиротропных кубических кристаллах, действительно может быть выражен через силу осциллятора перехода f , его частоту $\omega_L(0)$, плазменную частоту ω_0 , а также коэффициент при линейном по \mathbf{k} слагаемом в выражении для частоты механического экситона. Коэффициент K в (10.17) может быть определен на основании экспериментального изучения зависимости от частоты света вращательной способности кристалла, сила осциллятора и положение резонанса $\omega_L(0)$ — из данных о частотной зависимости показателя преломления. Поэтому использование соотношения (10.17а) открывает возможность для определения зависимости $\omega_{\pm}(\mathbf{k})$ при малых \mathbf{k} (см. также § 11). Отметим также, что проведенное рассмотрение для гиротропных кубических кристаллов распространяется также на случай одноосных гиротропных кристаллов, если только вектор \mathbf{k} направлен вдоль оптической оси; при этом величина γ заменяется на

компоненту γ_{zxy} . Наконец, следует иметь в виду, что выражение (10.17) справедливо, как уже указывалось, лишь на некотором удалении от частоты $\omega_L(0)$, поскольку при выводе этого соотношения фактически предполагается (см. п. 10.9), что третья волна, возникающая в непосредственной близости от $\omega = \omega_L(0)$, уже несущественна. Это предположение, в соответствии со сказанным в п. 6.3, оправдано, если $\omega \ll \omega_m$, где ω_m — частота, соответствующая точке поворота.

Отметим также, что с точностью до линейных по \mathbf{k} слагаемых, тензоры (10.13б) и (10.15) или (10.15а) являются обратными, так что их использование для вычисления величины оптической активности приводит, разумеется, к одинаковым результатам. Мы, однако, привели выше ряд формул для тензора $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ главным образом для того, чтобы установить значение фигурирующего в формуле (6.1) тензора $\delta_{ijl}(\omega)$. Сравнивая (6.1) и (10.16), мы видим, что при $\omega \approx \omega_L$ этот тензор непосредственно связан только с величиной γ и не содержит коэффициента $\Lambda^{(1)}$. Таким образом, только для гиротропных кристаллов, теряющих свойство гиротропии при растворении, определение коэффициента γ позволяет в рамках обсуждаемой модели полностью определить величину вращения плоскости поляризации $\varphi(\omega)$, обусловленную вкладом рассматриваемого резонанса.

Рассмотрим теперь случай изотропной негиротропной среды. Для изотропной негиротропной среды выполняются соотношения (10.12), причем $\gamma = \Lambda^{(1)} = 0$. Поэтому в выражениях для тензоров $\hat{\Delta}$ и $\hat{\Lambda}$ (соотношения (10.7)) следует принять во внимание квадратичные по \mathbf{k} слагаемые. В изотропной среде (см. (5.1), а также табл. III)

$$\begin{aligned} \alpha_{ijlm} k_i k_m &= \alpha_{tr} k^2 \delta_{ij} + (\alpha_l - \alpha_{tr}) k_i k_j, \\ \Lambda_{ijlm}^{(2)} k_i k_m &= \Lambda_{tr}^{(2)} k^2 \delta_{ij} + (\Lambda_l^{(2)} - \Lambda_{tr}^{(2)}) k_i k_j. \end{aligned}$$

Следовательно, учитывая также (10.12), находим, что

$$\Delta_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\beta - \rho \omega^2 - \alpha_{tr} k^2} \delta_{ij} + \frac{(\alpha_l - \alpha_{tr}) k_i k_j}{(\beta - \rho \omega^2 - \alpha_l k^2)(\beta - \rho \omega^2 - \alpha_{tr} k^2)}. \quad (10.21)$$

Подстановка этого выражения приводит к искомому соотношению

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \left(\epsilon_{00} - \frac{4\pi(\Lambda^{(0)} - \Lambda_{tr}^{(2)} k^2)}{\omega_L^2 - \omega^2 - \alpha_{tr} k^2} \right) \delta_{ij} + \\ &+ \left[\frac{4\pi\Lambda^{(0)}}{\rho^2} (\alpha'_l - \alpha'_{tr}) \frac{4\pi(\Lambda_l^{(2)} - \Lambda_{tr}^{(2)})}{\omega_L^2 - \omega^2 - \alpha'_{tr} k^2} \right] k_i k_j \equiv \\ &\equiv \epsilon^\perp(\omega) \delta_{ij} + [\epsilon^\parallel(\omega, \mathbf{k}) - \epsilon^\perp(\omega, \mathbf{k})] s_i s_j. \quad (10.22) \end{aligned}$$

Смысл обозначений ϵ^\perp и ϵ^\parallel ясен из (10.22). При этом использовано также обозначение $\alpha'_{ijlm} = \alpha_{ijlm}/\rho$.

Аналогичным образом может быть найден характер зависимости тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ или $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ от ω и \mathbf{k} для любой другой симметрии.

Резюмируя, можно отметить, что использованный выше подход пригоден во всей той области частот, где временная и пространственная дисперсии тензора диэлектрической проницаемости обусловлены одной зоной механического экситона. В этой области частот тензоры $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ или $\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ оказываются известными с точностью до некоторых постоянных параметров, которые могут быть, например, определены из эксперимента. Поэтому используемое здесь описание пространственной и частотной дисперсий является более детальным, чем то, которое следует из разложений вида (4.19) — (4.22), где остаются неизвестными некоторые функции частоты, такие, как $\gamma_{ijl}(\omega)$, $\alpha_{ijlm}(\omega)$ и т. д. Сказанное особенно ясно на рассмотренном ранее примере гиротропной среды. Разумеется, более детальное описание явилось следствием использования некоторой модели или, точнее, дополнительного предположения о характере связи между \mathbf{P} и \mathbf{E} (см. п. 10.2).

10.4. Граничные условия. Перейдем к анализу вопроса о дополнительных граничных условиях (д. г. у.) на основе установленных выше выражений, относящихся к окрестности одного резонанса. Основное соотношение (10.3) или (10.11), в отличие от уравнений (10.4), справедливо и вблизи поверхности среды. Предполагая, что $\mathbf{P}(\mathbf{r}', t) = \mathbf{P}(\mathbf{r}') e^{i\omega t}$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r}', t) =$

$\equiv E(\mathbf{r}') e^{i\omega t}$, а функции $P(\mathbf{r}')$ и $E(\mathbf{r}')$ достаточно плавно зависят от \mathbf{r}' , произведем в (10.3) разложение этих функций в ряд в окрестности точки $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$. В результате на поверхности кристалла вместо (10.4) получаем следующее соотношение (аргумент 0 отвечает поверхности кристалла):

$$(-\omega^2 \rho_{ij} + \beta'_{ij}) P_j(0) + \gamma'_{ijl} \frac{\partial P_j(0)}{\partial x_l} = \Lambda_{ij}^{(0)'} E_j(0) + \Lambda_{ijl}^{(1)'} \frac{\partial E_j(0)}{\partial x_l}. \quad (10.23)$$

При этом весьма существенно, что $\beta'_{ij} \neq \beta_{ij}$, $\gamma'_{ijl} \neq \gamma_{ijl}$, $\Lambda_{ij}^{(0)'} \neq \Lambda_{ij}^{(0)}$, $\Lambda_{ijl}^{(1)'} \neq \Lambda_{ijl}^{(1)}$. Так, в средах с центром инверсии, где $\Lambda_{ijl}^{(1)} = \gamma_{ijl} = 0$, тензоры γ'_{ijl} и $\Lambda_{ijl}^{(1)'}$, вообще говоря, отличны от нуля. Последнее связано с тем, что при наличии граничной поверхности даже негиротропный кристалл не инвариантен относительно инверсии. В соотношении (10.23) по причинам, указанным ранее (большие длины волн), не учтены слагаемые, содержащие вторые и более высокие производные от величин $P(\mathbf{r})$ и $E(\mathbf{r})$. По той же причине в (10.23) можно опустить и члены с первыми производными, если только $\Lambda_{ij}^{(0)'} \neq 0$. При этом соотношение (10.23) принимает следующий вид:

$$P_i(0) + \Gamma_{ij} E_j(0) = 0. \quad (10.24)$$

В этом соотношении тензор Γ_{ij} практически не зависит от частоты ω в рассматриваемой области спектра, поскольку $\beta'_{ij} \neq \beta_{ij}$. Именно слабая зависимость Γ_{ij} от ω является следствием рассмотрения изолированного резонанса. При этом, разумеется, д. г. у. (10.24) является частным случаем д. г. у. типа (10.1).

Величина $\Lambda_{ij}^{(0)'}$, как и $\Lambda_{ij}^{(0)}$, отлична от нуля только для дипольных колебаний. Поэтому соотношение (10.24) является дополнительным граничным условием только в окрестности дипольных экситонных линий поглощения. Отметим, что соотношения (10.24) дают сразу три дополнительных условия. Именно такое количество дополнительных условий необходимо для рассмотрения граничных задач при учете трех зон механического экситона, поляризации которых образуют тройку некопланарных направлений. Если же при $\mathbf{k} = 0$ частоты

механических экситонов достаточно удалены друг от друга, при выводе дополнительных граничных условий более удобно рассматривать только одну зону и использовать соотношение (10.11). В этом случае вместо трех соотношений (10.23) получаем одно соотношение, которое в случае зоны дипольных экситонов имеет следующий вид (напомним, что в рассматриваемых условиях $\mathbf{P} = P(\mathbf{r}) \mathbf{e}$ *):

$$P(0) + \Gamma(\mathbf{Ee}) = 0, \quad (10.25)$$

где

$$\Gamma = \frac{\Lambda^{(0)'}}{(\beta' - \omega^2 \rho)}.$$

В окрестности резонанса $\epsilon_{0ij}(\omega)$ выполняется соотношение $\omega^2 \approx \beta/\rho$. Поэтому, полагая $\Lambda^{(0)'} \approx \Lambda^{(0)}$ и используя соотношение $\frac{4\pi\Lambda^{(0)'}}{\rho} = \omega_0^2 f$ (см. п. 10.3), где f — сила осциллятора, а ω_0 — «плазменная» частота, находим, что

$$\Gamma \approx \frac{\omega_0^2 f}{4\pi} \frac{\rho}{\beta' - \beta}.$$

Если $|\beta' - \beta| \sim \beta$, то

$$\Gamma \simeq \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\omega_0}{\omega_L} \right)^2 f,$$

где $\hbar\omega_L = \hbar\sqrt{\beta/\rho}$ — энергия механического экситона при $\mathbf{k} = 0$. Если же $|\beta' - \beta| < \beta$, что более реально, то величина Γ возрастает, причем дальнейшее уточнение оценок Γ может быть достигнуто лишь при исследовании конкретной модели экситона. Для $|\beta' - \beta| \rightarrow 0$ величина $\Gamma \rightarrow \infty$, так что д. г. у. (10.25) принимает в этом случае вид

$$(\mathbf{Ee}) = 0. \quad (10.25a)$$

Если же $\Gamma_{ij} \rightarrow \infty$, то вместо (10.24) получаем д. г. у.

$$\mathbf{E} = 0. \quad (10.24a)$$

Для квадрупольных механических экситонов, вклад которых в поляризацию \mathbf{P} линеен по волновому вектору, коэффициент

*) Отметим, что д. г. у. вида (10.25) было получено в работе [111] в рамках микротемории для некоторой модели молекулярного кристалла.

$\Delta_{ij}^{(0)'} = 0$. Поэтому в дополнительных граничных условиях необходимо учесть следующие члены разложения по k , что приводит эти граничные условия к виду *)

$$P_i(0) + \Gamma_{ijl} \frac{\partial E_j(0)}{\partial x_l} = 0. \quad (10.26)$$

В этом соотношении Γ_{ijl} — тензор 3-го ранга, не зависящий от ω в рассматриваемой области частот.

Тензоры Γ_{ij} и Γ_{ijl} для конкретных кристаллов могут быть найдены только на основе микротемории. Однако свойства симметрии этих тензоров определяются симметрией конечного кристалла и могут быть использованы. Так, например, в одноосном кристалле, ограниченном плоскостью, перпендикулярной оси симметрии 3-го или более высокого порядка (ось z), отличными от нуля компонентами тензора Γ_{ij} являются компоненты $\Gamma_{xx} = \Gamma_{yy} \equiv \Gamma_t$, $\Gamma_{zz} \equiv \Gamma_n$. Это связано с тем, что и при наличии граничной поверхности указанная ось симметрии сохраняется. Те же компоненты тензора Γ_{ij} отличны от нуля, если плоскость ограничивает изотропную среду либо перпендикулярна одной из семи оптических осей кубического кристалла. Что же касается тензора Γ_{ijl} , то в указанном случае единственными отличными от нуля компонентами этого тензора являются следующие: $\Gamma_{xxz} = \Gamma_{yyz} \equiv \Gamma_{tz}$, $\Gamma_{zzz} \equiv \Gamma_{nz}$.

Для того чтобы показать, как «действуют» граничные условия (10.24) — (10.26), мы в дальнейшем рассмотрим ряд конкретных примеров. Здесь же представляется уместным заметить, что при получении дополнительных граничных условий (10.23) фактически предполагалось, что характерная длина вблизи поверхности кристалла, на которой заметно изменяются величины вида

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \mathcal{K}_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (x - x_1)^n (y - y_1)^m \dots d\mathbf{r}'$$

*) При выводе д. г. у. (10.24) или (10.25) для длинноволновых полей мы считали, что членом $\Delta_{ijl}^{(1)'} \partial E_j(0) / \partial x_l$ можно пренебречь по сравнению с $\Delta_{ij}^{(0)'} E_j(0)$. Разумеется, такое пренебрежение возможно лишь при условиях, которые несколько уже использованного нами требования, чтобы $\Delta_{ij}^{(0)'} \neq 0$.

(именно через такие величины с $r = 0$ выражаются фигурирующие в (10.23) тензоры), мала по сравнению с длиной волны в среде. В противном случае нельзя пренебрегать толщиной поверхностного слоя, и возникает задача о распространении электромагнитных волн в неоднородной среде. Точное решение этой задачи весьма сложно, и поэтому можно пойти по пути разбиения приповерхностного слоя по глубине на несколько слоев с одинаковыми оптическими свойствами [22а]. К этому вопросу мы еще вернемся в п. 10.7. Здесь же отметим, что в случае экситонов Френкеля соответствующая глубина слоя для квадрупольных экситонов составляет величину в несколько постоянных решетки. Что же касается дипольных френкелевских экситонов, то здесь следует иметь в виду, что речь идет о механических дипольных экситонах, когда взаимодействие обусловлено лишь близким окружением. Поэтому и для этих экситонов соответствующая глубина слоя также, по-видимому, мала, несмотря на то, что для кулоновских экситонов (со значениями волнового вектора $k \sim 2\pi/\lambda_0$, где λ_0 — длина волны света в вакууме), по расчетам [88], эффективная область взаимодействия имеет размер порядка 20Å . Иное положение может иметь место для экситонов Ванье — Мотта в полупроводниках. Здесь даже при отказе от учета длинноволновой части поля толщина переходного слоя составляет величину порядка боровского радиуса экситона, что в ряде случаев приводит к глубине приповерхностного слоя $l \approx 100\text{Å}$ [22а]. На этом вопросе мы еще остановимся в п. 11.2.

10.5. Отраженные и преломленные волны в окрестности частот дипольных и квадрупольных переходов в негиротропном кристалле. Рассмотрим здесь наиболее простой случай, когда монохроматическая линейно поляризованная волна падает нормально из вакуума на плоскую поверхность изотропной негиротропной среды. Направим ось z вдоль внутренней нормали и запишем всю совокупность граничных условий. Воспользуемся прежде всего граничными условиями (1.2), предполагаем при этом, что поверхностные заряды и токи отсутствуют и что среда немагнитна ($\mathbf{B} = \mathbf{H}$). В этом приближении условия (1.2) имеют следующий вид:

$$E_{1t} = E_{2t}, \quad H_{1t} = H_{2t}, \quad H_{1n} = H_{2n}, \quad D_{1n} = D_{2n}. \quad (10.27)$$

Что же касается дополнительных граничных условий, то их в силу (10.24) можно записать, используя обозначения $\Gamma_{11} = \Gamma_{22} = \Gamma_t$, $\Gamma_{33} = \Gamma_n$ в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} P_{2t} + \Gamma_t E_{2t} &= 0, \\ P_{2n} + \Gamma_n E_{2n} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (10.28)$$

При этом мы будем для определенности считать, что индекс 1 отвечает вакууму, а 2 — диспергирующей среде и что электрический вектор в падающей волне направлен вдоль оси x . В этом случае, когда диспергирующая среда занимает полупространство, электрическое поле в ней с учетом новых волн можно представить в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} E_{2x} &= a_1 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 z} + a_2 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 z}, \\ E_{2y} &= E_{2z} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10.29)$$

Второе из соотношений (10.29) непосредственно следует из (10.27). Что же касается выражения для E_{2x} , то здесь $\tilde{n}_1(\omega)$ и $\tilde{n}_2(\omega)$ суть два коэффициента преломления, соответствующие двум волнам одной поляризации, которые могут распространяться в негиротропной среде в окрестности резонанса $\epsilon_0(\omega)$ при учете пространственной дисперсии (см. п. 7.2).

Электрическое поле в вакууме складывается из поля падающей и отраженной волн

$$E_{1x} = e^{i \frac{\omega}{c} z} + b e^{-i \frac{\omega}{c} z}, \quad E_{1y} = E_{1z} = 0. \quad (10.30)$$

Здесь b — амплитуда отраженной волны, тогда как для падающей волны амплитуда принята равной единице. Используя уравнения поля (2.5), находим, что

$$H_{1x}(z) = H_{1z}(z) = 0, \quad H_{1y}(z) = E_{1x}(z), \quad H_{2x}(z) = H_{2z}(z) = 0,$$

$$H_{2y}(z) = \sum_{k=1}^2 a_k \tilde{n}_k e^{i \frac{\omega}{c} n_k z}.$$

Поэтому уравнения для определения амплитуд b , a_1 и a_2 имеют, в силу соотношений (10.27) и (10.28), следующий

вид:

$$1 + b = a_1 + a_2, \quad (10.31a)$$

$$1 - b = \tilde{n}_1 a_1 + \tilde{n}_2 a_2, \quad (10.31б)$$

$$(\tilde{n}_1^2 - \epsilon_{00} + 4\pi\Gamma_t) a_1 + (\tilde{n}_2^2 - \epsilon_{00} + 4\pi\Gamma_t) a_2 = 0. \quad (10.31в) *$$

Решая эту систему уравнений, находим, что

$$a_1 = -\frac{\Delta_2}{\Delta_1} a_2 = \frac{2\Delta_2}{\Delta_2(\tilde{n}_1 + 1) - \Delta_1(\tilde{n}_2 + 1)}, \quad (10.32a)$$

$$b = \frac{\Delta_1(\tilde{n}_2 - 1) - \Delta_2(\tilde{n}_1 - 1)}{\Delta_2(\tilde{n}_1 + 1) - \Delta_1(\tilde{n}_2 + 1)}, \quad (10.32б)$$

$$\Delta_k = \tilde{n}_k^2 - \epsilon_{00} + 4\pi\Gamma_t, \quad k = 1, 2. \quad (10.33)$$

Коэффициент отражения, равный $|b|^2$, определяется формулой

$$R = |b|^2 = \left| \frac{\Delta_1(\tilde{n}_2 - 1) - \Delta_2(\tilde{n}_1 - 1)}{\Delta_2(\tilde{n}_1 + 1) - \Delta_1(\tilde{n}_2 + 1)} \right|^2. \quad (10.34)$$

Если частота ω удаляется от резонанса, то коэффициент преломления новой волны $|\tilde{n}_2|$ сильно возрастает. В этом случае $a_2 \sim \frac{1}{\tilde{n}_2} \rightarrow 0$, а величина R принимает свое обычное выражение

$$R = \left| \frac{\tilde{n}_1 - 1}{\tilde{n}_1 + 1} \right|^2 = \frac{(n_1 - 1)^2 + \chi_1^2}{(n_1 + 1)^2 + \chi_1^2}.$$

Если же частота ω становится близкой к резонансной частоте, то коэффициент отражения зависит от значения коэффициента β и коэффициента δ , которые определяют ход кривых дисперсии в окрестности резонанса (см. рис. 6—14).

При $\delta = 0$ и $\beta < 0$ (см., например, рис. 6, б), когда частота ω лежит в той области, где не существует веще-

*) При выводе соотношения (10.31в) использовано для каждой из нормальных волн уравнение $D_i = \tilde{n}^2 \eta_{ij} E_j = \epsilon_{00} E_i + 4\pi P_i$, где P — поляризация, обусловленная рассматриваемым экситонным переходом, а величина ϵ_{00} определяется вкладом в диэлектрическую проницаемость остальных экситонных переходов. Отметим также, что второе из д. г. у. (10.28) в данном случае (нормальное падение), конечно, выполняется тождественно, поскольку $\tilde{E}_{2t} = P_{2t} = 0$.

ственных значений \tilde{n}^2 , коэффициент $R = 1$. Этот вывод следует из того факта, что в указанной области частот $\tilde{n}_2 = -\tilde{n}_1^*$, $\Delta_2 = \Delta_1^*$, так что в силу (10.34)

$$R = \left| \frac{\Delta_1^* - \Delta_1 - (\Delta_1^* \tilde{n}_1 + \Delta_1 \tilde{n}_1^*)}{\Delta_1^* - \Delta_1 + (\Delta_1^* \tilde{n}_1 + \Delta_1 \tilde{n}_1^*)} \right| = 1.$$

Разумеется такого результата и нужно было ожидать, так как при отсутствии поглощения ($\delta = 0$) и комплексном \tilde{n} волна должна полностью отражаться от среды (полное внутреннее отражение при нормальном падении; такой случай осуществляется, например, в плазме; см. [6]).

При $\delta = 0$ и $\beta > 0$ (см., например, рис. 6, а) в окрестности резонанса величина $\tilde{n}_1 = n_1$ имеет вещественное значение, тогда как $\tilde{n}_2 = ix_2$ является чисто мнимой величиной. Пока $n_1 \sim x_2$ величина R заметно меньше единицы. Однако при возрастании ω величина n_1 становится значительно больше $|x_2|$, $|\Delta_1| \gg |\Delta_2|$, так что коэффициент отражения принимает значение

$$R = \left| \frac{\tilde{n}_2 - 1}{\tilde{n}_2 + 1} \right|,$$

и при $\tilde{n}_2 = ix_2$ опять $R = 1$.

Учет поглощения ($\delta \neq 0$) приводит к тому, что при любых значениях β величина R в окрестности резонанса всегда меньше единицы. При этом следует отметить, что характер зависимости $R(\omega)$ существенно связан с зависимостью $\delta(\omega)$, что может приводить к резким изменениям величины $R(\omega)$ в окрестности резонанса при достаточно низких температурах (см. в этой связи также § 11).

Аналогичным образом может быть рассмотрен случай наклонного падения. При этом, если $E_{1n} \neq 0$, то в среде, кроме двух поперечных волн одной поляризации, возбуждается также продольная волна. В этом случае при определении амплитуд всех волн оказывается существенным и второе из дополнительных граничных условий (10.28). Поскольку явные выражения для соотношений между амплитудами в общем случае весьма громоздки, мы их здесь не выписываем; их вывод вполне аналогичен изложенному в учебниках (см., например, [1], § 66).

В работах [15, 55] используется частный случай д. г. у. (10.24), (10.25), а именно условие $P_i(0) = 0$ или $P(0) = 0$. Из (10.33) ясно, что такое условие приближенно справедливо лишь при

$$|\Gamma_{ij}| \ll \frac{1}{4\pi} |\tilde{n}_{1,2}^2 - \epsilon_{00}|,$$

что отнюдь не всегда может иметь место (см. п. 10.4). Микрорасчет [111] также приводит к (10.24), (10.25), а не к д. г. у. из [15, 55]. Заметим, что д. г. у. для плазмы [102] отвечает другому предельному случаю: $\Gamma_n \rightarrow \infty$ (это и приводит к д. г. у. $E_{2n} = 0$).

В окрестности квадрупольных экситонных переходов главная особенность рассмотрения связана с дополнительным граничным условием (10.26), поскольку в этом случае аналог соотношения (10.31в) имеет вид

$$\left(\tilde{n}_1^2 - \epsilon_{00} + 4\pi i \Gamma_{iz} \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 \right) a_1 + \left(\tilde{n}_2^2 - \epsilon_{00} + 4\pi i \Gamma_{iz} \frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 \right) a_2 = 0, \quad (10.31в)$$

где \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 — коэффициенты преломления, соответствующие двум нормальным волнам одной частоты и поляризации, которые могут распространяться в окрестности квадрупольного перехода при учете пространственной дисперсии (см. п. 8.4). Поэтому, если использовать вместо (10.33) соотношение

$$\Delta_k = \tilde{n}_k^2 - \epsilon_{00} + 4\pi i \Gamma_{iz} \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k, \quad (10.33а)$$

которое является следствием использования д. г. у. в виде (10.26) вместо (10.24), то формулы (10.32) и (10.34) остаются в силе и для квадрупольного перехода.

10.6. Отраженные и преломленные волны в окрестности частоты дипольного перехода в гиротропном кристалле. Как и в п. 10.5, рассмотрим простейший случай нормального падения монохроматической линейно поляризованной волны из вакуума на плоскую поверхность изотропной, но гиротропной среды.

В п. 10.5 было показано, что дополнительных граничных условий (10.24) оказывается вполне достаточно при рассмотрении распространения волн в негиротропной среде, где пространственная дисперсия была учтена с точностью до слагаемых порядка k^2 .

В случае гиротропных сред мы ранее ограничивались учетом слагаемых порядка k . При этом общее число нормальных волн уменьшается по сравнению со случаем учета членов порядка k^2 , в силу чего использование условий (10.24) в этом приближении приводило бы к лишним дополнительным граничным условиям. Ясно, однако, что эта трудность не носит принципиального характера, поскольку достаточно и в гиротропной среде учесть, наряду с линейными по k , также квадратичные по k слагаемые, чтобы среди условий (10.24) уже не было лишних. Однако среди нормальных волн при этом будет существовать волна с коэффициентом преломления, значительно превышающим по абсолютной величине коэффициенты преломления остальных волн. Это обстоятельство связано с относительной малостью коэффициента, стоящего при квадратичных по k слагаемых, и может быть учтено в конечных результатах путем предельного перехода к приближению, соответствующему учету лишь линейных по k слагаемых.

Проиллюстрируем сказанное конкретными вычислениями. Выберем направления координатных осей такими же, как в п. 10.5. Тогда электрическое поле в среде при $z > 0$ можно представить в следующем виде:

$$E_2(z) = xE_{2x}(z) + yE_{2y}(z), \quad (10.35a)$$

где

$$\left. \begin{aligned} E_{2x}(z) &= \sum_{k=1}^4 a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z}, \\ E_{2y}(z) &= \sum_{k=1}^4 i(-1)^k a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z}, \end{aligned} \right\} \quad (10.35b)$$

В этих соотношениях x и y — орты, направленные вдоль осей x и y ; \tilde{n}_k ($k=1, 2, 3, 4$) — коэффициенты преломления четырех нормальных волн, которые могут распространяться в рассматриваемой среде, при учете пространственной дисперсии с точностью до квадратичных по k слагаемых, причем индексы $k=1, 3$ соответствуют волнам, поляризованным по кругу влево, а $k=2, 4$ — вправо. Для негиротропных сред коэффициенты преломления этих волн попарно равны (например, $\tilde{n}_1 = \tilde{n}_2$, $\tilde{n}_3 = \tilde{n}_4$). Учет же гиротропии приводит к тому, что $\tilde{n}_1 \neq \tilde{n}_2$, $\tilde{n}_3 \neq \tilde{n}_4$. В (10.35) учтено

также, что для амплитуд правых и левых волн выполняется соответственно $E_y/E_x = \pm i$.

Будем считать, что в падающей волне вектор E направлен вдоль оси x , и ее амплитуду примем равной единице. Поэтому поле в вакууме ($z < 0$) можно представить в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} E_{1x} &= e^{i \frac{\omega}{c} z} + b e^{-i \frac{\omega}{c} z}, \\ E_{1y} &= d e^{-i \frac{\omega}{c} z}. \end{aligned} \right\} \quad (10.36)$$

Используя непрерывность тангенциальных составляющих напряженности электрического поля, находим, что

$$\left. \begin{aligned} 1 + b &= \sum_{k=1}^4 a_k, \\ d &= i \sum_{k=1}^4 (-1)^k a_k. \end{aligned} \right\} \quad (10.37)$$

Аналогично, используя непрерывность тангенциальных составляющих вектора H , получаем

$$\left. \begin{aligned} 1 - b &= \sum_{k=1}^4 \tilde{n}_k a_k, \\ d &= i \sum_{k=1}^4 a_k (-1)^k \tilde{n}_k. \end{aligned} \right\} \quad (10.38)$$

Дополнительные граничные условия (10.28) дают еще два соотношения:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{k=1}^4 a_k \Delta_k &= 0, \\ \sum_{k=1}^4 a_k (-1)^k \Delta_k &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (10.39)$$

где значения величин Δ_k определены формулой (10.33). Разрешая полученную систему из шести уравнений, находим

решение:

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= \frac{\Delta_3}{(\tilde{n}_1 + 1) \Delta_3 - (\tilde{n}_3 + 1) \Delta_1} = -\frac{\Delta_3}{\Delta_1} a_3; \\ a_2 &= \frac{\Delta_4}{(\tilde{n}_2 + 1) \Delta_4 - (\tilde{n}_4 + 1) \Delta_2} = -\frac{\Delta_4}{\Delta_2} a_4; \\ b &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\Delta_3(1 - \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 - \tilde{n}_3)}{\Delta_3(1 + \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 + \tilde{n}_3)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta_4(1 - \tilde{n}_2) - \Delta_2(1 - \tilde{n}_4)}{\Delta_4(1 + \tilde{n}_2) - \Delta_2(1 + \tilde{n}_4)} \right\}, \\ d &= i \left\{ \frac{\Delta_3 \tilde{n}_1 - \Delta_1 \tilde{n}_3}{\Delta_3(1 + \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 + \tilde{n}_3)} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\tilde{n}_2 \Delta_4 - \Delta_2 \tilde{n}_4}{\Delta_4(1 + \tilde{n}_2) - \Delta_2(1 + \tilde{n}_4)} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (10.40)$$

Коэффициент отражения $R(\omega)$ в рассмотренном случае равен $R(\omega) = |b|^2 + |d|^2$.

Решение (10.40) является более общим, чем полученное в п. 10.5, и переходит в него, если пренебречь эффектом гиротропии и положить $\tilde{n}_1 = \tilde{n}_2$ и $\tilde{n}_3 = \tilde{n}_4$. При этом величина d обращается в нуль. Если же учесть гиротропию, то $d \neq 0$, что приводит к эллиптической поляризации в отраженной волне с отношением полуосей, равным $\rho = |d|/|b|$.

Если гиротропия достаточно велика и для учета пространственной дисперсии достаточно ограничиться слагаемыми, линейными по k , то в отношении одного из коэффициентов преломления (скажем, \tilde{n}_4) следует совершить предельный переход $\tilde{n}_4 \rightarrow \infty$. В этом случае, как это следует из (10.40), $\Delta_4 \rightarrow \infty$ и вместо (10.40) получаем

$$\left. \begin{aligned} a_2 &= \frac{1}{\tilde{n}_2 + 1}, \quad a_4 = 0, \\ a_1 &= \frac{\Delta_3}{(\tilde{n}_1 + 1) \Delta_3 - (\tilde{n}_3 + 1) \Delta_1} = -\frac{\Delta_3}{\Delta_1} a_3, \\ b &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\Delta_3(1 - \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 - \tilde{n}_3)}{\Delta_3(1 + \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 + \tilde{n}_3)} + \frac{1 - \tilde{n}_2}{1 + \tilde{n}_2} \right\}, \\ d &= i \left\{ \frac{\Delta_3 \tilde{n}_1 - \Delta_1 \tilde{n}_3}{\Delta_3(1 + \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 + \tilde{n}_3)} - \frac{\tilde{n}_2}{1 + \tilde{n}_2} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (10.41)$$

Этот же результат можно получить, если с самого начала в (10.35) учитывать только три решения ($k = 1, 2, 3$), однако первое из граничных условий (10.28) записать в следующем виде:

$$P_{2t}^{(-)} + \Gamma_t E_{2t}^{(-)} = 0, \quad (10.42)$$

где знак $(-)$ означает, что соответствующий вектор P или E есть сумма левополяризованных решений. Наоборот, если в среде имеются два «правых» и одно «левое» решение, то вместо (10.42) следует использовать граничное условие

$$P_{2t}^{(+)} + \Gamma_t E_{2t}^{(+)} = 0. \quad (10.42a)$$

До сих пор предполагалось, что на плоскопараллельную пластинку падает линейно поляризованная волна. Однако определенный интерес представляет такой случай, когда падающая волна является поляризованной по кругу. Предположим для определенности, что при учете пространственной дисперсии в кристалле возможно распространение двух «левых» и одной «правой» волн. Тогда, если падающая волна является правой, то $a_1 = a_3 = 0$, а коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{\tilde{n}_2 - 1}{\tilde{n}_2 + 1} \right|^2.$$

Если же падающая волна является «левой», то $a_2 = 0$, $a_1 \neq 0$, $a_3 \neq 0$ и

$$R = \left| \frac{(1 - \tilde{n}_1) \Delta_3 - (1 - \tilde{n}_3) \Delta_1}{(1 + \tilde{n}_1) \Delta_3 - (1 + \tilde{n}_3) \Delta_1} \right|^2.$$

Интересно, что когда частота света ω лежит правее точки поворота (см., например, рис. 3) и мы не учитываем поглощения, то $\tilde{n}_3 = -\tilde{n}_1^*$, $\Delta_3 = \Delta_1^*$. Поэтому в этой области частот коэффициент отражения «левой» волны

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{(1 - \tilde{n}_1) \Delta_3 - (1 - \tilde{n}_3) \Delta_1}{(1 + \tilde{n}_1) \Delta_3 - (1 + \tilde{n}_3) \Delta_1} \right|^2 = \\ &= \left| \frac{(\tilde{n}_1 \Delta_1^* + \tilde{n}_1^* \Delta_1) - (\Delta_1^* - \Delta_1)}{(\tilde{n}_1 \Delta_1^* + \tilde{n}_1^* \Delta_1) + (\Delta_1^* - \Delta_1)} \right|^2 = 1. \end{aligned}$$

Заметим, что в статье [115] делается утверждение, что использование д. г. у. в виде (10.24) применительно к гиро-

тропным средам оставляет неопределенной задачу нахождения амплитуд всех волн при учете поверхности кристалла. Как мы уже убедились выше, эта критика не обоснована. В работе [115] обсуждается также специфический механизм поверхностных потерь, связанный с возбуждением коротковолновых механических экситонов. Формально поверхностные потери могут быть учтены, если считать тензор Γ_{ij} в д. г. у. (10.24), (10.25) комплексным. Однако в целом вопрос о поверхностных потерях как в рамках макро-, так и микротехники нуждается в специальном исследовании.

10.7. Влияние неоднородного приповерхностного слоя на отражение света в окрестности экситонных полос поглощения. Характер приповерхностной неоднородности существенно зависит от того, повышается или, наоборот, понижается потенциальная энергия механического экситона, когда центр экситона приближается к поверхности кристалла (здесь мы пользуемся картиной, в которой экситон представляет собой волновой пакет). Значительное повышение потенциальной энергии экситона в приповерхностном слое приводит к понижению поляризуемости приповерхностного слоя. В этом случае приближенно можно считать, что в приповерхностном слое с некоторой толщиной l поляризация, обусловленная рассматриваемой зоной механического экситона, равна нулю. Если же в приповерхностном слое энергия экситона понижается, то это может привести к появлению уровня поверхностного экситона (о поверхностных экситонах см. п. 10.10).

Поскольку собственная частота поверхностного экситона отлична от частоты $\omega_l(0)$ объемного экситона, и в этом случае в области частот $\omega \simeq \omega_l(0)$ приближенно можно, по-видимому, считать, что вектор поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ в приповерхностном слое равен нулю. Следовательно, в обоих случаях можно, видимо, в каком-то грубом приближении полагать, что на поверхности кристалла имеется слой толщиной l , где в рассматриваемой области частот тензор диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij} = \epsilon_{00} \delta_{ij}$ (см. (6.13)); здесь и ниже мы рассматриваем, ради простоты, окрестность дипольной экситонной зоны в изотропной негиротропной среде. Относительно более глубоких слоев среды предполагается, что в ней проявляются и временная и пространственная дисперсия со всеми вытекающими отсюда последствиями.

Рассмотрим отражение света от такой двуслойной среды.

Выберем, как и ранее, такую систему координат, в которой ось z направлена по внутренней нормали к поверхности кристалла, и будем считать, что из вакуума ($z < 0$) на кристалл падает нормально к поверхности монохроматическая электромагнитная волна, электрический вектор которой направлен вдоль оси x . В этом случае электрическое поле в вакууме (область I):

$$\left. \begin{aligned} E_x^I &= e^{i \frac{\omega}{c} z} + b e^{-i \frac{\omega}{c} z}, \\ E_y^I &= E_z^I = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10.43a)$$

В приповерхностном слое ($l > z > 0$, область II)

$$\left. \begin{aligned} E_x^{II} &= c_1 e^{i \frac{\omega}{c} n_0 z} + c_2 e^{-i \frac{\omega}{c} n_0 z}, \\ E_y^{II} &= E_z^{II} = 0, \end{aligned} \right\} \quad (10.43b)$$

где $n_0 = \sqrt{\epsilon_{00}}$.

В остальной же части кристалла ($z > l$, область III)

$$\left. \begin{aligned} E_x^{III} &= a_1 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 z} + a_2 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 z}, \\ E_y^{III} &= E_z^{III} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10.43b)$$

Используя непрерывность тангенциальных составляющих \mathbf{E} и \mathbf{H}_t (см. (10.27)), а также д. г. у. (10.28), получаем такие соотношения между амплитудами:

$$\left. \begin{aligned} 1 + b &= c_1 + c_2, \\ 1 - b &= n_0 (c_1 - c_2), \\ c_1 e^{i \frac{\omega}{c} n_0 l} + c_2 e^{-i \frac{\omega}{c} n_0 l} &= a_1 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 l} + a_2 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 l}, \\ n_0 [c_1 e^{i \frac{\omega}{c} n_0 l} - c_2 e^{-i \frac{\omega}{c} n_0 l}] &= \\ &= a_1 \tilde{n}_1 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 l} + a_2 \tilde{n}_2 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 l}, \\ \Delta_1 a_1 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_1 l} + \Delta_2 a_2 e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_2 l} &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (10.44)$$

где Δ_1 и Δ_2 определяются формулой (10.33) при $k=1$ и $k=2$. Из этих соотношений следует, что коэффициенты отражения света от рассматриваемой двуслойной среды

определяется выражением

$$R = |b|^2 = \left| \frac{r_{12} e^{-2i \frac{\omega}{c} n_0 l} + r_{23}}{e^{-2i \frac{\omega}{c} n_0 l} + r_{12} r_{23}} \right|^2, \quad (10.45)$$

где

$$r_{12} = \frac{n_0 - 1}{n_0 + 1}, \quad (10.46a)$$

$$r_{23} = \frac{(\tilde{n}_1 - n_0) \Delta_2 - (\tilde{n}_2 - n_0) \Delta_1}{(\tilde{n}_1 + n_0) \Delta_2 - (\tilde{n}_2 + n_0) \Delta_1}. \quad (10.46b)$$

Величины r_{12} и r_{23} имеют простой физический смысл. Именно, квадрат модуля величины r_{12} определяет коэффициент отражения на границе между вакуумом и полубесконечной средой II, а квадрат модуля величины r_{23} определяет коэффициент отражения на границе между полубесконечными средами II и III с учетом того, что в среде III возможно распространение двух волн с одной частотой и поляризацией, но различными коэффициентами преломления. Отметим, что при отказе от учета эффектов пространственной дисперсии вид соотношения (10.45) сохраняется и только коэффициент r_{23} имеет иное значение (см. [1], задача 4 в § 6б). Естественно, что при $l=0$ формула (10.45) переходит в (10.34). Однако при $l \approx 10^{-6}$ см удвоенный сдвиг фазы — величина $\frac{2\omega}{c} n_0 l$ при $n_0 \approx 2$ и $\lambda_0 \approx 5 \cdot 10^{-5}$ см равна $\frac{2\omega n_0 l}{c} = \frac{4\pi}{\lambda_0} l n_0 \approx \frac{1}{2}$ и, следовательно, должна быть учтена.

При этом следует отметить, что рассматриваемая в этом параграфе неоднородность приповерхностного слоя при не малых значениях l ($l \approx 100$ А) может, вообще говоря, приводить к особенностям в отражении света и в том случае, когда эффекты пространственной дисперсии малы и новую волну в среде III можно не принимать во внимание. Это обстоятельство не следует упускать из виду при попытке обнаружить эффекты пространственной дисперсии в кристаллах, изучая отражение света (см. [22a] и п. 11.2).

10.8. Прохождение света через плоскопараллельную пластинку (негиротропная среда). При решении задачи о пластинке ограничимся рассмотрением простейшего случая, когда на переднюю поверхность плоскопараллельной пластинки ($z=0$) толщины l из вакуума нормально падает мо-

нохроматическая линейно поляризованная электромагнитная волна. При этом мы будем считать, что индекс 1 отвечает вакууму ($z < 0$), индекс 2 — диспергирующей среде, которую предполагаем изотропной, а индекс 3 отвечает вакууму при $z > l$. Для определенности предположим, что электрический вектор в падающей волне направлен вдоль оси x . Тогда во всех трех областях у вектора напряженности электрического поля отлична от нуля только x -я компонента, причем

$$\left. \begin{aligned} E_{1x}(z) &= e^{i \frac{\omega}{c} z} + b e^{-i \frac{\omega}{c} z}, \\ E_{2x}(z) &= \sum_{k=1}^2 \left(a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z} + b_k e^{-i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z} \right), \\ E_{3x}(z) &= s e^{i \frac{\omega}{c} z}. \end{aligned} \right\} \quad (10.47)$$

В соотношениях (10.47) имеется шесть неизвестных коэффициентов, для определения которых воспользуемся граничными условиями. Используя непрерывность тангенциальных составляющих \mathbf{E} и \mathbf{H} , находим (см. (10.27)):

$$\left. \begin{aligned} 1 + b &= \sum_{k=1}^2 (a_k + b_k), \\ s e^{i \frac{\omega}{c} l} &= \sum_{k=1}^2 \left(a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l} + b_k e^{-i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l} \right), \\ 1 - b &= \sum_{k=1}^2 \tilde{n}_k (a_k - b_k), \\ s e^{i \frac{\omega}{c} l} &= \sum_{k=1}^2 \tilde{n}_k \left(a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l} - b_k e^{-i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l} \right). \end{aligned} \right\} \quad (10.48a)$$

Еще два условия получаются при использовании д. г. у. (10.28):

$$\left. \begin{aligned} \sum_k \Delta_k (a_k + b_k) &= 0, \\ \sum_k \Delta_k \left(a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l} + b_k e^{-i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l} \right) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (10.48b)$$

Нахождение из полученной системы уравнений выражений для амплитуд b и s позволяет определить коэффициент отражения $R = |b|^2$, а также коэффициент прохождения $T = |s|^2$,

причем из-за поглощения энергии в пластинке $R + T < 1$. В общем случае формулы для R и T громоздки и здесь не приводятся. Ниже будут указаны формулы для R и T лишь в случае достаточно толстых пластин, когда в тех из уравнений (10.48), которые соответствуют граничным условиям при $z = 0$, можно пренебречь амплитудами волн, отраженных от нижней поверхности пластины.

Ясно, что выражение для R в рассматриваемом приближении остается таким же, как и для случая отражения от полубесконечной среды (формула (10.34)). Что же касается выражения для T , то оно имеет следующий вид:

$$T = |s|^2 = 16 \left| \frac{(\Delta_2 \tilde{n}_1 e^{\psi_1} - \Delta_1 \tilde{n}_2 e^{\psi_2})(\Delta_2 - \Delta_1)}{[\Delta_2(1 + \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 + \tilde{n}_2)]^2} \right|^2, \quad (10.49)$$

где

$$\psi_i = i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_i l, \quad \tilde{n}_j = n_j + i x_j, \quad i = 1, 2.$$

Вдали от полосы поглощения, где учет пространственной дисперсии несуществен и где величина $\tilde{n}_2 \rightarrow \infty$ и, следовательно, $\Delta_2 \rightarrow \infty$, выражение (10.49) упрощается. В этом случае коэффициент прохождения

$$T = 16 \left| \frac{\tilde{n}_1^2}{(1 + \tilde{n}_1)^2} \right|^2 e^{-\frac{2\omega}{c} x_1 l} \quad (10.50)$$

и с ростом толщины монотонно убывает.

В окрестности полосы поглощения, в зависимости от величины затухания новой волны ($\tilde{n} = \tilde{n}_2$), возможны два случая. Если, например, $x_2 \equiv \text{Im } \tilde{n}_2 \gg x_1 \equiv \text{Im } \tilde{n}_1$, то в формуле (10.49) членами, пропорциональными множителю e^{ψ_2} , можно пренебречь. В этом случае коэффициент прохождения

$$T = 16 \left| \frac{\Delta_2 \tilde{n}_1 (\Delta_2 - \Delta_1)}{[\Delta_2(1 + \tilde{n}_1) - \Delta_1(1 + \tilde{n}_2)]^2} \right|^2 e^{-\frac{2\omega}{c} x_1 l} \quad (10.51)$$

с ростом толщины пластины (так же как и в случае, когда пространственная дисперсия не учитывается) монотонно убывает. При этом отличие формулы (10.51) от формулы (10.50) состоит в иной зависимости T от коэффициентов преломления \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 . Если же множители e^{ψ_1} и e^{ψ_2} одного порядка, то формула (10.49) приводит к немонотонному, осциллирующему убыванию величины T . Предположим, на-

пример, что величины x_1 и x_2 малы по сравнению с n_1 и n_2 соответственно. Тогда наличие затухания можно учесть приближенно, сохранив x_1 и x_2 только в выражениях для фаз ψ_i (см. (10.49)). В этом приближении

$$T = \frac{16 (\Delta_2 - \Delta_1)^2}{[\Delta_2(1 + n_1) - \Delta_1(1 + n_2)]^4} \left[\Delta_2^2 n_1^2 + \Delta_1^2 n_2^2 e^{-\frac{2\omega}{c}(x_2 - x_1)l} - 2\Delta_1 \Delta_2 n_1 n_2 e^{-\frac{\omega}{c}(x_2 - x_1)l} \cos \frac{\omega}{c}(n_2 - n_1)l \right] e^{-\frac{2\omega}{c} x_1 l}. \quad (10.52)$$

10.9. Прохождение света через плоскопараллельную пластинку (гиротропная среда). В отличие от предыдущего раздела, будем считать диспергирующую среду 2 гиротропной. Однако принимать во внимание двойное лучепреломление не будем; это справедливо, если среда изотропна или когда плоскость $z = 0$ перпендикулярна оптической оси. Тогда при нормальном падении на плоскость $z = 0$ линейно поляризованного монохроматического света напряженность электрического поля в пластинке, подобно (10.35а), равна

$$E_2(z) = x E_{2x}(z) + y E_{2y}(z), \quad (10.53)$$

где

$$\left. \begin{aligned} E_{2x}(z) &= \sum_{k=1}^4 a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z} + \sum_{k=1}^4 b_k e^{-i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z}, \\ E_{2y}(z) &= \sum_{k=1}^4 i (-1)^k a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z} - \\ &\quad - \sum_{k=1}^4 i (-1)^k b_k e^{-i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k z}. \end{aligned} \right\} \quad (10.53a)$$

В формулах (10.53а) учтена возможность распространения в среде 2 четырех волн (см. также п. 10.5). В вакууме при $z < 0$ электрическое поле определяется соотношениями (10.36), а при $z > l$

$$\left. \begin{aligned} E_{3x}(z) &= s_1 e^{i \frac{\omega}{c} z}, \\ E_{3y}(z) &= s_2 e^{i \frac{\omega}{c} z}. \end{aligned} \right\} \quad (10.54)$$

В соотношениях (10.36), (10.53) и (10.54) имеется двенадцать неизвестных коэффициентов, для определения которых следует воспользоваться граничными условиями.

Используя условия (10.27) и (10.28) при $z = 0$ и $z = l$ находим, что они имеют вид

$$\left. \begin{aligned} 1 + b &= \sum_{k=1}^4 (a_k + b_k), & d &= \sum_{k=1}^4 (-1)^k (a_k - b_k), \\ 1 - b &= \sum_{k=1}^4 \tilde{n}_k (a_k - b_k), \\ -d &= \sum_{k=1}^4 i (-1)^k (a_k + b_k) \tilde{n}_k, \\ \tilde{s}_1 &= \sum_{k=1}^4 (\tilde{a}_k + \tilde{b}_k), & \tilde{s}_2 &= \sum_{k=1}^4 i (-1)^k (\tilde{a}_k - \tilde{b}_k), \\ \tilde{s}_1 &= \sum_{k=1}^4 \tilde{n}_k (\tilde{a}_k - \tilde{b}_k), \\ \tilde{s}_2 &= \sum_{k=1}^4 i (-1)^k \tilde{n}_k (\tilde{a}_k + \tilde{b}_k), \\ \sum_{k=1}^4 \Delta_k (a_k + b_k) &= 0, & \sum_{k=1}^4 \Delta_k (-1)^k (a_k - b_k) &= 0, \\ \sum_{k=1}^4 \Delta_k (\tilde{a}_k + \tilde{b}_k) &= 0, & \sum_{k=1}^4 \Delta_k (-1)^k (\tilde{a}_k - \tilde{b}_k) &= 0, \end{aligned} \right\} (10.55)$$

где использованы обозначения (10.33), а также

$$\tilde{a}_k = a_k e^{i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l}, \quad \tilde{b}_k = b_k e^{-i \frac{\omega}{c} \tilde{n}_k l}, \quad \tilde{s}_k = s_k e^{i \frac{\omega}{c} l}.$$

До сих пор предполагалось, что пространственная дисперсия в пластинке учитывается с точностью до слагаемых порядка k^2 , в связи с чем в формулах (10.53) и (10.55) сохраняется вклад от всех четырех возможных решений дисперсионного уравнения. Поскольку, однако, здесь рассматривается гиротропная среда, можно перейти к более простому случаю, сохранив лишь вклад от трех решений, подобно тому, как это было сделано в п. 10.5. В этой связи заметим, что у комплексного показателя преломления \tilde{n}_4 аномально велики как $|\operatorname{Re} \tilde{n}_4|$, так и $|\operatorname{Im} \tilde{n}_4|$. Это обстоятельство позволяет в уравнениях (10.55) положить $b_4 = \tilde{a}_4 = 0$. Исключая затем из последних четырех уравнений системы (10.55) величины

\tilde{b}_4 и a_4 , получаем

$$\begin{aligned} \Delta_1 a_1 + \Delta_3 a_3 + \Delta_2 b_2 &= 0, \\ \Delta_1 \tilde{b}_1 + \Delta_2 \tilde{a}_2 + \Delta_3 \tilde{b}_3 &= 0. \end{aligned}$$

Из этих же уравнений следует, что амплитуды a_4 и \tilde{b}_4 обратно пропорциональны Δ_4 и, следовательно, также малы. Поскольку $\Delta_4 \sim \tilde{n}_4^2$, а в первые восемь уравнений (10.55) входят наряду со слагаемыми порядка a_4 и \tilde{b}_4 лишь произведения $\tilde{n}_4 a_4$ или $\tilde{n}_4 \tilde{b}_4$, ясно, что в этих уравнениях при аномально больших \tilde{n}_4 можно также положить $a_4 \rightarrow 0$, $\tilde{n}_4 a_4 \rightarrow 0$, $b_4 \rightarrow 0$, $\tilde{n}_4 \tilde{b}_4 \rightarrow 0$. Поэтому в окончательном виде упрощенная система уравнений для определения неизвестных амплитуд может быть записана в виде

$$\left. \begin{aligned} 1 + b &= \sum_{k=1}^3 (a_k + b_k), \\ d &= \sum_{k=1}^3 i (-1)^k (a_k - b_k), \\ 1 - b &= \sum_{k=1}^3 \tilde{n}_k (a_k - b_k), \\ -d &= \sum_{k=1}^3 i (-1)^k (a_k + b_k) \tilde{n}_k, \\ \tilde{s}_1 &= \sum_{k=1}^3 (\tilde{a}_k + \tilde{b}_k), \\ \tilde{s}_2 &= \sum_{k=1}^3 i (-1)^k (\tilde{a}_k - \tilde{b}_k), \\ \tilde{s}_1 &= \sum_{k=1}^3 (\tilde{a}_k - \tilde{b}_k) \tilde{n}_k, \\ \tilde{s}_2 &= \sum_{k=1}^3 i (-1)^k (\tilde{a}_k + \tilde{b}_k) \tilde{n}_k, \\ \Delta_1 a_1 + \Delta_3 a_3 &= -\Delta_2 b_2, \\ \Delta_1 \tilde{b}_1 + \Delta_3 \tilde{b}_3 &= -\Delta_2 \tilde{a}_2. \end{aligned} \right\} (10.55a)$$

При этом в (10.53a) также следует положить $a_4 = b_4 = 0$.

Таким образом, после исключения четвертого решения, для определения всех амплитуд необходимо решить систему уравнений с десятью неизвестными. Эта задача все еще громоздка. Поэтому, как и в п. 10.8, здесь будет рассмотрен лишь случай достаточно толстых пластин, когда в граничных условиях при $z=0$ можно пренебречь амплитудами волн, отраженных от нижней поверхности пластины $z=l$. В этом приближении коэффициент отражения остается таким же, как в случае отражения от полубесконечной среды (см. п. 10.5), а коэффициенты a_k определяются соотношениями (10.41). Для остальных амплитуд находим, что

$$\left. \begin{aligned} \tilde{b}_1 &= -\frac{\Delta_3(1-\tilde{n}_2)-\Delta_2(1+\tilde{n}_3)}{\Delta_3(1+\tilde{n}_1)-\Delta_1(1+\tilde{n}_3)} \tilde{a}_2, \\ \tilde{b}_2 &= -\frac{1}{1+\tilde{n}_2} [\tilde{a}_1(1-\tilde{n}_1)+\tilde{a}_3(1-\tilde{n}_3)], \\ \tilde{b}_3 &= -\frac{\Delta_2(1+\tilde{n}_1)-\Delta_1(1-\tilde{n}_2)}{\Delta_3(1+\tilde{n}_1)-\Delta_1(1+\tilde{n}_3)} \tilde{a}_2 \end{aligned} \right\} (10.56)$$

и

$$\left. \begin{aligned} \tilde{s}_1 &= \frac{\tilde{n}_1+\tilde{n}_2}{1+\tilde{n}_2} \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{n}_2+\tilde{n}_3}{1+\tilde{n}_2} \tilde{a}_3 + \\ &+ \frac{\Delta_3(\tilde{n}_1+\tilde{n}_2)+\Delta_2(\tilde{n}_3-\tilde{n}_1)-\Delta_1(\tilde{n}_2+\tilde{n}_3)}{\Delta_3(1+\tilde{n}_1)-\Delta_1(1+\tilde{n}_3)} \tilde{a}_2, \\ \tilde{s}_2 &= -i \left\{ \frac{\tilde{n}_1+\tilde{n}_2}{1+\tilde{n}_2} \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{n}_2+\tilde{n}_3}{1+\tilde{n}_2} \tilde{a}_3 - \right. \\ &\left. - \frac{\Delta_3(\tilde{n}_1+\tilde{n}_2)+\Delta_2(\tilde{n}_3-\tilde{n}_1)-\Delta_1(\tilde{n}_2+\tilde{n}_3)}{\Delta_3(1+\tilde{n}_1)-\Delta_1(1+\tilde{n}_3)} \tilde{a}_2 \right\} \end{aligned} \right\} (10.57)$$

Вдали от полосы поглощения $\Delta_3 \rightarrow \infty$, $a_3 \rightarrow 0$ (см. (10.41) и (10.54)), так что

$$\frac{E_{3y}(z)}{E_{3x}(z)} = \frac{s_2}{s_1} = \frac{\tilde{s}_2}{\tilde{s}_1} = -i \frac{e^{i\frac{\omega}{c}\tilde{n}_1 l} - e^{i\frac{\omega}{c}\tilde{n}_2 l}}{e^{i\frac{\omega}{c}\tilde{n}_1 l} + e^{i\frac{\omega}{c}\tilde{n}_2 l}} = \operatorname{tg} \varphi,$$

где

$$\varphi = \frac{\omega}{2c} (\tilde{n}_2 - \tilde{n}_1) l.$$

Если коэффициенты преломления \tilde{n}_1 и \tilde{n}_2 можно считать вещественными, то электромагнитное поле в области $z > l$ оказывается линейно поляризованным, причем отношение $\frac{\varphi}{l}$ определяет вращательную способность пластинки, отнесенную к единице ее толщины.

Наличие трех волн делает отношение \tilde{s}_2/\tilde{s}_1 комплексным даже в том случае, когда поглощением можно пренебречь и считать все величины \tilde{n}_k , $k=1, 2, 3$ вещественными. Следовательно, в этом случае проходящий свет является эллиптически поляризованным. При учете только двух волн эллиптическая поляризация возникает лишь при наличии поглощения, которое для «правой» и «левой» волн должно быть различным (круговой дихроизм). В рассматриваемом же случае при отказе от учета поглощения наличие эллиптической поляризации обусловлено тем, что из пластинки выходят три поляризованные по кругу в разные стороны волны (две «левые» и одна «правая» или наоборот). Действительно, используя (10.57), находим, что напряженность электрического поля при $z > l$

$$E_3(z) = A_1^- e^{i\frac{\omega}{c}z} + A_3^- e^{i\frac{\omega}{c}z} + A_2^+ e^{i\frac{\omega}{c}z}, \quad (10.58)$$

где $A = xA_x + yA_y$, причем

$$\left. \begin{aligned} A_{1x}^- &= iA_{1y}^- = \frac{\tilde{n}_1+\tilde{n}_2}{1+\tilde{n}_2} \frac{\Delta_3 e^{i\frac{\omega}{c}(\tilde{n}_1-1)l}}{(\tilde{n}_1+1)\Delta_3 - (\tilde{n}_3+1)\Delta_1}, \\ A_{3x}^- &= iA_{3y}^- = -\frac{\tilde{n}_2+\tilde{n}_3}{1+\tilde{n}_2} \frac{\Delta_1 e^{i\frac{\omega}{c}(\tilde{n}_3-1)l}}{(\tilde{n}_1+1)\Delta_3 - (\tilde{n}_3+1)\Delta_1}, \\ A_{2x}^+ &= -iA_{2y}^+ = \\ &= \frac{e^{i\frac{\omega}{c}(\tilde{n}_2-1)l}}{1+\tilde{n}_2} \frac{\Delta_3(\tilde{n}_1+\tilde{n}_2)+\Delta_2(\tilde{n}_3-\tilde{n}_1)-\Delta_1(\tilde{n}_2+\tilde{n}_3)}{(1+\tilde{n}_1)\Delta_3 - (\tilde{n}_3+1)\Delta_1}. \end{aligned} \right\} (10.58a)$$

Для той области, где $|\tilde{n}_1| \approx |\tilde{n}_2|$, $|\tilde{n}_3| \gg |\tilde{n}_1|$, $|\tilde{n}_3| \gg |\tilde{n}_2|$ (см. рис. 6—14), формулы (10.58a) упрощаются. С точностью

до малых слагаемых порядка $\frac{1}{|\tilde{n}_3|}$

$$A_{1x}^- = iA_{1y}^- = \frac{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2}{1 + \tilde{n}_2} e^{i \frac{\omega}{c} (\tilde{n}_1 - 1) l} \left(1 + \frac{\Delta_1}{1 + \tilde{n}_1} \frac{1}{\tilde{n}_3} \right),$$

$$A_{2x}^+ = -iA_{2y}^+ = \frac{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2}{1 + \tilde{n}_2} e^{i \frac{\omega}{c} (\tilde{n}_2 - 1) l} \left[1 + \frac{\tilde{n}_2 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_3} + \frac{\Delta_1}{(1 + \tilde{n}_1) \tilde{n}_3} \right],$$

$$A_{3x}^- = iA_{3y}^- = -\frac{\Delta_1 e^{i \frac{\omega}{c} (\tilde{n}_3 - 1) l}}{(1 + \tilde{n}_1) (1 + \tilde{n}_2) \tilde{n}_3}.$$

В области прозрачности сумма волн с амплитудами A_1^- и A_2^+ дает линейно поляризованную волну, повернутую относительно оси x на угол $\varphi = \frac{\omega}{2c} (n_2 - n_1) l$, с которой интерферирует поляризованная по кругу влево волна с амплитудой A_3^- . Это обстоятельство приводит к кажущемуся круговому дихроизму, величина которого осциллирует с изменением толщины пластины. Исследование этого эффекта может дать ценные сведения о зависимости от ω коэффициента преломления третьей волны (по этому поводу см. также § 11).

Заканчивая рассмотрение вопроса о прохождении нормальных электромагнитных волн через кристаллическую среду при учете пространственной дисперсии, сделаем одно замечание, касающееся выбора корней дисперсионного уравнения для коэффициентов преломления нормальных волн \tilde{n}_i . При учете пространственной дисперсии уравнение для определения величин \tilde{n}_i остается фактически уравнением для \tilde{n}^2 (см. уравнение (6.4) для гиротропной среды и уравнение (7.4) для среды негиротропной). Следовательно, уравнения (6.4) и (7.4) определяют \tilde{n}_i лишь с точностью до знака. Ясно, что его надлежит выбирать таким образом, чтобы волны, возникшие на поверхности кристалла, заглухали в глубь кристалла. Если же заглухание не учитывается и, например, все \tilde{n}_i имеют вещественные значения, то при выборе знака для $\tilde{n}_i = n_i$ можно воспользоваться соображениями, изложенными в пп. 3.2, 3.3 и 7.2

и относящимися к влиянию пространственной дисперсии на направление групповой скорости нормальных волн. Именно для тех нормальных волн, для которых $v_{гр} s > 0$, знак n_i следует выбирать таким, чтобы направление распространения волны, так же как и направление $v_{гр}$, образовывало с внутренней нормалью к поверхности кристалла острый угол. Наоборот, если $v_{гр} s < 0$, то направление распространения волны s , в отличие от направления $v_{гр}$, должно образовывать тупой угол с внутренней нормалью к границе раздела. Как раз такой выбор отвечает требованию, чтобы энергия в среде уходила от границы раздела. Для того чтобы проиллюстрировать сказанное, рассмотрим направление преломленной волны в изотропной прозрачной среде при наклонном падении (рис. 17; в этой связи см. также [116]).

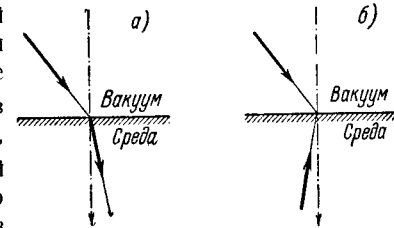


Рис. 17. Направление преломленной волны (вектор s) в изотропной прозрачной среде при наклонном падении. а) $v_{гр} s > 0$; б) $v_{гр} s < 0$.

10.10. О поверхностных экситонах. Влияние границы кристалла на экситонные состояния может носить двоякий характер. Наличие границы прежде всего сказывается на поведении около поверхности кристалла волновой функции «объемных» экситонов, т. е. таких экситонов, само существование которых не связано с наличием границы. Этот эффект обсуждался в пп. 10.4 и 10.7. Кроме того, наличие границы в некоторых случаях приводит к появлению особых поверхностных экситонов, которые аналогичны поверхностным рэлеевским волнам в теории упругости и таммовским поверхностным уровням электронов в ограниченном кристалле. Таким образом, если в принципиальном отношении возможность появления поверхностных экситонов не является чем-то неожиданным, то нахождение волновых функций и энергий поверхностных экситонов для различных кристаллов является малоисследованной проблемой и, вообще говоря, требует использования микротeorии. Исключением в этом смысле

является тот случай, когда толщина слоя, где локализован поверхностный экситон, значительно превышает постоянную решетки кристалла. Такие поверхностные состояния могут быть изучены в рамках феноменологической электродинамики (см., например, [1], § 68, а также [131, 137]). Действительно, в этом случае можно считать, что векторы напряженностей электрического и магнитного полей \mathbf{E} и \mathbf{H} в поверхностной электромагнитной волне, имеющей частоту ω , в обеих средах (в вакууме и кристалле) удовлетворяют уравнениям Максвелла (кристалл предполагается немагнитным, в связи с чем вектор $\mathbf{H} = \mathbf{B}$; см. (2.1)):

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= \frac{i\omega \mathbf{H}}{c}, & \operatorname{rot} \mathbf{H} &= -i \frac{\omega}{c} \mathbf{D}, \\ \operatorname{div} \mathbf{D} &= 0, & \operatorname{div} \mathbf{H} &= 0, & D_i &= \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j. \end{aligned} \right\} \quad (10.59)$$

Будем считать, что поверхность кристалла совпадает с плоскостью xy , так что полупространство $z > 0$ отвечает вакууму, а полупространство $z < 0$ — кристаллу.

Поскольку нас здесь интересуют решения уравнений Максвелла, убывающие при $z \rightarrow \pm\infty$, будем искать их в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}) &= E_0^{(1)} e^{i(k_1 x + k_2 y + i\kappa_1 z)} \equiv E_0^{(1)} e^{i\mathbf{K}^{(1)} \cdot \mathbf{r}}, \\ &z > 0, \operatorname{Re} \kappa_1 > 0, \\ \mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r}) &= E_0^{(2)} e^{i(k_1 x + k_2 y - i\kappa_2 z)} \equiv E_0^{(2)} e^{i\mathbf{K}^{(2)} \cdot \mathbf{r}}, \\ &z < 0, \operatorname{Re} \kappa_2 > 0, \end{aligned} \right\} \quad (10.60)$$

где векторы $\mathbf{K}^{(1)} = k_1 \mathbf{e}_1 + k_2 \mathbf{e}_2 + i\kappa_1 \mathbf{e}_3$, $\mathbf{K}^{(2)} = k_1 \mathbf{e}_1 + k_2 \mathbf{e}_2 - i\kappa_2 \mathbf{e}_3$, \mathbf{e}_i ($i = 1, 2, 3$) — единичные орты, направленные вдоль координатных осей. Выражения для $\mathbf{H}^{(1)}$ и $\mathbf{H}^{(2)}$ записываем в таком же виде. Поля (10.60) и им аналогичные по сути дела имеют вид плоских волн (2.2), но с комплексным \mathbf{k} , т. е. являются частным случаем неоднородных плоских волн. Поэтому очевидно, что использование уравнений поля (2.1) или (10.59) приводит для волн с $\mathbf{E} \neq 0$ к дисперсионному уравнению (2.10). В используемых в (10.60) обозначениях это уравнение принимает вид

$$\left| \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{K}) - (\mathbf{K})^2 \delta_{ij} + K_i K_j \right| = 0. \quad (10.61)$$

В вакууме $\varepsilon_{ij} = \delta_{ij}$, $\mathbf{K} = \mathbf{K}^{(1)}$, и поэтому (10.61) сводится к соотношению

$$\omega^2 = c^2 \mathbf{K}^2 = c |\mathbf{K}^{(1)}|^2,$$

т. е. приводит к связи

$$\kappa_1 = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 - \frac{\omega^2}{c^2}}. \quad (10.62)$$

Очевидно, уравнение (10.61) при $\mathbf{K} = \mathbf{K}^{(2)}$ может быть использовано только в том случае, если тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{K}^{(2)})$ сохраняет свой смысл и при комплексных $\mathbf{K}^{(2)}$. Поскольку в нашем случае величина κ_2 предполагается малой ($\kappa_2 a \ll 1$; только в этом случае феноменологический подход применим), это условие можно предполагать выполненным.

Для того чтобы определить область частот ω , которые соответствуют поверхностным экситонам, необходимо потребовать выполнения граничных условий при $z = 0$. Эти граничные условия в рассматриваемом случае дают

$$E_{01}^{(1)} = E_{01}^{(2)}, \quad E_{02}^{(1)} = E_{02}^{(2)}, \quad E_{03}^{(1)} = D_{03}^{(2)}, \quad (10.63a)$$

$$\mathbf{H}_0^{(1)} = \mathbf{H}_0^{(2)}. \quad (10.63b)$$

Легко убедиться в том, что при выполнении условия (10.63b) граничное условие $E_{03}^{(1)} = D_{03}^{(2)}$ соблюдается автоматически. Остальные два граничных условия можно записать в следующем виде:

$$[\mathbf{e}_3 [\mathbf{K}^{(1)} \mathbf{H}_0^{(1)}]] = [\mathbf{e}_3 c], \quad c_i = \varepsilon_{ij}^{-1} [\mathbf{K}^{(2)} \mathbf{H}_0^{(1)}]_j. \quad (10.64)$$

В случае изотропной среды, если пренебречь малыми слабеющими порядками $(a/\lambda)^2$ и положить

$$\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon(\omega, \mathbf{k})} \delta_{ij},$$

уравнение (10.64) принимает вид

$$H_{03}^{(1)} K_3^{(1)} - H_0^{(1)} K_3^{(1)} = \frac{1}{\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)})} (\mathbf{K}^{(2)} H_{03}^{(1)} - H_0^{(1)} K_3^{(2)}). \quad (10.65)$$

Из уравнения (10.65) следует, во-первых, что $K_3^{(1)} = \frac{K_3^{(2)}}{\varepsilon}$, т. е.

$$\kappa_1 = -\frac{\kappa_2}{\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)})}. \quad (10.65a)$$

Кроме того, согласно (10.65),

$$H_{03}^{(1)}K^{(1)} = \frac{1}{\varepsilon} H_{03}^{(1)}K^{(2)},$$

что для $\varepsilon \neq 1$ выполняется лишь при $H_{03}^{(1)} = 0$. Соотношение (10.65a) при вещественных и положительных κ_1 и κ_2 может соблюдаться только в области частот, где $\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)}) < 0$. Используя в этом случае связь (10.62), а также соотношение (10.61), которое в случае изотропной среды имеет вид

$$\kappa_2 = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)})}, \quad (10.66)$$

находим

$$k_1^2 + k_2^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{|\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)})|}{|\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)})| - 1}. \quad (10.67)$$

Формулы (10.66) и (10.67) позволяют выразить частоту поверхностной волны ω и величину κ_2 через сумму $k_1^2 + k_2^2$. Из условия $k_1^2 + k_2^2 > 0$ следует, что

$$|\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)})| > 1. \quad (10.68)$$

Из (10.67), (10.68) мы видим, что $k_1^2 + k_2^2 > \frac{\omega^2}{c^2}$ и, следовательно, $\kappa_1 > 0$ (см. (10.62)), как это и предполагалось. Таким образом, интервал частот, в котором существуют поверхностные состояния, ограничен неравенством (10.68) и условием (см. (10.65a))

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)}) < 0. \quad (10.69)$$

Тем самым зона поверхностных экситонов рассматриваемого типа, по крайней мере при отсутствии пространственной дисперсии, по своей ширине меньше, чем разность $\omega_{\parallel} - \omega_{\perp}$ (напомним, что $\varepsilon(\omega_{\parallel}) = 0$, $\varepsilon(\omega_{\perp}) = \pm \infty$).

Соотношения (10.66), (10.67) устанавливают зависимость частоты поверхностного экситона от $k_1^2 + k_2^2$ при учете запаздывания. Переход к кулоновскому поверхностному экситону отвечает пренебрежению запаздыванием, т. е. пренебрежению током смещения. Это значит, что в (10.59) (и следовательно, в (10.62) и (10.66)) нужно отбросить член с $\frac{\omega^2}{c^2}$. Поэтому $\kappa_1 = \kappa_2 = \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$, в то время как в силу (10.65a) $\kappa_1 = -\frac{\kappa_2}{\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)})}$. Таким образом, для частоты кулоновского поверхностного экситона в рассматриваемом случае имеем (см. (10.65))

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{K}^{(2)}) = -1. \quad (10.70)$$

Тот же результат формально получается из (10.67), если совершить переход $c \rightarrow \infty$ при фиксированных k_1 , k_2 и ω .

При учете пространственной дисперсии, если положить, в соответствии с (6.13),

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{00} - \frac{2A\omega_{\perp}^2(0)}{\omega^2 - \omega_{\perp}^2(\mathbf{k})} \quad (10.71)$$

и аналитически продолжить это выражение в область значений \mathbf{k} , когда $k_3 = ix$ — чисто мнимое число, уравнение для частот поверхностных экситонов (10.70) приводит к зависимости частоты поверхностного экситона от квазимпульса

$$\begin{aligned} \omega_{\text{пов}}^2(\mathbf{K}^{(2)}) &= \omega_{\perp}^2(\mathbf{K}^{(2)}) + \frac{2A\omega_{\perp}^2(0)}{\varepsilon_{00} + 1}, \\ \omega_{\perp}(\mathbf{K}^{(2)}) &= \omega_{\perp}(0) - \frac{\hbar\kappa_2^2}{2m_{\text{экс}}} + \frac{\hbar(k_1^2 + k_2^2)}{2m_{\text{экс}}}, \end{aligned} \quad (10.72)$$

где $m_{\text{экс}}$ — эффективная масса кулоновского объемного экситона. Таким образом, предельная частота поверхностного кулоновского экситона (отвечающая значениям $k_1 = k_2 = 0$, а следовательно, и $\kappa_2 \rightarrow 0$) определяется соотношением

$$\omega_{\text{пов}}(0) = \omega_{\perp}(0) \sqrt{1 + \frac{2A}{\varepsilon_{00} + 1}} < \omega_{\parallel}(0), \quad (10.73)$$

так как в рассматриваемой модели $\omega_{\parallel}(0) = \omega_{\perp}(0) \sqrt{1 + \frac{2A}{\varepsilon_{00}}}$.

Поскольку резонансы в поглощении света соответствуют частотам непродольных кулоновских экситонов, положение линий экситонного поглощения, связанное с поверхностными экситонами, в рассматриваемом случае приблизительно соответствует частоте $\omega_{\text{пов}}(0)$, определяемой выражением (10.71). Отметим, что рассмотренные выше поверхностные экситоны могут возбуждаться заряженными частицами и светом. В последнем случае, однако, это возбуждение может идти лишь с участием фононов или дефектов кристалла. Дело в том, что при поглощении фотона ($\omega_{\text{ф}} = c\sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$) поверхностным экситоном должна сохраняться не только частота, но и тангенциальные составляющие волнового вектора k_1 и k_2 . Подстановка же $\omega = \omega_{\text{ф}}$ в (10.62), если не учитывать дефекты и фононы, дает для κ_1 мнимое значение.

Для тех поверхностных экситонов, для которых вектор напряженности электрического поля $E = 0$, тогда как вектор $D \neq 0$, по аналогии со случаем «объемных» «волн поляризации» (см. п. 2.2 и формулу (2.41)) должно, очевидно, вместо (10.61) выполняться уравнение

$$|\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{K}^{(2)})| = 0 \quad (10.74)$$

при дополнительном условии $(\mathbf{K}^{(2)}\mathbf{D}^{(2)}) = 0$. При $\kappa_2 a \ll 1$ поверхностные волны с $E = 0$ и $D \neq 0$ (поверхностные «волны поляризации») также могут быть рассмотрены в рамках макротории, однако при этом приходится использовать дополнительные граничные условия (см. [131])*). Отметим, что состояния длинноволновых поверхностных кулоновских экситонов рассматривались в рамках микротории, например, в работе [132]. Ясно, однако, что при исследовании свойств состояний поверхностных дипольных экситонов при малых $|\mathbf{k}|$ микротория, если речь идет о функциональной зависимости, не дает ничего нового по сравнению с феноменологическим подходом **). Более того, в области приме-

*) О поверхностных экситонах в одноосных кристаллах см. [139].

**) Заметим, что в статье [132] задача о поверхностных экситонах, по сути дела, до конца не решена, поскольку величина κ_2 не была выражена через k_1 и k_2 (как мы видели, в изотропной среде для кулоновских поверхностных экситонов с $E \neq 0$ $\kappa_2 = \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$).

нимости формул вида (10.69) — (10.71) микротория поверхностных экситонов указанного типа (у которых при $|\mathbf{k}| < \frac{1}{a}$ $E \neq 0$ или $D \neq 0$) вообще не нужна, так как в эти формулы входят лишь параметры, определяющие объемную величину — диэлектрическую проницаемость (10.71) и дополнительные граничные условия.

§ 11. Экспериментальные исследования эффектов пространственной дисперсии в кристаллах

11.1. Гиротропные кристаллы. Вопрос о природе оптических свойств гиротропных кристаллов является отнюдь не новым — уже давно известно, что речь в этом случае идет об эффекте пространственной дисперсии порядка $\frac{a}{\lambda}$ (см. [89, 90] и введение). Тем не менее экспериментальные исследования оптических свойств гиротропных кристаллов в окрестности экситонных линий поглощения весьма немногочисленны. В частности, весьма скудны данные о частотной зависимости угла поворота плоскости поляризации в кристаллах вблизи отдельных полос поглощения. Единственными в этом отношении являются результаты работ [86], в которых были исследованы некоторые кристаллы, относящиеся к кристаллическому классу D_3 и имеющие симметрию кварца (кварц, киноварь, бензил), а также кубический кристалл хлората натрия, относящийся к кристаллическому классу T . При этом было показано, что величина вращения вне полосы поглощения, обусловленная вкладом исследованных возбужденных состояний, в зависимости от частоты света следует соотношению (10.17), т. е. $\varphi(\omega) = K\omega^2/(\omega^2 - \omega_L^2)^2$.

При исследовании одноосных кристаллов [86] в ряде случаев вращательная способность измерялась как для света, распространяющегося вдоль оптической оси, так и для света, распространяющегося перпендикулярно оптической оси. Если на кристалл падает линейно поляризованный свет под углом к оптической оси i , в частности, перпендикулярно к оси, то в кристалле вместо волн, поляризованных по кругу, возникают (см. § 6) эллиптически поляризованные волны с различным знаком вращения и различной ориентацией осей эллипса. В этом случае при прохождении волн через

кристалл у них образуется разность фаз, в которую вносит вклад не только эффект гирации, но и обычное двойное лучепреломление, что, разумеется, несколько усложняет исследование дисперсии вращения. В работе [86] показано, что для кварца при направлении распространения света, перпендикулярном оптической оси, дисперсия вращения также следует соотношению типа (10.17), но с другим значением коэффициента K .

Знание коэффициента K , а также знание частотной зависимости коэффициента преломления вдали от рассматриваемой полосы поглощения позволяет оценить величину $\frac{\omega}{c} \delta_{123}$ (см. (6.1)), значение которой, в частности, определяет ширину той области частот, примыкающей к резонансу, где возможно появление трех волн (см. § 6).

Действительно, сравнивая формулы (6.1) и (10.16), находим, что, например, в кубических кристаллах

$$\frac{\omega}{c} \delta_{123} = \frac{\gamma}{4\pi\Lambda^{(0)}}. \quad (11.1)$$

С другой стороны, как это следует из (10.15б), вне полосы поглощения

$$n^2(\omega) = \epsilon_0(\omega) = \epsilon_{00} + \frac{4\pi\Lambda^{(0)}/\rho}{\omega_L^2 - \omega^2} \equiv \epsilon_{00} + \frac{K_1\lambda_0^2}{\lambda_0^2 - \lambda_L^2}, \quad (11.2)$$

где

$$\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega}, \quad \lambda_L = \frac{2\pi c}{\omega_L}, \quad K_1 = \frac{\Lambda^{(0)}}{\rho} \frac{\lambda_L^2}{\pi c^2}.$$

Поэтому

$$\frac{\omega}{c} \delta_{123} = \frac{K_2}{\pi\lambda_0 K_1}, \quad (11.3)$$

где K_2 — коэффициент в формуле

$$\varphi(\lambda_0) = \frac{K_2\lambda_0^2}{(\lambda_0^2 - \lambda_L^2)^2}, \quad (11.4)$$

причем, очевидно (см. (10.17)), что $K_2 = K\lambda_L^4/4\pi^2c^2$. Согласно [86], в кристалле киновари полосе поглощения при $\lambda_L \simeq 4930\text{Å}$ соответствует $K_1 \simeq 0,56$; $K_2 \simeq 1,06\pi \cdot 10^{-8}$ см,

откуда находим, что $\frac{\omega}{c} \delta_{123} = \frac{2\pi}{\lambda_L} \delta_{123} \simeq 0,8 \cdot 10^{-3}$. Для органического кристалла бензила полосе $\lambda_L \simeq 2400\text{Å}$ соответствуют $K_1 \simeq 0,4$, $K_2 \simeq 0,35\pi \cdot 10^{-8}$ см. Поэтому $\frac{\omega}{c} \delta_{123} \simeq 10^{-3}$. Согласно данным того же автора, в кубическом кристалле хлората натрия полосе при $\lambda_L \simeq 900\text{Å}$ соответствуют $K_1 = 1,18$, $K_2 = 0,06\pi \cdot 10^{-8}$ см и, следовательно, $\frac{\omega}{c} \delta_{123} \simeq 4 \cdot 10^{-5}$, а полосе при $\lambda_L = 1850\text{Å}$ соответствуют $K_1 = 0,08$, $K_2 = -0,07\pi \cdot 10^{-9}$ см и, следовательно, $\frac{\omega}{c} \delta_{123} \simeq -0,5 \cdot 10^{-4}$.

Отметим, что очень сильной вращательной способностью обладают холестеристические жидкие кристаллы (см., например, [138]). В этих кристаллах вращательная способность достигает 200 оборотов на 1 мм толщины, так что в них значение величины $\frac{\omega}{c} \delta_{123}$ может быть значительно больше, чем в рассмотренных выше кристаллах.

Особый интерес представляют исследования эффектов гиротропии при низких температурах, когда затухание экситонных состояний может быть малым и когда можно ожидать проявления тонких эффектов пространственной дисперсии, связанных со структурой экситонных зон, и т. д. В настоящее время уже известна работа такого рода [91], а также ее развитие [92], в которых был исследован круговой дихроизм вблизи отдельных линий поглощения в кристалле натрийурилатацетата при гелиевых и водородных температурах.

Для молекул в растворе величина кругового дихроизма, т. е. отношение разности коэффициентов поглощения света, поляризованного по кругу вправо и влево, к их сумме, обычно мала, порядка $\frac{a}{\lambda}$, где a — размер молекулы, а λ — длина волны света, так что $\frac{a}{\lambda} \sim 10^{-2} \div 10^{-3}$. Однако в натрийурилатацетате величина кругового дихроизма для отдельных слабых линий оказалась близкой к единице, что соответствует относительно сильному поглощению только одной из волн, поляризованных по кругу. Поскольку кристалл натрийурилатацетата состоит из негиротропных молекул, обнаружение

явление характерно только для кристаллического состояния и является следствием различия структуры экситонных зон, соответствующих правой и левой круговым поляризациям вектора дипольного момента (см. [93, 94]). Характерным для кристалла натрийурилата является отсутствие кругового дихроизма в окрестности интенсивных полос поглощения, где уширение, обусловленное сильным внутримолекулярным взаимодействием, по-видимому, «смазывает» тонкие эффекты зонной структуры, обусловленные слабым межмолекулярным взаимодействием. Что же касается некоторых слабых линий поглощения, которые характерны только для кристалла, то в их окрестности наблюдение новой волны может быть затруднено (малые силы осциллятора), однако изучение вращательной способности кристалла в зависимости от частоты возможно и весьма актуально для выяснения природы обсуждаемых «кристаллических» линий поглощения.

До настоящего времени отсутствуют экспериментальные исследования эффектов, связанных с новыми волнами в гиротропных кристаллах (см. о них § 10). В этой связи следует отметить, что такие исследования при низких температурах представляли бы большой интерес, поскольку наличие в кристалле трех волн, имеющих одну частоту и различные показатели преломления, коэффициенты поглощения и поляризацию, при благоприятных условиях, как это показано в п. 10.5 и п. 10.8, должно приводить к целому ряду эффектов. В частности, в п. 10.5 указывалось, что правее точки поворота *) (см. рис. 3) для «левых» волн, если пренебречь поглощением, начинается область полного отражения ($R=1$). Если пространственная дисперсия не учитывается, область сильного отражения в диэлектриках располагается правее (в шкале частот) резонанса. Поэтому обнаружение сильного отражения левее резонанса и вне линии поглощения являлось бы подтверждением указанного на рис. 3 хода дисперсионных кривых для гиротропного кристалла в окрестности

*) Учет затухания волн приводит, как это видно из рис. 5, к исчезновению точки поворота. Тем не менее мы в дальнейшем будем пользоваться этим термином, ибо при отказе от учета поглощения, а также при достаточно слабом поглощении частота, соответствующая точке поворота, делит всю область частот на две такие области, в которых характер распространения нормальных волн существенно различен.

дипольной линии поглощения. Не менее интересным представляются нам наблюдения состояния поляризации линейно поляризованного света, прошедшего через плоскопараллельную пластинку (см. п. 10.8), поскольку после прохождения через пластинку такой свет преобразуется в сумму линейно поляризованной и поляризованной по кругу волн, интерферирующих друг с другом. Для частот ω , значительно меньших частоты поворота (см. рис. 3), амплитуда круговой волны мала, однако она становится порядка амплитуды линейно поляризованного света с приближением к точке поворота (см. п. 10.8). Отметим также, что если через пластинку пропускать в этой же области частот свет круговой поляризации, которая совпадает с поляризацией третьей (новой) волны, то из пластинки выйдет свет той же поляризации, однако его интенсивность должна осциллировать с изменением толщины пластинки (см. формулу (10.57) при $a_2=0$). Если же частота линейно поляризованного света, падающего на пластинку, расположена несколько правее точки поворота, то выходящий свет должен быть поляризован по кругу (для

рассмотренного в п. 10.8 случая $e^{i\frac{\omega}{c}n_1t} = e^{i\frac{\omega}{c}n_3t} \simeq 0$, $A_{1x}^- = A_{3x}^- = 0$, $A_{2x}^+ \neq 0$). При анализе экспериментальных данных все эти возможности следует иметь в виду. Разумеется, для успешной реализации отмеченных возможностей необходимо, чтобы ширина линии поглощения была достаточно мала, поскольку только в этом случае в гиротропном кристалле может распространяться новая (третья) волна (см. § 6).

11.2. Негиротропные кристаллы. Экспериментальные исследования оптических эффектов, связанных с пространственной дисперсией тензора диэлектрической проницаемости, в негиротропных кристаллах были выполнены как на неорганических кристаллах Cu_2O [72—75] и CdS [80—82], так и на некоторых органических кристаллах (антрацен, стильбен и др. [18, 95, 96]). Ранее мы уже упоминали (см. введение и п. 8.1) об исследованиях анизотропии в окрестности квадрупольной линии поглощения, а также об исследованиях влияния внешних воздействий на оптические свойства Cu_2O и CdS .

Остановимся более подробно на исследованиях оптической анизотропии в окрестности квадрупольных линий в закиси меди. На длинноволновом крае основного поглощения

кристалла Cu_2O наблюдается сложная структура в виде двух водородоподобных серий линий поглощения, связанных, если говорить на языке теории возмущений, с возбуждением экситонов Ванье — Мотта в решетке Cu_2O (см. [72]). С длинноволновой стороны от «желтой» серии, подчиняющейся при $n \geq 2$ формуле $\nu_n = (17\,460 - 785/n^2) \text{ см}^{-1}$, наблюдается значительно более слабая и узкая по сравнению с остальными членами этой серии линия $\lambda = 6125 \text{ \AA}$, которой условно приписывают номер $n = 1$. При исследовании спектров поглощения Cu_2O на монокристаллических образцах при $T = 77^\circ \text{ K}$ было обнаружено не наблюдавшееся ранее и поэтому необычное для кубических кристаллов явление анизотропного поглощения света как раз в этой линии с $n = 1$. Оказалось, что в спектре света, прошедшего через пластинку Cu_2O , интенсивность этой линии поглощения в двух взаимно перпендикулярных состояниях поляризации является в общем случае неодинаковой и сильно зависит от направления распространения света. Если свет распространяется вдоль одной из осей 4-го порядка либо вдоль какой-либо диагонали куба, поглощение не зависит от поляризации. Если же волновой вектор света направлен вдоль диагонали грани куба, то поглощение света на частоте этой линии обнаруживается только в том случае, когда вектор напряженности электрического поля в световой волне перпендикулярен плоскости грани.

Результаты этих исследований позволяют сделать однозначный вывод о квадрупольном характере поглощения света в Cu_2O при $\lambda = 6125 \text{ \AA}$. Действительно, как было показано в п. 8.1, при учете пространственной дисперсии поглощение света в кубических кристаллах в окрестности дипольных экситонных линий также становится различным в зависимости от поляризации и направления распространения света. При этом, однако, для любых направлений распространения света поглощение отлично от нуля независимо от направления электрического вектора, т. е. от поляризации света. Отсюда следует, что поглощение света при $\lambda = 6125 \text{ \AA}$ не является дипольным (т. е. не связано с возбуждением экситонных состояний, соответствующих при $k = 0$ представлению F'_1 группы O_h ; см. табл. IV) и для анализа его природы необходимо рассмотреть квадрупольные экситонные состояния.

Сравнение обсуждаемых результатов экспериментальных исследований с результатами изучения анизотропии поглощения и дисперсии света в окрестности квадрупольных экситонных линий в кубических кристаллах, относящихся к классу O_h (см. § 8), позволяет не только сделать вывод о том, что поглощение в кристаллах Cu_2O при $\lambda = 6125 \text{ \AA}$ является квадрупольным, но и указать, что речь идет о возбуждении экситонов, волновые функции которых при $k = 0$ преобразуются по неприводимому представлению F_2 группы O_h (см. табл. IV). Отметим также, что этот вывод, который, как и результаты § 8, не связан с использованием какой-либо конкретной модели экситонов, полностью подтверждается исследованиями углового распределения поглощения, которое, как оказалось [12], описывается формулами (8.46). Принадлежность линии $\lambda = 6125 \text{ \AA}$ к квадрупольному переходу $A_1 \rightarrow F_2$ подтверждается также опытами по исследованию расщепления линии $\lambda = 6125 \text{ \AA}$ под влиянием деформации кристаллов [73] и магнитного поля [75].

Перейдем теперь к обсуждению экспериментов, выполненных с целью обнаружить новые волны в негиротропных кристаллах.

В работе [18] был предложен способ экспериментального доказательства существования новых (дополнительных) световых волн в негиротропном кристалле. Метод сводится к измерению интенсивности монохроматического света, прошедшего сквозь плоскопараллельную пластинку кристалла, в зависимости от толщины пластинки. Признаком существования в кристалле двух волн явилось бы наблюдение их интерференции по выходе из кристалла. Такая интерференция должна привести к осцилляции интенсивности в зависимости от толщины. При этом предполагается, что осцилляции, связанные с отражением и трехкратным прохождением одной из волн, или несущественны, или могут быть соответствующим образом учтены.

Экспериментальные данные, полученные в [18], показывают, что интенсивность поглощения света в пластинках антрацена в области полосы собственного поглощения с максимумом при $\omega_L = 25\,200 \text{ см}^{-1}$ при $T = 20^\circ \text{ K}$ действительно осциллирует с изменением толщины. При этом для

$\ln \frac{I}{I_0}$ (I —интенсивность прошедшего, а I_0 —падающего света)

в области толщин 0,05—0,3 мк получается осциллирующая зависимость с расстоянием (разностью толщин пластинок) между абсциссами максимумов $\Delta d \simeq 0,06$ мк. Наиболее отчетливо осцилляции наблюдались при частоте, равной $\omega = 25\ 108$ см⁻¹. Авторы работы [18] предполагают, что факт осцилляций свидетельствует о наличии двух одинаково поляризованных волн с разностью коэффициентов преломления, равной 6,9.

Следует, однако, отметить, что такая интерпретация осцилляций противоречит приведенным в § 7 результатам расчета кривых поглощения и дисперсии. Действительно, согласно данным работы [95], а также [97], в антрацене рассматриваемому переходу соответствует значение $A \simeq 0,1$ (см. (6.13));

такое значение A при $\xi = \frac{\omega - \omega_1}{\omega_j} = -4 \cdot 10^{-3}$ дает $n^2 = -\frac{A}{\xi} = 25$, что находится в соответствии с [60, 95]. При

$\delta = 10^{-3}$ и $\xi = -4 \cdot 10^{-3}$ расчет (рис. 7—14) для новой волны дает $n_2 \simeq 35$, $x_2 \simeq 9$. Следовательно, новая волна даже при $d \simeq 0,1$ мк не может практически «добраться» до другой поверхности пленки, ибо при $\lambda_0 = 0,4$ мк множитель $\exp(-2\pi x d / \lambda_0) \simeq 10^{-6} \ll 1$. Приведенные оценки соответствуют значению $|\beta'| = 10^{-5}$. В действительности же величина $|\beta'|$ может быть значительно меньше этого значения, так что роль поглощения еще более возрастает*).

Происхождение обнаруженных в [18] осцилляций неясно. Возможно, что они объясняются интерференцией луча, однократно прошедшего через пластинку, с лучом, прошедшим ее три раза. Однако в этом случае (если, кроме того, пренебречь поглощением), антрацену пришлось бы приписать коэффициент преломления $n = \lambda_0 / 2\Delta d \simeq 3,45$. Это противоречит значению $n \gtrsim 5$, полученному в [60, 95], но это расхо-

*) При анализе экспериментов с тонкими пленками подход с использованием тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ вообще может оказаться непригодным, если только глубина приповерхностного слоя, свойства которого обусловлены наличием границы, сравнима с толщиной пленки. По-видимому, существенно также, чтобы длина волны в среде была меньше толщины пленки. В этой связи см. также работы [20, 113, 114].

ждение еще не показательно, поскольку соотношение $n = \lambda_0 / 2\Delta d$ при наличии сильного поглощения не точно.

Аналогичные эксперименты были проведены в [22] на кристалле Cu_2O . Отличие этих экспериментов от проведенных в [18] состоит в том, что в записи меди осцилляций наблюдались в области экситонного поглощения для квадрупольной линии $\lambda = 6125$ Å. Эту линию относят, как мы уже ранее указывали, к «желтой» экситонной серии Cu_2O , приписывая ей значение главного квантового числа $n = 1$. Измерения [22] велись при $T = 93^\circ \text{K}$, причем расстояние между абсциссами максимумов осцилляций оказалось равным примерно 0,2 мк, что на три порядка больше периода осцилляций, который имел бы место, если бы осуществлялась интерференция многократно отраженных волн ($\Delta d = \lambda_0 / 2n \simeq 10^{-4}$ мк). Если же допустить, что наблюдаемые в этом случае осцилляции вызваны проявлением новой волны, следует считать, что расстояние между максимумами $\Delta d = \lambda_0 / 2(n_1 - n_2)^*$, где n_1 и n_2 — коэффициенты преломления обычной и новой волн. Поэтому при $\Delta d \simeq 2 \cdot 10^{-2}$ см и $\lambda_0 \simeq 6 \cdot 10^{-5}$ см, получаем, что $n_1 - n_2 \simeq 10^{-3}$.

В соответствии с (8.53) при $\xi \approx 0$ (окрестность резонанса) имеем $\tilde{n}_2^2 \simeq 0$, $\tilde{n}_1^2 = \epsilon_0 - \nu/\mu$. Поэтому, если величина ϵ_0 примерно равна отношению ν/μ , разность $|\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2|$ может быть очень малой. Поскольку, однако, величина ϵ_0 и отношение ν/μ для различных квадрупольных линий, а также в различных кристаллах могут, вообще говоря, независимо принимать различные значения, столь малые значения разности $|\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2|$ являются крайне маловероятными. С другой стороны, столь малая разность коэффициентов преломления может наблюдаться в окрестности квадрупольных линий для

*) Речь, очевидно, идет о сложении двух колебаний

$$A \cos(\omega t - \omega n_1 d/c) \text{ и } B \cos(\omega t - \omega n_2 d/c).$$

Средний по времени квадрат амплитуды результирующего колебания равен

$$I = (A^2 + B^2)/2 + AB \cos 2\pi(n_1 - n_2)d/\lambda_0.$$

При изменении толщины пластины d на величину Δd значение I изменяется так, что для соседних минимумов или максимумов $\Delta d = \lambda_0 / 2(n_1 - n_2)$. При учете поглощения этот результат изменится мало, если только поглощение достаточно слабо.

волн взаимно ортогональной поляризации, если квадрупольное поглощение осуществляется только для волн одной из поляризаций (в окрестности дипольных линий эта разность порядка единицы)*). Поэтому при недостаточно тщательной юстировке кристалла могут возникнуть указанные ранее осцилляции интенсивности, природа которых не имеет ничего общего с появлением новых волн. Можно указать и на другие возможные в принципе причины осцилляций аналогичного типа. В этой связи до тех пор, пока в экспериментальном плане вопрос об осцилляциях не будет внимательно проанализирован, делать сколько-нибудь окончательные выводы по поводу упомянутых наблюдений в Cu_2O представляется преждевременным.

До сих пор шла речь об исследовании эффектов пространственной дисперсии в кристаллах по прохождению через них света. Как уже указывалось ранее, в таких экспериментах существенное значение играет сильное поглощение новых волн. В этой связи представляют интерес эксперименты по отражению света от поверхности кристалла CdS при $1,6 - 4,2^\circ \text{K}$, проведенные в работе [22a]. В этой работе наиболее полно представлены результаты исследования частотной зависимости коэффициента отражения света в окрестности экситонной линии $\hbar\omega_L(0) \approx 2,5528 \text{ эВ}$ («А»-экситонной линии в обозначениях работы [99]). Поскольку рассматриваемые «А»-экситоны возбуждаются светом в дипольном приближении, тензор диэлектрической проницаемости в соответствующей им области частот может быть представлен в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{011}(\omega) = \epsilon_{022}(\omega) &= \epsilon_{00}^\perp + \frac{2A\omega_L^2(0)}{\omega_L^2(0) - \omega^2}, \\ \epsilon_{033}(\omega) &= \epsilon_{00}^\parallel, \quad \epsilon_{0ij}(\omega) = 0, \quad i \neq j, \end{aligned} \right\} \quad (11.5)$$

где смысл величины A ясен из (6.13), а величины ϵ_{00}^\perp и ϵ_{00}^\parallel определяются вкладом остальных резонансов и в рассматриваемой области частот могут считаться постоянными. При

*) В окрестности экситонного перехода F_2 при распространении света вдоль диагонали грани куба квадрупольное поглощение испытывает лишь волна, электрический вектор которой перпендикулярен плоскости грани (см. табл. V).

этом в (11.5) использовано то обстоятельство, что механический «А»-экситон поляризован в плоскости, перпендикулярной оптической оси (оси C , принятой за ось z) и дважды вырожден. В том случае, когда волновой вектор экситона \mathbf{k} направлен под некоторым углом θ к оптической оси, учет кулоновского дальнего действия снимает вырождение, так что вместо дважды вырожденного механического экситона появляется поперечный экситон (волна поляризации, см. п. 2.2), частота которого при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ остается равной $\omega_\perp = \omega_L(0)$, и продольный экситон (фиктивная продольная волна, см. там же), предельная частота которого зависит от угла θ . Эта частота определяется из уравнения (2.38) с использованием (11.5) и, следовательно, равна

$$\omega'_\parallel(0) = \omega_\perp \sqrt{1 + \frac{2A \sin^2 \theta}{(\epsilon_{00}^\perp + \Delta\epsilon_{00} \cos^2 \theta)}}, \quad (11.6)$$

где $\Delta\epsilon_{00} = \epsilon_{00}^\parallel - \epsilon_{00}^\perp$.

Легко, кроме того, убедиться в том, что частота $\omega = \omega_\perp(0) \equiv \omega_L(0)$ определяет положение линии поглощения света, электрический вектор которого перпендикулярен оптической оси и направлению \mathbf{k} , тогда как частота $\omega = \omega'_\parallel(0)$ определяет положение линии поглощения света, электрический вектор которого лежит в той же плоскости, в которой расположены оптическая ось и вектор \mathbf{k} . Особой является ситуация, когда вектор \mathbf{k} перпендикулярен оптической оси. При этом кулоновский экситон с частотой $\omega'_\parallel(0)$ становится продольным, остается таковым при учете запаздывания и в поглощении не проявляется. В этом случае коэффициент преломления света, поляризованного перпендикулярно оптической оси, при отсутствии поглощения и пространственной дисперсии определяется соотношением

$$n^2(\omega) = \epsilon_{00}^\perp + \frac{2A\omega_L^2(0)}{\omega_\perp^2(0) - \omega^2}. \quad (11.7)$$

Такое же значение имеет коэффициент преломления света, распространяющегося вдоль оптической оси. В области частот $\omega_\perp(0) < \omega < \omega_\parallel(0)$ значение $n^2(\omega) < 0$. Следовательно, этой области должен соответствовать коэффициент отражения $R=1$. Однако, как экспериментально установлено в [22a], в указанной

области частот максимальное значение R при $T = 4,2^\circ \text{K}$ не превышает величины 0,5 и, кроме того, зависимость $R(\omega)$ для случаев, когда $\mathbf{k} \perp \mathbf{c}$ и $\mathbf{k} \parallel \mathbf{c}$, оказывается несколько различной (см. рис. 18, взятый из [22a]). При этом отличие

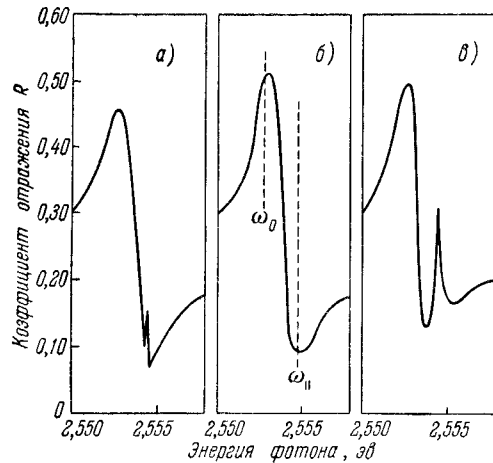


Рис. 18. Зависимость коэффициента отражения света для кристалла CdS в окрестности «А»-экситонной линии поглощения [22a]; а) волновой вектор перпендикулярен оптической оси (эксперимент); б) результаты расчетов при $\delta = 2 \cdot 10^{-4}$, $A = 0,0047$, $\epsilon_{00}^{\perp} = 8,1$; в) волновой вектор параллелен оптической оси (эксперимент).

связано с различной интенсивностью дополнительного пика отражения в окрестности частоты $\omega = \omega_{\parallel}(0)$.

При отказе от учета поглощения и пространственной дисперсии, когда величина $n^2(\omega)$ определяется одним и тем же выражением (11.7), зависимость $R(\omega)$ должна быть одинаковой для случаев $\mathbf{k} \perp \mathbf{c}$ и $\mathbf{k} \parallel \mathbf{c}$.

Если учесть поглощение и вместо (11.5) использовать выражение

$$\epsilon_{011}(\omega) = \epsilon_{022}(\omega) = \epsilon_{00}^{\perp} + \frac{2A\omega_L^2(0)}{\omega_L^2(0) - \omega^2 - i\nu_0}, \quad (11.8)$$

то значение коэффициента отражения в рассматриваемой

области частот падает (см. рис. 18, б), причем наилучшее согласие расчетов с экспериментом, как это установлено в [22a], достигается при выборе значений $\hbar\nu = 10^{-3} \text{эВ}$, $A = 0,0047$. В этой связи авторы работы [22a] замечают, что полуширина линии с энергией $\hbar\omega_L(0) = 2,5528 \text{эВ}$ при

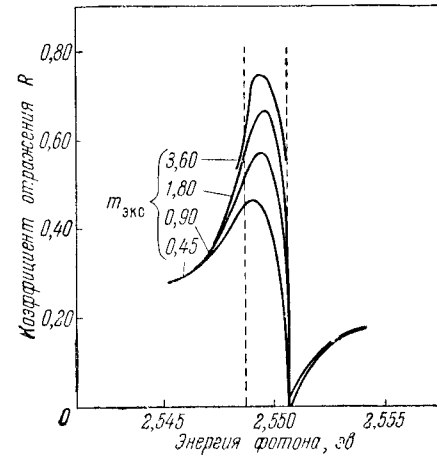


Рис. 19. Коэффициент отражения света в зависимости от эффективной массы экситона $m_{\text{экс}}$ в окрестности экситонной линии поглощения при учете пространственной дисперсии и пренебрежении поглощением [22a].

Расчеты с $A = 0,0625$ и $\epsilon_{00}^{\perp} = 8$.

$T \approx 4^\circ \text{K}$ не больше 10^{-4}эВ , и поэтому уменьшение отражения обусловлено проявлением пространственной дисперсии. Расчеты коэффициента отражения $R(\omega)$ в этой связи проводились для $\nu = 0$ с использованием выражения

$$\epsilon_{011}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{022}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{00}^{\perp} + \frac{2A\omega_L^2(0)}{\omega_L^2(0) - \omega^2 + \hbar k^2 \omega(0)/m_{\text{экс}}}, \quad (11.9)$$

где $m_{\text{экс}}$ — эффективная масса экситона (см. п. 7.2). Результаты расчетов приведены на рис. 19 и 20. При этом для

объяснения дополнительного пика отражения оказалось существенным предположение о наличии некоторого приповерхностного слоя толщины l , где экситонная поляризация полагалась равной нулю (см. п. 10.6), а для величины A использовалось значение $A = 0,0625$. Расчеты $R(\omega)$ проводились для

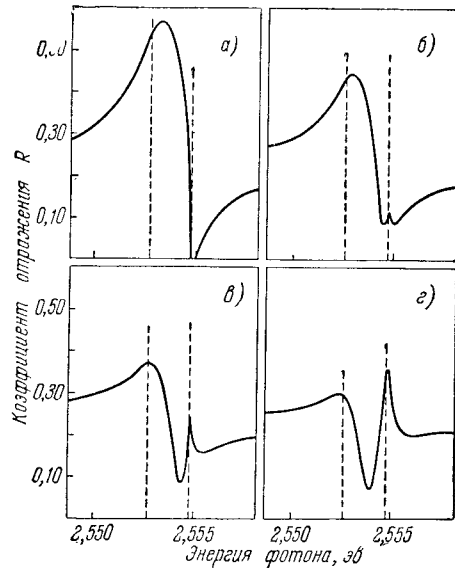


Рис. 20. Коэффициент отражения света в зависимости от толщины l приповерхностного слоя в окрестности экситонной линии поглощения при учете пространственной дисперсии и пренебрежении поглощением [22а]. Расчеты с $A = 0,0625$, $m_{\text{экс}} = 0,9 m$, $\epsilon_{00}^{\perp} = 8$. а) $l = 0$, б) $l = 77 \text{ \AA}$, в) $l = 116 \text{ \AA}$, г) $l = 154 \text{ \AA}$.

разных l по формуле (10.45), а равная статической поляризуемости величина $\epsilon_{00}^{\perp} = n_0^2$ в (11.9) выбиралась равной 8. Что же касается величины Γ_r , фигурирующей в формулах (10.33) (см. для сравнения (10.46)), то эта величина фактически принималась равной нулю. В этих предположе-

ниях достигается согласие расчета с экспериментом (см. рис. 18).

Если бы ширина экситонной линии была действительно столь мала, как это предполагают авторы работы [22а], их эксперименты по отражению, вероятно, можно было бы рассматривать как подтверждение существенной роли пространственной дисперсии и как метод для определения эффективной массы экситона. Однако, как это следует из экспериментальных данных, полученных в работе [100], где впервые были проведены количественные измерения интенсивности, формы и температурной зависимости экситонного поглощения в CdS при 4°K, полуширина «А»-экситонной линии составляет величину, равную $2,5 \cdot 10^{-3} \text{ эв}$, т. е. в 25 раз больше, чем это принято в [22а]. Это обстоятельство заставляет отнестись с осторожностью к выводу работы [22а], касающемуся роли пространственной дисперсии, тем более, что в расчетах, отраженных на рис. 19 и 20, величина A , пропорциональная силе осциллятора перехода (см. (6.13)), выбиралась не из независимых данных (например, по ходу $n^2(\omega)$ вне полосы поглощения), а подбиралась, как и значение эффективной массы экситона и толщины приповерхностного слоя. Далее, использованное в [22а] значение $A = 0,0625$ находится в противоречии с зависимостью $n(\omega)$ вне полосы поглощения, измеренной в работе [100], которой скорее соответствует значение $A = 0,0047$, использованное в расчетах, отраженных на рис. 18, б.

Кроме того, согласно [97], в CdS должно иметь место неучтенное в [22а] расщепление экситонных термов, обусловленное наличием двух одинаковых ионов в элементарной ячейке. Если замеченное в работе [97] расщепление достаточно мало, интерпретация экспериментальных данных, полученных в работе [22а], может претерпеть существенные изменения.

В заключение отметим, что в ряде работ (см. [96, 100]) были предприняты попытки экспериментальной проверки дисперсионных соотношений (2.70) для частот света ω , лежащих в окрестности экситонных линий поглощения. Для некоторых кристаллов при низких температурах было обнаружено нарушение соотношений (2.70), причем с повышением температуры эти нарушения постепенно исчезали. Совершенно очевидно, что эти исследования требуют дальнейшего развития,

поскольку их результаты представляются весьма странными. Поясним сказанное на примере кристалла CdS, для которого в работе [100] для той же «А»-экситонной полосы (см. [22а]) были обнаружены нарушения дисперсионных соотношений. Кристалл CdS является одноосным, поэтому, если пространственная дисперсия не учитывается, функции $\tilde{n}_i^2(\omega, \mathbf{s})$ для каждой из нормальных волн не имеют особенностей при $\omega = \omega' + i\omega''$, $\omega'' > 0$ (отсутствуют существенные кратные корни $\tilde{n}_i^2(\omega, \mathbf{s})$, см. п. 2.5) и для каждой из этих функций дисперсионные соотношения (2.70) должны выполняться. Поэтому обнаруженное в работе [100] их нарушение естественно попытаться связать с проявлением пространственной дисперсии, наличие которой, как это отмечалось уже в п. 2.5, иногда может привести к особенностям у $\tilde{n}_i^2(\omega, \mathbf{s})$ в верхней полуплоскости комплексных ω и, следовательно, к нарушению соотношений (2.70) для рассматриваемой нормальной волны. В конкретных условиях эксперимента [100], когда обычная и новая волны не разделяются, нарушение дисперсионных соотношений можно было бы связать с возбуждением новой волны и измерением не $n_i(\omega)$ и $\kappa_i(\omega)$ для одной нормальной волны, а нахождением некоторых эффективных величин. Если, однако, для указанной выше экситонной линии принять $A = 0,0047$, $\epsilon_{00} = 8$, $\delta = 10^{-3}$, а значение $|\beta'| = 4 \cdot 10^{-4}$ (это значение, в соответствии с результатами п. 7.2, отвечает эффективной массе экситона, равной по абсолютному значению массе электрона), то для нормальной волны роль пространственной дисперсии оказывается весьма малой. Для того чтобы в этом убедиться, достаточно для $\tilde{n}_{1,2}$ воспользоваться формулами (7.8), которые в данном случае справедливы даже в области полосы поглощения, поскольку, например, при $\xi = 0$

$$\epsilon_0 = \epsilon_{00} - \frac{A}{\xi + i\delta} \simeq 8 + 5i \quad \text{и} \quad |\epsilon_0^2 \beta'| \simeq 4 \cdot 10^{-2} \ll 1.$$

Следовательно, в соответствии с (7.8), для нормальной волны значение $\tilde{n}_1^2 \simeq \epsilon_0(\omega)$, т. е. от наличия пространственной дисперсии практически не зависит. В то же время для новой волны $\tilde{n}_2^2 = -\frac{1}{\epsilon_0(\omega)\beta'}$.

При $\xi = 0$ (резонанс) $|\tilde{n}_2| \simeq 15$, а $|\tilde{n}_1| \simeq 10$, и обе волны могут проявиться, если только использованное выше значение $|\beta'| = 4 \cdot 10^{-4}$ не слишком завышено. В этом, однако, уверенности нет, поскольку неизвестно значение эффективной массы экситона, а также значение параметров A и δ . Тем не менее дальнейшие исследования оптических свойств кристалла CdS в области рассматриваемой экситонной линии представляются весьма перспективными.

В этой связи следует отметить, что, как мы уже указывали, между экспериментальными результатами, которые относятся к оптике кристаллов при низких температурах и которые могли бы быть использованы для исследования эффектов пространственной дисперсии, во многих важнейших чертах нет согласованности. Результаты, полученные в разных работах, отличаются друг от друга, причем это особенно относится к таким параметрам, как полуширина, сила осциллятора и т. д. Поэтому дальнейший прогресс в понимании эффектов пространственной дисперсии будет во многом зависеть от совершенствования методов экспериментальных исследований.

ГЛАВА IV

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ
(ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕНЗОРА $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$)§ 12. Общие выражения для $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$

12.1. Квантовомеханический вывод выражения для $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Вычисление тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для кристалла или какой-либо его модели является задачей микротeorии. Для ионных кристаллов такая теория применительно к инфракрасной части спектра была развита уже давно (ее подробное изложение имеется в книге [14]; см. также [24]). При этом был выяснен также ряд важных методических моментов, имеющих отношение к кристаллам любой природы. В частности, на примере ионных кристаллов был рассмотрен вопрос о зависимости частот нормальных колебаний (волн) от направления волнового вектора \mathbf{k} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Было показано, например, что при полном учете кулоновского взаимодействия, но при пренебрежении запаздыванием частоты нормальных колебаний могут быть неаналитическими функциями \mathbf{k} (при $\mathbf{k} \rightarrow 0$). В этой связи нужно, однако, отметить, что в плане общего исследования подобных проблем ряд моментов не нуждается в микроскопическом анализе, поскольку соответствующие выводы непосредственно следуют из уравнений поля и факта существования тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. В качестве примера можно указать на соотношения (2.37) или (2.38), из которых очевидна зависимость частот «фиктивных» продольных волн $\omega_{\parallel}(\mathbf{k})$ от направления \mathbf{k} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ и т. д.

Важным методическим моментом, который также был установлен в теории ионных кристаллов, явилась процедура Эвальда, позволяющая выделить продольную часть макроскопической напряженности электрического поля (см. [24]). Это в свою

очередь дает возможность определить частоты и характер колебаний механических экситонов для ионных кристаллов (о механических экситонах см. п. 2.2), а с их помощью найти тензор диэлектрической проницаемости (см. [24], § 44). Ниже мы покажем, каким образом знание состояния механических экситонов и в более общем квантовом случае позволяет получить тензор диэлектрической проницаемости. Соответствующая процедура хорошо известна и состоит в нахождении плотности тока, индуцированного внешним классическим полем.

Удобно при этом выбрать калибровку потенциалов, в которой скалярный потенциал возмущающего поля равен нулю, и, таким образом, $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$, где \mathbf{A} — векторный потенциал поля, индуцированного в среде внешними источниками*). Обозначим, далее, через Ψ_{n0} волновые функции среды при отсутствии или при неучете поля \mathbf{E} , а через $\Psi_n = \Psi_{n0} + \delta\Psi_n$ — соответствующие функции при наличии поля \mathbf{E} . Оператор взаимодействия зарядов с внешним полем в линейном приближении равен

$$\hat{U} = - \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}}{2m_{\alpha}c} \{ \hat{p}^{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \hat{p}^{\alpha} \}, \quad (12.1)$$

где \mathbf{r}_{α} — радиус-вектор α -й частицы с зарядом e_{α} и массой m_{α} , \sum_{α} означает суммирование по всем частицам кристалла и

$$\hat{p}^{\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}.$$

Полагая

$$\mathbf{A} = -\frac{ic}{2\omega} [E_0 e^{i(kr - \omega t)} - E_0^* e^{-i(kr - \omega t)}],$$

находим, что

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t}, \quad \hat{F}(\mathbf{k}) = \hat{G}^*(\mathbf{k}) = -\frac{ic}{2\omega} \hat{M}(\mathbf{k}) E_0, \\ \hat{M}(\mathbf{k}) &= -\sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}}{2m_{\alpha}c} \{ \hat{p}^{\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\alpha}} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\alpha}} \hat{p}^{\alpha} \}. \end{aligned} \quad (12.1a)$$

*) Для простоты будем считать, что все остальное поле, кроме возмущающего поля \mathbf{E} , описывается скалярным потенциалом. Подобное описание было бы недостаточно, например, в случае, когда между частицами имеется существенное магнитное взаимодействие и нужно вводить векторный потенциал микрополя \mathbf{A}_{μ} .

Поэтому, используя теорию возмущений, в первом приближении получаем (см. [69], § 40)

$$\Psi_n = \Psi_{n0} - \sum_{m \neq n} \left\{ \frac{F_{mn} e^{-i\omega t}}{h(\omega_{mn} - \omega)} + \frac{F_{mn}^* e^{i\omega t}}{h(\omega_{mn} + \omega)} \right\} \Psi_{m0} = \Psi_{n0} + \delta\Psi_n, \quad (12.2)$$

где

$$F_{mn} = \int \Psi_{m0}^* \hat{F} \Psi_{n0} d\tau, \quad h\omega_{mn} = W_m - W_n \equiv \equiv h(\omega_m - \omega_n), \quad d\tau = dr_1 \dots dr_N$$

(W_m — собственное значение энергии, отвечающее функции Ψ_{m0}). Среднее значение оператора плотности тока в состоянии Ψ_n равно

$$j^{(n)}(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi_n | \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \left\{ \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} - \frac{e_{\alpha}}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} - \frac{e_{\alpha}}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right] \right\} | \Psi_n \rangle,$$

где

$$\langle \Psi_n | \hat{Q} | \Psi_n \rangle = \int \Psi_n^* \hat{Q} \Psi_n d\tau$$

(\hat{Q} — произвольный оператор). В линейном приближении выражение для среднего значения плотности индуцированного поля E тока $\delta j^{(n)}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \delta j^{(n)} = & \langle \delta\Psi_n | \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \{ \hat{p}^{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \hat{p}^{\alpha} \} | \Psi_{n0} \rangle + \\ & + \langle \Psi_{n0} | \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \{ \hat{p}^{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \hat{p}^{\alpha} \} | \delta\Psi_n \rangle - \\ & - \langle \Psi_{n0} | \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^2}{m_{\alpha} c} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) | \Psi_{n0} \rangle. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Полученное соотношение определяет величину плотности индуцированного тока в каждой точке пространства и времени (\mathbf{r}, t) и, следовательно, для нахождения тензора диэлектрической проницаемости необходимо перейти к фурье-компонентам величины $\delta j^{(n)}$. Однако, прежде чем совершать этот переход, укажем правила отбора для матричных элементов F_{mn} .

Поскольку волновые функции Ψ_{m0} имеют симметрию неприводимых представлений пространственной группы кристалла,

действие на волновую функцию Ψ_{m0} оператора \hat{T}_a трансляции всех частиц кристалла на целочисленный вектор решетки \mathbf{a} приводит к следующему результату:

$$\hat{T}_a \Psi_{m0} = e^{-iq_m a} \Psi_{m0}, \quad (12.4)$$

где вектор \mathbf{q}_m определяет то неприводимое представление подгруппы трансляции, к которому относится состояние Ψ_{m0} (см., например, [68] и приложение II). Согласно (12.1a)

$$\hat{T}_a \hat{M}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}a} \hat{M}(\mathbf{k}). \quad (12.4a)$$

Таким образом, подынтегральное выражение, стоящее в формуле для матричного элемента $M_{mn}(\mathbf{k}) = \langle \Psi_{m0} | \hat{M}(\mathbf{k}) | \Psi_{n0} \rangle$ при трансляции координат, по которым производится интегрирование, на произвольный целочисленный вектор решетки, остается неизменным только в том случае, если $\mathbf{q}_m = \mathbf{q}_n - \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}$. Ясно, что только при выполнении указанного условия отличен от нуля и матричный элемент $F_{mn}(\mathbf{k})$. Аналогичным образом приходим к выводу, что матричные элементы $M_{nm}(\mathbf{k})$ и $F_{nm}(\mathbf{k})$ отличны от нуля, если $\mathbf{q}_m = \mathbf{q}_n + \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}$, где \mathbf{b} — произвольный целочисленный вектор обратной решетки.

Учитывая сказанное и используя выражение

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})}, \quad \text{где } V \text{ — объем кристалла, на-}$$

ходим, что

$$\delta j_i^{(n)} = j_i^{(n)}(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}, \omega) = \sigma_{ij}^{(n), \mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k}, \omega), \quad (12.5)$$

где тензор

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{(n), \mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}) = & \frac{i\delta_{ij}}{V\omega} \left(\sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^2}{m_{\alpha}} e^{i2\pi\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} \right)_{nn} \delta_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'} + \\ & + \frac{i}{V\hbar\omega} \sum_{\substack{m \neq n \\ \alpha, \beta}} \frac{e_{\alpha} e_{\beta}}{4m_{\alpha} m_{\beta}} \left\{ \frac{(p_i^{\alpha} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} + e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} p_i^{\alpha})_{nm}}{\omega - \omega_m - \omega_n} \times \right. \\ & \times (p_j^{\beta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\beta}} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\beta}} p_j^{\beta})_{mn} - \frac{(p_i^{\alpha} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} + e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} p_i^{\alpha})_{mn}}{\omega + \omega_n - \omega_m} \times \\ & \left. \times (p_j^{\beta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\beta}} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\beta}} p_j^{\beta})_{nm} \right\}, \end{aligned} \quad (12.6)$$

где $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}$; $\delta_{\mathbf{k}} = 0$, если $\mathbf{k} \neq 0$ и $\delta_{\mathbf{k}} = 1$, если $\mathbf{k} = 0$.

Соотношение (12.6) позволяет сделать вывод о том, что с ростом $|\mathbf{b}|$ величины $\sigma_{ij}^{(n),b}$ убывают как фурье-компоненты плавной функции $\Psi_{n0}^* \Psi_{m0}$. Поскольку энергия взаимодействия в кристалле является непрерывной функцией координат, функция Ψ_{n0} имеет, по крайней мере, непрерывную вторую производную. В подобных условиях величины $\sigma_{ij}^{(n),b}$ при больших $|\mathbf{b}|$ убывают быстрее, чем $1/|\mathbf{b}|^3$. Фактически в реальных условиях волновую функцию Ψ_{m0} , вероятно, можно считать имеющей все производные. При этом величины $\sigma_{ij}^{(n),b}$ при больших $|\mathbf{b}|$ экспоненциально убывают с ростом $|\mathbf{b}|$.

Из соотношения (12.5) следует, что в кристалле под влиянием электрического поля с амплитудой $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$ возникает индуцированный электрический ток, у которого отличны от нуля фурье-компоненты, соответствующие значению волнового вектора $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}$, где \mathbf{b} — произвольный вектор обратной решетки. Если $\mathbf{b} = 0$, то

$$j_i^{(n)}(\mathbf{k}, \omega) = \sigma_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k}, \omega), \quad (12.7a)$$

где

$$\sigma_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) = \sigma_{ij}^{(n),b=0}(\omega, \mathbf{k}) \quad (12.7б)$$

— тензор комплексной проводимости. Зная тензор проводимости, можно найти и тензор диэлектрической проницаемости, если воспользоваться соотношением

$$\epsilon_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} + i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}). \quad (12.7в)$$

Поэтому, используя (12.6) и (12.7б, в), окончательно находим, что

$$\epsilon_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) = \left(1 - \frac{4\pi}{\omega^2 V} \sum_a \frac{e_a^2}{m_a} \right) \delta_{ij} - \frac{4\pi c^2}{\hbar \omega^2 V} \sum_{m \neq n} \left\{ \frac{M_{nm}^i(-\mathbf{k}) M_{mn}^j(\mathbf{k})}{\omega - \omega_m + \omega_n} - \frac{M_{mn}^i(-\mathbf{k}) M_{nm}^j(\mathbf{k})}{\omega + \omega_m - \omega_n} \right\}, \quad (12.8)$$

где

$$M_{nm}(\mathbf{k}) = \langle \Psi_{n0} | \mathbf{M}(\mathbf{k}) | \Psi_{m0} \rangle.$$

Полученное выражение для $\epsilon_{ij}^{(n)}$ играет роль тензора ϵ_{ij} в (4.6). Это следует из того, что выше использовались вол-

новые функции Ψ_{n0} , полученные при учете всего коротковолнового поля (см. также п. 4.1).

Если не интересоваться инфракрасной областью спектра, можно не учитывать вклад в тензор диэлектрической проницаемости, обусловленный прямым взаимодействием ионов с полем электромагнитной волны (это означает, что в соотношении (12.6) масса m_a для ионов полагается равной бесконечности). В этом приближении

$$\frac{4\pi}{V} \sum_a \frac{e_a^2}{m_a} = \frac{4\pi e^2 N_0}{m} = \omega_0^2,$$

где N_0 — полная концентрация электронов, а ω_0 — соответствующая электронам «плазменная» частота. Если кристалл находится в состоянии термодинамического равновесия, то для получения тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ выражение (12.8) должно быть усреднено с помощью распределения Гиббса.

Таким образом, в состоянии термодинамического равновесия плотность тока $\mathbf{j} = \frac{\partial(D-E)}{4\pi \partial t}$, фигурирующая в уравнениях поля (1.1), представляет собой величину

$$\mathbf{j} = \sum_n e^{-\frac{F-W_n}{kT}} \mathbf{j}^{(n)},$$

где свободная энергия $F = -kT \ln \sum e^{-\frac{W_n}{kT}}$. Более общее выражение, отвечающее усреднению с помощью статисти-

ческой матрицы, имеет вид $\mathbf{j} = \text{Sp} \left\{ e^{-\frac{F-\hat{H}}{kT}} \hat{\mathbf{j}} \right\}$, где \hat{H} — полный гамильтониан системы, включая поле, и $\hat{\mathbf{j}}$ — оператор плотности тока (см. выше). Поля \mathbf{E} и \mathbf{B} в уравнениях поля (1.1) также представляют собой соответствующие операторы $\hat{\mathbf{E}}$ и $\hat{\mathbf{B}}$, усредненные с помощью статистической матрицы.

При температурах $T = 0$ тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) \approx \epsilon_{ij}^0(\omega, \mathbf{k})$ принимает следующий вид (здесь индекс $n = 0$ отвечает основному состоянию кристалла):

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \left(1 - \frac{4\pi e^2 N_0}{m \omega^2} \right) \delta_{ij} - \frac{4\pi c^2}{\hbar \omega^2 V} \sum_{m \neq 0} \left\{ \frac{M_{0m}^i(-\mathbf{k}) M_{m0}^j(\mathbf{k})}{\omega - \omega_m} - \frac{M_{m0}^i(-\mathbf{k}) M_{0m}^j(\mathbf{k})}{\omega + \omega_m} \right\}. \quad (12.9)$$

Прежде чем переходить к рассмотрению свойств тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, обусловленных наличием экситонных состояний, уместно отметить, что процедура, аналогичная вышеизложенной, может быть использована для определения тензора $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$ (см. п. 2.4, формула (2.63)), который для нормальных волн позволяет выразить вектор поляризации $\mathbf{P} = \frac{1}{4\pi}(\mathbf{D} - \mathbf{E})$ лишь через поперечную часть напряженности электрического поля. Для этого следует в качестве «невозмущенных» состояний выбрать состояния, соответствующие кулоновским экситонам, т. е. полному учету кулоновского взаимодействия при отсутствии учета запаздывания (вихревого поля). Тогда в качестве возмущения фигурирует лишь поперечная часть напряженности электрического поля и, следовательно, для $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$ получаем

$$\epsilon_{\perp, ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} + 4\pi\chi_{\perp, ij}^{(n)}, \quad (12.8a)$$

где тензор

$$\chi_{\perp, ij}^{(n)} \equiv b_{ij}^{(n)}\eta_{ij}, \quad (12.8б)$$

причем

$$b_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\omega^2 V} \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^2}{m_{\alpha}} \delta_{ij} - \\ - \frac{c^2}{\hbar\omega^2 V} \sum_{m \neq n} \left[\frac{M_{nm}^i(-\mathbf{k}) M_{mn}^j(\mathbf{k})}{\omega - \Omega_m + \Omega_n} - \frac{M_{mn}^i(-\mathbf{k}) M_{nm}^j(\mathbf{k})}{\omega + \Omega_m - \Omega_n} \right]. \quad (12.8в)$$

В этом выражении Ω_m — частоты кулоновских экситонов, а матричные элементы $M_{mn}^i(\pm \mathbf{k})$ построены на волновых функциях этих экситонов.

В п. 2.4 было показано, каким образом можно определить тензор $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$, если известен тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (см. (2.58) и (2.59)). Эта процедура вполне однозначна. В этой связи представляет интерес также и выяснение возможности восстановления тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, если известен тензор $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$. В работе [117] тензор ϵ_{ij} восстанавливается следующим образом. Поскольку для нормальных волн, где $D_i s_i = 0$,

$$\eta_{ii} E_i = E_i - E_{\parallel, i} = E_i + 4\pi s_i(\mathbf{P} \mathbf{s}),$$

то с помощью (12.8а), получаем соотношение

$$D_i \equiv E_i + 4\pi P_i = E_i + 4\pi b_{ii}^{(n)} [E_i + 4\pi s_i(\mathbf{P} \mathbf{s})],$$

откуда

$$4\pi P_i = 4\pi \tilde{d}_{ii}^{-1} b_{ij}^{(n)} E_j, \quad d_{ij} = \delta_{ij} - 4\pi \tilde{d}_{im}^{(n)} s_m s_j.$$

Постулируя, что это соотношение справедливо и при $D_i s_i \neq 0$, находим, что

$$\epsilon_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} + 4\pi \tilde{d}_{ii}^{-1} b_{ij}^{(n)}. \quad (12.8г)$$

Однако эта процедура требует обоснования, поскольку, как мы покажем ниже, имеется много тензоров вида (12.8в), которым соответствует один и тот же тензор $\epsilon_{\perp, ij}^{(n)}$. Действительно, поскольку произведение тензора $s_i s_j$ на тензор η_{ij} равно нулю, т. е.

$$s_i s_l \eta_{lj} = s_i s_l (\delta_{lj} - s_l s_j) = s_i s_j - s_i s_j = 0,$$

тензор (12.8а) не изменится, если $b_{ij}^{(n)}$ заменить тензором $b_{ij}^{(n)} + \alpha_{il} s_l s_j$, где α_{il} — произвольный тензор. В то же время тензор типа (12.8г) принимает теперь следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{ij}^{(n)} &= \delta_{ij} + 4\pi \tilde{d}_{ii}^{-1} (b_{ij}^{(n)} + \alpha_{im} s_m s_j), \\ \tilde{d}_{ij} &= \delta_{ij} - 4\pi \tilde{d}_{im}^{(n)} s_m s_j - 4\pi \alpha_{im} s_m s_j \end{aligned} \right\} \quad (12.8д)$$

и уже не равен тензору (12.8г), несмотря на то, что оба они генетически соответствуют тензору (12.8а). Для того чтобы подтвердить справедливость сказанного, достаточно, например, положить $b_{ij}^{(n)} = 0$ и убедиться в том, что тензор $\epsilon_{ij}^{(n)} = \delta_{ij}$, определенный соотношением (12.8д), не равен тождественно нулю. Итак, всем тензорам вида (12.8г), (12.8д) соответствует один и тот же тензор (12.8а), и, следовательно, вопрос о том, какой из тензоров (12.8г), (12.8д) является «истинным» не может быть решен в рамках подхода, использованного в [117]*).

*) Для изотропной среды, а также для изолированного невырожденного перехода, в предположении об отсутствии поглощения, нам удалось показать (использовались результаты работы [51], основанной на применении функций Грина), что выражение (12.8г) с точностью до членов порядка k^2 является правильным. Однако в более общем случае вопрос о связи выражения (12.8г) с истинным тензором $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ остается открытым.

При выводе выражения для тензора $\varepsilon_{ij}^{(n)}(\omega, \mathbf{k})$ была использована методика теории возмущений. Однако эта методика в некоторых случаях нуждается в обобщении (при ее использовании остается, например, неучтенным эффект длинноволнового края поглощения, см. п. 14.2). Кроме того, для ряда систем в настоящее время развиты методы нахождения волновых функций и энергий не механических экситонов, которые использованы при выводе (12.8а), а функций и энергий кулоновских экситонов. Поэтому метод расчета, который позволяет находить тензор диэлектрической проницаемости на основе знания именно кулоновских экситонов, несомненно представляет интерес.

Как показано в [51], в качестве основы такого метода могут быть использованы результаты теории функций Грина [9,98]. Мы не имеем здесь возможности и намерения развивать и подробно излагать этот метод расчета. Однако целесообразно по крайней мере вкратце остановиться на этом вопросе*).

Основной величиной, которую нужно найти, является запаздывающая функция Грина $D_{ij}^E(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$, фурье-компоненты которой, определяемые соотношением

$$D_{ij}^E(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{V}{(2\pi)^4} \int D_{ij}^E(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-i\omega(t-t')} d\omega d\mathbf{k},$$

удовлетворяют уравнению

$$\left[\varepsilon_{il}(\omega, \mathbf{k}) - \frac{c^2 k^2}{\omega^2} \delta_{il} + \frac{c^2 k_i k_l}{\omega^2} \right] D_{ij}^E(\mathbf{k}, \omega) = 4\pi \delta_{ij}.$$

Отсюда ясно, что тензор диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{c^2 k^2}{\omega^2} \eta_{ij} + 4\pi [D^E(\mathbf{k}, \omega)]_{ij}^{-1}.$$

Таким образом, вычисление $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ сводится к вычислению величин $D_{ij}^E(\mathbf{k}, \omega)$. Функция $D_{ij}^E(\mathbf{r}, t)$, как показано в [98], определяется следующим образом:

$$D_{ij}^E(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i \langle [\hat{E}_i(\mathbf{r}, t) \hat{E}_j(\mathbf{r}', t')] \rangle \theta(t-t') + 4\pi \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \delta(t-t'),$$

*) Отметим, что теория функций Грина при вычислении тензора диэлектрической проницаемости использовалась также в работе [129].

где $\hat{E}(\mathbf{r}, t)$ — оператор напряженности электрического поля в точке \mathbf{r} в момент времени t , $\theta(t) = 0$ при $t < 0$ и $\theta(t) = 1$ при $t > 0$. Знак $\langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle$ означает статистическое усреднение коммутатора двух операторов:

$$[\hat{A}\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad \langle [AB] \rangle \equiv \text{Sp} \left\{ e^{\frac{F-\hat{H}}{kT}} [\hat{A}\hat{B}] \right\},$$

где \hat{H} — полный гамильтониан системы, включающий, в частности, наряду с кулоновским также запаздывающее взаимодействие между зарядами, F — свободная энергия системы, а T — ее температура.

В качестве полной системы волновых функций, которая необходима для нахождения суммы диагональных элементов некоторого оператора \hat{C} , т. е. его шпура $\text{Sp} \hat{C}$, могут быть использованы функции вида $\Psi_{n0}\chi$, где Ψ_{n0} — собственная функция кристалла $H_{\text{кр}}\Psi_{n0} = W_{n0}\Psi_{n0}$, а χ — волновая функция поля фотонов. Если используется кулоновская калибровка потенциала, то полный гамильтониан системы $\hat{H} = \hat{H}_{\text{кр}} + \hat{H}_{\perp} + \hat{H}_{\text{вз}}$, где в $\hat{H}_{\text{кр}}$ полностью учтено мгновенное кулоновское взаимодействие между зарядами, \hat{H}_{\perp} — гамильтониан, отвечающий свободному полю поперечных фотонов, а $\hat{H}_{\text{вз}}$ описывает взаимодействие зарядов с полем поперечных фотонов. В этом случае функции Ψ_{n0} и собственные значения W_{n0} в экситонной области спектра соответствуют кулоновским экситонам, тогда как функции χ это собственные функции оператора \hat{H}_{\perp} . Очевидно, при работе с функциями

типа $\Psi_{n0}\chi$ шпур $\text{Sp} \left\{ e^{\frac{F-\hat{H}}{kT}} [\hat{E}_i(\mathbf{r}, t), \hat{E}_j(\mathbf{r}', t')] \right\}$ даже при $T = 0$ содержит бесконечное число членов, поскольку собственные функции оператора \hat{H} не совпадают с $\Psi_{n0}\chi$. Поэтому значительно удобнее при нахождении $D_{ij}^E(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ использовать собственные функции кристалла при учете запаздывания, т. е. собственные функции оператора \hat{H} . Именно в этом случае метод, использованный в [51], оказывается достаточно эффективным. К этому вопросу мы еще вернемся в п. 14.2 в связи с учетом затухания.

12.2. Вклад экситонных состояний в тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.
В основном состоянии диэлектрика квазиимпульс равен нулю,

поскольку волновая функция этого состояния инвариантна относительно всех операций симметрии кристалла и в том числе операций из подгруппы трансляций. Что же касается экситонных состояний, то эти состояния, как известно, характеризуются единственным непрерывным квантовым числом — квазиимпульсом q , а также, вообще говоря, набором дискретных квантовых чисел s . Поэтому для экситонных состояний

$$\Psi_{m0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \equiv \Psi_{qs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots),$$

причем (см. также формулу (12.4))

$$\hat{T}_a \Psi_{qs} = e^{-iqa} \Psi_{qs}.$$

Как уже указывалось в п. 12.1, свойство оператора $\hat{M}(\mathbf{k})$, выраженное соотношением (12.4а), позволяет сделать вывод о том, что матричный элемент $M_{m\nu}(\mathbf{k}) \neq 0$, если только $q_m = q_n - \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}$ и аналогично $M_{nm}(\mathbf{k}) \neq 0$, если только $q_n = q_m - \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}$, где \mathbf{b} — целочисленный вектор обратной решетки. Поэтому, поскольку основному состоянию кристалла $n=0$ соответствует $q_n=0$, ясно, что если вектор q_n выбирать внутри основной ячейки обратной решетки, то для малых $|\mathbf{k}|$

$$M_{m0}^i(\mathbf{k}) \equiv M_{qs;0}^i(\mathbf{k}) = M_{-\mathbf{k}s;0}^i(\mathbf{k}) \delta_{q+\mathbf{k}}, \quad (12.10)$$

$$M_{0m}^i(\mathbf{k}) \equiv M_{0;qs}^i(\mathbf{k}) = M_{0;\mathbf{k}s}^i(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}-q}. \quad (12.11)$$

В идеальном кристалле-диэлектрике состояния m , по которым в формуле (12.9) производится суммирование, вообще говоря, могут соответствовать возбуждению не одного, а нескольких механических экситонов (среди которых могут быть фононы и т. п.). В этом случае состояние m характеризуется несколькими непрерывными квантовыми числами — квазиимпульсами различных экситонов, причем соотношения (12.10) и (12.11) сохраняются и в этом случае, однако под q следует понимать полный квазиимпульс в состоянии m .

Наличие экситон-фононной связи или каких-либо иных взаимодействий, приводящих к изменению состояний механических экситонов, энергия которых расположена в интересующей нас области спектра, приводит (см. более подробно § 14) к тому, что даже для кристалла в основном состоянии тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (формула (12.9)) становится ком-

плексным уже при вещественных ω и \mathbf{k} . Поскольку вопросы, связанные с затуханием электромагнитных волн, более подробно рассмотрены в § 14, здесь будем считать поглощение отсутствующим, а под состояниями m , по которым в (12.9) производится суммирование, понимать состояния кристалла, в котором возбужден только один механический экситон $m \equiv (\mathbf{k}, s)$. Тогда, используя (12.9) и (12.11), находим, что

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} \left(1 - \frac{4\pi e^2 N_0}{m \omega_j^2} \right) - \frac{4\pi c^2}{V \hbar \omega^2} \sum_s \left\{ \frac{M_{0;-\mathbf{k}s}^i(-\mathbf{k}) M_{-\mathbf{k}s;0}^j(\mathbf{k})}{\omega - \omega_s(-\mathbf{k})} - \frac{M_{\mathbf{k}s;0}^i(-\mathbf{k}) M_{0;\mathbf{k}s}^j(\mathbf{k})}{\omega + \omega_s(\mathbf{k})} \right\}. \quad (12.12)$$

В окрестности изолированной s -й линии поглощения изменение тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в зависимости от частоты ω в основном определяется одним из резонансных слагаемых в дисперсионной формуле (12.12). В этом случае приближенно

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^{(0)}(\omega) - \frac{4\pi c^2}{V \hbar \omega^2} \left\{ \frac{M_{0;-\mathbf{k}s}^i(-\mathbf{k}) M_{-\mathbf{k}s;0}^j(\mathbf{k})}{\omega - \omega_s(-\mathbf{k})} - \frac{M_{\mathbf{k}s;0}^i(-\mathbf{k}) M_{0;\mathbf{k}s}^j(\mathbf{k})}{\omega + \omega_s(+\mathbf{k})} \right\}, \quad (12.12a)$$

где $\varepsilon_{ij}^{(0)}(\omega)$ — плавная функция ω в рассматриваемом интервале частот. Если же состояние механического экситона при $\mathbf{k}=0$ является вырожденным, то число резонансных слагаемых соответственно увеличивается.

Отметим, что для экситонных состояний (\mathbf{k}, s) , волновые функции которых при $\mathbf{k}=0$ преобразуются так же, как компоненты полярного вектора, матричные элементы $M_{0s;0}^i(0)$ $i=1, 2, 3$ (по крайней мере некоторые из них) отличны от нуля. Ясно, что только эти экситонные состояния (мы их ранее называли дипольными экситонными состояниями) дают вклад в тензор диэлектрической проницаемости без учета пространственной дисперсии. Поскольку при этом

$$M_{0s;0}^j(0) = i \frac{\omega_s(0)}{c} \sqrt{N} D_{0s;0}^j, \quad (12.12б)$$

где $D_{0s;0}$ — матричный элемент оператора дипольного момента элементарной ячейки кристалла, а N — число элементарных ячеек в основном объеме кристалла,

$$\epsilon_{ij}(\omega, 0) = \left(1 - \frac{4\pi e^2 N_0}{m\omega^2}\right) \delta_{ij} - \frac{8\pi}{\Delta \hbar \omega^2} \sum_s \frac{D_{0s;0}^i(0) D_{0s;0}^j(0)}{\omega^2 - \omega_s^2(0)} \omega_s^3(0), \quad (12.13)$$

где Δ — объем элементарной ячейки кристалла. Соответственно вместо (12.12а) в рассматриваемом случае имеем

$$\epsilon_{ij}(\omega, 0) = \epsilon_{ij}^{(0)}(\omega) - \frac{8\pi}{\Delta \hbar \omega^2} \frac{D_{0s;0}^i(0) D_{0s;0}^j(0)}{\omega^2 - \omega_s^2(0)} \omega_s^3(0). \quad (12.13а)$$

Полос при $\omega = 0$ в (12.13) легко может быть исключен. Действительно, замечая, что

$$\frac{\omega_s^2(0)}{\omega^2 [\omega^2 - \omega_s^2(0)]} = \frac{1}{\omega^2 - \omega_s^2(0)} - \frac{1}{\omega^2}$$

и (см. [103])

$$\frac{4\pi e^2 N_0}{m} \delta_{ij} = \frac{8\pi}{\Delta \hbar} \sum_s D_{0s;0}^i(\mathbf{k}) D_{0s;0}^j(\mathbf{k}) \omega_s(\mathbf{k}), \quad (12.14а)$$

вместо (12.13) находим

$$\epsilon_{ij}(\omega, 0) = \delta_{ij} - \frac{8\pi}{\Delta \hbar} \sum_s \frac{D_{0s;0}^i(0) D_{0s;0}^j(0)}{\omega^2 - \omega_s^2(0)} \omega_s(0). \quad (12.14б)$$

В кубических кристаллах все состояния $(0s)$, для которых $D_{0s;0}(0) \neq 0$, являются трижды вырожденными ($s = s_1, s_2, s_3$), причем, если волновые функции этих состояний выбрать так, чтобы каждая из них преобразовывалась как одна из компонент полярного вектора (x или y , или z), то

$$D_{0s_\alpha;0}^i(0) = D_{0s_1;0}^i(0) \delta_{i\alpha}.$$

Поэтому

$$\sum_\alpha D_{0s_\alpha;0}^i(0) D_{0s_\alpha;0}^j(0) = |D_{0s_1;0}^i(0)|^2 \delta_{ij}$$

и, учитывая, что $\omega_{s_1}(0) = \omega_{s_2}(0) = \omega_{s_3}(0)$, вместо общей формулы (12.14) для кубического кристалла получаем

$$\epsilon_{ij}(\omega, 0) = \left(1 - \frac{8\pi}{3\Delta \hbar} \sum_s \frac{|D_{0s_1;0}^i(0)|^2 \omega_s(0)}{\omega^2 - \omega_s^2(0)}\right) \delta_{ij}. \quad (12.14в)$$

Аналогичным образом можно преобразовать формулу (12.14б) и для кристаллов более низкой симметрии.

Наряду с дипольными среди экситонных состояний удобно выделить квадрупольные экситонные состояния, волновые функции которых при $\mathbf{q} = 0$ преобразуются как произведения компонент двух полярных векторов. Подобно тому как это было сделано в работах [70, 104], можно показать, что для таких состояний в первом приближении по \mathbf{k}

$$M_{\mathbf{k}s;0}^i(\mathbf{k}) = -i \frac{e}{2mc} \sum_{i=1}^3 \langle 0, s | (p_i^\alpha r_i^\alpha + r_i^\alpha p_i^\alpha) | 0 \rangle k_i. \quad (12.15)$$

Отличие формулы (12.15) от аналогичной формулы, полученной в [70, 104], состоит в том, что (12.15) записана для волновых функций механических экситонов, а не кулоновских экситонов, волновые функции которых, вообще говоря, неаналитическим образом зависят от квазиимпульса при малых квазиимпульсах, что в статьях [70, 104] не было учтено.

Используя обозначение (8.24), видим, что

$$\begin{aligned} M_{0s;-\mathbf{k}s}^i(-\mathbf{k}) M_{-\mathbf{k}s;0}^j(\mathbf{k}) &= \\ &= -\frac{e^2}{4m^2 c^2} \sum_{l,m=1}^3 \langle 0 | \hat{T}_{il} | 0, s \rangle \langle 0, s | \hat{T}_{jm} | 0 \rangle k_l k_m \equiv \\ &\equiv -\frac{e^2}{8m^2 c^2} \sum_{i,m=1}^3 \{ \langle 0 | \hat{T}_{il} | 0, s \rangle \langle 0, s | \hat{T}_{jm} | 0 \rangle + \\ &\quad + \langle 0 | \hat{T}_{im} | 0, s \rangle \langle 0, s | \hat{T}_{jl} | 0 \rangle \} k_l k_m. \end{aligned}$$

Если частота $\omega \approx \omega_s(0)$, то основной вклад в сумму (12.12) вносит слагаемое, пропорциональное $1/[\omega - \omega_s(0)]$. Так как экситонный терм может быть вырожденным ($s = s_1, s_2, \dots$), приходим к соотношению (8.23), которое мы уже ранее использовали.

В заключение отметим, что тензор $\varepsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$ (см. (12.8а)), если не учитывать пространственную дисперсию и затухание, при $T=0$ подобно (12.14б) можно представить в следующем виде:

$$\varepsilon_{\perp, ij}(\omega, 0) = \delta_{ij} - \frac{8\pi}{\Delta\hbar} \sum_s \frac{\Omega_s(0) D_{0s}^i(0) D_{0s; 0}^j(0)}{\omega^2 - \Omega_s^2(0)} \eta_{ij}, \quad (12.16)$$

причем здесь $(0s)$ означает уже состояние s -го кулоновского (а не механического) экситона при $\mathbf{k}=0$ и $\Omega_s(0)$ — частота этого кулоновского экситона. С помощью (12.16) легко получается удобная формула для коэффициента преломления световых волн в кристалле. Действительно, для нормальных электромагнитных волн

$$D_i = \eta_{ij} D_j = \eta_{ij} \varepsilon_{\perp, ji}(\omega, 0) E_i = n^2 \eta_{ij} E_j, \quad (12.17)$$

Поэтому на основании (12.16) и так как $\eta_{ij} = \eta_{ji}$, найдем, что (12.17) можно записать в следующем виде:

$$\eta_{il} \varepsilon_{\perp, lm}(\omega, 0) \eta_{mn} \eta_{nj} E_j = n^2 \eta_{ij} E_j. \quad (12.18)$$

Направим теперь ось z вдоль вектора \mathbf{s} , а оси x и y вдоль ортов \mathbf{e}^α , $\alpha = 1, 2$, $(\mathbf{s} \cdot \mathbf{e}^\alpha) = 0$, $(\mathbf{e}^{(1)} \cdot \mathbf{e}^{(2)}) = 0$. Тогда, очевидно,

$$\left. \begin{aligned} \eta_{3l} \varepsilon_{\perp, lm}(\omega, 0) \eta_{mi} &= \eta_{il} \varepsilon_{\perp, lm}(\omega, 0) \eta_{m3} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \\ \eta_{\alpha l} \varepsilon_{\perp, lm}(\omega, 0) \eta_{m\beta} &= \delta_{\alpha\beta} - \frac{8\pi}{\Delta\hbar} \sum_s \frac{\Omega_s(0) (\mathbf{e}^\alpha \cdot \mathbf{D}_{0s}(0) (\mathbf{D}_{0s; 0}(0) \cdot \mathbf{e}^\beta))}{\omega^2 - \Omega_s^2(0)}, \\ \alpha &= 1, 2. \end{aligned} \right\} \quad (12.19)$$

Из (12.18) следует, что уравнение для определения $n^2(\omega, \mathbf{s})$ имеет следующий вид:

$$\begin{vmatrix} n^2 - \eta_{1l} \varepsilon_{\perp, lm} \eta_{m1} & -\eta_{1l} \varepsilon_{\perp, lm} \eta_{m2} \\ -\eta_{2l} \varepsilon_{\perp, lm} \eta_{m1} & n^2 - \eta_{2l} \varepsilon_{\perp, lm} \eta_{m2} \end{vmatrix} = 0,$$

откуда (см. также [103])

$$\begin{aligned} n_{1,2}^2(\omega, \mathbf{s}) &= 1 - \frac{1}{2} \sum_s \frac{\omega_0^2 f_s(s) \sin^2 \varphi(s, \mathbf{k})}{\omega^2 - \Omega_s^2(0)} \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \left\{ \left[\sum_s \frac{\omega_0^2 f_s(s) (\cos^2 \varphi_1(s, \mathbf{k}) - \cos^2 \varphi_2(s, \mathbf{k}))}{\omega^2 - \Omega_s^2(0)} \right]^2 + \right. \\ &\left. + 4 \left[\sum_s \frac{\omega_0^2 f_s(s) \cos \varphi_1(s, \mathbf{k}) \cos \varphi_2(s, \mathbf{k})}{\omega^2 - \Omega_s^2(0)} \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (12.20) \end{aligned}$$

В этом выражении использованы следующие обозначения: ω_0^2 — квадрат плазменной частоты, f_s — сила осциллятора, соответствующего s -й экситонной зоне, $\varphi(s, \mathbf{k})$ — угол, образованный вектором \mathbf{k} и вектором $\mathbf{D}_{0s; 0}(0)$, $\varphi_\alpha(s, \mathbf{k})$, $\alpha = 1, 2$ — угол, образованный ортом \mathbf{e}^α и вектором $\mathbf{D}_{0s; 0}(0)$. По определению

$$f_s(\mathbf{s}) = \frac{1}{\omega_0^2} \frac{8\pi}{\Delta\hbar} |\mathbf{D}_{0s; s}(0)|^2 \Omega_s(0).$$

Формула (12.20) позволяет анализировать зависимость величин $n_{1,2}(\omega, \mathbf{s})$ от направления распространения света в кристалле и может быть использована для определения направления вектора перехода \mathbf{D}_{0s} при экспериментальном изучении дисперсии света вне полос поглощения.

§ 13. Механические экситоны и тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в молекулярных кристаллах и в случае классической модели осцилляторов

13.1. Молекулярные кристаллы. Механические экситоны. Для вычисления тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, как это показано в § 12, нужно знать волновые функции Ψ_{m0} и собственные значения энергии W_m для механических экситонов. При этом, в соответствии со сказанным в п. 2.2, возбужденные состояния, называемые механическими экситонами, отвечают решению задачи без учета действия макроскопического (длинноволнового) поля либо при отсутствии этого поля.

Изложим здесь теорию механических экситонов в случае молекулярных кристаллов в приближении закрепленных

молекул. Заметим, что приближение Гайтлера — Лондона может быть использовано для этой цели (см. [66]) только при достаточно слабом взаимодействии между молекулами. В действительности же встречается целый ряд молекулярных кристаллов, где силы осцилляторов велики, а взаимодействие между молекулами в ряде спектральных областей не может считаться слабым (хотя это взаимодействие и не приводит к нарушению нейтральности отдельных молекул, оно вызывает интенсивное смешивание электронных конфигураций). Соответствующая теория, не использующая приближение Гайтлера — Лондона, была развита в работе [105]. Здесь мы, однако, ради простоты воспользуемся методом Гайтлера — Лондона, так как уточнение полученных ниже результатов может быть достигнуто подобно тому, как это было сделано в [105].

Предположим, что в элементарной ячейке кристалла содержится σ молекул. Гамильтониан полной кулоновской задачи

$$\hat{H} = \sum_{n\alpha} \hat{H}_{n\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{n\alpha \neq m\beta} \hat{V}_{n\alpha, m\beta}, \quad (13.1)$$

где \mathbf{n} , \mathbf{m} — целочисленные векторы кристаллической решетки, $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, \sigma$. $\hat{H}_{n\alpha}$ — гамильтониан молекулы ($n\alpha$), $\hat{V}_{n\alpha, m\beta}$ — оператор кулоновского взаимодействия между молекулами $n\alpha$ и $m\beta$. При построении волновых функций основного и возбужденных состояний кристалла не будем учитывать межмолекулярный обмен электронами, поскольку в области низших возбужденных состояний такой обмен не играет сколько-нибудь существенной роли. Введем нормированные антисимметризованные по всем координатам электронов функции $\varphi_{n\alpha}^l$:

$$\hat{H}_{n\alpha} \varphi_{n\alpha}^l = W_l^0 \varphi_{n\alpha}^l \quad (13.2)$$

(здесь $l=0$ соответствует основному состоянию молекулы; в том случае, когда молекулярный терм вырожден, индекс l следует считать сложным: $l \rightarrow (l, r)$, $r = 1, 2, \dots, t$, где t — кратность вырождения).

В приближении Гайтлера — Лондона волновая функция основного состояния кристалла

$$\Phi_0 = \prod_{n\alpha} \varphi_{n\alpha}^0, \quad (13.3)$$

а для возбужденного состояния

$$\Phi^l = \sum_{n\alpha, r} a_{n\alpha}^{lr} \chi_{n\alpha}^{lr}, \quad (13.4)$$

где

$$\chi_{n\alpha}^{lr} = \varphi_{n\alpha}^{lr} \prod_{m\beta \neq n\alpha} \varphi_{m\beta}^0. \quad (13.5)$$

Энергия основного состояния $W_0 = \langle \Phi_0^* | \hat{H} | \Phi_0 \rangle$. Для того чтобы определить энергию возбужденных состояний, следует найти минимум $H = \langle \Phi^l | \hat{H} | \Phi^l \rangle$ по совокупности $\{a_{n\alpha}^{lr}\}$ при дополнительном условии $\sum_{n\alpha, r} |a_{n\alpha}^{lr}|^2 = 1$. Минимизируя, находим, что величины $a_{n\alpha}^{lr}$ удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{m\beta \neq n\alpha} M_{m\beta, n\alpha}^{l; rr'} a_{m\beta}^{lr'} - \mu^l a_{n\alpha}^{lr} = 0, \quad \mu^l = W - W_0 - \Delta_l, \quad (13.6)$$

где W — энергия возбужденного состояния кристалла, $\Delta_l \equiv W_l^0 - W_0^0$ — энергия возбуждения изолированной молекулы,

$$M_{m\beta, n\alpha}^{l; rr'} = \int \varphi_{n\alpha}^{lr*} \varphi_{m\beta}^0 \hat{V}_{n\alpha, m\beta} \varphi_{n\alpha}^0 \varphi_{m\beta}^{lr'} d\tau. \quad (13.7)$$

Из соотношений трансляционной симметрии ясно, что

$$a_{n\alpha}^{lr} = \frac{1}{\sqrt{N}} a_{n\alpha}^{lr}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}r n\alpha}, \quad (13.8)$$

где N — полное число элементарных ячеек в основном объеме кристалла. Поэтому вместо (13.6) получаем

$$\sum_{\beta \neq \alpha} \Gamma_{\beta\alpha}^{l; rr'}(\mathbf{k}) a_{\beta}^{lr'}(\mathbf{k}) - \mu^l a_{\alpha}^{lr}(\mathbf{k}) = 0, \quad (13.9)$$

где штрих у знака суммы означает, что слагаемое $\mathbf{n} = \mathbf{m}$, $\alpha = \beta$ опущено,

$$\Gamma_{\beta\alpha}^{l; rr'}(\mathbf{k}) = \sum_m M_{m\beta, n\alpha}^{l; rr'} e^{i\mathbf{k}(r m\beta - r n\alpha)}. \quad (13.10)$$

Из (13.9) следует, что значения энергии возбуждения в полной кулоновской задаче $W = W_0 + \Delta_l + \mu^l$ выражаются через μ^l — собственные значения эрмитовской матрицы $\hat{\Gamma}(\mathbf{k})$, а числа

$a_{\alpha}^{lr}(\mathbf{k})$, $\alpha = 1, 2, \dots, \sigma$; $r = 1, 2, \dots, t$ являются компонентами ее собственных векторов.

Для того чтобы перейти к задаче о механическом экситоне, выделим из матрицы взаимодействия $\hat{\Gamma}(\mathbf{k})$ взаимодействие, обусловленное длинноволновым полем (нас, по существу, интересует только область малых значений $|\mathbf{k}|$, именно для этих значений волнового вектора используемая процедура Эвальда и приводит к выделению длинноволнового поля). Кроме того, ради простоты ограничимся во взаимодействии между молекулами учетом лишь диполь-дипольного взаимодействия, которое в большинстве наиболее интересных случаев является доминирующим. В этом приближении

$$\hat{V}_{n\alpha, m\beta} = \frac{1}{|\mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}|^3} \left\{ \hat{R}_{n\alpha} \hat{R}_{m\beta} - \frac{3}{|\mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}|^2} (\hat{R}_{n\alpha}, \mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}) (\hat{R}_{m\beta}, \mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}) \right\}, \quad (13.11)$$

где $\hat{R}_{n\alpha}$ — оператор дипольного момента молекулы $n\alpha$. Поэтому, используя (13.7) и (13.10), находим, что

$$\Gamma_{\beta, \alpha}^{lr, r'}(\mathbf{k}) = -R_{\alpha}^{0; lr} E_{n\alpha, \beta}^{lr'; 0}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{n\alpha}}, \quad (13.12)$$

где

$$R_{\alpha}^{0; lr} = \int \varphi_{n\alpha}^{lr} \hat{R}_{n\alpha} \varphi_{n\alpha}^0 d\tau, \quad (13.13)$$

$$E_{n\alpha, \beta}^{lr'; 0}(\mathbf{k}) = - \sum_m' \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{m\beta}}}{|\mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}|^3} \left\{ R_{\beta}^{0; lr'} - 3 \frac{(\mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta})}{|\mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}|^2} (R_{\beta}^{0; lr'}, \mathbf{r}_{n\alpha} - \mathbf{r}_{m\beta}) \right\}. \quad (13.14)$$

Из вида (13.14) ясно, что $E_{n\alpha, \beta}^{lr'; 0}$ суть электрическое поле в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{n\alpha}$, создаваемое диполями, расположенными в узлах решетки сорта β , причем величина диполей от узла к узлу изменяется по закону

$$R(\mathbf{m}\beta) = R_{\beta}^{lr'; 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{m\beta}}. \quad (13.15)$$

Полное поле (13.14) состоит фактически из двух частей — длинноволнового (макроскопического) поля и внутреннего поля. Метод разделения полного поля в дипольной решетке

на макроскопическое поле и внутреннее поле и называется методом, или процедурой, Эвальда.

Поскольку операция выделения макроскопической части поля из полного поля (13.14) подробно изложена в книге [24, § 30], мы здесь приведем только окончательный результат:

$$[E_{n\alpha, \beta}^{lr'; 0}(\mathbf{k})]_j = E_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{n\alpha}} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{n\alpha}} \sum_{j'} Q_{jj'} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right) R_{\beta, j'}^{lr'; 0}, \quad (13.16)$$

где E — амплитуда макроскопической части поля:

$$E_j = - \frac{4\pi}{\Delta} \frac{k_j}{|\mathbf{k}|} \left(\frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \sum_{\alpha} R_{\alpha}^{lr'; 0} \right), \quad (13.17)$$

а коэффициенты $Q_{jj'} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right)$ при заданном значении волнового вектора \mathbf{k} определяются только структурой ячейки (их конкретное выражение, которое нам здесь не понадобится, определяется формулой (30.31) в книге [24]). Существенным является то, что коэффициенты $Q_{jj'} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right)$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ являются аналитическими функциями волнового вектора, так что вся неаналитичность суммы (13.14) сосредоточена в (13.17). Коэффициенты $Q_{jj'} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right)$ удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} Q_{jj'} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right) &= Q_{j'j} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right), \\ Q_{jj'} \left(\frac{-\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right) &= Q_{jj'}^* \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right), \\ Q_{jj'} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right) &= Q_{jj'}^* \left(\frac{\mathbf{k}}{\beta\alpha} \right). \end{aligned} \right\} \quad (13.18)$$

Опуская в (13.16) первое слагаемое в правой части равенства, мы видим, что матрица взаимодействия в задаче о механическом экситоне имеет следующий вид:

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\alpha}^{lr, r'}(\mathbf{k}) = - \sum_{jj'} Q_{jj'} \left(\frac{\mathbf{k}}{\alpha\beta} \right) R_{\alpha j}^{0; lr} R_{\beta j'}^{lr'; 0}. \quad (13.19)$$

Используя (13.18) и (13.19) легко убедиться в том, что матрица $\tilde{\Gamma}(\mathbf{k})$, так же как $\Gamma(\mathbf{k})$, является эрмитовой:

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\alpha}^{lr, r'}(\mathbf{k}) = \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}^{*lr', r}(\mathbf{k}). \quad (13.19a)$$

Ясно, что в задаче о механическом экситоне соотношение вида (13.8) также имеет место, однако амплитуды $\tilde{a}_\alpha^{lr}(\mathbf{k})$ удовлетворяют, в отличие от (13.9), системе уравнений

$$\sum_{\beta \neq \alpha} \tilde{\Gamma}_{\beta\alpha}^{l;r'r}(\mathbf{k}) \tilde{a}_\beta^{lr'}(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}_l \tilde{a}_\alpha^{lr}(\mathbf{k}) = 0 \quad (13.20)$$

$$(\tilde{\mu}_l = \tilde{W} - W_0 - \Delta_l),$$

где \tilde{W} — энергия механического экситона. Для каждого значения \mathbf{k} оператор $\tilde{\Gamma}(\mathbf{k})$ имеет st собственных значений $\tilde{\mu}_\rho(\mathbf{k})$, $\rho = 1, 2, \dots, st$. Соответствующие ортонормированные собственные векторы будем обозначать через $\{\tilde{a}_\alpha^{lr}, \rho\}$. Ясно, что в рассматриваемом приближении дискретное квантовое число, определяющее, наряду с непрерывным квантовым числом \mathbf{k} , состояние экситона, является сложным $s \equiv (l, \rho)$. Пусть при $\mathbf{k} = 0$ величина $\tilde{\mu}^l(0)$ отвечает невырожденному состоянию механического экситона. Тогда, в силу аналитичности матрицы $\tilde{\Gamma}(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$, функции $\tilde{\mu}^l(\mathbf{k})$ как и $\tilde{a}_\alpha^{lr}(\mathbf{k})$ будут аналитическими функциями \mathbf{k} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Если состояние механического экситона при $\mathbf{k} = 0$ является вырожденным, то функция $\tilde{\mu}^l(\mathbf{k})$ может иметь при $\mathbf{k} = 0$ особую точку (точку ветвления).

В кристаллах, содержащих одну молекулу в элементарной ячейке, l -му невырожденному молекулярному терму ($\sigma = 1, t = 1$) соответствует только одна зона экситонов. В этом случае

$$\tilde{\mu}^l(\mathbf{k}) = \tilde{\Gamma}_{11}^l(\mathbf{k}), \quad \tilde{a}^l(\mathbf{k}) = 1.$$

В кристаллах более сложных, например содержащих две молекулы в элементарной ячейке, значения $\tilde{\mu}_\rho^l(\mathbf{k})$ определяются как корни уравнения (молекулярный терм предполагается невырожденным)

$$[\tilde{\Gamma}_{11}^l(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}^l] [\tilde{\Gamma}_{22}^l(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}^l] - \tilde{\Gamma}_{12}(\mathbf{k}) \tilde{\Gamma}_{21}(\mathbf{k}) = 0. \quad (13.21)$$

Величина $\tilde{\Gamma}_{11}^l(\mathbf{k})$ определяется только взаимодействием молекул с $\alpha = 1$, а величина $\tilde{\Gamma}_{22}^l(\mathbf{k})$ — взаимодействием молекул с $\alpha = 2$. Поскольку эти величины при $\mathbf{k} = 0$ не зависят от

направления \mathbf{k}/k , ясно, что $\tilde{\Gamma}_{11}^l(0) = \tilde{\Gamma}_{22}^l(0)$ (в отличие от $\Gamma_{11}^l(\mathbf{k})|_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \neq \Gamma_{22}^l(\mathbf{k})|_{\mathbf{k} \rightarrow 0}$). Поэтому при $\mathbf{k} = 0$ молекулярному терму l соответствуют два состояния механических экситонов [66], для которых

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\mu}_1^l(0) &= \tilde{\Gamma}_{11}(0) + |\tilde{\Gamma}_{12}(0)|, \\ \tilde{a}_1^{l_1}(0) &= \frac{\tilde{\Gamma}_{12}(0)}{|\tilde{\Gamma}_{12}(0)|} \tilde{a}_2^{l_2}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \tilde{\mu}_2^l(0) &= \tilde{\Gamma}_{11}(0) - |\tilde{\Gamma}_{12}(0)|, \\ \tilde{a}_1^{l_2}(0) &= -\frac{\tilde{\Gamma}_{12}(0)}{|\tilde{\Gamma}_{12}(0)|} \tilde{a}_2^{l_2}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (13.22)$$

Знание волновых функций механических экситонов позволяет непосредственно представить все величины, фигурирующие в выражении для тензора диэлектрической проницаемости, через характеристики отдельных молекул. Используя (13.3), (13.4), а также (12.1), находим, что фигурирующие в выражении для тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (12.12) величины, определяются для молекулярных кристаллов следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{V}} M_{-ks; 0}^i(\mathbf{k}) &= \frac{e/2mc}{\sqrt{\Delta}} \sum_{\alpha, r} a_{\alpha}^{s;lr; \rho}(-\mathbf{k}) \times \\ &\times \int \varphi_{n\alpha}^{s;lr} \sum_{\nu \in n\alpha} (p_i^\nu e^{ik_\nu} + e^{ik_\nu} p_i^\nu) \varphi_{n\alpha}^0 d\tau, \\ \frac{1}{\sqrt{V}} M_{0; -ks}^i(-\mathbf{k}) &= \frac{e/2mc}{\sqrt{\Delta}} \sum_{\alpha, r} a_{\alpha}^{r; \rho}(-\mathbf{k}) \times \\ &\times \int \varphi_{n\alpha}^0 \sum_{\nu \in n\alpha} (p_i^\nu e^{-ik_\nu} + e^{-ik_\nu} p_i^\nu) \varphi_{n\alpha}^{lr} d\tau, \end{aligned} \right\} \quad (13.23)$$

где ν — номер электрона, принадлежащего молекуле $n\alpha$, ρ_ν — радиус-вектор этого электрона относительно узла решетки $\mathbf{r}_{n\alpha}$. Что же касается фигурирующих в (12.12) частот $\omega_s(\mathbf{k})$, то, согласно (13.20), эти частоты в приближении Гайтлера — Лондона определяются соотношениями ($s \equiv l, \rho$)

$$\omega_s(\mathbf{k}) \equiv \omega'_\rho(\mathbf{k}) = \frac{1}{h} [W_0 + \Delta_l + \tilde{\mu}_\rho^l(\mathbf{k})]. \quad (13.24)$$

13.2. Модель осцилляторов. Модель молекулярного кристалла, рассмотренная выше, содержит в себе как предельный случай классическую модель кристалла, в узлах которого находятся классические диполи.

Для того чтобы убедиться в справедливости сделанного замечания, следует учесть, что в кристалле наряду с постоянной решетки a имеется еще целый набор параметров a_i , равных эффективным размерам атомов и молекул в различных состояниях, а также эффективным длинам, определяющим матричные элементы переходов между состояниями атомов и молекул. Эти значения a_i определяют в том числе величину матричных элементов и для различных мультипольных (дипольных, квадрупольных и т. д.) переходов. Вместо параметров a и a_i можно поэтому использовать a и значения некоторых эффективных мультипольных моментов (точнее, их матричных элементов), считая эти мультиполи точечными и находящимися в узлах решетки. В окрестности интенсивных дипольных линий можно ограничиться только дипольными моментами и мы, таким образом, приходим к модели кристалла, состоящего из точечных диполей. При этом единственным видом взаимодействия оказывается диполь-дипольное взаимодействие, а вместо (13.23) имеют место следующие соотношения:

$$\frac{1}{\sqrt{V}} M_{0; -ks}^j(\pm \mathbf{k}) = \frac{i\omega_p^l(-\mathbf{k})}{c\sqrt{\Delta}} \sum_{ar} a_{ar}^{lr; \rho}(-\mathbf{k}) R_{aj}^{lr; 0},$$

$$\frac{1}{\sqrt{V}} M_{-ks; 0}^j(\pm \mathbf{k}) = -\frac{i\omega_p^l(-\mathbf{k})}{c\sqrt{\Delta}} \sum_{ar} a_{ar}^{*lr; \rho}(-\mathbf{k}) R_{aj}^{0; lr},$$

где $R_{aj}^{lr; 0}$ — j -я компонента дипольного матричного элемента перехода из основного в lr -е возбужденное состояние молекулы, расположенной в узле типа a (см. (13.23) и (13.13)).

Пусть, например, решетка Бравэ кристалла кубическая, а в элементарной ячейке содержится одна изотропная молекула. У такой молекулы возбужденные состояния, в которые разрешены переходы в дипольном приближении, трижды вырождены. Выберем соответствующие волновые функции так, чтобы векторы R^{lr} , $r = 1, 2, 3$, были направлены вдоль осей куба 4-го порядка. В этом случае очевидно, что если

оси координат также направлены вдоль этих осей, то $R_j^{lr; 0} = R^{l, 0} \delta_{rj}$ и

$$\frac{1}{\sqrt{V}} M_{\pm ks; 0}^j(\mathbf{k}) = -\frac{i\omega_p^l(\pm \mathbf{k})}{c\sqrt{\Delta}} a^{*lj; \rho}(\pm \mathbf{k}) R^{l, 0} = \frac{1}{\sqrt{V}} M_{0; \pm ks}^j(\mathbf{k}).$$

Следовательно,

$$\frac{1}{V} M_{0; -ks}^i(-\mathbf{k}) M_{-ks; 0}^j(-\mathbf{k}) = \frac{[\omega_p^l(\mathbf{k})]^2}{c^2 \Delta} a^{ll; \rho}(-\mathbf{k}) a^{*lj; \rho}(-\mathbf{k}) |R^{l0}|^2.$$

Если пренебречь анизотропией эффективной массы механических экситонов, то при малых $|\mathbf{k}|$, с точностью до членов $\sim k^2$,

$$\omega_1^l(\mathbf{k}) = \omega_2^l(\mathbf{k}) = \omega_3^l(\mathbf{k}) \equiv \omega_l(\mathbf{k}).$$

Тогда, используя соотношение

$$\sum_{s=1}^3 a^{ll; \rho}(\mathbf{k}) a^{*lj; \rho}(\mathbf{k}) = \sigma t \delta_{ij}$$

при $\sigma = 1$, $t = 3$, в указанном приближении находим тензор диэлектрической проницаемости, который сводится к скаляру

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega, \mathbf{k}) \delta_{ij} = \left\{ 1 - \frac{4\pi e^2 N_0}{m\omega^2} - \frac{24\pi}{h \Delta \omega^2} \sum_l \frac{|R^{l0}|^2 \omega_l^3(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_l^2(\mathbf{k})} \right\} \delta_{ij}. \quad (13.25)$$

Если использовать правило сумм (12.14а), тензор (13.25) можно представить в виде

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega, \mathbf{k}) \delta_{ij} \equiv \left\{ 1 - \sum_l \frac{\omega_0^2 f_l(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_l^2(\mathbf{k})} \right\} \delta_{ij}, \quad (13.26)$$

где $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi e^2 N_0}{m}}$ — «плазменная» частота, $f_l(\mathbf{k})$ — сила осциллятора:

$$f_l(\mathbf{k}) = \frac{6 |R^{l0}|^2 \omega_l(\mathbf{k}) m}{h \Delta e^2 N_0}, \quad \sum_l f_l(\mathbf{k}) = 1. \quad (13.26a)$$

Формула (13.26) остается еще общим квантовомеханическим выражением. Переход к классическому пределу требует

дальнейшей конкретизации модели. Именно, будем считать, что в каждом узле элементарной ячейки расположены три одинаковых гармонических осциллятора, направления колебаний которых взаимно ортогональны (эффективные массы и заряды m и e , а также частоты осцилляторов, как сказано, одинаковы). Учет взаимодействия между различными ячейками кристалла приводит к снятию вырождения, так что вместо одной частоты появляется три энергетических зоны механических экситонов $\hbar\omega_p(\mathbf{k})$, $p=1, 2, 3$; однако при малых $|\mathbf{k}|$ частоты $\omega_1(\mathbf{k}) = \omega_2(\mathbf{k}) = \omega_3(\mathbf{k}) \equiv \omega(\mathbf{k})$, т. е. вырождение можно считать сохраняющимся. В этой модели в (13.26) вместо суммы по l остается одно слагаемое. Далее, в рассматриваемом случае число электронов в единице объема $N_0 = 3 \frac{1}{\Delta}$, и в используемом приближении (метод Гайтлера — Лондона, малые $|\mathbf{k}|$)

$$|R^{l_0}|^2 = \frac{e^2 \hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}.$$

Поэтому, в соответствии с (13.26а), $f(\mathbf{k}) = 1$ и, следовательно,

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon(\omega, \mathbf{k}) \delta_{ij} = \left\{ 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2 - \omega^2(\mathbf{k})} \right\} \delta_{ij}.$$

В такой классической модели, которая обсуждалась в работе [106], коэффициент преломления для поперечных нормальных волн, очевидно, равен $n(\omega) = \sqrt{\epsilon\left(\omega, \frac{\omega}{c} n\mathbf{s}\right)}$. Нормальные волны в любом направлении являются либо продольными, либо поперечными. Частоты «волн поляризации» $\omega_p(\mathbf{k})$ (см. п. 2.2) соответствуют полюсам $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$, тогда как на частотах продольных волн величина $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ обращается в нуль. В рассмотренной модели «фиктивные продольные волны» отсутствуют.

Ясно, что аналогичным образом можно рассмотреть и менее симметричные модели дипольных решеток.

§ 14. Механизм и расчеты поглощения

14.1. Механизм поглощения. Учет поглощения в первом приближении. Затухание электромагнитных волн в кристаллах связано прежде всего с возможностью необратимого перехода энергии рассматриваемых волн в энергию других

степеней свободы. В неметаллах поглощение электромагнитных волн в видимой области спектра и в ультрафиолете в основном обусловлено превращением энергии электронного возбуждения в энергию колебаний ядер кристаллической решетки. Возможность этого процесса приводит к тому, что состояния фотона в среде (реального экситона) становятся квазистационарными, а тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ — неэрмитовым уже при вещественных ω и \mathbf{k} . При этом процедура определения этого тензора в § 12 и основное отличие здесь возникает в связи с тем, что при учете колебаний решетки состояние кристалла характеризуется не только состояниями электронов, но также движением ядер или, на квантовом языке, состояниями фононной подсистемы.

Необходимость учитывать наряду с движением электронов также движение ядер кристалла, вообще говоря, существенно усложняет проблему отыскания стационарных состояний в невозмущенной задаче (т. е. в задаче, в которой не учтено макроскопическое электрическое поле). Еще далеко не все аспекты теории этих состояний достаточно полно изучены и вся проблема, несомненно, нуждается в дальнейшем обсуждении. Однако в настоящей книге мы делать этого не имеем возможности, и в последующем изложении стационарные состояния в невозмущенной задаче считаются известными*). Эти состояния по самой постановке вопроса характеризуются лишь приближенными собственными функциями оператора энергии системы, поскольку всегда в действительности имеется такое взаимодействие (например, ангармонические члены в уравнениях колебаний решетки), которое приводит к переходам между указанными приближенными состояниями системы даже при отсутствии внешнего возмущения. Такие переходы делают время жизни возбужденных состояний кристалла и, в частности, время жизни нормальных электромагнитных волн, конечным**). Для того чтобы учесть эти переходы при

*) Обсуждение вопросов, связанных с этой проблемой, можно найти, например, в работах [25, 66, 118, 119].

***) Здесь речь идет о нормальных электромагнитных волнах при такой постановке вопроса, когда волновой вектор \mathbf{k} считается вещественным, а частота ω определяется из дисперсионного уравнения (2.10), (2.22); при наличии поглощения частота ω при таком подходе оказывается комплексной.

вычислении индуцированного тока, вызванного действием внешнего периодического возмущения, наряду с этим периодическим возмущением следует также учесть наличие указанного выше возмущения, не зависящего от времени.

Пусть \hat{V} — оператор, соответствующий не зависящему от времени возмущению. Тогда при определении «возмущенной» волновой функции вместо (12.1) следует использовать оператор

$$\hat{U} = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{G}e^{i\omega t} + \hat{V}. \quad (14.1)$$

Как обычно (см., например, [69]), будем искать «возмущенную» волновую функцию кристалла в состоянии n в виде суммы

$$\Psi_n(t) = e^{-i\frac{W_n}{\hbar}t} \Psi_{n0} + \sum_{m \neq n} a_{mn}(t) \Psi_{m0}, \quad |a_{mn}| \ll 1. \quad (14.2)$$

Здесь, как и в п. 12.1, предполагаем функции Ψ_{m0} не зависящими от времени. Кроме того, удобно выбрать начало отсчета энергии системы так, чтобы $W_n = 0$. Тогда, подставляя (14.2) во временное уравнение Шредингера при учете возмущения (14.1), находим

$$i\hbar \dot{a}_{mn} = W_m a_{mn} + \sum_k u_{mk}(t) a_{kn}(t), \quad (14.3)$$

где

$$u_{mk}(t) = \int \Psi_{m0}^* \hat{U}(t) \Psi_{k0} d\tau$$

— матричные элементы оператора (14.1). Переходя к формулировке начальных условий для $a_{kn}(t)$, разобьем все возбужденные состояния кристалла, которые соответствуют наличию в кристалле механических экситонов и фононов на две группы*). В первую из них включим сравнительно небольшое число состояний, в которые система может перейти из состояния n под влиянием света; это такие состояния, для которых матричный элемент F_{nm} (см. (12.2)) значителен. Во вторую группу отнесем такие состояния, для которых элемент F_{nm} пренебрежимо мал и в которые, следовательно, запрещен фотопереход из состояния n . В эти

* В некоторых местах при вычислении функции (14.2) мы следуем [117]. Более частный случай, когда оператором \hat{V} , фигурирующим в (14.1), является оператор экситон-фононного взаимодействия, рассмотрен в ряде работ [62, 63].

состояния система может переходить из состояний первой группы только под влиянием возмущения \hat{V} (см. (14.1)). Состояния первой группы будем по-прежнему нумеровать индексом m , а для состояний второй группы введем индекс q . Конкретно, в интересующих нас случаях состояния n и m отличаются только состоянием электронов. Например, $n = 0$ есть основное состояние и $m = 1$ — состояние с одним механическим экситоном, причем $F_{nm} \neq 0$, а состояние фононов в состояниях n и m одинаково. Состояние q в этом примере получается из состояния $m = 1$, например, в результате излучения или поглощения фонона экситоном, который при этом превращается в механический экситон с измененными энергией и импульсом.

Нас будут интересовать решения уравнений (14.3) в условиях стационарности состояний первой группы, в силу чего будем искать $a_{mn}(t)$ в следующем виде (ср. (12.2)):

$$a_{mn}(t) = A_m(-\omega) e^{-i\omega t} + A_m(\omega) e^{i\omega t}, \quad (14.4)$$

где амплитуды A_m от времени не зависят. Что же касается коэффициентов $a_{qn}(t)$, то при их определении используем начальное условие

$$a_{qn}(t=0) = 0. \quad (14.5)$$

Это условие можно успешно использовать, если состояний q (состояний второй группы) очень много, и в связи с этим для всех рассматриваемых нами значений времени t все амплитуды состояний типа q слабо возбуждены и не успели достигнуть стационарных значений. Другими словами, состояния второй группы образуют диссипативную систему. Состояния первой группы, если пользоваться такой терминологией, можно считать образующими динамическую систему.

Найдем теперь решение системы уравнений (14.3), удовлетворяющее сформулированным условиям. Предварительно выберем такие базисные функции Ψ_{m0} , чтобы матрица $V_{mm'}$ была диагональна в подпространстве функций первой группы. В этом случае уравнения (14.3) приобретают вид

$$i\hbar \dot{a}_{mn} = W_m a_{mn} + \sum_q V_{mq} a_{qn} + F_{mn} e^{-i\omega t} + G_{mn} e^{i\omega t}, \quad (14.6)$$

$$i\hbar \dot{a}_{qn} = W_q a_{qn} + \sum_m V_{qm} a_{mn} + \sum_{q'} V_{qq'} a_{q'n}. \quad (14.7)$$

Из (14.6) следует, что по сравнению с a_{mn} коэффициенты a_{qn} являются относительно матричных элементов возмущения величинами более высокого порядка малости. Поэтому в (14.7) в первом приближении можно опустить сумму $\sum_{q'} V_{qq'} a_{q'n}$. Тогда, подставляя в (14.7) соотношения (14.4) и учитывая (14.5), находим, что

$$a_{qn} = a_{qn}^{\omega} + a_{qn}^{-\omega}, \quad (14.8)$$

где

$$a_{qn}^{\pm\omega}(t) = (e^{\mp i\omega t} - e^{\mp i\omega_q t}) \sum_m \frac{V_{qm} A_m(\mp\omega)}{(\pm \hbar\omega - W_q)}, \quad W_q = \hbar\omega_q.$$

Подставляя (14.4) и (14.8) в (14.6), получаем систему уравнений для определения коэффициентов $A_m(\pm\omega)$:

$$\left. \begin{aligned} (W_m - \hbar\omega) A_m(-\omega) + \sum_{m'} V_{mm'}^a(-\omega) A_{m'}(-\omega) + F_{mn} &= 0, \\ (W_m + \hbar\omega) A_m(\omega) + \sum_{m'} V_{mm'}^a(\omega) A_{m'}(\omega) + G_{mn} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (14.9)$$

Здесь величина

$$V_{nm'}^a(-\omega) = \sum_q V_{mq} V_{qm'} \frac{1 - \exp\{-i(\omega_q - \omega)t\}}{\hbar\omega - W_q} \quad (14.10)$$

для достаточно больших t (см. [120], § 16) от времени фактически не зависит, поскольку при $t \rightarrow \infty$ функция

$$\frac{1 - \exp\{-i(\omega_q - \omega)t\}}{\hbar\omega - \omega_q} = \frac{\mathcal{P}}{\hbar\omega - W_q} - i\pi\delta(\hbar\omega - W_q).$$

Следовательно,

$$V_{mm'}^a(-\omega) = \mathcal{P} \sum_q \frac{V_{mq} V_{qm'}}{\hbar\omega - W_q} - i\pi \sum_q V_{mq} V_{qm'} \delta(\hbar\omega - W_q). \quad (14.11)$$

В (14.11) \mathcal{P} означает, что последующий за \mathcal{P} интеграл (сумма по состояниям q) берется в смысле главного значения. Опуская в первом приближении в (14.9) недиагональные

элементы $V_{mm'}^a(\pm\omega)$, находим, что

$$\left. \begin{aligned} A_m(-\omega) &= -\frac{F_{mn}}{W_m + V_{mm}^a(-\omega) - \hbar\omega}, \\ A_m(\omega) &= -\frac{G_{mn}}{W_m + V_{mm}^a(\omega) + \hbar\omega}. \end{aligned} \right\} \quad (14.12)$$

Рассмотрим более подробно тот случай, когда состояние кристалла n (см. (14.2)) является основным состоянием $n=0$. Поскольку при этом для всех прочих состояний $W_q - W_0 > 0$, ясно, что мнимая часть функции $V_{mm}^a(\omega)$ при $\omega > 0$ в соответствии с (14.11) обращается в нуль. Воспользовавшись теперь выводом выражения для тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, изложенным в п. 12.1, находим, что при учете $\hat{V} \neq 0$ и, следовательно, конечного времени жизни состояний кристалла, в которые разрешен фотопереход из основного состояния, тензор диэлектрической проницаемости кристалла при низких температурах определяется следующим выражением:

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \left(1 - \frac{4\pi}{\omega^2 V} \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^2}{m_{\alpha}} \right) \delta_{ij} - \frac{4\pi c^2}{\omega^2 V} \sum_{m \neq 0} \left\{ \frac{M_{0m}^i(-\mathbf{k}) M_{m0}^j(\mathbf{k})}{\hbar\omega - \hbar\omega_m(-\mathbf{k}) - V_{mm}^a(-\omega)} - \frac{M_{m0}^i(-\mathbf{k}) M_{0m}^j(\mathbf{k})}{\hbar\omega + \hbar\omega_m(\mathbf{k}) + V_{mm}^a(\omega)} \right\}, \quad (14.13)$$

где использовано соотношение (14.11) и

$$V_{mm}^a(-\omega) = \Delta W_m(\omega) - \frac{i\hbar\nu_m(\omega)}{2}, \quad \nu_m > 0,$$

$$V_{mm}^a(\omega) = \Delta W_m(-\omega).$$

При этом

$$\left. \begin{aligned} \hbar\nu_m(\omega) &= 2\pi \sum_q |V_{qm}|^2 \delta(\hbar\omega - W_q), \\ \Delta W_m(\omega) &= \mathcal{P} \sum_q \frac{|V_{qm}|^2}{\hbar\omega - W_q}. \end{aligned} \right\} \quad (14.14)$$

$\nu_m(\omega)$, которая определяет форму экситонной линии поглощения, рассмотрим более подробно наиболее важный случай, когда основным механизмом, приводящим к затуханию нормальных электромагнитных волн в диэлектрическом кристалле, является экситон-фононное взаимодействие. Поскольку экситонные линии поглощения расположены в окрестности частот кулоновских экситонов, обсуждение вопроса о форме экситонной линии поглощения более удобно вести с использованием состояний не механических, а кулоновских экситонов.

Оператор Гамильтона для кристалла при кулоновской калибровке векторного потенциала и отсутствии учета запаздывающего взаимодействия между зарядами (что отвечает пренебрежению взаимодействием с полем поперечных фотонов) может быть представлен в виде

$$\hat{H}_{\text{кул}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{V}, \quad (14.17)$$

где \hat{H}_1 и \hat{H}_2 — гамильтонианы экситонной и фононной подсистем, а \hat{V} — оператор экситон-фононного взаимодействия (здесь и ниже под экситоном понимаем кулоновский экситон).

Предположим, что экситон-фононное взаимодействие является слабым. Тогда приближенно стационарные состояния кристалла в экситонной области спектра определяются одновременно заданием состояний (\mathbf{k}, s) электронной подсистемы, т. е. заданием волнового вектора \mathbf{k} кулоновского экситона и дискретного числа s , определяющего номер экситонной зоны, а также заданием состояния фононной подсистемы, т. е. заданием набора чисел $\{\dots, N_l(\mathbf{p}), \dots\}$, где $N_l(\mathbf{p})$ — квантовое число ($N_l(\mathbf{p}) = 0, 1, 2, \dots$), соответствующее состоянию фонона l -й ветви колебаний кристаллической решетки с квазиимпульсом \mathbf{p} .

Предположим, ради простоты, что температура кристалла $T = 0$. В этом случае кристалл находится в основном состоянии, причем и экситоны и фононы отсутствуют. Если теперь в операторе $\hat{M}(\mathbf{k})$ (см. (12.1а)) в сумме по α принимать во внимание только электроны, а малыми слагаемыми, которые отвечают взаимодействию ядер с внешним электрическим полем, пренебречь, то матричные элементы $M_{0m}(\mathbf{k})$ будут отличны от нуля только для таких состояний кристалла m , в которых фононы, как и в основном состоянии, отсутствуют,

а электронная подсистема находится в экситонном состоянии с волновым вектором \mathbf{k} (см. § 12). Если при этом $M_{0m}(0) \neq 0$, то, речь, очевидно, идет о дипольном переходе, если же $M_{0m}(0) = 0$, то речь может идти о квадрупольном либо еще более высоких мультипольных переходах.

Рассмотрим более подробно окрестность изолированной невырожденной дипольной зоны s , удаленной от других экситонных зон настолько, что междузонными переходами, вызванными наличием слабого экситон-фононного взаимодействия, можно пренебречь. В этом случае можно считать, что первая группа состояний, о которых говорилось выше, в п. 14.1, состоит из одного состояния $m = (\mathbf{k}, s, \dots, N_l(\mathbf{q}) = 0, \dots)$, тогда как для состояний второй группы $q = (\mathbf{k}', s, \dots, N_l(\mathbf{p}), \dots)$, причем, вообще говоря, $N_l(\mathbf{p}) \neq 0$. Поскольку кристалл предполагается идеальным, оператор экситон-фононного взаимодействия, который приводит к переходам из состояния m в состояние q и, следовательно, играет роль оператора \hat{V} (см. (14.1)), можно в первом приближении представить в следующем виде:

$$\hat{V} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, l} F(\mathbf{k} + \mathbf{p}; \mathbf{k}; \mathbf{p}, l) (B_{\mathbf{k}+\mathbf{p}}^+ B_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}+\mathbf{p}}^+) (b_{\mathbf{p}, l} + b_{-\mathbf{p}, l}^+), \quad (14.18)$$

где $B_{\mathbf{k}}^+$ и $B_{\mathbf{k}}$ — бозе-операторы рождения и уничтожения экситона (\mathbf{k}, s) , а $b_{\mathbf{p}, l}^+$ и $b_{\mathbf{p}, l}$ — бозе-операторы рождения и уничтожения фонона (\mathbf{p}, l) . При этом, поскольку \hat{V} — самосопряженный оператор,

$$F(\mathbf{k} + \mathbf{p}; \mathbf{k}; \mathbf{p}, l) = F^*(\mathbf{k}; \mathbf{k} + \mathbf{p}; -\mathbf{p}, l). \quad (14.19)$$

В силу (14.18)

$$|V_{qm}|^2 = |F(\mathbf{k} + \mathbf{p}; \mathbf{k}; \mathbf{p}, l)|^2$$

и, в соответствии с (14.14),

$$\begin{aligned} \nu_m(\omega) &\equiv \nu_s(\omega, \mathbf{k}) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}, l} |F(\mathbf{k} + \mathbf{p}; \mathbf{k}; \mathbf{p}, l)|^2 \delta[\hbar\omega - W_s(\mathbf{k} - \mathbf{p}) - \hbar\omega_l(\mathbf{p})], \end{aligned} \quad (14.20)$$

где $W_s(\mathbf{k})$ — энергия кулоновского экситона (\mathbf{k}, s) . Для дипольных экситонов в (14.20) можно положить $\mathbf{k} = 0$. Для

квадрупольных — $\gamma_m(\omega) \sim k^2$ и т. д. Явный вид зависимости $\gamma_m(\omega)$ может быть найден лишь при конкретном задании коэффициентов F в (14.19) (см., например, [119]). Отметим здесь лишь одну особенность формулы (14.20). Из этой формулы следует, что величина $\gamma_m(\omega)$ в рассматриваемом приближении равна нулю, если только частота $\omega < W_s^{\text{min}}/\hbar$, где W_s^{min} — минимальная энергия кулоновского экситона в s -й зоне. Если в экситонной зоне минимум соответствует квазиимпульсу $k=0$, то $W_s^{\text{min}} = W_s(0) \equiv W_s(k=0)$ и $\gamma_m(\omega) = 0$ при $\hbar\omega < W_s(0)$. Это заключение не изменяется, если в (14.18) учесть также следующие члены разложения оператора \hat{V} по смещениям ядер, т. е. если наряду с линейными по b и b^+ слагаемыми учесть также слагаемые вида $b \cdot b$, и т. д.

В действительности, однако, значение $\omega = \frac{1}{\hbar} W_s^{\text{min}}$ не является длинноволновым краем экситонной полосы поглощения, поскольку более точный учет экситон-фотонного взаимодействия приводит к затуханию света и при $\omega < \frac{1}{\hbar} W_s^{\text{min}}$.

14.3. Длинноволновый край экситонных полос поглощения. Для того чтобы пояснить природу длинноволнового поглощения, возникающего в области частот $\omega < \frac{1}{\hbar} W_s^{\text{min}}$, рассмотрим вопрос о том, какие элементарные возбуждения имеются в кристалле при учете не только мгновенного кулоновского взаимодействия, но и запаздывающего взаимодействия между зарядами.

При использовании кулоновской калибровки полный оператор Гамильтона для кристалла (включающий также оператор энергии поля поперечных фотонов) равен

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{кул}} + \hat{H}_{\perp} + \hat{H}_{\text{вз}},$$

где оператор $H_{\text{кул}}$ представлен выражением (14.17), H_{\perp} — гамильтониан поля поперечных фотонов, а $\hat{H}_{\text{вз}}$ отвечает взаимодействию зарядов с полем этих фотонов.

Если на кристалл из вакуума падает фотон с частотой ω и волновым вектором k (ясно, что это может быть только поперечный фотон), то при $\hat{H}_{\text{вз}} = 0$ этот фотон пройдет через кристалл, не взаимодействуя с экситонами. Если же учесть оператор $H_{\text{вз}}$ как слабое возмущение, состояние поперечных

фотонов становится затухающим. Положим температуру $T = 0$, так что фононы и экситоны могут только испускаться, но не поглощаться. Тогда в окрестности изолированной зоны кулоновского экситона процесс распада фотона с частотой ω и волновым вектором k может происходить либо с образованием кулоновского экситона и фононов (именно такие процессы учтены в соотношении (14.19)), либо же с образованием какого-либо другого фотона (ω' , k') и фононов*). Если учитывать рождение только одного фонона, последний процесс идет при соблюдении таких законов сохранения:

$$\left. \begin{aligned} \omega &= \omega' + \omega_l(p), \\ k &= k' + p, \end{aligned} \right\} \quad (14.21)$$

где $\omega_l(p)$ — частота фонона l -й ветви колебаний с волновым вектором p ; этот процесс фактически представляет собой комбинационное рассеяние поперечного фотона с образованием фонона.

Соотношения (14.21) не накладывают ограничений на частоту ω , однако при $\omega > \frac{1}{\hbar} W_s^{\text{min}}$ интенсивность упомянутого процесса комбинационного рассеяния обычно мала по сравнению с интенсивностью процессов распада фотонов на кулоновский экситон и фононы, которые, следовательно, в этой области частот полностью определяют интенсивность затухания состояний поперечных фотонов в кристалле (наличием дефектов пренебрегаем). Расчеты сечения комбинационного рассеяния поперечных фотонов с образованием фононов могут быть проведены с использованием оператора (14.1) во втором приближении теории возмущений (см., например, п. 15.1). При этом в промежуточном состоянии появляется экситон, в данном случае кулоновский. Однако такие расчеты становятся непригодными, если частота фотона ω лежит в окрестности частоты кулоновского экситона $\frac{1}{\hbar} W_s(0)$.

При этом, если рассматриваемая экситонная зона соответствует большим силам осциллятора, область частот, где непригодна теория возмущений, становится значительной.

Остановимся на этом вопросе более подробно. При малых значениях квазиимпульса k энергия кулоновского экситона

*) Маловероятным процессом превращения фотона с энергией $\hbar\omega$ в один только фононы пренебрегаем.

$W_s(\mathbf{k})$ может быть представлена следующим образом:

$$W_s(\mathbf{k}) = W_s(0) + \alpha_i k_i + \beta_{ij} k_i k_j + \dots$$

где $W_s(0)$, α_i , β_{ij} , вообще говоря, зависят от $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$. Спектр поперечных фотонов определяется формулой

$$W_{\perp}(\mathbf{k}) = \hbar |\mathbf{k}| c,$$

и в пространстве квазиимпульсов при малых $|\mathbf{k}| \sim \frac{W_s(0)}{\hbar c} \ll \frac{1}{a}$ ветви энергий кулоновских экситонов и поперечных фотонов

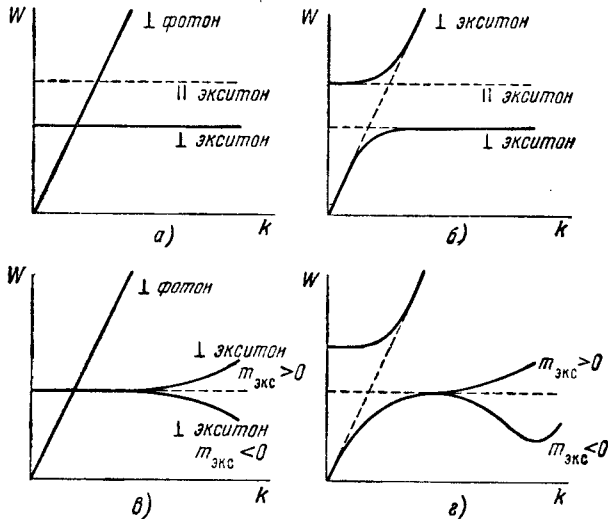


Рис. 21. Влияние запаздывания на зависимость энергии поперечных (\perp) экситонов от волнового вектора. В а) и б) $m_{\text{экс}} = \infty$, в в) и г) $m_{\text{экс}}$ имеет конечное значение; ветвь продольных экситонов не обозначена, в б) и г) учтено запаздывание.

пересекаются. Поэтому учет даже слабого взаимодействия этих экситонов с поперечными фотонами (т. е. учет запаздывающего взаимодействия) приводит в окрестности пересечения к изменениям в форме спектра элементарных возбуждений. О такой ситуации иногда говорят, что происходит «смешивание» состояний кулоновских экситонов и поперечных фотонов. Так, например, в кубических кристаллах (рис. 21)

поперечные кулоновские экситоны, подобно поперечным оптическим колебаниям ионных решеток, «смешиваются» с состояниями поперечных фотонов и образуют наблюдаемые оптические волны, т. е. нормальные электромагнитные волны, или реальные экситоны (в условиях, изображенных на рис. 21, поглощение не учитывается).

Из рис. 21 видно, что при учете запаздывания в окрестности пересечения ветви кулоновских экситонов и фотонов происходит изменение групповой скорости нормальных волн, что оказывается особенно существенным при рассмотрении их взаимодействия с фононами. «Смешивание» состояний, о котором идет речь, является отражением того очевидного факта, что нормальные электромагнитные волны в среде, особенно вблизи резонансов, существенно отличны от нормальных волн в вакууме.

Влияние запаздывающего взаимодействия между электронами на экситон-фононное взаимодействие проще всего может быть рассмотрено следующим образом [93, 121].

В нулевом приближении учтем как кулоновское, так и запаздывающее взаимодействие между зарядами, однако экситон-фононное взаимодействие принимать во внимание не будем. При этом получаются «реальные» незатухающие экситоны (энергия $W(\mathbf{k})$). Взаимодействие с фононами будем считать слабым, так что его учет в следующем приближении приводит к появлению малой мнимой добавки $i\delta W(\mathbf{k})$ к энергии $W(\mathbf{k})$ экситонов нулевого приближения, что делает эти состояния затухающими. Знание же величины $\delta W(\mathbf{k})$ позволяет в первом приближении вычислить коэффициент затухания нормальных волн (реальных экситонов) $\chi(\omega, \mathbf{s})$, распространяющихся в направлении \mathbf{s} и имеющих частоту ω . Действительно,

$$i \frac{\omega}{c} \chi(\omega, \mathbf{s}) \equiv i \delta k = \frac{d\mathbf{k}}{d\omega(\mathbf{k})} i \delta \omega(\mathbf{k}), \quad \delta \omega = \frac{\delta W(\mathbf{k})}{\hbar}. \quad (14.22)$$

Величина $v_{\text{гр}} = \frac{d\omega(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}$ есть групповая скорость волн нулевого приближения. Существенно, что при $\omega \simeq \frac{1}{\hbar} W_s(0)$ (см. рис. 21) величина $v_{\text{гр}} \ll c$. Если же частота ω становится заметно меньше предельной частоты $\frac{1}{\hbar} W_s(0)$, то

$|\mathbf{v}_{\text{гр}}| \sim c$ (например, при $\omega \rightarrow 0$ скорость $\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_{00}}}$, где $\epsilon_{00} = \text{const}$ — статическая проницаемость) и величина показателя поглощения $\chi(\omega, \mathbf{s})$ резко падает. Уменьшение величины $\chi(\omega, \mathbf{s})$ связано, кроме того, и с тем, что при $\omega \ll \frac{1}{\hbar} W(0)$ и в то же время вдали от других резонансов нормальные волны в среде уже сравнительно мало отличаются от состояний поперечных фотонов и слабо взаимодействуют с фононами. Отметим, что именно в этой области частот при расчете $\chi(\omega, \mathbf{s})$ может быть использовано упоминавшееся ранее второе приближение теории возмущений, определяющее вероятность комбинационного рассеяния с образованием фононов.

Оценки показывают [121], что интервал частот, где при расчете $\chi(\omega, \mathbf{s})$ существен учет запаздывания, тем шире, чем больше сила осциллятора перехода, и иногда достигает величины порядка 100 см^{-1} . Таким образом, описанный выше метод с использованием формулы (14.22) в первом приближении действительно позволяет учесть эффект длинноволнового края. При этом, однако, остается неучтенным влияние затухания на групповую скорость и вообще на зависимость $n(\omega)$, а также остается найденным в соответствующем приближении комплексный тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Определение этого тензора было проведено в работе [51] с использованием метода функций Грина. Мы не будем здесь излагать работу [51], а ограничимся лишь указанием тех изменений в выражении для $\tilde{n}^2(\omega, \mathbf{s})$, которые возникают по сравнению с выражением для $\tilde{n}^2(\omega, \mathbf{s})$, полученным методом теории возмущений в § 12 и п. 14.1. Как уже указывалось в § 12, для определения величин $\tilde{n}^2(\omega, \mathbf{s})$ достаточно знать тензор $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$. Учет запаздывающего взаимодействия, в соответствии с [51], приводит к тому, что тензор $\epsilon_{\perp, ij}(\omega, \mathbf{k})$ сохраняет вид $\epsilon_{\perp, ij} = \delta_{ij} + 4\pi b_{ij} \eta_{ij}$, причем тензор b_{ij} определяется формулой (14.16), в которой, однако, вместо $\text{Im} V_{mm}^a(-\omega)$ стоит величина мнимой добавки к энергии $\hbar\omega = W(\mathbf{k})$, которая в первом приближении может быть найдена с использованием приближенной процедуры (см. [121]) и фигурирует в соотношении (14.22). Это соотношение ока-

зывается справедливым, как показано в [51], с точностью до линейных по $\delta W(\mathbf{k})$ слагаемых. Отсылая читателя за подробностями непосредственно к работе [51], заметим, что экспериментальное изучение длинноволнового края может оказаться удобным средством изучения формы экситонной зоны при малых $|\mathbf{k}|$ просто потому, что в области длинноволнового края поглощение света значительно слабее, чем в основной полосе поглощения.

§ 15. Некоторые вопросы электродинамики сред с пространственной дисперсией

15.1. Комбинационное рассеяние рентгеновских лучей и света с образованием экситонов. Измеряя показатель преломления $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$ для данной нормальной волны типа l , мы находим зависимость $\omega_l(\mathbf{k})$, поскольку $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}$. Вместе с тем энергия реального экситона, соответствующего нормальной волне, равна $\hbar\omega_l(\mathbf{k})$, и, очевидно, функцию $\omega_l(\mathbf{k})$ можно найти и неоптическими методами, используя различные процессы рассеяния и т. д. Применение неоптических методов для изучения экситонов представляет особенно большой интерес в связи с теми трудностями, с которыми встречается оптика кристаллов при исследовании ряда эффектов пространственной дисперсии.

Если экситон по своему характеру существенно связан с колебаниями ионов, как это и имеет место в ионных кристаллах для так называемых оптических колебаний, то эффективным методом исследования оказывается изучение неупругого рассеяния нейтронов [122] и эффекта Мёссбауэра [123]. В случае же экситонов «электронного» типа, слабо связанных с колебаниями решетки, можно надеяться на использование других способов, таких, в частности, как измерение дискретных потерь энергии при прохождении электронами тонких слоев [124] и изучение комбинационного (неупругого) рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах. Именно на последнем явлении мы здесь и остановимся [226].

Речь идет, очевидно, об измерении частоты ω'_r рентгеновских лучей, рассеянных под углом Φ от кристалла с образованием реального экситона (частота падающего излучения равна ω , Φ — угол между волновыми векторами \mathbf{k}'_r и \mathbf{k}_r рас-

сеянной и падающей волн). Из законов сохранения (поглощением экситонов здесь пренебрегаем, оно будет приводить к размазыванию картины) следует

$$\omega = \omega_r - \omega', \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_r - \mathbf{k}'. \quad (15.1)$$

Здесь $\omega \equiv \omega_l$ и \mathbf{k} — частота и волновой вектор экситона. Для длинноволновых экситонов ($k = \frac{2\pi}{\Lambda} \ll \frac{2\pi}{a}$, где a — постоянная решетки) из соотношений (15.1) находим

$$2\Lambda \sin \frac{\Phi}{2} = \lambda_r = \frac{2\pi c}{\omega_r}. \quad (15.2)$$

Здесь учтено, что для рентгеновских лучей $n(\omega_r) \simeq n(\omega') \simeq 1$.

В силу анизотропии при данном угле Φ и определенной ориентации кристалла частота ω зависит, вообще говоря, и от азимутального угла (т. е. от направления вектора \mathbf{k} при данном Φ). Кроме того, разумеется, частоты $\omega(\mathbf{k})$ различны для экситонов разного типа, например отличающихся значением дискретного квантового числа s (см. п. 12.2).

При $\lambda_r \sim 1 \div 3 \text{ \AA}$ для наименьших доступных углов $\Phi \sim 10'$ длина волны экситона $\Lambda = \frac{\lambda_r}{\Phi} = 3 \div 10 \cdot 10^{-6} \text{ см}$, тогда как

при $\Phi \sim 1 \div 3^\circ$ $\Lambda = 2 \cdot 10^{-7} \div 2 \cdot 10^{-6} \text{ см}$ или $k = \frac{2\pi}{\Lambda} \sim$

$\sim 3 \cdot 10^6 \div 3 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$. Типичные для «электронных» экситонов значения энергии лежат в пределах $\hbar\omega \sim 1 \div 5 \text{ эв}$, а ширины соответствующих им энергетических зон составляют величины $\sim 0,01 \div 1 \text{ эв}$ *). В то же время разрешение рентгеноспектральной аппаратуры по энергиям достигает только $\sim 0,3 \text{ эв}$ (при $\lambda_r \sim 3 \text{ \AA}$), что заметно лимитирует возможности метода. Потому только для экситонов с $\hbar\omega \gtrsim 1 \text{ эв}$ и с шириной зоны $\gtrsim 0,5 \text{ эв}$ можно надеяться на получение ценной информации о функции $\omega(\mathbf{k})$, если только интенсивность комбинационного рассеяния достаточно велика.

*) Для некоторого сравнения укажем, что при рассеянии на свободных электронах изменение энергии рентгеновского фотона $\hbar\omega \simeq (\hbar\omega_r/2mc^2) \Phi^2 \hbar\omega_r$ при $\Phi \sim 1^\circ$ и $\lambda_r \sim 3 \text{ \AA}$ составляет $\hbar\omega \sim 4 \cdot 10^{-4} \text{ эв}$.

Условия излучения (15.1) можно записать в форме, отличной от (15.2). Именно, для коротковолнового (рентгеновского) излучения будем считать среду изотропной и характеризовать ее показателем преломления $n_0(\omega_r)$. Для рассматриваемых длинноволновых экситонов $n = n_l(\omega, \mathbf{s})$, где $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$. Далее, как всегда.

$$\mathbf{k}_r = \frac{\omega_r}{c} n_0(\omega_r) \mathbf{s}_0,$$

$$\mathbf{k}'_r = \frac{\omega'_r}{c} n_0(\omega'_r) \mathbf{s}'_0, \quad \mathbf{k} = \frac{\omega}{c} n_l(\omega, \mathbf{s}) \mathbf{s}.$$

Тогда из (15.1) для угла θ_l между \mathbf{k} и \mathbf{k}_r получаем

$$\begin{aligned} \cos \theta_l &= \frac{\omega_r n_0(\omega_r)}{\omega n_l(\omega, \mathbf{s})} - \frac{\omega'_r n_0(\omega'_r)}{\omega n_l(\omega, \mathbf{s})} \sqrt{1 - \left[\frac{\omega n_l(\omega, \mathbf{s})}{\omega'_r n_0(\omega'_r)} \right]^2} \sin^2 \theta_l = \\ &= \frac{\omega_r^2 n_0^2(\omega_r) - \omega'^2 n_0^2(\omega'_r) + \omega^2 n_l^2}{2\omega_r n_0(\omega_r) \omega n_l}. \end{aligned} \quad (15.3)$$

Если $\omega \ll \omega_r$, то

$$\cos \theta_l \simeq \frac{d\omega_r n_0(\omega_r)}{d\omega_r} = \frac{c}{n_l(\omega, \mathbf{s}) v_{гр}(\omega_r)}. \quad (15.4)$$

Условие (15.4) совпадает с условием черенковского излучения (см. (15.20)) для частицы, движущейся со скоростью $v = v_{гр}(\omega_r)$. В данном случае тоже можно говорить о черенковском излучении (излучается экситон, т. е. фотон в среде с частотой ω), которое создается не частицей, а коротковолновым излучением (фотоном) с частотой ω_r . Тот факт, что при этом вместо скорости частицы v фигурирует групповая скорость $v_{гр}(\omega_r)$, имеет простой физический смысл. В самом деле, выражения (15.2) — (15.4) представляют собой условие соблюдения законов сохранения, или, на классическом языке, условие интерференции (классическая картина здесь вполне адекватна задаче, поскольку квантовая постоянная \hbar в формулы не входит). Очевидно, эти условия одинаковы для любого излучателя — заряда, диполя, пакета волн (импульса) и т. д. Интенсивность же излучения, напротив, существенно зависит от характера излучателя. В частности, в рамках линейной электродинамики соблюдается принцип суперпозиции, и электромагнитное поле при своем распро-

странении в среде не может породить черенковское излучение, т. е. соответствующая интенсивность равна нулю. Но при учете нелинейности пакет волн, очевидно, эквивалентен некоторому излучателю, который движется в среде со скоростью, равной скорости пакета, т. е. с групповой скоростью $v_{гр}$.

Итак, обсуждаемое излучение экситонов рентгеновскими фотонами можно считать одним из видов черенковского излучения (из дальнейшего ясно, что интенсивность этого излучения отлична от нуля лишь при учете нелинейности).

Вычисление интенсивности или эффективного сечения для обсуждаемого процесса особенно просто в предельном случае, когда частота рентгеновского излучения велика по сравнению со всеми собственными частотами среды. В этом случае, как известно (см., например, [1]), эффективное сечение для когерентного рассеяния неполяризованного излучения определяется формулой

$$d\sigma = r_0^2 \frac{1 + \cos^2 \Phi}{2} \left| \int N_0(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|^2 d\Omega, \quad (15.5)$$

где $N_0(\mathbf{r})$ — средняя по времени электронная концентрация, $r_0 = e^2/mc^2$, $d\Omega = \sin \Phi d\Phi d\varphi$.

При квантовомеханическом подходе этот результат получается, если в гамильтониане задачи использовать в качестве энергии взаимодействия выражение $(e^2/2mc^2) N_0(\mathbf{r}) A^2(\mathbf{r})$, где A — векторный потенциал поля излучения.

При рассмотрении комбинационного рассеяния с участием электромагнитной волны в среде (экситона) концентрацию $N(\mathbf{r})$ уже нельзя считать заданной и можно написать:

$$\left. \begin{aligned} N(\mathbf{r}) &= N_0(\mathbf{r}) + N'(\mathbf{r}), \\ 4\pi e N'(\mathbf{r}) &= \operatorname{div} \mathbf{E}_l = i(\mathbf{k}\mathbf{e}) E_l^0 \exp [i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_l t)]. \end{aligned} \right\} (15.6)$$

Здесь

$$\mathbf{E}_l(\mathbf{r}) = eE_l^0 \exp [i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_l t)]$$

— электрическое поле в рассматриваемой нормальной волне (экситоне) сорта l (единичный вектор \mathbf{e} характеризует поляризацию волны). Энергия, связанная с возбуждением этой волны, может быть представлена в виде энергии возбуждения осциллятора

$$a_l(\mathbf{k}) E_l^* E_l V = (p_l^* p_l + \omega_l^2 q_l^* q_l) = \hbar \omega_l n, \quad (15.7)$$

где последнее выражение отвечает квантованию ($n=0, 1, 2, \dots$), V — объем кристалла, а коэффициент $a_l(\mathbf{k})$ может быть вычислен при рассмотрении энергии системы.

Энергия взаимодействия с рентгеновским излучением теперь равна (см. (15.6) и (15.7))

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{2mc^2} [N_0(\mathbf{r}) + N'(\mathbf{r})] A^2(\mathbf{r}) &= \\ &= \frac{e^2}{2mc^2} \left\{ N_0(\mathbf{r}) + \frac{i(\mathbf{k}\mathbf{e}) q_l^0 V \sqrt{2}}{4\pi e V \sqrt{V} a_l} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_l t)} \right\} A^2(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (15.8)$$

Если квантовое число $n \gg 1$, задача является классической и сводится к рассеянию поперечных электромагнитных (рентгеновских) волн на волнах (экситонах), имеющих продольную составляющую поля*). Поскольку в кристаллах в равновесном начальном состоянии экситонов практически нет, при рассеянии следует рассматривать переход в экситонной подсистеме из состояния $n=0$ в состояние с $n=1$ (см. (15.7)). Для такого перехода матричный элемент

$$(0 | q_l e^{i\omega_l t} | 1) = \sqrt{\hbar/2\omega_l}.$$

При этом задачу о рассеянии рентгеновских лучей заново решать не нужно, поскольку, исходя из (15.8) с $q_l=0$, получаем формулу (15.5), а расчет при $q_l \neq 0$ по существу не изменится. Таким образом, из (15.5) и (15.8) сразу находим сечение для комбинационного рассеяния:

$$\begin{aligned} d\sigma_k &= r_0^2 \frac{1 + \cos^2 \Phi}{2} (\mathbf{k}\mathbf{e})^2 \frac{V \hbar \omega_l}{4\pi e^2 a_l} d\Omega = \\ &= r_0^2 \frac{1 + \cos^2 \Phi}{2} (\mathbf{k}\mathbf{e})^2 \frac{\hbar \omega_l N_0 V}{4\pi a_l m \omega_0^2} d\Omega, \end{aligned} \quad (15.9)$$

где $\omega_0^2 = (4\pi e^2/m) N_0$ — плазменная частота и N_0 — средняя электронная концентрация.

*) Разумеется, такое рассеяние не ограничивается рассматриваемым диапазоном волн. Речь может идти, например, в случае изотропной плазмы о рассеянии поперечных волн на продольных или для магнитоактивной плазмы о рассеянии одних нормальных волн на других, лишь бы эти последние не были строго поперечными (см. [6], § 39).

При некогерентном рассеянии на свободных электронах в (15.5)

$$\left| \int N_0(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|^2 = N_0 V,$$

так как $N_0(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$. Поэтому отношение сечения (15.9) к сечению рассеяния на свободных электронах $d\sigma_0$ равно

$$\frac{d\sigma_k}{d\sigma_0} = \frac{(\mathbf{k}\mathbf{e})^2 \hbar\omega_l}{4\pi a_l m\omega_0^2} = \left(\frac{\hbar\omega_r}{mc^2} \right) \left(\frac{\omega_r\omega_l}{\omega_0^2} \right) \frac{\sin^2(\Phi/2) \cos^2\varphi}{\pi a_l}, \quad (15.10)$$

где φ — угол между \mathbf{k} и \mathbf{e} ; кроме того, использовано соотношение (15.1) $k^2 = (2\omega_r/c)^2 \sin^2\Phi/2$.

Если вектор \mathbf{k} направлен вдоль соответствующих осей симметрии, а в кубических кристаллах (при пренебрежении пространственной дисперсией) — вдоль любых направлений, то нормальные волны (\mathbf{k} , l) делятся на поперечные и продольные. В поперечных волнах $(\mathbf{k}\mathbf{e}) = 0$, и в рассматриваемом приближении комбинационное рассеяние отсутствует (см. (15.9) и (15.10)), тогда как для продольных волн $d\sigma_k \neq 0$. Для продольных (плазменных) волн в газе свободных электронов (плазме) при пренебрежении пространственной дисперсией (это означает, что $\omega_0^2 \gg v_0^2 k^2$, где v_0 — некоторая средняя скорость электронов) частота $\omega_l = \omega_0$ и $a_l = 1/2\pi$ (см., например, [6]). В случае же произвольной оптически изотропной среды (металлы, диэлектрики) с достаточно слабым поглощением в рассматриваемой области частот для длинных продольных волн

$$\epsilon_0(\omega_l) = 0, \quad a_l = \frac{\omega_l}{4\pi} \left(\frac{d\epsilon_0}{d\omega} \right)_{\omega=\omega_l}, \quad (15.11)$$

где $\epsilon_0(\omega)$ — диэлектрическая проницаемость среды (для свободных электронов $\epsilon_0 = 1 - \omega_0^2/\omega^2$).

В случае свободных электронов имеем

$$d\sigma_{k,0}/d\sigma_0 = \hbar k^2 / 2m\omega_0 = 2(\hbar\omega_r/mc^2) \frac{\omega_r}{\omega_0} \sin^2 \frac{\Phi}{2}, \quad (15.10a)$$

Эта формула эквивалентна формуле, получающейся при классическом расчете рассеяния на плазменной волне, плотность

заряда в которой изменяется по закону $N' \exp [i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_0 t)]$, где

$$|N'| = \sqrt{\hbar k^2 N_0 / 2m\omega_0 V}.$$

Такое значение амплитуды получается, если воспользоваться соотношением (15.4), и величину напряженности электрического поля найти из соотношения $E^* E V / 2\pi = \hbar\omega_0$. При $\Phi \simeq 30^\circ$, $\hbar\omega_r \sim 5 \cdot 10^3$ эв ($\lambda_r \sim 3\text{Å}$) и $\hbar\omega_0 \sim 10$ эв отношение $d\sigma_{k,0}/d\sigma_0 \sim 10^{-2}$.

Оценим теперь величину $d\sigma_k/d\sigma_0$ (см. (15.10)) для случая связанных электронов в кубических кристаллах. Используя соотношение (12.14a)

$$\epsilon_0(\omega) = \epsilon_{00} - \frac{8\pi |D_{0,0l}|^2 \omega_{\perp}}{\Delta \hbar (\omega^2 - \omega_{\perp}^2)},$$

где ϵ_{00} определяется вкладом остальных резонансов, в соответствии с (15.11) находим, что

$$a_l = \frac{\omega_{\parallel}}{4\pi} \left(\frac{d\epsilon_0}{d\omega} \right)_{\omega=\omega_{\parallel}} = \frac{\epsilon_{00}^2 \omega_{\parallel}^2 \Delta \hbar}{16\pi^2 |D_{0,0l}|^2 \omega_{\perp}},$$

где ω_{\parallel} — корень уравнения $\epsilon_0(\omega) = 0$. Подставляя это выражение в (15.10), получаем

$$\frac{d\sigma_k}{d\sigma_0} = 16\pi \left(\frac{\omega_r^2}{\omega_0^2} \right) \left(\frac{|D_{0,0l}|^2}{mc^2 \Delta} \right) \sin^2 \frac{\Phi}{2}. \quad (15.12)$$

При получении этой формулы использовано значение $\varphi = 0$ (продольные волны), а также принято $\frac{\omega_{\perp}}{\omega_{\parallel}} \approx 1$, что справедливо при определении $d\sigma_k/d\sigma_0$ в первом приближении по силе осциллятора. Разумеется, формулу (15.12) можно получить в рамках последовательной микротeorии. При этом, однако, приходится использовать определенные модельные представления для экситонов (см. [226]). При неупругом рассеянии рентгеновских лучей в анизотропном кристалле вместо (15.12) имеет место ее естественное обобщение [226]:

$$\frac{d\sigma_k}{d\sigma_0} = 16\pi \left(\frac{\omega_r^2}{\omega_0^2} \right) \left(\frac{|D_{0,0l}|^2}{mc^2 \Delta} \right) \sin^2 \frac{\Phi}{2} \cos^2 \varphi.$$

Итак, при комбинационном рассеянии рентгеновских лучей с образованием дипольных экситонов сечение процесса оказывается пропорциональным силе осциллятора перехода. Например, в молекулярных кристаллах наиболее интенсивные дипольные переходы обнаружены в антрацене (второй электронный переход [88]), для которого $|D_{0;0l}|/e \approx 3 \cdot 10^{-8}$ см. Для этого кристалла, полагая $\Delta \approx 125 \cdot 10^{-24}$ см³, $\Phi \sim 3^\circ$, $\cos^2 \varphi \sim 1/3$, $\omega_r/\omega_0 \approx 5 \cdot 10^2$, находим, что $d\sigma_k/d\sigma_0 \approx 4 \cdot 10^{-3}$. Таким образом, из проведенных оценок, по-видимому, следует, что интенсивность комбинационного рассеяния достаточна для уверенного ее измерения, если только соответствующие силы осциллятора не слишком малы.

Выше предполагалось, что частота экситона ω очень мала по сравнению с частотой падающего излучения ω_r . Но, разумеется, можно рассматривать и более общий случай комбинационного рассеяния, когда неравенство $\omega \ll \omega_r$ не выполняется или плохо выполняется. Это может иметь место, например, при комбинационном рассеянии ультрафиолетового или видимого света с образованием двух фотонов со сравнимыми частотами. Общая формула (15.1), а в известных пределах и (15.3) при этом сохраняют силу, но условиями излучения (15.2) и (15.4) пользоваться уже нельзя (на квантовом языке это значит, что недопустимо пренебрегать отдачи — изменением импульса падающего фотона). С другой стороны, если речь идет о рассеянии видимого света на колебаниях решетки, причем частота света $\omega \gg \omega_l(\mathbf{k})$, ситуация подобна изложенной выше, так что для рассеяния на дипольных колебаниях может быть использована для оценок интенсивности формула (15.9), если только частота ω лежит в области прозрачности кристалла. В том же случае, когда указанное неравенство $\omega \gg \omega_l$ не выполняется либо когда частота света не лежит в области прозрачности, картина оказывается более сложной и ее анализ требует более подробного рассмотрения (см. [107]). Заметим также, что вопрос об учете пространственной дисперсии возникает и при исследовании рассеяния света в кристаллах вблизи точек фазового перехода второго рода [126, 127].

15.2. Потери энергии и черенковское излучение заряда, равномерно движущегося в среде с пространственной дисперсией. Одним из методов наблюдения новых волн,

появляющихся при учете пространственной дисперсии, может служить их возбуждение путем использования эффекта Вавилова — Черенкова. В этой связи возникает более общая проблема теоретического изучения энергетических потерь заряда, движущегося в среде с пространственной дисперсией.

Пусть в анизотропной немагнитной среде с произвольной пространственной дисперсией движется электрон со скоростью \mathbf{v} .

Система уравнений поля для этого случая имеет следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0, & \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \mathbf{D} &= 4\pi e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{vt}), \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} e\mathbf{v}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{vt}), \\ D_j(\mathbf{r}, t) &= \int \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{k}. \end{aligned} \right\} (15.13)$$

Переходя в этой системе уравнений к фурье-компонентам величин \mathbf{E} , \mathbf{D} , \mathbf{B} , а затем исключая векторы \mathbf{D} и \mathbf{B} , находим

$$\left. \begin{aligned} E_i(\mathbf{r}, t) &= \frac{ie^2}{2\pi^2 c^2} \int (\mathbf{k}\mathbf{v}) A_{ij}^{-1} \mathbf{v}_j e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{vt})} d\mathbf{k}, \\ A_{ij} &= k^2 \eta_{ij} - \frac{(\mathbf{k}\mathbf{v})^2}{c^2} \epsilon_{ij}(\mathbf{k}\mathbf{v}, \mathbf{k}), \end{aligned} \right\} (15.14)$$

где $\eta_{ij} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}$ — тензор проектирования. Интересующие нас потери энергии движущегося заряда определяются работой, производимой силой торможения, действующей на частицу со стороны создаваемого ею поля (см. [1], гл. 12). Взяв значение поля в той точке, в которой находится электрон, т. е. при $\mathbf{r} = \mathbf{vt}$, и воспользовавшись тождеством

$$\left. \begin{aligned} A_{ij}^{-1} \mathbf{v}_j &\equiv B_{ij}^{-1} \mathbf{v}_j + \frac{(B_{lm}^{-1} k_l k_m) B_{ij}^{-1} k_j}{1 - (B_{st}^{-1} k_s k_t)}, \\ B_{ij} &= k^2 \delta_{ij} - \frac{(\mathbf{k}\mathbf{v})^2}{c^2} \epsilon_{ij}(\mathbf{k}\mathbf{v}, \mathbf{k}), \end{aligned} \right\} (15.15)$$

находим следующее значение полных потерь, отнесенных к единице длины пути заряда [22в]:

$$R = -\frac{ie^2}{2\pi^2vc} \int (k\mathbf{v}) \times \frac{(B_{ij}^{-1}v_i k_j)^2 - (B_{lm}^{-1}v_l v_m)(B_{rs}^{-1}k_r k_s) + (B_{nk}^{-1}v_n v_k)}{1 - (B_{sv}^{-1}k_s k_v)} d\mathbf{k}. \quad (15.16)$$

В нерелятивистском приближении формула (15.16) упрощается и принимает следующий вид:

$$R = -\frac{ie^2}{2\pi^2v} \int \frac{(k\mathbf{v})}{(\epsilon_{lm} k_l k_m)} d\mathbf{k}.$$

Более подробно остановимся на величине R (15.16) в случае изотропной негиротропной среды. Полагая, в соответствии с (5.1) (см. также (1.48)),

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{\perp}(\omega, k) \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) + \epsilon_{\parallel}(\omega, k) \frac{k_i k_j}{k^2}, \quad \tilde{\epsilon} = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp},$$

находим, что

$$R = -\frac{ie^2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega d\omega \int_0^{\infty} k dk \times \frac{v^{-2} - \epsilon_{\parallel}(\omega, \sqrt{k^2 + \omega^2/v^2})/c^2 + \frac{\omega^2}{\omega^2 + k^2 v^2} \tilde{\epsilon}(\omega, \sqrt{k^2 + \omega^2/v^2})}{\epsilon_{\parallel}(\omega, \sqrt{k^2 + \omega^2/v^2}) \{k^2 + \omega^2 [v^{-2} - c^{-2} \epsilon_{\perp}(\omega, \sqrt{k^2 + \omega^2/v^2})]\}}. \quad (15.17)$$

Из формулы (15.17) следует, что нули выражения, стоящего в фигурных скобках в знаменателе (и, следовательно, потери на возбуждение поперечных волн; см. [1], § 86), могут возникнуть в том случае, если выполнено условие

$$v > \frac{c}{n_l(\omega)}, \quad (15.18)$$

где коэффициенты преломления нормальных волн $n_l(\omega)$ определяются из уравнения

$$n^2 = \epsilon_{\perp} \left(\omega, \frac{\omega}{c} n \right). \quad (15.19)$$

Если пространственной дисперсией пренебречь, то уравнение (15.19) для волн с любой поляризацией определяет единственную функцию $n(\omega)$. При учете пространственной дисперсии это уравнение в окрестности резонанса $\epsilon_{\perp}(\omega, 0)$ имеет два решения $n_l = n_l(\omega)$, $l = 1, 2$, и общая картина потерь на черенковское излучение, вообще говоря, изменяется [22в].

Пусть θ — угол между направлением движения частицы и направлением излучения. Тогда, как известно (см., например, [23]),

$$\cos \theta_l = \frac{c}{v n_l(\omega)}, \quad (15.20)$$

и мы приходим к выводу, что черенковское излучение с частотой ω при учете пространственной дисперсии среды распространяется по поверхности двух конусов с углами раствора θ_l , $l = 1, 2$, определяемыми формулой (15.20).

Рассмотрим распределение интенсивностей черенковского излучения по этим конусам.

Производя интегрирование в формуле (15.17) с соответствующим обходом полюсов в комплексной плоскости k (см. [1], § 86), находим, что потери энергии на излучение Вавилова — Черенкова в интервале частот ω , $\omega + d\omega$ определяются выражением

$$dR = \frac{e^2}{c^2} \sum_l \left(1 - \frac{c^2}{v^2 n_l^2(\omega)} \right) \left| 1 - \frac{1}{2n_l(\omega)} \frac{\partial}{\partial n_l} \epsilon_{\perp} \left(\omega, \frac{\omega}{c} n_l \right) \right|^{-1} \omega d\omega. \quad (15.21)$$

Эта формула дает полную интенсивность черенковского излучения в указанном интервале частот в виде суммы интенсивностей, распределенных по отдельным конусам (15.20).

Если частота черенковского излучения лежит вдали от собственных частот среды, решение уравнения (15.19) можно искать, используя соотношение (см. (5.1))

$$\epsilon_{\perp}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_0(\omega) - \alpha_{\perp}(\omega) n^2.$$

В этом случае на основе (15.19) находим единственное решение этого уравнения:

$$n^2(\omega) = \frac{\epsilon_0(\omega)}{[1 + \alpha_1(\omega)]},$$

и следовательно, черенковское излучение распределено по поверхности одного конуса. Поскольку в рассматриваемой области спектра $|\alpha(\omega)| \ll 1$, учет пространственной дисперсии среды не оказывает практически никакого влияния на черенковское излучение электрона. Иное положение может иметь место для частот черенковского излучения в окрестности экситонной полосы поглощения, поскольку при этом уравнение (15.19) имеет два корня. Если использовать соотношение (см. (5.3))

$$\frac{1}{\epsilon_{\perp}(\omega, \mathbf{k})} = \frac{1}{\epsilon_0(\omega)} + \beta_{\perp}(\omega) n^2,$$

то

$$1 - \frac{1}{2n} \frac{\partial}{\partial n} \epsilon_{\perp} \left(\omega, \frac{\omega}{c} n \right) = 1 + \beta_{\perp}(\omega) n^4$$

и, следовательно, полная интенсивность черенковского излучения в интервале частот $\omega, \omega + d\omega$ определяется выражением

$$dR = \frac{e^2}{c^2} \sum_{l=1,2} \frac{1 - \frac{c^2}{v^2 n_l^2(\omega)}}{|1 + \beta_{\perp}(\omega) n_l^4(\omega)|} \omega d\omega. \quad (15.22)$$

В той области частот, где коэффициенты преломления n_1 и n_2 близки, учет пространственной дисперсии весьма существен. В этом случае излучение распределено по двум конусам, причем соответствующие интенсивности оказываются одного порядка. При удалении частоты от области резонанса один из корней уравнения (15.19) возрастает, и вклад интенсивности излучения, соответствующей аномальному конусу, резко спадает. Аналогичная ситуация осуществляется и для гиротропных кубических кристаллов, где интенсивность черенковского излучения в окрестности дипольных экситонных линий распределена между тремя конусами излучения.

В рассматриваемой изотропной среде, как ясно уже из соображений симметрии, групповая скорость может быть направлена лишь параллельно или антипараллельно волновому вектору \mathbf{k} . В п. 7.2 было показано, что для обычных волн вне полосы поглощения вектор групповой скорости всегда параллелен \mathbf{k} , т. е. $(\mathbf{v}_{гр}, \mathbf{k}) > 0$, тогда как для новой волны возможен случай $(\mathbf{v}_{гр}, \mathbf{k}) < 0$. Это обстоятельство оказывается

особенно существенным для выхода из кристалла в вакуум новых световых волн, возбуждаемых движущимся в кристалле зарядом.

Рассмотрим этот вопрос более подробно (см. также [108, 110]). Предположим, что быстрая заряженная частица движется

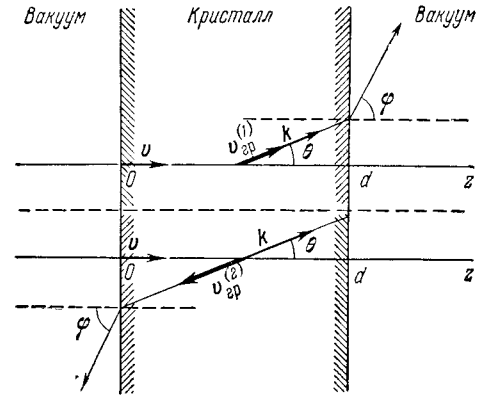


Рис. 22. Направление распространения волн черенковского излучения при учете пространственной дисперсии для обычной (индекс (1)) и новой (индекс (2)) волн.

из вакуума ($z < 0$) вдоль оси z и проходит через плоскопараллельную пластинку, ограниченную плоскостями $z = 0$ и $z = d$ (рис. 22). Для черенковской волны с частотой ω и коэффициентом преломления $n_l(\omega)$ в силу (15.20) $\cos \theta_l = c/vn_l(\omega)$. Кроме того, из условия преломления волны на поверхности кристалла $n_l(\omega) = \sin \varphi_l / \sin \theta_l$, где φ_l — угол между направлением распространения волны в вакууме и осью z . Поскольку $\sin^2 \varphi_l \leq 1$ и в то же время

$$\begin{aligned} \sin^2 \varphi_l &= n_l^2(\omega) \sin^2 \theta_l = n_l^2(\omega) [1 - \cos^2 \theta_l] = \\ &= n_l^2(\omega) \left[1 - \frac{c^2}{n_l^2(\omega) v^2} \right] = n_l^2(\omega) - \frac{c^2}{v^2}, \end{aligned} \quad (15.23)$$

приходим к заключению, что из кристалла в вакуум могут выйти лишь такие черенковские волны, для которых

$$n_l^2(\omega) \leq 1 + \frac{c^2}{v^2}. \quad (15.24)$$

Неравенство (15.24) вместе с условием возникновения черенковского излучения $n_i^2(\omega) \geq \frac{c^2}{v^2}$ (см. (15.20)) определяет частоты тех черенковских волн, которые выходят из кристалла

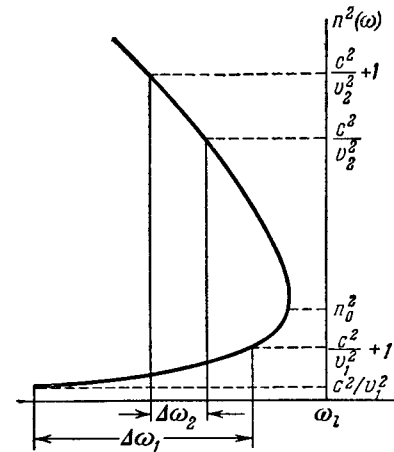


Рис. 23. Спектр черенковского излучения при учете пространственной дисперсии в зависимости от скорости заряда. В качестве примера выбраны два значения скорости: при $v = v_1$ выполняется неравенство $n_0^2 > 1 + \frac{c^2}{v_1^2}$.

а при $v = v_2$, напротив,
 $n_0^2 < \frac{c^2}{v_2^2} < 1 + \frac{c^2}{v_2^2}$.

выполняется только для обычной волны. Поскольку у этой волны $v_{гр} s > 0$, со стороны выхода заряда из кристалла ($z > d$) будет наблюдаться сравнительно широкий спектр черенковского излучения. При понижении скорости заряда этот спектр сужается и при $n_0^2 < 1 + \frac{c^2}{v^2}$ условие (15.25) в некоторой области частот выполняется для новой волны. Как уже указывалось, для этой волны $v_{гр} s$ может принимать отрицательные значения. В этом случае черенковское излу-

чение и при благоприятных условиях (достаточно слабое поглощение) могут наблюдаться в вакууме. Из сказанного ясно, что для этих волн

$$\frac{c^2}{v^2} \leq n_i^2(\omega) \leq 1 + \frac{c^2}{v^2}. \quad (15.25)$$

Для того чтобы пояснить, как изменяется при учете пространственной дисперсии спектр выходящих из кристалла волн черенковского излучения в зависимости от скорости заряда, рассмотрим случай изотропной негиротропной среды с $\beta' < 0$ (см. п. 7.2) и без учета поглощения. Если скорость заряда v велика,

так что $\frac{c^2}{v^2} + 1 < n_0^2$ (n_0 — значение n , отвечающее кратному корню, см. рис. 23), то условие (15.25)

чение в виде сравнительно узкой линии излучения появляется уже перед пластиной в области $z < 0$. Поскольку эта линия связана с черенковским возбуждением новой волны, ее экспериментальное наблюдение прямо свидетельствовало бы о существовании такой волны.

Выше, даже для ограниченной среды, речь шла только о черенковском излучении. Между тем при пересечении границы равномерно движущимся зарядом возникает также переходное излучение [125] (о тормозном и некоторых других видах излучения, связанных с изменением движения заряда, мы здесь не говорим)*). Учет пространственной дисперсии в теории переходного излучения обсуждался в работах [109, 110, 128]. При этом в работе [110] было показано, что в области экситонной линии в кристаллах вклад переходного излучения по сравнению с черенковским излучением мал и практически не сказывается на общей картине явления.

Необходимо подчеркнуть, что при обсуждении черенковского излучения мы не принимали во внимание наличие поглощения нормальных волн, которое, вообще говоря, существенно понижает интенсивность вышедшего излучения. Расчеты показывают, что это поглощение велико именно для новых волн. Поэтому успех экспериментальных наблюдений новых волн в данном случае, как, впрочем, и в большинстве других, может быть обеспечен лишь при тщательном выборе объекта наблюдений. В этом смысле особенно перспективными представляются окрестности дипольных экситонных линий поглощения в гиротропных кристаллах при низких температурах.

* При пересечении зарядом границы раздела двух сред могут возбуждаться поверхностные экситоны, рассматривавшиеся в п. 10.10.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При изучении экситонов оптическими методами до сих пор в большинстве случаев проводились лишь измерения поглощения и при этом без анализа вопроса о форме линий поглощения. Такой путь естествен, пока речь идет о самом нахождении более или менее резких возбужденных уровней в кристаллах, о выяснении соответствующих сериальных закономерностей и т. п. Положение здесь, если можно считать кристалл оптически изотропным, вполне аналогично имеющему место при определении атомных уровней в случае газов. Для анизотропной среды эта аналогия также сохраняется, если только заменить обычный газ «ориентированным газом», т. е. совокупностью независимых молекул с фиксированным направлением некоторых осей (речь идет, например, о направлениях нормальных колебаний анизотропного осциллятора). Поскольку в случае слабого поглощения положение линий поглощения определяет частоты $\Omega(\mathbf{k})$ кулоновских экситонов, именно эти частоты и измеряются в опытах, которые мы имеем в виду.

Совершенно очевидно, однако, что при детальном исследовании энергетического спектра кристаллов в области оптических частот приходится сталкиваться с более общей постановкой задачи. С одной стороны, подлежит анализу форма линий поглощения; с другой стороны, помимо поглощения можно и нужно изучать дисперсию, т. е. измерять показатель преломления. Рассмотрением оптически изотропной среды при этом тем более нельзя ограничиться, что кубические кристаллы при учете пространственной дисперсии оптически анизотропны. Другими словами, изучение экситонов оказывается неразрывно связанным как с классической кристаллооптикой, так и кристаллооптикой с учетом пространственной диспер-

сии. В этом направлении уже проведена определенная работа и в области эксперимента, и в области теории, но еще многое предстоит сделать. В частности, заслуживают внимания новые волны в гиротропных и негиротропных кристаллах, дисперсия и поглощение вблизи квадрупольных линий поглощения в кристаллах, влияние на оптические свойства кристаллов внешних электрического и магнитного полей, а также напряжений и деформаций.

Представляют интерес и вопросы о направлении вектора групповой скорости, поверхностных экситонах, комбинационном рассеянии, черенковском излучении с возбуждением экситонов и др.

Для правильного анализа экспериментальных данных и получения из них вполне определенных сведений о свойствах кристалла нужно учитывать и использовать результаты кристаллооптики. Насколько нам известно, эти результаты при учете пространственной дисперсии не были до сих пор изложены достаточно подробно и с единой точки зрения. Мы надеемся, что настоящая книга в некоторой мере решит эту задачу.

Вместе с тем не может быть и речи о том, что в рамках кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии уже исследованы все интересные задачи. Достаточно сказать, что даже в классической кристаллооптике, которая развивается много десятилетий, до сих пор встречаются интересные вопросы и еще недостаточно изученные случаи (упомянем, например, о сингулярных оптических осях). Число кристаллооптических задач, которые можно было бы решать с учетом пространственной дисперсии, очень велико. Однако решение многих таких задач далеко не всегда будет оправдано с точки зрения реальных требований, которые определяются экспериментальными возможностями и ценностью той или иной информации для теории кристаллов. Поэтому, как нам представляется, проводить дальнейшее развитие теории (речь сейчас идет о расчетах, аналогичных изложенным в § 10) в первую очередь нужно в тесной связи с анализом данных и возможностей эксперимента. Впрочем, и вне непосредственной связи с экспериментом вряд ли можно считать излишним исследование влияния слабой пространственной дисперсии на распространение электромагнитных волн в кристаллах разных классов, вблизи оптических осей,

для кристаллических пластинок с различной ориентацией и т. д.

Важный момент, который мы уже неоднократно подчеркивали и упомянем здесь еще раз, состоит в полной необоснованности пренебрежения или противопоставления макроскопической (феноменологической) кристаллооптики, использующей тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, и микроскопической теории. Несомненно, микроскопические расчеты (например, вычисление $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ или $\tilde{n}(\omega, \mathbf{s})$ для той или иной модели) могут дать больше, чем макроскопическая теория (в данном случае кристаллооптика). Действительно, результаты корректного расчета для данной разумной модели не только должны содержать все следствия макротeorии в применении к этой модели, но и позволяют конкретизировать ряд зависимостей, например частотную зависимость $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. При этом, однако, остается неясным, что зависит от данной модели и что должно получиться для любой модели (т. е. вообще не зависит от модели).

В то же время совершенно очевидно, что использование модели или приближения и сопоставление результатов соответствующих расчетов с опытом имеет ценность в первую очередь тогда, когда речь идет о следствиях или моментах специфичных для данной модели, а не о следствиях, являющихся общими и не зависящими от выбора модели. Таким образом, использование макротeorии, вообще говоря, не только целесообразно, но и необходимо для решения вопроса о ценности той или иной модели или приближения. Кроме того, при такой постановке вопроса мы избавляемся от необходимости проводить микрорасчеты для величин, являющихся, по существу, производными от более фундаментальных величин (например, в общем случае целесообразно вычислять $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, а не $\tilde{n}_l(\omega, \mathbf{s})$).

Сказанное, конечно, специфично не только для макро- и микротeorии оптических свойств кристаллов, а имеет общий (и хорошо известный) характер. Но, как уже указывалось ранее, в теории экситонов по ряду причин не было достигнуто гармоничного сочетания макро- и микроподходов. Цель настоящей книги в значительной мере будет достигнута, если этот важный и простой момент окажется в должной степени осознанным.

В результате широкого использования кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии и ее правильного сочетания с микротeorией экситонов дальнейшее развитие исследований в области оптических и некоторых других свойств кристаллов во многом будет облегчено и пойдет более быстрыми темпами. Другая сторона дела связана с тем фактом, что кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии содержит всю классическую кристаллооптику в качестве своего частного случая. Поэтому здание кристаллооптики, которое начало возводиться более столетия назад, может быть достроено только в рамках кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии.

отражении в данной плоскости. Наличие оси n -го порядка означает эквивалентность кристалла при повороте вокруг этой оси на угол $360^\circ/n$. В случае инверсионной оси помимо поворота нужно совершить отражение (инверсию) в начале координат. Вместо инверсионных осей часто пользуются зеркально-поворотными осями: в этом случае вместо

Таблица А

Символы элементов симметрии

Элемент симметрии	Интернациональный символ	Другие обозначения	
Центр симметрии	$\bar{1}$	C	I
Плоскость симметрии	m	P	σ
Поворотные оси			
Ось 1-го порядка	1	L^1	C_1
Ось 2-го порядка	2	L^2	C_2
Ось 3-го порядка	3	L^3	C_3
Ось 4-го порядка	4	L^4	C_4
Ось 6-го порядка	6	L^6	C_6
Инверсионные оси			
Ось 1-го порядка \equiv центр симметрии	$\bar{1}$	$L_i^1 \equiv C$	I
Ось 2-го порядка \equiv плоскость симметрии, перпендикулярная оси . . .	$\bar{2} (\equiv m)$	$L_i^2 \equiv P$	σ_h
Ось 3-го порядка \equiv поворотная ось 3-го порядка + центр симметрии	$\bar{3}$	L_i^3	
Ось 4-го порядка (включает поворотную ось 2-го порядка) . . .	$\bar{4}$	L_i^4	
Ось 6-го порядка \equiv поворотная ось 3-го порядка + перпендикулярная к ней плоскость симметрии . . .	$\bar{6}$	L_i^6	
Зеркально-поворотные оси			
Ось 2-го порядка \equiv центр симметрии	$\bar{6} (\equiv \frac{3}{m})$	$L_i^1 \equiv C$	$S_2 = I$
Ось 4-го порядка		L_4^2	S_4
Ось 6-го порядка		L_6^3	S_6

Приложение I

НЕКОТОРЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ, КАСАЮЩИЕСЯ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ

При использовании тензора диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ кристалл, по существу, считается пространственно однородной (сплошной) средой. Свойства, характеризующие такую среду, часто называют макроскопическими; они зависят только от направления (например, направления волнового вектора света), но не от местоположения. Симметрия кристаллов приводит к эквивалентности ряда направлений — вдоль этих эквивалентных направлений все макроскопические свойства кристаллов строго одинаковы.

Кристаллы могут обладать следующими макроскопическими элементами симметрии: центром симметрии, плоскостями симметрии (зеркальными плоскостями), поворотными осями 1-го, 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков, зеркально-поворотными или инверсионными осями тех же порядков.

При наличии комбинаций всех этих элементов можно считать, что они проходят через одну точку, в связи с чем комбинации макроскопических элементов симметрии, образующие группы, называются точечными группами.

Все кристаллы подразделяются на 32 кристаллографических класса, каждому из которых отвечает своя точечная группа. С другой стороны, кристаллы делятся на кристаллографические системы, или сингонии, в зависимости от симметрии их решетки. Интернациональные символы элементов симметрии указаны в табл. А; там же приведены некоторые другие обозначения.

При наличии центра симметрии свойства кристалла в данном направлении и направлении, ему противоположном, тождественны. Существование плоскости симметрии приводит к эквивалентности кристаллов, получающихся при зеркальном

Таблица Б

Кристаллические классы

Система	Класс		
	элементы симметрии	интернациональный символ	обозначения Шенфлиса
Триклинная	L^1 C	1 $\bar{1}$	C_1 $C_i = S_2$
Моноклинная	L^2 P L^2PC	2 m $2/m$	C_2 $C_{1h} = C_s$ C_{2h}
Ромбическая	$3L^2$ L^22P $3L^23PC$	222 $mm2$ mmm	$D_2 = V$ C_{2v} $D_{2h} = V_h$
Тетрагональная	L^4 L^2_4 L^4PC L^44L^2 L^44P $L^2_2L^22P$ L^44L^25PC	4 4 4/m 422 4mm $\bar{4}2m$ 4/mmm	C_4 S_4 C_{4h} D_4 C_{4v} $D_{2d} = V_d$ D_{4h}
Тригональная (ромбоэдрическая)	L^3 L^3_6C L^33L^2 L^33P $L^3_6L^23PC$	3 $\bar{3}$ 32 3m $\bar{3}m$	C_3 $C_{3i} = S_6$ D_3 C_{3v} D_{3d}
Гексагональная	L^6 L^3P L^6PC L^6L^2 L^66P L^33L^24P L^66L^27PC	6 $\bar{6}$ 6/m 622 6mm $\bar{6}m2$ 6/mmm	C_6 C_{3h} C_{6h} D_6 C_{6v} D_{3h} D_{6h}
Кубическая	$3L^24L^3$ $3L^24L^3_63PC$ $3L^44L^36L^2$ $3L^2_4L^36P$ $3L^44L^3_6L^29PC$	23 $m\bar{3}$ 432 $\bar{4}3m$ $m\bar{3}m$	T T_h O T_d O_h

инверсии производится отражение в плоскости, перпендикулярной оси. Зеркально-поворотные оси n -го порядка обозначаются символом $L_n^{n/2}$ (существуют оси L_2^1 , L_4^2 и L_6^3).

Распределение кристаллических классов по системам (сингониям) и их обозначения указаны в таблице Б.

Иногда кубическую сингонию называют высшей, гексагональная, тригональная и тетрагональная сингонии именуются средними, а ромбическая, моноклинная и триклинная — низшими сингониями.

Обозначения Шенфлиса построены по такому принципу. Буква C (Cyclyus) отвечает существованию одной оси симметрии, причем значок внизу указывает на характер оси (например, в классе C_2 имеется одна ось 2-го порядка). Наличие плоскости симметрии отмечается буквой внизу, причем буква h (horizontal) отвечает плоскости, перпендикулярной оси, а буква v (vertikal) — плоскости, параллельной оси. Таким образом, $C_{3h} = L^3P$ и $C_{3v} = L^33P$. Буквой D обозначены классы, имеющие только оси симметрии, т. е. $D_2 = 3L^2$ и $D_3 = L^33L^2$ (везде цифра перед L или P указывает на число осей или плоскостей). Классы с зеркально-поворотными осями обозначаются буквой S (Spiegelaxe). Остальные обозначения ясны из табл. Б.

Очень наглядно элементы симметрии кристаллических классов изображаются с помощью стереографической проекции (см. [34], табл. 30). На такой проекции удобно указывать также направление обычно выбираемых координатных осей. Последнее уже было сделано в табл. II, находящейся в § 5 настоящей книги.

Приложение II

НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ ТЕОРИИ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП *)

Две точки кристалла или два направления в кристалле называются эквивалентными, если все физические и геометрические свойства кристалла в этих точках или направлениях одинаковы (речь идет о средних статистических свойствах

*) Доказательства целого ряда приведенных утверждений, а также более подробное и полное изложение теории групп имеется в [68, 133].

кристалла, который находится в равновесном состоянии). Совокупность элементов симметрии кристалла, т. е. совокупность операций, которые переводят каждую точку кристалла в эквивалентную ей и каждое направление в кристалле в эквивалентное ему, образует группу симметрии кристалла G . Всего для немагнитной среды существует 230 различных кристаллических групп, которые обычно называют пространственными группами.

Совокупность всех поворотов и зеркальных поворотов, которые переводят каждое направление в ему эквивалентное, образует точечную группу кристаллического класса F (ее элементы будем обозначать буквой r), характеризующую симметрию направлений в кристалле. Всякий элемент g группы кристалла G можно представить в виде

$$g = T_a r, \quad (\text{II. 1})$$

где T_a есть операция сдвига на вектор a , и элементы r , соответствующие элементам g , как уже сказано, образуют точечную группу — группу кристаллического класса F . Фигурирующий в (II. 1) вектор трансляции a равен

$$\begin{aligned} a &= m + \alpha, \quad m = m_1 a_1 + m_2 a_2 + m_3 a_3, \\ \alpha &= \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 + \alpha_3 a_3, \end{aligned} \quad (\text{II. 2})$$

где a_1, a_2, a_3 — векторы элементарной ячейки, m_1, m_2, m_3 — целые числа, равные $0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ — дробные положительные числа, которые меньше единицы.

В данной пространственной группе G каждому элементу r группы F соответствует определенный вектор α , тогда как значения m_1, m_2 и m_3 могут быть любыми. Из сказанного следует, что любой элемент пространственной группы кристалла может быть представлен в виде произведения операции трансляции, отвечающей трансляции на целочисленный вектор решетки $m = m_1 a_1 + m_2 a_2 + m_3 a_3$, на один из «поворотных элементов» $T_{\alpha_1} r_1, T_{\alpha_2} r_2, \dots, T_{\alpha_N} r_N$, где N — число элементов в точечной группе кристаллического класса F . Если пространственная группа кристалла не содержит существенных винтовых осей и плоскостей скольжения (это означает, что

все $\alpha_i = 0$), то поворотные элементы *) $g = T_a r$ группы симметрии кристалла G совпадают с элементами r группы F и, следовательно, образуют точечную группу. Если же не все $\alpha_i = 0$, то группа F , очевидно, не является подгруппой группы G .

Поскольку произведение операций трансляции на целочисленный вектор решетки также является операцией трансляции на целочисленный вектор решетки (при этом $T_n \cdot T_m = T_{n+m}$), ясно, что трансляции на целочисленный вектор решетки образуют подгруппу пространственной группы кристалла G .

Говорят, что задано представление A группы G в некотором линейном пространстве L , если каждому элементу g группы G отвечает оператор $A(g)$ (этот оператор может быть задан матрицей) в пространстве L , так что произведению элементов группы отвечает произведение операторов A , т. е.

$$A(g_1) A(g_2) = A(g_1 g_2). \quad (\text{II. 3})$$

Размерность пространства L (число линейно независимых элементов) называют размерностью представления.

Поскольку гамильтониан кристалла инвариантен относительно элементов симметрии пространственной группы кристалла, совокупность всех решений уравнения Шредингера Ψ_W , отвечающих энергии W , является линейным пространством L_W , элементы которого под действием элементов пространственной группы кристалла преобразуются друг через друга. При этом каждому элементу симметрии кристалла соответствует матрица — матрица преобразования, размерность которой равна кратности вырождения уровня W , т. е. размерности пространства L_W . Совокупность этих матриц образует представление пространственной группы кристалла, отвечающее уровню W .

В силу трансляционной симметрии кристалла решения уравнения Шредингера можно выбрать таким образом, чтобы эти решения были собственными функциями оператора тран-

*) Отметим, что даже при наличии существенных винтовых осей или плоскостей скольжения существуют равные нулю векторы α (например, вектор α , соответствующий тождественной операции, всегда может быть принят равным нулю).

сляции на целочисленный вектор решетки. Если Ψ_{ks} — одно из таких решений, то

$$T_m \Psi_{ks} = e^{-ikm} \Psi_{ks}. \quad (\text{II. 4})$$

Каждая из функций Ψ_{ks} является собственной функцией T_m , т. е. под действием операторов T_m преобразуется в соответствии с соотношением (II. 4), куда никакие другие решения уравнения Шредингера не входят. Отсюда ясно, что каждая из этих функций Ψ_{ks} преобразуется по одномерному представлению подгруппы трансляций. Кроме того, как это видно из (II. 4), волновые функции, отвечающие значению $k=0$, под влиянием трансляций не изменяются. Это обстоятельство позволяет сделать вывод о том, что волновые функции, отвечающие $k=0$, осуществляют представление фактор-группы подгруппы трансляций.

Поскольку понятие о фактор-группе используется в физике сравнительно редко, мы остановимся на этом вопросе несколько подробнее. Нашей главной целью является при этом доказательство утверждения о том, что фактор-группа подгруппы трансляции T изоморфна группе кристаллического класса F .

Введем понятие о сопряженных элементах, классах и инвариантной подгруппе. Если g — любой элемент группы, то gg_1g^{-1} называется элементом, сопряженным с g_1 (g^{-1} есть элемент, обратный g , т. е. $gg^{-1}=E$). Легко показать, что если два элемента g_1 и g_2 сопряжены с элементом g_3 , то они также сопряжены друг с другом. Те элементы группы, которые сопряжены друг с другом, образуют класс. Ясно, что класс определяется заданием одного из его элементов g_1 и объединяет совокупность элементов вида gg_1g^{-1} , где роль g играют все элементы группы. Все элементы группы могут быть разбиты на классы, ибо каждый элемент группы встречается в одном и только в одном классе. Тожественный (единичный) элемент группы E образует класс сам по себе, ибо он не сопряжен ни с каким другим элементом: $gEg^{-1}=E$ для всех g . За исключением этого класса, состоящего из одного элемента, никакой другой класс не образует подгруппы, ибо не содержит единичного элемента E .

В некоторых группах можно образовать подгруппу, состоящую исключительно из целых классов первоначальной группы. Такая подгруппа называется инвариантной подгруппой. Группы,

не имеющие инвариантных подгрупп, называются простыми группами. Отметим, что пространственная группа таковой не является, ибо подгруппа трансляций является инвариантной подгруппой. Действительно, поскольку элемент группы вида gT_mg^{-1} , где g — произвольный элемент группы, является трансляцией, в подгруппу трансляций наряду с единичным элементом входят все элементы, сопряженные с любой операцией трансляции.

Инвариантная подгруппа позволяет ввести понятие смежного класса на инвариантной подгруппе R . Если g — некоторый элемент группы, то совокупность элементов вида gR_1, gR_2, gR_3, \dots , где R_1, R_2 — элементы подгруппы R , образуют смежный с g класс по R . Можно показать, что совокупность элементов вида gR совпадает с совокупностью элементов Rg . Если перемножить элементы одного смежного класса Rg_1 со всеми элементами другого смежного класса Rg_2 , то результат перемножения дает элементы смежного класса Rg_1g_2 . Поэтому, если рассматривать смежные классы на некоторой инвариантной подгруппе R как новые объекты и определить произведение двух смежных классов как смежный класс с элементами, полученными в результате перемножения элементов двух смежных классов, то сами смежные классы образуют группу. Эта группа называется фактор-группой инвариантной подгруппы. Единичным элементом фактор-группы является сама инвариантная подгруппа. Порядок, т. е. число элементов фактор-группы, равен числу смежных классов по инвариантной подгруппе (ниже речь идет об инвариантной подгруппе трансляций T группы G). Не следует смешивать фактор-группу с подгруппой группы G . Элементы подгруппы являются элементами группы G , тогда как элементами фактор-группы являются смежные классы.

Вернемся теперь к рассмотрению пространственной группы кристалла. Как уже указывалось ранее, эта группа имеет инвариантную подгруппу — подгруппу трансляций T (ее элементами являются все операции T_m). В то же время каждый смежный класс по T является совокупностью, состоящей из элементов вида T_mT_ar , где операция $r \neq E$ фиксирована, а T_m — все элементы подгруппы трансляций T . Если $r = E$, то соответствующий смежный класс совпадает с подгруппой трансляций. Ясно, что в рассматриваемом случае пространственной группы G число элементов фактор-группы равно

числу элементов точечной группы кристаллического класса, ибо число поворотных элементов $T_{\alpha r}$ равно числу элементов группы F . Более того, имеет место взаимно однозначное соответствие между элементами фактор-группы и элементами группы F , причем произведение элементов фактор-группы отвечает произведению соответствующих элементов группы кристаллического класса. Таким образом, в данном случае фактор-группа изоморфна группе F .

Отметим, что поскольку элементы пространственной группы, входящие в некоторый смежный класс на инвариантной подгруппе T , имеют вид $T_m T_{\alpha r}$, т. е. отличаются друг от друга лишь на операцию трансляции, все они дают один и тот же результат при воздействии на функцию Ψ_{k_s} при $k=0$. В самом деле,

$$T_m T_{\alpha r} \Psi_{0s} = T_{\alpha r} T_m \Psi_{0s} = T_{\alpha r} \Psi_{0s}. \quad (\text{II.5})$$

Определим результат воздействия элемента фактор-группы Φ_r на функцию Ψ_{0s} таким образом:

$$\Phi_r \Psi_{0s} = T_{\alpha r} \Psi_{0s}.$$

Поскольку оператор $T_{\alpha r}$ принадлежит пространственной группе кристалла, функция $T_{\alpha r} \Psi_{0s}$ является линейной комбинацией функций $\Psi_{0s'}$, отвечающих, как и Ψ_{0s} , одной и той же энергии кристалла W . Ясно, что тем самым мы определяем матрицы преобразований для каждого элемента фактор-группы Φ_r . Эти матрицы образуют представление фактор-группы в линейном пространстве собственных функций Ψ_{0s} оператора Гамильтона, отвечающих одной и той же энергии W .

Линейное пространство всех функций Ψ_{0s} , вообще говоря, можно разбить на так называемые инвариантные подпространства. Функции Ψ_{0s}^i , где $i=1, 2, \dots, t$, входящие в данное инвариантное подпространство, при воздействии на них элементов фактор-группы преобразуются только друг через друга, т. е. для любого элемента фактор-группы Φ_r функция $\Phi_r \Psi_{0s}^i$ остается в инвариантном подпространстве. Следовательно, каждому инвариантному подпространству отвечает представление группы Φ_r размерности t . Если в инвариантном подпространстве нельзя выделить инвариантное подпространство меньшей размерности, то соответствующее представление называется неприводимым. В противном случае представление называется приводимым.

Изоморфные группы имеют одни и те же неприводимые представления. Это весьма существенно, ибо означает, что для классификации состояний механических экситонов, соответствующих $k=0$, могут быть использованы неприводимые представления точечной группы кристаллического класса F , которая, как мы видели, изоморфна фактор-группе инвариантной подгруппы трансляций. Использование неприводимых представлений группы F , таким образом, возможно, несмотря на то, что F , вообще говоря, содержит элементы, не являющиеся элементами симметрии кристалла (последнее имеет место, как уже указывалось, при наличии существенных винтовых осей и плоскостей скольжения).

При изучении представлений группы часто используют так называемые характеры представлений. Характером $\chi(g)$ представления A называется сумма диагональных элементов матрицы $A(g)$, соответствующей элементу g какой-то группы. Под скалярным произведением характеров $\chi^{(1)}(g)$ и $\chi^{(2)}(g)$ для двух разных представлений $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$ понимают выражение

$$(\chi^{(1)}, \chi^{(2)}) = \frac{1}{N} \sum_g \chi^{(1)}(g) \chi^{(2)}(g), \quad (\text{II.6})$$

где N — число элементов g в группе (порядок группы), а \sum_g означает суммирование по всем элементам группы.

Для неприводимых представлений

$$(\chi^{(i)}, \chi^{(k)}) = \delta_{ik}. \quad (\text{II.7})$$

Что же касается какого-либо приводимого представления $A(g)$, то его характер $\chi(g)$ равен сумме характеров всех неприводимых представлений $A_\nu(g)$, которые содержатся в $A(g)$ (каждое представление считается столько раз, сколько раз оно содержится в $A(g)$). Если обозначить через m_ν число, показывающее, сколько раз содержится в представлении A неприводимое представление A_ν , то

$$\chi(g) = \sum_\nu m_\nu \chi_\nu(g), \quad m_\nu = (\chi, \chi_\nu). \quad (\text{II.8})$$

Поэтому, в силу (II.7),

$$(\chi, \chi) = \sum_\nu m_\nu^2.$$

Если представление приводимо, то скалярный квадрат его характера (χ, χ) больше единицы. В этом утверждении содержится удобный критерий приводимости представления.

Отметим также, что, поскольку единичному элементу группы $g = E$ в любом представлении соответствует единичная матрица, характер $\chi(E)$ всегда есть целое положительное число, равное порядку матрицы представления, т. е. его размерности.

Поскольку при определении состояний механических экситонов дальное действие либо отсутствует, либо не принимается во внимание, энергия механического экситона $W_s(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ не зависит от $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$ (в отличие от энергии кулоновских экситонов, см. § 13). Поэтому при классификации состояний механических экситонов направление \mathbf{s} при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ несущественно, и эта классификация оказывается совершенно аналогичной классификации возбужденных состояний атомов и молекул.

Рассмотрим в качестве примера кристалл, относящийся к кристаллическому классу точечной группы O_h . Характеры этой группы приведены в табл. IV основного текста. На основании этой таблицы можно сделать вывод о том, что в рассматриваемом кристалле имеется десять типов экситонных зон механических экситонов (по числу неприводимых представлений*), причем четыре типа зон при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ являются трижды вырожденными (соответствующие им волновые функции Ψ_{0s} преобразуются по неприводимым представлениям F_1, F_2, F'_1 и F'_2), два типа зон при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ дважды вырождены (представления E и E'), остальные зоны при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ являются невырожденными.

Если на рассматриваемый кристалл наложить внешнее постоянное электрическое поле, направленное вдоль оси 4-го порядка (ось z), то некоторые из представлений, неприводимых в группе O_h , в новой группе симметрии (группа C_{4v}) становятся приводимыми. Действительно, рассмотрим, например, представление E (не путать с единичным элементом E) группы O_h . В новой группе вместо трех осей C_4^2 осталась одна такая ось, вместо шести осей 4-го порядка C_4 остались две такие оси, вместо трех операций IC_4^2 — две и вместо шести операций симметрии IC_4 — также две операции симметрии. Очевидно, каждому элементу симметрии,

* При учете состояний с $\mathbf{k} \neq 0$ каждый терм, очевидно, преобразуется в зону.

который вообще сохранился в новой группе, отвечает та же матрица представления $A(g)$ и, следовательно, то же значение характера χ . Поэтому характеры представления E из группы O_h в группе C_{4v} могут быть представлены следующей таблицей:

	E	C_4^2	$2C_4$	$2I \cdot C_4^2$	$2IC_4$
χ	2	2	0	2	0

Поскольку, согласно (II. 6), $(\chi, \chi) = \frac{1}{8}(4 + 4 + 2 \cdot 0 + 2 \cdot 4 + 2 \cdot 0) = 2 > 1$, рассматриваемое представление приводимо. Используя характеры неприводимых представлений A_1, A_2, B_1, B_2 и E группы C_{4v} (см. табл. VI), находим (см. (II. 6)), что

$$(\chi, \chi^{A_1}) = \frac{1}{8}(2 + 2 + 2 \cdot 0 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 0) = 1,$$

$$(\chi, \chi^{A_2}) = \frac{1}{8}(2 + 2 + 2 \cdot 0 - 2 \cdot 2 + 2 \cdot 0) = 0,$$

$$(\chi, \chi^{B_1}) = \frac{1}{8}(2 + 2 + 2 \cdot 0 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 0) = 1,$$

$$(\chi, \chi^{B_2}) = (\chi, \chi^E) = 0.$$

Здесь χ — характеры матриц приводимого представления, указанные в таблице. Таким образом, представление E группы O_h распадается на два одномерных представления $E \rightarrow A_1 + B_1$. Если волновые функции механических экситонов при $\mathbf{k} = 0$ преобразуются по неприводимому представлению E группы O_h , это значит, что все они отвечают одной и той же энергии и число этих функций равно двум (уровень дважды вырожден). Поскольку в группе C_{4v} представление E группы O_h распадается на два одномерных представления (см. выше), ясно, что дважды вырожденный терм симметрии представления E группы O_h , вообще говоря, расщепляется на два невырожденных терма, волновые функции которых преобразуются по одномерным неприводимым представлениям группы C_{4v} .

Аналогичным образом могут быть рассмотрены и другие двумерные и трехмерные представления группы O_h .

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, Гостехиздат, 1957.
2. М. Борн, Оптика, НТИ Украины, 1937.
3. S. Szivessy, Kristallooptik, Handbuch d. Physik 20, 635 (1928).
4. G. N. Ramachandran, S. Ramaseshan, Crystal Optics, Handbuch d. Physik 25/1, 1 (1961).
5. В. Л. Гинзбург, ЖЭТФ 34, 1593 (1958).
6. В. Л. Гинзбург, Распространение электромагнитных волн в плазме, Физматгиз, 1960.
7. В. П. Силин, А. А. Рухадзе, Электромагнитные свойства плазмы и плазмopodobных сред, Госатомиздат, 1961.
8. В. Л. Гинзбург, Г. П. Мотулевич, УФН 55, 469 (1955).
9. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, 1962.
10. H. A. Lorentz, Collected Papers, Vol. 2, 79, 1936; Vol. 3, 314, 1936.
11. K. H. Hellwege, Zs. f. Physik 129, 626 (1951).
12. Е. Ф. Гросс, А. А. Каплянский, ДАН СССР 132, 93 (1960); 139, 75 (1961).
13. Б. Н. Гершман, В. Л. Гинзбург, Радиофизика, Известия вузов 5, 31 (1962).
14. М. Борн, М. Генперт-Мейер, Теория твердого тела, ОНТИ 1938.
15. С. И. Пекар, ЖЭТФ 33, 1022 (1957).
16. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, УФН 76, 643 (1962); 77, 663 (1962); Fortschr. Phys. 11, 163 (1963).
17. А. С. Давыдов, ЖЭТФ 43, 1832 (1962).
18. М. Б. Бродин, С. И. Пекар, ЖЭТФ 38, 71, 1910 (1960).
19. С. И. Пекар, УФН 77, 309 (1962).
20. А. С. Давыдов, ЖЭТФ 45, 723 (1963).
21. Б. Е. Цеквава, ФТТ 3, 1164 (1961).
22. И. С. Горбань, В. Б. Тимофеев, ДАН СССР 141, 791 (1961).
- 22a. J. J. Hopfield, D. G. Tomas, Phys. Rev. 132, 561 (1963).
- 22б. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, ЖЭТФ 40, 913 (1961).
- 22в. В. М. Агранович, А. А. Рухадзе, ЖЭТФ 35, 1171 (1958).
23. В. Л. Гинзбург, УФН 69, 537 (1959).
24. М. Борн, Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958.
25. H. Haken, Fortschr. Phys. 6, 271 (1958); УФН 68, 565 (1959).
- 25a. R. S. Knox, Theory of Exzitons, Solid State Physics, Suppl. 5, Academic Press, 1963.
26. В. М. Файн, Я. И. Ханин, Квантовая радиофизика, «Сов. радио», 1965.
27. И. Е. Тамм, Основы теории электричества, Гостехиздат, 1957.
- 27a. Г. С. Кринчик, М. В. Четкин, ЖЭТФ 41, 673 (1961).
28. В. Л. Гинзбург, ЖЭТФ 29, 748 (1955).
29. В. Л. Гинзбург, Н. Н. Мейман, ЖЭТФ 46, 243 (1964).
30. М. А. Леонтович, ЖЭТФ 40, 907 (1961).
31. В. Л. Гинзбург, ДАН СССР 36, 9 (1942).
32. А. А. Андронов, Радиофизика, Известия вузов 3, 645 (1960).
33. В. Л. Гинзбург, Акустический журнал 1, 31 (1955).
34. Дж. Най, Физические свойства кристаллов, ИЛ, 1960.
35. Ф. И. Федоров, Оптика анизотропных сред, Изд-во АН БССР, Минск, 1958.
- 35a. П. С. Петров, Ф. И. Федоров, Оптика и спектроскопия 15, 792 (1963).
36. А. П. Хапалюк, Кристаллография 7, 724 (1962).
- 36a. W. Voigt, Gött. Nachr. 5, 269 (1902).
37. В. Н. Писковой, ФТТ 5, 3, 168, 701 (1963).
38. A. Einstein, Ann. Physik 23, 371 (1907).
39. В. Паули, Теория относительности, Гостехиздат, 1947.
40. В. Л. Гинзбург, Радиофизика, Известия вузов 5, 473 (1962).
41. В. Л. Гинзбург, Радиофизика, Известия вузов 4, 74 (1961).
42. М. Е. Герцейштейн, ЖЭТФ 26, 680 (1954).
43. J. Neufeld, Phys. Letters 6, 246 (1963).
44. С. М. Рытов, ЖЭТФ 17, 930 (1947)
45. A. Sommerfeld, L. Brillouin, Ann. Physik 44, 177, 203 (1914); L. Brillouin, Wave Propagation and Group Velocity, Academic Press, 1960.
- 45a. К. А. Барсуков, В. Л. Гинзбург, Радиофизика, Известия вузов 7, № 6 (1964).
46. G. Marx, G. Gyorgui, Ann. Physik 16, 211 (1955).
- 46a. Л. П. Питаевский, ЖЭТФ 39, 1450 (1960).
47. Л. А. Вайнштейн, Электромагнитные волны, «Сов. радио», 1957.
48. Е. Л. Фейнберг, Распространение радиоволн вдоль земной поверхности, Изд-во АН СССР, 1961.
49. Л. М. Коврижных, А. А. Рухадзе, В. П. Силин, ЖЭТФ 44, 1953, (1963); УФН 82, 499 (1964).
50. В. Л. Гинзбург, А. А. Рухадзе, В. П. Силин, ФТТ 3, 1835, 2890 (1961); J. Phys. a. Chem. Solids 23, 85 (1962).
51. В. М. Агранович, Ю. В. Конобеев, ФТТ 5, 2544 (1963).
52. N. G. Van Kampen, Math. Rev. 20, 1227 (1959).
53. С. И. Пекар, ЖЭТФ 38, 1787 (1960),

54. В. М. Агранович, А. А. Рухадзе, ЖЭТФ 35, 982 (1958).
55. С. И. Пекар, ФТТ 4, 1301 (1962).
56. Ф. И. Федоров, Оптика и спектроскопия 6, 85, 377 (1959).
57. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Механика сплошных сред, ч. II, § 10, Гостехиздат, 1953.
58. В. М. Агранович, ДАН СССР 97, 797 (1954); Оптика и спектроскопия, 1, 338 (1956).
59. Ю. А. Цвирко, ЖЭТФ 38, 1615 (1960).
60. И. В. Обреимов, А. Ф. Прихотько, Сборник «Памяти С. И. Вавилова», М., 1952, стр. 197.
61. W. R. Heller, A. Markus, Phys. Rev. 84, 809 (1951).
62. Е. Е. Лысенко, ЖЭТФ 6, 787 (1936).
63. А. С. Давыдов, ЖЭТФ 19, 181 (1949). Труды ИФ АН УССР, № 3, 36 (1952); А. С. Давыдов, Э. И. Рашба, Украинский физический журнал 2, 226 (1957).
64. С. И. Пекар, Б. Е. Цеквава, ФТТ 2, 261 (1960).
65. П. П. Феофилов, А. А. Каплянский, УФН 76, 201 (1962).
66. А. С. Давыдов, Теория поглощения света в молекулярных кристаллах, Изд-во АН УССР, Киев, 1951.
67. H. Winston, J. Chem. Phys. 19, 156 (1951).
68. Г. Я. Любарский, Теория групп и ее применение в физике, Физматгиз, 1958.
69. Л. Ландау, Е. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
70. В. И. Черепанов, В. С. Галишев, ФТТ 3, 1085 (1961).
71. Б. Е. Цеквава, ФТТ 3, 1164 (1961).
72. Е. Ф. Гросс, УФН 63, 575 (1957).
73. Е. Ф. Гросс, А. А. Каплянский, ФТТ 2, 1676, 2963 (1960).
74. Е. Ф. Гросс, Б. П. Захарченя, Л. М. Канская, ФТТ 3, 972 (1961).
75. Е. Ф. Гросс, А. Г. Жилич, Б. П. Захарченя, А. В. Варфоломеев, ФТТ 3, 1445 (1961).
76. В. И. Черепанов, ФТТ 3, 1493 (1961).
77. А. Г. Жилич, ФТТ 3, 2041 (1961).
78. В. И. Черепанов, ФТТ 3, 2183 (1961).
79. С. А. Москаленко, ФТТ 2, 1755 (1960).
80. Е. Ф. Гросс, Б. П. Захарченя, О. В. Константинов, ФТТ 3, 305 (1961).
81. D. G. Tomas, J. J. Hopfield, Phys. Rev. Letters, 4, 357 (1960); Phys. Rev. 124, 657 (1961).
82. D. G. Tomas, J. J. Hopfield, Phys. Rev. Letters, 5, 505 (1960).
83. А. Г. Жилич, ФТТ 6, 2058 (1964); ФТТ, 7, 670 (1965).
84. Хуан Куиь, Proc. Roy. Soc. A 208, 352 (1951).
85. В. М. Агранович, М. И. Каганов, ФТТ 4, 1681 (1962).
86. S. Chandrasekhar, Proc. Indian. Acad. Sci. A36, 103 (1952); A37, 468, 697 (1953); A39, 243 (1954).
87. В. М. Агранович, Оптика и спектроскопия 2, 738 (1957).
88. D. P. Craig, P. C. Hobbins, J. Chem. Soc. 539, 2309 (1955).

89. M. Vogt, Phys. Zs. 16, 251, 437 (1915); Ann. Physik 55, 177 (1917).
90. C. Oseer, Ann. Physik 48, 1 (1915).
91. Б. Н. Самойлов, ЖЭТФ 18, 1030 (1948).
92. М. С. Бродин, Я. О. Довгий, Оптика и спектроскопия 12, 285 (1962).
93. В. М. Агранович, УФН 71, 141 (1960).
94. В. М. Агранович, ФТТ 2, 1197 (1960).
95. М. С. Бродин, А. Ф. Прихотько, Оптика и спектроскопия 7, 132 (1959).
96. М. С. Бродин, А. Ф. Прихотько, М. С. Соскин, Оптика и спектроскопия 6, 28 (1959).
97. С. А. Москаленко, М. И. Шмиглюк, ФТТ 6, 3535 (1964).
98. И. Е. Дзялошинский, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ 36, 1797 (1959).
99. J. J. Hopfield, D. G. Tomas, Phys. Rev. 116, 512 (1959).
100. М. С. Бродин, И. Н. Страшикова, ФТТ 4, 2454 (1962).
101. А. Зоммерфельд, Оптика, § 19, ИЛ, 1953.
102. В. П. Силин, Е. П. Фетисов, ЖЭТФ 41, 159 (1961).
103. В. М. Агранович, ЖЭТФ 37, 430 (1959).
104. А. Г. Жилич, В. И. Черепанов, Ю. А. Каргаполов, ФТТ 3, 1808 (1961).
105. В. М. Агранович, ФТТ 3, 811 (1961).
106. U. Fano, Phys. Rev. 118, 451 (1960).
107. Л. Н. Овандер, ФТТ 3, 2394 (1961); 4, 157 (1962); 4, 294 (1962) УФН 86, 3 (1965).
108. В. М. Агранович, В. Е. Пафомов, А. А. Рухадзе, ЖЭТФ 36, 238 (1959).
109. Б. Л. Желнов, ЖЭТФ 40, 170 (1961).
110. Ф. Г. Басс, М. И. Каганов, В. М. Яковенко, ФТТ 4, 3260 (1962); Ф. Г. Басс, В. М. Яковенко, УФН 86, № 2 (1965).
111. В. И. Сугаков, ФТТ 5, 2207, 2682 (1963).
112. В. С. Машкевич, ЖЭТФ 38, 906 (1960); 40, 1803 (1961); 42, 135 (1962).
113. В. М. Агранович, А. С. Давыдов, ЖЭТФ 21, 667 (1951).
114. А. С. Давыдов, УФН 82, 393 (1964).
115. Ю. А. Цвирко, ФТТ 5, 1498 (1963).
116. Л. И. Мандельштам, ЖЭТФ 15, 475 (1945); Полное собрание трудов, т. 2, стр. 334, 1947.
117. С. И. Пекар, ЖЭТФ 36, 451 (1959).
118. I. Toyozawa, J. Phys. Chem. Solids 25, 59 (1964).
119. В. М. Агранович, Ю. В. Конобеев, ФТТ 6, 831 (1964).
120. В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.
121. В. М. Агранович, Ю. В. Конобеев, ФТТ 3, 360 (1961).
122. L. S. Kothari, K. S. Singwi, Solid State Phys. 8, 110 (1959).
123. Эффект Мессбауэра, сборник статей под редакцией Ю. Кагана, ИЛ, 1962.
124. O. Klemperer, J. P. G. Shepherd, Advances Phys. 12, 355 (1963).

125. В. Л. Гинзбург, И. М. Франк, ЖЭТФ 16, 15 (1946).
 126. В. Л. Гинзбург, А. П. Леванюк, J. Phys. Chem. Solids 6, 51 (1958); ЖЭТФ 39, 192 (1960).
 127. В. Л. Гинзбург, УФН 77, 621 (1962).
 128. В. Я. Эйдман, Радиофизика, Известия вузов 5, 478 (1962).
 129. Г. М. Гандельман, В. М. Ермаченко, ЖЭТФ 45, 522 (1963).
 130. Э. А. Канер, В. Г. Скобов, ЖЭТФ 45, 610 (1963).
 131. В. М. Агранович, Ю. В. Конобеев, ФТТ 7, 111 (1965).
 132. Г. Ф. Квенцель, С. И. Пекар, ФТТ 6, 811 (1964).
 133. Е. Вигнер, Теория групп и ее приложения к квантовой механике, ИЛ, 1961.
 134. A. Vardasis, F. K. Schrieffer, Phys. Rev. 121, 1050 (1961).
 135. В. Л. Гинзбург, ЖЭТФ 41, 828 (1961).
 136. А. М. Афанасьев, Ю. М. Каган, ЖЭТФ 48, № 1 (1965).
 137. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, Fortschr. Phys. (в печати).
 138. И. Г. Чистяков, Кристаллография 5, 962 (1961).
 139. В. М. Агранович, О. А. Дубовский, ФТТ (в печати).

*Владимир Моисеевич Агранович,
 Виталий Лазаревич Гинзбург*

Кристаллооптика с учетом
 пространственной дисперсии
 и теория экситонов

М., 1965 г., 376 стр. с илл.

Редакторы *Вирко И. Г., Райская Н. А.*

Техн. редактор *Шкляр С. Я.*

Корректор *Алексеева М. Ф.*

Сдано в набор 23/ХII 1964 г. Подписано к печати 26/III 1965 г. Бумага 84×108¹/₃₂. Физ. печ. л. 11,75 Условн. печ. л. 19,27. Уч.-изд. л. 18,54. Тираж 4700 экз. Т-01670. Цена книги 1 р. 13 к. Заказ № 992

Издательство «Наука».

Главная редакция

физико-математической литературы.

Москва, В-71, Ленинский проспект, 15.

Ленинградская типография № 2 имени Евгении Соколовой Главполиграфпрома Государственного комитета Совета Министров СССР по печати. Измайловский проспект, 29.

ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
ИЗДАТЕЛЬСТВА «НАУКА»

Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

ВЫИДУТ ИЗ ПЕЧАТИ В 1965 ГОДУ:

Белов К. П. и др., Ферро- и антиферромагнетизм редкоземельных металлов и их соединений (Серия «Современные проблемы физики»), 12 л., 6000 экз., 80 коп. в пер. (IV кв.).

Дитчберн Р., Физическая оптика, перевод с английского, под ред. проф. И. А. Яковлева, 53 л., 10 000 экз., 2 р. 85 к. в пер. (II кв.).

Мигдал А. Б., Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, 24 л., 6000 экз., 1 р. 40 к. в пер. (III кв.).

Фабелинский И. Л., Молекулярное рассеяние света, 25 л., 7000 экз., 1 р. 45 к. в пер. (IV кв.).

Федоров Ф. И., Теория упругих волн в кристаллах, 17 л., 6000 экз., 1 р. 05 к. в пер. (I кв.).

Халатников И. М., Введение в теорию сверхтекучести (Серия «Современные проблемы физики»), 10 л., 6000 экз., 70 коп. в пер. (II кв.).

Заказы на печатающиеся книги принимаются всеми магазинами Книготорга. При отказе принять заявку можно обращаться по адресу: Москва, В-71, Ленинский проспект, 15, в/о «Союзкнига».

ОПЕЧАТКИ

Стр.	Строка	Напечатано	Следует читать
82	11 снизу	k	k
99	3 »	ϵ'_{ij}	ϵ''_{ij}
112	5 »	$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial \alpha} l'$	$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial \alpha} l$
275	2 »	$ n_3 \gg n_2 $	$ \tilde{n}_3 \gg \tilde{n}_2 $
294	рис. 18, б	ω_0	$\omega_L(0)$

В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург