

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

КРИСТАЛЛООПТИКА С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ
ДИСПЕРСИИ И ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ. I

В. М. Агранович и В. Л. Гинзбург

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	643
§ 1. Тензор комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и нормальные волны в среде	653
а) Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и его свойства	653
б) Нормальные электромагнитные волны в среде. Поперечные и продольные волны. «Фиктивные» продольные волны и «волны поляризации»	657
в) Энергетические и некоторые другие соотношения для волн в анизотропной среде	663
§ 2. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах	667
а) Введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для кристаллов	667
б) Случай слабой пространственной дисперсии ($a/\lambda \ll 1$)	670
Цитированная литература. I	682
§ 3. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии. а) Новая волна вблизи линии поглощения в гиротропном кристалле. б) Новые волны в негиротропных кристаллах. в) Оптическая анизотропия кубических кристаллов. Квадрупольные линии поглощения. г) Влияние механических напряжений и внешних электрического и магнитного полей. д) Проблема граничных условий. е) Экспериментальные исследования эффектов пространственной дисперсии в кристаллооптике. § 4. Вычисление тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ квантовомеханическим методом. а) Квантовомеханическое выражение для $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. б) Механические экситоны и тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в молекулярных кристаллах и в случае классической модели осцилляторов. в) Механизм и расчеты поглощения. Заключительные замечания. Цитированная литература. II.	

ВВЕДЕНИЕ

Классическая кристаллооптика развивается в рамках следующей схемы. Кристалл характеризуется тензором комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij}(\omega)$, зависящей от частоты излучения ω . Зная тензор $\epsilon_{ij}(\omega)$, из уравнений макроскопической электродинамики можно найти «нормальные» электромагнитные волны в кристалле, т. е. волны типа $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$, $\mathbf{E}_0 = \text{const}$, $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \hat{n}\mathbf{s}$, $s = \frac{k}{k}$ (мы ограничиваемся для простоты однородными плоскими волнами, в которых плоскости равных фаз и амплитуд совпадают). Различные нормальные волны (индекс l) отличаются своей поляризацией (вектор $\mathbf{E}_{0l}$) и значениями комплексного показателя преломления $\hat{n}_l(\omega, \mathbf{s}) = n_l + i\kappa_l$.

Если не касаться вопроса о решении задач для среды с границами, то смысл использования тензора $\epsilon_{ij}(\omega)$ состоит в том, что с его помощью выражается значительно более сложная величина $\hat{n}_l(\omega, \mathbf{s})$, являющаяся функцией не только ω , но и $\mathbf{s}$. Соображения общего характера позволяют

установить симметрию тензора $\varepsilon_{ij}(\omega) = \varepsilon'_{ij}(\omega) + i\varepsilon''_{ij}(\omega)$, а также связать его вещественную и мнимую части ε'_{ij} и ε''_{ij} (дисперсионные соотношения). Нахождение зависимости ε_{ij} от частоты требует уже привлечения микроскопической теории, что связано с использованием определенной модели или различными приближениями. При использовании простой модели, особенно в случае высокой симметрии, представляется возможным с равным правом вычислять не $\varepsilon_{ij}(\omega)$, а сразу $\hat{n}_i(\omega, \mathbf{s})$. Однако даже в кубических кристаллах, когда в конечном счете речь идет об одной функции $\hat{n}(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$ (здесь $\varepsilon_{ij}(\omega) = \varepsilon(\omega)\delta_{ij}$), величина $\varepsilon(\omega)$ является более простой; она связывает индуцированный полем ток и само это поле в одной и той же точке, и ее вычисление не требует учета запаздывающего взаимодействия (в то же время показатель $\hat{n}(\omega)$ очевидным образом связан с распространением волн; кроме того, в кубическом кристалле существуют, если учитывать и продольную волну, три нормальные волны, хотя для двух из них и имеет место вырождение $n_1 = n_2 = n$). Таким образом, представляется несомненным, что задачей микротехники нужно, вообще говоря, считать именно нахождение тензора $\varepsilon_{ij}(\omega)$.

Из принципа симметрии кинетических коэффициентов следует, что при отсутствии макроскопического магнитного поля тензор $\varepsilon_{ij}(\omega)$ симметричен (см., например, ¹). Поэтому явление естественной оптической активности (гиротропии) лежит уже вне области классической кристаллооптики (в том понимании этого термина, которым мы пользуемся). Как хорошо известно, рассмотрение естественной оптической активности связано с учетом некоторых малых членов порядка a/λ , где a — характерный размер (постоянная решетки, размер молекулы), а $\lambda = \lambda_0/n = 2\pi/k$ — длина волны света в среде ($\lambda_0 = 2\pi c/\omega$ — длина волны в вакууме). Физически дело сводится к тому, что индуцируемый заданным полем ток зависит не только от частоты ω , но и от волнового вектора $\mathbf{k}$, т. е. ток различен для поля с разной длиной волны. Подобную зависимость принято называть пространственной дисперсией (частотная дисперсия есть зависимость тока от частоты поля ω). В однородной безграничной среде (плазма, жидкости), а в хорошем приближении и в оптике кристаллов (см. § 2,а), учет пространственной дисперсии сводится к использованию в уравнениях поля тензора *)

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}) + i\varepsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}), \quad (1)$$

зависящего от ω и $\mathbf{k}$ и удовлетворяющего, конечно, условию $\varepsilon_{ij}(\omega, 0) = \varepsilon_{ij}(\omega)$, где $\varepsilon_{ij}(\omega)$ — тензор, рассматриваемый в классической кристаллооптике.

Кристаллооптику, которая развивается на основе использования тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, мы называем кристаллооптикой с учетом пространственной дисперсии. Хотя такая кристаллооптика очевидным образом шире классической, она в свою очередь ограничена областью не слишком коротких волн $\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega}$, так что параметр a/λ_0 является малым. Постоянная решетки $a \sim 10^{-8} - 10^{-7}$ см, в оптической области $\lambda_0 \gtrsim 10^{-5}$ см и, следовательно, $a/\lambda_0 \lesssim 10^{-2} - 10^{-3}$. С другой стороны, в оптике даже вблизи линий поглощения обычно $n \lesssim 10$ и таким образом соблюдается также неравенство

$$\frac{a}{\lambda} = \frac{an}{\lambda_0} \ll 1. \quad (2)$$

*) В настоящей статье речь идет только о линейной теории (соблюдается принцип суперпозиции) и не рассматриваются эффекты типа комбинационного рассеяния света. По последнему вопросу см., например, работу³⁰.

Условие (2) означает, что пространственная дисперсия является слабой и именно такое предположение (отвечающее в оптической области всем известным нам случаям) будет использовано ниже.

Как сказано, учет членов порядка a/λ необходим при рассмотрении гиротропии. В кристаллах с центром симметрии и некоторых других члены $\sim (a/\lambda)$ отсутствуют, а члены порядка $(a/\lambda)^2$ обычно весьма малы. Тем не менее учет членов $\sim (a/\lambda)^2$ в некоторых случаях необходим даже для качественного понимания явлений. Так, распространение продольных волн в любой среде и, в частности, в кристаллах полностью определяется пространственной дисперсией (при неучете пространственной дисперсии групповая скорость продольных волн равна нулю; см., например, ² и ниже). Далее, как было указано еще в 1878 г. Лоренцем ³, при учете членов $\sim (a/\lambda)^2$ кубические кристаллы становятся анизотропными (см. также ⁴, ⁵). Недавно оптическая анизотропия кубических кристаллов была установлена на опыте ⁶. Наконец, учет членов $\sim a/\lambda$ или, при отсутствии гиротропии, членов $\sim (a/\lambda)^2$ может оказаться нужным в области аномальной дисперсии, т. е. вблизи линий поглощения. Здесь показатель преломления n увеличивается и, следовательно, параметр $a/\lambda = an/\lambda_0$ возрастает. Поэтому, как это хорошо известно на примере магнитоактивной плазмы ², в области линии поглощения (вблизи собственной частоты) пространственная дисперсия может существенно изменить ход дисперсионных кривых и, в частности, привести к появлению новых волн (новых значений n_i при данной частоте ω). Появление новых волн в принципе возможно, например, и вблизи линий так называемого экситонного поглощения света в негиротропных кристаллах ⁷ (в статье ⁷ этот эффект рассматривался как некоторое явление нового типа; в связи с этим в работе ⁵ было показано, что речь идет о частном случае учета пространственной дисперсии, причем в негиротропных кристаллах достаточно принять во внимание члены $\sim (a/\lambda)^2$). В негиротропных кристаллах наблюдение новых волн сильно осложняется влиянием поглощения. В случае гиротропных кристаллов вблизи линии поглощения должна появляться новая волна, свойства которой характеризуются параметром a/λ , что делает условия ее наблюдения более благоприятными ⁵.

Итак, имеется ряд вопросов, анализ которых относится к области кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии. Задача теории состоит здесь в первую очередь в установлении связи между $\hat{n}_i(\omega, s)$ и $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и в использовании соответствующих формул для обработки экспериментальных данных. На опыте определяется комплексный показатель преломления $\hat{n}_i(\omega, s) = n_i + i\kappa_i$, и если не пользоваться кристаллооптикой, нужно было бы проводить измерения для очень большого числа направлений s . Если же выразить $\hat{n}_i(\omega, s)$ через $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, то достаточно измерить n_i 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 (имеется в виду, что ϵ'_{ij} и ϵ''_{ij} уже приведены к главным осям). При учете слабой пространственной дисперсии картина сложнее, но нужно проводить измерения лишь для немногих направлений, в силу простой зависимости $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ 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, закон дисперсии $\omega_i = \omega_i(\mathbf{k})$ эквивалентен заданию функций $\hat{n}_i(\omega, s) = \frac{ck}{\omega_i(\mathbf{k})}$). Кроме того, тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ определяет потери энергии при движении частиц в среде, молекулярные силы между

телями, флуктуации электромагнитного поля и вообще весьма полно характеризует среду (кристалл) ^{1, 8, 10}.

Целью настоящей статьи является главным образом изложение основ кристаллооптики с учетом пространственной дисперсии (при этом мы в значительной мере используем работы ^{5, 8}). Нам представляется целесообразным также остановиться здесь на связи кристаллооптики с теорией экситонов и на некоторых относящихся сюда вопросах.

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 представляют собой не что иное, как «фотоны в среде» (включая сюда и продольные фотоны в среде — плазмоны^{*)}). Тем самым общая теория экситонов включает, с одной стороны, кристаллооптику с учетом пространственной дисперсии и, с другой, — все теоретические построения, имеющие своей целью вычисление тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

Переход от вопросов терминологии к существу дела происходит при обсуждении способов вычисления $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и характера различных возможных 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 ¹². 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 ¹³. Наглядно эти возбуждения могут быть представлены как переходящее от узла к узлу возбужденное состояние молекулы (молекулярные кристаллы) или движущаяся связанная пара электрон — дырка (полупроводники). 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 ограничиться для простоты случаем идеальной неподвижной решетки, то волновая функция возбуждения может быть записана в виде ¹³

$$\Psi_{\mathbf{k}, l} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} U_{\mathbf{k}, l}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (3)$$

где $\mathbf{R} = \sum_i \mathbf{r}_i / NV$ — радиус-вектор центра тяжести всех NV электронов (радиусы-векторы $\mathbf{r}_i$), функция $U_{\mathbf{k}, l}$ периодична (с периодом решетки) относительно $\mathbf{R}$ и индекс l отвечает квантовым числам, не сводящимся к $\mathbf{k}$. Ограничиваясь в (3) 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 «механических» возбуждений (экситонов) с реальными экситонами, и об их роли с точки зрения вычисления $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$.

Прежде чем коснуться этой проблемы, уточним понятие «механического экситона». Понимать под «механическим экситоном» любое решение кулоновской задачи представляется нерациональным. В самом деле, среди

^{*)} Об использовании понятия о фотонах в среде (с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\omega n/c$) в применении к другим задачам теории излучения см. ¹¹. Заметим, что под указанное в тексте определение экситонов подпадают также акустические волны, для которых, однако, целесообразно сохранить общепринятый термин «фононы».

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

таких возбуждений окажутся и такие реальные экситоны, как продольные нормальные волны (плазмоны), в которых электрическое поле безвихревое, а магнитное поле отсутствует. Кроме того, к числу решений кулоновской задачи относятся волны, которые мы будем называть «фиктивными» продольными волнами (см. § 1,б). В таких волнах (с малыми значениями k), так же как и в продольных волнах, имеется отличное от нуля длинноволновое безвихревое электрическое поле $E = E_{||}$ (поле $E_{||}$ не равно нулю всегда, когда $\operatorname{div} P \neq 0$, где P — электрическая поляризация *)).

Кулоновское макроскопическое поле $E_{||}$ помимо продольного характера поляризации ($\operatorname{rot} E_{||} = 0$) ничем не отличается от произвольного макроскопического поля (разумеется, имеются в виду одинаковые значения ω и 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 E не является ни поперечным, ни продольным. Наконец, если речь идет об учете роли длинноволнового поля, то этот учет (даже если нормальные волны делятся на продольные и поперечные) производится единым образом для полного поля, на основе использования уравнений электродинамики. В связи со сказанным под «механическими экситонами» мы будем везде понимать возбуждения, получающиеся при отсутствии или при пренебрежении не только длинноволновым поперечным электромагнитным полем, но и безвихревым макроскопическим (длинноволновым) электрическим полем (см., например, ⁸). С точки зрения решения механической задачи это означает, что в уравнениях движения безвихревое макроскопическое поле $E_{||}$ (если оно не равно нулю) отбрасывается и, таким образом, речь идет не о полном, а о приближенном учете кулоновского взаимодействия **). Фактически, конечно, при конкретных расчетах так и представляется естественным поступать, что нашло вполне ясное отражение в § 44 книги ¹². Что же касается терминологии; то в статье ¹⁴ «механическими экситонами» называются все точные и только точные решения кулоновской задачи, а реальные экситоны именуются «светоэкситонами»; ранее в статье ^{14а} те же реальные экситоны назывались «поляритонами». Как сказано, мы пользуемся другой терминологией. При этом существенным для нас моментом является то, что «механическим экситоном» именуется возбуждение, рассматриваемое без учета длинноволнового поля. В отношении же учитываемого коротковолнового (микроскопического) поля ограничение лишь кулоновским взаимодействием, как это предполагается при использовании выражения (3), 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

) Считаем, что «свободные заряды» отсутствуют, а поглощения нет, и поэтому $\operatorname{div} D = \operatorname{div} (E + 4\pi P) = 0$ (см. § 1,а, где используется величина D' , причем для непоглощающей немагнитной среды $D = D'$; в настоящем введении мы для простоты пользуемся векторами D и P , а не D' и P'). В состоянии (3) вектор поляризации $P = \int \Psi_{kl}^ \left(\frac{1}{V} \sum e r_i - P_u \right) \Psi_{kl} dr_1 \dots dr_{N_V}$, где P_u — поляризация ионов, N — концентрация электронов и V — объем кристалла.

**) Как известно, макроскопическое поле E может быть последовательным способом выделено (см., например, ¹², § 30 и 44). Таким образом, пренебрежение влиянием поля E на собственные функции и частоты может быть проведено вполне определенным образом. Заметим также, что под макроскопическим полем (в частности, полем E) здесь понимается любое поле, в разложении которого, по Фурье, представлены лишь длинные волны ($\lambda \gg a$; подробнее см. § 1,а).

о магнитном взаимодействии). Поскольку на практике обычно все же ограничиваются учетом лишь кулоновского взаимодействия, мы в тексте также упоминаем только это взаимодействие, но исключительно для того, чтобы не загромождать изложение.

Для пояснения сказанного и для целей дальнейшего изложения рассмотрим качественно простую модель. Именно, остановимся на системе NV анизотропных гармонических осцилляторов, расположенных в узлах ромбической решетки (оси второго порядка совпадают с осями x, y, z). Каждый изолированный осциллятор имеет три различных собственных частоты $\omega_i = \omega_{x,y,z}$, причем нормальные колебания отвечают колебаниям (изменению электрического дипольного момента $\mathbf{p}$) осциллятора вдоль осей решетки x, y или z . В пределе достаточно больших постоянных решетки a_x, a_y, a_z или в случае малости «сил осцилляторов» (т. е. достаточно слабого взаимодействия между осцилляторами) частоты нормальных колебаний системы можно считать NV -кратно вырожденными и также равными $\omega_{x,y,z}$. При сближении осцилляторов частоты расщепляются и нормальные колебания имеют вид $\mathbf{p}_{i,i} = \mathbf{p}_{i,i,0} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}_i - \omega_i(\mathbf{k})t)}$, где $\mathbf{p}_{i,i}$ — дипольный момент i -го осциллятора, расположенного в точке $\mathbf{r}_i$. Если рассматривать только кулоновское взаимодействие (конкретно, диполь-дипольное взаимодействие) между осцилляторами, то длинноволновые нормальные колебания по своим свойствам довольно резко разделяются на поперечные колебания поляризации ($\mathbf{p}_{i,i} \cdot \mathbf{k} = 0$), продольные ($[\mathbf{p}_{i,i} \cdot \mathbf{k}] = 0$) и все остальные. В случае поперечных колебаний поляризации продольное электрическое поле

$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{||}$ отсутствует, так как $\operatorname{div} \mathbf{P} = \operatorname{div} \left(\frac{1}{V} \sum \mathbf{p}_i \right) = 0$, $\operatorname{div} \mathbf{D} = \operatorname{div} (\mathbf{E}_{||} + 4\pi \mathbf{P}) = 0$, $\operatorname{rot} \mathbf{E}_{||} = 0$ и, таким образом, $(\mathbf{k}\mathbf{E}_{||}) = 0$ и $[\mathbf{k}\mathbf{E}_{||}] = 0$. Из соображений симметрии ясно, что поперечные нормальные колебания возможны, если моменты $\mathbf{p}_{i,i}$ и, следовательно, электрическая поляризация $\mathbf{P}$ направлены по одной из осей x, y или z , в то время как волновой вектор $\mathbf{k}$ лежит в соответствующей координатной плоскости (например, $P_x \neq 0, P_y = P_z = 0, k_x = 0$). В ромбической решетке имеются, очевидно, три «зоны» таких волн с частотами $\omega_x(k_x = 0, k_y, k_z)$, $\omega_y(k_x, k_y = 0, k_z)$ и $\omega_z(k_x, k_y, k_z = 0)$. В § 1,б эти волны («волны поляризации») будут рассмотрены макроскопически. Поскольку в «волнах поляризации» поле $\mathbf{E}_{||} = 0$, эти волны должны быть отнесены к числу «механических экситонов» и в то же время получаются при точном решении кулоновской задачи.

Волны, бегущие по одной из осей и с поляризацией вдоль той же оси (например, $P_x \neq 0, P_y = P_z = 0, k_y = k_z = 0$), представляют собой продольные волны, в которых $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{||} \neq 0$ и $\mathbf{D} = 0$. Наконец, могут существовать волны, в которых $\mathbf{D} \neq 0$ и $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{||} \neq 0$. В этих волнах, как и во всех других, вектор $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$ поперечен ($(\mathbf{k}\mathbf{D}) = 0$ в силу $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$). Но вектор $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{||}$ обязательно продольен (рассматривается чисто кулоновская задача). Поэтому вектор $\mathbf{P}$ в этих волнах («фиктивных» продольных волнах; см. § 1,б) ни продольен, ни поперечен. Только такие нормальные волны и могут в обсуждаемой модели распространяться в произвольном направлении ($k_x \neq 0, k_y \neq 0, k_z \neq 0$)*. Продольные и «фиктивные» продольные волны, рассматриваемые как точные решения кулоновской задачи, при используемой нами терминологии не принадлежат к числу «механических экситонов». Однако каждой из таких волн соответствует «механический экситон» — нормальное колебание, характеристики

*) Сделанные утверждения без более детального анализа модели вытекают из макроскопического рассмотрения (см. § 1,б), а также представляются ясными, если иметь в виду предельный случай несвязанных (невзаимодействующих) осцилляторов (при наличии же слабой связи обсуждаемые свойства модели явно не изменяются).

которого получаются при пренебрежении действием поля $E_{||}$. На примере продольной волны, бегущей по оси x , поясним, что это значит. Уравнение движения для осциллятора можно тогда записать так: $\ddot{x}_i + \omega_{xi}^2 g_{xi} = ef^{1/2} E_{||}/m$, где $p_i = ef^{1/2} x_i$ (f — «сила осциллятора») и g_i — сила, действующая со стороны всех остальных осцилляторов, за вычетом дальнедействующей части (последняя как раз и учтена в поле $E_{||}$ *). В про-

дольной волне $\mathbf{D} = \mathbf{E}_{||} + 4\pi\mathbf{P} = 0$, $P = -\frac{i}{V} \sum x_i \approx ef^{1/2} N x_i$ (рассматриваем длинные волны) и $E_{||} = -4\pi ef^{1/2} N x_i$. Таким образом, учет поля $E_{||}$ приводит к изменению квадрата собственной частоты на $\omega_0^2 = 4\pi e^2 f N/m$, причем это изменение может быть очень велико и значительно превосходить расщепление частот, обусловленное силой g_i **). В нашем примере, очевидно, «механический экситон» — это продольная волна с частотой $\omega_x + \delta\omega_x$, где $\delta\omega_x$ — изменение частоты, обусловленное силами g_{xi} . Частота же реального продольного экситона равна $\omega_{||} = \omega_x + \delta\omega_x + \omega_0$.

Сделанные замечания и дальнейшее изложение, как можно думать, не оставят сомнений в целесообразности проводить в оптике кристаллов различие между реальными экситонами и некоторыми приближенными решениями (образами), названными «механическими экситонами», именно по линии учета или неучета действия длинноволнового электромагнитного поля.

Какова же связь между реальными и «механическими» экситонами? Если иметь в виду лишь принципиальную сторону дела (а не конкретное количественное сопоставление), то ответ на этот вопрос совершенно ясен как из общих соображений, так и при рассмотрении какой-либо простой модели. Последний путь нагляднее и короче, в силу чего обратимся к обсуждавшейся модели анизотропных осцилляторов.

В случае продольных волн реальный экситон (т. е. точное решение с учетом всего электромагнитного взаимодействия) отличается от соответствующего механического экситона учетом длинноволнового поля $E_{||}$. Это приводит, как уже было пояснено, к изменению собственных частот $\omega_{||}(\mathbf{k})$. Для поперечных механических экситонов («волн поляризации») $\mathbf{P}_{\perp} \neq 0$ и $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{||} = 0$. Наличие переменной поляризации $\mathbf{P}_{\perp}$ порождает поперечное электромагнитное поле, что приводит к существенному, вообще говоря, отличию реального поперечного экситона от механического. Действительно, уравнение движения для i -го осциллятора, вносящего свой вклад, скажем, в поперечное нормальное колебание по оси y , можно записать в виде $\ddot{y}_i + \omega_{yi}^2 + g_{yi} = ef^{1/2} E_y/m$. Для выяснения качественной картины в области длинных волн можно положить $g_{yi} = 0$ («поляризационную поправку» считаем учтенной путем изменения частоты ω_y) и $P_y = ef^{1/2} N y_i$. Тогда

*) Сила g_i содержит также член дальнедействующего типа («поляризационную поправку»), связанный с отличием макроскопического поля $\mathbf{E}$ от «действующего поля» $\mathbf{F}$.

Для кубической решетки из точечных диполей, как известно, $\mathbf{F} - \mathbf{E} = \frac{4\pi}{3} \mathbf{P}$ (при $\mathbf{k}' \rightarrow 0$). В связи с этим обстоятельством в кубической решетке, поляризованной по оси x , сила g_i содержит член $(4\pi ef^{1/2}/3)P \approx (4\pi e^2 f N/3m)x_i$. Этот член можно учесть, изменяя соответствующим образом частоту ω_x ; то же относится и к кристаллам с более низкой симметрией, если не говорить о замене численного коэффициента $4\pi/3$ другим коэффициентом. В связи со сказанным и качественным характером проводимого обсуждения мы не будем явно учитывать факт отличия действующего поля от макроскопического, считая частоты $\omega_{x,y,z}$ соответствующим образом измененными, а силу g_i учитывая только короткодействующее взаимодействие (корректный классический расчет для кубической решетки см. в ¹⁵; см. также § 4,б).

**) См. предыдущее примечание.

в поле $E_y = E_{y0} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$

$$P_y = \frac{e^2 f N E_y}{m(\omega_y^2 - \omega^2)} = \frac{\varepsilon'_y - 1}{4\pi} E_y, \quad (4)$$

$$\varepsilon_y = \varepsilon'_y = 1 + \frac{4\pi e^2 f N}{m(\omega_y^2 - \omega^2)}, \quad \omega_y = \omega_y(k_x, k_y = 0, k_z).$$

Для поперечных волн уравнения поля приводят в данном случае к связи $\varepsilon'_y E_y = \hat{n}^2 E_y$, т. е.

$$\hat{n} = n + i\kappa = \sqrt{\varepsilon_y} = \sqrt{1 + \frac{4\pi e^2 f N}{m(\omega_y^2 - \omega^2)}}. \quad (4')$$

Разумеется, если частота ω_y вещественна, то поглощение отсутствует (это и предполагалось). В области $\varepsilon_y = \hat{n}^2 = -\kappa^2 < 0$ при пренебрежении пространственной дисперсией средний поток энергии в волне равен нулю (при падении на такую среду волны извне происходит полное отражение; см., например, ² и ниже § 1, в). В области прозрачности ($\kappa = 0$ и $\hat{n}^2 = n^2 > 0$)

$$k = \frac{\omega}{c} n(\omega, s) = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 + \frac{4\pi e^2 f N}{m(\omega_y^2 - \omega^2)}}. \quad (5)$$

В пределе, отвечающем классической кристаллооптике, ω_y не зависит от $\mathbf{k}$ и легко в явном виде выразить ω через k .

Итак, для реального экситона дисперсионное уравнение $\omega = \omega(\mathbf{k})$ в данном случае имеет вид (5), в то время как для механического экситона $\omega = \omega_y(\mathbf{k})$. В простейшем случае, когда зависимостью ω_y от $\mathbf{k}$ можно пренебречь (только в этих условиях проведенный примитивный расчет*) вообще достаточно убедителен без дальнейшего анализа), приведенное рассмотрение, конечно, эквивалентно общеизвестной элементарной теории дисперсии. Здесь мы, однако, как раз и хотели подчеркнуть тесную связь теории экситонов с давно и хорошо известными вопросами. Использование иной терминологии или непривычных образов иногда делает эту связь недостаточно очевидной, о чем свидетельствует содержание некоторых статей.

В классической кристаллооптике ($\omega_x, \omega_y, \omega_z = \text{const}$) пользуются обычно графиками функций $n = \sqrt{\varepsilon_{x,y,z}(\omega)}$. Для случая (5) такой график представлен на рис. 1, а. В теории экситонов чаще используется зависимость $\omega = \omega(k)$, т. е. в нашем примере график, изображенный на рис. 1, б.

Заметим, что частота $\omega_{||} = \sqrt{\omega_y^2 + \frac{4\pi e^2 f N}{m}}$ отвечает условию $\varepsilon_y(\omega) = 0$; именно эта частота $\omega_{||}$ равна частоте продольной волны, распространяющейся вдоль оси y (см. § 1, б). Вблизи частоты $\omega = \omega_{||}$, очевидно,

$$\varepsilon_y(\omega) = \left(\frac{d\varepsilon_y}{d\omega} \right)_{\omega_{||}} (\omega - \omega_{||}) = n^2 = \frac{c^2 k^2}{\omega_{||}^2}, \quad (6)$$

или

$$\omega = \omega_{||} + \frac{c^2}{\omega_{||}^2 \left(d\varepsilon_y / d\omega \right)_{\omega_{||}}} k^2.$$

Если сопоставить (6) с соотношением $W = \hbar\omega = \hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{эфф}}}$, то можно

*) О строгих расчетах см. § 4, б.

говорить ¹⁴ об эффективной массе экситона $m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2 \omega_{||}^2 (d\epsilon_y/d\omega)_{\omega_{||}}}{2c^2}$ вблизи частоты ω_0 . Использование этого термина не может, конечно, что-либо добавить к пониманию классической теории дисперсии и в применении к реальным экситонам пользоваться им мы не будем.

Если для механического экситона $\omega_y = \omega_y(\mathbf{k})$, то ϵ_y зависит от $\mathbf{k}$ — это соответствует учету пространственной дисперсии.

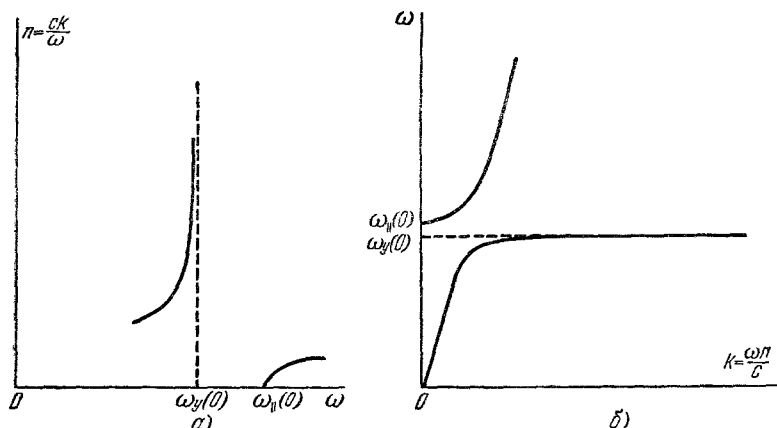


Рис. 1.

Характер кривых $n(\omega)$ и $\omega(k)$ в подобных условиях при $k_x = k_y = 0$, $k_z = k \neq 0$ (или при $k_y = k_z = 0$, $k_x = k \neq 0$) и при выбранной некоторой определенной зависимости ω_y от k ясен из рис. 2. Заметим, что для оптических колебаний ионной решетки зависимость $\omega_y(k)$ в простейшем случае

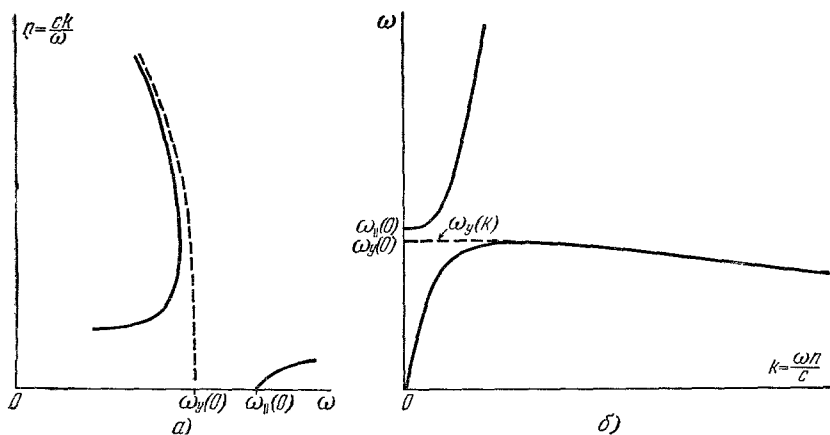


Рис. 2.

как раз отвечает по форме пунктирной кривой на рис. 2. Переход от механических колебаний (механических экситонов) к реальным электромагнитным волнам (экситонам) для этого случая также легко проследить, что и было давно сделано ^{12,16,17}. Результат в качественном отношении такой же, как для модели осцилляторов, и отражен на рис. 2. Это и понятно, ибо теория дисперсии носит весьма общий характер и лишь учет поглощения может существенно изменить кривые рис. 1 и 2 (если, конечно, речь идет о рассмотрении только одной резонансной частоты и одной функции $\epsilon_{x,y,z}$; см. § 3,б).

Рассмотрим теперь «механический экситон» третьего типа (т. е. не продольный и не поперечный относительно поляризации $\mathbf{P}$). В обсуждаемой модели к числу таких экситонов относятся, в первую очередь, все механические нормальные волны с $k_x \neq 0$, $k_y \neq 0$, $k_z \neq 0$. Вектор $\mathbf{P}$ при этом имеет поперечную компоненту, что порождает поперечное электромагнитное поле. Соответствующий реальный экситон не является поэтому ни продольным, ни поперечным (речь идет о поле $\mathbf{E}$), а закон дисперсии для него $\omega = \omega(\mathbf{k})$ отличается от закона дисперсии для механического экситона, вообще говоря, еще сильнее, чем в случае поперечных экситонов. В пределе $k \rightarrow 0$ картина легко может быть выяснена из формул классической кристаллооптики или на основе той же осцилляторной модели. Этому вопросу мы еще коснемся ниже (см. § 1, б).

Из выражения (5) или рис. 1 и 2 ясно, что при больших значениях k (или n), но частотах $\omega \sim \omega_{||}(0) \sim \omega_y(0)$, приближенно

$$\omega(\mathbf{k}) \approx \omega_y(\mathbf{k}), \quad k \rightarrow \infty, \quad \omega \lesssim \omega_{||}(0). \quad (7)$$

Другими словами, с ростом k свойства реальных поперечных экситонов приближаются к свойствам поперечных механических экситонов. Этот результат является весьма общим и имеет ясный физический смысл (равенство (7) есть условие резонанса в (5)). Что касается частот непоперечных (относительно $\mathbf{P}$) механических экситонов, то при $k \rightarrow 0$ они совпадают с частотами поперечных экситонов с тем же направлением колебаний, так как при $k = 0$ направление поляризации, при неучете дальнего действия длинноволнового поля $\mathbf{E}_{||}$, не может играть роли. Поскольку в интересующей нас области пространственная дисперсия слаба (вектор $\mathbf{k}$ мал по сравнению с $1/a_{x,y,z}$), различие между частотами механических экситонов с данной поляризацией $\mathbf{P}$, но разными $\mathbf{k}$, также будет мало. В отношении же точных решений кулоновской задачи с $\mathbf{E}_{||} \neq 0$ (т. е. для продольных и «фиктивных» продольных волн) это уже не так, например, частота продольной волны отличается от частот поперечных волн на величину порядка $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi e^2 f N}{m}}$, а «плазменная» частота ω_0 в конденсированной среде обычно весьма велика.

Если свойства реальных и механических экситонов совпадают лишь в предельных случаях (см., например, (7)), то связь между ними, разумеется, имеет место всегда. Это очевидно из тех же выражений (4) — (5)', показывающих, что диэлектрическая проницаемость и, следовательно, все свойства реальных экситонов определяются частотами механических экситонов. При использовании же общей дисперсионной формулы ясно, что энергии (частоты) и собственные функции механических экситонов в определенных условиях полностью определяют тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. На последнем вопросе мы остановимся в § 4. Необходимо вместе с тем подчеркнуть, что сколь угодно детальное и полное изложение не только квантовомеханической теории механических экситонов, но и конкретных вычислений $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, не входит в задачи настоящей статьи. Что же касается соответствующих замечаний, которые были сделаны выше, а также последуют в § 3 и 4, то они продиктованы в основном методическими соображениями. По той же причине материал в статье излагается в большинстве случаев довольно подробно, причем это относится и к элементарным вопросам. Как нам представляется, такой характер изложения оправдан, так как в огромной литературе по теории экситонов имеется немало пуганицы и недоразумений. Заметим, наконец, что сравнительно подробно излагая некоторые моменты, авторы в то же время ни в какой мере не претендуют на полноту освещения затронутых проблем теории экситонов (то же относится и к списку цитированной литературы).

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

а) Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и его свойства. Уравнения электромагнитного поля запишем в виде

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}'}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{D}' = 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \end{aligned} \quad (1,1)$$

Здесь $\mathbf{E}$ — напряженность электрического поля, а $\mathbf{B}$ — магнитная индукция, фигурирующие в выражении для силы $\mathbf{F} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right)$, действующей на частицу с зарядом e и скоростью $\mathbf{v}$. Плотность заряда ρ_0 и плотность тока $\mathbf{j}_0$, соответствующие внешним источникам, считаются в (1,1) равными нулю (в противном случае $\operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}'}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_0$ и $\operatorname{div} \mathbf{D}' = 4\pi\rho_0$). Используемая в (1,1) электрическая индукция $\mathbf{D}'$ определяется соотношением

$$\frac{\partial \mathbf{D}'}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \mathbf{j}, \quad (1,2)$$

где $\mathbf{j}$ — плотность тока, индуцированного в среде*).

Во избежание недоразумений подчеркнем, что нигде ниже не будет идти речь об усреднении полей по малым областям. Последняя процедура не нужна, да и не представляется выполнимой в электродинамике сред, последовательно учитывающей пространственную дисперсию.

В линейной электродинамике связь между $\mathbf{D}'$ и $\mathbf{E}$ может быть записана в следующем 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 и ниже по дважды встречающимся индексам проводится суммирование.

Зависимость ядра этого интегрального соотношения от разности $t - t'$ обусловлена предполагаемой однородностью свойств среды во времени (другими словами, свойства среды считаются неизменными во времени). Если же под влиянием каких-либо причин (например, переменного внешнего давления) свойства среды меняются со временем, то $\hat{\epsilon}_{ij} = \epsilon_{ij}(t, t', \mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Далее, интегрирование по t' в (1,3) распространено только на интервал от $-\infty$ до t , в связи с требованием принципа причинности: индукция $\mathbf{D}'(\mathbf{r}, t)$ определяется значениями поля $\mathbf{E}$ только в прошлом и настоящем, т. е. при $t' \leq t$. Если среда также пространственно однородна (все ее точки равноправны), то

$$D'_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \hat{\epsilon}_{ij}(t-t', \mathbf{r}-\mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', t'). \quad (1,4)$$

*) Здесь через $\mathbf{j}$ обозначена плотность тока в системе, находящейся в определенном состоянии или после усреднения с помощью статистической матрицы (тем самым флуктуационные явления не рассматриваются, вопрос о флуктуациях освещен в работе ¹⁰). В традиционных для теории поля обозначениях вместо $\mathbf{D}'$ используется выражение $\mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + c \operatorname{rot} \mathbf{M}$, где $\mathbf{j}$ — плотность тока проводимости, $\mathbf{P} = (\mathbf{D} - \mathbf{E})/4\pi$ — электрическая поляризация и $\mathbf{M}$ — намагничение (другими словами, используемая нами величина $\mathbf{D}'$ и вводимая обычно индукция $\mathbf{D}$ совпадают только для непоглощающей немагнитной среды).

Перейдем в этой формуле к трансформантам Фурье, полагая $E_j(\mathbf{r}, t) = \int E_j(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d\omega d\mathbf{k}$ (для трансформант $E_j(\mathbf{k}, \omega)$ и оригиналов $E_j(\mathbf{r}, t)$ используются одинаковые обозначения E_j , что не приведет к путанице в связи с указанием аргументов; аналогичные обозначения используются и для других величин). Впрочем, для получения $D_i(\mathbf{k}, \omega)$ даже нет нужды проводить фурье-преобразование, а достаточно положить в (1,4) $\mathbf{E}(\mathbf{r}', t') = \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}' - \omega t')}$. В результате

$$D_i(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k}, \omega),$$

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \int_0^\infty d\tau \int d\mathbf{R} e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R} - \omega\tau)} \hat{\varepsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R}), \quad (1,5)$$

причем компонента $D_i(\mathbf{k}, \omega)$ связана только с компонентами $E_j(\mathbf{k}, \omega)$ с теми же значениями ω и $\mathbf{k}$; это имеет место в силу временной и пространственной однородности среды, т. е. обусловлено зависимостью ε_{ij} лишь от разностей $\tau = t - t'$ и $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

Величина $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ называется тензором комплексной диэлектрической проницаемости.

Зависимость тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ от частоты соответствует частотной дисперсии, а зависимость от волнового вектора — пространственной дисперсии. Область, в которой ядро $\hat{\varepsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{R})$ сколько-нибудь значительно, определяется характерными частотами среды ω_i (а также обратными временами релаксации) и характерными размерами a_i .

Частоты ω_i обычно лежат в довольно широких пределах. Размеры a («радиус молекулярного действия» и т. п.), наоборот, в целом ряде случаев могут считаться малыми. В жидкостях и твердых телах роль a_i играют размеры молекул, расстояние 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 дисперсия.

При пренебрежении пространственной дисперсией $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega, 0) \equiv \varepsilon_{ij}(\omega)$, причем в однородной изотропной среде, конечно, $\varepsilon_{ij}(\omega) = \varepsilon(\omega)\delta_{ij}$ (примером однородной, но анизотропной среды являются жидкие кристаллы). При учете пространственной дисперсии в изотропной, негиротропной среде $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = (\delta_{ij} - k_i k_j / k^2) \varepsilon^{\text{tr}}(\omega, k) + (k_i k_j / k^2) \varepsilon^{\text{l}}(\omega, k)$, причем $\varepsilon^{\text{tr}}(\omega, 0) = \varepsilon^{\text{l}}(\omega, 0) = \varepsilon(\omega)$ (подробнее см. ниже). Отметим, что тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, как это ясно из (1,4) и (1,5), описывает и магнитные свойства среды (в случае, если $\mathbf{D}'$ зависит также от $\mathbf{B}$, соотношение (1,3) остается в силе, так как поле $\mathbf{B}$ можно считать выраженным через $\mathbf{E}$ с помощью уравнения $\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$). Вводить же дополнительно магнитную проницаемость $\mu_{ij}(\omega)$ нужно только при переходе к тензору $\varepsilon_{ij}(\omega)$. Соответствующий предельный переход довольно своеобразен¹⁰; здесь мы на этом вопросе останавливаться не будем, поскольку для оптических частот $\mu_{ij}(\omega) = \delta_{ij}$ (см. также¹, § 60). Это обстоятельство уже используется, когда мы полагаем $\varepsilon_{ij}(\omega, 0) = \varepsilon_{ij}(\omega)$. Заметим также, что формула (1,5) или ее аналитическое продолжение, вообще говоря, определяют тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ не только при вещественных, но и при комплексных значениях ω и $\mathbf{k}$. Тензор ε_{ij} не лишается при этом физического смысла, так как связывает $\mathbf{D}'$ с полем $\mathbf{E}$, амплитуда которого нарастает или затухает во времени и в пространстве. Правда, такие амплитуды неограниченно возрастают при удалении на бесконечность в соответствующих областях комплексной плоскости. Однако поле вида $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$ при вещественных ω и $\mathbf{k}$ также не отвечает реаль-

ности, поскольку такая волна заполняет все пространство — время. При любой же конкретной физической постановке задачи приходится иметь дело с интегралом по частотам и волновым векторам (т. е. с волновыми пакетами; сюда относятся также задачи с граничными и начальными условиями) и, строго говоря, роль играют лишь конечные значения t и r . Поэтому в области, где функции $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ определены, ими можно пользоваться без опасений. Тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, вообще говоря, имеет обратный тензор $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$, так что

$$E_i(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D_j(\mathbf{k}, \omega). \quad (1,6)$$

Кристалл не является пространственно-однородной средой, но для длинных волн ($\lambda_0 \gg a$) тензором $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ можно пользоваться и в этом случае. Анализ вопроса о введении $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах будет проведен в § 2, а, здесь же пойдет речь о любой среде, для которой имеют место связи (1,5) — (1,6).

На энергетических соотношениях мы остановимся в § 1, в. Сейчас отметим лишь, что при вещественных ω и $\mathbf{k}$ для монохроматической волны выделяющееся тепло пропорционально разности $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \varepsilon_{ji}^*(\omega, \mathbf{k})$, где звездочкой отмечена комплексно-сопряженная величина (см. также § 1, в). Таким образом, в указанных условиях поглощение энергии отсутствует, если тензор ε_{ij} эрмитов:

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ji}^*(\omega, \mathbf{k}). \quad (1,7)$$

Тензор ε_{ij} является, вообще говоря, комплексным даже при вещественных ω и $\mathbf{k}$. Как в этом, так и в общем случае бывает удобно разделить ε_{ij} на две эрмитовы части ε'_{ij} и ε''_{ij} :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k}) + i\varepsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k}) \equiv \delta_{ij} + i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{ij}(\omega, \mathbf{k}), \\ \varepsilon'_{ij} &= \varepsilon_{ji}^*, \quad \varepsilon''_{ij} = \varepsilon_{ji}^{\prime\prime*}, \end{aligned} \quad (1,8)$$

где введен также используемый иногда комплексный тензор проводимости $\sigma_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \sigma'_{ij}(\omega, \mathbf{k}) + i\sigma''_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ (предполагаем, что $\omega \neq 0$, а тензоры σ'_{ij} и σ''_{ij} — эрмитовы *).

Из (1,7) очевидно, что при отсутствии поглощения и вещественных ω и $\mathbf{k}$ тензор $\varepsilon''_{ij} = 0$.

Вещественное поле $\mathbf{E}$ должно приводить к вещественной индукции $\mathbf{D}'$, в силу чего (см. (1,4) — (1,5) и § 1, в)

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^*(-\omega, -\mathbf{k}), \quad (1,9)$$

причем здесь ω и $\mathbf{k}$ считаются вещественными. Если же частота ω вещественна, а вектор $\mathbf{k}$ — комплексен (с этим случаем нам придется иметь дело),

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^*(-\omega, -\mathbf{k}^*). \quad (1,9a)$$

В силу принципа симметрии кинетических коэффициентов имеем (доказательство см., например, в работе¹⁰: оно является непосредственным обобщением соответствующего доказательства для тензора $\varepsilon_{ij}(\omega)$):

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k}). \quad (1,10)$$

*) Применяются и смешанные обозначения²: $\varepsilon'_{ij} = \varepsilon_{ij} \pm i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{ij}$, где полный тензор отмечается штрихом, а его эрмитова часть записывается без штриха (кроме того, здесь σ_{ij} , в отличие от (1,8), является эрмитовым тензором). Выбор знаков $\pm$ перед σ_{ij} соответствует записи волны в виде $e^{\pm i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$; в настоящей статье выбран знак «+».

Здесь и обычно ниже предполагается, что индукция постоянного магнитного поля $\mathbf{B}_{\text{ext}} = 0$; в противном случае $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{B}_{\text{ext}}) = \varepsilon_{ji}(\omega, -\mathbf{k}, -\mathbf{B}_{\text{ext}})$. Если среда имеет центр симметрии (т. е. имеют центр симметрии молекулы газа или ячейки кристалла), направления $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ эквивалентны и

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ji}(\omega, \mathbf{k}). \quad (1,11)$$

Естественным образом обобщая обычные определения, среду, в которой удовлетворяется условие (1,11), назовем негиротропной, а при несоблюдении этого условия — гиротропной или естественно-активной (при этом нужно иметь в виду, что соотношение (1,11) может выполняться и при отсутствии центра симметрии; другими словами, отсутствие центра симметрии необходимо, но не достаточно для появления гиротропии; см. § 2, б).

Для негиротропной среды и $\mathbf{B}_{\text{ext}} = 0$, когда имеет место соотношение (1,11), тензоры $\varepsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\varepsilon''_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ являются вещественными, поскольку симметричный эрмитов тензор всегда веществен (см. (1,8) и (1,11)). В частности, это имеет место при отсутствии пространственной дисперсии и $\mathbf{B}_{\text{ext}} = 0$. (Индукция $\mathbf{B}_{\text{ext}} \neq 0$ при наличии внешнего поля или в ферромагнетиках.) В этой связи обычно через ε'_{ij} и ε''_{ij} обозначают вещественную и мнимую части ε_{ij} . Мы тоже иногда будем так поступать, если это не может повести к недоразумениям.

В силу принципа причинности, уже использованного в (1,3) и (1,4), тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ обладает определенными аналитическими свойствами. Использование этих свойств позволяет интегральным образом связать вещественную и мнимую части ε_{ij} при вещественных ω и $\mathbf{k}$. Все рассмотрение проводится так же, как для изотропной среды без пространственной дисперсии (см., например, ¹). В результате (см. также ¹⁰)

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im} \varepsilon_{ij}(\omega', \mathbf{k})}{\omega' - \omega} d\omega', \\ \operatorname{Im} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega', \mathbf{k}) - \delta_{ij}}{\omega' - \omega} d\omega'. \end{aligned} \quad (1,12)$$

Здесь интегралы берутся в смысле главного значения и для простоты положено, что

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega_{ij} \varepsilon(\omega, \mathbf{k}) \rightarrow 0.$$

Эрмитовы тензоры ε'_{ij} и ε''_{ij} можно представить в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{ij} &= \varepsilon'_{ij,c} + i\varepsilon'_{ij,a}, \quad \varepsilon''_{ij} = \varepsilon''_{ij,c} + i\varepsilon''_{ij,a}, \quad \operatorname{Re} \varepsilon_{ij} = \varepsilon'_{ij,c} - \varepsilon''_{ij,a}, \\ \varepsilon'_{ij,c} &= \varepsilon'_{ji,c}, \quad \varepsilon''_{ij,c} = \varepsilon''_{ji,c}, \quad \varepsilon'_{ij,a} = -\varepsilon'_{ji,a}, \quad \varepsilon''_{ij,a} = -\varepsilon''_{ji,a}, \quad \operatorname{Im} \varepsilon_{ij} = \varepsilon'_{ij,a} + \varepsilon''_{ij,c}, \end{aligned} \quad (1,8a)$$

где все тензоры со значками c и a являются вещественными. Если $\mathbf{B}_{\text{ext}} = 0$ и выполнено условие (1,11), то $\varepsilon'_{ij,a} = \varepsilon''_{ij,a} = 0$ и в (1,12) можно просто положить $\operatorname{Re} \varepsilon_{ij} = \varepsilon'_{ij}$ и $\operatorname{Im} \varepsilon_{ij} = \varepsilon''_{ij}$. В общем же случае, из (1,12) и (1,8a) получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{ij,c}(\omega, \mathbf{k}) - \delta_{ij} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon''_{ij,c}(\omega', \mathbf{k})}{\omega' - \omega} d\omega', \quad \varepsilon''_{ij,c}(\omega, \mathbf{k}) = \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\{\varepsilon'_{ij,c}(\omega', \mathbf{k}) - \delta_{ij}\}}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (1,12a) \\ \varepsilon'_{ij,a} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon''_{ij,a}(\omega', \mathbf{k})}{\omega' - \omega} d\omega', \quad \varepsilon''_{ij,a}(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon'_{ij,a}(\omega', \mathbf{k})}{\omega' - \omega} d\omega'. \end{aligned}$$

Заметим, что при выводе формул (1,12) в известных нам источниках^{10,18} не только частота ω , но и вектор $\mathbf{k}$ считаются вещественными. Между тем считать обе величины ω и $\mathbf{k}$ вещественными можно лишь в предельном случае прозрачной среды. Поскольку в (1,12) — (1,12а) имеется интегрирование по частоте, предположение о прозрачности во всем интервале явно недопустимо. Поэтому использовать соотношения (1,12) — (1,12а) при наличии пространственной дисперсии для анализа распространения волн в среде можно только при их обобщении на комплексные значения $\mathbf{k}$. Соотношение (1,10) получается (см.¹⁰) при использовании формул (1,12) и поэтому тоже доказано в¹⁰ только при вещественных $\mathbf{k}$. Поскольку $\mathbf{k}$ входит в выражения (1,12) как параметр, нам представляется, что эти выражения и формула (1,10) должны быть справедливы и при комплексных $\mathbf{k}$. При этом предполагается, что тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ однозначным образом определен при рассматриваемых комплексных значениях $\mathbf{k}$. Вероятно, здесь существенно также отсутствие у $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в соответствующей области изменения переменных каких-либо особенностей (аналитичность). В интересующем нас случае слабой пространственной дисперсии (см. § 2,б) тензор ε_{ij} или другие используемые тензоры как раз не имеют недопустимых особенностей вблизи точки $\mathbf{k} = 0$, в которой формулы (1,12) заведомо справедливы. Учет того факта, что скорость сигнала не превосходит c , приводит^{18,10} к дисперсионным соотношениям, которые являются более общими, чем (1,12).

Некоторые неравенства для производных ε_{ij} по ω следуют из (1,12) и принципа возрастания энтропии (см.¹⁹ и § 1,в). Отметим, наконец, что все свойства (в частности, свойства симметрии) тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ переносятся и на обратный тензор $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$. Использование же тензора ε_{ij} или ε_{ij}^{-1} , т. е. связей (1,5) или (1,6), в широких пределах эквивалентно и определяется соображениями удобства.

б) Нормальные электромагнитные волны в среде. Поперечные и продольные волны. «Фиктивные» продольные волны и «волны поляризации». Будем искать решение уравнений поля (1,1) в виде плоских волн

$$\mathbf{E}_l = \mathbf{E}_{0l} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{B}_l = \mathbf{B}_{0l} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{D}'_l = \mathbf{D}'_{0l} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (1,13)$$

где $\mathbf{E}_{0l}$, $\mathbf{B}_{0l}$, $\mathbf{D}'_{0l}$ — постоянные.

Тогда имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}' &= -\frac{c}{\omega} [\mathbf{k}\mathbf{B}], \quad \mathbf{k}\mathbf{D}' = 0, \\ \mathbf{B} &= \frac{c}{\omega} [\mathbf{k}\mathbf{E}], \quad \mathbf{k}\mathbf{B} = 0. \end{aligned} \quad (1,14)$$

Отсюда, исключая $\mathbf{B}$, получаем «волновое уравнение»

$$\mathbf{D}' = \frac{c^2}{\omega^2} \{k^2 \mathbf{E} - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{E})\}. \quad (1,15)$$

Волны (1,13) могут, очевидно, быть решениями уравнений *) поля только, если связь между $\mathbf{D}'$ и $\mathbf{E}$ такова, что связанными оказываются лишь волны с одинаковыми ω и $\mathbf{k}$. Это как раз и имеет место в условиях, когда можно ввести тензоры $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ или $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$.

Подставляя связь (1,5) в (1,15), получаем систему линейных уравнений

$$\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{ij} E_j - k^2 E_i + k_i k_j E_j = 0. \quad (1,16)$$

*) Рассмотрение волн типа (1,13) может оказаться недостаточным при значениях ω и $\mathbf{k}$, отвечающих кратным корням дисперсионного уравнения. На этом вопросе, не играющем большой роли, мы остановимся в § 3,а.

Условие существования у этой системы нетривиального решения приводит к связывающему ω с $\mathbf{k}$ дисперсионному уравнению (значки Δ или $\|$ соответствуют определителям):

$$\Delta_1(\omega, \mathbf{k}) = \left\| \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \omega) - k^2 \delta_{ij} + k_i k_j \right\| = 0. \quad (1,17)$$

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

$$\Delta_2(\omega, \mathbf{k}) = \left\| \frac{\omega^2}{c^2} \delta_{ij} - k^2 \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) + k_i k_j \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) \right\| = 0. \quad (1,18)$$

Конечно, в условиях, когда одновременно существуют оба тензора ε_{ij} и ε_{ij}^{-1} , уравнения (1,17) и (1,18) эквивалентны. Если не оговорено противное, такая ситуация и будет предполагаться.

Корни уравнения (1,17) — частоты нормальных волн, будем различать индексом l , т. е. обозначать как $\omega_l = \omega_l(\mathbf{k})$, где ω_l и $\mathbf{k}$ являются, вообще говоря, комплексными. Возможность выбора одной из этих величин ω_l или $\mathbf{k}$ в качестве вещественной переменной определяется постановкой физической задачи (см., например, ²). В кристаллооптике обычно частота ω вещественна (это частота света от внешнего источника). Но и при вещественной частоте ω в общем случае $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$ и лишь в области прозрачности приближенно вектор $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ ($\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}''$ — вещественны). Ниже будут обычно рассматриваться лишь однородные плоские волны, для которых

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \hat{n} \mathbf{s}, \quad \hat{n}(\omega, \mathbf{s}) = n + i\kappa, \quad (1,19)$$

где $\mathbf{s} = \frac{\mathbf{k}}{k}$ — единичный вещественный вектор и частота ω — вещественна. В тех случаях, когда будет появляться вектор $\mathbf{s}$, подразумевается без дальнейших пояснений, что совершен переход к однородным волнам. В условиях (1,19), очевидно, утверждение о комплексности $\mathbf{k}$ при вещественной ω означает, что $\kappa \neq 0$.

Уравнение (1,15) имеет теперь вид

$$\mathbf{D}' = \hat{n}^2 \{ \mathbf{E} - \mathbf{s}(\mathbf{sE}) \}. \quad (1,20)$$

Дисперсионное уравнение (1,17) имеет в этом случае такую форму:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} \left(\omega, \frac{\omega}{c} \hat{n} \mathbf{s} \right) - \hat{n}^2 (\delta_{ij} - s_i s_j) &= \\ = \varepsilon_{ij} s_i s_j \hat{n}^4 - [(\varepsilon_{ij} s_i s_j) \varepsilon_{li} - s_i \varepsilon_{li} \varepsilon_{lj} s_j] \hat{n}^2 + |\varepsilon_{ij}| &= 0. \end{aligned} \quad (1,21)$$

Индукция $\mathbf{D}'$ всегда поперечна (т. е. $\mathbf{sD}' = 0$), и ниже термины «поперечные» и «продольные» волны будут применяться, как обычно, только в отношении вектора $\mathbf{E}$. В общем случае нормальные волны в анизотропной среде не являются ни поперечными, ни продольными. Однако при некоторых условиях волны могут быть продольными или поперечными, и мы остановимся на этих случаях. Для поперечных волн, согласно (1,20),

$$\mathbf{D}' = \hat{n}^2 \mathbf{E}, \quad \mathbf{sE} = 0, \quad \mathbf{sD}' = 0. \quad (1,22)$$

Для иллюстрации в настоящем разделе мы укажем характер различных нормальных волн для ромбического кристалла в пределе $\mathbf{k} \rightarrow 0$, т. е. полагая $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega)$ (классическая кристаллооптика). Для такого кристалла главные оси тензора ε_{ij} при всех ω совпадают с осями второго 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 к плоскостям симметрии). В этой системе координат диагональные элементы ε_{ij} , равные ε_x , ε_y и ε_z , различны (при отсутствии случайного вырождения, что

предполагается). Поперечными являются волны с вектором $\mathbf{E}$, направленным по любой из осей x, y, z . Вектор $\mathbf{k}$ при этом лежит в одной из координатных плоскостей. В системе главных осей x, y, z для поперечных волн

$$n_{1,2,3}^2 = \varepsilon_{x,y,z}(\omega). \quad (1,23)$$

В произвольной системе осей для поперечных волн (см. (1,16), (1,19), (1,23))

$$|\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \hat{n}^2 \delta_{ij}| = 0. \quad (1,22a)$$

Это уравнение справедливо и при наличии пространственной дисперсии.

Заметим, что поперечным волнам соответствуют только те решения уравнения (1,23), которые совместимы с условием поперечности $\mathbf{sE} = 0$. Поэтому пользоваться уравнением (1,22a), конечно, неудобно и нерационально. Для продольных волн, как ясно из (1,20),

$$\mathbf{D}' = 0, \quad \mathbf{E} = E\mathbf{s}. \quad (1,24)$$

Вектор $\mathbf{E}$ может быть не равен нулю при $D'_i = \varepsilon_{ij}, E_j = 0$ только тогда, если

$$|\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})| = 0. \quad (1,25)$$

Кроме того, нужно быть уверенным, что для рассматриваемого решения вектор продольен, т. е. $\mathbf{E} = E\mathbf{s}$. Вопрос о продольных волнах особенно часто рассматривается в применении к плазме и достаточно хорошо изучен (см., например, ²). Тем не менее мы сделаем несколько замечаний об этих волнах. Из уравнений поля (1,14) следует, что в продольных волнах $\mathbf{B} = 0$, и они, таким образом, могут рассматриваться с учетом только кулоновского поля *).

При отсутствии пространственной дисперсии условие (1,25) определяет возможные частоты продольных волн $\omega_{||}$, которые не зависят от $\mathbf{k}$. Поэтому групповая скорость $\mathbf{u} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = 0$ и, следовательно, только учет пространственной дисперсии обеспечивает распространение продольных волн (в том смысле, что $\mathbf{u} \neq 0$).

В изотропной негиротропной среде, как уже указывалось в § 1,а,

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = (\delta_{ij} - s_i s_j) \varepsilon^{\text{tr}}(\omega, k) + s_i s_j \varepsilon^{\text{l}}(\omega, k). \quad (1,26)$$

К этому выражению приходим, учитывая, что в изотропной среде тензор 2-го ранга можно образовать, только используя тензор δ_{ij} ($\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$, $\delta_{ij} = 1$ при $i = j$) и тензор $s_i s_j$. Введение обозначений ε^{tr} и ε^{l} связано с тем, что в поперечном поле $\mathbf{E}$, когда $\mathbf{sE} = 0$,

$$\mathbf{D}' = \varepsilon^{\text{tr}}(\omega, k) \mathbf{E} \quad (\text{при } \mathbf{sE} = 0). \quad (1,27)$$

В продольном поле, когда $\mathbf{E} = E\mathbf{s}$,

$$\mathbf{D}' = \varepsilon^{\text{l}}(\omega, k) \mathbf{E} \quad (\text{при } \mathbf{E} = E\mathbf{s}). \quad (1,28)$$

Легко видеть, что волны в изотропной среде могут быть либо продольными, либо поперечными. При этом для поперечных волн (см. (1,22) и (1,27))

$$\hat{n}_{\perp}^2 = \varepsilon^{\text{tr}}\left(\omega, \frac{\omega}{c} \hat{n}_{\perp}\right); \quad (1,29)$$

для продольных волн, согласно (1,24) и (1,28),

$$\varepsilon^{\text{l}}\left(\omega, \frac{\omega}{c} \hat{n}_{\parallel}\right) = 0. \quad (1,30)$$

*) Равенство $\mathbf{B} = 0$ в продольных волнах относится, конечно, только к полю волны, как это и принято в (1,14). При наличии внешнего магнитного поля $\mathbf{B}_{\text{ext}} = \text{const}$ продольная волна может распространяться лишь в направлении вектора $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ (см. ²).

Разумеется, уравнение (1,30) получается и в результате подстановки выражения (1,26) в общее соотношение (1,25). При пренебрежении пространственной дисперсией $\epsilon^{\text{tr}} = \epsilon^1 = \epsilon(\omega)$ и частоты продольных волн определяются уравнением $\epsilon(\omega_{||}) = 0$.

Для ромбических кристаллов при $k = 0$ в системе главных осей условие (1,25) для продольных волн имеет вид

$$\epsilon_x(\omega) \epsilon_y(\omega) \epsilon_z(\omega) = 0.$$

При отсутствии случайного вырождения эти продольные волны направлены по одной из главных осей x, y, z и имеют частоту $\omega_{||}$, удовлетворяющую соответствующему уравнению $\epsilon_x(\omega) = 0$, $\epsilon_y(\omega) = 0$ или $\epsilon_z(\omega) = 0$. Только для вектора $\mathbf{k}$, направленного по одной из осей x, y, z , все нормальные волны в ромбическом кристалле являются поперечными или продольными, что понятно уже из соображений симметрии. Для вектора $\mathbf{k}$, лежащего в координатной плоскости (но не направленного по оси), одна из нормальных волн поперечная, но другая уже ни продольная, ни поперечная *). Последнее относится ко всем нормальным волнам в случае вектора $\mathbf{k}$, лежащего вне координатных плоскостей. При этом мы имеем в виду оптическую область или, формально, конечные значения k , а также лишь решения, удовлетворяющие всем уравнениям поля. Если же рассматривать большие значения k (короткие волны), то волны с конечным значением D' и неравным нулю полем E приближаются к продольным. Это сразу же ясно из волнового уравнения — формулы (1,20): в области прозрачности $\hat{n} = n$ и при конечной частоте ω предел $k = \frac{\omega}{c} n \rightarrow \infty$ соответствует пределу $n \rightarrow \infty$; но при $\hat{n} = n \rightarrow \infty$, согласно (1,20), индукция D' конечна только при $E = s(sE)$, т. е. для неравного нулю поля $E \neq 0$ лишь для продольных волн. При переходе к модулям то же относится к произвольному $\hat{n}$, но фактически при учете поглощения модуль $|\hat{n}|$ конечен и переход к пределу $|\hat{n}| \rightarrow \infty$ неосуществим. При учете пространственной дисперсии модуль $|\hat{n}|$, вообще говоря, конечен даже при пренебрежении поглощением (см. § 3,б). Эти моменты, однако, здесь несущественны, поскольку предельный переход $k \rightarrow \infty$ имеет формальное значение — физически речь идет только о том, что при достаточно больших значениях $k = \omega |\hat{n}|/c$ волны с $E \neq 0$ близки к продольным.

Для выяснения условий возрастания n воспользуемся раньше всего хорошо известным уравнением, определяющим n в классической кристаллооптике для одноосного непоглощающего кристалла:

$$n_1^2 = \epsilon'_1 = \epsilon'_x = \epsilon'_y, \quad \frac{1}{n_2^2} = \frac{s_x^2 + s_y^2}{\epsilon'_z(\omega)} + \frac{s_z^2}{\epsilon'_1(\omega)} \quad (1,31)$$

(ось z выбрана по оптической оси, например, оси четвертого порядка в случае тетрагонального кристалла).

Показатель преломления для необыкновенной волны n_2 обращается в бесконечность при условии

$$\epsilon'_1(\omega) (s_x^2 + s_y^2) + \epsilon'_z(\omega) s_z^2 = 0. \quad (1,32)$$

Для того чтобы это условие удовлетворялось, показатели ϵ'_1 и ϵ'_z должны, очевидно, иметь разные знаки, но могут не обладать никакими особенностями (полюсами).

*) В таких волнах направление потока энергии S (или вектора групповой скорости $\mathbf{u} = d\omega/d\mathbf{k}$) не совпадает с $\mathbf{k}$ (см. также § 1,в).

В пределах классической кристаллооптики, в условиях совпадения главных осей тензоров $\epsilon'_{ij}(\omega)$ и $\epsilon''_{ij}(\omega)$, удобно перейти к системе этих осей. В этой системе дисперсионное уравнение (1,21) имеет вид

$$(\epsilon_x s_x^2 + \epsilon_y s_y^2 + \epsilon_z s_z^2) \hat{n}^4 - [\epsilon_x (\epsilon_y + \epsilon_z) s_x^2 + \epsilon_y (\epsilon_x + \epsilon_z) s_y^2 + \epsilon_z (\epsilon_x + \epsilon_y) s_z^2] \hat{n}^2 + \epsilon_x \epsilon_y \epsilon_z = 0. \quad (1,33)$$

Корень этого уравнения может обратиться в бесконечность при конечных значениях ϵ_x , ϵ_y и ϵ_z только при условии, непосредственно обобщающем (1,32):

$$\epsilon_x^2 s_x^2 + \epsilon_y^2 s_y^2 + \epsilon_z^2 s_z^2 = 0. \quad (1,34)$$

Если же не переходить к системе главных осей, то, как легко видеть, уравнение (1,34) записывается в виде

$$\epsilon_{ij}(\omega) s_i s_j = 0. \quad (1,35)$$

Частоты $\omega_{||}$, удовлетворяющие уравнению (1,35) или приведенному ниже более общему уравнению (1,39), будем называть частотами «фиктивных» продольных волн; в этих волнах $\mathbf{D}' \neq 0$ и $\mathbf{E} = E\mathbf{s}$.

Как сказано, «фиктивные» продольные волны удовлетворяют уравнениям поля лишь при $\mathbf{k} \rightarrow \infty$. Если, однако, рассматривать уравнение (1,35) независимо от уравнений поля, что имеет известный смысл (см. ниже), то частоты $\omega_{||}$ оказываются зависящими от s и при $k = 0$ (в (1,35) абсолютное значение k не входит). Это значит, что частоты $\omega_{||}$ не являются аналитическими функциями k при $k \rightarrow 0$.

Частоты $\omega_{||}$ отвечают резонансу — уходу в бесконечность кривых $n(\omega)$, — только для непоперечных волн. Последнее ограничение связано с тем, что строго поперечные волны (см. (1,22) — (1,23)) никак не могут приблизиться к продольным. Вместе с тем и для этих волн показатель $n(\omega)$ может стремиться к бесконечности.

Из формулы (1,20) ясно, что для непродольных волн и, в частности, для поперечных волн (см. (1,21))

$$\mathbf{E} = 0 \text{ (при } |\hat{n}| \rightarrow \infty \text{ и конечном } \mathbf{D}'). \quad (1,36)$$

В простом случае (1,23) полюс $|\hat{n}| \rightarrow \infty$ соответствует полюсу одной из величин $\epsilon_{x,y,z}(\omega)$.

Если не принимать во внимание уравнений поля, то индукция $\mathbf{D}'$ может быть отлична от нуля при равном нулю поле $E_i = \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D'_j = 0$ только, если

$$|\epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})| = 0. \quad (1,37)$$

Волны с частотами $\omega_P(\mathbf{k})$, одновременно удовлетворяющие этому уравнению и условию $\mathbf{kD}' = 0$, назовем «волнами поляризации» (в таких волнах обобщенная поляризация $\mathbf{P} = \frac{\mathbf{D}' - \mathbf{E}}{4\pi} = \frac{\mathbf{D}'}{4\pi} \neq 0$ при $\mathbf{E} = 0$). Как следует из (1,36) и сказанного выше, «волны поляризации» удовлетворяют полной системе уравнений поля лишь при $k \rightarrow \infty$.

«Фиктивные» продольные волны и «волны поляризации», удовлетворяющие уравнениям поля лишь при $|\hat{n}| \rightarrow \infty$, не могут существовать в действительности, и их рассмотрение имеет только вспомогательное значение. Последнее связано преимущественно с тем, что эти волны уже при любых $\mathbf{k}$ получаются при решении чисто кулоновской задачи $\text{div } \mathbf{D}' = 0$, $\text{rot } \mathbf{E} = 0$ (формально уравнения кулоновской задачи получаются из общих уравнений поля (1,4) при $s \rightarrow \infty$). Для однородных плоских волн последние два уравнения означают, что

$$s\mathbf{D}' = 0, \quad \mathbf{E} = E\mathbf{s}. \quad (1,38)$$

«Волны поляризации» удовлетворяют этим уравнениям кулоновской задачи, если помимо условия (1,37) индукция в них поперечна ($s\mathbf{D}'=0$). «Фиктивные» продольные волны ($\mathbf{D}'\neq 0$, $\mathbf{E}=\mathbf{E}s\neq 0$) удовлетворяют уравнениям (1,38), если $s_i D'_i = s_i \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j = s_i s_j \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E = 0$, т. е. при условии

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) s_i s_j = 0. \quad (1,39)$$

Это уравнение непосредственно обобщает условие (1,35) и переходит в него в пределе классической кристаллооптики.

Тот факт, что решения кулоновской задачи («фиктивные» продольные волны и «волны поляризации») при $k \rightarrow \infty$ удовлетворяют полной системе уравнений поля, связан, конечно, с возможностью пренебречь поперечным полем *) (или, как иногда говорят, пренебречь запаздыванием) при $k \rightarrow \infty$. И, действительно, из уравнений поля (1,14) непосредственно ясно, что при $k \rightarrow \infty$ и конечных $\omega \neq 0$, $\mathbf{E}$ и $\mathbf{D}'$ вектор $\mathbf{B} \rightarrow 0$ и $[\mathbf{kE}] = 0$. То же самое ясно из дисперсионного уравнения (1,24), поскольку это уравнение удовлетворяется при условии (1,39) и $\hat{n}^2 \rightarrow \infty$.

Что касается продольных волн (1,24), то они, конечно, удовлетворяют уравнениям кулоновской задачи. Если не говорить об этих волнах, то решение кулоновской задачи в оптике кристаллов важно только с точки зрения вычисления тензора $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для той или иной модели. При этом, как уже указывалось во введении и еще пойдет речь в § 4, имеют значение «волны поляризации» и приближенные решения, получающиеся при $\mathbf{E} = 0$ и переходящие в «фиктивные» продольные волны при учете влияния длинноволнового поля $\mathbf{E}$ на частоты и поляризацию волн.

В заключение приведем табл. I, в которой выписаны соотношения для нормальных волн в анизотропной среде.

Таблица I

Нормальные плоские и однородные волны в анизотропной среде

$$(\mathbf{E}_l = \mathbf{E}_{0l} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \hat{n}(\omega) \mathbf{s}, \quad s^2 = 1)$$

а) Полная система уравнения поля (конечные значения $\mathbf{k}$):
общий случай:

$$\mathbf{D}' = \hat{n}^2 \{\mathbf{E} - \mathbf{s}(\mathbf{sE})\}, \quad s\mathbf{D}' = 0, \quad |\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \hat{n}^2(\delta_{ij} - s_i s_j)| = 0;$$

поперечные волны:

$$\mathbf{D}' = \hat{n}^2 \mathbf{E}, \quad s\mathbf{D}' = 0, \quad \mathbf{sE} = 0;$$

продольные волны:

$$\mathbf{D}' = 0, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}s \neq 0, \quad |\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})| = 0.$$

б) Решения кулоновской задачи ($s\mathbf{D}' = 0$, $\mathbf{E} = \mathbf{E}s$):

продольные волны:

$$\mathbf{D}' = 0, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}s \neq 0, \quad |\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})| = 0;$$

«фиктивные» продольные волны:

$$\mathbf{D}' \neq 0, \quad s\mathbf{D}' = 0, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}s \neq 0, \quad \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) s_i s_j = 0;$$

«волны поляризации»

$$\mathbf{D}' \neq 0, \quad s\mathbf{D}' = 0, \quad \mathbf{E} = 0, \quad |\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})| = 0.$$

Формально, при $k \rightarrow \infty$, «фиктивные» продольные волны и «волны поляризации» удовлетворяют также полной системе уравнений поля.

*) Если речь идет о микрополе, то в уравнениях поля (1,1) нужно учитывать появление плотности заряда ρ_0 и плотности тока $\mathbf{j}_0$, связанных с частицами. Поэтому вывод о пренебрежении поперечным полем не относится к магнитным полям, существенным при рассмотрении магнитного взаимодействия между частицами в кристалле.

Формально, при $k \rightarrow \infty$, «фиктивные» продольные волны и «волны поляризации» удовлетворяют также полной системе уравнений поля.

в) Энергетические и некоторые другие соотношения для волн в анизотропной среде. При рассмотрении квадратичных по полю величин (например, плотности энергии) поля нужно считать вещественными. Положим поэтому

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \{ \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + \mathbf{E}_0^* e^{i(\omega t - \mathbf{k}^* \cdot \mathbf{r})} \}, \quad (1,40)$$

где для монохроматической волны $\mathbf{E}_0 = \text{const}$, а для квазимонохроматического поля вектор $\mathbf{E}_0$ медленно меняется (это значит, что изменения $\mathbf{E}_0$ малы за время $\sim 1/\omega$ и на расстоянии $\sim 1/k$). Частота ω в (1,40) считается вещественной в соответствии с характером интересующих нас задач. Для $\mathbf{D}'$ и $\mathbf{B}$ используются выражения, аналогичные (1,40).

Уравнения (1,14) при пренебрежении производными от $\mathbf{E}_0$, $\mathbf{B}_0$ и $\mathbf{D}'_0$ принимают вид

$$\omega \mathbf{D}'_0 = -c [\mathbf{k} \mathbf{B}_0], \quad \omega \mathbf{B}_0 = c [\mathbf{k} \mathbf{E}_0]; \quad (1,41a)$$

$$\omega \mathbf{D}'_0^* = -c [\mathbf{k}^* \mathbf{B}_0^*], \quad \omega \mathbf{B}_0^* = c [\mathbf{k}^* \mathbf{E}_0^*]. \quad (1,41b)$$

Умножая уравнения (1,41a) соответственно на $\mathbf{E}_0$ и $\mathbf{B}_0$, имеем

$$\mathbf{D}'_0 \mathbf{E}_0 = \mathbf{B}_0 \mathbf{B}_0 = c \mathbf{k} [\mathbf{E}_0 \mathbf{B}_0]. \quad (1,42)$$

В прозрачной среде $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$ и, как ясно из (1,41), имеет также место соотношение

$$\mathbf{D}'_0 \mathbf{E}_0^* = \mathbf{B}_0 \mathbf{B}_0^*. \quad (1,43)$$

Далее, из (1,41a), после умножения соответственно на $\mathbf{E}^*$ и $\mathbf{B}_0^*$, имеем

$$\omega (\mathbf{D}'_0 \mathbf{E}_0^* \pm \mathbf{B}_0 \mathbf{B}_0^*) = c \mathbf{k} \{ [\mathbf{E}_0 \mathbf{B}_0^*] \pm [\mathbf{E}_0^* \mathbf{B}_0] \}. \quad (1,44)$$

Кроме того, конечно,

$$\mathbf{k} \mathbf{D}'_0 = 0, \quad \mathbf{k} \mathbf{B}_0 = 0, \quad \mathbf{D}'_0 \mathbf{B}_0 = 0, \quad \mathbf{B}_0 \mathbf{E}_0 = 0. \quad (1,45)$$

Дифференцируя уравнение (1,44) по k_i , с учетом связей (1,5), получаем выражения, которые сильно упрощаются для прозрачной среды при выборе верхнего знака в (1,44) (общий случай см. в ¹⁹, где указана также более ранняя литература). Для прозрачной среды, таким образом, приходим к соотношению:

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{W}} \mathbf{u} = \overline{\mathbf{S}}, \quad \mathbf{u} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}, \quad \varepsilon_{ij} = \varepsilon'_{ij}, \quad \overline{\mathbf{S}} = \overline{\mathbf{S}}_0 + \overline{\mathbf{S}}_1, \quad \overline{\mathbf{S}}_0 = \frac{c}{16\pi} ([\mathbf{E}_0 \mathbf{B}_0^*] + [\mathbf{E}_0^* \mathbf{B}_0]), \\ S_{1i} = -\frac{\omega}{16\pi} \frac{\partial \varepsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k})}{\partial k_l} E_{0j} E_{0i}^*, \quad \overline{\mathbf{W}} = \frac{1}{16\pi} \left\{ \frac{\partial \omega \varepsilon'_{ij}(\omega, \mathbf{k})}{\partial \omega} E_{0j} E_{0i}^* + \mathbf{B}_0 \mathbf{B}_0^* \right\}. \end{aligned} \quad (1,46)$$

Здесь $\mathbf{u}$ — групповая скорость, $\overline{\mathbf{W}}$ — средняя по времени плотность энергии, $\mathbf{S}_0$ — вектор Пойнтинга и $\mathbf{S}_1$ — поток энергии, возникающий лишь при наличии пространственной дисперсии (черта сверху означает усреднение по времени или, точнее, по высокой частоте; подробнее см. ^{1,2,10,19,20}). При отсутствии частотной и пространственной дисперсии

$$\overline{\mathbf{W}} = \overline{\mathbf{W}}_0 = \frac{\mathbf{D}'_0 \mathbf{E}_0^* + \mathbf{B}_0 \mathbf{B}_0^*}{16\pi}, \quad \overline{\mathbf{S}} = \overline{\mathbf{S}}_0 \quad (1,47)$$

и выражения (1,46) и (1,44), при выборе верхнего знака, дают

$$\overline{\mathbf{W}}_0 \mathbf{u} = \overline{\mathbf{S}}_0, \quad \overline{\mathbf{W}}_0 = \frac{\mathbf{k}}{\omega} \overline{\mathbf{S}}_0, \quad \frac{\mathbf{u} \mathbf{k}}{\omega} = 1, \quad (1,48)$$

т. е. $u_k = v_\phi$, где $u_k = \frac{\mathbf{k}}{k}$ и $v_\phi = \frac{\omega}{k}$ — фазовая скорость, направленная по $\mathbf{k}$.

Помимо соотношений (1,41) и (1,46), можно получить и другие формулы такого типа¹⁹.

При наличии поглощения или для нестационарного процесса существенную роль в анализе энергетических вопросов играет соотношение Пойнтинга

$$\frac{1}{4\pi} \mathbf{E} \frac{\partial \mathbf{D}'}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{B^2}{4\pi} = -\frac{c}{4\pi} \operatorname{div} [\mathbf{E}\mathbf{B}], \quad (1,49)$$

вытекающее из уравнений поля (1,1).

Для поля (1,40) усредненное по высокой частоте соотношение (1,49) имеет вид^{19a}

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2} \sigma_{ij} E_{0j} E_{0i}^* - \frac{i}{4} \left\{ \frac{\partial \sigma_{ij}^*}{\partial \omega} \frac{\partial E_{0i}}{\partial t} E_{0j}^* - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \omega} \frac{\partial E_{0i}^*}{\partial t} E_{0j} \right\} + \\ + \frac{i}{4} \left\{ \frac{\partial \sigma_{ij}^*}{\partial k_l} \frac{\partial E_{0j}}{\partial x_l} E_{0i}^* - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial k_l} \frac{\partial E_{0i}^*}{\partial x_l} E_{0j} \right\} = -\operatorname{div} \bar{\mathbf{S}}, \end{aligned} \quad (1,50)$$

где выражения для $\bar{W}$ и $\bar{\mathbf{S}}$ указаны в (1,46) и введена величина (проводимость) $\sigma_{ij} = \frac{\omega \varepsilon_{ij}''}{4\pi}$, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}' + i\varepsilon_{ij}''$ (эрмитовы тензоры ε_{ij} , σ_{ij} и их производные берутся в (1,50) при вещественных значениях частоты ω и вектора $\mathbf{k}$; в работе^{19a} получено также более общее выражение, пригодное при комплексных $\mathbf{k}$). Из (1,50) ясно (подробнее см. ^{19a}, ²⁰), что физическая интерпретация тех или иных членов в этом уравнении в общем случае затруднительна. Если же речь идет, например, о монохроматической волне (т. е. при $\frac{\partial E_{0i}}{\partial t} = 0$) при отсутствии пространственной дисперсии²⁰ или в почти прозрачной среде (вещественный вектор $\mathbf{k}$; см. ¹⁹), то величина $\frac{1}{2} \sigma_{ij} E_{0j} E_{0i}^*$ есть выделяющееся в единицу времени тепло, отнесенное к единице объема*).

Исходя из дисперсионных соотношений (1,12), можно получить в случае равновесной среды¹⁹ ряд неравенств для производных $\frac{\partial \varepsilon_{ij}'}{\partial \omega}$ и их комбинаций. Например,

$$\frac{\partial \varepsilon_{ii}'}{\partial \omega}(\omega, \mathbf{k}) > 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_{ii}'}{\partial \omega} > \frac{2(3 - \varepsilon_{ii}')}{\omega}. \quad (1,51)$$

Если учесть, что групповая скорость $\mathbf{u}$ есть скорость сигнала в прозрачной среде, представляется довольно очевидным, что в такой среде

$$u = \left| \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \right| < c; \quad (1,52)$$

если иметь в виду также и случай вакуума, это неравенство нужно, конечно, записать в виде $u \leq c$. В общем случае $\omega = \omega(k, \alpha, \beta)$, где

*) В настоящей статье речь идет о поглощающей среде, какой является, в частности, среда в состоянии теплового равновесия. Отметим, что неравновесная среда (кристалл) может быть не поглощающей, а излучающей, как это и имеет место, в лазерах. Для изотропной среды без пространственной дисперсии это значит, что $\varepsilon'' = \frac{4\pi\sigma}{\omega} < 0$ и $n\kappa = \frac{2\pi\sigma}{\omega} < 0$, как это ясно из соотношения $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'' = (n + i\kappa)^2$.

$\alpha = k_x/k$, $\beta = k_y/k$ ($\gamma = k_z/k$, $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$). Отсюда, как легко видеть, $\frac{\partial \omega}{\partial k_x} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \alpha + \frac{\partial \omega}{\partial \alpha} \frac{1-\alpha^2}{k} - \frac{\partial \omega}{\partial \beta} \frac{\alpha \beta}{k}$ и т. д.

Поэтому сразу же имеем

$$u_k = \frac{\mathbf{k}}{k} \frac{d\omega}{dk} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \frac{c}{\frac{d(\omega n)}{d\omega}} = u \cos \varphi, \quad (1,53)$$

где φ — угол между $\mathbf{u}$ и $\mathbf{k}$. Согласно (1,52) и (1,53)

$$\left| \frac{d(\omega n)}{d\omega} \right| > 1. \quad (1,54)$$

При отсутствии пространственной дисперсии можно показать, что угол $\varphi < \frac{\pi}{2}$ (т. е. векторы $\mathbf{u}$ и $\mathbf{k}$ всегда образуют острый угол) и, следовательно,

$$\frac{d(\omega n)}{d\omega} > 1. \quad (1,54a)$$

Кроме того, при отсутствии пространственной дисперсии в непоглощающей среде величина $\hat{n}^2 = (n + i\kappa)^2$ всегда вещественна, а при наличии поглощения произведение $n\kappa > 0$ ¹⁹. При наличии пространственной дисперсии угол между $\bar{S}_0$ и $\mathbf{k}$ остается острым, но угол между $\mathbf{u}$ и $\mathbf{k}$ может быть любым. Величина $\hat{n}^2$ при этом и для непоглощающей среды может быть комплексной, а знак $n\kappa$ — любым (см. § 3). В случае комплексного $\hat{n}^2$ поле убывает вглубь среды не монотонно (как при вещественном $\hat{n}^2 = -\kappa^2$), а осциллируя; поэтому средний по времени вектор Пойнтинга $\bar{S}_0 \neq 0$. С другой стороны, если имеет место полное отражение (поглощение отсутствует, но волна падает на протяженную непрозрачную среду с $\kappa = 0$), то средний по времени полный поток энергии вглубь среды $\bar{S} = \bar{S}_0 + \bar{S}_1$, конечно, равен нулю. Поскольку при отсутствии пространственной дисперсии поток $S_1 = 0$, то в этом случае при полном отражении обязательно должно соблюдаться равенство $\bar{S}_0 = 0$ (при нормальном падении на среду). Отсюда ясно, почему при отсутствии пространственной дисперсии поле в условиях полного отражения не может убывать вглубь непоглощающей среды с осцилляциями (т. е. с показателем $n \neq 0$).

Остановимся в заключение на влиянии пространственной дисперсии на скалярное произведение индукций $\mathbf{D}'$ для различных однородных нормальных волн, распространяющихся в данном направлении $\mathbf{s}$.

Из уравнения (1,20), учитывая также соотношение $\mathbf{sD} = 0$, для любых двух нормальных волн с данным $\mathbf{s}$ (волны $\mathbf{D}'_1$, $\mathbf{E}_1$, $\hat{n}_1$ и $\mathbf{D}'_2$, $\mathbf{E}_2$ и $\hat{n}_2$) получаем

$$\mathbf{D}'_1 \mathbf{D}'_2 = \hat{n}_1^2 \mathbf{E}_1 \mathbf{D}'_2 = \hat{n}_2^2 \mathbf{E}_2 \mathbf{D}'_1. \quad (1,55)$$

Отсюда при различных $\hat{n}_1$ и $\hat{n}_2$, учитывая свойство симметрии (1,40), имеем

$$\mathbf{D}'_1 \mathbf{D}'_2 \left(\frac{1}{\hat{n}_1^2} - \frac{1}{\hat{n}_2^2} \right) = \left\{ \varepsilon_{ij} \left(\omega_2, \frac{\omega_2}{c} \hat{n}_2 \mathbf{s} \right) - \varepsilon_{ij} \left(\omega_1, -\frac{\omega_1}{c} \hat{n}_1 \mathbf{s} \right) \right\} E_{1i} E_{2j}. \quad (1,56)$$

При отсутствии пространственной дисперсии и $\omega_1 = \omega_2$ соотношение (1,56) приводит к заключению об ортогональности решений 1 и 2 (т. е. при этих условиях $\mathbf{D}'_1 \mathbf{D}'_2 = 0$). При наличии пространственной дисперсии это свойство ортогональности, вообще говоря, не имеет места даже при одинаковых ω_1 и ω_2 , поскольку $\hat{n}_1^2 \neq \hat{n}_2^2$. В изотропной среде или при

распространения вдоль оптической оси, когда $\hat{n}_1 = \hat{n}_2$, имеется вырождение, и векторы $\mathbf{D}'_1$ и $\mathbf{D}'_2$ в нормальных волнах можно выбрать так, чтобы они были ортогональны. Кроме того, в случае гиротропных сред (см. ниже связи (2,26)), как легко видеть, свойство ортогональности $\mathbf{D}'_1$ и $\mathbf{D}'_2$ при $\hat{n}_1 \neq \hat{n}_2$ сохраняется, несмотря на наличие гиротропии — пространственной дисперсии первого порядка относительно $\mathbf{k}$.

Аналогично тому, как это сделано при выводе соотношения (1,56), легко получить выражение

$$\mathbf{D}'_1 \mathbf{D}'_2{}^* \left(\frac{1}{\hat{n}_1^2} - \frac{1}{(\hat{n}_2^*)^2} \right) = \left[\varepsilon_{ij}^* \left(\omega_2, \frac{\omega_2}{c} \hat{n}_2 \mathbf{s} \right) - \varepsilon_{ji} \left(\omega_1, \frac{\omega_1}{c} \hat{n}_1 \mathbf{s} \right) \right] E_{1i} E_{2j}^*. \quad (1,56a)$$

При $\omega_1 = \omega_2$, отсутствии пространственной дисперсии и пренебрежении поглощением тензор ε_{ij} эрмитов, а величина $\hat{n}^2$ является вещественной. При этих условиях и $\hat{n}_1^2 \neq \hat{n}_2^2$, очевидно, $\mathbf{D}'_1 \mathbf{D}'_2{}^* = 0$. Если же учитывать пространственную дисперсию, то уже для прозрачной среды (показатель $\hat{n}$ — вещественный, тензор ε_{ij} — эрмитов) условие $\mathbf{D}'_1 \mathbf{D}'_2{}^* = 0$ нарушается даже при $\omega_1 = \omega_2$, но $\hat{n}_1^2 \neq \hat{n}_2^2$. Заметим, наконец, что при анализе распространения волн в среде иногда используют тензор

$$\varepsilon_{\perp,ij}^{-1} = \eta_{il} \varepsilon_{lm}^{-1} \eta_{mj}, \quad (1,57)$$

где η_{ij} — тензор проектирования

$$\eta_{ij} = \delta_{ij} - s_i s_j. \quad (1,58)$$

В силу уравнений (1,20) и $\mathbf{sD}' = 0$, очевидно,

$$\frac{1}{\hat{n}^2} D'_i = \eta_{il} E_l = \eta_{il} \varepsilon_{lj}^{-1} D'_j = \eta_{il} \varepsilon_{lm}^{-1} \eta_{mj} D'_j = \varepsilon_{\perp,ij}^{-1} D'_j. \quad (1,59)$$

Свойства симметричности и эрмитовости тензора ε_{ij}^{-1} переносятся на тензор $\varepsilon_{\perp,ij}^{-1}$, поскольку тензор η_{ij} вещественный и симметричный. В качестве примера использования тензоров $\varepsilon_{\perp,ij}^{-1}$ и η_{ij} запишем в другой форме условие существования «фиктивных» продольных волн (1,39). Именно, оба соотношения $E_i = \varepsilon_{ij}^{-1} D'_j$ и $s_i D'_i = 0$ можно записать в виде одного равенства $E_i = \varepsilon_{il}^{-1} \eta_{lj} D'_j$, поскольку автоматически $s_i \eta_{ij} D'_j = 0$. Отсюда ясно, что при $\mathbf{D}' \neq 0$ вектор $\mathbf{E}$ является неравным нулю и продольным (т. е. $\mathbf{E} = E\mathbf{s}$ или $\eta_{ij} E_j = 0$) только, если определитель

$$|\eta_{il} \varepsilon_{lm}^{-1} \eta_{mj}| = |\varepsilon_{\perp,ij}^{-1}| = 0. \quad (1,60)$$

Иногда вводят²⁵ также тензор $\varepsilon_{\perp,ij}$, обратный $\varepsilon_{\perp,ij}^{-1}$. Поскольку $E_i = \varepsilon_{ij}^{-1} D'_j = \varepsilon_{lm}^{-1} \eta_{mj} D'_j$, очевидно,

$$\eta_{il} E_l = \varepsilon_{\perp,ij}^{-1} D'_j$$

и

$$\begin{aligned} D'_i &= \varepsilon_{\perp,ij} \eta_{jl} E_l = \varepsilon_{\perp,ij} E_{\perp,l}, \\ \varepsilon_{\perp,im} \varepsilon_{\perp,mj}^{-1} &= \delta_{ij}, \quad E_{\perp,i} = \eta_{ij} E_j. \end{aligned} \quad (1,61)$$

Таким образом, тензор $\varepsilon_{\perp,ij}$ позволяет выразить индукцию $\mathbf{D}'$ (в условиях $\mathbf{sD}' = 0$) через поперечное электрическое поле $\mathbf{E}_{\perp}$. Тензор $\varepsilon_{\perp,ij}$ не существует, если имеет место соотношение (1,60). Это сразу понятно, так как при условии (1,60) $\mathbf{D}' \neq 0$ при продольном $\mathbf{E}$, т. е. при $\mathbf{E}_{\perp} = 0$.

Тензор $\varepsilon_{\perp,ij}$ не является, вообще говоря, аналитической функцией $\mathbf{k}$ при $k \rightarrow 0$, даже если тензор ε_{ij} является аналитическим (последнее в широких пределах и имеет место; см. § 2,б). Кроме того, зная $\varepsilon_{\perp,ij}$, не всегда можно восстановить ε_{ij} . Уже по этим причинам ясно, что тензоры $\varepsilon_{\perp,ij}$

и $\varepsilon_{\perp,ij}^{-1}$ в лучшем случае имеют вспомогательное значение, хотя и могут быть удобны для записи тех или иных выражений. Действительно, при рассмотрении непродольных волн выражение для $\hat{n}^2$ довольно просто выражается через $\varepsilon_{\perp,ij}^{-1}$ и $\varepsilon_{\perp,ij}$. Так, согласно (1,59), дисперсионное уравнение имеет вид

$$\left| \frac{\delta_{ij}}{\hat{n}^2} - \varepsilon_{\perp,ij}^{-1} \right| = 0. \quad (1,62)$$

Далее, из уравнений (1,20) и (1,61) ясно, что

$$\varepsilon_{\perp,ij} E_{\perp,j} = \hat{n}^2 E_{\perp,i}, \quad (1,63)$$

и дисперсионное уравнение записывается в виде

$$|\varepsilon_{\perp,\alpha\beta} - \hat{n}^2 \delta_{\alpha\beta}| = \hat{n}^4 - \varepsilon_{\perp,\alpha\alpha} \hat{n}^2 + |\varepsilon_{\perp,\alpha\beta}| = 0. \quad (1,64)$$

Здесь $\alpha, \beta = 1, 2$ и ось z направлена по $\mathbf{k}$; в этой системе

$$\eta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{\perp,\alpha\alpha} = \varepsilon_{\perp,11} + \varepsilon_{\perp,22}; \quad |\varepsilon_{\perp,\alpha\beta}| = \varepsilon_{\perp,11}\varepsilon_{\perp,22} - \varepsilon_{\perp,12}\varepsilon_{\perp,21}$$

и при отсутствии пространственной дисперсии

$$n_{1,2}^2 = \frac{\varepsilon_{\perp,11} + \varepsilon_{\perp,22}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{\perp,11} - \varepsilon_{\perp,22})^2 + 4\varepsilon_{\perp,12}\varepsilon_{\perp,21}}. \quad (1,65)$$

Вместо тензора $\varepsilon_{\perp,ij}$ можно с равным правом использовать тензор $\epsilon_{ij} = \varepsilon_{\perp,ij} + s_i s_j$, так как $D'_i = \varepsilon_{\perp,ij} E_{\perp,j} = \epsilon_{ij} E_{\perp,j}$. Можно показать, что

$$\varepsilon_{\perp,ij} = 2(\delta_{ij} - s_i s_j) - \epsilon_{ij} + \frac{\epsilon_{il} \epsilon_{mj} s_l s_m}{\epsilon_{rt} s_r s_t}. \quad (1,66)$$

В микротeorии при использовании в качестве возмущения только поперечного поля получается как раз тензор $\varepsilon_{\perp,ij}$ (см. § 4,б).

§ 2. ТЕНЗОР $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ В КРИСТАЛЛАХ

а) Введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ для кристаллов. Кристаллы не являются пространственно-однородными, поскольку, например, узлы решетки не эквивалентны другим точкам. Поэтому использование тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, введенного для однородной среды, в применении к кристаллам, заведомо ограничено. Прежде чем перейти к кристаллам, запишем в другом виде соотношение (1,3), относящееся к произвольной среде (при условии независимости свойств среды от времени). Именно, положим $E(\mathbf{r}, t) = E_j(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}$, или $E(\mathbf{r}, t) = \int E_j(\mathbf{k}', \omega) e^{i(\mathbf{k}'\mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{k}'$, а для D' используем аналогичные обозначения. Подставляя эти выражения в (3), получаем

$$\left. \begin{aligned} D'_i(\mathbf{r}, \omega) &= \int \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_j(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}', \\ \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \int \hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\omega\tau} d\tau, \\ D'_i(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int D'_i(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \int \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{k}') E_j(\mathbf{k}', \omega) d\mathbf{k}', \\ \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i(-\mathbf{k}\mathbf{r} + \mathbf{k}'\mathbf{r}')} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \right\} \quad (2,1)$$

Для безграничной однородной среды $\hat{\epsilon}_{ij}(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \epsilon_{ij}(\tau, \mathbf{r} - \mathbf{r}')$ и так как $\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, видим, что $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. Как это и должно быть, для однородной среды мы приходим поэтому к уравнению (1,5).

Кристалл представляет собой неоднородную среду, свойства которой неизменны при сдвиге на любой вектор решетки $\mathbf{a}$ (трансляционная симметрия). Поэтому в кристалле

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{r}' + \mathbf{a}). \quad (2,2)$$

Функция, обладающая свойством (2,2), 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 (2,1), получаем

$$\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{b}} \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - 2\pi\mathbf{b}), \quad (2,3)$$

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, очевидно, если учитывать только член с $\mathbf{b} = 0$, будет $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}=0}(\omega, \mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ и $D'_i(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}=0}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k}, \omega)$.

Таким образом, тензор $\epsilon_{ij}^{\mathbf{b}=0}(\omega, \mathbf{k})$ соответствует тензору диэлектрической проницаемости $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и последним в электродинамике кристаллов можно пользоваться тогда, когда в правой части формулы (2,3) достаточно оставить одно слагаемое с $\mathbf{b} = 0$ или же можно выразить все остальные члены через этот первый член.

Согласно формулам (2,1) и (2,3) электрическое поле $\mathbf{E}$ и индукция $\mathbf{D}'$ связаны соотношением

$$D'_i(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{b}} \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}, \omega), \quad (2,4)$$

которое позволяет записать волновое уравнение (1,15) в виде

$$\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{b}} \epsilon_{ij}^{\mathbf{b}}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}, \omega) - k^2 E_i(\mathbf{k}, \omega) + k_i k_j E_j(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (2,5)$$

Детерминант $\Delta(\omega, \mathbf{k})$ системы уравнений (2,5) определяет дисперсионное уравнение

$$\Delta(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (2,6)$$

корни которого (вообще говоря, комплексные)

$$\omega_l = \omega_l(\mathbf{k}), \quad l = 1, 2, 3, \dots \quad (2,7)$$

отвечают различным ветвям (типам) и зонам «нормальных» частот электромагнитного поля в кристалле.

Для оптики интерес представляет область сравнительно длинных волн ($k \ll b \sim 1/a$) и относительно небольших частот ($\omega \ll cb \sim c/a$). Допустим, что в такой области частот имеется фурье-компонента электрического поля $E_j(\mathbf{k}, \omega)$, соответствующая малому k , значительно превышающая другие фурье-компоненты, входящие в (2,4) и (2,5) и соответствующие значениям $\mathbf{b} \neq 0$.

Из уравнения (2,5) методом последовательных приближений легко установить, что такое предположение, вообще говоря, подтверждается, а

компоненты поля $\mathbf{b} \neq 0$ оказываются меньше $E_j(\mathbf{k}, \omega)$ в $(\omega/2\pi b c)^2 \times \epsilon^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b}) \ll (a/\lambda_0)^2$ раз (можно думать, что обычно $\epsilon^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b}) \ll 1$ *). Поэтому, если в соответствующем приближении исключить из уравнений (2,5) все члены с $\mathbf{b} \neq 0$, получаем для $E(\mathbf{k}, \omega)$ уравнение, совпадающее с (1,16):

$$\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j - k^2 E_i + k_i k_j E_j = 0. \quad (2,8)$$

Здесь $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ отличается от $\epsilon_{ij}^{b=0}(\omega, \mathbf{k})$ членами порядка $(a/\lambda_0)^2$. Эти добавочные члены, вместе с тем, слабо зависят от $\mathbf{k}$, если только $\frac{k}{2\pi b} \sim ak = (2\pi an/\lambda_0) \ll 1$; поэтому в первом приближении $\epsilon_{ij}^b(\omega, \mathbf{k}) \approx \epsilon_{ij}^b(\omega, 0)$. Другими словами, в области длинных волн добавочные члены нужно было бы учитывать при рассмотрении частотной дисперсии с точностью $\sim (a/\lambda_0)^2$. Интерес же представляют эффекты порядка an/λ_0 (естественная оптическая активность), эффекты порядка $(an/\lambda_0)^2 = (a/\lambda)^2$ при $n \gg 1$ (продольные волны, волны вблизи линий поглощения) и члены $\sim (a/\lambda_0)^2$, но зависящие от направления (оптическая анизотропия кубических кристаллов с $n \sim 1$). В результате в (2,8) в интересующей нас

*) Обозначим текущий волновой вектор через $\mathbf{k}'$ (в (2,5) этот вектор обозначен через $\mathbf{k}$) и положим $\mathbf{k}' = 2\pi\mathbf{b} + \mathbf{k}$, $|\mathbf{k}| \ll |2\pi\mathbf{b}|$. Тогда в первом приближении имеем

$$\left(\frac{\omega}{2\pi c}\right)^2 \epsilon_{ij}^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b}) E_j(\mathbf{k}, \omega) - b^2 E_i(2\pi\mathbf{b}, \omega) + b_i b_j E_j(2\pi\mathbf{b}, \omega) = 0.$$

Отсюда как раз $E(2\pi\mathbf{b}, \omega) \sim \left(\frac{\omega}{2\pi c b}\right)^2 \epsilon_{ij}^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b}) E(\mathbf{k}, \omega)$, если не обращать внимания на возможность появления малого коэффициента в знаменателе за счет малости детерминанта $\left|\delta_{ij} - \frac{b_i b_j}{b^2}\right|$. Даже если на кристалл действует однородное поле $E(0, \omega)$, то индуцированный ток и $\mathbf{D}'$ будут, вообще говоря, глубоко промодулированы в связи с влиянием узлов решетки с периодами $\sim a$, что соответствует волновым векторам $\sim 1/a \sim b$. Поэтому мы и принимаем, что $\epsilon_{ij}^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b}) \ll 1$. Нужно вместе с тем отметить, что как это последнее предположение, так и, особенно, использование оценки $\left|\delta_{ij} - \frac{b_i b_j}{b^2}\right| \sim 1$ заслуживают более детального анализа. Для этой цели, в частности, полезно было бы произвести соответствующий расчет для какой-либо простой модели.

При сделанных выше предположениях для малых $k \ll 2\pi b$ имеем $E(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b}, \omega) \approx E(2\pi\mathbf{b}, \omega) \sim \left(\frac{a}{\lambda_0}\right)^2 E(\mathbf{k}, \omega)$ и первый член в (2,5) имеет вид $\frac{\omega^2}{c^2} \left\{ \epsilon_{ij}^{b=0}(\omega, \mathbf{k}) \times E_j(\mathbf{k}, \omega) + \text{члены порядка } \epsilon^{b \neq 0}(\omega, \mathbf{k}) \left(\frac{a}{\lambda_0}\right)^2 E(\mathbf{k}, \omega) \right\}$.

При этом, согласно (2,4), с точностью до малых членов

$$D'_i(2\pi\mathbf{b}, \omega) = \epsilon_{ij}^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b}) E_j(\mathbf{k}, \omega) \text{ и } D'_i(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon_{ij}^{b=0}(\omega, \mathbf{k}) E_j(\mathbf{k}, \omega).$$

Отсюда ясно, что по порядку величины

$$\frac{D'(2\pi\mathbf{b}, \omega)}{D'(\mathbf{k}, \omega)} \sim \frac{\epsilon^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b})}{\epsilon^{b=0}(\omega, \mathbf{k})}$$

и, таким образом, это отношение отнюдь не мало при $\epsilon^{-b} \sim 1$ и $\epsilon^{b=0} \ll 10$. Другими словами, если пространственная модуляция является глубокой, в силу чего $\epsilon^{-b}(\omega, 2\pi\mathbf{b}) \sim 1$, малость амплитуд $E(2\pi\mathbf{b}, \omega)$ отнюдь не связана одновременно с малостью амплитуд $D'(2\pi\mathbf{b}, \omega)$. По последней причине волновое уравнение для D' , вообще говоря, нельзя (подобно уравнению (2,5) для E) использовать для получения уравнения типа (2,8) на основе метода последовательных приближений.

области длинных волн можно, вообще говоря, положить $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ij}^{b=0}(\omega, \mathbf{k})$.

Уравнение (2,8) приводит к дисперсионному уравнению (1,17), причем нужно ограничиться достаточно низкими частотами ($\omega \ll c/a \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}$) и длинными волнами ($\lambda_0 \gg a \sim 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$), что и отвечает оптической области; гармоники электрического поля, соответствующие коротким волнам, малы, а основная часть поля определяется уравнением (2,8) с некоторым тензором $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$. Тем самым в оптике кристаллов можно пользоваться этим тензором так же, как в однородной среде⁸. Так фактически и поступали ранее. Однако уточнение условий и смысла введения тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах представляется необходимым. Достаточно сказать, что при использовании тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k} \neq 0)$ отношение a/λ считается неравным нулю, а с другой стороны, среда (кристалл) считается пространственно-однородной. Возможность поступать таким образом не представляется а priori очевидной.

Выше было показано, в чем здесь дело с точки зрения используемого аппарата. Физически же все сводится к тому, что постоянная решетки a играет двойную роль. С одной стороны, параметр a характеризует пространственную неоднородность среды и этой неоднородностью при переходе к $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ пренебрегается. С другой же стороны, тот же параметр a определяет «радиус молекулярного действия» l — интервал значений R , при которых ядро $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{R})$ в (2,1) существенно отлично от нуля. Стремление радиуса l к нулю соответствует пренебрежению пространственной дисперсией, как это уже отмечалось ранее. Если с самого начала ввести два формально независимых параметра a (постоянная решетки) и l («радиус молекулярного действия»), то картина становится, может быть, более ясной. Однако фактически в кристалле обычно $a \sim l$ или, для сложных кристаллов с аномально большим параметром решетки, $a \gg l$. Поэтому неравенство $a \ll l$ (или, формально, стремление a к нулю при $l \neq 0$), по-видимому, для реального кристалла невозможно.

б) С л у ч а й с л а б о й п р о с т р а н с т в е н н о й д и с п е р с и и ($a/\lambda \ll 1$). Введение тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и его использование в волновом уравнении (2,8) для кристаллов возможно, вообще говоря, при условии

$$\left(\frac{a}{\lambda_0}\right)^2 \ll 1 \quad (2,9)$$

(мы отвлекаемся сейчас от некоторых дополнительных моментов, указанных в § 2,а).

Условие (2,9) в оптике может считаться всегда выполненным, но оно, вместе с тем, еще не свидетельствует о малости пространственной дисперсии. Дело в том, как это уже 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 (2,9). В подобных условиях $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ может оказаться весьма сложной функцией $\mathbf{k}$, а 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 (2,8) в таком случае может иметь много решений, т. е. дисперсионное уравнение (1,17) будет иметь много корней $\omega_i(\mathbf{k})$. При пренебрежении же пространственной дисперсией имеются только два корня дисперсионного уравнения, отвечающие обыкновенной и необыкновенной волнам, а в определенных условиях также корень $\omega_{||} = \text{const}$ для продольной волны.

В связи со сказанным, представляется чрезвычайно важным тот факт, что в оптике кристаллов пространственная дисперсия является слабой,

т. е. соблюдается уже упомянутое во введении неравенство

$$a/\lambda = an/\lambda_0 \ll 1. \quad (2,10)$$

При соблюдении этого неравенства можно практически положить $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^{b=0}(\omega, \mathbf{k})$. Этот момент существен с точки зрения расчетов $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ на основе микроскопической теории. Поскольку такие расчеты имеют лишь весьма ограниченное значение, несравненно более важно то обстоятельство, что при условии (2,10) можно пользоваться разложением тензоров $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ или $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ в ряд по $\mathbf{k}$ с сохранением двух-трех первых членов⁵. Итак, воспользуемся разложением:

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega)k_l + \alpha_{ijlm}(\omega)k_lk_m, \quad (2,11)$$

или для однородных плоских волн, когда $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \hat{n}\mathbf{s}$:

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega) \frac{\omega}{c} \hat{n}s_l + \alpha_{ijlm}(\omega) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \hat{n}^2 s_l s_m. \quad (2,12)$$

Аналогично, для обратного тензора

$$\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega) + i\delta_{ijl}(\omega)k_l + \beta_{ijlm}(\omega)k_lk_m. \quad (2,13)$$

Использование тензоров ε_{ij} и ε_{ij}^{-1} , как вообще, так и в форме (2,11) — (2,13), в широких пределах эквивалентно и определяется соображениями удобства*). Искключение составляют случаи, когда некоторые компоненты тензоров $\varepsilon_{ij}(\omega)$ или $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ стремятся к бесконечности (сильно возрастают). Например, если какая-то компонента $\varepsilon_{ij}(\omega)$ стремится к бесконечности, то разложения (2,11) — (2,12) для соответствующей компоненты $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ недостаточно, поскольку все члены исчезающе малы по сравнению с $\varepsilon_{ij}(\omega)$. В то же время с возрастанием ε_{ij} обычно растет и $\hat{n}$, т. е. роль пространственной дисперсии повышается. В подобном случае нужно использовать разложение (2,13), которое при уменьшении $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ особенно эффективно. Аналогично, в области сильного возрастания $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ нужно пользоваться разложением (2,11) — (2,12), а не (2,13). В дальнейшем мы будем базироваться на разложениях (2,11) — (2,13).

Обсудим теперь условия их использования, помимо исходного требования (2,10). Выражения (2,11) — (2,13) имеют смысл только, если функции $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ вообще допускают разложение в ряд вблизи точки $\mathbf{k} = 0$. В этой связи напомним, что при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ функции $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ стремятся соответственно к $\varepsilon_{ij}(\omega)$ и $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega)$ и не зависят ни от модуля, ни от направления $\mathbf{k}$. Далее, $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ и $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k})$ являются интегральными величинами — они получаются путем суммирования по спектру (см. § 4). Поэтому даже при наличии некоторых достаточно слабых особенностей в подынтегральном 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 § 4, в известных нам случаях собственные частоты корректно выбранной невозмущенной задачи не имеют особенностей при $\mathbf{k} = 0$. Итак, нет никаких оснований сомневаться в отсутствии у функций ε_{ij} и ε_{ij}^{-1} существенно особых точек при $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Разложения типа (2,11) — (2,13) с учетом лишь нескольких членов могут оказаться недостаточными в следующей своеобразной ситуации. Пусть, например, $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega, \mathbf{k})\delta_i$, причем

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega) + \frac{vk^2}{\omega - \omega_l - \mu k^2}; \quad (2,14)$$

*) Несмотря на то, что чаще используется тензор ε_{ij} , целесообразность применения в некоторых случаях тензора ε_{ij}^{-1} была отмечена уже давно (см., например, ^{21, 22}).

такое выражение в некоторых условиях описывает ход $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ вблизи квадрупольной линии поглощения. Пока член μk^2 несуществен, мы имеем здесь дело с разложением типа (2,11). Но в противном случае

$$[\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) - \varepsilon(\omega)]^{-1} = \frac{\frac{\omega - \omega_l}{\omega_l} - \mu k^2}{\nu k^2},$$

что не соответствует ни (2,11), ни (2,13). Легко написать выражение, обобщающее формулу (2,14) для любого кристалла в духе феноменологического разложения (2,11):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon_{ij}(\omega) + i\gamma_{ijl}(\omega)k_l + \alpha_{ijlm}(\omega, \mathbf{k})k_l k_m, \\ \alpha_{ijlm}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) &= \xi_{ijlm}(\omega) + i\eta_{ihl}(\omega)k_l + \xi_{ihlm}(\omega)k_l k_m. \end{aligned} \quad (2,15)$$

Аналогичным образом можно заменить в (2,11) $\gamma_{ijl}(\omega)$ на $\gamma_{ijl}(\omega, \mathbf{k})$, причем $\gamma_{ijl}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = \gamma_{ijl}^{-1}(\omega) + i\mu_{ijlm}(\omega)k_m + \nu_{ijlmn}(\omega)k_l k_n$. Формула (2,15) эквивалентна (2,14) для негиротропного кубического кристалла, причем

$$\alpha_{ijlm}k_l k_m = \delta_{ij} \frac{\nu(\omega)k^2}{\frac{\omega - \omega_l}{\omega_l} - \mu k^2}.$$

В более сложном случае использование комбинированного разложения (2,15) приводит к громоздким выражениям, вряд ли могущим представить практический интерес. Более существенно, однако, то обстоятельство, что формулами типа (2,14) или (2,15) нужно пользоваться лишь в исключительных случаях. В самом деле, разложения (2,11) — (2,15) 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 (2,14), член μk^2 в знаменателе нужно учитывать только при $|\omega - \omega_l|/\omega_l \sim \mu k^2 \sim (2\pi a/\lambda)^2$, когда вместе с тем

$$\frac{\nu k^2}{\frac{\omega - \omega_l}{\omega_l}} \sim \mu k^2 \sim \varepsilon(\omega) \sim 1.$$

Последнее означает, что квадрупольная линия вносит в ε вклад, сравнимый со вкладом дипольных линий. Соответствующее значение отношения $\frac{\omega - \omega_l}{\omega_l} \sim 10^{-5} \div 10^{-6}$, 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 (2,14) или зависимость α_{ijlm} от $\mathbf{k}$ в (2,15) все равно нужно лишь в очень узкой области вблизи центра линии. Вне этой области пригодны разложения (2,11) — (2,13), причем весь «квадрупольный эффект» отражен в членах $\alpha_{ijlm}k_l k_m$ или $\beta_{ijlm}k_l k_m$, которые, таким образом, играют основную роль. Итак, переход к выражениям типа (2,14) и (2,15) в известном смысле отвечает рассмотрению эффектов более высокого порядка. Соответствующее ограничение области применимости выражений (2,11) — (2,13) носит, таким образом, совершенно естественный характер. Интересно, что с таким эффектом высшего порядка, по-видимому, приходится сталкиваться на опыте (см. § 3,е). Резюмируя, можно сказать, что использование формул (2,11) — (2,13) в кристаллооптике с пространственной дисперсией является вполне последовательным способом*), хотя иногда нуждается в обобщении — использовании выражений типа (2,15)

* При подстановке рядов типа (2,11) — (2,13) в дисперсионные уравнения (1,17) — (1,18), как это и делалось в работе ⁵, для показателя преломления $\hat{n}$ получаются алгебраические уравнения, порядок которых растет с числом учитываемых членов ряда. Однако новые корни $\hat{n}$ лежат при все больших значениях k . Поэтому при нахождении первых нескольких корней $\hat{n}$, которые только и можно рассматривать в связи с условием (2,9) и в силу влияния поглощения (см. ⁵ и ниже § 3,6), ограничение первыми членами ряда опять-таки совершенно оправдано и последовательно. Противоположное по содержанию замечание ²³ представляется нам, таким образом, неправильным.

Заметим, что в литературе ^{14, 24, 25} используются также выражения для $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в кристаллах, которые представляются в известном отношении более общими, чем (2,11) — (2,13). Так, в работе ¹⁴ употребляется выражение типа

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}^0 + \frac{g_{ij}}{\omega - \omega_l - F(\mathbf{k})}; \quad (2,16)$$

здесь $\varepsilon_{ij}^{(0)}$, ω_l , g_{ij} — постоянные. Фактически, однако, в (2,16) нужно положить $F(\mathbf{k}) = f + g_l k_l + h_{lm} k_l k_m$, так как учет более высоких членов по k лежит, вообще говоря, за пределами исходного приближения. С учетом этого обстоятельства выражение (2,16) сводится к (2,13), причем пригодно лишь вблизи центра линии *). Для широкого интервала частот удобны формулы, приведенные в ²⁴, но вне пределов справедливости разложений (2,11) — (2,13), и эти формулы носят лишь экстраполяционный характер. Нам представляется, что правильнее всего не прибегать к экстраполяционным формулам для $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$, явно учитывая тем самым слабость пространственной дисперсии. Наоборот, для $\varepsilon_{ij}(\omega)$ вблизи линии поглощения удобно пользоваться экстраполяционными формулами, например, полагая в системе главных осей

$$\varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_j' + i\varepsilon_j'' = \varepsilon_{0j} - \frac{\omega_{0j}^2}{\omega^2 - \omega_{\infty j}^2 - i\nu_j \omega}. \quad (2,17)$$

Тензоры, фигурирующие в формулах (2,11) — (2,13), удовлетворяют ряду соотношений, являющихся следствием равенств (1,7), (1,9) — (1,11). Так, в силу (1,10)

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\omega) &= \varepsilon_{ji}(\omega), \quad \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega) = \varepsilon_{ji}^{-1}(\omega), \quad \alpha_{ijlm}(\omega) = \alpha_{jilm}(\omega), \\ \gamma_{ijl}(\omega) &= -\gamma_{jil}(\omega), \quad \delta_{ijl}(\omega) = -\delta_{jil}(\omega), \quad \beta_{ijlm}(\omega) = \beta_{jilm}(\omega). \end{aligned} \quad (2,18)$$

Кроме того, тензоры α_{ikln} и β_{iklm} всегда можно выбрать так, что $\alpha_{ijklm} = \alpha_{ijnkl}$ и $\beta_{ijklm} = \beta_{ijlmk}$ (ниже предполагается, что сделан именно такой выбор). Заметим, так же, что магнитная индукция внешнего поля $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ везде, кроме § 3, г, считается равной нулю. При наличии центра симметрии и вообще для негиротропной среды из (1,11) следует, что

$$\gamma_{ijl} = 0, \quad \delta_{ijl} = 0. \quad (2,19)$$

При отсутствии поглощения тензоры $\varepsilon_{ij}(\omega)$, $\varepsilon_{ij}^{-1}(\omega)$, γ_{ijl} , α_{ijlm} , δ_{ijl} и β_{ijlm} — вещественные (см. (1,7) и (2,18)).

Существенное упрощение всех тензоров имеет место для кристаллов с высокой симметрией, не говоря уже об изотропной среде.

В изотропной негиротропной среде тензор $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ имеет вид (1,26). Если пространственная дисперсия слаба, то (см. (1,26) — (1,30) и (2,12))

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon(\omega) \delta_{ij} - \alpha_{\perp}(\omega) \hat{n}^2 (\delta_{ij} - s_i s_j) - \alpha_{\parallel}(\omega) \hat{n}^2 s_i s_j, \\ n_{\perp}^2 &= \frac{\varepsilon(\omega)}{1 + \alpha_{\perp}(\omega)}, \quad n_{\parallel}^2 = \frac{\varepsilon(\omega)}{\alpha_{\parallel}(\omega)} \end{aligned} \quad (2,20)$$

*) В статье ²⁵ и некоторых других использованный в ⁵ и выше подход, связанный с разложением $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в ряд по $\mathbf{k}$, в известной мере противопоставляется различным вычислениям, включающим те или иные элементы микроскопической теории. Нам представляется, что с этим противопоставлением и целым рядом других моментов, имеющих в литературе, нельзя согласиться. Поскольку соответствующие критические замечания частично уже были приведены в работе ⁸, мы считали ненужным подробно останавливаться на них в настоящей статье.

(множитель $(\omega/c)^2$, имеющийся в (2,12), включен в $\alpha_{||}$ и $\alpha_{\perp}$). Вблизи полюса $\varepsilon(\omega)$ нужно использовать разложение типа (2,13), причем для изотропной среды

$$\varepsilon_{ij}^{-1} = \varepsilon^{-1}(\omega) \delta_{ij} + \beta_{\perp}(\omega) \hat{n}^2 (\delta_{ij} - s_i s_j) + \beta_{||}(\omega) \hat{n}^2 s_i s_j. \quad (2,21)$$

В силу условия $s\mathbf{D}' = 0$, очевидно, $\mathbf{E} = \left(\frac{1}{\varepsilon} + \beta_{\perp}(\omega) \hat{n}_{\perp}^2 \right) \mathbf{D}$ и из (1,20) получаем

$$\beta_{\perp} n_{\perp}^4 + \frac{\hat{n}_{\perp}^2}{\varepsilon} - 1 = 0, \quad n_{\perp}^2 = -\frac{1}{2\beta_{\perp}\varepsilon} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2\beta_{\perp}\varepsilon} \right)^2 + \frac{1}{\beta_{\perp}}}. \quad (2,22)$$

Об этом решении еще пойдет речь в § 3.6. Что касается продольной волны, то из (2,21) для нее получается условие $\varepsilon(\omega_{||}) = 0$. Пространственная дисперсия для продольной волны при использовании разложения (2,21) не учитывается.

Отметим, что формулы (2,20) и (2,21) соответствуют следующим связям:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \varepsilon \mathbf{E} - \alpha_{\perp}(\omega) \frac{c^2}{\omega^2} \text{rot rot } \mathbf{E} + \alpha_{||}(\omega) \frac{c^2}{\omega^2} \text{grad div } \mathbf{E}, \\ \mathbf{E} &= \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon} + \beta_{\perp}(\omega) \frac{c^2}{\omega^2} \text{rot rot } \mathbf{D} - \beta_{||}(\omega) \frac{c^2}{\omega^2} \text{grad div } \mathbf{D}. \end{aligned} \quad (2,23)$$

Выражения (2,23) являются самыми общими связями между двумя векторами в изотропной негиротропной среде при учете производных не выше второго порядка.

Условия, которые связаны с симметрией кристаллов, в отношении тензоров ε_{ij} и γ_{ijkl} хорошо известны (см., например, ^{1, 22, 26}). Тем не менее, для удобства напомним соответствующие результаты (свойства симметрии для обратных тензоров, очевидно, такие же, как для исходных тензоров, и поэтому компоненты обратных тензоров ниже не выписываются).

Симметричный тензор второго ранга, в частности, тензор $\varepsilon_{ij}(\omega)$ имеет максимум шесть независимых компонент. Для характеристической поверхности второго порядка $\varepsilon_{ij} x_i x_j = 1$ 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 к осям третьего 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. $\varepsilon_{ij} = \varepsilon \delta_{ij}$ (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, 3 или 6-го порядков,

приводим тензор ε_{ij} к виду $\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}$ и т. д. (табл. II *).

*) Упрощение тензоров, связанное с симметрией, особенно подробно излагается в книге ²⁶. Заметим, что для обозначения кристаллических классов мы пользуемся наиболее распространенными в физической литературе обозначениями Шенфлиса (соответствие между этими обозначениями и интернациональными см. в ²⁶).

Таблица II

Свойства тензора $\varepsilon_{ij}(\omega)$ и псевдотензора $f_{ij}(\omega)$
 ($\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$, $f_{ij} = f_{ji}$, $\gamma_{ijl} = e_{ijm} f_{ml}$)

Система	ε_{ij}	Главные оси тензора	f_{ij}
Триклини- ная	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$	Не фиксированы	$f_{ij} = 0$ в классе C_1 $f_{ij} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{12} & f_{22} & f_{23} \\ f_{13} & f_{23} & f_{33} \end{pmatrix}$ — в классе C_1
Моноклин- ная	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & \varepsilon_{13} \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ \varepsilon_{13} & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$	Ось y направлена по оси 2-го порядка или перпендикулярно к плоскости симметрии	$f_{ij} = 0$ в классе C_{2h} $f_{ij} = \begin{pmatrix} f_{11} & 0 & f_{13} \\ 0 & f_{22} & 0 \\ f_{13} & 0 & f_{33} \end{pmatrix}$ — в классе C_2 $f_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & f_{12} & 0 \\ f_{12} & 0 & f_{23} \\ 0 & f_{23} & 0 \end{pmatrix}$ — в классе C_s
Ромбиче- ская	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$	Оси x, y, z направлены по осям 2-го порядка, а в классе C_{2v} оси x и y перпендикулярны к плоскостям симметрии	$f_{ij} = 0$ в классе C_{2h} $f_{ij} = \begin{pmatrix} f_{11} & 0 & 0 \\ 0 & f_{22} & 0 \\ 0 & 0 & f_{33} \end{pmatrix}$ — в классе D_2 $f_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & f_{12} & 0 \\ f_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ — в классе C_{2v}
Тетраго- нальная	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$	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	$f_{ij} = 0$ в классах C_{4h}, C_{4v} и D_{4h} $f_{ij} = \begin{pmatrix} f_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & f_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & f_{\parallel} \end{pmatrix}$ в классах C_4 и D_4 $f_{ij} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & 0 \\ f_{12} & f_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ в классе S_4 $f_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & f_{12} & 0 \\ f_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ в классе D_{2d}
Тригональ- ная	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$	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	$f_{ij} = 0$ в классах C_{3i}, C_{3v} и D_{3d} $f_{ij} = \begin{pmatrix} f_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & f_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & f_{\parallel} \end{pmatrix}$ в классах C_3 и D_3
Гексаго- нальная	$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}$	В классах C_6, C_{3h} и C_{6h} фиксирована лишь ось z (ось 6-го порядка)	$f_{ij} = 0$ в классах $C_{3h}, C_{6h}, C_{6v}, D_{3h}, D_{6h}$ $f_{ij} = \begin{pmatrix} f_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & f_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & f_{\parallel} \end{pmatrix}$ в классах C_6 и D_6

Продолжение табл. II

Система	ε_{ij}	Главные оси тензора	f_{ij}
Кубиче- ская	$\begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$	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)	$f_{ij}=0$ в классах T_h, T_d и O_h $f_{ij}=\begin{pmatrix} f & 0 & 0 \\ 0 & f & 0 \\ 0 & 0 & f \end{pmatrix}$ в классах T и O
Изотроп- ная среда	$\begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$	Выбор осей произволен	$f_{ij}=0$ при наличии центра симметрии $f_{ij}=\begin{pmatrix} f & 0 & 0 \\ 0 & f & 0 \\ 0 & 0 & f \end{pmatrix}$ при отсутствии центра симметрии

В силу соотношений (2,18) тензор γ_{ijl} (и δ_{ijl}) обладает следующими свойствами: $\gamma_{xx,l} = \gamma_{yy,l} = \gamma_{zz,l} = 0$, $\gamma_{xy,l} = -\gamma_{yx,l}$, $\gamma_{yz,l} = -\gamma_{zy,l}$, $\gamma_{zx,l} = -\gamma_{xz,l}$ ($l = 1, 2, 3 \equiv x, y, z$); таким образом, тензоры γ_{ijl} и δ_{ijl} в общем случае имеют девять независимых компонент и их можно записать в виде

$$\gamma_{ijl} = e_{ijm} g_{ml}, \quad \delta_{ijl} = e_{ijm} f_{ml}, \quad (2,24)$$

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 g_{ml} и f_{ml} — псевдотензоры 2-го ранга. Далее, можно записать

$$\gamma_{ijl} k_l = e_{ijm} g_{ml} k_l = e_{ijm} g'_m, \quad \delta_{ijl} k_l = e_{ijm} f_{ml} k_l = e_{ijm} f'_m, \quad (2,25)$$

где введены псевдо(т. е. аксиальные)-векторы g' и f' .

При пренебрежении в формулах (2,14) — (2,13) членами, квадратичными по k , имеем

$$\begin{aligned} D'_i &= \varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) E_j = \varepsilon_{ij}(\omega) E_j - i [g' E]_i, \\ E_i &= \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D'_j = \varepsilon_{ij}^{-1}(\omega) D'_j - i [f' D']_i. \end{aligned} \quad (2,26)$$

Подставляя эти связи в волновое уравнение (1,15), можно убедиться (см. § 3, а и, например, ¹, § 82, 83), 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 отношение компонент вектора D' не зависят от антисимметричной части f_{ij} , т. е. этот тензор можно выбирать в симметричной форме *). Для изотропной среды и кубических кристаллов (разумеется,

*) Антисимметричные части псевдотензоров $g_{ij,a}$ и $f_{ij,a}$ приводят к псевдовекторам g'_a и f'_a , которые имеют вид $\text{const} \cdot [\mathbf{h}, \mathbf{k}]$; здесь $\mathbf{h}$ — некоторый единичный 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 (кристаллы $C_1, C_s, C_2, C_{2v}, C_4, C_{4v}, C_3, C_{3v}, C_6, C_{6v}$; см., например, ¹, § 13). Отсюда 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 (2,26) следует, что вектор f'_a ведет к по-

без центра симметрии, так как иначе $g_{ij} = f_{ij} = 0$; кроме того, нужно иметь в виду, что тензор g_{ij} может быть равен нулю и при отсутствии центра симметрии, как это имеет место, например, для кубических кристаллов класса T_d):

$$\left. \begin{aligned} g_{ij} &= g\delta_{ij}, \quad f_{ij} = f\delta_{ij}, \quad g' = g\mathbf{k}, \quad f' = f\mathbf{k}, \\ \mathbf{D}' &= \varepsilon\mathbf{E} - ig[\mathbf{kE}], \\ \mathbf{E} &= \frac{\mathbf{D}'}{\varepsilon} - if[\mathbf{kD}']. \end{aligned} \right\} \quad (2,27)$$

В этом случае не только $\mathbf{D}'\mathbf{k} = 0$, но при $\mathbf{D}' \neq 0$ также и $\mathbf{E}\mathbf{k} = 0$. Если же $\mathbf{D}' = 0$ и $\mathbf{E} = E\mathbf{s}$ (продольные волны), то гиротропия оказывается несущественной. Вид симметричного тензора f_{ij} для различных кристаллических классов указан в табл. II (подробнее см. ¹, § 33 и ²², ²⁶, ²⁸).

Перейдем к рассмотрению свойств тензора α_{ijlm} (и β_{ijlm}). В силу симметричности тензора α_{ijlm} по индексам ij и отдельно по индексам lm (см. (2,18)) 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. ²⁶, ²⁸).

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_{ijlm} . 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 $\varepsilon_{ij}(\omega)$ (или любого другого тензора второго ранга). Число независимых компонент тензора ε_{ij} в триклинной, моноклинной и ромбической системах равно соответственно 6, 4 и 3 (см. табл. II). В то же время во всех этих случаях в системе главных осей тензор ε_{ij} имеет три независимые компоненты. Разница же между кристаллами указанных классов очень большая, поскольку в ромбическом кристалле главные оси фиксированы, а в триклинном кристалле все главные оси нужно находить, что и эквивалентно еще трем параметрам.

Ниже возможность выбора главных осей указывается (т. е. отмечаются случаи, когда этот выбор не фиксирован на основании соображений,

явлению лишь продольной составляющей $\mathbf{E}$ (считаем, что $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c}\mathbf{ns}$). Поэтому при решении волнового уравнения для изотропного кристалла (см., например, § 3, а) тензор $f_{ij,a}$ не вносит никакого вклада в значение показателей преломления и соотношение между компонентами вектора $\mathbf{D}$. Вместе с тем, вектор $\mathbf{E}$, 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 для простоты считаются отсутствующими в (2,11) — (2,13) 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 ²⁷), представляется нам, вместе с тем, вполне заслуживающей внимания.

связанных с симметрией кристалла), но при подсчете числа независимых компонент это обстоятельство не учитывается*).

В моноклинных кристаллах классов C_2 и C_{2h} имеется ось второго 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 этом преобразовании меняют знак, физически же обе системы координат совершенно равноправны — в этом и состоит смысл утверждения о наличии оси второго порядка. Следовательно, соответствующие 16 компонент тензора α_{ijklm} равны нулю; имеются в виду компоненты

$$\alpha_{xyyy}, \alpha_{zyyy}, \alpha_{yuyx}, \alpha_{yuyz}, \alpha_{xxxy}, \alpha_{yxxx}, \alpha_{zzzy}, \alpha_{yzzz}, \\ \alpha_{xxxy}, \alpha_{xyxz}, \alpha_{xxyz}, \alpha_{yzxx}, \alpha_{zxzy}, \alpha_{zyzx}, \alpha_{zzxy}, \alpha_{xyzz}.$$

Класс C_s имеет только плоскость симметрии, перпендикулярную к оси y , и в силу симметрии должны исчезать компоненты α_{ijlm} 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 второго 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 второго порядка):

$$\alpha_{xxxx}, \alpha_{xxyy}, \alpha_{xxzz}, \alpha_{yyxx}, \alpha_{yyzz}, \alpha_{zzxx}, \alpha_{xxyy}, \alpha_{xxzz}, \\ \alpha_{yyyy}, \alpha_{yyzz}, \alpha_{zzyy}, \alpha_{yzyz}, \alpha_{zzzz} \quad (2,28)$$

(кроме того, конечно, $\alpha_{xyxy} = \alpha_{yxyx} = \alpha_{xyyx}$ и т. д.).

Третий класс ромбической системы, класс C_{2v} , имеет одну ось второго 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, с четным числом индексов y . Но отсюда для тензора 4-го ранга вытекает требование о четности числа индексов z , т. е. опять приходим к схеме (2,28). Итак, кристаллы ромбической системы имеют 12 независимых компонент α_{ijklm} .

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 четвертого 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 (2,28) равны между собой и независимы только семь из них (остальные α_{ijklm} , кроме получающихся в силу условий $\alpha_{ijklm} = \alpha_{jilm} = \alpha_{ijml}$, в выбранной системе отсчета равны нулю):

$$\alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xxyy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{zzxx}, \\ \alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yzyz}, \alpha_{xyxy}. \quad (2,29)$$

Для классов C_4 , S_4 и C_{4h} тетрагональной системы, имеющих только поворотную или зеркально-поворотную ось четвертого порядка (а также перпендикулярную к ней плоскость симметрии в случае класса C_{4h}), исходить из (2,28) нельзя. Так же как это проиллюстрировано выше, приходим

*) В работе ²⁹ при подсчете числа независимых компонент тензора модулей упругости возможность выбора осей учитывается. Этим и объясняются отличия между числами независимых компонент в работах ²⁹ и ²⁶.

к выводу, что для этих классов, помимо коэффициентов (2,29), отличны от нуля коэффициенты

$$\alpha_{xuxx} = -\alpha_{xyyy}, \quad \alpha_{xxxu} = -\alpha_{yxyu}, \quad \alpha_{xzyz} = -\alpha_{yzzx}. \quad (2,30)$$

Таким образом, для классов C_4 , S_4 и C_{4h} имеется 10 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. (2,28)). Число независимых компонент, однако, сильно уменьшается. Так, уже наличие четырех осей третьего порядка, имеющих для всех классов кубической системы (пространственные диагонали куба), приводит к эквивалентности всех компонент тензора при замене $xyz \rightarrow yzx \rightarrow zxy$. Поэтому остается только четыре независимые компоненты:

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy} = \alpha_{zzzz}, \quad \alpha_2 = \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyxx} = \alpha_{zzyy}, \\ \alpha_3 = \alpha_{xxyy} = \alpha_{yyzz} = \alpha_{zzxx}, \quad \alpha_4 = \alpha_{zxzx} = \alpha_{xyxy} = \alpha_{yzyz}. \end{aligned} \quad (2,31)$$

Для классов T и T_h дальнейших упрощений не возникает. В классах T_d , O и O_h , кроме того,

$$\alpha_2 = \alpha_4 \text{ (классы } T_d, O, O_h). \quad (2,32)$$

Равенство (2,32) сразу очевидно из (2,31), если учесть, что оси куба xyz являются зеркально-поворотными (класс T_d) или поворотными (классы O и O_h) осями четвертого порядка**).

В изотропной среде, как ясно из (2,20), имеются только две независимые компоненты α_{ijklm} . В тензорной записи для произвольной декартовой системы координат

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy} = \alpha_{zzzz} = \alpha_1 = -\frac{c^2}{\omega^2} \alpha_{||}, \quad \alpha_{xxyy} = \alpha_{xxzz} = \\ = \alpha_{yyxx} = \alpha_{yyzz} = \alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy} = \alpha_2 = \alpha_4 = -\frac{c^2}{\omega^2} \alpha_{\perp}, \\ \alpha_{xxyy} = \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz} = \alpha_3 = \alpha_1 - \alpha_2 = \frac{c^2}{\omega^2} (\alpha_{\perp} - \alpha_{||}). \end{aligned} \right\} \quad (2,33)$$

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 тензорам см., например, ^{26, 29}). 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. ²⁶). Совершенно такой же, естественно, является также симметрия тензора упругооптических

*) 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, наглядную табл. 21 в работе ²⁶). Напомним также, что оси x , y , z для всех классов кубической системы фиксируются (оси второго порядка для классов T , T_h и T_d ; оси четвертого порядка для классов O и O_h).

**) Укажем, что в работе ⁵ допущена неточность: утверждения, сделанные в отношении значений α_{ijklm} в тетрагональных и кубических кристаллах, справедливы только для более симметричных классов этих систем (схемы (2,29) и (2,31) — (2,32)).

Таблица III

Свойства тензора α_{ijklm}
 $(\alpha_{ijklm} = \alpha_{jilm}; \alpha_{ijlm} = \alpha_{ijml}; \text{свойства } \beta_{ijklm} \text{ аналогичны свойствам } \alpha_{ijklm})$

Система	Компоненты α_{ijklm} (кроме указанных, отличны от нуля компоненты, получающиеся в силу условий $\alpha_{ijklm} = \alpha_{jilm} = \alpha_{ijml}$)
Триклинная	Отличны от нуля все 36 компонент α_{ijklm} (возможность фиксации осей в таблице не учитывается; см. текст и табл. II)
Моноклиновая	Отличны от нуля 20 компонент, кроме равных нулю: $\alpha_{xyyy}, \alpha_{zyyy}, \alpha_{yuyx}, \alpha_{yuyz}, \alpha_{xxxy}, \alpha_{yxxx}, \alpha_{zzzy}, \alpha_{yzzy}, \alpha_{xzzy}, \alpha_{yxxz}, \alpha_{xxyz}, \alpha_{zxxz}, \alpha_{yzxz}, \alpha_{xzyz}, \alpha_{yzyz}, \alpha_{zxzx}, \alpha_{zyzx}, \alpha_{zzxx}, \alpha_{xzzx}, \alpha_{xyxy}, \alpha_{x'xz}, \alpha_{yuyz}, \alpha_{zzyy}, \alpha_{yzyz}$
Ромбическая	Отличны от нуля 12 независимых компонент: $\alpha_{xxxx}, \alpha_{yyyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xxxy}, \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz}, \alpha_{yyzz}, \alpha_{xxxy}, \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz}, \alpha_{yyzz}, \alpha_{yzyz}$
Тетрагональная	В классах D_4, C_{4v}, D_{2d} и D_{4h} отличны от нуля семь независимых компонент. $\alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xxxy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz}, \alpha_{xxxy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz}, \alpha_{xxxy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz}$ В классах C_4, S_4 и C_{4h} отличны от нуля еще три независимые компоненты: $\alpha_{xyxx} = -\alpha_{xyyy}, \alpha_{xxxy} = -\alpha_{yxyx}, \alpha_{xzyz} = -\alpha_{yzxz}$
Тригональная	В классах C_3 и C_{3v} имеется 12 независимых компонент: $\alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy}, \alpha_{xxxy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz}, \alpha_{xxxy} = \alpha_{yyxx} = -\alpha_{yuyz}, \alpha_{xxxz} = -\alpha_{yuyz} = -\alpha_{xyyz}, \alpha_{xxxy} = \alpha_{xyyy} = -\alpha_{yuyx} = -\alpha_{xyxx}, \alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{yzxx} = -\alpha_{yzyy} = -\alpha_{xzyx}, \alpha_{xzxx} = -\alpha_{xzyy} = -\alpha_{yzyx}, \alpha_{yzyz} = \alpha_{xzxz}, \alpha_{y'xz} = -\alpha_{xzyz}, \alpha_{xyxy} = +\alpha_{xxxx} - \alpha_{xxxy}$ В классах D_3, C_{3v} и D_{3d} , кроме того $\alpha_{xxxz} = \alpha_{xxxy} = \alpha_{y'xz} = \alpha_{x'zz} = 0$
Гексагональная	В классах C_6, C_{3h} и C_{6h} имеется восемь независимых компонент (неперечисленные компоненты равны нулю): $\alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy}, \alpha_{xxxy} = \alpha_{yyxx}, \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyzz}, \alpha_{zzxx} = \alpha_{zzyy}, \alpha_{zzzz}, \alpha_{xyyy} = \alpha_{xxxy} = -\alpha_{yuyx} = -\alpha_{xyxx}, \alpha_{yzyz} = \alpha_{xzxz}, \alpha_{yzxz} = -\alpha_{xzyz}, \alpha_{xyxy} = \alpha_{xxxx} - \alpha_{xxxy}$ В классах D_6, C_{6v}, D_{3h} и D_{6h} , кроме того, $\alpha_{xxxy} = \alpha_{y'xz} = 0$ (равны нулю и другие компоненты, связанные с указанными, в силу приведенных выше соотношений)
Кубическая	В классах T и T_h отличны от нуля четыре независимые компоненты: $\alpha_1 = \alpha_{xxxx} = \alpha_{yyyy} = \alpha_{zzzz}, \alpha_2 = \alpha_{xxzz} = \alpha_{yyxx} = \alpha_{zzyy}, \alpha_3 = \alpha_{xyxy} = \alpha_{yzyz} = \alpha_{zxzx}, \alpha_4 = \alpha_{zzxx} = \alpha_{xxzy} = \alpha_{y'yz}$ Для классов O, T_d и O_h , кроме того, $\alpha_2 = \alpha_4$
Изотропная среда	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 две независимые компоненты)

коэффициентов p_{ijlm} (здесь $\delta\epsilon_{ij}^{-1} = p_{ijlm}u_{lm}$, где u_{lm} — тензор деформаций). Поэтому свойства симметрии тензора α_{ijlm} для тригональной и гексагональной систем мы возьмем из ²⁶ (см. табл. 15 в работе ²⁶). Это не было сделано для других систем в связи с простотой вывода и желанием подчеркнуть некоторые моменты. Сводка всех значений α_{ijlm} приведена в табл. III.

Ниже мы не будем одновременно учитывать члены первого и второго порядков по $\mathbf{k}$ в соответствии с уже сделанным замечанием о малости пространственной дисперсии. Поэтому нас будут интересовать не общие выражения (2,14)–(2,13), а выражения (2,26) для гиротропной среды и нижеследующие выражения для негиротропной среды:

$$\begin{aligned}\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \alpha_{ijlm}(\omega) \hat{n}^2 s_l s_m, \\ \epsilon_{ij}^{-1}(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{ij}^{-1}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \beta_{ijlm}(\omega) \hat{n}^2 s_l s_m.\end{aligned}\quad (2,33')$$

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 (2,33).

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. (2,28) и табл. III). Если например, вектор $\mathbf{s}$ направлен по оси x , то главные значения тензора $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ равны

$$\begin{aligned}\epsilon_1 = \epsilon_{xx}(\omega, \mathbf{k}) &= \epsilon_{xx}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_{xxxx}, \quad \epsilon_2 = \epsilon_{yy}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{yy}(\omega) + \\ &+ \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_{yyxx}, \quad \epsilon_3 = \epsilon_{zz}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{zz}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_{zzxx}.\end{aligned}$$

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 направлен по оси z (по оси четвертого порядка), то

$$\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_{\perp}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_{xxzz}, \quad \epsilon_3 = \epsilon_{\parallel}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_{zzzz}.$$

Не останавливаясь на кристаллах других систем, перейдем к кубическим кристаллам. В этом случае (см. табл. III)

$$\left. \begin{aligned}\epsilon_{xx} &= \epsilon + \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \{\alpha_1 s_x^2 + \alpha_4 s_y^2 + \alpha_2 s_z^2\}, \quad \epsilon_{xy} = 2 \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_3 s_x s_y, \\ \epsilon_{yy} &= \epsilon + \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \{\alpha_2 s_x^2 + \alpha_1 s_y^2 + \alpha_4 s_z^2\}, \quad \epsilon_{xz} = 2 \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_3 s_x s_z, \\ \epsilon_{zz} &= \epsilon + \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \{\alpha_4 s_x^2 + \alpha_2 s_y^2 + \alpha_1 s_z^2\}, \quad \epsilon_{yz} = 2 \left(\frac{\omega}{c} \hat{n}\right)^2 \alpha_3 s_y s_z\end{aligned}\right\} \quad (2,34)$$

(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 (2,33) членов,

*) 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 в общем случае не совпадают. Если не оговорено противное, мы в тексте для краткости имеем в виду только тензор ϵ'_{ij} , считая его вещественным.

пропорциональных $s_x s_y$ и $s_y s_x$). Отсюда очевидно, что оси куба x, y, z являются главными осями тензора, если вектор s направлен по любой из осей x, y, z . При этом соответствующая поверхность второго порядка при $\alpha_2 = \alpha_4$ вырождается в поверхность (эллипсоид или гиперболоид) вращения. Если вектор s направлен по пространственным диагоналям куба $\left(|s_x| = |s_y| = |s_z| = \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$, то

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} &= \varepsilon + \frac{1}{3} \left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \right)^2 (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_4), \\ |\varepsilon_{xy}| = |\varepsilon_{xz}| = |\varepsilon_{yz}| &= 2 \left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \right)^2 \frac{\alpha_3}{3}.\end{aligned}\quad (2,35)$$

(Часть II статьи (§ 3 и 4) будет опубликована в одном из последующих выпусков УФН.)

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА. I

1. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред. М., Гостехиздат, 1957.
2. В. Л. Гинзбург, Распространение электромагнитных волн в плазме, М., Физматгиз, 1960.
3. H. A. Lorentz, Collected Papers, Vol. 2, 1936, стр. 79; Vol. 3, 1936, стр. 314.
4. K. H. Hellwege, Zs. Phys. **129**, 626 (1951).
5. В. Л. Гинзбург, ЖЭТФ **34**, 1593 (1958); см. также Proc. Intern. Conf. Semiconductor Physics, Prague, 1961, стр. 394.
6. Е. Ф. Гросс и А. А. Каплянский, ДАН СССР **132**, 98 (1960); **139**, 75 (1961).
7. С. И. Пекар, ЖЭТФ **33**, 1022 (1957).
8. В. Л. Гинзбург, А. А. Рухадзе и В. П. Силин, Физ. тв. тела **3**, 1835, 2890 (1961); Phys. Chem. Solids, 1962.
9. Ю. Л. Климонтович и В. П. Силин, УФН **70**, 247 (1960).
10. А. А. Рухадзе и В. П. Силин, УФН **74**, 223 (1961) и монография «Электромагнитные свойства плазмы и плазмopodobных сред», М., Атомиздат, 1961.
11. В. Л. Гинзбург, УФН **69**, 537 (1959).
12. М. Борн и Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, М., ИЛ, 1958.
13. H.aken, Fortschr. Phys. **6**, 271 (1958), УФН **68**, 565 (1959).
14. С. И. Пекар, ЖЭТФ **38**, 1787 (1960).
- 14а. J. J. Hopfield, Phys. Rev. **112**, 1555 (1958).
15. U. Fano, Phys. Rev. **118**, 451 (1960).
16. К. Б. Толпыго, ЖЭТФ **20**, 497 (1950).
17. К. Б. Толпыго, УФН **74**, 269 (1961).
18. М. А. Леонтович, ЖЭТФ **40**, 907 (1961).
19. Б. Н. Гершман и В. Л. Гинзбург, Изв. вузов (Радиофизика) **5**, 31 (1962)
- 19а. В. Л. Гинзбург, Изв. вузов (Радиофизика) **5**, № 3 (1962).
20. В. Л. Гинзбург, Изв. вузов (Радиофизика) **4**, 74 (1961).
21. С. Богуславский, Ann. d. Phys. **44**, 1077 (1914).
22. G. Szivessy, Handb. d. Phys. **20**, 635 (1928).
23. N. G. van Kampen, Math. Rev. **20**, 1227 (1959).
24. В. М. Агранович и А. А. Рухадзе, ЖЭТФ **35**, 982 (1958).
25. С. И. Пекар, ЖЭТФ **36**, 451 (1959).
26. Дж. Най, Физические свойства кристаллов, М., ИЛ, 1960.
27. Ф. И. Федоров, Оптика и спектр. **6**, 85, 377 (1959).
28. G. N. Ramachandran and S. Ramaseshan, Handb. d. Phys. **25/1**, 1 (1961).
29. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика сплошных сред. Часть II, § 10, М., Гостехиздат, 1953.
30. Л. Н. Овандер, Физ. тв. тела **3**, 2394 (1961).