Волны в сверхрешетке с произвольной толщиной границы между слоями

© В.А. Игнатченко, О.Н. Лалетин*

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, 660036 Красноярск, Россия * Красноярский государственный университет, 660041 Красноярск, Россия E-mail: vignatch@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 4 февраля 2004 г. В окончательной редакции 31 марта 2004 г.)

Исследованы коэффициенты прохождения $D(\omega)$ и отражения $R(\omega)$ и закон дисперсии волн $\omega(k)$ в одномерной сверхрешетке (мультислойной структуре) с произвольной толщиной границы между слоями. Рассчитаны зависимости ширин запрещенных зон $\Delta \omega_m$ и их положения в волновом спектре сверхрешетки от толщины границы между слоями d и номера зоны m. Расчет проведен методом модифицированной теории связанных волн (МТСВ) из частотной зависимости $R(\omega)$ и методом теории возмущений из зависимости $\omega(k)$, что позволило оценить точность метода МТСВ; метод обладает высокой точностью при расчете ширин запрещенных зон и гораздо меньшей при определении положений этих зон. Показано, что $\Delta \omega_m$ имеет различную зависимость от m для электромагнитных (или упругих) и для спиновых волн. Показано, что ширины запрещенных зон с m = 1 и 2 практически не зависят от d, в то время как ширины всех зон с m > 2 имеют сильную зависимость от d. Экспериментальные измерения этих зависимостей позволяют определять толщину границы между слоями сверхрешеток спектральными методами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-04-16174) и Красноярского краевого научного фонда (грант № 12F0013C) и частично фонда "Династия" и МЦФФМ.

1. Введение

Распространение волн различной природы (электромагнитных, упругих, спиновых и т.д.) и их спектры в средах с одномерной периодической модуляцией какого-либо материального параметра — мультислойных структурах или сверхрешетках (SL) — исследовано теоретически во многих работах. Эта проблема отражена в монографиях [1–5] и обзорах [6,7]. Вид законов дисперсии и коэффициентов распространения волн в SL в сильной степени определяется геометрической структурой профиля модуляции материального параметра SL. Как правило, в литературе широко рассматриваются два вида пространственной модуляции этого параметра: прямоугольная и синусоидальная. Прямоугольная модуляция соответствует случаю максимально резких границ между слоями SL (толщина границ равна нулю), синусоидальная модуляция соответствует предельному случаю максимально плавных границ (толщина "границы" равна толщине "слоя"). Модель с прямоугольным профилем модуляции широко использована при исследовании электромагнитных [8–11], упругих [12–16] и спиновых [17-22] волн. Волны различной физической природы для модели с синусоидальным профилем модуляции материального параметра исследованы в работах [23,24]. В [25] спиновые волны рассмотрены для обоих случаев.

Однако в реальных SL профиль модуляции материального параметра может иметь форму, промежуточную между этими двумя предельными случаями. Поэтому в работе [26] была предложена модель сверхрешетки, в которой модуляция пропорциональна эллиптическому синусу Якоби

$$\rho(z) = \kappa \left(\frac{\mathbf{K}}{\mathbf{K} - \mathbf{E}}\right)^{1/2} \operatorname{sn}\left(\frac{\pi z}{2d}\right), \tag{1}$$

где $d = \pi l/8$ K — толщина границы между слоями SL, l — период сверхрешетки (l/2 - d — толщина слоя), К и Е — полные эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно, к — модуль этих интегралов. Коэффициент перед эллиптическим синусом соответствует нормировке $\langle \rho^2(z) \rangle = 1$ (угловые скобки означают усреднение по периоду *l*). Общий вид функции (1) приведен на рис. 1. В зависимости от величины модуля к эта функция описывает как предельные случаи прямоугольного профиля $(d/l = 0, \kappa = 1, \mathbf{K} = \infty)$ и синусоидального профиля $(d/l = 1/4, \kappa = 0, \mathbf{K} = \pi/2)$, так и все промежуточные значения d/l. Толщина границы dопределена в выражении (1) таким образом, что основное изменение материального параметра происходит на длине d для всех значений d/l (рис. 1). В работе [26] показана принципиальная возможность развития спектральных методов исследования структуры границы в сверхрешетках. Для ее реализации требуется развитие теории в нескольких направлениях. Настоящая работа посвящена двум таким направлениям. Первое связано с тем, что в [26] расчет проведен для спектра стоячих волн, в экспериментах с которыми исследуется непо-



Рис. 1. Вид функции (1) для $\kappa = 0.994$ (d/l = 0.218).

средственно закон дисперсии волн. В экспериментах с бегущими волнами измеряются другие параметры — коэффициенты отражения и прохождения. Поэтому необходимо изучение случая распространяющихся волн для модели [26]. Вторым направлением работы является развитие более точной теории нахождения закона дисперсии волн для такой модели. Оба направления требуют применения и развития соответствующих приближенных методов расчета, так как уравнение второго порядка с коэффициентом, зависящим от координаты по закону эллиптического синуса, принадлежащее к общему классу уравнений Хилла, не сводится к какому-либо хорошо изученному типу уравнений этого класса. В частности, оно не может быть сведено к уравнению Ламе, которое содержит квадрат эллиптического синуса.

2. Распространение волн в сверхрешетках

Ситуацию с распространяющимися в среде волнами рассмотрим на примере электромагнитных волн в SL с периодически модулированной вдоль оси *z* диэлектрической проницаемостью, которую представим в виде

$$\epsilon(z) = \epsilon' \left[1 - \gamma \rho(z) \right] - i\epsilon'', \tag{2}$$

где ϵ' и ϵ'' — постоянные составляющие действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости соответственно; у — величина относительной среднеквадратичной модуляции действительной части диэлектрической проницаемости; $\rho(z)$ — периодическая функция с периодом l, удовлетворяющая условиям центрированности $\langle \rho(z) \rangle = 0$ и нормированности $\langle \rho(z) \rangle = 1$. Ограничимся рассмотрением слабо возмущенных сред, т.е. положим $\gamma \ll 1$. Будем также считать, что отношение ϵ''/ϵ' по порядку величины не превышает γ . Нас будут интересовать решения системы уравнений Максвелла вблизи частот брэгговских резонансов, соответствующих границам *т*-х зон Бриллюэна. Будем рассматривать волны, распространяющиеся вдоль оси z. Для нахождения приближенного решения используем модифицированную теорию связанных волн (МТСВ) (см. [27], а также обзор [7]; о развитии теории связанных волн применительно к оптическим волноводам см. обзор [28]; непосредственно теория связанных волн впервые предложена в работе [29]). В этой теории записывают систему уравнений для амплитуд двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях. Параметры связи κ_m^{\pm} в этой системе имеют вид

$$\kappa_m^{\pm} = \frac{1}{4l} \int_0^t \frac{dz}{\epsilon(z)} \frac{d\epsilon(z)}{dz} \exp\left(\pm 2i\psi(z) \mp 2i\omega\tilde{n}z/c \pm imqz\right) + \frac{1}{4l} \sum_{j=1}^N \ln\frac{\epsilon(z_j+0)}{\epsilon(z_j-0)} \exp\left(\pm 2i\psi(z_j) \mp 2i\omega\tilde{n}z_j/c \pm imqz_j\right),$$
(3)

где $\psi(z) = \frac{\omega}{c} \int_{0}^{l} \sqrt{\epsilon(z')} dz'$, $\tilde{n} = c\psi(l)/\omega l$, $q = 2\pi/l$; интеграл понимается в смысле главного значения, а сумма учитывает вклад скачков диэлектрической проницаемости в точках разрыва z_j . Формула (3) является основным результатом МТСВ, так как через коэффициенты связи κ_m^{\pm} выражаются все измеряемые физические величины, в частности коэффициенты отражения $R(\omega)$ и прохождения $D(\omega)$ (см., например, [7]).

На рис. 2 приведен график зависимости коэффициента отражения R от частоты для полубесконечной среды $(L
ightarrow \infty)$ в отсутствии поглощения $(\epsilon'' = 0)$ для двух хорошо изученных предельных случаев толщины границы: d/l = 0 (прямоугольный профиль SL — сплошная кривая) и d/l = 1/4 (синусоидальный профиль SL штриховая кривая). На графике изображен вид $R(\omega)$ в окрестностях трех зон Бриллюэна: m = 1, 2 и 3. Видно, что ширины запрещенных зон практически одинаковы для обоих предельных случаев как для m = 1, так и для m = 2. Однако для m = 3 эти ширины существенно отличаются. На этом отличии и предполагается построить теоретическую базу для развития экспериментального метода определения толщины границы d из спектральных измерений. Для этого нужно получить прежде всего зависимости коэффициентов связи κ_m^{\pm} от параметров SL. Считая, что функция $\rho(z)$, входящая в выражение (2), не испытывает скачков, оставляем в формуле (3) только интегральное выражение, в которое подставим разложение этой функции в ряд Фурье. Если



Рис. 2. Зависимость $R(\omega)$ для полубесконечной SL вблизи первых трех зон Бриллюэна для прямоугольной (сплошная кривая) и синусоидальной (штриховая кривая) модуляции SL.

номер зоны *m* не слишком велик, так что выполняется соотношение $m\gamma/2 \ll 1$, то подынтегральное выражение в (3) можно разложить в ряд по малому параметру γ . Ограничившись разложением до γ^3 , после выполнения интегрирования получаем

$$\kappa_{m}^{\pm} = \pm \frac{imq}{8} e^{\pm i\Phi} \left[2\gamma \left(1 + i \frac{\epsilon''}{\epsilon'} - \frac{\epsilon''^{2}}{\epsilon'^{2}} \right) \rho_{\mp m} \right. \\ \left. + \gamma^{2} \left\{ \frac{2\omega\sqrt{\epsilon'}}{mqc} \left(1 + \frac{3i}{2} \frac{\epsilon''}{\epsilon'} \right) \sum_{n} \frac{\mp m - n}{n} \rho_{n} \rho_{\mp m - n} \right. \\ \left. + \left(1 + 2i \frac{\epsilon''}{\epsilon'} \right) \sum_{n} \rho_{n} \rho_{\mp m - n} \right\} \\ \left. + \gamma^{3} \left\{ \frac{\omega\sqrt{\epsilon'}}{2mqc} \sum_{n+p\neq 0} \frac{\mp m - n - p}{n+p} \rho_{n} \rho_{p} \rho_{\mp m - n - p} \right. \\ \left. + \sum_{n,p} \left(\mp \frac{\omega^{2}\epsilon'}{mq^{2}c^{2}} \frac{\mp m - n - p}{np} + \frac{\omega\sqrt{\epsilon'}}{mqc} \frac{\mp m - p}{p} + \frac{2}{3} \right) \right. \\ \left. \times \rho_{n} \rho_{p} \rho_{\mp m - n - p} \right\} + \dots \right],$$

$$(4)$$

где

$$\Phi = \frac{\omega\sqrt{\epsilon'}}{iqc} \left[\left(1 + \frac{i}{2} \frac{\epsilon''}{\epsilon'} \right) \gamma \sum_{n} \frac{\rho_n}{n} + \frac{1}{4} \gamma^2 \sum_{n+p \neq 0} \frac{\rho_n \rho_p}{n+p} + \dots \right].$$
(5)

После подстановки выражения (4) в выражения для коэффициентов прохождения D и отражения R их зависимости от ω могут быть построены в общем случае для любого профиля модуляции и любой толщины L сверхрешетки. Из графиков $D(\omega)$ или $R(\omega)$ могут быть, в частности, определены и зависимости ширин щелей на границах зон Бриллюэна от толщины границы.

Для более простой модели полубесконечной SL в непоглощающей среде получим явные зависимости ширин щелей от *d*. В этом случае функция $R(\omega)$ в области запрещенных зон имеет плоские вершины с R = 1. Из этого условия следуют уравнения для частот ω_m^{\pm} , ограничивающих *m*-ю запрещенную зону

$$\omega_m^{\pm} = \frac{c}{\tilde{n}} \left(\frac{mq}{2} \pm \left| \kappa_m^+ \kappa_m^- \right|^{1/2} \right); \tag{6}$$

в этих уравнениях коэффициенты κ_m^{\pm} зависят от ω_m^{\pm} . Решив эти уравнения, можно найти ширину *m*-й запрещенной зоны $\Delta \omega_m = \omega_m^+ - \omega_m^-$. Положим в выражениях (4) $\epsilon'' = 0$ и подставим κ_m^{\pm} , определяемые этими выражениями, в уравнения (6). Решая полученные уравнения

относительно ω_m^{\pm} с точностью до γ^3 , получим

$$\omega_{m}^{\pm} = \frac{mqc}{2\sqrt{\epsilon'}} \left[1 + \frac{1}{8} \gamma^{2} \pm \frac{1}{16} \gamma^{3} \left(|\rho_{m}| \mp \sum_{n+p\neq 0} \rho_{n} \rho_{p} \rho_{-n-p} \right) \\ \pm \left| \frac{1}{2} \rho_{m} \gamma + \frac{m}{4} \gamma^{2} \sum_{p} \frac{\rho_{p} \rho_{m-p}}{p} \pm \frac{m}{8} |\rho_{m}| \gamma^{3} \\ \times \sum_{p} \frac{\rho_{p} \rho_{m-p}}{p} + \frac{1}{16} \gamma^{3} S_{m} \right| \right],$$
(7)

где

$$S_{m} = \sum_{n+p\neq 0} \frac{m-n-p}{n+p} \rho_{n} \rho_{p} \rho_{m-n-p} + \sum_{n,p} \left(\frac{m^{2}}{np} + \frac{2}{3}\right) \rho_{n} \rho_{p} \rho_{m-n-p}.$$
 (8)

Отсюда для ширин щелей с точностью до γ^2 получаем

$$\Delta\omega_m = \frac{mqc}{2\sqrt{\epsilon'}} \left| \rho_m \gamma + \frac{m}{2} \gamma^2 \sum_p \frac{\rho_p \rho_{m-p}}{p} \right|. \tag{9}$$

Выражения (7)–(9) справедливы для любой формы профиля SL $\rho(z)$, представленного в этих выражениях своими гармониками Фурье ρ_n .

Рассмотрим функции, обладающие так называемой симметрией третьего рода [30]

$$\rho(z+l/2) = -\rho(z).$$
(10)

Для всех функций данного класса гармоники Фурье ρ_n с четным *n* обращаются в нуль. Используя это свойство, можно упростить выражения (7)

$$\omega_{m}^{\pm} = \frac{mqc}{2\sqrt{\epsilon'}} \times \begin{cases} 1 + \frac{1}{8}\gamma^{2} \pm \left|\frac{\rho_{m}}{2}\gamma + \frac{S_{m}}{16}\gamma^{3}\right| \pm \frac{|\rho_{m}|}{16}\gamma^{3}, & m - \text{ нечетное,} \\ 1 + \frac{1}{8}\gamma^{2} \pm \frac{m}{4}\gamma^{2} \left|\sum_{p} \frac{\rho_{p}\rho_{m-p}}{p}\right|, & m - \text{ четное.} \end{cases}$$
(11)

Для ширины щелей на границах нечетных и четных зон Бриллюэна получаем

$$\Delta\omega_{m} = \frac{mqc}{2\sqrt{\epsilon'}} \begin{cases} \left|\rho_{m}\gamma + \frac{S_{m}}{8}\gamma^{3}\right| + \frac{\left|\rho_{m}\right|}{8}\gamma^{3}, & m - \text{ нечетное,} \\ \frac{m}{2}\gamma^{2}\left|\sum_{p}\frac{\rho_{p}\rho_{m-p}}{p}\right|, & m - \text{ четное.} \end{cases}$$
(12)

Зависимости $\Delta \omega_n$ от d/l, определяемые этими выражениями для модели SL с произвольной толщиной границы (1), показаны на рис. 3, *a*, для нечетных зон и на рис. 3, *b* для четных зон. На обоих графиках ширины щелей нормированы к ширине первой запрещенной зоны SL с синусоидальным профилем $\Delta \omega_{1 \text{ sine}}$. Полученные ранее в [26] выражения для ширин нечетных щелей соответствуют члену, пропорциональному γ в верхней строке выражений (12). В работе [26] выражения и графики



Рис. 3. Зависимости ширин щелей $\Delta \omega_m$ на краю *m*-й зоны Бриллюэна от d/l для нечетных (a) и четных (b) зон при $\gamma = 0.15$. Значения *m* указаны у соответствующих кривых. Штрихом на части *b* показана ширина щели первой зоны.

приведены для ширин щелей в спектре спиновых волн, которые преобразуются в соответствующие зависимости для электромагнитных волн заменой $v = (\omega/c)^2 \epsilon_e$, $\epsilon = \gamma(\omega/c)^2 \epsilon_e$ (в обозначениях работы [26] ϵ_e — диэлектрическая проницаемость, ϵ — коэффициент размерности волнового числа перед функцией $\rho(z)$ в волновом уравнении). Качественный характер зависимостей $\Delta \omega_m$ от d/l, полученных в работе [26] (см. также [31]) и в данной работе, для нечетных зон Бриллюэна одинаков: $\Delta \omega_m$ для m = 1 практически не зависит от d/l и резко уменьшается с ростом d/l для m > 1. Первое количественное различие, связанное с учетом членов третьего порядка по γ , для нечетных зон проявляется при приближении $d/l \kappa 1/4$: член, пропорциональный γ , в выражении (12) при этом стремится к нулю, и при d/l = 1/4 в верхней строке этого выражения остаются слагаемые, которые описывают $\Delta \omega_m$ для нечетных зон синусоидальной SL. Второе отличие связано с появлением провала на графиках зависимостей $\Delta \omega_m(d)$ для нечетных зон (для m = 3 провал находится вблизи d/l = 1/4, для m = 5 и 7 он не виден в масштабе приведенного графика).

Зависимости $\Delta \omega_m$ от d/l для четных щелей (нижняя строка в выражении (12)) получены в данной работе впервые. Из рис. 3, *b* видно, что $\Delta \omega_m$ для m = 2 практически не зависит от d/l, а для m > 2 резко уменьшается с ростом d/l. При этом для SL с прямоугольным профилем $\Delta \omega_m$ для четных щелей возрастают пропорционально *m* с ростом *m*. Напомним, что полученные выражения остаются справедливыми только для тех *m*, при которых выполняется неравенство $m\gamma/2 \ll 1$. Из этого следует, в частности, что для SL с d/l = 0 развитая теория справедлива только для величин *m*, при которых выполняется меньше ширин нечетных зон.

3. Закон дисперсии волн

Законы дисперсии волн в SL с произвольной толщиной границы будем исследовать в общем виде для волн различной физической природы: электромагнитных, упругих и спиновых. Такой подход возможен, потому что вид законов дисперсии обусловлен в первую очередь структурой SL и ее границы. В этом подходе SL характеризуется периодической зависимостью от координаты z некоторого материального параметра A(z), различного для волн различной природы. Это может быть диэлектрическая проницаемость для электромагнитных волн, плотность вещества или силовая константа для упругих волн, величина намагниченности, анизотропии или обмена для спиновых волн и т. д. Представим A(z) в виде, аналогичном (2) (мнимой частью A пренебрегаем)

$$A(z) = A [1 - \gamma \rho(z)], \qquad (13)$$

где *А* и *у* — постоянная составляющая и относительная среднеквадратичная модуляция этого параметра соответственно.

Волновое уравнение запишем в виде

$$\frac{d^2\mu}{dz^2} + [\nu - \eta \rho(z)]\mu = 0,$$
(14)

где выражения для переменной μ и параметров ν и η различны для волн различной физической природы: электромагнитных, упругих и спиновых. Так, для спиновых волн $\nu = (\omega - \omega_0)/\alpha g M$, где ω_0 — частота ферромагнитного резонанса, α — параметр обменной связи, g — гиромагнитное отношение, M — величина внешнего магнитного поля; $\nu \propto \omega^2$ для электромагнитных и упругих волн и т.д. (см. [26]). Согласно теореме Флоке, решение уравнения (14) для волн, распространяющихся вдоль оси z, ищется в виде

$$\mu(z) = e^{-ikz} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mu_n e^{inqz}.$$
 (15)

Подставляя это выражение и разложение функции $\rho(z)$ в ряд Фурье в уравнение (14), получаем систему бесконечного числа уравнений для трансформант Фурье μ_n и ρ_n

$$(\nu - \nu_n)\mu_n = \eta \sum_{n_1} \mu_{n_1} \rho_{n-n_1},$$
 (16)

где $v = (k - nq)^2$. Уравнение для нахождения закона дисперсии v = v(k) следует из равенства нулю определителя системы (16), содержащего бесконечное число строк и столбцов. Численный анализ определителей $N \times N$ с конечными числами N строк и столбцов позволяет приближенно исследовать закон дисперсии волн.

Однако во многих случаях удобней вывести уравнение для нахождения v(k) в виде ряда по степеням η . Этот ряд может быть получен различными способами. Предлагаем еще один способ, в котором явно фигурируют запреты на присутствие в суммах некоторых членов. Это будет использовано далее при проведении анализа таких запретов на вид дисперсионного уравнения. Для общности вывода откажемся временно от ограничения $\langle \rho(z) \rangle = 0$, используемого в данной работе. Представим ρ_{n-n_1} , входящее в правую часть уравнения (16), в виде

$$\rho_{n-n_1} = \rho_{n-n_1} \delta_{nn_1} + \rho_{n-n_1} \Big|_{n_1 \neq n}.$$
 (17)

После подстановки (17) в уравнение (16) последнее примет вид

$$(\nu - \tilde{\nu}_n)\mu_n = \eta \sum_{n_1 \neq n} \mu_{n_1} \rho_{n-n_1}, \qquad (18)$$

где $\tilde{\nu}_n = \nu_n + \eta \rho_0$. Повышая в уравнении (18) индекс при n_i на единицу, выражая из полученного уравнения μ_{n_1} и подставляя в правую часть уравнения (18), имеем

$$(\nu - \tilde{\nu}_n)\mu_n = \eta^2 \sum_{n_1 \neq n} \sum_{n_2 \neq n_1} \frac{\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}\mu_{n_2}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}}.$$
 (19)

Представим произведение $\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}$ в виде, аналогичном (17)

$$\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2} = \rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}\delta_{nn_2} + \rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}\Big|_{n_2\neq n}, \quad (20)$$

и подставим его в уравнение (19), которое примет вид

$$\begin{pmatrix} \nu - \tilde{\nu}_n - \eta^2 \sum_{n_1 \neq n} \frac{\rho_{n-n_1} \rho_{n_1 - n}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} \end{pmatrix} \mu_n$$

= $\eta^2 \sum_{\substack{n_1 \neq n}} \sum_{\substack{n_2 \neq n \\ n_2 \neq n_1}} \frac{\rho_{n-n_1} \rho_{n_1 - n_2} \mu_{n_2}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}}.$ (21)

Повышаем в уравнении (18) индекс при n_i на 2, выражаем из получившегося уравнения μ_{n_2} и подставляем в правую часть уравнения (21); представляем образовавшееся тройное произведение функций ρ_i в форме, аналогичной (20). Продолжая этот процесс, получим из условия $\mu_n \neq 0$ уравнение для закона дисперсии в виде

$$\nu - \tilde{\nu}_{n} - \eta^{2} \sum_{n_{1} \neq n} \frac{\rho_{n-n_{1}} \rho_{n_{1}-n}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_{1}}}$$
$$- \eta^{3} \sum_{\substack{n_{1} \neq n}} \sum_{\substack{n_{2} \neq n \\ n_{2} \neq n_{1}}} \frac{\rho_{n-n_{1}} \rho_{n_{1}-n_{2}} \rho_{n_{2}-n}}{(\nu - \tilde{\nu}_{n_{1}})(\nu - \tilde{\nu}_{n_{2}})} - \dots = 0. \quad (22)$$

В работе [32] это уравнение получено другим методом. Однако при этом была допущена неточность, связанная с потерей в суммах запретов вида $n_i \neq n_{i-1}$.

Далее воспользуемся оригинальной идеей авторов работы [32], представивших ряд, аналогичный (22), в форме, соответствующей дисперсионному уравнению в приближении слабой связи. В наших обозначениях такое представление для главной ветки имеет вид

$$\left(\nu - \tilde{\nu}_0 - \tilde{T}^{(0)}\right) \left(\nu - \tilde{\nu}_m - T^{(0)}\right) = T^{(-m)} T^{(m)},$$
 (23)

где $T^{(m)}$, $T^{(-m)}$, $T^{(0)}$ и $\tilde{T}^{(0)}$ — ряды, не содержащие резонансных сомножителей. При учете всех запретов $n_i \neq n_{i-1}$ они имеют вид

$$T^{(-m)} = \eta \rho_{-m} + \eta^2 \sum_{\substack{n_1 \neq 0, m}} \frac{\rho_{-n_1} \rho_{n_1 - m}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} + \eta^3 \sum_{\substack{n_1 \neq 0, m \\ n_2 \neq 0, m}} \sum_{\substack{n_2 \neq 0, m \\ n_2 \neq n_1}} \frac{\rho_{-n_1} \rho_{n_1 - n_2} \rho_{n_2 - m}}{(\nu - \tilde{\nu}_{n_1})(\nu - \tilde{\nu}_{n_2})} + \dots,$$

$$T^{(m)} = \eta \rho_m + \eta^2 \sum_{\substack{n_1 \neq 0, m \\ n_2 \neq 0, m}} \frac{\rho_{m-n_1} \rho_{n_1}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} + \eta^3 \sum_{\substack{n_1 \neq 0, m \\ n_2 \neq n_1}} \sum_{\substack{n_2 \neq 0, m \\ \nu = \nu n_1}} \frac{\rho_{m-n_1} \rho_{n_1-n_2} \rho_{n_2}}{(\nu - \tilde{\nu}_{n_1})(\nu - \tilde{\nu}_{n_2})} + \dots,$$

$$T^{(0)} = \eta^{2} \sum_{n_{1} \neq 0,m} \frac{\underline{\rho_{m-n_{1}}\rho_{n_{1}-m}}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_{1}}} + \eta^{3} \sum_{\substack{n_{1} \neq 0,m \\ n_{2} \neq n_{1}}} \sum_{\substack{n_{2} \neq 0,m \\ n_{2} \neq n_{1}}} \frac{\rho_{m-n_{1}}\rho_{n_{1}-n_{2}}\rho_{n_{2}-m}}{(\nu - \tilde{\nu}_{n_{1}})(\nu - \tilde{\nu}_{n_{2}})} + \dots,$$

$$\tilde{T}^{(0)} = \eta^2 \sum_{\substack{n_1 \neq 0, m \\ n_1 \neq 0, m}} \frac{\rho_{-n_1} \rho_{n_1}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} + \eta^3 \sum_{\substack{n_1 \neq 0, m \\ n_2 \neq 0, m \\ n_2 \neq n_1}} \frac{\rho_{-n_1} \rho_{n_1 - n_2} \rho_{n_2}}{(\nu - \tilde{\nu}_{n_1})(\nu - \tilde{\nu}_{n_2})} + \dots$$
(24)

Физика твердого тела, 2004, том 46, вып. 12

Уравнения для нахождения границ запрещенных зон находим, полагая в (23) k = mq/2,

$$\nu = \tilde{\nu}_0 + \frac{\tilde{T}^{(0)} + T^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\frac{\left(\tilde{T}^{(0)} - T^{(0)}\right)^2}{4} + T^{(-m)}T^{(m)}}.$$
(25)

Выражения (23)–(25) отличаются от соответствующих выражений работы [32] (в частности, у нас $T^{(-m)} \neq T^{(m)*}$). Однако для случая $\langle \rho(z) \rangle = 0$, когда запреты вида $n_i \neq n_{i-1}$ становятся излишними, выражения работы [32] и выражения (22)–(25) нашей работы принимают один и тот же вид. Так, для уравнения (25) имеем

$$\nu = \nu_0 + T^{(0)} \pm |T^{(-m)}|.$$
 (26)

Решая (26) с точностью до η^2 , получаем следующие выражения для границ щелей:

$$\nu_{m}^{\pm} = \nu_{0} + \eta^{2} \sum_{n_{1}} \frac{|\rho_{n_{1}}|^{2}}{\nu_{0} - \nu_{n_{1}}} \pm \left| \eta \rho_{m} + \eta^{2} \sum_{n_{1}} \frac{\rho_{n_{1}} \rho_{m-n_{1}}}{\nu_{0} - \nu_{n_{1}}} \right|$$
(27)

и для ширин щелей

$$\Delta \nu_m = 2 \left| \eta \rho_m + \eta^2 \sum_{n_1} \frac{\rho_{n_1} \rho_{m-n_1}}{\nu_0 - \nu_{n_1}} \right|.$$
(28)

Как и в разделе 2, рассмотрим функции $\rho(z)$ с симметрией третьего рода. Решая для таких функций уравнение (26) с точностью до η^3 , получаем выражения для ν_m^{\pm}

$$\begin{split} \nu_m^{\pm} &= \nu_0 + \eta^2 \sum_{n_1} \frac{|\rho_{n_1}|^2}{\nu_0 - \nu_{n_1}} \pm \eta^3 |\rho_m| \sum_{n_1} \frac{|\rho_{n_1}|^2}{(\nu_0 - \nu_{n_1})^2} \\ &\pm \left| \eta \rho_m + \eta^3 \sum_{n_1, n_2} \frac{\rho_{n_1} \rho_{n_2 - n_1} \rho_{m - n_2}}{(\nu_0 - \nu_{n_1})(\nu_0 - \nu_{n_2})} \right|, \ m - \text{ нечетное,} \end{split}$$

$$\nu_{m}^{\pm} = \nu_{0} + \eta^{2} \left(\sum_{n_{1}} \frac{|\rho_{n_{1}}|^{2}}{\nu_{0} - \nu_{n_{1}}} \pm \left| \sum_{n_{1}} \frac{\rho_{n_{1}} \rho_{m-n_{1}}}{\nu_{0} - \nu_{n_{1}}} \right| \right),$$

$$m - \text{ vertuce}, \qquad (29)$$

и для Δv_m

$$\Delta \nu_{m} = \begin{cases} \left| 2\eta \rho_{m} + 2\eta^{3} \sum_{n_{1},n_{2}} \frac{\rho_{n_{1}} \rho_{n_{2}-n_{1}} \rho_{m-n_{2}}}{(\nu_{0} - \nu_{n_{1}})(\nu_{0} - \nu_{n_{2}})} \right| \\ -2\eta^{3} |\rho_{m}| \sum_{n_{1}} \frac{|\rho_{n_{1}}|^{2}}{(\nu_{0} - \nu_{n_{1}})^{2}}, \quad m - \text{ нечетное,} \\ 2\eta^{2} \left| \sum_{n_{1}} \frac{\rho_{n_{1}} \rho_{m-n_{1}}}{\nu_{0} - \nu_{n_{1}}} \right|, \qquad m - \text{ четное.} \end{cases}$$

$$(30)$$

Эти выражения описывают щели в спектре спиновых волн. Для электромагнитных волн, пользуясь представлением (2) для диэлектрической проницаемости ($\epsilon \equiv \epsilon'$, $\epsilon'' = 0$), получаем из (29) с точностью до γ^3 выражения для ω_m^{\pm}

$$\begin{split} \omega_{m}^{\pm} &= \frac{mq}{2\sqrt{\epsilon}} \\ & \left\{ \begin{array}{l} 1 \pm \left| \frac{\rho_{m}}{2} \gamma \pm \frac{|\rho_{m}|\rho_{m}}{2} \gamma^{2} \\ & + \left(\frac{m^{2}\rho_{m}}{8} S_{1} + \frac{m^{4}}{32} S_{3} + \frac{|\rho_{m}|^{2}\rho_{m}}{2} \right) \gamma^{3} \right| \\ & + \left(\frac{m^{2}}{32} S_{1} - \frac{|\rho_{m}|^{2}}{8} \right) \gamma^{2} \pm \left(\frac{3m^{2}|\rho_{m}|}{16} S_{1} \\ & - \frac{m^{4}|\rho_{m}|}{32} S_{2} - \frac{3|\rho_{m}|^{3}}{16} \right) \gamma^{3}, \ m - \text{ нечетное,} \\ & \left\{ 1 + \left(\frac{m^{2}}{8} \sum_{n_{1}} \frac{|\rho_{n_{1}}|^{2}}{n_{1}(m-n_{1})} \\ & \pm \frac{m}{4} \left| \sum_{n_{1}} \frac{\rho_{n_{1}}\rho_{m-n_{1}}}{n_{1}} \right| \right) \gamma^{2}, \quad m - \text{ четное.} \end{split} \right. \end{split}$$

где

$$S_{1} = \sum_{n_{1}} \frac{|\rho_{n_{1}}|^{2}}{n_{1}(m-n_{1})}, \quad S_{2} = \sum_{n_{1}} \frac{|\rho_{n_{1}}|^{2}}{n_{1}^{2}(m-n_{1})},$$
$$S_{3} = \sum_{n_{1},n_{2}} \frac{\rho_{n_{1}}\rho_{n_{2}-n_{1}}\rho_{m-n_{2}}}{n_{1}(m-n_{1})n_{2}(m-n_{2})}.$$
(32)

Выражения для ширин нечетных щелей получить из (31) в общем виде не просто, так как под знаком модуля в верхней строке этого выражения стоит слагаемое, имеющее переменный знак. Поэтому приведем выражения для ширин щелей с точностью до γ^2

$$\Delta \omega_m = \frac{mqc}{2\sqrt{\epsilon}} \begin{cases} |\rho_m|\gamma, & m - \text{ нечетное,} \\ \frac{m}{2}\gamma^2 \Big| \sum_{n_1} \frac{\rho_{n_1}\rho_{m-n_1}}{n_1} \Big|, & m - \text{ четное.} \end{cases}$$
(33)

Сравним формулу (11) для границ запрещенных зон ω_m^{\pm} , полученную методом МТСВ, с аналогичной формулой (31), полученной из точного дисперсионного уравнения. Из такого сравнения видно, что коэффициенты при соответствующих степенях у в этих формулах описываются существенно различающимися выражениями (за исключением коэффициентов при первой степени у, которые совпадают между собой). Следует подчеркнуть, что выражения для этих коэффициентов в формуле (31) являются точными, так как получены в рамках теории возмущений из точного дисперсионного уравнения (22) (или эквивалентного ему уравнения (26)). Поэтому отличие соответствующих коэффициентов формул (31) от формул (11) характеризует точность метода МТСВ. Чтобы получить наглядное представление о степени этой точности, рассмотрим выражения (31) и (11) для двух предельных случаев толщины границы: d/l = 0 (прямоугольный профиль) и d/l = 1/4 (синусоидальный профиль). Для прямоугольного профиля выражения для ω_m^{\pm} , полученные методом МТСВ, совпадают



Рис. 4. Зависимости ширин щелей Δv_m на краю *m*-й зоны Бриллюэна от d/l для нечетных (a) и четных (b) зон при $\eta/q^2 = 0.1$. Значения *m* указаны у соответствующих кривых. Обращаем внимание на отличие масштабов оси ординат частей *a* и *b*.

с соответствующими выражениями теории возмущений по крайней мере до членов порядка γ^2

$$\omega_m^{\pm} = qc/2\sqrt{\epsilon} \begin{cases} m \pm \frac{\gamma}{\pi} + \frac{\gamma^2}{8}m \pm \dots, & m - \text{ нечетное,} \\ m + (1 \pm 2)\frac{\gamma^2}{8}m + \dots, & m - \text{ четное.} \end{cases}$$
(34)

Для синусоидального профиля выражения для ω_m^{\pm} , полученные методом МТСВ, отличаются от соответствующих результатов теории возмущений. При этом оказывается, что отличия результатов, полученных методом МТСВ, от результатов теории возмущений более существенны для положений запрещенных зон, чем для их ширин. Так, для граничных частот первой зоны Бриллюэна имеем

$$\omega_{1}^{\pm} = qc/2\sqrt{\epsilon} \left\{ 1 \pm \frac{\sqrt{2}}{4}\gamma + \begin{cases} \frac{5}{32}\gamma^{2} \pm \frac{19\sqrt{2}}{2^{9}}\gamma^{3} + \dots, \\ \frac{4}{32}\gamma^{2} \pm \frac{20\sqrt{2}}{2^{9}}\gamma^{3} + \dots, \end{cases} \right.$$
(35)

где нижняя строчка соответствует методу МТСВ, а верхняя — методу возмущений.

Для построения графиков зависимости ширины запрещенных зон от толщины границы слоя *d* использовались выражения (30) и (31), в которые подставлялись ρ_m , соответствующие гармоникам Фурье эллиптического синуса (1). Для $\gamma = 0.15$ полученные кривые $\Delta \omega_m(d/l)$ как для нечетных, так и для четных зон мало отличаются от соответствующих кривых графиков 3, а и 3, b, которые были получены методом МТСВ в предыдущем разделе (в масштабе этих графиков соответствующие кривые совпадают между собой). Зависимости Δv_m от d, соответствующие спиновым волнам, приведены на рис. 4, а для нечетных зон и на рис. 4, b для четных зон. На обоих графиках ширины щелей нормированы к ширине первой запрещенной зоны SL с синусоидальным профилем $\Delta v_{1\text{sine}}$. Качественный характер зависимостей $\Delta v_m(d)$ и $\Delta \omega_m(d)$ совпадает: ширины щелей для m=1 и 2 практически не зависят от d и резко уменьшаются с ростом d для m > 2. На зависимостях $\Delta v_m(d)$ для нечетных зон, как и на зависимостях $\Delta \omega_m(d)$, имеются провалы, которые не видны в масштабе рис. 4, а. Из сравнения рис. 3 и 4 видно, что имеется качественно различный характер зависимостей ширин щелей от номера зоны т для случаев электромагнитных и спиновых волн, который проявляется наиболее резко для прямоугольного профиля модуляции. Ширина нечетных зон при d/l = 0для электромагнитных (и соответственно упругих) волн слабо зависит от m (рис. 3, a). Ширина нечетных зон для спиновых волн резко уменьшается с ростом *m* (как 1/*m* при пренебрежении эффектами порядка η^3 , см. рис. 4, *a*). Еще более значительны различия между зависимостями от *m* для четных зон. Если для спиновых волн Δv_m убывает с ростом m как 1/m (рис. 4, b), то для электромагнитных волн $\Delta \omega_m$ возрастает пропорционально *m* (рис. 3, b).

4. Заключение

Таким образом, рассмотрено распространение волн в одномерной SL (мультислойной структуре) с произвольной толщиной границы между слоями такой структуры. Для описания SL использована предложенная ранее модель [26], в которой профиль модуляции материального параметра вдоль оси SL описывается эллиптическим синусом Якоби. Методом МТСВ исследованы частотные зависимости коэффициентов прохождения $D(\omega)$ и отражения $R(\omega)$ электромагнитных волн в такой SL. Методом теории возмущений изучены законы

2223

дисперсии $\omega(k)$ электромагнитных, упругих и спиновых волн в SL с модуляцией соответствующего материального параметра (диэлектрической постоянной, плотности вещества, магнитной анизотропии). Измерению коэффициента отражения $R(\omega)$ (или коэффициента прохождения $D(\omega)$) соответствует экспериментальная ситуация бегущих волн. Измерению закона дисперсии $\omega(k)$ соответствует ситуация стоячих волн в каком-либо резонаторе (например, спин-волновой резонанс в тонкой магнитной пленке). В обоих случаях на измеряемых зависимостях $R(\omega)$ и $\omega(k)$ проявляются общие параметры — частоты положений границ запрещенных зон ω_m^{\pm} : на законе дисперсии $\omega(k)$ непосредственно, а на зависимости $R(\omega)$ — в виде граничных частот брэгговских зеркал. Аналитические выражения для ω_m^{\pm} , полученные разными методами из зависимостей $R(\omega)$ и $\omega(k)$, оказались существенно различными. Поскольку коэффициенты при членах по η, найденные из дисперсионного закона $\omega(k)$, являются точными, сравнение их с соответствующими коэффициентами ряда по η, найденного для зависимости $R(\omega)$ методом МТСВ, позволило оценить точность метода. Оказалось, что ширины зон определяются этим методом со значительно более высокой точностью, чем положения зон. Высокая точность метода МТСВ отмечалась также в работе [33], где результаты, полученные этим методом, сравнивались с результатами численного решения волнового уравнения.

Как из частотных зависимостей коэффициента отражения волн $R(\omega)$, так и из законов дисперсии рассчитаны зависимости ширин запрещенных зон $\Delta \omega_m$ и их положений в спектре от толщины границы d. Расчет проведен как для нечетных, так и для четных зон Бриллюэна SL (подобный расчет для нечетных зон в первом приближении теории возмущений впервые проведен в работе [26]). Характер зависимостей ширин запрещенных зон от номера зоны различен для электромагнитных (или упругих) волн ($\Delta \omega_m$) и спиновых волн ($\Delta \nu_m$). При d = 0 для нечетных зон $\Delta \omega_m$ слабо зависит от m, а $\Delta v_m \propto 1/m$; для четных зон $\Delta \omega_m \propto m$, а $\Delta v_m \propto 1/m$. Зависимости ширин запрещенных зон от d имеют общий характер: ширины запрещенных зон для первой и второй зон Бриллюэна практически не зависят от d, в то время как ширины всех зон с зонным номером m > 2имеют сильную зависимость от d. Обнаружен провал на зависимостях $\Delta \omega_m$ и $\Delta \nu_m$ от d/l для m = 3, 5, 7,обусловленный учетом следующих членов ряда теории возмущений. Полученные результаты являются теоретическим обоснованием возможности развития экспериментальных методов измерения толщины границы в сверхрешетках спектральными методами. Для этого необходимо измерить ширины двух запрещенных зон: первой $\Delta \omega_1$ и, например, третьей $\Delta \omega_3$. Тогда, пользуясь графиками рис. З для электромагнитных или упругих волн и графиками рис. 4 для спиновых волн, можно из величины отношения $\Delta \omega_3 / \Delta \omega_1$ определить величину d/l.

Список литературы

- [1] Л. Бриллюэн, М. Пароди. Распространение волн в периодических структурах. ИЛ, М. (1959). 457 с.
- [2] Л.М. Бреховский. Волны в слоистых средах. Наука, М. (1973). 343 с.
- [3] В.А. Беляков. Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры. Наука, М. (1988). 256 с.
- [4] Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. Наука, М. (1989). 286 с.
- [5] М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики. Наука, М. (1970). 855 с.
- [6] Ш. Элаши. ТИИЭР 64, 12, 22 (1976).
- [7] С.Ю. Карпов, С.Н. Столяров. УФН 163, 1, 63 (1993).
- [8] P. Yeh, A. Yariv, Chi-Shain Hohg. J. Opt. Soc. Am. 67, 4, 423 (1977).
- [9] Н.Г. Бебенин. ЖЭТФ 103, 6, 2154 (1993).
- [10] P. Erdös, E. Liviotti, R.C. Herndon. J. Phys. D: Appl. Phys. 30, 3, 338 (1997).
- [11] И.О. Богульский, С.Я. Ветров, А.В. Шабанов. Оптика и спектроскопия 84, 5, 823 (1998).
- [12] В.Г. Савин, Н.А. Шульга. Акустический журнал 21, 2, 260 (1975); 21, 3, 448 (1975).
- [13] B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O.H. Duparc, R.E. Camley, A.A. Maradudin. Phys. Rev. B 28, 4, 1711 (1983).
- [14] B. Djafari-Rouhani, A.A. Maradudin, R.F. Wallis. Phys. Rev. B 29, 12, 6454 (1984).
- [15] J. Mendialdua, T. Szwacka, A. Rodrigues, L. Dobrzynski. Phys. Rev. B 39, 15, 10674 (1989).
- [16] С.Я. Ветров, В.Ф. Шабанов. Письма в ЖТФ 17, 5, 34 (1991).
- [17] P. Grunberg, K. Mika. Phys. Rev. B 27, 5, 2955 (1983).
- [18] R.E. Camley, T.S. Rahman, D.L. Mills. Phys. Rev. B 27, 1, 261 (1983).
- [19] Ю.В. Грибкова, М.И. Каганов. Письма в ЖЭТФ 47, 11, 588 (1988).
- [20] B. Hillebrands. Phys. Rev. B 41, 1, 530 (1990).
- [21] R.E. Camley, R.L. Stamps. J. Phys.: Condens. Matter 5, 23, 3727 (1993).
- [22] В.В. Кругляк, А.Н. Кучко. ФММ 92, 3, 3 (2001).
- [23] T. Tamir, H.C. Wang, A.A. Oliner. IEEE Trans. Microwave Theory Tech. MTT-12, 323 (1964).
- [24] C. Yen, K.F. Casey, Z. Kaprielian. IEEE Trans. Microwave Theory Tech. MTT-13, 297 (1965).
- [25] Ю.И. Горобец, А.Е. Зюбанов, А.Н. Кучко, К.Д. Шеджури. ФТТ 34, 5, 1486 (1992).
- [26] V.A. Ignatchenko, Yu.I. Mankov, A.A. Maradudin. Phys. Rev. B 62, 3, 2181 (2000).
- [27] Н.Н. Мартынов, С.Н. Столяров. Квантовая электрон. 5, 8, 1853 (1978).
- [28] W.P. Huang. J. Opt. Soc. Am. A 11, 3, 963 (1994).
- [29] H. Kogelnik. BSTJ 48, 9, 2909 (1969).
- [30] И.Н. Бронштейн, К.А. Семендяев. Справочник по математике. ГИФМЛ, М. (1962). С. 551.
- [31] V.A. Ignatchenko, Yu.I. Mankov, A.A. Maradudin. Phys. Rev. B 65, 1, 024 207 (2000).
- [32] С.Ю. Карпов, О.В. Константинов, М.Э. Райх. ФТТ 22, 11, 3402 (1980).
- [33] Б.М. Болотовский, В.Е. Воловельский, Н.Н. Мартынов, С.Н. Столяров. Приближенные аналитические решения в периодически неоднородных средах и расчет коэффициентов отражения. Препринт ФИАН, М. (1989). 101 с.