отметить, что с увеличением концентрации Pb в $(Pb_xSn_{1-x})_2P_2Se_6$ барические производные dT_c/dp и dT_i/dp линейно увеличиваются от значений -240 и -163 К/ГПа для $Sn_2P_2Se_6$ с коэффициентами $d(dT_c/dp)/dx = 3.5$ К/(ГПа·мол.%) и $d(dT_i/dp)/dx=1.8$ К/(ГПамол.%) соответственно.

На основании температурных и барических исследований пиротока, ε и $\mathrm{tg}\,\delta$ в области T_c и T_i кристаллов $(Pb_xSn_{1-x})_2P_2Se_6$ построена p, T, x-диаграмма, которая приведена на рис. 2. Линии AB и CD представляют собой концентрационные зависимости $T_i(x)$ и $T_c(x)$, т. е. x, T-диаграмму исследованных кристаллов при атмосферном давлении. Линии AA'' и CC'' — p, T-диаграмма состояния кристалла $Sn_2P_2Se_6$, а DD'' и BB'' — x, p-диаграмма при $T=80$ К. Линии $A'B'$, $C'D'$ и $A''B''$, $C''D''$ описывают фазовые x, T-диаграммы при $p=0.20$ и 0.40 ГПа соответственно. На рис. 2 поверхность $CDC''D''$ является поверхностью фазовых переходов из несоразмерной в сегнетоэлектрическую фазу в p, T, x-пространстве. Ниже этой поверхности существует сегнетоэлектрическая фаза (P_c). Поверхность $ABA''B''$ — поверхность структурных фазовых переходов второго рода из параэлектрической в несоразмерную фазы. Выше поверхности $ABA''B''$ находится параэлектрическая фаза ($P2_1/c$). Область, ограниченная поверхностями $ABA''B''$ и $CDC''D''$, является областью несоразмерной фазы кристаллов $(Pb_xSn_{1-x})_2P_2Se_6$ в p, T, x-пространстве.

Литература

[1] *Парсамян Т. К., Хасанов С. С., Шехтман В. Ш.* и др. ФТТ, 1985, т. 27, № 11, с. 3327—3331.

[2] *Высочанский Ю. М., Гурзан М. И., Майор М. М.* и др. ФТТ, 1985, т. 27, № 3, с. 858—864.

[3] *Герзанич Е. И., Бутурлакин А. П., Чепур Д. В., Юркевич В. Э., Ролов Б. Н.* Сб.: Размытые фазовые переходы. Рига: Изд-во Латв. ун-та им. П. Стучки, 1975, т. 233, № 6, с. 142—167.

Ужгородский государственный университет
Ужгород

Поступило в Редакцию
1 ноября 1987 г.

УДК 535.39 535.015 535.323

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТА В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОМ КРИСТАЛЛЕ

С. Н. Латынин, К. Б. Толпыго

Поле в полубесконечном кристалле ($z>0$), который здесь представлен простой кубической решеткой с векторами основных трансляций $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, направленными вдоль соответствующих координатных осей x, y, z, рассматривается как суперпозиция падающей на его поверхность волны $\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0^{(e)} \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega t)$, где $|\mathbf{k}_0| = \omega a/c$, ω — частота; a — постоянная решетки и совокупности рассеянных волн, излучаемых поляризованными атомами кристалла. Дипольный момент атома $\mathscr{P}^l$ в l-й ячейке, как и для бесконечного кристалла в [1], определим произведением

$$\mathscr{P}^l = \alpha(\omega)\{\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{l}) + \mathbf{E}^*(\mathbf{l})\}, \tag{1}$$

где $\alpha(\omega)$ — атомная поляризуемость; $\mathbf{E}^*(\mathbf{l})$ — поле, создаваемое всеми атомами, кроме l-го в его центре, как в [2]

$$\mathbf{E}^*(\mathbf{l},\ t) = \nabla\nabla\Pi^l(\mathbf{r},\ t) - \frac{1}{c^2}\ddot{\Pi}^l(\mathbf{r},\ t) \text{ при } \mathbf{r} = \mathbf{l}, \tag{2}$$

где вектор Герца

$$\Pi^l(\mathbf{r},\ t) = \sum_{l_3'>0}' \frac{\mathscr{P}^l\left(t - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{l}'|}{c}\right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{l}'|}, \tag{3}$$

радиус-вектор $\mathbf{l} = (l_1,\ l_2,\ l_3)$, l_1, l_2, l_3 — целые числа в единицах постоянной решетки. Штрих у знака Σ означает отсутствие члена с $l' = l$. Если $\mathscr{P}^l$ определить как

$$\mathscr{P}^l(t) = \mathscr{P}_0 \exp(i\mathbf{kl} - i\omega t), \tag{4}$$

где $\mathbf{k}$ — волновой вектор, умноженный на a, тогда сумма по l в (3) распадается на две: в первой из них сумма берется при $l_3' = l_3$, где удобно добавить и вычесть член самодействия, а во второй при $l_3' > 0$ полагают $l_3' \neq l_3$. В силу периодичности в плоскости xy разложим каждую в ряд Фурье по векторам обратной решетки $\mathbf{q}_\perp$ (в единицах $1/a$), $\perp$ обозначает проекцию на плоскость xy. Тогда поле в узле l

$$E_\alpha^*(\mathbf{l},\ t) = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega)\mathscr{P}_{0\beta} \exp(i\mathbf{kl} - i\omega t) + \sum_{\beta,\ \mathbf{q}_\perp} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega,\ \mathbf{q}_\perp)\mathscr{P}_{0\beta} \times$$
$$\times \exp(-\gamma_q l_3 + i\mathbf{k}_\perp\mathbf{l}_\perp - i\omega t), \tag{5}$$

$$\alpha,\ \beta = 1,\ 2,\ 3;\quad \gamma_q = \sqrt{(\mathbf{q}_\perp + \mathbf{k}_\perp)^2 - k_0^2};\quad D_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega,\ \mathbf{q}_\perp) =$$
$$= \frac{(-2\pi)\,[(ik_{\perp\alpha} + iq_{\perp\alpha} - \gamma_q\delta_{\alpha 3})(ik_{\perp\beta} + iq_{\perp\beta} - \gamma_q\delta_{\beta 3}) - k_0^2\delta_{\alpha\beta}]}{\gamma_q\,[1 - \exp(-ik_3 - \gamma_q)]}, \tag{6}$$

как в [3]

$$\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega) = \frac{4\pi}{3}\delta_{\alpha\beta} + \sum_{q_\perp} \frac{2\pi}{\gamma_q}\Bigg\{D_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega,\ \mathbf{q}_\perp)\exp(-\gamma_q - ik_3) -$$
$$- \frac{(ik_{\perp\alpha} + iq_{\perp\alpha} + \gamma_q\delta_{\alpha 3})(ik_{\perp\beta} + iq_{\perp\beta} + \gamma_q\delta_{\beta 3}) - k_0^2\delta_{\alpha\beta}}{1 - \exp(\gamma_q - ik_3)} + \ldots\Bigg\} \tag{7}$$

(5) представляет суперпозицию полей: первая сумма описывает плоские волны, распространяющиеся в кристалле, а вторая содержит члены с экспонентами $\exp(-\gamma_q l_3)$ (показатели приблизительно линейно растут с $|\mathbf{q}_\perp|$), которые существенны только при $l_3 = 1$, и незатухающий член при $\mathbf{q}_\perp = 0$. Поскольку полубесконечная система диполей, представляемых плоскими волнами (4), порождает поле более сложного вида (5), то невозможно будет выполнить во всем кристалле условие (1), поэтому рассмотрим систему диполей более общего вида

$$\mathscr{P}^l(t) = \mathscr{P}_0 \exp(i\mathbf{kl} - i\omega t) + \sum_{\mathbf{q}_\perp' \neq 0}' \mathbf{B}(\mathbf{q}_\perp') \exp(-\gamma_{q'} l_3 + i\mathbf{k}_\perp l_\perp - i\omega t). \tag{8}$$

Условие $\mathbf{q}_\perp' \neq 0$ введено, ввиду отсутствия в глубине кристалла волн с $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$. Подставив (8) в (1) и приравняв коэффициенты при одинаковых экспонентах, получим систему трех уравнений

$$\frac{1}{a(\omega)}\mathscr{P}_{0\alpha} = \sum_\beta \varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega)\mathscr{P}_{0\beta}, \tag{9}$$

$$E_{0\alpha}^{(e)} + \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega,\ 0)\mathscr{P}_{0\beta} + \sum_\beta \sum_{q_\perp' \neq 0}' D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_\perp,\ i\gamma_{q'},\ \omega,\ 0) B_\beta(\mathbf{q}_\perp') = 0, \tag{10}$$

$$\frac{1}{a(\omega)} B_\beta(\mathbf{q}_\perp) - \sum_\beta \tilde{\varphi}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_\perp,\ \omega,\ i\gamma_q) B_\beta(q_\perp) - \sum_\beta \sum_{q_\perp'}'' B_\beta(\mathbf{q}_\perp') D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_\perp,\ i\gamma_{q'},\ \omega,\ \mathbf{q}_\perp) =$$
$$= \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\ \omega,\ \mathbf{q}_\perp)\mathscr{P}_{0\beta}, \tag{11}$$

где $\sum''_{\mathbf{q}'_\perp}$ означает $\mathbf{q}'_\perp \neq 0$ и $\mathbf{q}'_\perp \neq \mathbf{q}_\perp$; $\tilde{\varphi}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_\perp, \omega, i\gamma_q)$ и $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_\perp, i\gamma_{q'}, \omega, \mathbf{q}_\perp)$ определяются формулами вида (6), (7), как в [3]. Кроме того, справа в (1) имеем остаток

$$-\sum_\beta \sum_{\mathbf{q}_\perp \neq 0}' \frac{l_3-1}{\gamma_q} \{(ik_\alpha + iq_{\perp\alpha} - \gamma_q\delta_{\alpha 3})(ik_\beta + iq_{\perp\beta} - \gamma_q\delta_{\beta 3}) - k_0^2\delta_{\alpha\beta}\} \times$$
$$\times B_\beta(\mathbf{q}_\perp)\exp(-\gamma_q l_3 + i\mathbf{k}_\perp \mathbf{l}_\perp). \qquad (12)$$

При $l_3=1$ он равен нулю. Если потребовать его равенство нулю при $l_3=2$, то для всех остальных остаток не превышает 10^{-8}, что предполагает описание с большой точностью. Можно показать, что $\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ такие же, как в выражениях для бесконечного кристалла [1], поэтому (9) описывает закон дисперсии в бесконечном кристалле. Уравнение (10) определяет при $\mathbf{k}_\perp = \mathbf{k}_{0\perp}$ условие отсутствия в глубине волн с $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$, которое известно как теорема погашения [2]. Уравнение (11) представляет бесконечную систему линейно-неоднородных уравнений относительно $\mathbf{B}(\mathbf{q}'_\perp)$, решая которую методом последовательных приближений, поскольку $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_\perp, i\gamma_a, \omega, \mathbf{q}_\perp)$ быстро убывает с ростом $|\mathbf{q}_\perp - \mathbf{q}'_\perp|$, получим $|\mathbf{B}(\mathbf{q}'_\perp)| \sim |\mathbf{k}_\perp||\mathscr{P}_0|$, откуда, согласно (8) дополнительный дипольный момент (ДДМ), приобретаемый поверхностными атомами, уже при $l_3=1$ порядка $|\mathbf{k}_\perp|\exp(-2\pi)|\mathscr{P}_0|$.

Введение ДДМ обусловливает появление в выражениях для амплитуд падающей и отраженной волн слагаемых, которые по сравнению с основными членами имеют порядок $|\mathbf{k}_\perp|(k_{03} \pm k_3)\cdot\exp(-2\pi)$. Это дает качественное объяснение отклонения коэффициентов отражения света от формул Френеля.

В резонансной области перейдем в (8) к сумме моментов с $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, определяемых из (9), если сохранить члены порядка $(a/\lambda)^2$ (приводящие к добавочным световым волнам [1]) при $\mathbf{k}_{1\perp} = \mathbf{k}_{2\perp}$. Согласно [3], амплитуды $\mathscr{P}_0(\mathbf{k}_i)$, где $i=1, 2$, необходимо выбрать так, чтобы остаточный член (12) обратился в нуль для любого l_3. Однако такое условие приводит к сильно переопределенной системе и может иметь только тривиальное решение $\mathscr{P}_0(\mathbf{k}_i)=0$. Удовлетворим это условие лишь приближенно, скажем при $l_3=2$, тогда оно даст систему трех уравнений общего вида

$$\sum_{i=1}^{2}\sum_\beta (a_{\alpha\beta} + ik_{i3}b_{\alpha\beta})\mathscr{P}_{0\beta}(\mathbf{k}_i) = 0, \qquad (13)$$

где тензоры $a_{\alpha\beta}$ и $b_{\alpha\beta}$ содержат соответственно множители $\exp(-\gamma_q)$ и $\exp(-2\gamma_q)$, и так как в общем случае $\mathrm{Det}\,|a_{\alpha\beta}| \neq 0$, то в нулевом приближении (с точностью выше $\exp(-\gamma_q)$) добавочное граничное условие будет типа Пекара [3]

$$\sum_{i=1}^{2}\mathscr{P}_{0\beta}(\mathbf{k}_i) = 0. \qquad (14)$$

Иными словами, объемная часть поляризации (14), связанная с экситоном, обращается в нуль на поверхности кристалла. Учет в (13) малых членов порядка k_{i3} (их можно заменить оператором $\partial/\partial r_3$) дал бы обобщенное условие Гинзбурга [4].

Литература

[1] *Толпыго К. Б.* УФЖ, 1986, т. 31, № 2, с. 178—187.
[2] *Борн М.*, *Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1970. 856 с.
[3] *Пекар С. И.* Кристаллооптика и добавочные световые волны. Киев: Наукова думка, 1982. 296 с.
[4] *Агранович В. М.*, *Гинзбург В. Л.* Кристаллооптика, учет пространственной дисперсии и теория экситонов. М.: Наука, 1986. 432 с.

Донецкий физико-технический
институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
8 июля 1987 г.
В окончательной редакции
3 ноября 1987 г.