УДК: 534+537.86+537.611.2

ЗАКОН ДИСПЕРСИИ ВОЛН В СВЕРХРЕШЕТКАХ С ПРОИЗВОЛЬНОЙ ТОЛЩИНОЙ ГРАНИЦЫ МЕЖДУ СЛОЯМИ[1]

В.А. Игнатченко, О.Н. Лалетин[*]

Исследован 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* $\Delta\omega_m$ *проведен методом теории возмущений из закона дисперсии* $\omega(k)$. *Проведено сравнение полученных результатов с результатами нашей предыдущей работы, в которой ширины запрещенных зон получены с помощью модифицированной теории связанных волн (МТСВ). Данное сравнение 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 позволят определять толщину границы между слоями сверхрешеток спектральными методами.*

Спектр волн различной природы (электромагнитных, упругих, спиновых и так далее) в средах с одномерной периодической модуляцией какого-либо материального параметра – мультислойных структурах или сверхрешетках (SL) – исследован теоретически во многих работах (см., например, [1-4]). Вид закона диспер-

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-04-16174) и Красноярского краевого научного фонда (грант № 12F0013C); авторы выражают благодарность Фонду «Династия» и МЦФФМ за оказанную финансовую поддержку.
[*] © В.А. Игнатченко, 2004; ИФ СО РАН, E-mail: vignatch@iph.krasn.ru; О.Н. Лалетин, 2004, Красноярский госуниверситет, E-mail: olalet@iph.krasn.ru

сии в сверхрешетках 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"). Однако в реальных SL профиль модуляции материального параметра может иметь форму, промежуточную между этими двумя предельными случаями. Поэтому в работе [5] была предложена модель сверхрешетки, в которой модуляция пропорциональна эллиптическому синусу Якоби:

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

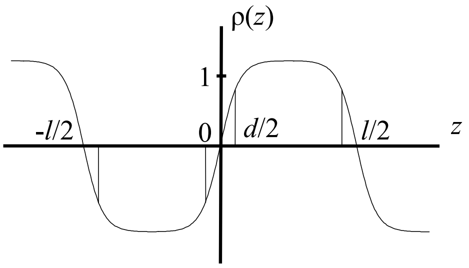

Рис. 1. Вид функции (1) для κ = 0,994 (d / l = 0,218)

где $d = \pi l / 8\mathbf{K}$ – толщина границы между слоями SL; l – период сверхрешетки ($l/2 - d$ – толщина слоя); **K** и **E** – полные эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно; κ – модуль этих интегралов. Коэффициент перед эллиптическим синусом соответствует нормировке $\left\langle \rho^2(z) \right\rangle = 1$ (угловые скобки означают усреднение по периоду *l*). Общий вид функции (1) приведен на рис. 1. В зависимости от величины модуля κ 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 *d* определена в выражении (1) таким образом, что основное изменение материального параметра происходит на длине *d* для всех значений *d*/*l* (рис. 1). В работе [5] были вычислены в первом порядке теории возмущений ширины щелей (запрещенных зон) в спектре на границах нечетных зон Бриллюэна для такой модели и показано, что экспериментальное измерение ширины этих щелей позволило бы определять толщину границы *d* между слоями SL. Таким образом, в работе [5] была показана принципиальная возможность развития спектральных методов исследования структуры границы в сверхрешетках. Для ее реализации требуется развитие теории в нескольких направлениях. В предыдущей работе авторов [6] рассматривалось одно из таких направлений, которое связано с тем, что в [5] расчет был проведен для спектра стоячих волн. Это соответствует, например, экспериментальной ситуации спин-волнового резонанса в ферромагнитных тонких пленках, которая позволяет исследовать непосредственно закон дисперсии волн. В экспериментах с бегущими электромагнитными или упругими волнами измеряются другие параметры – коэффициенты отражения и прохождения волн в веществе. Поэтому работа [6] была посвящена расчету как этих коэффициентов, так и ширин щелей для распространяющихся волн. Другим направлением является развитие более точной теории нахождения закона дисперсии волн для такой модели, в частности, расчет ширин щелей и для четных зон Бриллюэна. Этому направлению и посвящена данная работа. Одной из целей является также сравнение результатов, полученных в [6] с помощью модифицированной теории связанных волн (МТСВ), с результатами данной работы, в частности определение точности метода МТСВ.

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 могут 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 следующем виде (мнимой частью *A* пренебрегаем):

$$A(z) = A[1 - \gamma\rho(z)], \tag{2}$$

где *A* – среднее значение этого параметра; γ – его относительное среднеквадратичное отклонение; $\gamma \ll 1$; $\rho(z)$ – центрированная $\left(\left\langle \rho(z) \right\rangle = 0\right)$ и нормированная $\left(\left\langle \rho^2(z) \right\rangle = 1\right)$ периодическая функция.

Волновое уравнение запишем в виде

$$\frac{d^2\mu}{dz^2} + [\nu - \eta\rho(z)]\mu = 0, \tag{3}$$

где выражения для переменной μ и параметров ν и η различны для волн различной физической природы. Для электромагнитных волн в скалярном приближении, когда $\mu = E$, имеем:

$$\nu = \varepsilon\left(\frac{\omega}{c}\right)^2, \quad \eta = \gamma\,\varepsilon\left(\frac{\omega}{c}\right)^2, \tag{4}$$

где γ – среднеквадратичное отклонение диэлектрической проницаемости ε. Для упругих волн в таком же приближении ($\mu = u$):

$$\nu = \left(\frac{\omega}{v}\right)^2, \quad \eta = \gamma\left(\frac{\omega}{v}\right)^2, \tag{5}$$

где v – скорость упругих волн; γ – среднеквадратичное отклонение плотности вещества. Для спиновых волн, когда $\mu = M_x + iM_y$ описывает циркулярные проекции поперечных компонент вектора намагниченности $\vec{\mathbf{M}}$, а параметр $A(z)$ есть одноосная магнитная анизотропия $\beta(z)$, имеем [5]:

$$\nu = \frac{\omega - \omega_0}{\alpha\, g\, M}, \quad \eta = \frac{\gamma\beta}{\alpha}, \tag{6}$$

где $\omega_0 = g(H + \beta M)$; g – гиромагнитное отношение; α – параметр обмена; M – величина вектора намагниченности; β – среднее значение величины магнитной анизотропии; γ – ее среднеквадратичное отклонение (здесь предполагается, что только величина анизотропии зависит от координат, а направление легкой оси однородно).

Согласно теореме Флоке решение уравнения (3) для волн, распространяющихся вдоль оси z, ищется в виде

$$\mu(z) = e^{-ikz}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\mu_n\, e^{inqz}\,. \tag{7}$$

Подставляя это выражение и разложение функции $\rho(z)$ в ряд Фурье

$$\rho(z) = \sum_n \rho_n\, e^{inqz} \tag{8}$$

в уравнение (3), получаем систему бесконечного числа уравнений для трансформант Фурье μ_n и ρ_n:

$$\left(\nu - \nu_n\right)\mu_n = \eta\sum_{n_1}\mu_{n_1}\rho_{n-n_1}\,, \tag{9}$$

где $\nu_n = \left(k - nq\right)^2$. Уравнение для нахождения закона дисперсии $\nu = \nu(k)$ следует из равенства нулю определителя системы (9), содержащего бесконечное число строк и столбцов:

$$\det\left\|\left(\nu - \nu_m\right)\delta_{mn} - \eta\rho_{n-m}\right\| = 0, \tag{10}$$

где δ_{nm} – символ Кронекера. Численный анализ определителей $N \times N$ с конечными числами N строк и столбцов позволяет приближенно исследовать закон дисперсии волн.

Однако во многих случаях удобнее вывести уравнение для нахождения $\nu(k)$ в виде ряда по степеням η. Этот ряд может быть получен различными способами. Мы предлагаем здесь еще один способ, в котором явно фигурируют запреты на отсутствие в суммах некоторых членов. Это будет использовано 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, то есть будем рассматривать и случай, когда ρ_n может быть не равным нулю при $n = 0$. Представим ρ_{n-n_1}, входящее в правую часть уравнения (9), в виде

$$\rho_{n-n_1} = \rho_{n-n_1}\delta_{nn_1} + \rho_{n-n_1}\Big|_{n_1\neq n}\,. \tag{11}$$

После подстановки (11) в уравнение (9), последнее примет вид

$$\left(\nu - \tilde{\nu}_n\right)\mu_n = \eta\sum_{n_1\neq n}\mu_{n_1}\rho_{n-n_1}\,, \tag{12}$$

где $\tilde{\nu}_n = \nu_n + \eta\rho_0$. Повышая в уравнении (12) индекс при n_i на единицу, выражая из полученного уравнения μ_{n_1} и подставляя в правую часть уравнения (12), имеем

$$\left(\nu - \tilde{\nu}_n\right)\mu_n = \eta^2 \sum_{n_1 \neq n} \sum_{n_2 \neq n_1} \frac{\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} \mu_{n_2} . \tag{13}$$

Представим произведение $\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}$ в виде, аналогичном (11),

$$\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2} = \rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}\delta_{nn_2} + \rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}\Big|_{n_2 \neq n} \tag{14}$$

и подставим его в уравнение (13), которое примет вид

$$\left(\nu - \tilde{\nu}_n - \eta^2 \sum_{n_1 \neq n} \frac{\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}}\right)\mu_{n_1} = \eta^2 \sum_{n_1 \neq n} \sum_{\substack{n_2 \neq n \\ n_2 \neq n_1}} \frac{\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} \mu_{n_2} . \tag{15}$$

Повышаем в уравнении (12) индекс при n_i на 2, выражаем из получившегося уравнения μ_{n_2} и подставляем в правую часть уравнения (15); представляем образовавшееся тройное произведение функций ρ_i в форме, аналогичной (14). Продолжая этот процесс, получим из условия $\mu_n \neq 0$ уравнение для закона дисперсии в виде

$$\nu - \tilde{\nu}_n - \eta^2 \sum_{n_1 \neq n} \frac{\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} - \eta^3 \sum_{n_1 \neq n} \sum_{\substack{n_2 \neq n \\ n_2 \neq n_1}} \frac{\rho_{n-n_1}\rho_{n_1-n_2}\rho_{n_2-n}}{\left(\nu - \tilde{\nu}_{n_1}\right)\left(\nu - \tilde{\nu}_{n_2}\right)} - ... = 0. \tag{16}$$

Отметим, что выражение (16) только по внешнему виду напоминает ряд теории возмущений. В действительности это уравнение для нахождения функции $\nu(k)$, которая входит в знаменатели всех сумм. Поэтому каждый член ряда (16) содержит в себе члены всех порядков по η. В работе [7] это уравнение было получено другим методом. Однако при этом была допущена неточность, связанная с потерей в суммах запретов вида $n_i \neq n_{i-1}$. Например, в члене, пропорциональном η^3, в работе [7] отсутствует запрет, соответствующий нашему $n_2 \neq n_1$. Чтобы показать, к чему это приведет, рассмотрим решение уравнения (16) вдали от границ зон Бриллюэна для главной ветки $n = 0$. В этом случае никаких особенностей, связанных со знаменателями нет, и мы можем найти решение для ν методом последовательных приближений:

$$\nu = \tilde{\nu}_0 + \eta^2 \sum_{n_1 \neq 0} \frac{\rho_{-n_1}\rho_{n_1}}{\tilde{\nu}_0 - \tilde{\nu}_{n_1}} + \eta^3 \sum_{n_1 \neq 0} \sum_{\substack{n_2 \neq 0 \\ n_2 \neq n_1}} \frac{\rho_{-n_1}\rho_{n_1-n_2}\rho_{n_2}}{\left(\tilde{\nu}_0 - \tilde{\nu}_{n_1}\right)\left(\tilde{\nu}_0 - \tilde{\nu}_{n_2}\right)} + ... \ . \tag{17}$$

Сравнивая полученное выражение (17) с выражением стандартной теории возмущения [8, 9], видим, что именно из-за запрета $n_2 \neq n_1$ имеется совпадение между соответствующими членами третьего порядка.

Далее воспользуемся оригинальной идеей авторов работы [7], представивших ряд, аналогичный (16), в форме, соответствующей дисперсионному уравнению в приближении слабой связи. В наших обозначениях такое представление для главной ветки имеет вид

$$\left(\nu - \tilde{\nu}_0 - \tilde{T}^{(0)}\right)\left(\nu - \tilde{\nu}_m - T^{(0)}\right) = T^{(-m)}T^{(m)}, \tag{18}$$

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 следующий вид:

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

$$T^{(m)} = \eta\rho_{m} + \eta^2 \sum_{n_1 \neq 0,m} \frac{\rho_{m-n_1}\rho_{n_1}}{\nu - \tilde{\nu}_{n_1}} + \eta^3 \sum_{n_1 \neq 0} \sum_{\substack{n_2 \neq 0,m \\ n_2 \neq n_1}} \frac{\rho_{m-n_1}\rho_{n_1-n_2}\rho_{n_2}}{\left(\nu - \tilde{\nu}_{n_1}\right)\left(\nu - \tilde{\nu}_{n_2}\right)} + \ldots, \tag{19}$$

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

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

Уравнения для нахождения границ запрещенных зон находим, полагая в (18) $k = mq/2$:

$$\nu = \tilde{\nu}_0 + \frac{\tilde{T}^{(0)} + T^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\frac{\left(\tilde{T}^{(0)} - T^{(0)}\right)^2}{4} + T^{(-m)}T^{(m)}} \; . \tag{20}$$

Выражения (18)–(20) отличаются от соответствующих выражений работы [7] (в частности, у нас $T^{(-m)} \neq T^{(-m)\,*}$). Однако для случая $\rho_0 = 0$, когда запреты вида $n_i \neq n_{i-1}$ становятся излишними, выражения работы [7] и выражения (18)–(20) нашей работы принимают один и тот же вид. Так как в работе [7] дальнейшие расчеты конкретных профилей SL проводились только для случаев центрированных функций $\rho(z)$, допущенная в выводе уравнений неточность не оказала никакого влияния на окончательные результаты, полученные в этой работе. В дальнейшем также будем рассматривать центрированные функции $\rho(z)$. Поэтому формула (20) принимает тот же вид, что и в работе [7]:

$$\nu = \tilde{\nu}_0 + T^{(0)} \pm \left|T^{(-m)}\right|. \tag{21}$$

Выражения (18)–(21) необходимо рассматривать как уравнения для ν, поскольку все входящие в них суммы зависят от ν. Решая (21) с точностью до η^2, получаем следующие выражения:
для границ щелей

$$\nu_m^{\pm} = \nu_0 + \eta^2 \sum_{n_1} \frac{\left|\rho_{-n_1}\right|^2}{\nu_0 - \nu_{n_1}} \pm \left|\eta\rho_m + \eta^2 \sum_{n_1} \frac{\rho_{n_1}\rho_{m-n_1}}{\nu_0 - \nu_{n_1}}\right|, \tag{22}$$

для ширин щелей

$$\Delta\nu_m = 2\left|\eta\rho_m + \eta^2 \sum_{n_1} \frac{\rho_{n_1}\rho_{m-n_1}}{\nu_0 - \nu_{n_1}}\right|. \tag{23}$$

Рассмотрим функции $\rho(z)$ с симметрией третьего рода [10]:

$$\rho(z + l/2) = -\rho(z). \tag{24}$$

Для всех функций данного класса гармоники Фурье ρ_n с четным n обращаются в нуль. Решая для таких функций уравнение (21) с точностью до η^3, получаем выражения:
для $\nu_m^{\pm}$

$$\nu_m^{\pm} = \nu_0 + \eta^2 \sum_{n_1} \frac{\left|\rho_{-n_1}\right|^2}{\nu_0 - \nu_{n_1}} \mp \eta^3 |\rho_m| \sum_{n_1} \frac{\left|\rho_{-n_1}\right|^2}{\left(\nu_0 - \nu_{n_1}\right)^2} \pm$$

$$\pm \left| \eta\rho_m + \eta^3 \sum_{n_1, n_2} \frac{\rho_{n_1}\rho_{n_2 - n_1}\rho_{m-n_2}}{\left(\nu_0 - \nu_{n_1}\right)\left(\nu_0 - \nu_{n_2}\right)} \right|, \; m \text{ – нечетное}, \tag{25}$$

$$\nu_m^{\pm} = \nu_0 + \eta^2 \left(\sum_{n_1} \frac{\left|\rho_{-n_1}\right|^2}{\nu_0 - \nu_{n_1}} \pm \left| \sum_{n_1} \frac{\rho_{n_1}\rho_{m-n_1}}{\nu_0 - \nu_{n_1}} \right| \right), \; m \text{ – четное};$$

для $\Delta\nu_m$

$$\Delta\nu_m = \begin{cases} \left| \eta\rho_m + \eta^3 \sum\limits_{n_1, n_2} \dfrac{\rho_{n_1}\rho_{n_2 - n_1}\rho_{m-n_2}}{\left(\nu_0 - \nu_{n_1}\right)\left(\nu_0 - \nu_{n_2}\right)} \right| - \eta^3 |\rho_m| \sum\limits_{n_1} \dfrac{\left|\rho_{-n_1}\right|^2}{\left(\nu_0 - \nu_{n_1}\right)^2}, \; m \text{ – нечетное}, \\ 2\eta^2 \left| \sum\limits_{n_1} \dfrac{\rho_{n_1}\rho_{m-n_1}}{\nu_0 - \nu_{n_1}} \right|, \quad m \text{ – четное}. \end{cases} \tag{26}$$

Эти выражения описывают щели в спектре спиновых волн. Для электромагнитных волн, пользуясь соотношениями (4), получаем из (25) с точностью до γ^3 выражения для $\omega_m^{\pm}$:

$$\omega_m^{\pm} = \frac{mqc}{2\sqrt{\varepsilon}} \begin{cases} 1 \pm \left| \dfrac{\rho_m}{2}\gamma \pm \dfrac{|\rho_m|\rho_m}{2}\gamma^2 + \left(\dfrac{m^2\rho_m}{8} S_1 + \dfrac{m^4}{32} S_3 + \dfrac{|\rho_m|^2 \rho_m}{2} \right)\gamma^3 \right| + \\ + \left(\dfrac{m^2}{8} S_1 - \dfrac{|\rho_m|^2}{8} \right)\gamma^2 \pm \left(\dfrac{3m^2 |\rho_m|}{16} S_1 - \dfrac{m^4 |\rho_m|}{32} S_2 - \dfrac{3|\rho_m|^3}{16} \right)\gamma^3, \\ \qquad\qquad m \text{ – нечетное}, \\ 1 + \left(\dfrac{m^2}{8} \sum\limits_{n_1} \dfrac{\left|\rho_{n_1}\right|^2}{n_1\left(m - n_1\right)} \pm \dfrac{m}{4} \left| \sum\limits_{n_1} \dfrac{\rho_{n_1}\rho_{m-n_1}}{n_1} \right| \right)\gamma^2, \qquad m \text{ – четное}, \end{cases} \tag{27}$$

где

$$S_1 = \sum_{n_1} \frac{\left|\rho_{n_1}\right|^2}{n_1\left(m - n_1\right)}, \; S_2 = \sum_{n_1} \frac{\left|\rho_{n_1}\right|^2}{n_1^2\left(m - n_1\right)^2}, \; S_3 = \sum_{n_1} \frac{\rho_{n_1}\rho_{n_2 - n_1}\rho_{m-n_2}}{n_1\left(m - n_1\right)n_2\left(m - n_2\right)}. \tag{28}$$

Выражения для ширин нечетных щелей получить из (27) 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:

$$\Delta\omega_m = \frac{mqc}{2\sqrt{\varepsilon}} \begin{cases} |\rho_m|\gamma, & m \text{ – нечетное}, \\ \dfrac{m}{2}\gamma^2 \left| \sum\limits_{n_1} \dfrac{\rho_{n_1}\rho_{m-n_1}}{n_1} \right|, & m \text{ – четное}. \end{cases} \tag{29}$$

Сравним формулы (27) и (29), полученные из точного дисперсионного уравнения, с аналогичными формулами для границ запрещенных зон $\omega_m^{\pm}$ и ширин запрещенных зон $\Delta\omega_m$, полученными с помощью МТСВ (см. [6]):

$$\omega_m^{\pm} = \frac{mqc}{2\sqrt{\varepsilon}} \begin{cases} 1 + \dfrac{1}{8}\gamma^2 \pm \left| \dfrac{\rho_m}{2}\gamma + \dfrac{S_m}{16}\gamma^3 \right| \pm \dfrac{|\rho_m|}{16}\gamma^3, & m\text{ – нечетное}, \\ 1 + \dfrac{1}{8}\gamma^2 \pm \dfrac{m}{4}\gamma^2 \left| \sum\limits_{n} \dfrac{\rho_n\rho_{m-n}}{n} \right|, & m\text{ – четное}, \end{cases} \tag{30}$$

$$\Delta\omega_m = \frac{mqc}{2\sqrt{\varepsilon}}\begin{cases} \left|\rho_m\gamma + \dfrac{S_m}{8}\gamma^3\right| + \dfrac{|\rho_m|}{8}\gamma^3, & m - \text{нечетное}, \\ \dfrac{m}{2}\gamma^2\left|\sum\limits_n \dfrac{\rho_n\rho_{m-n}}{n}\right|, & m - \text{четное}, \end{cases} \tag{31}$$

где

$$S_m = \sum_{n+p\neq 0}\frac{m-n-p}{n+p}\,\rho_n\,\rho_p\,\rho_{m-n-p} + \sum_{n,p}\left(\frac{m^2}{np}+\frac{2}{3}\right)\rho_n\,\rho_p\,\rho_{m-n-p}\ . \tag{32}$$

Из такого сравнения видно, что коэффициенты при соответствующих степенях γ в этих формулах описываются существенно различающимися выражениями (за исключением коэффициентов при первой степени γ, которые совпадают между собой). Следует подчеркнуть, что выражения для этих коэффициентов в формулах (27) являются точными, так как получены в рамках теории возмущений из точного дисперсионного уравнения (16) (или эквивалентного ему уравнения (21)). Поэтому точность метода МТСВ характеризуется отличием соответствующих коэффициентов формул (27) от формул (30). Чтобы получить наглядное представление о степени этой точности, рассмотрим выражения (27) и (30) для двух предельных случаев толщины границы между слоями: $d/l = 0$ (прямоугольный профиль SL) и $d/l = 1/4$ (синусоидальный профиль). Для прямоугольного профиля выражения для $\omega_m^{\pm}$, полученные методом МТСВ, совпадают с соответствующими выражениями теории возмущений, по крайней мере, до членов порядка γ^2:

$$\omega_m^{\pm} = \frac{qc}{2\sqrt{\varepsilon}}\begin{cases} m \pm \dfrac{\gamma}{\pi} + \dfrac{\gamma^2}{8}m \pm \ldots, & m\ -\ \text{нечетное}, \\ m + (1\pm 2)\dfrac{\gamma^2}{8}m + \ldots, & m\ -\ \text{четное}. \end{cases} \tag{33}$$

Для синусоидального профиля выражения для $\omega_m^{\pm}$, полученные методом МТСВ (нижние строчки формул (34)-(37), отличаются от соответствующих выражений теории возмущений (верхние строчки формул (34)-(37). Кроме того, выражения для различных величин m также различны:

$$m = 1: \qquad \omega_1^{\pm} = \frac{qc}{2\sqrt{\varepsilon}}\left\{1 \pm \frac{\sqrt{2}}{4}\gamma + \begin{cases} \dfrac{5}{2^5}\gamma^2 \pm \dfrac{19\sqrt{2}}{2^9}\gamma^3 + \ldots, \\ \dfrac{4}{2^5}\gamma^2 \pm \dfrac{20\sqrt{2}}{2^9}\gamma^3 + \ldots, \end{cases}\right. \tag{34}$$

$$m = 2: \qquad \omega_2^{\pm} = \frac{qc}{2\sqrt{\varepsilon}}\left\{2 + \frac{1}{2}\gamma^2 + \begin{cases} \dfrac{1}{3}\gamma^2 + \ldots, \\ \dfrac{1}{4}\gamma^2 + \ldots, \end{cases}\right. \tag{35}$$

$$m = 3: \qquad \omega_3^{\pm} = \frac{qc}{2\sqrt{\varepsilon}}\left\{3 + \begin{cases} \dfrac{27}{2^6}\gamma^2 \pm \dfrac{243}{2^9}\gamma^3 + \ldots, \\ \dfrac{24}{2^6}\gamma^2 \pm \dfrac{244}{2^9}\gamma^3 + \ldots, \end{cases}\right. \tag{36}$$

$$m > 3: \qquad \omega_m^{\pm} = \frac{qc}{2\sqrt{\varepsilon}}\left\{m + \begin{cases} \dfrac{1}{8}\gamma^2\dfrac{m^3}{m^2-1} + \ldots, \\ \dfrac{1}{8}\gamma^2 m + \ldots\ . \end{cases}\right. \tag{37}$$

Видно, что отличия результатов, полученных методом МТСВ, от результатов теории возмущений более существенны для положений запрещенных зон, чем для их ширин.

Для построения графиков зависимости ширины запрещенных зон от толщины границы d использовались выражения (26) для спиновых волн и выражения (27) и (30) для электромагнитных или упругих. В эти выражения подставлялись ρ_m, соответствующие гармоникам Фурье эллиптического синуса (1) [10, 11]. Зависимости $\Delta\omega_m(d/l)$, определяемые выражениями (30) (метод МТСВ), приведены на рис. 2, а для нечетных и

2, б для четных зон. Отметим, что в работе [6] была допущена неточность в выражениях для $\Delta\omega_m$ при нечетных m (см. формулу (35) работы [6]). Данная неточность приводит только к незначительному расхождению графиков зависимостей $\Delta\omega_m(d/l)$ при нечетных m работы [6] и данной работы: в частности, на графике $\Delta\omega_3(d/l)$ (см. рис. 6 работы [6]) отсутствует провал вблизи значения $d/l = 1/4$. Эта неточность не влияет на выводы, сделанные в работе [6]. Для $\gamma = 0{,}15$ кривые $\Delta\omega_m(d/l)$, определяемые выражениями (27) (метод возмущений) как для нечетных, так и для четных зон, мало отличаются от соответствующих кривых графиков 2,а и 2,б, которые были получены методом МТСВ (в масштабе этих графиков соответствующие кривые совпадают между собой). Зависимости $\Delta\nu_m(d/l)$, соответствующие спиновым волнам и определяемые выражениями (26), приведены на рис. 3,а для нечетных зон и на рис. 3,б для четных зон. На обоих графиках ширины щелей нормированы к ширине 1-й запрещенной зоны SL с синусоидальным профилем $\Delta\nu_{1\sin e}$. Качественный характер зависимостей $\Delta\nu_m(d/l)$ и $\Delta\omega_m(d/l)$ совпадает: ширины щелей для $m=1$ и 2 практически не зависят от *d* и резко уменьшаются с ростом *d* для $m > 2$. На зависимостях $\Delta\nu_m(d/l)$ для нечетных зон, как и на зависимостях $\Delta\omega_m(d/l)$, имеются провалы, которые не видны в масштабе рис. 3,а. Из сравнения рис. 2 и 3 видно, что имеется качественно различный характер зависимостей ширин щелей от номера зоны *m* для случаев электромагнитных и спиновых волн, который проявляется наиболее резко для прямоугольного профиля модуляции. Ширина нечетных зон при $d/l = 0$ для электромагнитных (и, соответственно, упругих) волн слабо зависит от *m* (рис. 2,а). Ширина нечетных зон для спиновых волн резко уменьшается с ростом *m* (как $1/m$ при пренебрежении эффектами порядка η^3, см. рис. 3,а). Еще более значительны различия между зависимостями от *m* для четных зон. Если для спиновых волн $\Delta\nu_m$ убывает с ростом *m* как $1/m$ (рис. 3,б), то для электромагнитных волн $\Delta\omega_m$ возрастает пропорционально *m* (рис. 2,б).

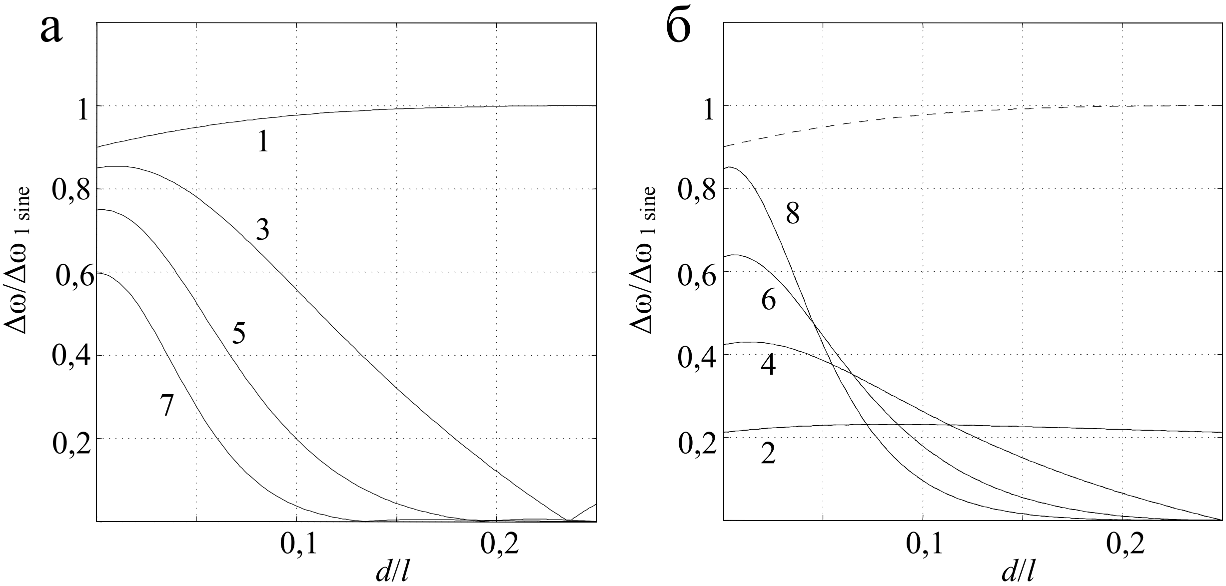

Рис. 2. Зависимости ширин щелей $\Delta\omega_m$ на краю m-й зоны Бриллюэна от d / l для нечетных (а) и четных (б) зон при γ = 0,15. Значения m указаны у соответствующих кривых. Пунктиром на рис. 2, б показана ширина щели 1-й зоны

Суммируем полученные результаты. В работе исследован закон дисперсии волн в одномерной SL (мультислойной структуре) с произвольной толщиной границы между слоями такой структуры. Для описания SL использована предложенная ранее модель [5], в которой профиль модуляции материального параметра вдоль оси SL описывается эллиптическим синусом Якоби. Из закона дисперсии рассчитаны зависимости ширин запрещенных зон $\Delta\nu_m$ и $\Delta\omega_m$, 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 [5]). Характер зависимостей ширин запрещенных зон от номера зоны различен для электромагнитных (или упругих), $\Delta\omega_m$, и спиновых волн, $\Delta\nu_m$. Обнаружен провал на зависимостях $\Delta\nu_m$ и $\Delta\omega_m$ от d/l для $m = 3, 5, 7$, обусловленный учетом следующих членов ряда теории возмущений (для сравнения, в первом порядке теории возмущений зависимость $\Delta\omega_m$ от d/l для этих же значений *m* имеет монотонно убывающий характер [5]). Для модели [5] аналитические выражения для $\omega_m^{\pm}$, полученные методом МТСВ (формулы (30), см. также [6]) и из закона дисперсии (формулы (27)), оказались существенно различными. Так как коэффициенты при членах по γ, найденные из дисперсионного закона $\omega(k)$, являются точными, то сравнение их с соответствующими коэффициентами ряда по γ, найденного методом МТСВ, позволило оценить точность этого метода. Показано, что ошибка метода в определении положений зон может быть весьма велика (коэффициент 1/4 вместо 1/3 перед γ^2 в формуле (35)), в то время как ширины зон определяются этим методом со значительно более высокой точностью. Высокая точность метода МТСВ отмечалась также в работе [12], где результаты, полученные этим методом, сравнивались с результатами численного решения волнового уравнения. 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. 2 для электромагнитных или упругих волн и графиками рис. 3 для спиновых волн, можно из величины отношения $\Delta\omega_3/\Delta\omega_1$ определить величину d/l.

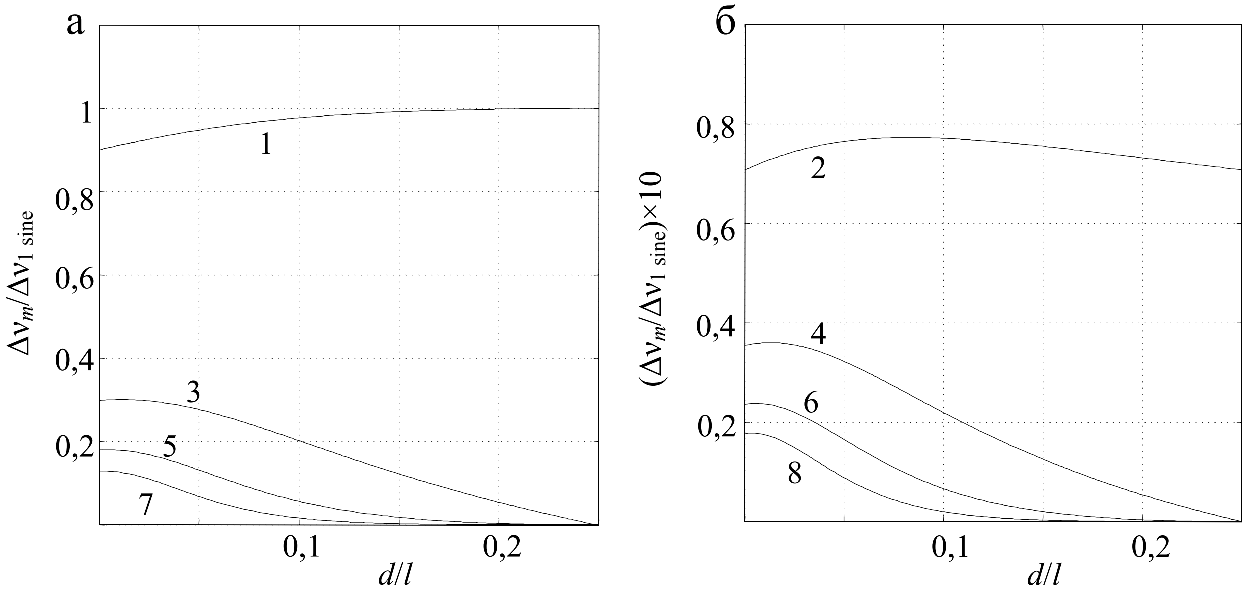

Рис. 3. Зависимости ширин щелей $\Delta\nu_m$ на краю m-й зоны Бриллюэна от d / l для нечетных (а) и четных (б) зон при $\eta / q^2 = 0{,}1$. Значения m указаны у соответствующих кривых. Обращаем внимание на отличие масштабов оси ординат рис. 3, а и 3, б

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бриллюэн Л. Распространение волн в периодических структурах / Л.Бриллюэн, М.Пароди. – М.: Иностр. лит., 1959. – 457 с.
2. Басс Ф.Г. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками / Ф.Г.Басс, А.А.Булгаков, А.П.Тетервов. – М.: Наука, 1989. – 286 с.
3. Элаши Ш. Волны в активных и пассивных периодических структурах / Ш. Элаши // ТИИЭР. – 1976. – Т. 64. – Вып. 12. – С. 22-57.
4. Карпов С.Ю. Распространение и преобразование волн в средах с одномерной периодичностью / С.Ю.Карпов, С.Н.Столяров // УФН. – 1993. – Т. 163. – Вып. 1. – С. 63-89.
5. Ignatchenko V.A. Wave spectrum of multilayers with finite thicknesses of interfaces / V.A.Ignatchenko, Yu.I.Mankov, A.A.Maradudin // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62, № 3. P. 2181-2184.
6. Игнатченко В.А. Распространение электромагнитных волн в одномерных сверхрешетках / В.А.Игнатченко, О.Н.Лалетин // Вестник КрасГУ. – 2003. – Вып. 3. – С. 9-17.
7. Карпов С.Ю. Модифицированная теория возмущений для расчета зонной структуры в одномерном периодическом потенциале / С.Ю.Карпов, О.В.Константинов, М.Э.Райх // ФТТ. – 1980. – Т. 22. – № 11. – С. 3402-3407.
8. Маделунг Э. Математический аппарат физики / Э. Маделунг. – М.: ГИФМЛ, 1961. – С. 365.
9. Ландау Л.Д. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. – М.: Наука, 1989. – С. 365.
10. Бронштейн И.Н. Справочник по математике / И.Н.Бронштейн, К.А.Семендяев. – М.: ГИФМЛ, 1962. – С. 551.

11. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Стигана, И. Абрамовица. – М.: Наука, 1979. – С. 388.
12. Болотовский Б.М. Приближенные аналитические решения в периодически неоднородных средах и расчет коэффициентов отражения / Б.М.Болотовский, В.Е.Воловельский, Н.Н.Мартынов, С.Н.Столяров. – М.: Препринт ФИАН. – 1989. – № 101.

WAVE SPECTRUM OF SUPERLATTICES WITH ARBITRARY THICKNESS OF THE INTERFACE BETWEEN LAYERS

V.A. Ignatchenko and O.N. Laletin

The wave spectrum $\omega(k)$ *in an one-dimensional superlattice (multilayer structure) with an arbitrary thickness of the interface between the layers is studied. Dependences of widths of the forbidden zones* $\Delta\omega_m$ *and their locations in the spectrum of the superlattice on the thickness of the interface* d *and the zone number* m *are calculated. The calculation of* $\Delta\omega_m$ *is carried out by the method of the perturbation theory from the dispersion law* $\omega(k)$*. These results are compared with the results of our previous paper, where the widths of the forbidden zones were calculated by the modified coupled-wave theory (MCWT). The comparison allow us to estimate the precision of the MCWT method. This method has a high precision in calculation of the widths of the forbidden zones and much smaller accuracy in determination of their locations. It is shown, that* $\Delta\omega_m$ *has different dependences on* m *for the electromagnetic (or elastic) and for the spin waves. It is shown, that the widths of the forbidden zones with* m *=1 and 2 practically do not depend on* d*, while the widths of all zones with* $m > 2$ *have a strong dependence on* d*. Experimental measuring of these dependences will allow to determine the thickness of the interface between layers of superlattices by the spectral methods.*