УДК 535.39:535.01:535.323

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРЕМЫ ЭВАЛЬДА-ОЗЕЕНА К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ НА ОТРАЖЕНИЕ И ПРЕЛОМЛЕНИЕ ВОЛН НА СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

С. Н. Латынин
Донецкий национальный университет экономики и торговли имени М. Туган-Барановского

В методе действующего поля, обобщенного на двумерно-периодические структуры, решена задача отражения и преломления волн на слоистых кристаллах. В теории Єйри получены коэффициенты отражения и пропускания волн при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена, без использования волновых уравнений и граничных условий.

Ключевые слова: дипольный момент, теорема погашения, слоистый кристалл, отражение и преломление волн.

Введение. Вопрос о распространении электромагнитных волн в слоях и слоистых кристаллах широко обсуждается в научной литературе [1-3]. Было предложено много схем для расчета отражения и преломления волн на различных многослойных системах. В общей теории для кристаллов из макроскопических слоев электромагнитные волны в каждом слое описываются уравнениями Максвелла, а на границах сшиваются граничными условиями [1, 2]. Внутри переходных слоев кристаллов (порядка нескольких постоянных решетки a), где имеют место эффекты релаксации и реконструкции поверхности [4], а также в фотонных [5] или в других слоистых кристаллах [3], где слоями являются моноатомные плоскости (или тонкие слои $\sim a$), для описания электромагнитных волн некорректно применять макротеорию. В [3] распространение волн в таких кристаллах описано в рамках расширенного феноменологического подхода при помощи модернизированных граничных условий. В отличие от модернизированных макротеорий в молекулярной теории [6-8] процесс распространения волн можно описать более непосредственным способом, не прибегая к уравнениям Максвелла и граничным условиям, а лишь при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена. Теорема Эвальда-Озеена была доказана для двумерно-периодических кристаллов, для оптически активных и анизотропных сред, она также применима к волнам в широком диапазоне частот [9, 10]. Особенно актуален такой подход при рассмотрении мономолекулярных плоскостей и тонких слоистых кристаллов [7], когда в качестве структурной единицы кристалла необходимо выбирать атом (или другую хорошо локализованную структурную группу – молекулу, ион, ковалентную связь, моноатомный плоскопараллельный слой или любое другое квазидвумерное образование).

В настоящей работе решается задача отражения и пропускания (преломления) волн на многослойных кристаллах произвольных размеров в рамках метода действующего поля, обобщенного на двумерно-периодические кристаллические структуры [6-8], при помощи теории Эйри [1], основанной на многократных отражения волн внутри слоев и между слоями.

Применение теории Эйри в методе действующего поля. Любой слоистый кристалл можно представить как суперпозицию n плоскопараллельных слоев. Предполагаем, что в i-ом слое атомы одного сорта, а слой состоит из $N_3^{(i)}$ атомных плоскостей перпендикулярных направлению оси z декартовой системы координат ($i = 1,...,n$).

Рассмотрим падение на слоистый кристалл плоской монохроматической волны $\boldsymbol{E}^{(e)} = \boldsymbol{E}_0^{(e)} \exp(i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r} - i\omega t)$, с частотой ω и волновым вектором $\boldsymbol{k}_0 = (\boldsymbol{k}_\perp, k_{03})$ (где $k_0 = \omega\, a/c$, «$\perp$» обозначает проекцию вектора на поверхность, плоскость xy). Эта волна самосогласованным образом поляризует атомы первого слоя [6,7], так что дипольный момент атома в l-ом узле имеет вид:

$$\mathbf{P}'^{l}(\mathbf{r},t) = \mathbf{P}'\left(\mathbf{k}^{(1)}\right)\exp\left(\left(i\mathbf{k}_\perp\mathbf{L}_\perp + ik_3 d_3^{(i)}(l_3-1)\right) - i\omega\, t\right) + \\ + \vec{P}'\left(\tilde{\mathbf{k}}^{(1)}\right)\exp\left(\left(i\mathbf{k}_\perp\mathbf{L}_\perp - ik_3 d_3^{(1)}(l_3-1)\right) - i\omega\, t\right), \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{L}_\perp, L_3) = \left(\boldsymbol{L}_\perp, d_3^{(1)}(l_3-1)\right)$ – радиус-вектор l-го узла, $0 < l_3 \le N_3^{(1)}$, $d_3^{(1)}$ – межплоскостное расстояние (в направлении оси z); $\boldsymbol{k}^{(1)} = \left(\boldsymbol{k}_\perp, k_3^{(1)}\right)$– волновой вектор преломленной волны в слое (в единицах a); $\tilde{\boldsymbol{k}}^{(1)} = \left(\boldsymbol{k}_\perp, -k_3^{(1)}\right)$.

Дипольный момент (1) определяется из самосогласованной системы уравнений:

$$\boldsymbol{P}'^{\,l} = \alpha(\omega)\left\{\boldsymbol{E}^{(*)l} + \boldsymbol{E}^{(e)}\right\}, \tag{2}$$

$$\boldsymbol{E}^{l(*)} = \frac{1}{a^3}\left[\nabla\nabla - \frac{a^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\boldsymbol{\Pi}^{l_3}(\boldsymbol{r},t) \tag{3}$$

при $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{L}$, где вектор Герца $\boldsymbol{\Pi}^{l_3}(\boldsymbol{r},t)$ рассчитывается по методу Эвальда, обобщенному на двумерно-периодические структуры [7]. В случае $\vec{q}_\perp = 0$ он имеет вид

$$\mathbf{\Pi}^{l_3}(\mathbf{r},t) = \frac{2\pi\delta^{(1)}}{-ik_{03}}\sum_{l_3'}\left\{\mathbf{P}\left(\mathbf{k}^{(1)}\right)\exp\left(ik_3^{(1)}L_3'\right) + \mathbf{P}\left(\tilde{\mathbf{k}}^{(1)}\right)\exp\left(-ik_3^{(1)}L_3'\right)\right\}\exp\left(ik_{03}\left|r_3 - L_3'\right| + i\mathbf{k}_\perp\mathbf{r}_\perp - i\omega\, t\right), \tag{4}$$

где $\delta^{(i)} = \theta a^{-3}\Omega_\perp^{-1}$ – параметры, которые определяются для каждого слоя ($i = 1,...,n$), a – постоянная решетки рассматриваемого слоя; $\theta = 1$ или 2 [7]; $\Omega_\perp$ – площадь элементарной ячейки на поверхности слоя.

Поле (3) внутри и вне кристаллического слоя можно представить как суперпозицию волн, создаваемых дипольными моментами отдельных атомных плоскостей с различными l_3: $0 < l_3 \le N_3^{(1)}$. При $r_3 < r_3^{(1)}$ имеем отраженную от слоя волну $\boldsymbol{E}^{(r)} = \boldsymbol{E}^{(*)l}$, а при $r_3 > r_3^{(1)} + d_3^{(1)}\left(N_3^{(1)} - 1\right)$ имеем прошедшую сквозь слой волну $\boldsymbol{E}^{(d)} = \boldsymbol{E}^{(*)l} + \boldsymbol{E}^{(e)}$. Для обеих волн в (3)-(4) сумма $\sum_{l_3'} = \sum_{l_3'=1}^{N_3^{(1)}}$.

Если в (2)-(3) $0 < l_3 \le N_3^{(1)}$, то в (3)-(4) сумма $\sum_{l_3'} = \sum_{l_3'=1}^{l_3-1} + \sum_{l_3'=l_3-1}^{N_3^{(1)}}$ и решая самосогласованную систему уравнений (2)-(3) для дипольных моментов (1) найдем

– теорему погашения Эвальда-Озеена с учетом многократных отражений волн внутри слоя

$$E_0^{(e)} = \frac{2\pi\delta^{(1)}k_0^2}{ik_{03}}\frac{\cos\left(\varphi - \psi^{(1)}\right)\exp\left(\left(ik_3^{(1)} - ik_{03}\right)r_3^{(1)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(1)} - ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)}P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right), \tag{5}$$

из которой можно определить $P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)$, если известна амплитуда $E_0^{(e)}$, падающей на поверхность кристалла волны и

– законы отражения волн на нижней и верхней грани внутри слоя:

$$P\left(\tilde{\boldsymbol{k}}^{(1)}\right) = -R^{(1)}\exp\left(2ik_3^{(1)}\left(r_3^{(1)} + d_3^1 N_3^{(1)}\right)\right)P\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right); \tag{6}$$

$$P\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right) = -R^{(1)}\exp\left(-2ik_3^{(1)}\left(r_3^{(1)} - d_3^{(1)}\right)\right)P\left(\tilde{\boldsymbol{k}}^{(1)}\right), \tag{7}$$

где $R^{(1)} = \dfrac{\cos\left(\varphi + \psi^{(1)}\right)}{\cos\left(\varphi - \psi^{(1)}\right)}\dfrac{1 - \exp\left(\left(ik_{03} - ik_3^{(1)}\right)d_3^{(1)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_{03} + ik_3^{(1)}\right)d_3^{(1)}\right)}$; $r_3^{(1)}$ определяет положение первого слоя; $\psi^{(1)}$ – угол преломления волны в слое; φ – угол падения волны на поверхность кристалла. Для каждого слоя определяются свои параметры: $R^{(i)}$, $r_3^{(i)}$, $d_3^{(i)}$, $\delta^{(i)}$, $\psi^{(i)}$, $\boldsymbol{k}^{(i)}$ и $\tilde{\boldsymbol{k}}^{(i)}$, где $i = 1,...,n$. В этой работе рассматриваются составляющие волн, лежащие в плоскости падения.

Решим самосогласованную задачу (2) для дипольных моментов атомов произвольного i-го слоя и выведем для него теорему погашения Эвальда-Озеена на верхней и нижней грани, с учетом многократных отражений волн внутри слоя. Из нее получим амплитуды волн $E_0^{(e)i}$ и $\tilde{E}_0^{(e)i}$, соответственно падающих на верхнюю, нижнюю поверхность слоя и лежащих в плоскости падения. Амплитуды волн отраженных на и прошедших сквозь i-й кристаллический слой соответственно при падении волны сверху на слой $E_0^{(r)i}$, $E_0^{(d)i}$ и снизу $\tilde{E}_0^{(r)i}$ и $\tilde{E}_0^{(d)i}$ получим применив для (3) обобщение метода Эвальда на двумерно-периодические структуры [6, 7].

Так как, по теории Эйри на каждый слой (кроме последнего) в многослойной структуре, с обеих сторон падают волны, отраженные или преломленные на соседних слоях, то они поляризуют атомы этого слоя, которые в свою очередь формируют волны, поляризующие атомы соседних слоев. Эта самосогласованная задача многократного отражения и преломления волн на слоистом кристалле может быть решена без граничных условий и волновых уравнений, а лишь при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена.

Так как по теореме погашения Эвальда-Озеена для соседних слоев имеют место соотношения $E_0^{(d)i} = E_0^{(e)i+1}$, $E_0^{(r)i+1} = \widetilde{E}_0^{(e)i}$, $\widetilde{E}_0^{(d)i+1} = \widetilde{E}_0^{(e)i}$ и $\widetilde{E}_0^{(r)i} = E_0^{(e)i+1}$, то получим формулы для связи амплитуд дипольных моментов атомов этих слоев ($i = 1,...,n$):

$$P\left(\boldsymbol{k}^{(i+1)}\right) = W_{i0} P\left(\boldsymbol{k}^{(i)}\right); \quad P\left(\boldsymbol{k}^{(i)}\right) = V_{i0} P\left(\boldsymbol{k}^{(i+1)}\right); \tag{8}$$

$$P\left(\vec{k}^{(i)}\right) = \widetilde{W}_{i0} P\left(\vec{k}^{(i+1)}\right); \quad P\left(\vec{k}^{(i+1)}\right) = \widetilde{V}_{i0} P\left(\vec{k}^{(i)}\right). \tag{9}$$

Здесь

$$W_{i0} = \frac{\delta^{(i)}}{\delta^{(i+1)}} \frac{\cos\left(\varphi - \psi^{(i)}\right)}{\cos\left(\varphi - \psi^{(i+1)}\right)} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right) d_3^{(i+1)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right) d_3^{(i)}\right)} \frac{\exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right) d_3^{(i)}\right)}{\exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right) \Delta^{(i+1)}\right)} \times$$
$$\times \frac{1 - \left(R^{(i)}\right)^2 \exp\left(2ik_3^{(i)} d_3^{(i)}\right)}{1 - \left(R^{(i)}\right)^2 \exp\left(2ik_3^{(i)} d_3^{(i)}\left(N_3^{(i)} + 1\right)\right)} \exp\left\{ i\left(k_3^{(i)} - k_3^{(i+1)}\right) \sum_{j=1}^{i} \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right\}; \tag{10}$$

$$V_{i0} = \frac{\delta^{(i+1)}}{\delta^{(i)}} \frac{\cos\left(\varphi + \psi^{(i+1)}\right)}{\cos\left(\varphi - \psi^{(i)}\right)} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right) d_3^{(i)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} + ik_{03}\right) d_3^{(i+1)}\right)} \frac{\exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} + ik_{03}\right) \Delta^{(i+1)}\right)}{\exp\left\{-2ik_3^{(i)} d_3^{(i)} N_3^{(i)}\right\}} \times$$
$$\times \frac{R^{(i)}\left(1 - \exp\left(2ik_3^{(i+1)} d_3^{(i+1)} N_3^{(i+1)}\right)\right)}{1 - \left(R^{(i+1)}\right)^2 \exp\left(2ik_3^{(i+1)} d_3^{(i+1)}\left(N_3^{(i+1)} + 1\right)\right)} \exp\left\{ i\left(k_3^{(i+1)} - k_3^{(i)}\right) \sum_{j=1}^{i} \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right\}. \tag{11}$$

$$\widetilde{W}_{i0} = \frac{\delta^{(i+1)}}{\delta^{(i)}} \frac{\cos\left(\varphi - \psi^{(i+1)}\right)}{\cos\left(\varphi - \psi^{(i)}\right)} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right) d_3^{(i)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right) d_3^{(i+1)}\right)} \frac{R^{(i)}}{R^{(i+1)}} \exp\left(2ik_3^{(i)} d_3^{(i)} N_3^{(i)}\right) \times$$
$$\frac{\exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_3^{(i)}\right) \sum_{j=1}^{i} \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right)}{\exp\left(-\left(ik_3^{(i+1)} + ik_{03}\right)\left(\Delta^{(i+1)} - d_3^{(i+1)}\right)\right)} \frac{1 - \left(R^{(i+1)}\right)^2 \exp\left(2ik_3^{(i+1)} d_3^{(i+1)}\right)}{1 - \left(R^{(i+1)}\right)^2 \exp\left(2ik_3^{(i+1)} d_3^{(i+1)}\left(N_3^{(i+1)} + 1\right)\right)}; \tag{12}$$

$$\widetilde{V}_{i0} = \frac{\delta^{(i)}}{\delta^{(i+1)}} \frac{\cos\left(\varphi + \psi^{(i)}\right)}{\cos\left(\varphi - \psi^{(i+1)}\right)} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right) d_3^{(i+1)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} + ik_{03}\right) d_3^{(i)}\right)} \frac{\exp\left(\left(ik_{03} - ik_3^{(i+1)}\right) \Delta^{(i+1)}\right)}{R^{(i)} \exp\left(2ik_3^{(i)} d_3^{(i)} N_3^{(i)}\right)} \times$$
$$\times \frac{1 - \exp\left(2ik_3^{(i)} d_3^{(i)} N_3^{(i)}\right)}{1 - \left(R^{(i)}\right)^2 \exp\left(2ik_3^{(i)} d_3^{(i)}\left(N_3^{(i)} + 1\right)\right)} \exp\left\{ i\left(k_3^{(i)} - k_3^{(i+1)}\right) \sum_{j=1}^{i} \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right\}; \tag{13}$$

$\Delta^{(j)}$ – расстояние между j -м и $j-1$ -м слоями; $\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)$ – толщина j -го слоя.

Если исходить из того, что волна, отраженная от слоистой структуры, формируется первым слоем, а прошедшая волна формируется последним, то для вычисления коэффициентов отражения и прохождения волн – необходимо рассчитать дипольные моменты атомов этих слоев. Найдем их, применим метод действующего поля и теорию Эйри, основанную на многократных отражениях волн внутри слоев и между ними [1].

Дипольные моменты атомов первого слоя $P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)$ определяются по формуле:

$$P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right) = P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right) + \sum_{i=1}^{n} \widetilde{P}_i\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right), \tag{14}$$

где $\widetilde{P}_i\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)$ – дополнительные дипольные моменты атомов первого слоя, поляризуемые волнами типа (16)-(17), создаваемые нижними слоями в результате многократных отражений и преломлений волн между слоями и внутри их.

Получим рекуррентные формулы для (14) и дипольных моментов атомов последнего слоя $P(\boldsymbol{k}^{(n)})$. Рекуррентная формула – это формула приведения, которая сводит вычисление i – го члена какой-либо последовательности к вычислению $i-1$ – го члена этой последовательности. Рекуррентная формула позволяет шаг за шагом определить любой член последовательности, если известен ее первый член.

В результате громоздких вычислений методом математической индукции были получены и доказаны рекуррентные формулы для $P(\boldsymbol{k}^{(n)})$ и $P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)$ в виде:

$$P\left(\boldsymbol{k}^{(n)}\right)=P\left(\boldsymbol{k}^{(n-1)}\right)W_{n-1,0}[n-2]$$

или

$$P\left(\boldsymbol{k}^{(n)}\right)=P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)[O_1]\prod_{i=1}^{n-1}W_{i0}\prod_{l=1}^{n-2}[i]; \tag{15}$$

$$P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)=P_{n-1}\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)+\widetilde{P}_n\left(\boldsymbol{k}^{(n-1)}\right)=P_{n-1}\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)+P\left(\boldsymbol{k}^{(n-1)}\right)W_{n-1,0}V_{n-1,0}[n-2][O_{n-2}]\prod_{i=1}^{n-2}\widetilde{W}_{i0}\prod_{i=1}^{n-3}[\bar{i}]$$

или

$$P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)=P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)\left[1+W_{10}V_{10}[O_1]+[O_1]\sum_{j=1}^{n-2}\left([O_j]V_{j+1,0}\prod_{i=1}^{j+1}W_{i0}\prod_{i=1}^{j}\left(\widetilde{W}_{i0}[i]\right)\prod_{i=1}^{j-1}[\bar{i}]\right)\right], \tag{16}$$

где коэффициенты $[n-1]=1+\sum_{p=1}^{\infty}\prod_{j=1}^{p}(V_{n0})^j\left[\widetilde{V}_{n0}+\widetilde{W}_{n-1,0}\widetilde{V}_{n-1,0}[O_{n-1}]W_{n0}+W_{n0}[O_{n-1}]\times\right.$

$$\left.\times\sum_{l=1}^{n-2}\left(\widetilde{V}_{n-1-l,0}[O_{n-l}]\prod_{i=1}^{l+1}\widetilde{W}_{n-i,0}\prod_{i=1}^{l+1}\left([\bar{i}]W_{n-i,0}\right)\prod_{i=1}^{l-1}\left[\bar{\bar{i}}\right]\right)\right]^j; \tag{17}$$

$[O_i]=1+\sum_{k=1}^{\infty}\prod_{j=1}^{k}\left(V_{i0}\widetilde{V}_{i0}\right)^j$ ($i=1,\ldots,n$). Коэффициенты $[\bar{i}]$ получают из $[i]$ заменой: $W_i\leftrightarrow\widetilde{W}_{n-1-i}$, $V_i\leftrightarrow\widetilde{V}_{n-1-i}$, $[O_i]\leftrightarrow[O_{n-1-i}]$; коэффициенты $\left[\bar{\bar{i}}\right]$ получают из $[i]$, если сделать последовательно две группы замен: 1) $W_i\leftrightarrow\widetilde{W}_{n-2-i}$, $V_i\leftrightarrow\widetilde{V}_{n-2-i}$, $[O_i]\leftrightarrow[O_{n-2-i}]$ и 2) $W_i\leftrightarrow\widetilde{W}_{n-1-i}$, $V_i\leftrightarrow\widetilde{V}_{n-1-i}$, $[O_i]\leftrightarrow[O_{n-1-i}]$; $[\bar{0}]=1$; $\left[\bar{\bar{0}}\right]=1$.

Дипольные моменты атомов n –го слоя $P(\boldsymbol{k}^{(n)})$ и первого $P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)$ получены для многослойных структур со слоями произвольной конечной толщины (вплоть до моноатомной, $N_3^{(i)}\cong 1$). Формулы (15)-(17) не имеют ограничений при применении, они достаточно эффективны при моделировании и компьютерных вычислениях.

Для дипольных моментов (15)-(17) можно рассчитать амплитуды волн $E_0^{(r)}$ отраженные от многослойной кристаллической структуры по формуле

$$E_0^{(r)}=E_0^{(r)1}+\sum_{i=1}^{n}\widetilde{E}_0^{(d)1}(i), \tag{18}$$

где $E_0^{(r)1}$ рассчитывается для дипольного момента $P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)$, $\widetilde{E}_0^{(d)1}(i)$ – для $\widetilde{P}_i\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)$, а волны прошедшие сквозь многослойную структуру $E_0^{(d)}$ рассчитываются для $P(\boldsymbol{k}^{(n)})$ по формулам:

$$E_0^{(r)1}=-2\pi\delta^{(1)}\frac{k_0^2}{ik_{03}}\frac{\cos\left(\varphi+\psi^{(1)}\right)P\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)}{1-\exp\left(\left(ik_3^{(1)}+ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)}\exp\left(\left(ik_3^{(1)}+ik_{03}\right)r_3^{(1)}\right)\times$$

$$\times\frac{1-\exp\left(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}N_3^{(1)}\right)}{1-\left(R^{(1)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}\left(N_3^{(1)}+1\right)\right)}; \qquad (19)$$

$$\widetilde{E}_0^{(d)1}=2\pi\delta^{(1)}\frac{k_0^2}{ik_{03}}\frac{\cos\left(\varphi-\psi^{(1)}\right)P\left(\widetilde{\boldsymbol{k}}^{(1)}\right)}{1-\exp\left(\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)}\exp\left(-\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)\left(r_3^{(1)}-d_3^{(1)}\right)\right)\times$$

$$\times\frac{1-\left(R^{(1)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}\right)}{1-\left(R^{(1)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}\left(N_3^{(1)}+1\right)\right)}; \qquad (20)$$

$$E_0^{(d)}=2\pi\delta^{(n)}\frac{k_0^2}{ik_{03}}\frac{\cos\left(\varphi-\psi^{(n)}\right)P\left(\boldsymbol{k}^{(n)}\right)}{1-\exp\left(\left(ik_3^{(n)}-ik_{03}\right)d_3^{(n)}\right)}\exp\left(\left(ik_3^{(n)}-ik_{03}\right)\left(\sum_{j=1}^{n}\Delta^{(j)}+\sum_{j=1}^{n}d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)}-1\right)+d_3^{(n)}\right)\right)\times$$

$$\times\frac{1-\left(R^{(n)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)}\right)}{1-\left(R^{(n)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)}\left(N_3^{(n)}+1\right)\right)}. \qquad (21)$$

При выводе формул (5), (19)-(21) мы опустили неоднородные компоненты поля и поправки связанные с дополнительной поверхностной поляризацией атомов, см. [7]. Из (5) и (19) следует: – теорема погашения в кристаллическом слое такая же, как и в полубесконечном кристалле [6]; – волна, падающая на поверхность кристалла, должна гаситься уже в области первой атомной плоскости первого слоя; – коэффициенты отражения и прохождения волн для сверхтонкокого слоя, рассчитанные в микротеории такие же, как в [1,2] при исследовании толстых слоев или полубесконечных кристаллов ($N_3^{(1)}\to\infty$),но при их выводе мы не использовали граничных условий.

В этом разделе показано, что теорему погашения Эвальда-Озеена можно охарактеризовать, как основную и универсальную закономерность, определяющую поведение электромагнитной волны на границе двух сред произвольного вида. На основе ее разработана процедура вычислений дипольных моментов атомов слоистых кристаллов в самосогласованной задаче поляризации атомов в поле многократно отраженных и преломленных волн внутри и между слоями. Формулы (18) и (21) позволяют рассчитать амплитуд волн $E_0^{(r)}$ и $E_0^{(d)}$ для произвольных многослойных кристаллов.

Коэффициенты отражения и пропускания волн на многослойной кристаллической структуре. После того, как при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена были рассчитаны амплитуды волн $E_0^{(e)}$, $E_0^{(r)}$ и $E_0^{(d)}$, выведем коэффициенты отражения и пропускания волн на многослойном кристалле:

$$\frac{E_0^{(r)}}{E_0^{(e)}}=\frac{\exp\left(\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)}{1-\left(R^{(1)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}\left(N_3^{(1)}+1\right)\right)}\left[R^{(1)}\left(1-\exp\left(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}N_3^{(1)}\right)\right)+\right.$$

$$\left.+\left(1-\left(R^{(1)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}\right)\right)\exp\left(-2\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)r_3^{(1)}\right)\frac{P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)-P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)}{P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)}\right]; \qquad (22)$$

$$\frac{E_0^{(d)}}{E_0^{(e)}}=\frac{\delta^{(n)}}{\delta^{(1)}}\frac{\cos\left(\varphi-\psi^{(n)}\right)}{\cos\left(\varphi-\psi^{(1)}\right)}\frac{1-\exp\left(\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)}{1-\exp\left(\left(ik_3^{(n)}-ik_{03}\right)d_3^{(2)}\right)}\times$$

$$\times\frac{1-R^{(n)}\exp\left(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)}\right)}{1-\left(R^{(n)}\right)^2\exp\left(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)}\left(N_3^{(n)}+1\right)\right)}\frac{\exp\left(\left(ik_3^{(n)}-ik_{03}\right)\left(r_3^{(n)}+d_3^{(n)}N_3^{(n)}\right)\right)}{\exp\left(\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)r_3^{(1)}\right)}\frac{P\left(\boldsymbol{k}^{(n)}\right)}{P'\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right)}. \qquad (23)$$

Если слоистый кристалл находится на полубесконечной подложке (с заданными структурными и оптическими характеристиками ψ , d_3 , $\vec{k}$, δ), то преломленная волна имеет вид:

$$E_0^{(d)}=2\pi\delta\frac{k_0^2}{ik_{03}}\frac{\cos(\varphi-\psi)}{1-\exp\left(\left(ik_3-ik_{03}\right)d_3\right)}\left[1+R\cdot\exp\left(2ik_3d_3\right)\right]P_0, \qquad (24)$$

где $R = \dfrac{\cos(\varphi+\psi)}{\cos(\varphi-\psi)} \dfrac{1-\exp((ik_{03}-ik_3)d_3)}{1-\exp((ik_{03}+ik_3)d_3)}$. Тогда формула Френеля для преломленной волны имеет вид:

$$\frac{E_0^{(d)}}{E_0^{(e)}} = \frac{\delta}{\delta^{(1)}} \frac{\cos(\varphi-\psi)}{\cos\left(\varphi-\psi^{(1)}\right)} \frac{1-\exp\left(\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)}{1-\exp\left(\left(ik_3-ik_{03}\right)d_3\right)} \exp\left(\left(ik_3^{(1)}-ik_{03}\right)r_3^{(1)}\right) \times$$
$$\times\left[1+R\cdot\exp\left(2ik_3 d_3\right)\right] \frac{P_0}{P'\left(\mathbf{k}^{(1)}\right)}, \tag{25}$$

где дипольные моменты $P_n(\mathbf{k}^{(1)})$ и P_0 в (22) и (25) рассчитываются аналогично (21)-(23) по формулам:

$$P_0 = P(\boldsymbol{k}^{(n)})Z[n]; \tag{26}$$

$$P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right) \to P_{n+1}\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right) = P_n\left(\boldsymbol{k}^{(1)}\right) + P(\boldsymbol{k}^{(n)})YZ[O_{n-1}][n-1]\prod_{l=1}^{n-1}\tilde{W}_{1l}\prod_{l=1}^{n-2}\left[\bar{l}\right], \tag{27}$$

где $[n-1] = 1+\sum_{p=1}^{\infty}\prod_{j=1}^{p}(YZ)^j\left[1+\tilde{W}_{n-1,0}\tilde{V}_{n-1,0}[O_{n-1}]+[O_{n-1}]\sum_{l=1}^{n-2}\left(\tilde{V}_{n-1-l,0}[O_{n-l}]\times\right.\right.$

$$\left.\left.\times\prod_{i=1}^{l+1}\left(W_{n-i,0}\tilde{W}_{n-i,0}\left[\bar{i}\right]\right)\prod_{i=1}^{l-1}\left[\hat{i}\right]\right)\right]^j. \tag{28}$$

Коэффициенты Z и Y рассчитываются по формулам (10)-(11), если сделать замены: $R^{(i+1)} \to 0$; $\delta^{(i+1)}, k_3^{(i+1)}, d_3^{(i+1)}, \psi^{(i+1)}, \Delta^{(i+1)} \to \delta, k_3, d_3, \psi, \Delta$; $\delta^{(i)}, k_3^{(i)}, d_3^{(i)}, \psi^{(i)}, \Delta^{(i)}, R^{(i)}, N_3^{(i)} \to \delta^{(n)}$, $k_3^{(n)}, d_3^{(n)}, \psi^{(n)}, \Delta^{(n)}, R^{(n)}, N_3^{(n)}$; $\sum_{j=1}^{i} \to \sum_{j=1}^{n}$; в (11) $1-\exp\left(2ik_3^{(i+1)}d_3^{(i+1)}N_3^{(i+1)}\right) \to -1$.

Результаты настоящей работы свидетельствуют, что можно смоделировать любую многослойную кристаллическую среду и для нее рассчитать коэффициенты отражения и пропускания волн, связав их со структурой среды. Формулы (22), (23) и (25) применимы для слоев произвольной толщины, вплоть до атомарной, необходимо лишь учесть изменения законов дисперсии светоэкситонов и параметров решетки. Для сверхтонких слоев первое слагаемое квадратных скобок в (22) $\sim a/\lambda$. Поэтому, например, наличие на поверхности полубесконечной подложки моноатомного кристаллического слоя (с дипольными моментами атомов вида (26)-(28)), может приводить к небольшому усилению или ослаблению отраженной волны.

При $N_3^{(i)} \to 1$ и $r^{(i+1)} \to r^{(i)} + d_3^{(i)} + \Delta^{(i+1)}$ для всех $i = 1,...,n$ слоистый кристалл вырождается в систему моноатомных плоскостей расположенных на полубесконечной подложке. В таком виде (22) и (25) можно применять, например, при исследовании релаксации и реконструкции поверхности кристалла, при изучении поверхностных состояний в фотонных кристаллах или поверхностной структуры нанорешеток и т.д., см., например, [5,11].

Заключение. В методе действующего поля, обобщенного на двумерно-периодические структуры, была применена теория Эйри для описания распространения волн в многослойных кристаллических системах. В работе была разработана процедура расчета дипольных моментов атомов слоистых кристаллов в самосогласованной задаче поляризации атомов в поле многократно отраженных и преломленных волн внутри и между слоями при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена, без использования волновых уравнений и граничных условий Максвелла. Полученные в микротеории коэффициенты отражения и пропускания волн найдут широкое применение в развитие теории слоистых сред, нанокристаллических пленок и слоистых структур с заданными свойствами.

РЕЗЮМЕ

У методі діючого поля, узагальненого на двовимірно-періодичні структури, розв′язується задача відбиття і заломлення хвиль на шаруватих кристалах. В теорії Ейрі одержані коефіцієнти відбиття і проходження хвиль за допомогою теореми погашення Евальда-Озеєна, без використання хвильових рівнянь і граничних умов.

Ключові слова: дипольний момент, теорема погашення, шаруватий кристал, відбиття і заломлення хвиль.

SUMMARY

In a method of a working field generalized on two-measure periodic structures a problem of reflection and refraction of waves on layered crystals is decided. The method Airy determines amplitudes of reflected and refracted waves. The factors of reflection and passing of waves are received through the theorem of repayment Ewald-Oseen without use of wave equations and boundary conditions.

Keywords: dipole moment, the theorem of repayment, layered crystal, reflection and refraction of waves.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борн М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф. − М.: Наука, 1970. − 856 с.
2. Ярив А. Оптические волны в кристаллах / А. Ярив, П. Юх. − М.: Мир, 1987. – 616 с.
3. Румянцев В.В. Взаимодействие электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами / В. В. Румянцев– Донецк: Норд-Пресс, 2006. – 347 с.
4. Латышев А.В. Моноатомные ступени на поверхности кремния / А. В. Латышев, А. Л. Асеев // Успехи физических наук. – 1998 – Т. 168, № 10. – С. 1117-1127.
5. Виноградов А.П. Поверхностные состояния в фотонных кристаллах / А. П. Виноградов, А. В. Дорофеенко, А. М. Мерзликин та інш. // Успехи физических наук. – 2010. – Т. 180, № 3. – С. 249-263.
6. Латинін С. М. До питання про існування рівноважних граней у кубічних кристалах / С. М. Латинін // Український фізичний журнал . − 2001. − Т. 46, № 9. − С. 932-936.
7. Латынин С. Н. Микроскопическая теория распространения света в сверхтонком кристаллическом слое / С. Н. Латынин // Вісник Донецького університета. – 2007, № 2. – С. 100-109.
8. Латинін С. М. Мікроскопічна теорія відбиття та заломлення хвиль на шаруватих кристалах / С. М. Латинін // Український фізичний журнал. − 2001. − Т. 46, № 1. − С. 88-93.
9. Litzman O. The Ewald dynamical theory of reflection and transmission of light by a dielectric slab. The extinction theorem in spatially dispersive media / O. Litzman // Optic Acta. − 1978. − V. 85, № 6. − P. 509-526.
10. Puri Ashok. Extinction theorem, boundary conditions and dispersion equations in bounded gyrotropic media / Ashok Puri, Zoseph Birman // Optics Communications. − 1981. − V. 37, № 2. − P. 81-85.
11. Андреев А.В. Численное исследование оптических коэффициентов отражения и пропускания поверхности периодической нанорешетки из металлических нанонитей / А. В. Андреев, А. А. Коновко, И. Р. Прудников // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2009. – № 11. – С. 14-23.

Поступила в редакцию 25.03.2010 г.