Изв. АН Армянской ССР, Физика, 9, 451—462 (1974)

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В ОДНООСНЫХ ПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ

Р. Г. ТАРХАНЯН

Исследовано влияние слабой пространственной дисперсии оптических колебаний решетки одноосных полярных кристаллов на распространение электромагнитных волн. Показано, что как пространственная дисперсия, так и анизотропия приводят к ряду новых интересных эффектов, в частности, к существенному изменению частотной зависимости показателей преломления рассматриваемых волн, к различию оптических свойств одноосных кристаллов разных сингоний, к появлению новых волн в окрестности частот длинноволновых оптических фононов и зависимости коэффициента отражения при нормальном падении от ориентации оси кристалла относительно отражающей грани, отсутствующей при той же геометрии, если пространственная дисперсия не учитывается и т. д. Получены дополнительные граничные условия, позволяющие однозначно определить амплитуды всех волн. Вычислен коэффициент отражения при различных ориентациях оси кристалла относительно отражающей поверхности как для нормального, так и для наклонного падения внешней электромагнитной волны при наличии пространственной дисперсии.

1. Оптические свойства полярных кристаллов существенным образом определяются наличием в них оптических колебаний решетки [1]. В настоящей работе исследуется ряд эффектов, обусловленных пространственной дисперсией оптических фононов в одноосных полярных кристаллах. Мы рассмотрим, в частности, проблему дополнительных граничных условий, возникающую в связи с появлением новых поляритонных мод в окрестности резонансных частот, и влияние последних на спектр отражения кристалла.

Рассмотрим для простоты одноосный негиротропный непроводящий кристалл с двумя ионами в элементарной ячейке. Плотность лагранжиана и вытекающее из нее уравнение движения для оптических колебаний решетки в отсутствие диссипации энергии могут быть записаны в виде

$$L=\frac{1}{2}\left(\dot{\vec{W}}^2-\alpha_{ij}W_iW_j+\lambda_{ijlm}\frac{\partial W_i}{\partial x_j}\frac{\partial W_l}{\partial x_m}+\chi_{ij}E_iE_j\right)-\beta_{ij}W_iE_j+ + \frac{E^2-H^2}{8\pi}, \tag{1}$$

$$\ddot{W}_i=-\alpha_{ij}W_j-\beta_{ij}E_j-\lambda_{ijlm}\frac{\partial^2 W_l}{\partial x_j\partial x_m}, \tag{2}$$

где $\vec{W}$ характеризует относительное смещение подрешеток; тензоры $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ и $\hat{\chi}$ диагональны в системе координат с осью z вдоль оптической оси кристалла и имеют по две независимые компоненты вдоль ($\parallel$) и поперек ($\perp$) оси кристалла, при этом

$$\alpha_l = \omega^2_{\tau l}, \quad \beta_l = \omega_{\tau l}\sqrt{\frac{\varepsilon^0_l - \varepsilon^\infty_l}{4\pi}}, \quad \gamma_l = \frac{\varepsilon^\infty_l - 1}{4\pi},$$

ε^∞_l и ε^0_l — компоненты тензоров высокочастотной и статической диэлектрической проницаемости, $\varepsilon^0_l = \varepsilon^0_\perp$ при $i = x, y$ и $\varepsilon^0_\parallel$ при $i = z$, то же относится к величинам ε^∞_l и $\omega_{\tau l}$, $\omega_{\tau\parallel}$ и $\omega_{\tau\perp}$ — частоты длинноволновых поперечных оптических колебаний, распространяющихся вдоль и поперек оси кристалла. Компоненты тензора λ_{ijkl} сравнимы с квадратом скорости звука $s^2 \sim 10^{11}$ *см²/сек²*. Последний член в (2) описывает пространственную дисперсию оптических колебаний решетки с точностью до членов порядка $\frac{\lambda k^2}{\omega^2} \ll 1$.

Для вектора электрической индукции $\vec{D} = \hat{\varepsilon}\vec{E}$ имеем

$$\vec{D} = 4\pi\frac{\partial L}{\partial \vec{E}} = \hat{\varepsilon}^\infty \vec{E} - 4\pi\hat{\beta}\vec{W}. \tag{3}$$

Полагая $\vec{E} \sim \vec{W} \sim e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ и исключая $\vec{W}$ из уравнений (2), (3), для компонент тензора диэлектрической проницаемости получим

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \vec{k}) = \left(\varepsilon^\infty_i + \frac{\omega^2_i}{\Omega^2_i}\right)\delta_{ij} + (1 - \delta_{ij})\frac{k^2\Lambda_{ij}\omega_i\omega_j}{\Omega^2_i\Omega^2_j}, \tag{4}$$

где

$$\omega_i = \omega_{\tau i}\sqrt{\varepsilon^0_i - \varepsilon^\infty_i}, \quad \Omega^2_i = \omega^2_{\tau i} - \omega^2 - k^2\Lambda_{ii},$$

$$\Lambda_{ij} = \lambda_{ikl j}\, s_k\, s_l, \quad \vec{s} = \frac{\vec{k}}{k}.$$

В случае гексагональных кристаллов компоненты симметричного тензора Λ_{ij} имеют вид

$$\begin{aligned}
\Lambda_{xx} &= \lambda_{11}\, s_x^2 + \lambda_{66}\, s_y^2 + \lambda_{44}\, s_z^2, & \Lambda_{xy} &= (\lambda_{11} - \lambda_{66})\, s_x s_y,\\
\Lambda_{yy} &= \lambda_{66}\, s_x^2 + \lambda_{11}\, s_y^2 + \lambda_{44}\, s_z^2, & \Lambda_{xz} &= (\lambda_{13} + \lambda_{44})\, s_x\, s_z,\\
\Lambda_{zz} &= \lambda_{44}\,(s_x^2 + s_y^2) + \lambda_{33}\, s_z^2, & \Lambda_{yz} &= (\lambda_{13} + \lambda_{44})\, s_y\, s_z
\end{aligned} \tag{5}$$

(ось z направлена вдоль оси 6-го порядка).

Для тетрагональных и тригональных кристаллов Λ_{ij} существенно отличаются друг от друга, а также от (5) [2, 3].

Соотношения (4) приводят к трем выводам, указывающим на существенную зависимость оптических свойств полярных кристаллов от пространственной дисперсии оптических фононов:

1) появление недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости (даже для кубических кристаллов);

2) отличие ε_{xx} от ε_{yy} (зависящее от направления волнового вектора $\vec{s}$);

3) оптические свойства одноосных кристаллов разных сингоний (тетрагональных, тригональных, гексагональных), которые в отсут-

ствие пространственной дисперсии оптических фононов одинаковы, при ее наличии становятся различными вследствие различий тензоров Λ_{ij}.

2. Распространяющиеся в полярном диэлектрике волны (поляритоны) представляют собой наложение электромагнитных и оптических колебаний. Спектр последних при неучете запаздывающего взаимодействия между зарядами ($\operatorname{rot}\vec{E}=0$) определяется решением уравнений

$$(\Gamma_{ij}-\omega^2\delta_{ij})\,W_j=0, \tag{6}$$

где

$$\Gamma_{ij}=\omega^2_{\perp i}\delta_{ij}-k^2\Lambda_{ij}+\frac{\omega_i\omega_j\,s_i\,s_j}{\varepsilon^\infty_{kl}\,s_k\,s_l}. \tag{6a}$$

Отсюда следует, что в заданном направлении распространяются три волны с взаимно ортогональными векторами $\vec{W}$ и с частотами, которые удовлетворяют бикубическому уравнению

$$|\Gamma_{ij}-\omega^2\delta_{ij}|=0. \tag{7}$$

В дальнейшем мы ограничимся случаем гексагональных кристаллов. Выбирая ось x в плоскости, проходящей через ось симметрии 6-го порядка (ось z) и волновой вектор $\vec{k}$, используя (5) и (6a), для решений уравнения (7) получим

$$\omega^2=\Gamma_{yy}, \tag{8}$$

$$\omega^2=\frac{1}{2}\left(\Gamma_{xx}+\Gamma_{zz}\pm\sqrt{(\Gamma_{xx}-\Gamma_{zz})^2+4\Gamma^2_{xz}}\right). \tag{8a}$$

В поперечных оптических колебаниях с частотой (8) вектор смещения $\vec{W}$ направлен вдоль оси y, $\vec{E}=0$, но $\vec{D}\neq 0$. Оптические колебания с дисперсионным соотношением (8a) сопровождаются продольным электрическим полем

$$\vec{E}=\sqrt{4\pi}\,\frac{\omega_i\,W_i\,s_i}{\varepsilon^\infty_{kl}\,s_k\,s_l}\,\vec{s}, \tag{9}$$

а векторы $\vec{W}$ лежат в плоскости xz и имеют как продольную, так и поперечную (относительно $\vec{k}$) компоненты.

В изотропной среде электромагнитные волны взаимодействуют лишь с поперечными оптическими колебаниями. В анизотропной среде появляются новые ветви продольно-поперечных поляритонов, которые для одноосного кристалла без учета пространственной дисперсии исследовались в [4]. При наличии пространственной дисперсии надо решить уравнения (2) и (3) совместно с уравнениями Максвелла. Для гексагональных кристаллов дисперсионные соотношения принимают вид

$$\frac{c^2k^2}{\omega^2}=\varepsilon_{yy}, \tag{10}$$

$$\frac{c^2k^2}{\omega^2} = \frac{\varepsilon_{xx}\,\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_{xx}\,s_x^2 + \varepsilon_{zz}\,s_z^2 + 2s_x\,s_z\,\varepsilon_{xz}}, \tag{11}$$

где ε_{ij} заданы в (4).

Соотношение (10) характеризует поперечные $(\vec{E} \parallel \vec{W} \parallel oy)$, а (11)— продольно-поперечные ($\vec{E}$ и $\vec{W}$ лежат в плоскости xz) поляритоны. Уравнение (10) квадратично относительно k^2; его решение показывает, что при одной и той же частоте в кристалле могут возбуждаться две поперечные нормальные волны с показателями преломления

$$n_{1,2}^2 = \frac{1}{2}\left[\varepsilon_\perp^\infty - \frac{c^2}{\Lambda_{yy}}\left(1 - \frac{\omega_{T\perp}^2}{\omega^2}\right)\right] \pm \left\{\frac{1}{4}\left[\varepsilon_\perp^\infty - \frac{c^2}{\Lambda_{yy}}\left(1 - \frac{\omega_{T\perp}^2}{\omega^2}\right)\right]^2 - \right.$$

$$\left. - \frac{c^2}{\Lambda_{yy}}\,\varepsilon_\perp^\infty\left(\frac{\omega_{L\perp}^2}{\omega^2} - 1\right)\right\}^{1/2}, \tag{12}$$

где $n = \dfrac{ck}{\omega}$, $\omega_{L\perp} = \omega_{T\perp}\sqrt{\dfrac{\varepsilon_\perp^0}{\varepsilon_\perp^\infty}}$ — частота продольных оптических фононов при $k = 0$, распространяющихся поперек оси кристалла. Оба решения (12) вещественны и положительны лишь в области частот $\omega < \omega_-$,

$$\omega_- = \frac{c\omega_{T\perp}}{\sqrt{\Lambda_{yy}}}\left(\sqrt{\varepsilon_\perp^0 + \frac{c^2}{\Lambda_{yy}}} + \sqrt{\varepsilon_\perp^0 - \varepsilon_\perp^\infty}\right)^{-1} \approx \omega_{T\perp}\left(1 - \frac{\sqrt{\Lambda_{yy}(\varepsilon_\perp^0 - \varepsilon_\perp^\infty)}}{c}\right); \tag{13}$$

при этом одно из них с точностью до членов порядка $\dfrac{\Lambda_{yy}}{c^2}$ совпадает с показателем преломления поперечной волны в отсутствие пространственной дисперсии

$$n^2 = \varepsilon_\perp^\infty\,\frac{\omega^2 - \omega_{L\perp}^2}{\omega^2 - \omega_{T\perp}^2}, \tag{14}$$

а второе решение

$$n^2 \approx \frac{c^2}{\Lambda_{yy}}\left(\frac{\omega_{T\perp}^2}{\omega^2} - 1\right) \tag{15}$$

соответствует упругой волне (8) с малой $\left(\sim \dfrac{\Lambda_{yy}}{c^2}\right)$ примесью электромагнитных колебаний. Заметим, что формулой (15) можно пользоваться лишь при $\dfrac{|\omega_{T\perp} - \omega|}{\omega_{T\perp}} \ll 1$, так как вне этой области частот n^2 очень велик и нарушается условие применимости макроскопического подхода к задаче.

При $\omega = \omega_-$ уравнение (10) имеет двукратно вырожденный положительный корень, соответствующий поперечной волне с показателем преломления

$$n^2 = \varepsilon_\perp^\infty + \sqrt{(\varepsilon_\perp^0 - \varepsilon_\perp^\infty)\left(\varepsilon_\perp^0 + \frac{c^2}{\Lambda_{yy}}\right)} \approx \frac{c}{\sqrt{\Lambda_{yy}}}\sqrt{\varepsilon_\perp^0 - \varepsilon_\perp^\infty}. \tag{16}$$

В области частот $\omega_- < \omega < \omega_+$ (ω_+ отличается от ω_- лишь знаком последнего слагаемого в (13)), включающей $\omega_{T\perp}$, оба решения (12) комплексны, а в области $\omega_+ < \omega < \omega_{L\perp}$ они вещественны, но отрицательны, т. е. объемные волны не существуют. Лишь в области $\omega > \omega_{L\perp}$ становится возможным распространение волны с показателем преломления (14); вторая волна при этом не существует ($n^2 < 0$). Отметим, что указанные результаты справедливы при условии

$$(\varepsilon_-^{\infty})^{-1} - (\varepsilon_{\perp}^{0})^{-1} > \frac{\Lambda_{yy}}{c^2}, \tag{17}$$

что обычно выполняется (напр., в кристаллах ZnS, CdS, $CdSe$, $GaSe$). При выполнении обратного неравенства в области частот $\omega_+ < \omega < \omega_{L\perp}$ решения (12) вещественны, положительны и соответствуют двум новым волнам, обязанным своим появлением учету пространственной дисперсии.

Итак, пространственная дисперсия устраняет резонанс поперечной волны при $\omega = \omega_{T\perp}$ и приводит к появлению дополнительной волны. Вследствие этого структура отражения в окрестности $\omega_{T\perp}$ существенно изменяется по сравнению с той, которую можно ожидать при пренебрежении пространственной дисперсией.

Пусть плоско-поляризованная волна частоты ω падает нормально на поверхность кристалла $\zeta = 0$, причем оптическая ось кристалла oz составляет произвольный угол φ с осью $o\zeta$. Выберем ось oy перпендикулярно к плоскости $z\zeta$. Если электрический вектор в падающей волне поляризован вдоль оси y, то прошедшая внутрь кристалла энергия переносится поперечными поляритонами, при этом вектор электрического поля имеет вид

$$\vec{E} = (0,\ E,\ 0), \quad E = e^{-i\omega t}\left(E_1 e^{i\frac{\omega}{c} n_1 \zeta} + E_2 e^{i\frac{\omega}{c} n_2 \zeta}\right), \tag{18}$$

где $n_{1,2}$ даются (12). Обычные граничные условия

$$E_0 + E' = E_1 + E_2, \tag{19а}$$

$$E_0 - E' = n_1 E_1 + n_2 E_2 \tag{19б}$$

(E_0 и E' — амплитуды падающей и отраженной волн) не позволяют определить амплитуды отраженной и преломленных волн. Для однозначного определения коэффициента отражения в этом случае требуется третье граничное условие (см. следующий пункт).

Аналогичная ситуация возникает в случае, когда электрический вектор в нормально падающей волне лежит в плоскости $z\zeta$. При этом в кристалле возбуждаются продольно-поперечные волны с дисперсионным соотношением (11). В отсутствие пространственной дисперсии имеется одна такая волна с вещественным (в трех областях частот) и чисто мнимым (в двух областях) значением показателя преломления; волна имеет две отсечки ($n = 0$) при $\omega = \omega_{L\perp}$ и $\omega_{L\parallel}$ и два резонанса

($n \to \infty$) на частотах продольно-поперечных фононных ветвей (8a) в центре зоны Бриллюэна. Анализ показывает, что пространственная дисперсия устраняет резонансы и приводит к появлению уже двух дополнительных волн, так что при заданной частоте волновое число k имеет, вообще говоря, три различных значения.

В случае $\varphi \neq 0, \frac{\pi}{2}$ из (11) и (4) с точностью до членов $\sim \frac{\Lambda_{ij}}{c^2} \equiv \widetilde{\Lambda}_{ij}$ получим бикубическое дисперсионное уравнение

$$\widetilde{\Lambda}_{xx}\widetilde{\Lambda}_{zz}n^6 - (\widetilde{\Lambda}_{xx} + \widetilde{\Lambda}_{zz})\left(\frac{\omega_1^2}{\omega^2} - 1\right)n^4 + \left(1 - \frac{\Omega_-^2}{\omega^2}\right)\left(1 - \frac{\Omega_+^2}{\omega^2}\right)n^2 +$$
$$+ \frac{\varepsilon_\perp^\infty \varepsilon_\parallel^\infty}{\varepsilon_\perp^\infty s_x^2 + \varepsilon_\parallel^\infty s_z^2}\left(1 - \frac{\omega_{L\perp}^2}{\omega^2}\right)\left(1 - \frac{\omega_{L\parallel}^2}{\omega^2}\right) = 0, \tag{20}$$

где

$$\Omega_\pm^2 = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_\perp^\infty s_x^2 + \varepsilon_\parallel^\infty s_z^2\right)^{-1}\left\{\omega_{T\perp}^2\left(\varepsilon_\parallel^\infty s_z^2 + \varepsilon_\perp^0 s_x^2\right) + \omega_{T\parallel}^2\left(\varepsilon_\perp^\infty s_x^2 + \varepsilon_\parallel^0 s_z^2\right) \pm\right.$$
$$\pm\left[\left(\omega_{T\perp}^2\left(\varepsilon_\parallel^\infty s_z^2 + \varepsilon_\perp^0 s_x^2\right) + \omega_{T\parallel}^2\left(\varepsilon_\perp^\infty s_x^2 + \varepsilon_\parallel^0 s_z^2\right)\right)^2 - 4\,\omega_{T\perp}^2\omega_{T\parallel}^2\left(\varepsilon_\perp^\infty s_x^2 +\right.\right.$$
$$\left.\left.\left. + \varepsilon_\parallel^\infty s_z^2\right)\left(\varepsilon_\perp^0 s_x^2 + \varepsilon_\parallel^\infty s_z^2\right)\right]^{1/2}\right\}, \quad s_x = \sin\varphi, \quad s_z = \cos\varphi,$$

$$\omega_1^2 = \frac{1}{\Lambda_{xx} + \Lambda_{zz}}\left[\Lambda_{xx}\omega_{T\parallel}^2 + \Lambda_{zz}\omega_{T\perp}^2\,\frac{\varepsilon_\perp^0 s_x^2 + \varepsilon_\parallel^\infty s_z^2}{\varepsilon_\perp^\infty s_x^2 + \varepsilon_\parallel^\infty s_z^2} -\right.$$
$$\left. - \Lambda_{xz}\omega_{T\perp}\omega_{T\parallel}\,\frac{2\,s_x s_z\sqrt{(\varepsilon_\perp^0 - \varepsilon_\perp^\infty)(\varepsilon_\parallel^0 - \varepsilon_\parallel^\infty)}}{\varepsilon_\perp^\infty s_x^2 + \varepsilon_\parallel^\infty s_z^2}\right].$$

Поле в кристалле представляет собой линейную комбинацию трех поляритонных мод, характеризуемых решениями уравнения (20). При $\varphi = 0$ и $\varphi = \frac{\pi}{2}$ одна из этих мод продольна, остальные две — поперечны.

Показатели преломления для поперечных волн можно получить из (12), следует лишь в случае $\varphi = \frac{\pi}{2}$ заменить индекс $\perp$ на $\parallel$. Для продольной волны имеем

$$n^2(\varphi = 0) = \frac{c^2}{\lambda_{33}}\left(\frac{\omega_{L\parallel}^2}{\omega^2} - 1\right), \quad n^2\left(\varphi = \frac{\pi}{2}\right) = \frac{c^2}{\lambda_{11}}\left(\frac{\omega_{L\perp}^2}{\omega^2} - 1\right). \tag{21}$$

Таким образом, в рассматриваемом случае электромагнитное поле внутри кристалла имеет вид

$$\vec{E} = (E_\xi, 0, E_\zeta), \ \vec{H} = (0, H, 0), \ H = e^{-i\omega t}\left(H_1 e^{i\frac{\omega}{c}n_1\zeta} +\right.$$
$$\left. + H_2 e^{i\frac{\omega}{c}n_2\zeta} + H_3 e^{i\frac{\omega}{c}n_3\zeta}\right), \tag{22}$$

где n_1, n_2 и n_3 даются решениями уравнения (20) в случае $\varphi \neq 0, \frac{\pi}{2}$ и (12), (21) в случаях $\varphi = 0$ и $\varphi = \frac{\pi}{2}$. При этом для однозначного решения задачи об отражении помимо обычных граничных условий

$$H_0 + H' = H_1 + H_2 + H_3, \tag{23}$$

$$H_0 - H' = \frac{H_1}{n_1} + \frac{H_2}{n_2} + \frac{H_3}{n_3} \tag{24}$$

необходимо установить еще два дополнительных граничных условия, связывающих амплитуды волн на поверхности кристалла.

3. В ряде работ [5—9] предложены различные дополнительные граничные условия, пригодные в той или иной мере лишь в окрестности изолированного экситонного перехода, которые не могут быть использованы в рассматриваемом нами случае пространственной дисперсии оптических фононов. Мы получим искомые дополнительные граничные условия непосредственно из уравнения движения (2), которое в модели упругого анизотропного континуума можно переписать в виде

$$\ddot{W}_i = -\alpha_{ij} W_j - \beta_{ij} E_j + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \tag{2a}$$

где $\sigma_{ij} = -\lambda_{ijlm} \frac{\partial W_l}{\partial x_m}$ — тензор напряжений. Но на свободной поверхности упруго деформированной среды имеет место [10] $\sigma_{ij} N_j = 0$, где $\vec{N}$ — единичный вектор вдоль нормали к поверхности (ось ζ). Последнее условие дает $\lambda_{i\zeta lm} k_m W_l = 0$, откуда следует простое дополнительное граничное условие

$$\vec{W}|_{\zeta=0} = 0. \tag{25}$$

Это условие аналогично граничному условию $\vec{P}_{\zeta=0} = 0$, введенному Пекаром для экситонов [5], и означает, что суммарная дополнительная поляризация, обусловленная наличием оптических колебаний решетки, обращается в нуль на границе кристалла.

В случае, когда нормально падающая волна возбуждает в кристалле поперечные волны, характеризуемые соотношениями (12), требуется лишь одно дополнительное граничное условие

$$W_{1y} + W_{2y}|_{\zeta=0} = 0. \tag{26}$$

Воспользовавшись соотношением

$$D_{\alpha y} = \varepsilon_{\perp}^{\infty} E_{\alpha y} - 4\pi\beta_{\perp} W_{\alpha y} = n_{\alpha}^2 E_{\alpha y}, \tag{27}$$

где $\alpha = 1,2$ характеризует различные поперечные поляритонные моды, из (26) получим, что на границе кристалла

$$(\varepsilon_{\perp}^{\infty} - n_1^2) E_{1y} + (\varepsilon_{\perp}^{\infty} - n_2^2) E_{2y} = 0. \tag{19в}$$

Дополнительное граничное условие (19*в*) совместно с (19*а*) и (19*б*) позволяет однозначно определить коэффициент отражения

$$R = \left|\frac{E'}{E_0}\right|^2 = \left|\frac{1-n^*}{1+n^*}\right|^2, \quad n^* = \frac{\varepsilon_\perp^\infty + n_1 n_2}{n_1 + n_2}. \tag{28}$$

В предельном случае $\lambda_{ij} \to 0$, соответствующем пренебрежению пространственной дисперсией, $n_2 \to \infty$ и $n^* = n_1$ совпадает с (14). В этом случае коэффициент отражения не зависит от угла φ между осью кристалла и нормалью к отражающей поверхности. Из (28) и (12), где $\Lambda_{yy} = \lambda_{66} \sin^2 \varphi + \lambda_{44} \cos^2 \varphi$, следует, что пространственная дисперсия приводит к появлению угловой зависимости $R(\varphi)$ — эффекту, отсутствующему при той же геометрии отражения, если пространственная дисперсия не учитывается. Пространственная дисперсия приводит к незначительному сужению области полного отражения, низкочастотный край которой смещается от $\omega_{T\perp}$ в сторону более высоких частот на величину $\sim \frac{\omega_{T\perp}}{c} \sqrt{\Lambda_{yy}(\varepsilon_\perp^0 - \varepsilon_\perp^\infty)}$ и совпадает с частотой ω_+.

В случае, когда электрическое поле в падающей волне поляризовано в плоскости $z\zeta$, требуются два дополнительных граничных условия, в качестве которых используем оставшиеся компоненты соотношения (25)

$$W_{1\xi} + W_{2\xi} + W_{3\xi}|_{\zeta=0} = 0, \tag{29а}$$

$$W_{1\zeta} + W_{2\zeta} + W_{3\zeta}|_{\zeta=0} = 0, \tag{29б}$$

где $\vec{W}_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$) — смещения, соответствующие трем продольно-поперечным волнам. С помощью уравнений Максвелла и (3) нетрудно выразить W_ξ и W_ζ через H_y. При $\varphi \neq 0, \frac{\pi}{2}$ условия (29*а*, *б*) принимают вид

$$\sum_\alpha \frac{a_\alpha H_\alpha}{n_\alpha} = 0, \tag{30а}$$

$$\sum_\alpha \frac{b_\alpha H_\alpha}{n_\alpha} = 0, \tag{30б}$$

где

$$a_\alpha = \varepsilon_{\xi\xi}^\infty - n_\alpha^2 - \frac{\varepsilon_{\zeta\xi}}{\varepsilon_{\zeta\zeta}} \varepsilon_{\xi\zeta}^\infty, \quad b_\alpha = \varepsilon_{\zeta\xi}^\infty - \varepsilon_{\zeta\zeta}^\infty \frac{\varepsilon_{\zeta\xi}}{\varepsilon_{\zeta\zeta}}.$$

Условия (30*а*, *б*) совместно с (23) и (24) приводят к следующему выражению для коэффициента отражения:

$$R = \left|\frac{H'}{H}\right|^2 = \left|\frac{1-n^*}{1+n^*}\right|^2, \quad n^* = \frac{\sum\limits_{\alpha, \beta, \gamma} n_\alpha^{-1} n_\beta^{-1} n_\gamma^{-1} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} b_\beta a_\gamma}{\sum\limits_{\alpha, \beta, \gamma} n_\beta^{-1} n_\gamma^{-1} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} b_\beta a_\gamma}, \tag{31}$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — тензор Леви—Чивита. В частных случаях $\varphi = 0$ и $\varphi = \frac{\pi}{2}$

одна из волн продольна ($H_3 = 0$), остальные две — поперечны; для них $W_{1z} = W_{2z} = 0$ и условие (29б) дает $W_{3z} \sim E_{3z} = 0$, откуда следует, что возбуждение чисто продольной волны при нормальном падении света невозможно. Дополнительное граничное условие (29а) при этом принимает вид

$$(\varepsilon_{zz}^{\infty} - n_1^2)\frac{H_1}{n_1} + (\varepsilon_{zz}^{\infty} - n_2^2)\frac{H_2}{n_2} = 0, \tag{32}$$

где $\varepsilon_{zz}^{\infty} = \varepsilon_{\perp}^{\infty}$ при $\varphi = 0$ и $\varepsilon_{\parallel}^{\infty}$ при $\varphi = \frac{\pi}{2}$. Условие (32) совместно с граничными условиями (23) и (24), в которых следует подставить $H_3 = 0$, позволяет определить коэффициент отражения; последний совпадает с (28), следует лишь в случае $\varphi = \frac{\pi}{2}$ заменить $\varepsilon_{\perp}^{\infty}$ на $\varepsilon_{\parallel}^{\infty}$ в выражении для n^* и подставить соответствующее значение φ в выражения для n_1 и n_2.

Аналогичным образом могут быть вычислены амплитуды отраженных и преломленных волн в случае наклонного падения. В Приложении приведены выражения для $R(\omega)$ при нескольких частных геометриях отражения, представляющих интерес с точки зрения эксперимента. Эти формулы могут быть использованы для интерпретации аномальных особенностей спектров наклонного отражения, обусловленных пространственной дисперсией. Они могут быть применены также для исследования низкотемпературных спектров отражения в окрестностях экситонных переходов, если заменить Λ_{ij} на $-\frac{\hbar\omega_0}{M_{ij}}$, где M_{ij} — тензор эффективной массы экситона, ω_0 — частота экситона в центре зоны Бриллюэна.

Автор признателен Л. Э. Гуревичу за ценное обсуждение.

Приложение

Приведем формулы для коэффициента отражения при наклонном падении света, полученные с помощью дополнительных граничных условий (25). Удобно написать коэффициент отражения в виде

$$R = \left|\frac{1-n^*}{1+n^*}\right|^2. \tag{П1}$$

Ниже ψ — угол падения, φ — угол преломления, причем $\sin\varphi = \frac{\sin\psi}{n}$, n — показатель преломления рассматриваемой волны,

$$\tilde{n} = \sqrt{n^2 - \sin^2\psi}.$$

Рассмотрим несколько случаев.

а) Ось кристалла $\vec{c}$ перпендикулярна к отражающей грани.

В случае s-поляризации, когда электрический вектор перпендикулярен к плоскости падения, имеем

$$n^{*}\equiv n_s^{*}=\frac{(n_1^2-\varepsilon_{\perp}^{\infty})\,\tilde{n}_2-(n_2^2-\varepsilon_{\perp}^{\infty})\,\tilde{n}_1}{\cos\psi\,(n_1^2-n_2^2)}, \tag{П2}$$

где

$$n_{1,2}^2=\frac{1}{2}\left[\varepsilon_{\perp}^{\infty}+\sin^2\psi\left(1-\frac{\lambda_{66}}{\lambda_{44}}\right)+\frac{c^2}{\lambda_{44}}\left(\frac{\omega_{T\perp}^2}{\omega^2}-1\right)\right]\pm\left\{\frac{1}{4}\left[\varepsilon_{\perp}^{\infty}+\right.\right.$$
$$\left.+\sin^2\psi\left(1-\frac{\lambda_{66}}{\lambda_{44}}\right)+\frac{c^2}{\lambda_{44}}\left(\frac{\omega_{T\perp}^2}{\omega^2}-1\right)\right]^2-\varepsilon_{\perp}^{\infty}\sin^2\psi\left(1-\frac{\lambda_{66}}{\lambda_{44}}\right)+$$
$$\left.+\frac{c^2\varepsilon_{\perp}^{\infty}}{\lambda_{44}}\left(1-\frac{\omega_{L\perp}^2}{\omega^2}\right)\right\}^{1/2}. \tag{П3}$$

В случае p-поляризации, когда вектор $\vec{E}$ лежит в плоскости падения,

$$n^{*}\equiv n_p^{*}=\frac{\sum\limits_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,\tilde{n}_{\alpha}\,b_{\gamma}(\sin\psi-a_{\beta})}{\cos\psi\sum\limits_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,a_{\beta}\,(\tilde{n}_{\gamma}-\varepsilon_{\perp}^{\infty}b_{\gamma})}, \tag{П4}$$

где

$$a_{\alpha}=\frac{\varepsilon_{\parallel}^{\infty}(n_{\alpha}^2-\varepsilon_{xx})}{n_{\alpha}\varepsilon_{xz}+\varepsilon_{xx}\cos\psi},\qquad b_{\alpha}=\frac{\varepsilon_{xz}+n_{\alpha}\cos\psi}{n_{\alpha}\varepsilon_{xz}+\varepsilon_{xx}\cos\psi}, \tag{П5}$$

n_{α} — решения бикубического уравнения (20), в ε_{ij} следует подставить $k=\dfrac{\omega}{c}n_{\alpha}$.

б) Ось $\vec{c}$ параллельна отражающей грани, плоскость падения перпендикулярна к $\vec{c}$.

В этом случае в кристалле возбуждаются две поперечные и одна продольная волна (последняя — лишь в случае p-поляризации) и ситуация такая же, как и для изотропной среды. Имеем

$$n_s^{*}=\frac{\varepsilon_{\parallel}^{\infty}+\tilde{n}_1\tilde{n}_2-\sin^2\psi}{\cos\psi\,(\tilde{n}_1+\tilde{n}_2)}, \tag{П6}$$

где

$$n_{1,2}^2=\frac{1}{2}\left[\varepsilon_{\parallel}^{\infty}-\frac{c^2}{\lambda_{44}}\left(1-\frac{\omega_{T\parallel}^2}{\omega^2}\right)\right]\pm\left\{\frac{1}{4}\left[\varepsilon_{\parallel}^{\infty}-\frac{c^2}{\lambda_{44}}\left(1-\frac{\omega_{T\parallel}^2}{\omega^2}\right)\right]^2-\right.$$
$$\left.-\frac{c^2}{\lambda_{44}}\varepsilon_{\parallel}^{\infty}\left(\frac{\omega_{L\parallel}^2}{\omega^2}-1\right)\right\}^{1/2}; \tag{П7}$$

$$n_p^{*}=\varepsilon_{\perp}^{\infty}\cos\psi\,\frac{\tilde{n}_3\left[n_1^2\tilde{n}_2(\varepsilon_{\perp}^{\infty}-n_2^2)-n_2^2\tilde{n}_1(\varepsilon_{\perp}^{\infty}-n_1^2)\right]+(n_1^2-n_2^2)\varepsilon_{\perp}^{\infty}\sin^2\psi}{\varepsilon_{\perp}^{\infty}\sin^2\psi\,(n_1^2\tilde{n}_1-n_2^2\tilde{n}_2)-n_1^2n_2^2\sin\psi\,(\tilde{n}_1-\tilde{n}_2)+(n_1^2-n_2^2)\,\varepsilon_{\perp}^{\infty}\tilde{n}_1\tilde{n}_2\tilde{n}_3}. \tag{П8}$$

Здесь $n_3 = n_1 n_2 \left(\frac{\lambda_{66}}{\varepsilon_{\perp}^{\infty}\lambda_{11}}\right)^{1/2}$, $n_{1,2}^2$ отличаются от (П7) лишь заменой индекса $\parallel$ на $\perp$ и λ_{44} на λ_{66}.

в) Ось $\vec{c}$ параллельна отражающей грани и лежит в плоскости падения.

В этом случае для n_s^* можно использовать формулу (П6), следует лишь заменить $\varepsilon_{\parallel}^{\infty}$ на $\varepsilon_{\perp}^{\infty}$ в числителе и вместо (П7) для $n_{1,2}^2$ применять (П3) с заменой в последней $\lambda_{44} \rightleftarrows \lambda_{66}$. Для n_p^* остается в силе (П4), если заменить там $\varepsilon_{\perp}^{\infty}$ на $\varepsilon_{\parallel}^{\infty}$ в знаменателе и использовать вместо (П5) выражения

$$a_\alpha = \varepsilon_{\perp}^{\infty} \frac{\tilde{n}_\alpha \sin\psi + \varepsilon_{yz}}{\tilde{n}_\alpha \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yz}\sin\psi}, \quad b_\alpha = \frac{\varepsilon_{yy} - \sin^2\psi}{\tilde{n}_\alpha \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yz}\sin\psi}, \tag{П9}$$

где $\tilde{n}_\alpha$ — решения бикубического уравнения

$$\varepsilon_{yy}\tilde{n}^2 + \varepsilon_{zz}\sin^2\psi + 2\tilde{n}\,\varepsilon_{yz}\sin\psi - \varepsilon_{yy}\varepsilon_{zz} = 0. \tag{П10}$$

При наличии соответствующего эксперимента анализ вышеприведенных формул с помощью ЭВМ позволил бы не только выяснить справедливость использованных здесь дополнительных граничных условий и допущенных приближений (напр., пренебрежение диссипативными процессами), но и получить богатую информацию об энергетическом спектре объема кристалла при наличии пространственной дисперсии.

Институт радиофизики и электроники
АН АрмССР

Поступила 8.II.1974

ЛИТЕРАТУРА

1. *М. Борн, Х. Кунь.* Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, М., 1958.
2. *Дж. Най.* Физические свойства кристаллов, ИЛ, М., 1960.
3. *Ф. П. Федоров.* Теория упругих волн в кристаллах, Изд. Наука, М., 1965.
4. *Л. Э. Гуревич, Р. Г. Тарханян.* ФТП, 6, 1716 (1972).
5. *С. И. Пекар.* ЖЭТФ, 33, 1022 (1957); 34, 1176 (1958).
6. *J. J. Hopfield, D. G. Thomas.* Phys. Rev., 132, 563 (1963).
7. *В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург.* Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов, Изд. Наука, М., 1965.
8. *G. Agarval, D. Pattanayak, E. Wolf.* Phys. Rev. Lett., 27, 1022 (1971).
9. *G. L. Birman, J. J. Sein.* Phys. Rev., B6, 2482 (1972).
10. *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.* Теория упругости, Изд. Наука, М., 1965.

ԷԼԵԿՏՐԱՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԱԼԻՔՆԵՐԻ ՏԱՐԱԾՈՒՄԸ ՄԻԱՌԱՆՑՔԱՆԻ ԻՈՆԱՅԻՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՖՈՆՈՆՆԵՐԻ ՏԱՐԱԾԱԿԱՆ ԴԻՍՊԵՐՍԻԱՅԻ ՀԱՇՎԱՌՈՒՄՈՎ

Ռ. Հ. ԹԱՐԽԱՆՅԱՆ

Դիտարկված է միառանցքանի իոնային բյուրեղների օպտիկական տատանումների տարածական դիսպերսիայի ազդեցությունը էլեկտրամագնիսական ալիքների տարածման վրա։ Ցույց է տրված, որ տարածական դիսպերսիան և անիզոտրոպիան հիմնավորապես փոխում են դիտարկվող ալիքների հատկությունները և հանգեցնում են մի շարք նոր հետաքրքիր էֆեկտների։ Արտածված են լրացուցիչ սահմանային պայմաններ, որոնց օգնությամբ ստացված են միարժեք բանաձևեր բյուրեղի անդրադարձման գործակցի համար ինչպես ուղղահայաց, այնպես էլ թեք ընկման դեպքում, անդրադարձնող մակերևույթի նկատմամբ բյուրեղի առանցքի տարբեր դիրքերի համար։

PROPAGATION OF ELECTROMAGNETIC WAVES IN UNIAXIAL POLAR CRYSTALS WITH DUE REGARD FOR THE SPATIAL DISPERSION OF OPTICAL PHONONS

R. G. TARKHANYAN

The influence of the spatial dispersion of optical vibrations on the propagation of electromagnetic waves in uniaxial polar crystals is investigated. It is shown that the spatial dispersion essentially changes the characteristics of the waves considered. The additional boundary conditions are derived. The reflection coefficient is calculated at different orientations of the crystal axis relative to the reflection surface both for the normal and the inclined incidence of the wave.