01; 06; 08

ЧАСТИЧНАЯ РЕФЛЕКТ-СИММЕТРИЯ ДВУМЕРНО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Д. К. Грамотнев, Л. А. Чернозатонский

Получены условия, которым должна удовлетворять двумерно-периодическая структура для того, чтобы при прохождении через нее поверхностная волна рассеивалась в направления, зеркально симмеричные относительно своей волновой нормали, на одних частотах с одинаковыми интенсивностями, а на других — с различными (частичная рефлект-симметрия). Предложен метод, устанавливающий соответствие между различными частичными рефлект-симметриями основной и вспомогательной структур. Определены возможные оси частичной рефлект-симметрии и рассмотрены примеры конкретных структур.

Использование двумерно-периодических структур (ДПС) [1-6] вместо традиционных одномерно-периодических может открыть широкие возможности как при совершенствовании различных радио-, акусто- и оптоэлектронных устройств, так и для моделирования и изучения волновых эффектов в кристаллических телах. Так, рассмотренная ранее в работах [3, 4] рефлект-симметрия прямоугольных ДПС может быть использована при создании ответвителей, многочастотных фильтров и резонаторов на поверхностных волнах (ПВ), а также в структурном анализе для определения взаимного расположения атомов и симметрии элементарной ячейки кристалла.

В данной работе мы продолжим изучение рефлект-симметрийных свойств в общем случае косоугольных ДПС, представляющих собой слабое возмущение поверхности изотропного твердого тела. Рассмотрим отражение волн, распространяющихся вдоль некоторой оси или по зеркально-симметричным относительно нее направлениям. Найдем условия, которым должна удовлетворять ДПС для того, чтобы рассеянные в зеркально-симметричные направления волны были одинаковыми по интенсивности лишь для некоторых из возможных отражений.

Под поверхностными подразумеваем любой тип волн, локализованных вблизи поверхности твердого тела или границы раздела двух сред: поверхностных акустических, электромагнитных, волн в планарных волноводах и т. д.

Рассмотрим вначале прямоугольные структуры. Выберем оси координат x и y параллельными векторам $\mathbf{Q}_{1,\,2}$ обратной решетки ДПС, представляющей собой полосу толщиной $L \gg d_{1,\,2}$, $1/q$; $Q_{1,\,2}=2\pi/d_{1,\,2}$; $d_{1,\,2}$ — периоды структуры по осям x и y соответственно (рис. 1, *а*), $\mathbf{q}$ (ω) — волновой вектор падающей волны частоты ω. Направления возможных отражений ПВ от ДПС получаются из условия Брэгга

$$\mathbf{q}'(\omega)-\mathbf{q}(\omega)=\mathbf{Q}_{lm}, \tag{1}$$

где $\mathbf{q}'$ (ω) — волновой вектор рассеянной волны, $\mathbf{Q}_{lm}=l\mathbf{Q}_1+m\mathbf{Q}_2$; $l, m=0, \pm1, \ldots$ (рис. 1, *б*).

При условии рассматриваемого слабого возмущения свойств поверхности интенсивности этих отражений определяются длинами взаимодействия падающих и рассеянных волн, а также модулями коэффициентов Фурье $|\Delta_{lm}|$ функции Δ (x, y), описывающей периодическое изменение свойств поверхности при наличии ДПС, например рельеф на поверхности, изменение скорости распространения волны и т. д.

$$\Delta(x, y) = \sum_{l, m} \Delta_{lm} \exp\{i\mathbf{Q}_{lm}\rho\}. \tag{2}$$

Здесь $\rho = \mathbf{i}x + \mathbf{j}y$; затухание ПВ не учитываем.

Пусть две волны ($\omega_1 = \omega_2$, $|\mathbf{q}_1| = |\mathbf{q}_2| = q$) одинаковой интенсивности падают на структуру под углами $\pm\beta$ (может быть $\beta = 0$) к некоторой оси M, перпендикулярной или параллельной границам ДПС (рис. 1). Тогда отношение интенсивностей волн, рассеянных в зеркально-симметричные относительно рассматриваемой оси направления, определяются только величинами $|\Delta_{lm}|$. Будем говорить, что структура обладает частичной рефлект-симметрией (ЧРС) относительно оси M для некоторых выбранных индексов l и m, если каждая из точек обратной решетки, определяемых этими индексами, имеет симметричную относительно M точку этой решетки, а отражения, соответствующие таким симметричным точкам, одинаковы по интенсивности. В этом случае направлен-

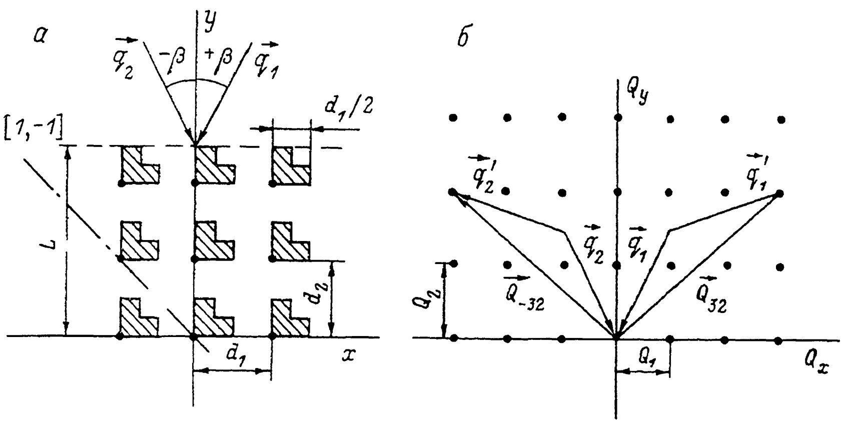


Рис. 1. ДПС в виде полосы шириной L (а) и схема симметричных относительно оси y отражений волны в пространстве обратной решетки ДПС (б).

ные вдоль рассматриваемой оси волны, проходя через ДПС, рассеиваются по направлениям, симметричным относительно M, на одних частотах с одинаковыми интенсивностями, а на других — с различными.

Например, структура обладает частичной рефлект-симметрией относительно оси y для некоторых выбранных l и m, если равенство

$$|\Delta_{lm}| = |\Delta_{-lm}| \tag{3}$$

выполняется лишь для этих значений индексов.

Существует простой метод, устанавливающий соответствие между различными частичными рефлект-симметриями исходной и вспомогательной ДПС. Помимо самостоятельного интереса, такая связь значительно облегчает задачу о нахождении условий существования ЧРС, так как позволяет свести многочисленные типы таких симметрий к нескольким основополагающим с более высокой степенью симметрии, для которых и следует найти условия существования. Сведение многих типов ЧРС к одному открывает путь классификации таких симметрий.

Рассмотрим указанный метод на примере сведения ЧРС структуры относительно оси y для значений индексов

$$l = k_1 n,\ m = k_2 p\ (n,\ p = 0,\ \pm 1, \ldots,\ k_1, k_2 \text{ — целые положительные числа}) \tag{4}$$

к полной рефлект-симметрии, т. е. частичной рефлект-симметрии вспомогательной ДПС для значений индексов (4) с $k_1 = k_2 = 1$. Тем самым по известным условиям рефлект-симметрии [3, 4] найдем условия существования таких ЧРС.

Соответствующие индексам (4) коэффициенты Фурье функции (2) имеют вид

$$\Delta_{k_1 n,\, k_2 p} = \frac{1}{S} \iint\limits_{\Omega(x,\, y)} \Delta(x,\ y) \exp\{-iQ'_1 nx - iQ'_2 py\}\, dxdy, \tag{5}$$

где $\Omega(x, y)$ — прямоугольная элементарная ячейка структуры, S — ее площадь, а $Q'_{1,\,2} = k_{1,\,2} Q_{1,\,2}$.

Разделим ячейку $\Omega(x,\ y)$ на $N = k_1 k_2$ равных прямоугольников $\Omega_i(x,\ y)$: $k_1 - 1$ — прямыми, параллельными оси y, и $k_2 - 1$ — прямыми, параллельными оси x. Наложим на каждый из этих прямоугольников все остальные $N-1$, причем значения функции $\Delta(x,\ y)$ в каждом из налагаемых прямоугольников складываются. В результате этого получаем вспомогательную ДПС с периодами $d'_1 = d_1/k_1$ и $d'_2 = d_2/k_2$, определяемую функцией

$$\tilde{\Delta}(x,\ y) = \sum_{\xi=0}^{k_1-1} \sum_{\gamma=0}^{k_2-1} \Delta(x + \xi d_1/k_1,\ y + \gamma d_2/k_2). \tag{6}$$

Выражение для коэффициентов Фурье (5) функции $\Delta(x,\ y)$ при этом можно записать в виде

$$\Delta_{k_1 n,\, k_2 p} = \frac{1}{NS_1} \iint\limits_{\Omega_1(x,\, y)} \tilde{\Delta}(x,\ y) \exp\{-iQ'_1 nx - iQ'_2 py\}\, dxdy \tag{7}$$

(S_1 — площадь элементарной ячейки $\Omega_1(x,\ y)$), т. е. с точностью до постоянного множителя N^{-1} они совпадают с коэффициентами Фурье функции (6) для любых значений индексов n и p. Таким образом, если вспомогательная структура с функцией $\tilde{\Delta}(x, y) = \tilde{\Delta}(x + d'_1,\ y + d'_2)$ рефлект-симметрична относительно оси y, то исходная ДПС с функ-

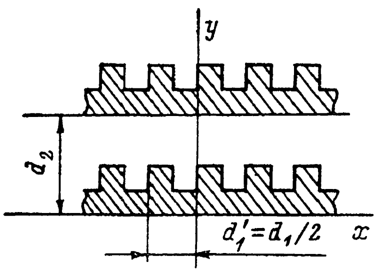


Рис. 2. Вспомогательная рефлект-симметричная ДПС $\tilde{\Delta}\ (x,\ y) = \Delta\ (x,\ y) + \Delta\ (x + d_1/2,\ \ y)$, получаемая из частично рефлект-симметричной структуры, представленной на рис. 1, *а*.

цией (2) обладает ЧРС относительно этой же оси для кратных индексов (4).

Например, структура со ступенчатым изменением функции $\Delta(x,\ y)$ (рис. 1, *а*) обладает ЧРС относительно оси y для $l = 2n$ и любых m. Вспомогательная рефлект-симметричная ДПС в этом случае определяется функцией (6) с $k_1 = 2$, $k_2 = 1$ и показана на рис. 2. Структура на рис. 3, *а* с периодами $d_{1,\,2}$ обладает ЧРС относительно оси y для $l = 3n$ и любого m.

Условие ЧРС для кратных индексов является необходимым, но не достаточным в том смысле, что при его выполнении ДПС может быть частично рефлект-симметричной и для индексов меньшей кратности. Таким образом, определяя рефлект-симметрийные свойства структуры, следует вначале исследовать данную ДПС на наличие полной рефлект-симметрии, затем на наличие ЧРС для индексов, кратных двум, трем и т. д.

Рассмотренным способом установления соответствия между различными ЧРС можно пользоваться непосредственно во всех случаях, когда индексы l или (и) m, для которых исходная ДПС частично рефлект-симметрична, имеют целый общий множитель, отличный от единицы. Так, структура обладает ЧРС относительно оси y для значений $l = am$ (a — целое положительное число, m — любое), если вспомогательная ДПС с функцией, определяемой выражением (6) с подстановкой $k_1 = a$ и $k_2 = 1$, частично рефлект-симметрична для значений индексов $l = m$. Точно так же структура обладает ЧРС для любого l и значений $m = a\,(2n+1)$, $n = 0,\ \pm 1,\ \ldots$, если вспомогательная ДПС, определяемая функцией (6) с $k_1 = 1$, $k_2 = a$, частично рефлект-симметрична для любых значений l и нечетного m. Аналогично можно рассмотреть и другие случаи частично рефлект-симметричных ДПС.

Можно принять классификацию частичных рефлект-симметрий, положив в основу каждого класса наибольшую симметрию, к которой указанным методом можно свести все остальные, относящиеся к рассматриваемому классу. Например, все ЧРС для кратных индексов (4) относятся к классу полной рефлект-симметрии, так как ДПС, обладающие такими ЧРС, имеют вспомогательные рефлект-симметричные структуры (6). Частичные же рефлект-симметрии для значений $l=am$ и любого m относятся к классу частичной рефлект-симметрии для $l=m$ и т. д.

Вывод полученных выше условий частичной рефлект-симметрии основан на том, что существование ЧРС эквивалентно наличию равенства соответствующих величин $|\Delta_{lm}|$ (см. (3)). Однако такое утверждение справедливо, вообще говоря, только при наличии не более двух рассеянных волн некоторой частоты ω. Если количество таких рассеянных волн больше двух, то, несмотря на равенство соответствующих амплитуд $|\Delta_{lm}|$ гармоник ряда Фурье (2), взаимодействие между отраженными волнами может приводить к нарушению равенства

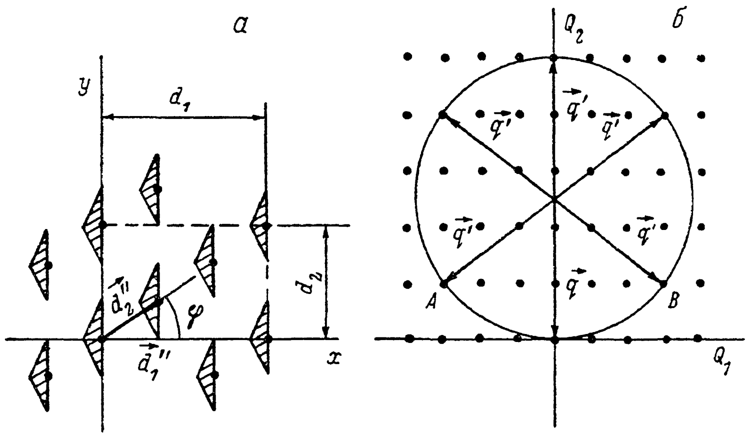


Рис. 3. Частично рефлект-симметричная относительно оси y для $l=3n$ ($n=0,\ \pm1, \ldots$) косоугольная ДПС, которую можно представить как прямоугольную с периодами $d_{1,\,2}$ (*а*), и схема шестиволнового рассеяния в пространстве обратной решетки (*б*).

интенсивностей волн в зеркально-симметричных направлениях, т. е. к нарушению ЧРС. Например, нарушение равенства интенсивностей волн, отраженных по направлениям A и B, имеет место при шестиволновом рассеянии (рис. 3, *б*), если $|\Delta_{31}|=|\Delta_{-31}|$, а $|\Delta_{34}|\neq|\Delta_{-34}|$. В то же время описанное нарушение отсутствует при любом числе взаимодействующих ПВ, если все узлы обратной решетки, лежащие на окружности Эвальда, соответствуют индексам l и m, для которых выполняется равенство (3). Такая ситуация возникает, например, если обратная решетка на рис. 3, *б* соответствует прямоугольной ДПС с периодами $d_{1,\,2}$, представленной на рис. 3, *а*. Действительно, для этой структуры функция (6) с заменой $k_1=3$, $k_2=1$ описывает рефлект-симметричную относительно оси y ДПС, а значит, для всех узлов обратной решетки на окружности Эвальда (рис. 3, *б*) равенство (3) имеет место.

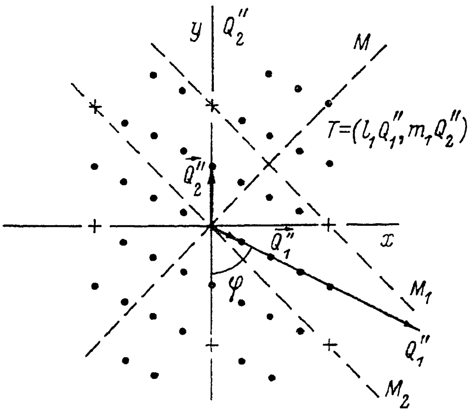
Рассмотренный метод установления соответствия между различными ЧРС применим также и при наличии затухания ПВ в ДПС. При этом рассеяние в структуре определяется коэффициентами Фурье Δ_{lm} и α_{lm} в общем случае различных функций (2) и $\alpha(x, y)=\alpha(x+d_1, y+d_2)$, последняя из которых описывает затухание ПВ в структуре. Такая ДПС обладает, например, ЧРС относительно оси y для кратных индексов (4), если вспомогательная структура, описываемая функциями (6) и

$$\tilde{\alpha}(x,\ y)=\sum_{\xi=0}^{k_1-1}\sum_{\gamma=0}^{k_2-1}\alpha(x+\xi d_1/k_1,\ y+\gamma d_2/k_2)$$

рефлект-симметрична относительно той же оси. Это будет, в частности, иметь место в случае, когда $\tilde{\Delta}(x, y)=\tilde{\Delta}(-x, y)$ и $\tilde{\alpha}(x, y)=\tilde{\alpha}(-x, y)$.

До сих пор мы рассматривали ЧРС прямоугольных структур относительно оси y. Пусть теперь волна $(\omega, \mathbf{q})$ падает в общем случае на косоугольную ДПС вдоль произвольной оси M, проходящей через точку решетки структуры с координатами (0, 0). Покажем, что если существуют хотя бы две зеркально-симметричные относительно этой оси точки обратной решетки (т. е. структура может обладать ЧРС относительно M), то элементарную ячейку такой ДПС можно выбрать прямоугольной со стороной, параллельной оси M. Другими словами, покажем, что в этом случае ось M можно рассматривать в качестве оси y в той же ДПС, но с другой (прямоугольной) элементарной ячейкой.

Пусть M_1 — прямая, проходящая через эти две симметричные точки, а M_2 — прямая, параллельная M_1 и проходящая через точку (0, 0) (рис. 4). Тогда в силу трансляционной симметрии обратной решетки на каждой из этих прямых



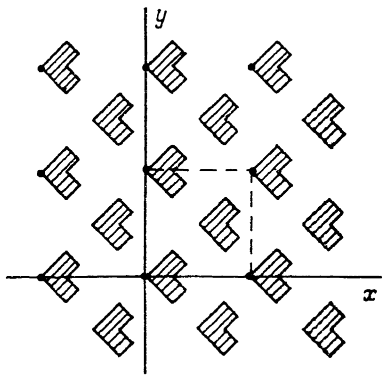


Рис. 4. Пространство обратной решетки косоугольной ДПС.

M — ось возможной ЧРС; крестиками обозначены точки обратной решетки, зеркально-симметричные относительно *M*.

Рис. 5. Структура, представленная на рис. 1, *а* ($d_1=d_2$), с выбором в качестве осей координат осей [1, 1] и [1, —1].

Штриховые линии — новая элементарная ячейка.

лежит бесконечное число точек, отстоящих друг от друга на одинаковые расстояния и симметричных относительно оси M, на которой в свою очередь также расположены равноудаленные друг от друга точки обратной решетки. При этом решетку можно достроить до прямоугольной с векторами $\mathbf{Q}_1$ и $\mathbf{Q}_2$, направленными по осям M_2 и M соответственно, а в качестве периодов ДПС можно взять величины $d_{1,2}=2\pi/Q_{1,2}$. Например, ось [1, —1] в структуре на рис. 1, *а* можно рассматривать в качестве оси y новой системы координат в той же ДПС, но с другой элементарной ячейкой (рис. 5). Таким образом, мы показали, что ЧРС относительно некоторой оси сводится к уже рассмотренному выше случаю частичной рефлект-симметрии прямоугольной ДПС относительно оси y. Если же структура не может быть представлена как прямоугольная, то она не может обладать и частичной рефлект-симметрией.

Из сказанного следует, что, проходя через начало координат, ось частичной рефлект-симметрии структуры должна пройти по крайней мере еще через одну точку обратной (или прямой) решетки ДПС. Однако это условие не является достаточным для того, чтобы относительно некоторой оси M, удовлетворяющей ему, существовали симметричные точки обратной решетки структуры, т. е. чтобы ось M могла бы быть осью ЧРС. Найдем дополнительное условие, которое вместе с только что указанным полностью определит совокупность возможных осей частичной рефлект-симметрии.

Пусть в некоторой косоугольной ДПС ось M проходит через точки (0, 0) и $T=(l_1Q_1'', m_1Q_2'')$, где l_1, m_1 — произвольные фиксированные целые числа, а $\mathbf{Q}_{1,2}''$ — векторы обратной решетки косоугольной структуры. Выберем ориентацию осей так, чтобы ось y была параллельна вектору $\mathbf{Q}_2''$ (рис. 4). Тогда ось x параллельна вектору $\mathbf{d}_1''$ прямой решетки ДПС (рис. 3, *а*), а

$$\mathbf{Q}_1''=2\pi\mathbf{i}/d_1''-(2\pi\mathbf{j}\operatorname{ctg}\varphi)/d_1'',\qquad \mathbf{Q}_2''=2\pi\mathbf{j}/(d_2''\sin\varphi), \tag{8}$$

где $\varphi=\measuredangle(\mathbf{d}_1'', \mathbf{d}_2'')$, $\mathbf{d}_2''$ — второй вектор прямой решетки.

Определяя декартовы координаты точки T

$$T_x=l_1Q_1''\sin\varphi,\qquad T_y=m_1Q_2''-l_1Q_1''\cos\varphi, \tag{9}$$

получаем уравнение прямой M_2, перпендикулярной M и проходящей через точку (0, 0),

$$y=-\frac{l_1Q_1''\sin\varphi}{m_1Q_2''-l_1Q_1''\cos\varphi}\,x. \tag{10}$$

Из трансляционной симметрии и выражений (9), (10) следует, что для существования точек обратной решетки, симметричных относительно M, необходимо и достаточно выполнение равенства

$$m_2Q_2''-l_2Q_1''\cos\varphi=-\frac{l_1l_2Q_1''^2\sin^2\varphi}{m_1Q_2''-l_1Q_1''\cos\varphi},$$

хотя бы при одном наборе двух целых чисел l_2 и m_2. Отсюда, учитывая (8), получаем искомое условие

$$\frac{d_1''}{d_2''}\,\frac{d_1''m_1-d_2''l_1\cos\varphi}{d_1''m_1\cos\varphi-d_2''l_1}\ \text{— рациональное число.} \tag{11}$$

Если мы рассматриваем ось $y=x\operatorname{tg}\varphi$, то формальное использование условия (11) недопустимо, так как знаменатель его левой части обращается в нуль. Однако в этом случае прямая M_2 совпадает с осью Q_1'' и на ней всегда лежат точки обратной решетки ДПС. Поэтому ось $y=x\operatorname{tg}\varphi$ может быть осью ЧРС, если она проходит по крайней мере через две точки обратной решетки. Условие этого заключается в рациональности выражения

$$\frac{d_1''}{d_2''}\cos\varphi\ \text{— рациональное число.} \tag{12}$$

При $\varphi=\pi/2$, т. е. когда структура прямоугольна, условие (12) выполняется автоматически, а (11) переходит в более простое: отношение d_1^2/d_2^2 должно быть рациональным числом. Если это отношение иррационально, то только две оси y и x в прямоугольной ДПС могут быть осями частичной рефлект-симметрии.

Если равенство (3) не имеет места, то наличие зеркально-симметричных отражений одинаковой интенсивности может быть обусловлено тем, что условие Брэгга для них выполняется с различной степенью точности (например, при небольшом отклонении направления распространения волны от оси y). Можно показать, что для такой ЧРС метод установления соответствия между различными симметриями остается в силе.

Полученные результаты справедливы для описания взаимодействия с периодическими структурами волн любой природы. Так, при рассмотрении электронов в кристалле его частичная рефлект-симметрия (или асимметрия), вызванная несимметричным расположением атомов в элементарной ячейке, может привести к поверхности Ферми с более низкой по сравнению с решеткой степенью симметрии. Это должно сказаться на симметрии электронных свойств рассматриваемого материала, а также может явиться причиной перекрытия зон.

Список литературы

[1] *Сандлер М. С., Свешников Б. В.* // РиЭ. 1976. Т. 21. № 5. С. 1063—1068.
[2] *Пустовойт В. И., Чернозатонский Л. А.* // Письма в ЖТФ. 1982. Т. 8. Вып. 13. С. 823—827.
[3] *Грамотнев Д. К., Пустовойт В. И., Чернозатонский Л. А.* // Письма в ЖТФ. 1987. Т. 13. Вып. 5. С. 312—316.

[4] *Chernozatonskii L. A.*, *Gramothev D. K.*, *Pustovoit V. I.* // Sol. St. Comm. 1988. Vol. 65. N 7. P. 769—773.
[5] *Pustovoit V. I.*, *Chernozatonskii L. A.* // Intern. Symp. Surface Waves in Solids and Layered Structures. Novosibirsk, 1986. Vol. 1. P. 176—182.
[6] *Shiokawa S.*, *Marizumi T.*, *Yasuda T.* // Nicon Onke Hakaisi. 1977. Vol. 33. N 10. P. 571—576.

Всесоюзный научно-исследовательский институт
физико-технических и радиотехнических измерений
Московская обл.

Поступило в Редакцию
28 декабря 1988 г.