

Поверхностные и квазиповерхностные фононы и волны трансформации в гексагональном кристалле

А. М. Косевич¹, Д. В. Мацокин², С. Е. Савотченко¹

¹*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: kosevich@ilt.kharkov.ua*

²*Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4*

Статья поступила в редакцию 18 мая 1998 г.

Сформулирована простая модель динамики слоистого кристалла, обладающего гексагональной решеткой, со слабым взаимодействием атомов в соседних базисных плоскостях. Изучены колебания, распространяющиеся в базисной плоскости, вектор смещения которых лежит в той же плоскости. Получены законы дисперсии локализованных у свободной поверхности низкочастотных (рэлеевского типа) и высокочастотных (щелевых) колебаний. Определена область существования квазиповерхностных фононов, границы которой существенно определяются формой изочастотных поверхностей двух мод объемных колебаний. Установлено, что в спектре объемных колебаний существуют выделенные частоты, при которых возникают особенности взаимодействия упругих волн с поверхностью кристалла. Показано, что дисперсионные кривые поверхностных колебаний, отщепляющихся от сплошного спектра, находят свое продолжение в этом спектре в виде зависимостей, отвечающих трансформации поперечной волны в продольную. Исследовано влияние поверхностного монослоя примесных атомов на локализованные и псевдолокализованные колебания.

Сформульовано просту модель динаміки шаруватого кристала, який має гексагональну ґратку, зі слабкою взаємодією атомів у сусідніх базисних площинах. Вивчено коливання, що розповсюджуються у базисній площині, вектор зміщення яких лежить у тій самій площині. Отримано закони дисперсії локалізованих у вільної поверхні низькочастотних (релєївського типу) і високочастотних (щілинних) коливань. Визначено область існування квазіповерхневих фононів, межі якої суттєво визначаються формою ізочастотних поверхонь двох мод об'ємних коливань. Встановлено, що в спектрі об'ємних коливань існують виділені частоти, при яких виникають особливості взаємодії пружних хвиль з поверхнею кристала. Показано, що дисперсійні криві поверхневих коливань, які відщеплюються від суцільного спектра, знаходять своє продовження у цьому спектрі у вигляді залежностей, що відповідають трансформації поперечних хвиль у повздовжні. Вивчено вплив поверхневого моношару домішкових атомів на локалізовані та псевдолокалізовані коливання.

PACS: 63.20.Pw, 63.20.Dj

Введение

Во многих приложениях многослойных кристаллических систем, основанных на использовании резонансных свойств, необходима информация об особенностях спектра колебаний, связанных с плоскими дефектами. Простейшим плоским дефектом в кристалле является его поверхность с адсорбированными на ней чужеродными атомами. Известно, что вблизи

поверхности кристалла могут возникать локализованные волны типа рэлеевских волн, глубина проникновения которых в объем обычно мала. Положение возможных частот локализованных волн существенно зависит от спектра объемных колебаний кристалла.

Исследованию поверхностных волн в сплошной среде (в длинноволновом приближении) и в кристаллической решетке

посвящена обширная литература. Упомянем лишь публикации [1–8], содержание которых близко к теме нашей работы.

Целью настоящей работы является подробный анализ спектра поверхностных и псевдоповерхностных волн, возникающих в анизотропном кристалле вблизи поверхности, а также изучение волн трансформации различного рода, имеющих выделенные частотные зависимости внутри спектра объемных колебаний. Псевдоповерхностными мы называем двухпарциальные упругие колебания вблизи поверхности с принципиально различным поведением двух составляющих (порций). Одна из них (псевдопродольная) локализована вблизи поверхности, а другая (псевдопоперечная) имеет вид стоячей волны, существующей во всем полупространстве. Интерес к таким колебаниям возрос, поскольку выяснилось, что их существование обуславливает резонансные свойства процесса рассеяния поперечной волны на плоском дефекте. Под «трансформацией волн» условно понимаются процессы рассеяния упругих волн на поверхности кристалла, при которых, например, падающая поперечная волна отражается в виде чисто продольной волны. Другим примером служит процесс, в котором падающая поперечная (продольная) волна отражается в виде чисто поперечной (продольной) волны. Поскольку при стандартном процессе рассеяния на поверхности независимые в объеме моды упругих колебаний оказываются взаимосвязанными, ясно, что указанная «трансформация» может происходить лишь при выполнении специальных условий, связывающих частоту и волновой вектор волны.

Рассмотрим кристалл с простой гексагональной решеткой, в котором атомы попарно взаимодействуют в базисной плоскости xOz и вдоль оси симметрии шестого порядка Oy , причем сила взаимодействия атомов в плоскости xOz предполагается много больше силы взаимодействия между атомами в соседних базисных плоскостях. При описании колебаний, поляризованных в базисной плоскости, мы исходим из модели, в которой учитывается сильное взаимодействие только ближайших соседей в плоскости xOz , а взаимодействие между атомами в соседних базисных плоскостях не проявляется, если плоская волна распространяется в направлении, перпендикулярном оси шестого порядка.

Таким образом, модель анизотропного кристалла при изучении колебаний,

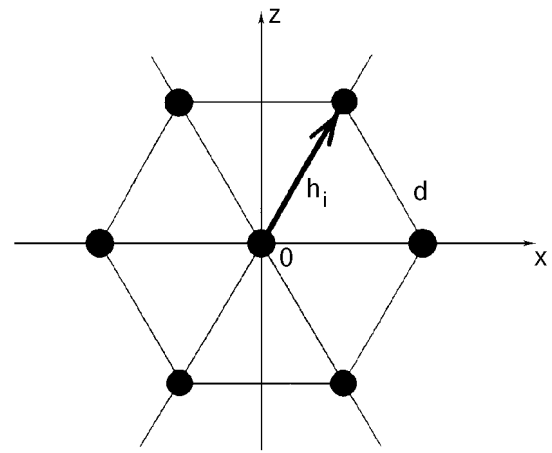


Рис. 1. Выбор ближайших соседей в базисной плоскости гексагонального кристалла.

поляризованных в базисной плоскости и распространяющихся в этой же плоскости, сводится к двумерной гексагональной решетке с центральным взаимодействием ближайших соседей. Поверхность, ограничивающая кристалл, содержит ось шестого порядка и расположена перпендикулярно базисной плоскости.

Обсуждается влияние адсорбированного на поверхности монослоя атомов на спектр поверхностных и резонансных колебаний кристалла.

1. Уравнения движения и законы дисперсии объемных колебаний

Рассматривается двумерная гексагональная решетка с межатомным расстоянием d (рис. 1). Каждый узел в такой решетке содержит ось симметрии шестого порядка. Положение атомов характеризуется координатами (x, z) , ось x направлена в сторону ближайшего соседа. Взаимодействие между всеми ближайшими атомами одинаково и характеризуется силовой константой α . Выберем атом, расположенный в начале координат $(0,0)$; его ближайшие шесть соседей имеют следующие координаты (для простоты будем считать $d = 1$):

$$\mathbf{h}_1 = (1, 0), \quad \mathbf{h}_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \mathbf{h}_3 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right),$$

$$\mathbf{h}_4 = (-1, 0), \quad \mathbf{h}_5 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \mathbf{h}_6 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right).$$

Тогда потенциальная энергия взаимодействия выбранного атома с ближайшими соседями может быть записана как

$$U = \frac{\alpha}{2} \sum_{\mathbf{n}} [\delta l(\mathbf{n})]^2, \quad (1)$$

где удлинение

$$\delta l(x, z) = \sqrt{(x + \Delta u_x(x, z))^2 + (z + \Delta u_z(x, z))^2} - 1;$$

приращение $\Delta u_i(x, z) = u_i(x, z) - u_i(0, 0)$, а суммирование проводится по всем ближайшим соседям. Имея потенциальную энергию (1), нетрудно написать уравнения движения гармонических колебаний атомов:

$$\begin{cases} \frac{m}{\alpha} \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = -3u_x(0, 0) + \frac{1}{4}[u_x(\mathbf{h}_2) + u_x(\mathbf{h}_3) + u_x(\mathbf{h}_6) + u_x(\mathbf{h}_5)] + \frac{\sqrt{3}}{4}[u_z(\mathbf{h}_2) + u_z(\mathbf{h}_6) - u_z(\mathbf{h}_5) - u_z(\mathbf{h}_3)] + u_x(\mathbf{h}_1) + u_x(\mathbf{h}_4), \\ \frac{m}{\alpha} \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = -3u_z(0, 0) + \frac{3}{4}[u_z(\mathbf{h}_2) + u_z(\mathbf{h}_3) + u_z(\mathbf{h}_6) + u_z(\mathbf{h}_5)] + \frac{\sqrt{3}}{4}[u_x(\mathbf{h}_2) + u_x(\mathbf{h}_6) - u_x(\mathbf{h}_3) - u_x(\mathbf{h}_5)]. \end{cases} \quad (2)$$

Начнем с анализа собственных объемных колебаний идеальной решетки. Тогда интересующее нас смещение выберем в стандартном виде:

$$\mathbf{u}(x, z) = \mathbf{u}_0 e^{i(kx + qz - \omega t)}. \quad (3)$$

Подставляя (3) в уравнения движения (2), получаем систему однородных алгебраических уравнений относительно компонент вектора \mathbf{u}_0 (индекс «0» для упрощения записи будем опускать):

$$\begin{cases} u_x \left(\lambda - 5 + 4 \cos^2 \frac{k}{2} + \cos \frac{k}{2} \cos \frac{\sqrt{3}q}{2} \right) - u_z \sqrt{3} \sin \frac{k}{2} \sin \frac{\sqrt{3}q}{2} = 0, \\ u_x \sqrt{3} \sin \frac{k}{2} \sin \frac{\sqrt{3}q}{2} - u_z \left(\lambda - 3 + 3 \cos \frac{k}{2} \cos \frac{\sqrt{3}q}{2} \right) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

где $\lambda = m\omega^2/\alpha$. Из (4) следует характеристическое уравнение

$$(\lambda - 5 + 4a^2 + ab)(\lambda - 3 + 3ab) = 3(1 - a^2)(1 - b^2), \quad (5)$$

где $a \equiv \cos(k/2)$, $b \equiv \cos(\sqrt{3}q/2)$. Квадратичное относительно λ уравнение (5) определяет две независимые ветви объемных колебаний, которые будем называть в дальнейшем псевдопродольной (l -ветвь, вышележащая) и псевдопоперечной (t -ветвь, нижележащая).

Сплошной спектр объемных колебаний состоит из двух частично перекрывающихся ветвей, законы дисперсии которых определяются из характеристического уравнения (5):

$$\lambda_{l,t}(k, q) = 2[2 - a(a + b)] \pm \sqrt{D}, \quad (6)$$

$$D = 4[2 - a(a + b)]^2 - 3[4 - 3a^2 + b^2 - 2ab(3 - 2a^2)],$$

где знаки «+» — для l -ветви и «-» — для t -ветви.

Основную зону Бриллюэна для рассматриваемой гексагональной решетки удобно выбрать следующим образом: $-(2\pi/\sqrt{3}) < q < (2\pi/\sqrt{3})$, $-2\pi < k < 2\pi$. Спектры частот объемных гармонических колебаний (6) в зависимости от волнового числа k в пределах $0 < k < \pi$ и $0 < q < 2\pi/\sqrt{3}$ приведены на рис. 2 (заштрихованные области). Кривая 1 — нижняя

граница сплошного спектра, представляющая собой огибающую кривых $\lambda = \lambda(k, q)$, соответствующих минимальным λ при каждом k . Кривые 2, 3 — верхняя граница псевдопоперечной ветви, соответствующая $q = 2\pi/\sqrt{3}$. Кривая 4 — нижняя граница псевдопродольной ветви. Кривая 5 — верхняя

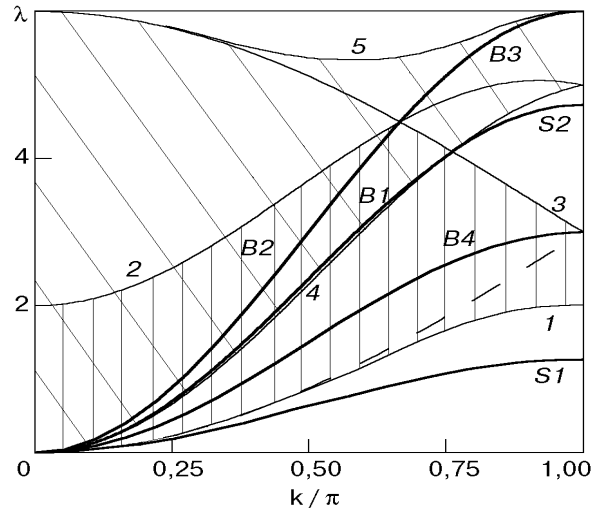


Рис. 2. Спектры частот объемных колебаний (заштрихованные области), поверхностных волн $S1$ и $S2$, волн трансформации $B1$, $B2$, $B3$ и $B4$ в зависимости от волнового числа k . Вертикальная штриховка соответствует псевдопоперечной ветви, наклонная — псевдопродольной.

граница псевдопродольной ветви, также огибающая, соответствующая максимальным λ при каждом k .

В сплошном спектре объемных колебаний имеется высокочастотная щель, примыкающая к границе зоны Бриллюэна и образованная пересечением нижней граничной линии псевдопродольной ветви и верхней граничной линии псевдопоперечной ветви в точке $\lambda_0(k_0) = 3(1 + \sqrt{3})/2$ при $k_0 = 2 \arccos [(\sqrt{3} - 1)/2]$.

В силу того, что каждый узел гексагональной решетки находится на оси симметрии шестого порядка, все уравнения движения, а значит и законы дисперсии в области малых значений волновых чисел (длинноволновое приближение), должны перейти в уравнения теории упругости изотропного твердого тела. Действительно, раскладывая при $k \ll 1$ выражение (6), можно получить длинноволновые законы дисперсии объемных колебаний, из которых нетрудно определить скорости $c = \omega/k$ поперечных и продольных звуковых волн, распространяющихся в объеме кристалла:

$$c_t^2 = \frac{3\alpha}{8m}, \quad c_l^2 = \frac{9\alpha}{8m}. \quad (7)$$

Таким образом, в рассматриваемой модели соотношение между продольной звуковой скоростью и поперечной следующее: $c_l = \sqrt{3}c_t$. То есть можно сказать, что рассматриваемые колебания гексагонального кристалла эквивалентны колебаниям изотропного твердого тела с коэффициентами Ламэ $\lambda = \mu = 3\alpha/8$, что отвечает коэффициенту Пуассона $\sigma = \lambda/[2(\lambda + \mu)] = 1/4$.

2. Влияние свободной поверхности на сплошной спектр частот объемных колебаний кристалла

Пусть кристалл заполняет полупространство $z \geq 0$. Тогда свободную поверхность будем моделировать обрывом взаимодействия между атомами граничного слоя $z = 0$ и ближайшего слоя $z < 0$. Уравнения движения атомов поверхностного слоя, которые в рассматриваемой задаче будут играть роль граничных условий к объемным уравнениям (2), будут иметь вид

$$\begin{cases} \frac{m}{\alpha} \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = -\frac{3}{2}u_x(0,0) + u_x(\mathbf{h}_1) + u_x(\mathbf{h}_4) + \frac{1}{4}[u_x(\mathbf{h}_2) + u_x(\mathbf{h}_3)] + \frac{\sqrt{3}}{4}[u_z(\mathbf{h}_2) - u_z(\mathbf{h}_3)], \\ \frac{m}{\alpha} \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = -\frac{3}{2}u_z(0,0) + \frac{3}{4}[u_z(\mathbf{h}_2) + u_z(\mathbf{h}_3)] + \frac{\sqrt{3}}{4}[u_x(\mathbf{h}_2) - u_x(\mathbf{h}_3)]. \end{cases} \quad (8)$$

Поскольку в рассматриваемой кристаллической решетке могут распространяться две волны вдоль оси x , вектор смещения запишем в виде

$$u_x(x, z) = (u_t e^{iq_t z} + u_l e^{iq_l z}) e^{i(kx - \omega t)}, \quad (9)$$

$$u_z(x, z) = (\Gamma_t u_t e^{iq_t z} + \Gamma_l u_l e^{iq_l z}) e^{i(kx - \omega t)},$$

где собственные векторы объемных уравнений (4) суть

$$\Gamma_\mu = \frac{u_{z\mu}}{u_{x\mu}} = \frac{\lambda - 5 + 4a^2 + ab_\mu}{\sqrt{3(1 - a^2)(1 - b_\mu^2)}} = \frac{\sqrt{3(1 - a^2)(1 - b_\mu^2)}}{\lambda - 3 + 3ab_\mu}, \quad (10)$$

$\mu = l, t$; корни характеристического уравнения (5) для соответствующих ветвей колебаний равны

$$b_\mu = \frac{1}{3} [a[9 - 2(\lambda + 3a^2)] \pm \sqrt{d}], \quad (11)$$

$$d = a^2[9 - 2(\lambda + 3a^2)]^2 - 3[\lambda^2 + 4\lambda(a^2 - 2) + 3(4 - 3a^2)].$$

Подставив выражения для компонент вектора смещения (9) в граничные уравнения (8), получим систему алгебраических однородных уравнений относительно амплитуд колебаний в поверхностной волне

$$\sum_{\mu=l,t} u_\mu C_{j\mu} = 0, \quad (j = 1, 2), \quad (12)$$

где элементы матрицы $C_{j\mu}$ ($\mu = l, t$) имеют вид

$$\begin{aligned} C_{1\mu} &= \frac{9}{2} - \lambda - 4a^2 - \frac{1}{2}[a + i\Gamma_\mu \sqrt{3(1 - a^2)}] \times \\ &\quad \times (b_\mu + \sqrt{b_\mu^2 - 1}), \\ C_{2\mu} &= \left\{ \frac{3}{2}[a(b_\mu + \sqrt{b_\mu^2 - 1}) - 1] + \lambda \right\} \Gamma_\mu - \\ &\quad - i \frac{1}{2} \sqrt{3(1 - a^2)} (b_\mu + \sqrt{b_\mu^2 - 1}). \end{aligned} \quad (13)$$

Из условия разрешимости системы уравнений (12) следует уравнение для нахождения возможных значений λ :

$$C_{1t}C_{2l} - C_{1l}C_{2t} = 0. \quad (14)$$

В длинноволновом пределе дисперсионное уравнение (14) переходит в известное уравнение для фазовой скорости $c = \omega/k$ рэлеевской волны в изотропном полупространстве [2]

$$4\kappa_l\kappa_t = \left(2 - \frac{c^2}{c_t^2}\right)^2 k^2, \quad (15)$$

где $\kappa_\mu = k\sqrt{1 - c^2/c_\mu^2}$, $\mu = l, t$. Параметры κ_l и κ_t характеризуют скорости убывания продольной и поперечной мод соответственно: $u_\mu(x, z) = u_\mu^0 \exp(-\kappa_\mu z) e^{ikx}$. Уравнение (15) определяет фазовую скорость обычной рэлеевской волны, локализованной у свободной поверхности изотропного твердого тела и обладающей скоростью c_R , квадрат которой равен

$$c_R^2 = c_t^2 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

Аналогичный результат был получен для двумерной квадратной решетки в [12]. Фазовая скорость поверхностной волны при произвольных k не может быть записана в явном виде. Однако при любых значениях k закон дисперсии этой поверхностной волны может быть получен численными методами. Его график приведен на рис. 2 (кривая $S1$).

Известно, что тип пространственного убывания локализованной волны определяется формой сечения изочастотной поверхности [11]. Если изочастотные сечения выпуклые относительно направления распространения, то колебания убывают монотонно в глубину кристалла, а в случае невыпуклых — поверхностные волны могут быть только так называемыми обобщенными. Смещения в обобщенной поверхностной волне, убывая с ростом глубины, осциллируют с некоторой характерной длиной волны, определяемой формой невыпуклой изочастотной поверхности.

При $k < \pi/2$ убывание волны $S1$ монотонное, а в интервале значений $\pi/2 < k < \pi$ убывание колебаний в $S1$ носит осциллирующий характер, так как здесь волновые числа q_μ имеют как вещественную, так и мнимую части, и волна становится обобщенной рэлеевской.

Предельное значение частоты поверхностных колебаний для этой низкочастотной волны на

границе зоны Бриллюэна ($k = \pi$) равно $\lambda_s^{(low)}(\pi) = 3 - \sqrt{3}$.

Помимо волны рэлеевского типа существует также локализованная высокочастотная щелевая волна $S2$ в области значений волновых чисел, близких к границе зоны Бриллюэна (рис. 2). Волна $S2$ является обычной поверхностной волной, затухающей монотонно от слоя к слою. Оказалось, что кривая $S2$ начинается в точке сплошного спектра $\lambda_0(k_0) = 3(1 + \sqrt{3})/2$ при $k_0 = 2 \arccos[(\sqrt{3} - 1)/2]$ (точка пересечения нижней границы псевдопродольной и верхней границы псевдопоперечной ветвей объемных колебаний) и заканчивается на границе зоны Бриллюэна, где $\lambda_s^{(gap)}(\pi) = 3 + \sqrt{3}$.

Уравнение (15) помимо корней, соответствующих вещественным κ_μ (т.е. экспоненциально затухающим в глубину кристалла волнам), имеет корни в области сплошного спектра ($c > c_l$), соответствующие мнимым κ_μ . Этим корням отвечают $\kappa_\mu = iq_\mu$ при обязательном условии $q_t q_l < 0$ (q_t и q_l должны быть разного знака). Такие решения соответствуют, например, процессу, при котором на поверхность падает псевдопоперечная волна, $\exp(iq_t z) e^{-i\omega t}$, а отражается псевдопродольная волна $\exp(iq_l z) e^{-i\omega t}$ или наоборот. Подобный процесс превращения волны одной поляризации в волну другой поляризации известен в теории упругости как процесс трансформации волн при отражении от поверхности [8], а соответствующее дисперсионное уравнение (15) в этом случае естественно назвать уравнением трансформации. Уравнение (15) имеет два решения, отвечающие скоростям распространяющихся в объеме кристалла волн, претерпевающих трансформацию на свободной поверхности:

$$c_1^2 = c_t^2 2 \left(1 + \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad c_2^2 = 4c_t^2. \quad (16)$$

Это соответствует значениям скоростей волн трансформации в изотропном полупространстве при значении коэффициента Пуассона $\sigma = 1/4$ [8].

Распространяющаяся со скоростью c_1 волна падает на поверхность кристалла под углом $\theta_{1t} = \arctg(1 + 2/\sqrt{3})^{1/2}$ (угол падения определяется как $\tg \theta_\mu = q_\mu/k$, $\mu = l, t$) и отражается под углом $\theta_{1l} = \arctg[1/3(2/\sqrt{3} - 1)]^{1/2}$. Волна, распространяющаяся со скоростью c_2 , падает на поверхность под углом $\theta_{2t} = \pi/3$ и отражается под углом $\theta_{2l} = \pi/6$.

Естественно, что коэффициент отражения поперечной (или продольной) волны от

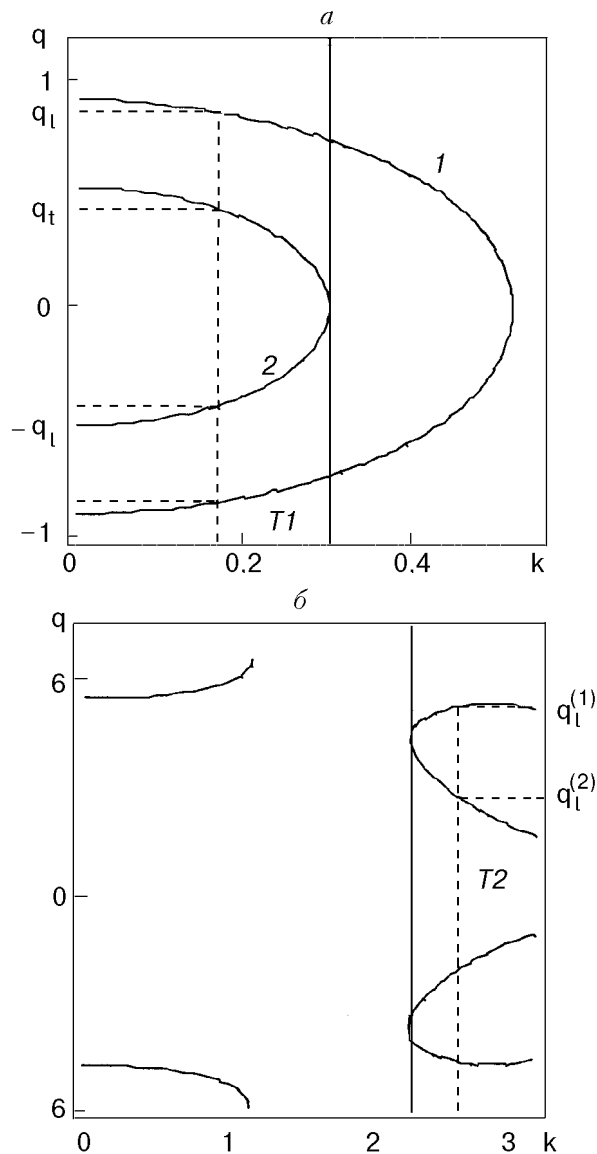


Рис. 3. Сечение изочастотных поверхностей плоскостью $k0q$. Низкочастотная область ($\lambda = 0,1$): псевдопоперечная ветвь (1), псевдопродольная ветвь (2) (а); высокочастотная область ($\lambda = 5,5$), в которой существуют только псевдопродольные колебания (б).

поверхности обращается в нуль при этих значениях выделенных частот $\omega_1 = c_1 k$ и $\omega_2 = c_2 k$. Отметим, что на приведенные результаты не влияет то, падает ли на поверхность поперечная, а отражается продольная волна, или падает продольная, а отражается поперечная.

Анализ объемного закона дисперсии (6) показывает, что у обеих ветвей есть как участки, на которых изочастотные линии в плоскости kq выпуклые (рис. 3,а), так и участки невыпуклой формы, на которых одному значению волнового числа k соответствует более двух волновых чисел q , относящихся к какой-либо одной ветви колебаний (рис. 3,б). Поэтому на участках типа

$T1$ может осуществляться трансформация волн с изменением ветви $t \leftrightarrow l$, а на участках типа $T2$ происходит трансформация волны без изменения ветви, $q_l^{(1)} \leftrightarrow q_l^{(2)}$.

Для произвольного значения волнового числа k линии трансформации волн приведены на рис. 2 (кривые $B1$ и $B2$). Оказалось, что кривая $B1$ приходит в ту же точку сплошного спектра $\lambda_0(k_0)$, в которой начинается линия поверхностной волны $S2$ (точка пересечения нижней границы псевдопродольной и верхней границы псевдопоперечной ветви объемных колебаний).

Закон дисперсии другой выделенной волны (кривая $B2$ на рис. 2) (в длинноволновом приближении $\omega = 2c_l k$) находится также в области существования t - и l -ветвей сплошного спектра и с ростом волнового числа примыкает к верхней границе псевдопоперечной моды в точке $\omega_2^2 = 9\alpha/2m$ при $k = 2\pi/3$.

Линия $B2$ переходит, начиная с $k > 2\pi/3$, в область существования лишь псевдопродольных объемных колебаний, где происходит трансформация другого рода. В этой области сплошного спектра сечения изочастотных поверхностей объемных мод плоскостью $k0q$ становятся невыпуклыми относительно направления распространения волны и каждому волновому числу k соответствуют при фиксированной частоте две пары волновых чисел $\pm q^{(1)}$ и $\pm q^{(2)}$, описывающих псевдопродольную ветвь (рис. 3,б). Происходит процесс неупругого рассеяния объемной волны свободной поверхностью кристалла без изменения поляризации колебаний, но с изменением q . Оказывается, что возможен лишь процесс типа $q^{(1)} \leftrightarrow q^{(2)}$ (рис. 3,б).

Возникающие за счет наличия поверхности выделенные объемные состояния вдоль линий $B1$, $B2$ и $B3$ характеризуются тем, что при данных частотах колебаний обращаются в нуль соответствующие коэффициенты отражения, т.е. особенности такого рода проявляются в процессе рассеяния объемных волн поверхностью кристалла.

3. Квазиповерхностные фононы в полуограниченном кристалле и проблема упругих колебаний вблизи плоского дефекта

Поверхность в кристалле может приводить к возникновению колебаний другого типа, частоты которых также находятся в сплошном спектре, но в области, где существуют лишь объемные псевдопоперечные волны. Такие колебания называют псевдолокальными (или

квазиповерхностными фононами) [9,10]. Волны такого типа являются двухпарциальными и состоят из падающей и зеркально отраженной t -волн (одна компонента) и локализованной за счет поверхности l -моды (другая компонента):

$$u_x(x,z) = [u_t \cos(q_t z - \varphi) + u_l e^{-\kappa_l z}] e^{ik(x-ct)}, \quad (17)$$

$$u_z(x,z) = [iu_t \Gamma_t \sin(q_t z - \varphi) + u_l \Gamma_l e^{-\kappa_l z}] e^{ik(x-ct)},$$

где Γ_t и Γ_l по-прежнему определяются формулами (10), однако теперь $b_t \equiv \cos(\sqrt{3}q_t/2)$, а $b_l \equiv \text{ch}(\sqrt{3}\kappa_l/2)$, поэтому Γ_l — чисто мнимые величины. Фаза волны φ характеризует непрерывное изменение частоты в пределах спектра псевдолокальных колебаний.

Псевдолокализованные колебания могут существовать в области сплошного спектра под нижней границей псевдопродольной ветви $\lambda_{t\min}(k) = 1 - \cos(k/2) + 4 \sin^2(k/2)$ (кривая 4 на рис. 2) и над частотами $\lambda_{t\min}(k) = 3[1 - \cos(k/2)]$ объемных колебаний, отвечающих $q = 0$ (пунктирная линия на рис. 2). При $k < \pi/2$ последняя линия является нижней границей псевдопоперечной ветви. Это область сплошного спектра (аналогичная $T1$ на рис. 3,а), в которой сечения плоскостью $k\theta q$ изочастотных поверхностей объемных мод остаются выпуклыми относительно направления распространения волны и каждому волновому числу k соответствует при фиксированной частоте пара волновых чисел $\pm q_t$.

Закон дисперсии, рассчитанный для распространяющейся у поверхности псевдопоперечной волны для всех значений волнового числа k в пределах зоны Бриллюэна, приведен на рис. 2 (линия $B4$).

Поскольку длинноволновые колебания, поляризованные в базисной плоскости слоистого гексагонального кристалла, эквивалентны колебаниям изотропной среды, частотная зависимость псевдолокальных колебаний в этом пределе переходит в закон дисперсии, описанный в [9,10]. Фазовые скорости $c(\varphi)$ таких волн лежат между скоростями поперечной и продольной (7) звуковых волн ($c_t < c(\varphi) < c_l$) и зависимость $c = c(\varphi)$ определяется соотношением

$$\text{tg } \varphi = 4 \frac{[(c^2/c_t^2 - 1)(1 - c^2/c_l^2)]^{1/2}}{(c^2/c_t^2 - 2)^2}. \quad (18)$$

Из анализа (18) следует, что в кристалле могут существовать одновременно две псевдолокализованные волны при одном и том же значении фазы. При $\varphi \rightarrow 0$ скорость

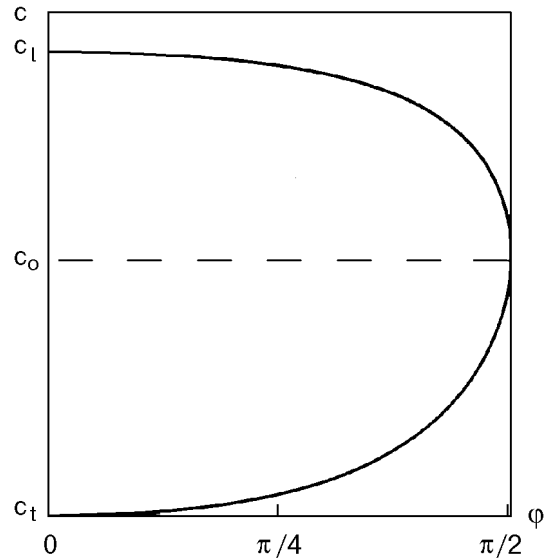


Рис. 4. Зависимость скорости псевдолокализованной волны от фазы.

псевдолокальной волны стремится к предельным скоростям c_t и c_l объемных волн (рис. 4). При $\varphi = \pi/2$ может распространяться только волна со скоростью $c_0 = \sqrt{2}c_t$, соответствующей скорости зеркально рассеивающейся под углом $\theta = \pi/4$ поперечной волны на свободной поверхности (процесс трансформации волны саму в себя).

Возможность перехода к изотропной среде в случае $kd \ll 1$ позволяет поставить вопрос о длинноволновом описании особенностей локализованных и псевдолокализованных колебаний у более общего плоского дефекта в объеме кристалла.

Допустим, что плоскость $z = 0$ расположена в глубине кристалла и совпадает с поверхностью некоего дефекта упаковки. Будем считать, что взаимодействие атомов в слое $z = 0$ с атомами в вышележащем слое по-прежнему характеризуется параметром α , а взаимодействие с атомами в нижележащем слое $z = -\sqrt{3}d/2$ характеризуется параметром силового взаимодействия β , отличным от α . Аналогично, взаимодействие атомов в слое $z = -\sqrt{3}d/2$ с атомами нижележащего слоя описывается параметром α (при описании свободной поверхности мы полагали $\beta = 0$). Легко получить граничные условия для динамических уравнений колебаний, предполагая предельный переход $kd \ll 1$. Запишем уравнения движения атомов, лежащих в двух слоях по обе стороны от дефекта. В слое $z = 0$ координаты выделенного атома обозначим вектором $\mathbf{h}_0^+ = d(0,0)$, а координаты выделенного атома в нижележащем слое — вектором $\mathbf{h}_0^- = d/2(1, -\sqrt{3})$. Тогда

$$\left\{ \begin{aligned} m \frac{\partial^2 u_x(\mathbf{h}_0^\pm)}{\partial t^2} &= -\frac{1}{2}(5\alpha + \beta)u_x(\mathbf{h}_0^\pm) + \alpha[u_x(\mathbf{h}_0^\pm + \mathbf{h}_1) + u_x(\mathbf{h}_0^\pm + \mathbf{h}_4)] + \frac{\alpha}{4}[u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_2) + u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_3)] \pm \\ &\pm \frac{\sqrt{3}}{4} \alpha [u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_2) - u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_3)] + \frac{\beta}{4} [u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_5) + u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_6)] \pm \frac{\sqrt{3}}{4} \beta [u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_6) - u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_5)]; \\ m \frac{\partial^2 u_z(\mathbf{h}_0^\pm)}{\partial t^2} &= -\frac{3}{2}(\alpha + \beta)u_z(\mathbf{h}_0^\pm) + \frac{3}{4} \alpha [u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_2) + u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_3)] \pm \frac{\sqrt{3}}{4} \alpha [u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_2) - u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_3)] + \\ &+ \frac{3}{4} \beta [u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_5) + u_z(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_6)] \pm \frac{\sqrt{3}}{4} \beta [u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_6) - u_x(\mathbf{h}_0^\pm \pm \mathbf{h}_5)], \end{aligned} \right. \quad (19)$$

где при выборе знака «+» получаются уравнения движения атома верхнего берега дефекта, а при выборе знака «-» — нижнего.

Разложим смещения $u_i(x, z)$ в (19) относительно выбранных узлов решетки \mathbf{h}_0^+ и \mathbf{h}_0^- по степеням h_i ($i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$), ограничившись лишь первыми членами. Тогда нетрудно прийти к длинноволновым граничным условиям для уравнений упругих полей на плоском дефекте:

$$\begin{aligned} \sigma_{iz}^+ - \sigma_{iz}^- &= \frac{3}{8} \beta \frac{\partial}{\partial x} (u_z^- - u_z^+), \quad (i = x, z), \\ \sigma_{xz}^+ + \sigma_{xz}^- &= \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\beta}{d} \frac{\partial}{\partial x} (u_x^+ - u_x^-) + \frac{3}{8} \beta \frac{\partial}{\partial x} (u_z^+ + u_z^-), \\ \sigma_{zz}^+ + \sigma_{zz}^- &= \frac{3\sqrt{3}}{2} \frac{\beta}{d} \frac{\partial}{\partial x} (u_z^+ - u_z^-) + \frac{3}{8} \beta \frac{\partial}{\partial x} (u_x^+ + u_x^-), \end{aligned} \quad (20)$$

где u_i^+ — смещения в верхнем полупространстве (при $z = 0$); u_i^- — смещения в нижнем полупространстве (при $z = -\sqrt{3}d/2$). Закон Гука в изучаемой модели имеет следующий вид:

$$\sigma_{xz} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right), \quad \sigma_{zz} = \lambda \frac{\partial u_x}{\partial x} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_z}{\partial x},$$

а соответствующие упругие модули $\lambda = \mu = 3\alpha/8$. Полученные из уравнений динамики решетки граничные условия (20) совпадают с точностью до обозначений упругих модулей с феноменологическими граничными условиями, выведенными из уравнений теории упругости в [10]. В работе [10] показано, что в кристалле с плоским дефектом помимо локальных колебаний существуют псевдолокализованные колебания. Упругие поля таких колебаний в верхнем полупространстве $u_i^+(x, z)$ имеют вид (17). Вид решений в нижнем полупространстве $u_i^-(x, z)$ зависит от их симметрии. Оказывается, что колебания разделяются на симметричные, для которых

$$u_{x\mu}^-(x, z) = -u_{x\mu}^+(x, -z),$$

и антисимметричные, для которых $u_{x\mu}^-(x, z) = u_{x\mu}^+(x, -z)$, $u_{z\mu}^-(x, z) = -u_{z\mu}^+(x, -z)$. Полученные в [10] результаты с точностью до обозначений переносятся на интересующий нас случай длинноволновых колебаний рассматриваемой модели дискретной решетки.

В близкой по тематике работе [13] изучались спектры длинноволновых колебаний кристалла с плоским дефектом, который представляет собой интеркалированную базисную плоскость изотоп-атомов со связью соседних слоев, отличающейся от таковой в невозмущенной матрице. Отличия от рассмотренного нами случая заключались в ином расположении плоскости дефекта (плоскость дефекта параллельна базисной плоскости кристалла) и в методике теоретического рассмотрения. Тем не менее выводы об условиях образования локальных состояний симметричного и антисимметричного видов, а также о продолжении линии частот локальных колебаний дисперсионными кривыми резонансных мод в сплошном спектре качественно подобны.

4. Адсорбированный на поверхности кристалла монослой чужеродных атомов

Изучение спектров локализованных у свободной поверхности колебаний показало, что их частоты могут появляться в щелях и под сплошным спектром. Известно, что в случае, когда поверхность «нагружена», частоты локальных колебаний могут появиться и над спектром объемных колебаний. В [3] были получены такие законы дисперсии для ГЦК кристалла, на поверхности которого адсорбирован монослой атомов (их масса отличается от массы атомов внутренних слоев). В [4] исследовано влияние адсорбированного монослоя на спектр частот локализованных колебаний двумерной квадратной решетки в длинноволновом пределе и при k , соответствующем границе зоны Бриллюэна.

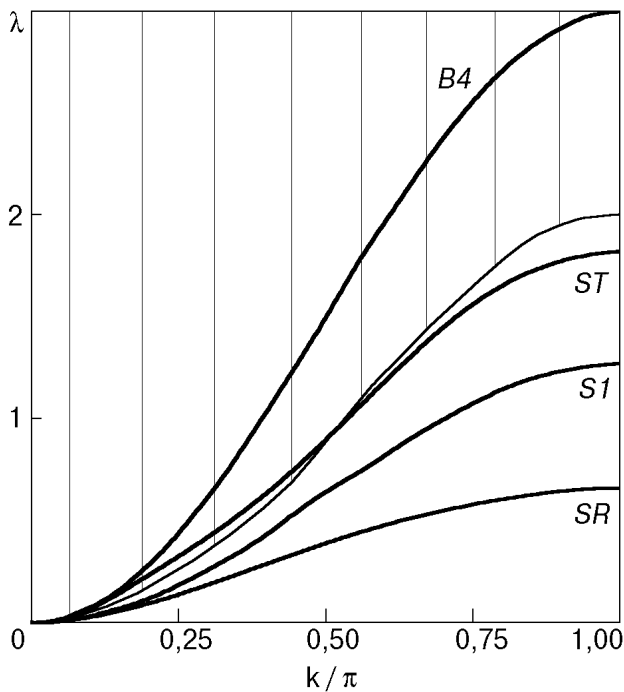


Рис. 5. Законы дисперсии локализованной низкочастотной волны рэлеевского типа SR и поперечной моды ST при наличии на поверхности моно слоя тяжелых атомов ($M = 2m$). $S1$ и $B4$ – волна рэлеевского типа и волна трансформации соответственно в случае бездефектной свободной поверхности. Заштрихованная область – сплошной спектр частот объемных колебаний.

Проанализируем влияние плоского дефекта в рассматриваемой модели сильно анизотропного слоистого кристалла, атомы поверхностного слоя которого имеют массу M , отличную от массы атомов m внутренних слоев. Тогда уравнения движения граничного слоя $z = 0$ получаются из (8) заменой $m \rightarrow M$. Подставив в них решения в виде (9), связи (10) и корни характеристического уравнения (11), получим систему вида (12), коэффициенты в которой будут

$$C_{1\mu} = \frac{9}{2} - \eta\lambda - 4a^2 - \frac{1}{2}[a + i\Gamma_\mu \sqrt{3(1-a^2)}](b_\mu + \sqrt{b_\mu^2 - 1}),$$

$$C_{2\mu} = \left\{ \frac{3}{2} [a(b_\mu + \sqrt{b_\mu^2 - 1}) - 1] + \eta\lambda \right\} \Gamma_\mu -$$

$$- i \frac{1}{2} \sqrt{3(1-a^2)} (b_\mu + \sqrt{b_\mu^2 - 1}),$$

где $\eta = \frac{M}{m}$. Частоты колебаний различных типов находятся численно из дисперсионного уравнения (14) с коэффициентами (21).

На рис. 5 изображены законы дисперсии колебаний при наличии тяжелой примеси $M = 2m$. Видно, что частота поверхностной волны рэлеевского типа SR опускается ниже частоты

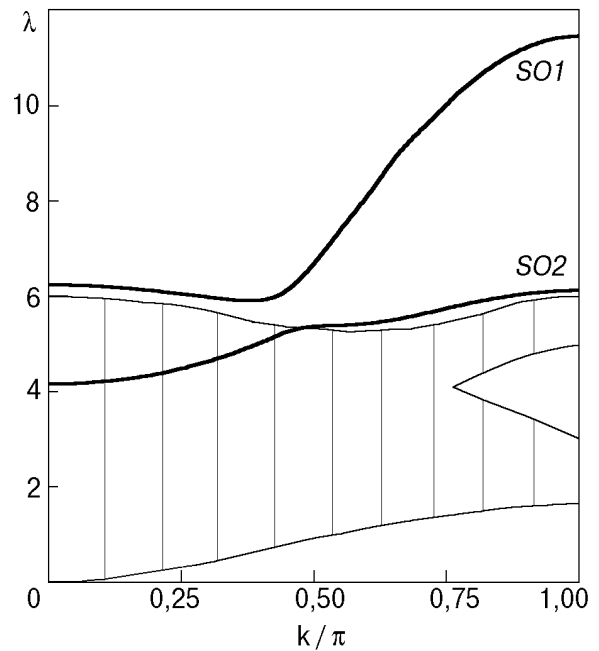


Рис. 6. Высоочастотные поверхностные волны $SO1$ и $SO2$ при наличии на поверхности кристалла легкой примеси ($M = 0,4 m$). Заштрихованная область – сплошной спектр частот объемных колебаний.

рэлеевской волны у свободной поверхности $S1$ при $M > m$. Оказывается, что могут возникать дополнительные локализованные поперечные колебания ST . Частоты волн такого типа отщепляются от нижней границы сплошного спектра при $M > 3m/2$. При значении массы атомов поверхностного слоя $M = 3m/2$ частота волны ST совпадает с частотой нижней границы псевдопоперечной ветви на границе зоны Бриллюэна $\lambda_{ST}(\pi) = \lambda_{\min}(\pi) = 2$. Колебания указанного типа локализируются в приповерхностных слоях при значениях волнового числа k в интервале $k^*(\eta) \ll k < \pi$. При $k < k^*$ частоты волны ST попадают в сплошной спектр и продолжают в нем в виде выделенной линии, соответствующей частотам зеркально рассеивающейся на поверхности поперечной волны (у свободной поверхности это волна типа $B4$).

Анализ дисперсионного уравнения показывает, что в длинноволновой области спектра дефект массы M/m приводит к слабой дисперсии скорости волны.

Низкочастотные волны рэлеевского типа SR могут существовать и при наличии легкой примеси, когда массы атомов поверхностного слоя меньше массы атомов внутренних слоев кристалла ($M < m$). Частоты волны типа SR поднимаются выше частот локализованной у

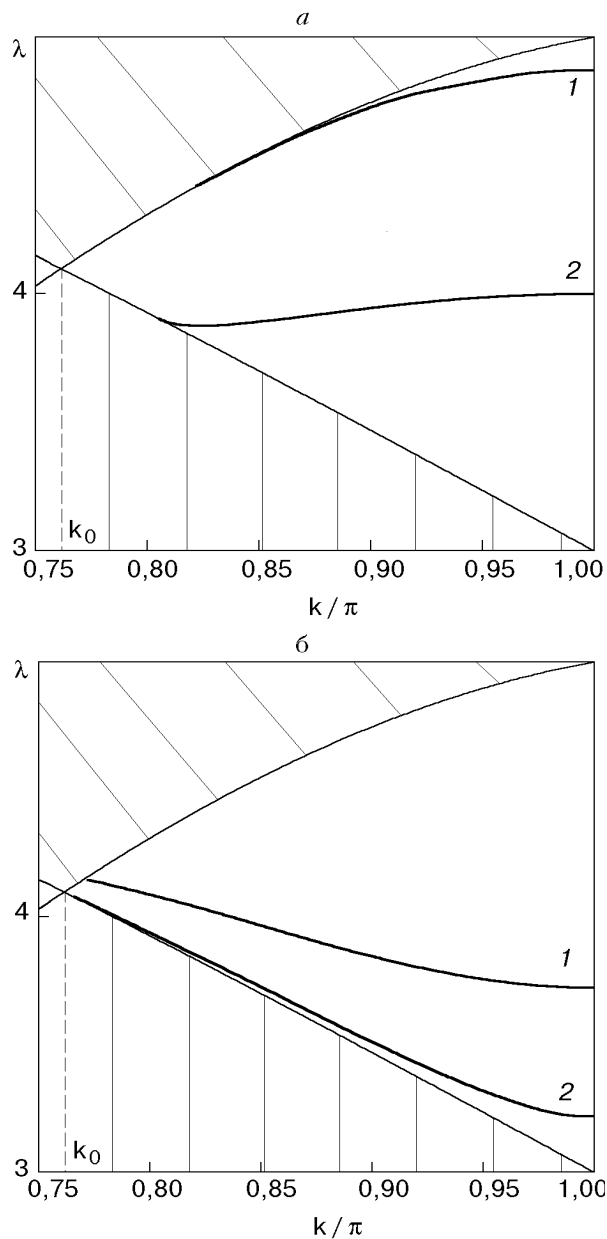


Рис. 7. Щелевые поверхностные волны. Волны типа *SG* (тяжелая примесь): $M = 0,96m$ (1), $M = 1,25m$ (2) (а); волны типа *SI* (легкая примесь): $M = 0,3m$ (1), $M = 0,4m$ (2) (б).

свободной поверхности волны *S1* с уменьшением отношения M/m , и при $M = m/2$ частота волны *SR* на границе зоны Бриллюэна совпадает с частотой нижней границы сплошного спектра. В случае дальнейшего уменьшения массы точка, в которой эта волна примыкает к сплошному спектру, будет перемещаться в сторону меньших k .

Наличие легкой примеси приводит к проявлению локализованных колебаний, частоты которых лежат выше сплошного спектра (рис. 6). Такие высокочастотные поверхностные колебания существуют в области значений волновых чисел k , близких к границе зоны Бриллюэна. Первая

поверхностная волна *SO1* появляется при любом $M < m$. Такое отщепление при малом возмущении по параметру $|m - M|/m \ll 1$ связано с тем, что при $M = m$ (свободная поверхность) к верхнему краю псевдопродольной ветви в точку $\lambda_{\text{max}}(\pi) = 6$ приходит выделенная линия частот волны трансформации *B3*. При бесконечно малом отличии массы атомов поверхностного слоя от массы внутренних атомов частоты волны типа *B3* выходят из сплошного спектра и колебания локализуются в приповерхностных слоях.

При $M < m/2$ возникает вторая высокочастотная поверхностная волна *SO2*, частота которой уменьшается по мере уменьшения k и при некотором значении $k_1^* = k_1^*(\eta)$ достигает сплошного спектра, где находит продолжение в виде зеркально рассеивающейся поверхностью псевдопродольной волны. На рис. 6 показаны численно полученные дисперсионные кривые волн *SO1* и *SO2* в случае легкой примеси для значения $M = 0,4m$.

В щели сплошного спектра могут существовать поверхностные волны как в случае легкой, так и в случае тяжелой примеси. При $M > 9m/10$ возникает волна *SG* (рис. 7,а) и с ростом η частоты волны *SG* уменьшаются. При $\eta = 1$ закон дисперсии такой волны переходит в закон дисперсии локализованных у свободной поверхности колебаний *S2*.

В случае легкой примеси при $M < m/2$ в щели возникает щелевая волна *SI* другого типа (рис. 7,б). Эта волна отщепляется от верхней границы t -ветви сплошного спектра объемных колебаний (нижний край щели).

В заключение отметим, что наличие поверхности приводит к появлению дополнительных новых типов распространяющихся в кристалле волн. Те локальные частоты, которые входят в сплошной спектр, находят свое продолжение в виде выделенных законов дисперсии объемных колебаний, отвечающих волнам трансформации различного рода. Вблизи поверхности могут также возникать псевдолокализованные колебания, представляющие собой связанные за счет границы локальные колебания, отщепившиеся от верхней объемной l -ветви, с распространяющимися волнами нижней объемной t -ветви. Учет отличия массы атомов поверхностного слоя от массы атомов внутренних слоев кристалла приводит при $M < m$ к появлению высокочастотных поверхностных волн над сплошным спектром и при $M < m/2$ к появлению второй локальной моды в этой области. Низкочастотные колебания

рэлеевского типа существуют при любых $M > m/2$, и также возникает вторая локализованная низкочастотная мода при $M > 3m/2$.

Мы благодарны Х. А. Дитерману и А. Метрикину за ознакомление с их работой до ее опубликования, а также Е. С. Сыркину и А. В. Тутову за обсуждение результатов.

1. A. M. Kosevich and A. V. Tutov, *Phys. Lett.* (in press).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 7, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
3. R. E. Allen, G. P. Alldredge, and F. W. de Wette, *Phys. Rev.* **B4**, 1661 (1971).
4. H. Kaplan, *Phys. Rev.* **125**, 1271 (1962).
5. А. М. Косевич, Д. В. Мацокин, С. Е. Савотченко, *ФНТ* **23**, 92 (1997).
6. J. Black, A. Franchini, V. Bortolani, and R. Wallis, *Phys. Rev.* **B36**, 2996 (1987).
7. G. Braco, R. Tatarek, F. Tommasini, V. Linke, and M. Persson, *Phys. Rev.* **B36**, 2928 (1987).
8. И. А. Виктор, *Поверхностные волны в твердых телах*, Наука, Москва (1981).
9. А. М. Косевич, А. В. Тутов, *ФНТ* **19**, 1273 (1993).
10. А. М. Косевич и А. В. Тутов, *Phys. Lett.* **A213**, 265 (1996).
11. А. М. Косевич, Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, *ЖЭТФ* **19**, 1089 (1985).
12. H. A. Dieterman and A. Metrikine, *Wave Motion* (in press).

13. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, Н. Н. Гуменчук, *ФНТ* **23**, 208 (1997).

The surface and quasisurface phonons and transformation waves in hexagonal crystal

A. M. Kosevich, D. V. Matsokin,
and S. E. Savotchenko

A simple model of a layered hexagonal lattice crystal with weak interaction of the atoms in the neighbouring basis planes is formulated. The vibrations propagating along the basis plane with the displacement vector in the same plane are investigated. Dispersion relations of the vibrations localized at the free surface are obtained for both low-frequency (Rayleigh type) and high-frequency (gap mode) phonons. The region of existence of the quasisurface phonons is determined. It is shown that the elastic wave scattering starts to display some peculiarities having the frequencies within the bulk spectrum. The effect of the dependence of the boundary and the internal atom mass on the frequencies of the localized vibrations is investigated.