

Поверхностные и квазиповерхностные состояния в сильно анизотропном слоистом кристалле

А.М. Косевич, П.А. Минаев, Е.С. Сыркин

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: syrkin@ilt.kharkov.ua*

М.Л. Поляков

1153 Baker Ave., Shenectady, NY 12309, USA

Статья поступила в редакцию 25 июля 2002 г.

В первой части работы для относительно простой модели сильно анизотропного слоистого кристалла в длинноволновом приближении рассмотрены различные типы поверхностных волн. Получены особые решения уравнений динамики решетки при наличии примесного поверхностного монослоя, имеющие частоты как вне полосы сплошного спектра идеальной решетки (поверхностные состояния), так и внутри этой полосы (квазиповерхностные состояния). Во второй части для векторной модели решетки, удовлетворяющей условиям трансляционной, вращательной инвариантности и упругой устойчивости, на микроскопическом уровне рассмотрены сдвиговые волны, локализованные вблизи моноатомного слоя, адсорбированного на свободной поверхности сильно анизотропного слоистого кристалла. Показано, что нецентральное взаимодействие между атомами в некоторых случаях приводит к возникновению поверхностных сдвиговых волн особого типа, имеющих одну или две точки окончания и немонотонную зависимость параметра затухания от двумерного волнового вектора.

У першій частині роботи для відносно простої моделі сильно анізотропного шаруватого кристалу в довгохвильовому наближенні розглянуто різні типи поверхневих хвиль. Одержано особливі рішення рівнянь динаміки ґратки при наявності домішкового поверхневого моношару, які мають частоти як за смугою суцільного спектру ідеальної ґратки (поверхневі стани), так і усередені цій смузі (квазіповерхневі стани). У другій частині для векторної моделі ґратки, яка задовольняє умовам трансляційної, обертальної інваріантності і пружної стійкості, на мікроскопічному рівні розглянуто зсувні хвилі, які локалізовані поблизу моноатомного шару, що адсорбован на вільній поверхні сильно анізотропного шаруватого кристалу. Показано, що нецентральна взаємодія між атомами в деяких випадках приводить до виникнення поверхневих зсувних хвиль особливого типу, які мають одну або дві крапки закінчення та немонотонну залежність параметру затухання від двовимірного хвильового вектору.

PACS: **63.20.-e**, **68.65.+g**

Сильно анизотропные слоистые кристаллы представляют собой довольно широкий класс веществ, среди которых полупроводники, диэлектрики, магнитоупорядоченные системы, полимеры и др. [1,2]. Особенностью этих кристаллов является наличие слабой связи между слоями, оказывающей существенное влияние на возбуждения различного типа. Безусловный интерес представляет изучение поверхностных акустических волн, которые могут рас-

пространяться в таких соединениях. Известно, что в сильно анизотропных системах (или в кристаллах вблизи структурного фазового перехода, связанного со смягчением акустических фононов) поверхностные волны Рэлея модифицируются — эти волны становятся замедленными и глубокопроникающими [3–5]. Последнее может быть использовано в технологических приложениях (например, в акустоэлектронике). Наряду с поверхностными волнами рэле-

евского типа видоизменяются и чисто сдвиговые поверхностные волны с горизонтальной поляризацией (*SH*-волны) — аналог поверхностных волн Гуляева—Блюстейна в пьезокристаллах [6,7]. В длинноволновом пределе глубина проникновения упругих *SH*-волн (в отличие от волн Рэлея) значительно превышает длину волны [8,9], и их характеристики становятся чрезвычайно чувствительными к внешним воздействиям [10]. *SH*-волны в последнее время интенсивно изучаются и находят все более обширное применение [11,12]. То обстоятельство, что однокомпонентные *SH*-волны являются по своей структуре более простыми, чем двухкомпонентные волны Рэлея, может быть использовано в экспериментальных исследованиях, например, для измерения плотности нормальной компоненты сверхтекучего гелия [13] или при исследовании поверхностных пленок Ленгмюра—Блоджетт [14]. Настоящая работа посвящена выяснению основных характеристик этих волн при наличии сильной анизотропии.

В работе рассмотрены следующие вопросы. В первой части с целью выяснения общих свойств поверхностных состояний проанализирован длинноволновый случай для относительно простой модели сильно анизотропного слоистого кристалла. Получены особые решения уравнений динамики решетки при наличии плоского дефекта, имеющие частоты как вне полосы сплошного спектра идеальной решетки (поверхностные состояния), так и внутри этой полосы (квазиповерхностные состояния). Во второй части обсуждены условия образования и характеристики колебательных состояний для чисто сдвиговых волн, локализованных вблизи моноатомного слоя, расположенного на поверхности сильно анизотропного слоистого кристалла. Показано, в частности, что при учете нецентрального взаимодействия в таких кристаллах возможно появление глубоко проникающих поверхностных волн, существующих только внутри определенного интервала значений двумерного квазиволнового вектора.

Длинноволновое приближение для простой модели сильно анизотропного слоистого кристалла

Рассмотрено длинноволновое приближение для скалярной модели полуограниченного сильно анизотропного слоистого кристалла с адсорбированным слоем примесных атомов на поверхности. Сделано предположение, что решетка кристалла является объемно центрированной тетрагональной, а поверхность кристалла перпендикулярна оси симметрии четвертого порядка. Для описания такой решетки удобно выбрать следующую прямоугольную систе-

му координат: оси *OX* и *OY* лежат в плоскости моноатомного слоя на поверхности кристалла, ось *OZ* направлена вглубь кристалла. Пусть *a* — расстояние между ближайшими атомами в плоскости *XOY*, а *b/2* — расстояние между соседними атомными слоями, перпендикулярными оси *OZ*. В данной модели учтено минимальное число типов межатомных взаимодействий, которые могут быть существенными для изучаемых структур — межслоевое взаимодействие учитывается в приближении первых соседей и характеризуется параметром γ , взаимодействие внутри слоев кристалла также учитывается в приближении первых соседей (параметр α). Условие сильной анизотропии означает, что $\gamma \ll \alpha$. Введем параметры, характеризующие адсорбированный монослой: $\varepsilon = \tilde{m}/m - 1$, $\zeta_0 = \tilde{\alpha}/\alpha - 1$. Здесь \tilde{m} и *m* — массы атомов слоя и основной решетки, $\tilde{\alpha}$ и α — параметры взаимодействия первых соседей внутри адсорбированного монослоя и внутри слоев основной решетки соответственно. Предполагается, что взаимодействие поверхностного слоя с основной решеткой, будучи достаточно слабым, не отличается от межслоевого взаимодействия в объеме кристалла. Так как в плоскости *XOY* кристалл структурно однороден, то в уравнениях движения удобно перейти от узельного представления в плоскости слоев к двумерному *k*-представлению, сохранив узельное представление вдоль направления оси *z*. В результате мы получаем разностные уравнения, описывающие стационарные колебания атомных слоев в глубине кристалла:

$$\lambda u(z) + \frac{2\alpha}{m} [\cos k_x + \cos k_y - 2u(z)] + \frac{4\gamma}{m} [(u(z + b/2) + u(z - b/2)) \cos(k_x/2) \cos(k_y/2) - 2u(z)] = 0, \quad (1)$$

где $\lambda \equiv \omega^2$, ω^2 — квадрат собственной частоты колебаний. Используя стандартный вид решения $u(z) = u_0 \exp[ik_z z/(b/2)]$, получим закон дисперсии колебаний идеальной решетки. В этой части будем рассматривать область низких частот $\omega \ll \ll \sqrt{\alpha/m}$, что позволяет учитывать дисперсию колебаний, распространяющихся вдоль слоев, приближенно. Для того чтобы в длинноволновом пределе учесть влияние слабого межслоевого взаимодействия на распространение таких колебаний, в слагаемых закона дисперсии, содержащих множитель γ , достаточно ограничиться квадратичным по величине двумерного волнового вектора *k* приближением. Однако поскольку анизотропия системы предполагается сильной ($\gamma \ll \alpha$), то в тех членах, которые содержат в качестве множителя константу α самого

сильного в решетке взаимодействия, помимо второй необходимо учесть и четвертую степень k . Дисперсия колебаний, распространяющихся перпендикулярно слоям решетки, должна быть учтена более точно, поскольку частоты таких колебаний имеют порядок величины $\sqrt{\gamma/m} \ll \sqrt{\alpha/m}$ и, вообще говоря, попадают в рассматриваемую нами область частот. В таком приближении закон дисперсии колебаний идеального кристалла вдоль направления [100] имеет вид

$$\lambda = \frac{1}{m}(\alpha + \gamma \cos k_z)k^2 - \frac{\alpha}{12m}k^4 + \frac{16\gamma}{m}(\sin(k_z/2))^2, \quad (2)$$

где $k = k_x$ — модуль двумерного волнового вектора. Из данного выражения видно, что учет членов порядка $(\gamma/m)k^2$ и $(\alpha/m)k^4$ важен в длинноволновом пределе в области значений двумерного волнового вектора $k \lesssim \sqrt{\gamma/\alpha}$. Этим закон дисперсии (2) отличается от закона дисперсии сильно анизотропного кристалла, приведенного в монографии [17].

Для анализа локализованных состояний удобно построить зону непрерывного спектра колебаний идеального кристалла как функцию двумерного волнового вектора (k_x, k_y) при всех возможных значениях k_z (2). Характерной особенностью таких зон в сильно анизотропных слоистых кристаллах является то, что ширина зоны (при любом значении k) определяется слабым межслоевым взаимодействием, а максимальная частота колебаний — сильным внутрислоевым взаимодействием, т.е. зона является очень узкой и сильновытянутой [18]. На рисунках 1, 2 заштрихованная область соответствует зоне непрерывного спектра колебаний идеального кристалла в данной модели. Нижняя $\lambda_{\text{low}}(k)$ и верхняя $\lambda_{\text{up}}(k)$ границы этой зоны определяются выражениями

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{low}}(k) &= \frac{1}{m}(\alpha + \gamma)k^2 - \frac{\alpha}{12m}k^4, \\ \lambda_{\text{up}}(k) &= \frac{1}{m}(\alpha - \gamma)k^2 - \frac{\alpha}{12m}k^4 + \frac{16\gamma}{m}. \end{aligned} \quad (3)$$

Проанализируем характеристики локализованных состояний в рассматриваемой геометрии. Система уравнений, которые описывают колебания адсорбированного монослоя ($z = 0$) и следующего за ним слоя ($z = b/2$) и играют роль граничных условий для объемных уравнений (1), имеет вид

$$\begin{aligned} &\left[\lambda - \frac{\alpha(\zeta_0 + 1)}{m(\varepsilon + 1)} \left(k^2 - \frac{k^4}{12} \right) - \frac{4\gamma}{m(\varepsilon + 1)} \right] u(0) + \\ &+ \frac{4\gamma}{m(\varepsilon + 1)} \left(1 - \frac{k^2}{8} \right) u\left(\frac{b}{2}\right) = 0, \\ &\frac{4\gamma}{m} \left(1 - \frac{k^2}{8} \right) u(0) + \left[\lambda - \frac{\alpha}{m} \left(k^2 - \frac{k^4}{12} \right) - \frac{8\gamma}{m} \right] u\left(\frac{b}{2}\right) + \\ &+ \frac{4\gamma}{m} \left(1 - \frac{k^2}{8} \right) u(b) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

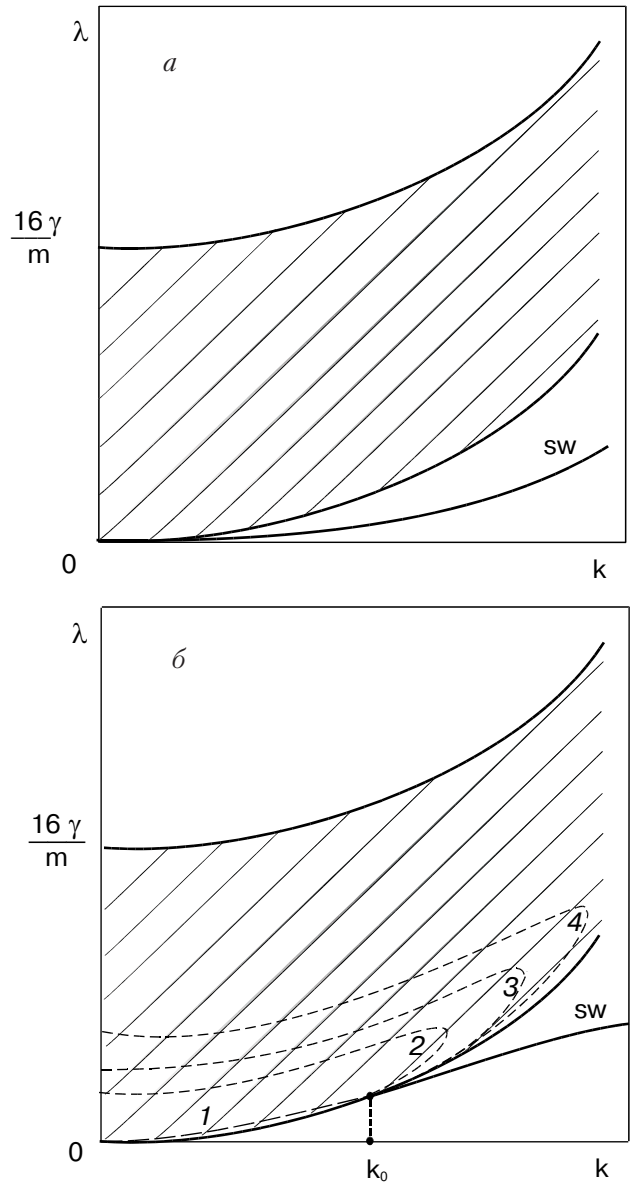


Рис. 1. Дисперсионная кривая (SW), соответствующая поверхностной волне, в которой колебания соседних слоев решетки синфазны: поверхностная волна существует в интервале значений двумерного волнового вектора $k > 0$ (а); $k > k_0$ (б). Область непрерывного спектра идеального кристалла заштрихована.

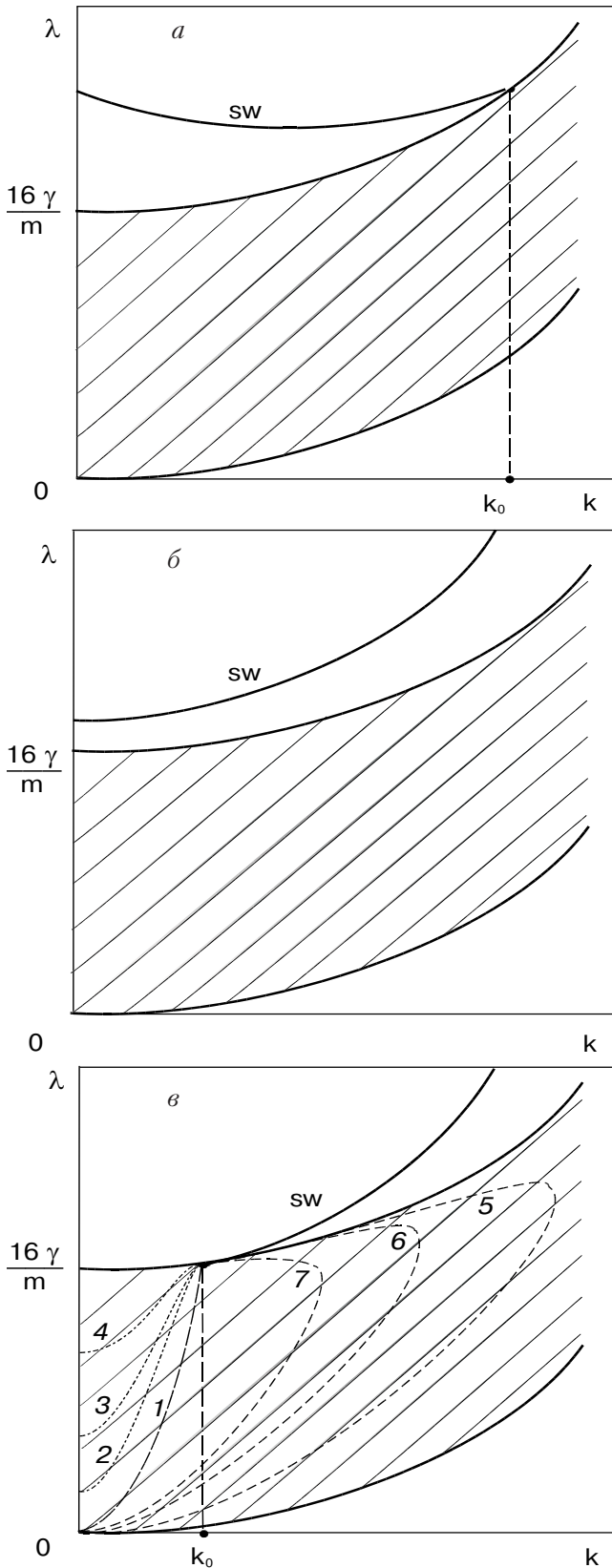


Рис. 2. Дисперсионная кривая (SW), соответствующая поверхностной волне, в которой колебания соседних слоев решетки противофазны: поверхностная волна существует в интервале значений двумерного волнового вектора $k < k_0$ (а); $k > 0$, при $k = 0$ существует щель между верхней границей непрерывного спектра и частотой локализованного состояния (б); $k > k_0$ (в).

Решения, затухающие вглубь кристалла, следующие:

$$u(0) = w, \quad (5)$$

$$u(z) = vq^{(z-b/2)/(b/2)}, \quad z \geq b/2.$$

Здесь w – смещение адсорбированного монослоя, $u(z)$ – смещения слоев основной решетки, q – параметр, характеризующий затухание решения вглубь кристалла ($|q| < 1$).

Из анализа уравнений (1) и (4) получаем поверхностные состояния следующих типов:

1. Поверхностные состояния с частотами, лежащими ниже зоны непрерывного спектра колебаний идеального кристалла. Появление таких состояний возможно, если параметры решетки кристалла и дефекта удовлетворяют соотношению $\gamma(2\varepsilon + 1) \sim 2\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)$. В этом случае зависимость $q(k)$ в рассматриваемом приближении имеет вид

$$q(k) = 1 + \frac{2\alpha(\zeta_0 - \varepsilon) - \gamma(2\varepsilon + 1)}{8\gamma} k^2 - \frac{\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)}{64\gamma} k^4, \quad (6)$$

а отщепление квадрата частоты поверхностного состояния от нижней границы зоны непрерывного спектра

$$\Delta\lambda = \lambda_{\text{low}} - \lambda_{\text{loc}} = \frac{4\gamma(1 - q)^2}{mq} \cos(k/2). \quad (7)$$

Как видно из выражений (6) и (7), величина отщепления $\Delta\lambda$ в длинноволновом пределе пропорциональна k^4 , что является характерным для рассматриваемого типа волн [16].

Колебания соседних атомных слоев решетки происходят синфазно, поскольку величина $q(k) > 0$. Если $\gamma(2\varepsilon + 1) > 2\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)$, то поверхностная волна существует при всех значениях k , больших нуля (рис. 1, а). Однако если имеет место обратное неравенство (т.е. $\gamma(2\varepsilon + 1) < 2\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)$), то поверхностная волна может существовать только при значениях k , превышающих некоторое значение k_0 , где

$$k_0 = 2\sqrt{2\frac{2\alpha(\zeta_0 - \varepsilon) - \gamma(2\varepsilon + 1)}{\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)}}. \quad (8)$$

Дисперсионная кривая, соответствующая данному случаю, изображена на рис. 1, б.

2. Поверхностные состояния с частотами, лежащими выше зоны непрерывного спектра колебаний идеального кристалла. Такие состояния соответствуют противофазным смещениям соседних слоев решетки и имеют место при условии $\gamma(2\varepsilon + 1) \ll 2\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)$. Соответствующее значение параметра $q(k)$ (в данном случае $q(k) < 0$) имеет вид

$$q(k) = \frac{\varepsilon + 1}{\varepsilon} - \frac{\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)}{8\gamma\varepsilon} k^2, \quad (9)$$

а отщепление квадрата частоты поверхностного состояния от верхней границы зоны непрерывного спектра

$$\Delta\lambda = \lambda_{\text{loc}} - \lambda_{\text{up}} = \frac{4\gamma(1+q)^2}{m|q|} \cos(k/2). \quad (10)$$

При этом если масса атомов слоя на поверхности кристалла более чем в два раза меньше атомов самого кристалла (т.е. $\varepsilon < -1/2$), то при $k = 0$ имеется щель между частотой поверхностного состояния и зоной непрерывного спектра. В зависимости от соотношений между параметрами, характеризующими адсорбированный монослой, поверхностные состояния могут существовать либо при значениях волнового вектора $k < k_0$ (рис. 2,а), либо при всех значениях $k > 0$ (рис. 2,б). Первая возможность существует, когда $\zeta_0 < \varepsilon$, а вторая — когда существует противоположное неравенство $\zeta_0 > \varepsilon$. Значение k_0 , при котором дисперсионная кривая, соответствующая поверхностной волне, касается верхней границы зоны непрерывного спектра, имеет вид

$$k_0 = 2\sqrt{2\frac{\gamma(2\varepsilon + 1)}{\alpha(\zeta_0 - \varepsilon)}}. \quad (11)$$

Если же масса атомов слоя такова, что $\varepsilon \geq -1/2$, то никакой щели при $k = 0$ нет, и поверхностные состояния могут существовать только при значениях k , больших k_0 (рис. 2,в), причем величина k_0 определяется тем же выражением (11).

Представляет интерес рассмотреть также и такие решения уравнений (1), (4), которые имеют частоты внутри зоны колебательного спектра идеальной решетки. Данные решения имеют вид стоячих волн (по координате z) и могут быть записаны в виде

$$u(z) = \tilde{w} \cos\left(\frac{z}{(b/2)} k_z + \phi\right). \quad (12)$$

В этих выражениях \tilde{w} — амплитуда колебаний слоев кристалла, ϕ — фаза (независимый параметр решения). Собственные частоты, соответствующие этим решениям, являются функциями двух переменных k и ϕ и могут быть получены из системы уравнений

$$\begin{aligned} \lambda m &= 2\alpha(1 - \cos k) + 8\gamma(1 - \cos k_z \cos(k/2)); \\ (\lambda m(\varepsilon + 1) - 2\alpha(\zeta_0 + 1)(1 - \cos k) - 4\gamma) \cos \phi &+ \\ + 4\gamma \cos(k_z + \phi) \cos(k/2) &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Представляет интерес качественный анализ возможных дисперсионных соотношений, полученных из уравнений (13) для значений ϕ из интервала $(0, \pi)$. Мы проделаем его для двух уже рассмотрен-

ных случаев, когда поверхностные состояния существуют при $k > k_0$ (8), (11). Рассмотрим сначала случай, соответствующий рис. 1,б. При $\phi = 0, \pi$ дисперсионные кривые совпадают с кривой 1, определяемой выражением

$$\lambda = \frac{4\alpha(2\zeta_0 + 1)}{m(2\varepsilon + 1)} (\sin(k/2))^2. \quad (14)$$

Последовательно возрастающим значениям ϕ в интервале $0 < \phi < \pi/2$ соответствуют кривые 2, 3 и 4, приближающиеся к верхней границе сплошного спектра. При $\phi = \pi/2$ дисперсионные кривые совпадают с верхней и нижней границами сплошного спектра (3). При дальнейшем увеличении параметра ϕ в промежутке $\pi/2 < \phi < \pi$ дисперсионные кривые будут существовать только в интервале $0 < k < k_0$, соответствующие им частоты будут ниже, чем на кривой 1, и по мере приближения ϕ к граничному значению π данные кривые будут асимптотически стремиться к кривой 1.

Теперь рассмотрим случай, соответствующий продемонстрированному на рис. 2,в. При $\phi = 0, \pi$ дисперсионные кривые совпадают с кривой 1, определяемой тем же выражением (14). Типичный вид дисперсионных кривых, соответствующих возрастающим значениям параметра ϕ в интервале $0 < \phi < \pi/2$, приведен на данном рисунке для значений $0 < \phi_1 < \phi_2 < \phi_3 < \pi/2$ (кривые 2, 3 и 4). При $\phi = \pi/2$ дисперсионные кривые совпадают с верхней и нижней границами сплошного спектра (3). По мере дальнейшего увеличения ϕ в интервале $\pi/2 < \phi < \pi$ кривые принимают вид, подобный изображенному на рис. 2,в для $\pi/2 < \phi_4 < \phi_5 < \phi_6 < \pi$ (кривые 5, 6 и 7), причем при ϕ , стремящемся к π , эти кривые асимптотически приближаются к кривой 1.

Более подробно различные типы поверхностных состояний будут исследованы во второй части статьи для векторной модели сильно анизотропного слоистого кристалла, удовлетворяющей условиям упругой устойчивости, трансляционной и вращательной инвариантности.

Сдвиговые поверхностные волны в полубесконечном сильно анизотропном слоистом кристалле с адсорбированным слоем

В данной части работы рассмотрены условия образования и характеристики чисто сдвиговых поверхностных волн, локализованных вблизи монослоя, адсорбированного поверхностью сильно анизотропного слоистого кристалла. В качестве модели основной решетки возьмем объемно центрированную тетрагональную структуру, межслоевое взаимодействие в которой, будучи относительно слабым,

описывается в приближении ближайших соседей и является чисто центральным, а в плоскостях слоев учитывается как центральное, так и нецентральное взаимодействие первых и вторых соседей. Матрицы силовых констант такой модели имеют вид (ось z направлена вдоль оси симметрии 4-го порядка, оси x и y расположены в плоскости слоев) [19], [20]

$$\Phi_{ik}(a,0,0) = -\delta_{ik}[\alpha\delta_{i,x} + \beta(\delta_{i,y} + \delta_{i,z})];$$

$$\Phi_{ik}(a,a,0) = -\begin{pmatrix} \alpha' & \xi & 0 \\ \xi & \alpha' & 0 \\ 0 & 0 & \beta' \end{pmatrix};$$

$$\Phi_{ik}\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a\Delta}{2}\right) = -\gamma \begin{pmatrix} 1 & 1 & \Delta \\ 1 & 1 & \Delta \\ \Delta & \Delta & \Delta^2 \end{pmatrix}.$$

Здесь a — межатомное расстояние в плоскости слоя; $a\Delta$ — межатомное расстояние вдоль оси z (эта ось перпендикулярна плоскости слоев). Параметры β и β' описывают нецентральное взаимодействие в плоскости слоя. Условие перехода в длинноволновом пределе уравнений динамики решетки в уравнения теории упругости приводит к следующему соотношению между данными параметрами: $\beta = -2\beta'$ [19]. К такому же соотношению приводит условие ненапряженности границы, ориентированной вдоль плоскости слоя, что дает нам право рассматривать такую свободную поверхность без учета релаксации на ней силовых постоянных.

Параметр γ описывает слабое межслоевое взаимодействие, а параметр α — самое сильное в кристалле центральное взаимодействие ближайших соседей в плоскости слоя. Величина α' характеризует центральное взаимодействие вторых соседей в этой же плоскости, параметр ξ определяется выражением $\xi = \alpha' + \beta/2$.

Матрица $\Phi_{ik}(0,0,0)$ определяется из условия трансляционной инвариантности решетки и имеет следующий вид:

$$\Phi_{ik}(0,0,0) = 2(\alpha + 2\alpha' + \beta + 4\gamma)(\delta_{i,x}\delta_{k,x} + \delta_{i,y}\delta_{k,y}) + 2(\beta + 4\gamma\Delta^2)\delta_{i,z}\delta_{k,z}.$$

Все остальные матрицы могут быть получены с помощью операций точечной группы симметрии D_{4h} . Рассматриваемая модель является механически устойчивой при положительных α , α' , γ , ξ и $0 < \beta < \alpha$.

Масса атомов адсорбированного монослоя и параметры, характеризующие взаимодействие в плоскости слоя, отличаются от соответствующих величин основной решетки. Межслоевое взаимодействие, будучи относительно слабым, предполагается одним и тем же для всей структуры. Введем следующие параметры, описывающие монослой: $\varepsilon = \tilde{m}/m - 1$, $\zeta_0 = \tilde{\alpha}/\alpha - 1$, $\zeta_1 = \tilde{\alpha}'/\alpha' - 1$,

$\zeta_2 = \tilde{\beta}/\beta - 1$, здесь величины m , α , α' и β соответственно означают массу атомов, центральное взаимодействие первых и вторых соседей, нецентральное взаимодействие в плоскостях слоев основной решетки; \tilde{m} , $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\alpha}'$ и $\tilde{\beta}$ имеют такой же смысл, но для монослоя.

Уравнение, описывающее собственные колебания кристаллической решетки, можно представить в виде

$$\lambda u_i(\mathbf{n}) - \sum_{k,\mathbf{n}'} L_{ik}(\mathbf{n},\mathbf{n}') u_k(\mathbf{n}') = 0, \quad (15)$$

где $\lambda \equiv \omega^2$ — квадрат собственной частоты; $u_i(\mathbf{n})$ — i -я компонента смещения атома, положение которого в решетке дается вектором \mathbf{n} ;

$$L_{ik}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \frac{\Phi_{ik}(\mathbf{n},\mathbf{n}')}{(m(\mathbf{n})m(\mathbf{n}'))^{1/2}}$$

— матрица динамического оператора ($\Phi_{ik}(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ — матрица силовых констант кристалла, $m(\mathbf{n})$ — масса атома в узле \mathbf{n}). Воспользуемся трансляционной периодичностью дефектного кристалла вдоль плоскости xy и представим решение уравнения (15) в виде

$$u_i(\mathbf{n}) = \chi_i(z) \exp\{i(k_x x + k_y y)\}.$$

В результате получим следующее уравнение для функции $\chi_i(z)$:

$$\lambda \chi_i(z) - \sum_{k,z'} C_{ik}(k_x, k_y; zz') \chi_k(z') = 0, \quad (16)$$

где

$$C_{ik}(k_x, k_y; zz') = \sum_{x,y} L_{ik}(x,y; zz') \exp\{-i(k_x x + k_y y)\}.$$

С помощью такого подхода рассмотрим следующие задачи.

Пусть плоскость, в которой распространяется волна, совпадает с одной из плоскостей зеркальной симметрии кристалла. Тогда, как известно, поле смещений волны можно представить в виде двух не взаимодействующих друг с другом мод — однокомпонентной моды SH -типа (или сдвиговой волны) и двухкомпонентной моды рэлеевской поляризации.

Для случая однокомпонентных полей смещений в SH -волне уравнение (16) приобретает особенно простой вид: $\lambda \chi(z) - \sum C(zz') \chi(z') = 0$, причем смещение $\chi(z)$ перпендикулярно направлению распространения волны.

Для нашей модели кристалла зеркальными плоскостями симметрии являются плоскости, проходящие через направления [10] и [11] двумерной зоны Бриллюэна перпендикулярно поверхности кристалла. Рассмотрим SH -волны, проекция вектора фазовой скорости которых на поверхность кристалла совпадает с одним из указанных направлений.

Направление [10] в двумерной зоне Бриллюэна

Система уравнений, описывающих движение адсорбированного монослоя, имеет вид

$$\begin{aligned} \lambda\chi(0) &= C(00)\chi(0) + C(01)\chi(1), \\ \lambda\chi(1) &= C(10)\chi(0) + C(11)\chi(1) + C(12)\chi(2), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} C(00) &= \frac{4}{m(\varepsilon + 1)} [\beta(\zeta_2 + 1) + 2\alpha'(\zeta_1 + 1)] \times \\ &\times \sin^2(ka/2) + \frac{4\gamma}{m(\varepsilon + 1)}, \\ C(01) &= C(10) = -\frac{4\gamma}{m\sqrt{\varepsilon + 1}} \cos(ka/2), \\ C(11) &= \frac{4}{m} (\beta + 2\alpha') \sin^2(ka/2) + \frac{8\gamma}{m}, \\ C(12) &= -\frac{4\gamma}{m} \cos(ka/2). \end{aligned}$$

Локализованное вблизи поверхности решение этих уравнений будем искать в виде $\chi(0) = A$; $\chi(n) = Bq^{n-1}$, ($n > 0$). Здесь A и B соответственно амплитуды колебаний адсорбированного монослоя и следующего за ним слоя основной решетки, q — величина, характеризующая затухание волны вглубь кристалла ($|q| < 1$), n — номер слоя. В зависимости от параметров адсорбированного слоя возможно возникновение следующих типов локализованных волн:

1. Локализованные волны с частотами ниже полосы сплошного спектра идеальной решетки. Такие волны возникают, если параметры адсорбированного слоя и основной решетки удовлетворяют соотношению $\gamma(2\varepsilon + 1) > \beta(\zeta_2 - \varepsilon) + 2\alpha'(\zeta_1 - \varepsilon)$ (этому неравенству соответствует, например, достаточно тяжелый монослой, в котором нецентральное взаимодействие и взаимодействие вторых соседей меньше, чем в глубине кристалла, либо же незначительно больше). Из данного выражения видно, что поскольку центральное взаимодействие вторых соседей в плоскости слоя α' и нецентральное взаимодействие ближайших соседей β в этой же плоскости входят в условие образования локализованной волны аддитивным образом, то хотя, как правило, $\beta \sim 0,1\alpha'$, в некоторых случаях (например, когда $\zeta_1 \approx \varepsilon$) для анализа условий возникновения поверхностных волн учет только лишь более сильного центрального взаимодействия вторых соседей может оказаться недостаточным. Зависимость величины q от параметров монослоя и двумерного волнового вектора k дается соотношением

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{2\gamma\varepsilon \cos(ka/2)} \times \\ &\times [(\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 2\alpha'(\varepsilon - \zeta_1)) \sin^2(ka/2) + \gamma(2\varepsilon + 1)] - \\ &- \frac{1}{2\gamma\varepsilon \cos(ka/2)} \times \\ &\times \left\{ [(\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 2\alpha'(\varepsilon - \zeta_1)) \sin^2(ka/2) + \gamma(2\varepsilon + 1)]^2 - \right. \\ &\left. - 4\gamma^2\varepsilon(\varepsilon + 1) \cos^2(ka/2) \right\}^{1/2}. \end{aligned}$$

При этих условиях $q > 0$, что соответствует локализованным колебаниям, в которых смещения атомов соседних слоев решетки происходят синфазно. Отщепление локальной частоты происходит от нижней границы спектра объемных SH -волн (на рис. 3 область непрерывного спектра колебаний SH -типа обозначена цифрой 1) и описывается выражением

$$\Delta\lambda = \lambda_{\text{low}} - \lambda_{\text{loc}} = \frac{4\gamma(q - 1)^2}{mq} \cos(ka/2).$$

Если параметры адсорбированного монослоя таковы, что не выполняются неравенства

$$\varepsilon > -1/2; \quad \frac{\gamma(2\varepsilon + 1)}{\beta(\zeta_2 - \varepsilon) + 2\alpha'(\zeta_1 - \varepsilon)} < 2, \quad (17)$$

то отщепление дисперсионной кривой, соответствующей локализованной в пространстве волне, происходит вблизи $k = 0$ (рис. 3, кривая 2). В этой области выражение для q имеет вид

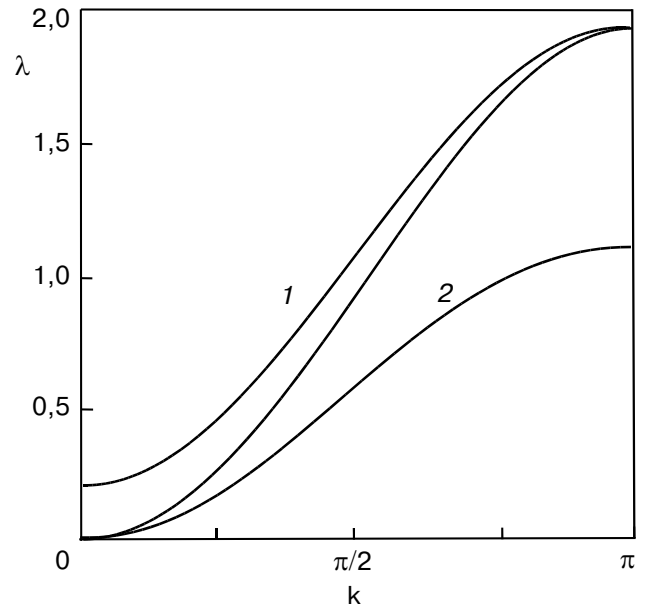


Рис. 3. Область непрерывного спектра колебаний SH -типа (1) и дисперсионная кривая (2), соответствующая волне, локализованной у адсорбированного монослоя, когда в данной волне смещения атомов соседних слоев решетки происходят синфазно (направление [10] в двумерной зоне Бриллюэна).

$$q = 1 - \frac{k^2 a^2}{8\gamma} [2\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 4\alpha'(\varepsilon - \zeta_1) + \gamma(2\varepsilon + 1)],$$

а соответствующее отщепление частоты

$$\Delta\lambda = \frac{k^4 a^4}{16\gamma m} [2\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 4\alpha'(\varepsilon - \zeta_1) + \gamma(2\varepsilon + 1)]^2.$$

Величина $\Delta\lambda$ в длинноволновом пределе ($ka \ll 1$) является достаточно малой ($\sim (ka)^4$), что не позволяет описывать волны рассматриваемого нами типа в рамках обычной локальной теории упругости и является причиной глубокого проникновения поверхностных волн вглубь кристалла [3]. Если же, напротив, неравенства (17) выполняются, то спектр поверхностных волн имеет точку окончания, отличную от $k = 0$ (под точкой окончания подразумевается значение k из рассматриваемого интервала $(0, \pi/a)$, при котором дисперсионная кривая, соответствующая локализованной волне, входит в сплошной спектр объемных колебаний). Эта точка определяется выражением

$$k_0 = (4/a) \arccos \left\{ \frac{\gamma(2\varepsilon + 1)}{2\beta(\zeta_2 - \varepsilon) + 4\alpha'(\zeta_1 - \varepsilon)} \right\}^{1/2}.$$

При этом величина отщепления $\Delta\lambda$ определяется в основном только лишь малым межслоевым взаимодействием, и соответствующие поверхностные волны являются глубоко проникающими. На границе двумерной зоны Бриллюэна ($k = \pi/a$) достигается максимальная величина отщепления

$$\Delta\lambda = \frac{4}{m(\varepsilon + 1)} (\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 2\alpha'(\varepsilon - \zeta_1) + \gamma(2\varepsilon + 1)).$$

Вблизи данной точки величина q имеет вид

$$q = \frac{\gamma(\varepsilon + 1) \cos(ka/2)}{\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 2\alpha'(\varepsilon - \zeta_1) + \gamma(2\varepsilon + 1)}.$$

Обращение q в нуль на границе зоны соответствует полной локализации колебаний в плоскости адсорбированного монослоя.

2. Локализованные волны с частотами выше полосы сплошного спектра идеальной решетки. Возникновение таких волн возможно, если параметры адсорбированного слоя и основной решетки удовлетворяют соотношению

$$\gamma(2\varepsilon + 1) < \beta(\zeta_2 - \varepsilon) + 2\alpha'(\zeta_1 - \varepsilon)$$

(например, легкий монослой, в котором нецентральность и взаимодействие вторых соседей значительно больше, чем в основной решетке). В этом случае зависимость q дается выражением

$$q = \frac{1}{2\gamma\varepsilon \cos(ka/2)} \times \\ \times [(\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 2\alpha'(\varepsilon - \zeta_1)) \sin^2(ka/2) + \gamma(2\varepsilon + 1)] + \\ + \frac{1}{2\gamma\varepsilon \cos(ka/2)} \times \\ \times \left\{ [(\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 2\alpha'(\varepsilon - \zeta_1)) \sin^2(ka/2) + \gamma(2\varepsilon + 1)]^2 - \right. \\ \left. - 4\gamma^2\varepsilon(\varepsilon + 1) \cos^2(ka/2) \right\}^{1/2}.$$

Величина q как функция k является отрицательно определенной на всем рассматриваемом интервале значений $(0, \pi/a)$, что соответствует локализованным колебаниям, в которых смещения атомов соседних слоев решетки происходят противофазно. Отщепление дисперсионной кривой, соответствующей данным колебаниям, происходит от верхней границы объемных колебаний SH -типа и определяется выражением

$$\Delta\lambda = \lambda_{\text{loc}} - \lambda_{\text{up}} = \frac{4\gamma(q + 1)^2}{m|q|} \cos(ka/2).$$

Если поверхность кристалла покрыта легким слоем адсорбированных атомов и $\varepsilon \leq -1/2$, то спектр поверхностных волн не имеет точки окончания и $\lambda_{\text{loc}} \neq \lambda_{\text{up}}$ при $k = 0$ (рис. 4, а, кривая 2; зона объемных колебаний (1)). В области волновых векторов $k \rightarrow +0$ поведение величины q описывается выражением

$$q = \frac{\varepsilon + 1}{\varepsilon} + \frac{\varepsilon + 1}{8\gamma\varepsilon} \times \\ \times [2\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 4\alpha'(\varepsilon - \zeta_1) + \gamma(2\varepsilon + 1)](ka)^2. \quad (18)$$

Отщепление частоты в этой же области имеет вид

$$\Delta\lambda = \frac{4\gamma(2\varepsilon + 1)^2}{m|\varepsilon|(\varepsilon + 1)} + (ka)^2 \frac{2\varepsilon + 1}{m|\varepsilon|(\varepsilon + 1)} \times \\ \times [\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 2\alpha'(\varepsilon - \zeta_1) + \gamma(2\varepsilon + 1)], \quad (19)$$

если же $\varepsilon = -1/2$, то

$$\Delta\lambda = \frac{(ka)^4}{16\gamma m} [2\beta(\varepsilon - \zeta_2) + 4\alpha'(\varepsilon - \zeta_1) + \gamma(2\varepsilon + 1)]^2.$$

Если выполнено условие $\varepsilon > -1/2$ (масса атома адсорбированного монослоя превышает половину массы атома основного кристалла), то спектр имеет точку окончания, определяемую выражением

$$k_0 = \frac{4}{a} \arcsin \left\{ \frac{\gamma(2\varepsilon + 1)}{2\beta(\zeta_2 - \varepsilon) + 4\alpha'(\zeta_1 - \varepsilon)} \right\}^{1/2}. \quad (20)$$

Колебания, локализованные вблизи поверхности кристалла, существуют при значениях $k > k_0$ (рис. 4, б, кривая 2). Максимальная величина от-

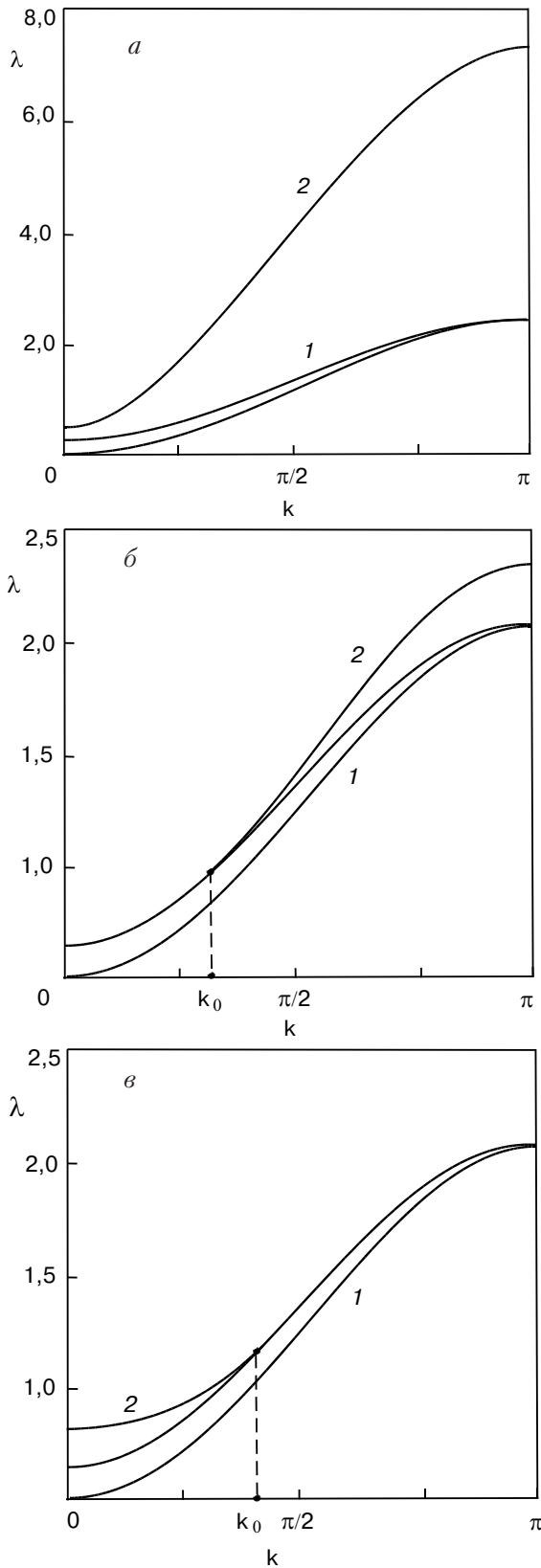


Рис. 4. Область непрерывного спектра колебаний SH-типа (1) и дисперсионная кривая (2), соответствующая локализованным колебаниям, в которых смещения атомов соседних слоев решетки происходят противофазно (направление [10] в двумерной зоне Бриллюэна). Локализованные вблизи дефекта колебания существуют при всех значениях k (а); $k > k_0$ (б); $k < k_0$ (в).

щепления достигается на границе двумерной зоны Бриллюэна ($k = \pi/a$) и равна

$$\Delta\lambda = \frac{4}{m(\epsilon + 1)} (\beta(\zeta_2 - \epsilon) + 2\alpha'(\zeta_1 - \epsilon) - \gamma(2\epsilon + 1)).$$

Вблизи этой точки q ведет себя точно также, как и в случае, когда частоты локализованных волн находятся ниже полосы сплошного спектра идеальной решетки.

Возможно также образование волн, существующих в интервале значений двумерного волнового вектора $0 \leq k \leq k_0$ (рис. 4, в, кривая 2), где значение k_0 дается выражением (20). Такая ситуация наблюдается, когда параметры монослоя и кристалла удовлетворяют соотношениям

$$\gamma(2\epsilon + 1) > \beta(\zeta_2 - \epsilon) + 2\alpha'(\zeta_1 - \epsilon), \quad \epsilon < -1/2.$$

Поведение величин q и $\Delta\lambda$ вблизи точки $k = 0$ описывается выражениями (18) и (19).

Направление [11] в двумерной зоне Бриллюэна

Вдоль направления [11] в двумерной зоне Бриллюэна условия формирования волн, локализованных вблизи адсорбированного монослоя, более разнообразны, чем в предыдущем случае, но, вообще говоря, не обладают какими-либо качественными особенностями по сравнению с проведенным рассмотрением. Однако существует интересное, по нашему мнению, исключение, когда спектр поверхностных волн имеет две точки окончания, лежащие внутри непрерывного спектра объемных SH-колебаний. Такая особенность спектра обусловлена специфическим проявлением нецентрального взаимодействия в решетке и не наблюдается в его отсутствие. Рассматриваемый эффект может существовать только в особых случаях, когда выполняется ряд ограничений, накладываемых на параметры поверхностного моноатомного слоя и основной решетки. Данные ограничения, впрочем, не являются слишком сильными и вполне выполнимы для реально существующих структур:

$$\begin{cases} \beta(\epsilon - \zeta_2) > 0, \quad \gamma(2\epsilon + 1) \geq 0 \\ -3\beta(\epsilon - \zeta_2) < \alpha(\epsilon - \zeta_0) < \beta(\epsilon - \zeta_2) \\ \alpha(\epsilon - \zeta_0) + \beta(\epsilon - \zeta_2) + 2\gamma(2\epsilon + 1) \geq 0 \\ 16\beta\gamma(\epsilon - \zeta_2)(2\epsilon + 1) < [\alpha(\epsilon - \zeta_0) - \beta(\epsilon - \zeta_2)]^2. \end{cases}$$

Волна, локализованная у адсорбированного слоя, существует в интервале значений $k \in (k_1, k_2)$, где $k_i = (2/a) \arcsin(\sqrt{x_i})$, $i = 1, 2$; $x_i = -(B/2A)[1 \mp \sqrt{1 - (4AC/B^2)}]$ (здесь знаки $-$ и $+$ соответствуют $i = 1, 2$). Параметры A и B в этих выражениях определяются соотношениями $A = 2\beta(\epsilon - \zeta_2)$,

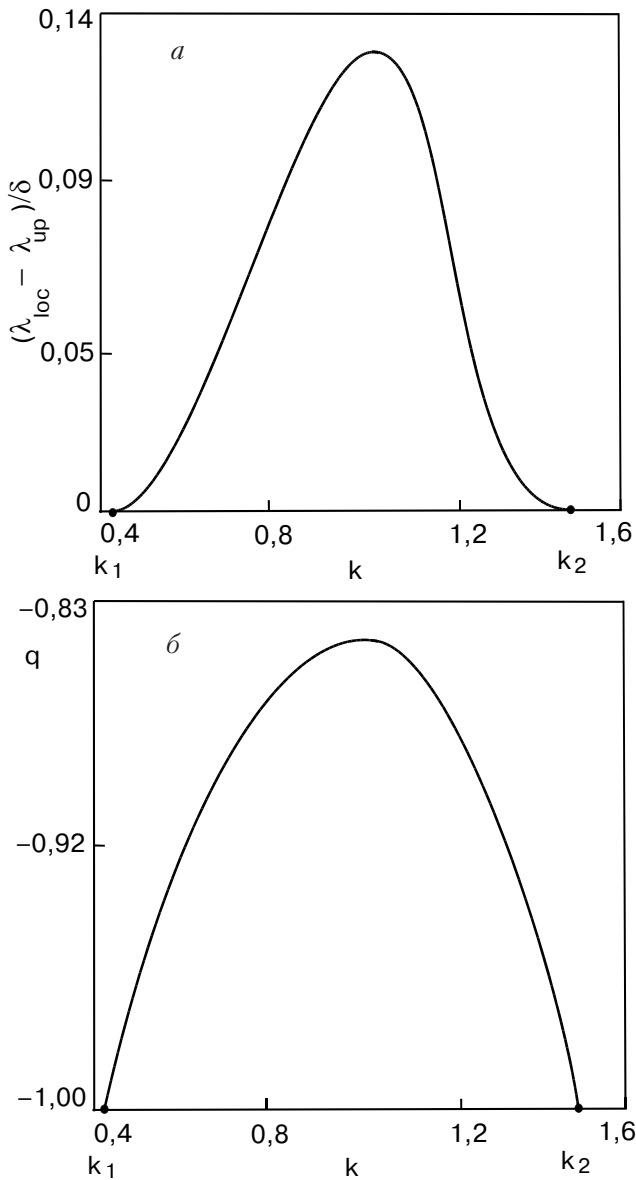


Рис. 5. Зависимость величины отщепления $\Delta\lambda$ от модуля волнового вектора k (направление [11] в двумерной зоне Бриллюэна, $\Delta\lambda = \lambda_{loc} - \lambda_{up}$ нормирована на величину $\delta = \gamma/m$, $k_1 \approx 0,4$ и $k_2 \approx 1,5$ — точки окончания спектра локализованной волны) (а). Зависимость параметра затухания $q(k)$, соответствующая случаю рис. 5,а (б).

$B = \alpha(\epsilon - \zeta_0) - \beta(\epsilon - \zeta_2)$, $C = 2\gamma(2\epsilon + 1)$. Показатель затухания такой волны имеет вид

$$q = \frac{1}{2\gamma\epsilon} [(\alpha(\epsilon - \zeta_0) - \beta(\epsilon - \zeta_2)) \cos(ka)] \sin^2(ka/2) + \gamma(2\epsilon + 1) + \frac{1}{2\gamma\epsilon} \{[(\alpha(\epsilon - \zeta_0) - \beta(\epsilon - \zeta_2)) \cos(ka)] \times \sin^2(ka/2) + \gamma(2\epsilon + 1)\}^2 - 4\gamma^2\epsilon(\epsilon + 1)\}^{1/2}.$$

Величина отщепления $\Delta\lambda$ определяется в основном нецентральной и межслоевым взаимодействием и

вследствие этого является относительно малой. Ее зависимость от двумерного волнового вектора k изображена на рис. 5,а ($\Delta\lambda = \lambda_{loc} - \lambda_{up}$ нормирована на величину $\delta = \gamma/m$). На рис. 5,б представлена зависимость параметра затухания волны $q(k)$, соответствующая случаю на рис. 5,а. На этом рисунке видно, что $q(k)$ в двух точках $k_1 \approx 0,4$ и $k_2 \approx 1,5$ становится равной -1 , что соответствует переходу поверхностной волны SH -типа в объемную, распространяющуюся вглубь кристалла без затухания. Таким образом, учет нецентрального взаимодействия приводит к тому, что при определенных соотношениях между параметрами основной решетки и адсорбированного слоя локализованная у поверхности SH -волна может существовать только для определенного интервала (k_1, k_2) проекций волнового вектора на направление [11] двумерной зоны Бриллюэна.

1. *Динамические свойства твердых тел и жидкостей. Исследования методом рассеяния нейтронов.* С. Лавси, Т. Шпрингер (ред.) Мир, Москва (1980).
2. G. Benedek, F. Hofmann, P. Ruggerone, G. Onida, and L. Miglio, *Surf. Sci. Rep.* **20**, 1 (1994).
3. И.М. Гельфгат, Е.С. Сыркин, *ФНТ* **4**, 672 (1978).
4. С.В. Герус, И.Е. Дикштейн, В.В. Тарасенко, В.Д. Харитонов, *ФТТ* **19**, 218 (1977).
5. Yu.A. Kosevich, O.Yu. Serdobol'skaya, and E.S. Syrkin, *Ferroelectrics* **75**, 409 (1987).
6. J.L. Bleustein, *Appl. Phys. Lett.* **13**, 412 (1968).
7. Ю.В. Гуляев, *Письма в ЖЭТФ* **9**, 63 (1969).
8. G.P. Alldredge, *Phys. Lett.* **A41**, 281 (1972).
9. И.М. Гельфгат, *ФТТ* **19**, 1711 (1977).
10. Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин, *Письма в ЖТФ* **13**, 1439 (1987).
11. A.N. Darinskii and W. Weihnacht, *J. Appl. Phys.* **90**, 383 (2001).
12. Ken-ya Hashimoto, *Surface Acoustic Wave Devices in Telecommunications*, Springer-Verlag, Heidelberg (2000).
13. Yu.A. Kosevich and E.S. Syrkin, *J. Phys.:Condens. Matt.* **2**, 5047 (1990).
14. М.В. Войнова, А.М. Косевич, Е.С. Сыркин, *Акуст. журн.* **39**, 944 (1993).
15. В.И. Пересада, Е.С. Сыркин, *ФНТ* **3**, 250 (1977).
16. I.M. Lifshitz and A.M. Kosevich, *Repts Progr. Phys.* **29**, 217 (1966); И.М. Лифшиц. *Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
17. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
18. Е.С. Сыркин, И.М. Гельфгат, *ФНТ* **5**, 181 (1979).
19. Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, О.Я. Шамфарова, *ФНТ* **17**, 746 (1991).
20. А.М. Косевич, Е.С. Сыркин, and S.B. Feodosyev, *Phys. Low-Dim. Struct.* **3**, 47 (1994).

Surface and quasi-surface states in strongly anisotropic layered crystal

**A.M. Kosevich, P.A. Minaev,
E.S. Syrkin, and M.L. Polyakov**

In the first part of the paper different types of the surface waves are considered within a long-wave limit for a relatively simple model of a strongly anisotropic layered crystal. Special solutions of the lattice dynamics equations possessing frequencies both out of the continuous spectrum band of the ideal lattice (surface states) and in-

side this band (quasi-surface states) are obtained. In the second part the shear waves localized near a monoatomic layer adsorbed by the surface of strongly anisotropic layered crystal are considered at a microscopic level for a vector lattice model. This model satisfies the conditions of translational and rotational invariance and elastic stability. It is shown that the noncentral interaction between atoms gives rise, in some cases, to surface shear waves of special type. These waves can exist only in a definite interval of the two-dimensional wave-vectors and have a nonmonotonic behaviour of the decay parameter.