

## Колебания, локализованные вблизи примесных слоев в слоистом кристалле

В. И. Гришаев, М. А. Мамалуй, П. А. Минаев, Е. С. Сыркин,  
С. Б. Феодосьев

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

Статья поступила в редакцию 5 мая 2001 г.

Показано, что в сильноанизотропном слоистом кристалле взаимодействие между колебательными модами поляризованными параллельно и перпендикулярно слоям, является очень слабым для частот, выше частоты Ван Хофа, которая соответствует переходу от закрытых изочастотных поверхностей к открытым вдоль направления слабой связи. Такое квазирасщепление мод приводит к квазидвумерному поведению фононов, поляризованных вдоль слоев, и к квазиодномерному поведению фононов, поляризованных в перпендикулярном слоям направлении и локализованных вблизи легких или сильносвязанных примесных атомов или монослоев.

Показано, що у сильноанізотропному шаруватому кристалі взаємодія між коливальними модами, які поляризовані паралельно та перпендикулярно до шарів, є дуже слабкою для частот вищих за частоту ван Хофа, що відповідає переходу від закритих ізочастотних поверхонь до відкритих вздовж напрямку слабого зв'язку. Таке квазірозщеплення мод приводить до квазидвовимірної поведінки фононів, що поляризовані вздовж шарів, і до квазіодновимірної поведінки фононів, що поляризовані у перпендикулярному до шарів напрямку та локалізовані поблизу легких або сильнов'язаних домішкових атомів чи моношарів.

PACS: 61.72.-y, 63.20.-e

### Введение

Изучение состояний, локализованных вблизи плоских дефектов кристаллической структуры, необходимо для понимания термодинамических и кинетических свойств реальных кристаллов, а также для решения прикладных задач акусто-, опто- и микроэлектроники (создание волноводных систем, высокочувствительных сенсорных устройств и т.п.). В последнее время появился ряд работ, в которых в рамках теории упругости исследовались резонансные состояния, локализованные в многослойных кристаллических структурах макроскопического масштаба (см., например, [1]). Однако из-за существенного вклада коротковолновых фононов во все колебательные характеристики таких соединений, а также учитывая практическую необходимость дальнейшей миниатюризации технических устройств, несомненный интерес представляет изучение резонансных эффектов методами атомной динамики кристаллической решетки.

При этом особо важным является изучение локализованных и квазилокализованных колебаний в кристаллах с сильной анизотропией межатомного взаимодействия, в частности в квазидвумерных кристаллических структурах. Во-первых, такие объекты занимают промежуточное положение между трехмерными решетками и структурами с пониженной размерностью, которые качественно отличаются от трехмерных условиями образования и характеристиками локализованных состояний. Во-вторых, слабая связь между атомами даже вдоль одного кристаллографического направления, что естественно для таких кристаллов, делает характеристики локализованных состояний (особенно локализованных вблизи поверхности) очень чувствительными к внешним воздействиям.

В настоящей статье изучены колебания, локализованные вблизи примесного монослоя, находящегося в глубине слоистого кристалла. Показано,

В настоящей статье изучены колебания, локализованные вблизи примесного монослоя, находящегося в глубине слоистого кристалла. Показано,

что поведение таких колебаний при достаточно сильной слоистой анизотропии имеет квазиодномерный характер, что дает возможность описывать состояния, локализованные вблизи плоских дефектов, с помощью точно решаемых одномерных моделей, принимая во внимание только соотношения между упругими модулями кристалла.

В сильноанизотропном слоистом кристалле, атомы различных слоев которого связаны между собой намного слабее, чем атомы одного слоя, взаимодействие между колебаниями, поляризованными параллельно и перпендикулярно слоям, оказывается пропорциональным квадрату малого «параметра анизотропии»  $\gamma$  — отношение слабого межслоевого взаимодействия к сильному внутрислоевому ( $\gamma \ll 1$ ) [2]. (Это явление обычно называется квазирасщеплением фононных мод.) Вследствие этого изочастотные поверхности поляризованных вдоль слоев фононных мод сильно вытянуты вдоль направления слабой связи и являются открытыми вдоль этого направления на очень широком частотном интервале, в котором спектральные свойства соответствующих колебаний являются практически двумерными\*. Квазидвумерное поведение поляризованных вдоль слоев фононов означает, что практически все они (кроме предельно длинноволновых) локализованы в плоскости слоев. С другой стороны, изочастотные поверхности, соответствующие фононной ветви, поляризованной вдоль направления слабой связи (т.е. перпендикулярно плоскости слоев), не являются вытянутыми вдоль какого-либо кристаллографического направления, и в поведении соответствующих фононов в идеальном слоистом кристалле не обнаруживается никаких квазинизкоразмерных особенностей.

Практически для всех слоистых кристаллов (см., например, [3–14]) величина изгибной жесткости слоев значительно меньше сильного внутрислоевого взаимодействия и максимальная частота фононов для последней ветви заметно ниже максимальных частот двух других акустических ветвей. Она имеет один порядок с частотами особенностей Ван Хова, соответствующих переходу изочастотных поверхностей этих ветвей от закрытых к открытым. То есть в той области частот, где наиболее ярко проявляется двумерная природа фононов, поляризованных в плоскости слоя, колебания идеальной слоистой решетки, поляризованные в направлении слабой связи, практически отсутствуют. Такие колебания в данной частотной области могут возникнуть благодаря наличию оп-

ределенных дефектов — легких или сильносвязанных примесных атомов или примесных монослоев. Действительно, в сильно анизотропных кристаллах колебания вдоль направления слабой связи легких примесей [15,16] или атомов легких подрешеток [17] очень сильно локализованы. Причем частота соответствующего ярко выраженного резонансного колебания, как правило, лежит именно в том интервале, где изочастотные поверхности поляризованных вдоль базисной плоскости колебаний являются открытыми вдоль направления слабой связи. Такая сильная локализация колебаний в частотной области, где фоннная плотность идеальной решетки отнюдь не мала, обусловлена отсутствием в этой области колебаний идеальной решетки с поляризацией поперек слоев и слабым взаимодействием фононов данной поляризации с двумерными фононами, поляризованными вдоль слоев. В поведении данных сильнолокализованных колебаний должны проявляться квазиодномерные особенности. Для доказательства этого утверждения рассмотрим колебания, локализованные вблизи примесного монослоя в сильноанизотропном слоистом кристалле.

При описании локализованных состояний наиболее естественной является классификация колебаний, основанная на их представлении в виде суперпозиции расходящихся волн (в отличие от традиционного разложения по плоским волнам [18–21]). Метод  $\mathcal{J}$ -матриц (или рекурсионный метод) [22–25] вполне соответствует такой классификации. Этот метод не использует явным образом трансляционную периодичность решетки и, следовательно, его применение как к идеальным, так и к дефектным структурам не имеет принципиальных отличий. Кроме того, невырожденность спектра операторов (соответствующих  $\mathcal{J}$ -матрицам), которые мы используем здесь для описания колебаний системы, дает возможность избежать многих вычислительных трудностей.

В рамках рекурсионного метода все пространство смещений атомов  $H$  с помощью соответствующего выбора так называемых порождающих векторов  $\mathbf{h}_0^{(i)}$  представляется в виде прямой суммы подпространств  $H^{(i)}$ , инвариантных относительно оператора  $\hat{\mathcal{L}}$ , описывающего колебания кристалла:

$$\hat{\mathcal{L}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\hat{\Phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\sqrt{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}}$$

\* В [2] это проиллюстрировано на поведении особенностей Ван Хова, которые чрезвычайно чувствительны к изменениям характера межатомного взаимодействия.

(здесь  $\hat{\Phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  — матрица силовых констант, которая описывает взаимодействие между атомами, расположенными в точках с векторами  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}'$ ;  $m(\mathbf{r})$  и  $m(\mathbf{r}')$  — массы этих атомов). Эти подпространства, обычно называемые циклическими, представляют собой линейные оболочки, натянутые на последовательность линейно независимых векторов  $\{\hat{\mathcal{L}}^n \mathbf{h}_0^{(i)}\}_{n=0}^{\infty}$ . После ортонормирования данной последовательности мы получаем ортогональный базис  $\{\mathbf{h}_n^{(i)}\}_{n=0}^{\infty}$ , в котором оператор  $\hat{\mathcal{L}}^{(i)}$ , порожденный оператором  $\hat{\mathcal{L}}$  в подпространстве  $H^{(i)}$ , представляется трехдиагональной якобиевой матрицей ( $\mathcal{J}$ -матрицей). Обозначим ее диагональные матричные элементы  $a_n^{(i)}$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ), а недиагональные  $b_n^{(i)}$ . Индекс  $(i)$ , нумерующий подпространства, будем использовать только тогда, когда необходимо отличать различные циклические подпространства.

Распределение частот атомных колебаний в системе обычно выражается через матричные элементы оператора Грина  $\hat{\mathcal{G}} = (\lambda \hat{I} - \hat{\mathcal{L}})^{-1}$  (здесь  $\lambda$  — квадрат частоты и собственное значение оператора  $\hat{\mathcal{L}}$ ). Если в качестве порождающего вектора возьмем  $\mathbf{h}_0 = |\mathbf{r}| \mathbf{u} \in H$ , т.е. смещение  $\mathbf{u}$  атома с радиусом-вектором  $\mathbf{r}$ , то матричный элемент  $\mathcal{G}_{00}(\lambda) \equiv (\mathbf{h}_0, \hat{\mathcal{G}} \mathbf{h}_0)$  будет содержать полную информацию о частотных характеристиках колебаний системы, в которых данный атом движется вдоль вектора  $\mathbf{u}$ . Условия существования мнимой части  $\mathcal{G}_{00}(\lambda)$  определяют границы полос сплошного спектра колебаний, а величина мнимой части характеризует распределение частот данного атома внутри этих полос. Спектральная плотность, нормированная на единицу, имеет вид

$$\rho_0(\lambda) = \frac{1}{\pi} \text{Im } \mathcal{G}_{00}(\lambda). \quad (1)$$

Полная функция распределения квадратов частот  $g(\lambda)$  равна среднему арифметическому спектральных плотностей, порожденных линейно независимыми векторами  $\mathbf{h}_0^{(i)}$ .

Функция  $\mathcal{G}_{00}(\lambda)$  может иметь полюса только за пределами сплошного спектра, т.е. в области, где она является чисто вещественной. Эти полюса  $\lambda_d$  определяют квадраты дискретных локальных частот. Вычеты функции Грина в полюсах

$$\mu_d^{(0)} = \text{rés}_{\lambda=\lambda_d} \mathcal{G}_{00}(\lambda) \quad (2)$$

представляют собой интенсивности (или веса) локальных колебаний.

Среднеквадратичное смещение атома с радиусом-вектором  $\mathbf{r}$  как функция квадрата частоты и температуры пропорционально  $\rho(\lambda)$  для колеба-

ний с частотами, лежащими в полосе сплошного спектра, и  $\mu_d^{(0)}$  для колебаний с дискретными частотами.

### Квазирасщепление фононных мод в сильноанизотропном слоистом кристалле

Если в качестве порождающих векторов  $\mathbf{h}_{\parallel}$  и  $\mathbf{h}_{\perp}$  выбрать смещения одного из атомов данной модели в направлениях соответственно параллельно и перпендикулярно базисной плоскости, то из-за квазирасщепления фононных мод, поляризованных в этих направлениях [2], соответствующие спектральные плотности (1) с точностью до квадрата малого параметра  $\gamma$  будут совпадать с фононными плотностями соответствующих ветвей. В дальнейшем мы будем рассматривать спектральные функции как функции частоты  $\omega$ , а не ее квадрата  $\lambda \equiv \omega^2$ , т.е. величины  $v_i(\omega) \equiv 2\omega \rho_i(\omega^2)$ . Для них справедливы соотношения:

$$\begin{aligned} v_{x,y}(\omega) &\equiv \frac{1}{\pi} \text{Im} (\mathbf{h}_{\parallel}, \hat{\mathcal{G}} \mathbf{h}_{\parallel}) = \\ &= \frac{a^2 c}{2(2\pi\hbar)^3} \sum_{q=1}^2 \oint_{\omega_q(\mathbf{k})=\omega} \frac{dS_q}{|\nabla_{\mathbf{k}} \omega_q(\mathbf{k})|} + O(\gamma^2); \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} v_z(\omega) &\equiv \frac{1}{\pi} \text{Im} (\mathbf{h}_{\perp}, \hat{\mathcal{G}} \mathbf{h}_{\perp}) = \\ &= \frac{a^2 c}{(2\pi\hbar)^3} \oint_{\omega_3(\mathbf{k})=\omega} \frac{dS_3}{|\nabla_{\mathbf{k}} \omega_3(\mathbf{k})|} + O(\gamma^2), \end{aligned}$$

как обычно (см., например, [18]), интеграл берется по изочастотной поверхности  $\omega_q(\mathbf{k}) = \omega$  ( $q = 1, 2, 3$ ) и  $dS_q$  — элемент этой поверхности.

Модель сильноанизотропной слоистой решетки должна описывать основные отличительные особенности фононного спектра кристаллов данного класса. Прежде всего, это наличие в спектре низкочастотных коротковолновых акустических фононов (см., например, [3–14]): вдоль направления слабой связи (в  $\mathbf{k}$ -пространстве) все три акустические ветви сохраняют низкие частоты вплоть до границы первой зоны Бриллюэна, а одна из них, поляризованная в перпендикулярном слоем направлении, остается низкочастотной и при  $\mathbf{k} \subset x0y$ . Закон дисперсии этой моды для волновых векторов, лежащих в базисной плоскости, в случае, когда изгибная жесткость слоев много больше слабого межслоевого взаимодейст-

вия, может иметь квазиизгибный характер\* [3,14, 18,26]. Разумеется, для рассматриваемой модели должны выполняться условия трансляционной и вращательной инвариантности, устойчивости и перехода в длинноволновом пределе уравнений динамики решетки в уравнения теории упругости (см, например, [18,19]).

В качестве модели выберем объемно-центрированную тетрагональную решетку и будем считать направление оси четвертого порядка направлением слабой связи. Поскольку атомы соседних слоев такой решетки сдвинуты друг относительно друга в направлении базисной плоскости, при описании слабого межслоевого взаимодействия можно ограничиться центральным взаимодействием ближайших (из не лежащих в одной плоскости) соседей — решетка будет устойчивой. При описании внутрислоевого взаимодействия ограничимся взаимодействием первых и вторых соседей в базисной плоскости, причем учтем как центральное, так и нецентральное взаимодействие между ними. Матрицы силовых постоянных имеют вид

$$\Phi_{ik}(a, 0, 0) = -\delta_{ik} [\alpha_{\parallel}^{(1)}\delta_{i,x} + \beta^{(1)}(\delta_{i,y} + \delta_{i,z})];$$

$$\Phi_{ik}(a, a, 0) = -\begin{pmatrix} \alpha_{\parallel}^{(2)} & \xi & 0 \\ \xi & \alpha_{\parallel}^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & \beta^{(2)} \end{pmatrix};$$

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

Здесь  $a$  и  $c \equiv a\epsilon$  — соответственно межатомные расстояния в базисной плоскости и вдоль оси четвертого порядка. Параметры  $\beta^{(1)}$  и  $\beta^{(2)}$  описывают нецентральное взаимодействие между первыми и вторыми соседями в базисной плоскости. Условие перехода уравнений динамики решетки в уравнения теории упругости приводит к следующему соотношению между этими параметрами:  $\beta^{(1)} = -2\beta^{(2)} \equiv \beta$ . Такое же соотношение следует из условия ненапряженности границы, ориентированной вдоль базисной плоскости, и мы можем рассматривать такую свободную поверхность без учета релаксации на ней силовых постоянных.

Параметры  $\alpha_{\parallel}^{(1)}$  и  $\alpha_{\perp}$  описывают соответственно центральное взаимодействие ближайших соседей

в базисной плоскости (самое сильное в решетке) и слабое межслоевое взаимодействие (также чисто центральное), при этом  $\gamma \equiv \alpha_{\perp}/\alpha_{\parallel}^{(1)}$ . Величина  $\alpha_{\parallel}^{(2)}$  характеризует центральное взаимодействие вторых соседей в этой же плоскости, параметр  $\xi$  определяется соотношением  $\xi = \alpha_{\parallel}^{(2)} - \beta/2$ . Рассматриваемая модель является устойчивой при положительных значениях величин  $\alpha_{\parallel}^{(1)}$ ,  $\alpha_{\perp}$ ,  $\xi$ ,  $\alpha_{\parallel}^{(2)}$  и  $0 < \beta < 1$ .

Матрица  $\Phi_{ik}(0, 0, 0)$  получается из условия трансляционной инвариантности. Остальные матрицы силовых констант могут быть найдены из описанных выше с помощью операций симметрии точечной группы  $D_{4h}$ .

Проанализируем зависимость величин  $v_i(\omega)$  от параметра  $\gamma$ . Остальные параметры фиксированы:  $\alpha_{\parallel}^{(2)} = 0, 2\alpha_{\parallel}^{(1)}$ ,  $\beta = 0, 05\alpha_{\parallel}^{(1)}$  и  $c/a = 2$ , частоту удобно измерять в величинах  $\omega_0 \equiv \sqrt{\alpha_{\parallel}^{(1)}/m}$ . На рис. 1 показана эволюция спектральных плотностей  $v_{x,y}$ . Кривая 1 соответствует  $\gamma = 0, 03$ , что при выбранном нами отношении  $c/a = 2$  отвечает слабоанизотропному кристаллу (типа  $PbI_2$ ). Кривая 2 ( $\gamma = 0, 01$ ) соответствует слоистым кристаллам, в которых отношения упругих модулей  $C_{33}/C_{11} \sim C_{44}/C_{11} \sim 0, 1$ , что характерно для многих слоистых соединений ( $GaSe$ ,  $GaS$ ,  $In_4Se_3$  и т.п.). Кривые 3 и 4 соответствуют  $\gamma = 0, 003$  и  $\gamma = 0, 001$  (еще более сильная анизотропия — типа анизотропии в графите).

Спектральные плотности  $v_{x,y}(\omega)$  имеют дебаевскую форму до частоты  $\omega_z^2$  (величина  $\omega_z^2 = 16\alpha_{\perp}/m$ ), при которой изочастотные поверхности становятся открытыми вдоль направления слабой связи, имеют на этой частоте особенность Ван Хова типа «излом» (их зависимости вблизи данной особенности в увеличенном масштабе изображены на врезке), а далее имеют ярко выраженный двумерный характер и мало изменяются с изменением  $\alpha_{\perp}$ . При этом максимальная частота колебаний решетки зависит от  $\alpha_{\perp}$  очень слабо. «Двумерные» особенности Ван Хова, соответствующие переходу от закрытых изочастотных поверхностей к открытым и обратно вдоль направления распространения поперечной волны в базисной плоскости (т.е. направления  $k_y$  для волны, поляризованной вдоль оси абсцисс, и направления  $k_x$  для волны, поляризованной вдоль оси ординат), имеют вид очень острых максимумов (при полном отсутствии взаимодействия между слоями данные особенности Ван Хова являются логарифмическими).

\* Кроме того, в колебательном спектре сильноанизотропных кристаллов со сложной решеткой возникают низкочастотные оптические фононы. Об их вкладе в колебательные характеристики и влиянии на их поведение изгибной жесткости слоев см., например, в [27–29].

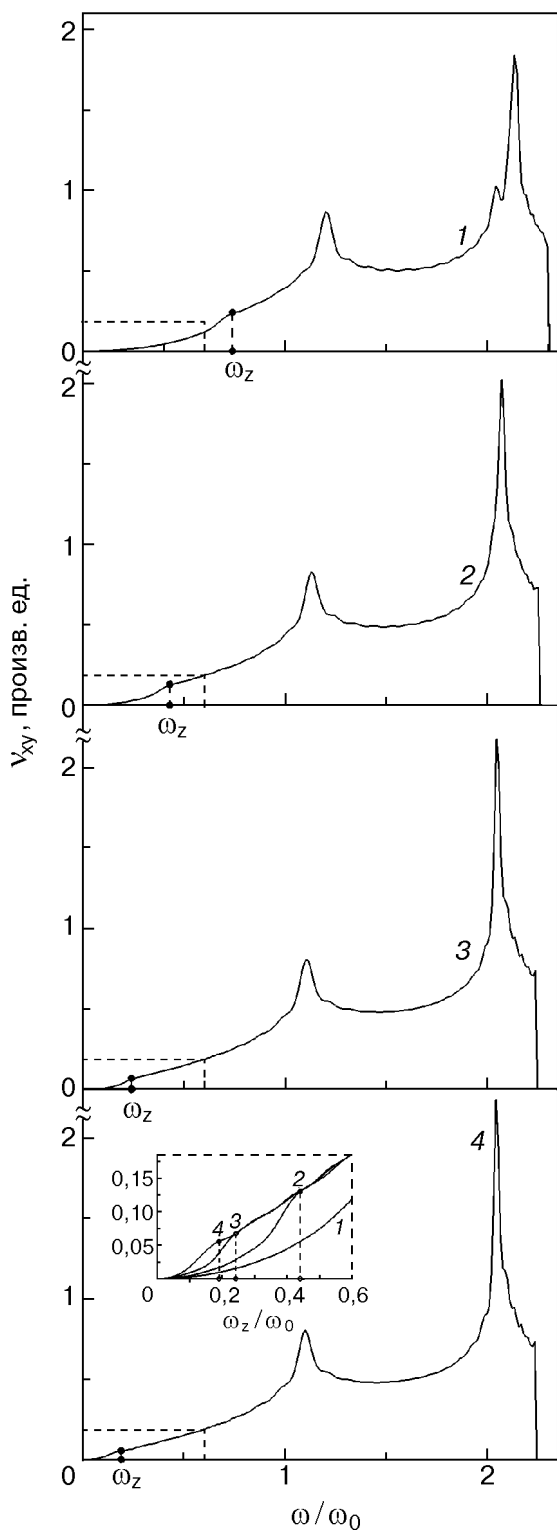


Рис. 1. Эволюция спектральных плотностей  $v_{x,y}$  с изменением анизотропии межатомного взаимодействия (параметра  $\gamma$ ):  $\gamma = 0,03$  (1);  $0,01$  (2);  $0,003$  (3);  $0,001$  (4).

На спектральных плотностях  $v_z(\omega)$  с уменьшением межслоевого взаимодействия формируется острый низкочастотный максимум (рис. 2), определяющий большинство аномалий в поведении

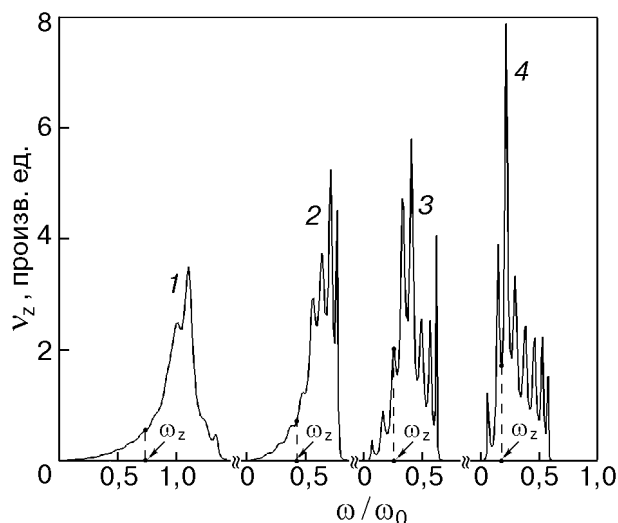


Рис. 2. Эволюция спектральных плотностей  $v_z$  с изменением параметра  $\gamma$  (нумерация кривых та же, что и на рис. 1).

колебательных термодинамических характеристик таких систем (см., например, [30,31]). При  $\alpha_{\perp} < \beta$  топология изочастотных поверхностей колебательной моды, поляризованной перпендикулярно слоям, определяется, главным образом, квазиизгибным слагаемым. Сильная анизотропия этого слагаемого в базисной плоскости (вытянутость изочастотных поверхностей вдоль координатных осей) обуславливает осцилляции соответствующих спектральных плотностей (кривые 2–4).

#### Квазиодномерный характер колебаний, локализованных вблизи примеси или примесного монослоя

Квазидвумерное поведение спектральных плотностей  $v_{x,y}(\omega)$  наблюдается при частотах  $\omega \geq \omega_z$ , т.е. в основном за пределами области локализации спектральной плотности  $v_z(\omega)$ . Поэтому для колебаний идеальной слоистой решетки, поляризованных в перпендикулярном слое направлении и слабо взаимодействующих с квазидвумерными фононами, которые поляризованы вдоль базисной плоскости, квазиодномерное поведение отнюдь не характерно (см. рис. 2).

В то же время соответствующим образом поляризованные колебания дефектных атомов (примесей и примесных монослоев) вполне могут иметь частоты, большие ван-хововской частоты  $\omega_z$ . В этом случае их поведение, в частности зависимость частоты от параметров дефекта, т.е. от изменения массы и силового взаимодействия (в данном случае межслоевого), должно быть аналогичным поведению *локальных* колебаний, лежа-

щих за пределами полосы сплошного спектра линейной цепочки. Естественно, что роль полосы сплошного спектра линейной цепочки будет в этом случае играть частотная область локализации спектральной плотности  $v_z(\omega)$ . Отличающаяся массой и силовым взаимодействием примесь в бесконечной линейной цепочке может привести к возникновению двух локальных колебаний [32,33]:

$$\omega_{l1}^2 = \frac{(\omega^*)^2}{8} \frac{1+\eta}{1+\varepsilon} \left\{ 3 + \varepsilon - \frac{1-\varepsilon}{\eta} + \frac{3+\varepsilon}{\eta} \left\{ (1+\eta) \left[ \left( \frac{1-\varepsilon}{3+\varepsilon} \right)^2 + \eta \right] \right\}^{1/2} \right\};$$

$$\omega_{l2}^2 = (\omega^*)^2 \frac{(1+\eta)^2}{4\eta},$$

(4)

где  $\omega^*$  — верхняя граница полосы сплошного спектра линейной цепочки;  $\varepsilon$  и  $\eta$  — относительное изменение массы и силовой постоянной соответственно. При этом сама примесь колеблется только с одной из локальных частот  $\omega_{l1}$ , а вторая локальная частота  $\omega_{l2}$  соответствует противофазному смещению ее ближайших соседей (сам примесной атом при этом покоится).

Пусть в слоистый кристалл, описываемый рассмотренной выше моделью, внедрен легкий монослой, связанный со слоями основной решетки сильнее, чем те связаны между собой. То есть в слоистом кристалле образовалась дефектная система из трех рядом расположенных слоев. В приближении одноатомной решетки, описывающем основные отличительные особенности фононного спектра сильноанизотропных слоистых кристаллов, это моделирует, например, внедрение легкого щелочного металла в слоистый полупроводник. Как правило, при этом  $\tilde{c}/\tilde{a} < c/a$  (характеристики примесных атомов будем отмечать *тильдой*). Положим  $\tilde{m}/m = 0,5$ ,  $\tilde{a} = a$  и  $\tilde{c}/a = 1,5$ . Так как в большинстве случаев легкие атомы имеют меньший атомный радиус, то, как правило [34],  $\tilde{\alpha}_{\parallel}^{(1)} < \alpha_{\parallel}^{(1)}$ . Выберем следующие значения силовых констант в дефектной системе:  $\tilde{\alpha}_{\parallel}^{(1)} = 0,5\alpha_{\parallel}^{(1)}$ ;  $\tilde{\alpha}_{\perp}^{(2)} = 0,1\alpha_{\perp}^{(1)}$ ,  $\tilde{\beta} = 0,04\alpha_{\perp}^{(1)}$  и  $\tilde{\alpha}_{\perp} > \alpha_{\perp}$ .

Рисунки 3, а-г соответствуют разным величинам взаимодействия дефектного монослоя с основной решеткой ( $\tilde{\alpha}_{\perp}$ ): а —  $\tilde{\alpha}_{\perp} = 0,1\alpha_{\perp}^{(1)}$ ; б —  $\tilde{\alpha}_{\perp} = 0,125\alpha_{\perp}^{(1)}$ ; в —  $\tilde{\alpha}_{\perp} = 0,15\alpha_{\perp}^{(1)}$  и г —  $\tilde{\alpha}_{\perp} = 0,175\alpha_{\perp}^{(1)}$ . На всех четырех рисунках представлены зависимости (4)  $\omega_{l1}(\eta)$  (при  $\varepsilon \equiv (\tilde{m} - m)/m = -0,5$ ) и  $\omega_{l2}(\eta)$  (кривые 1 и 2). Там же приведе-

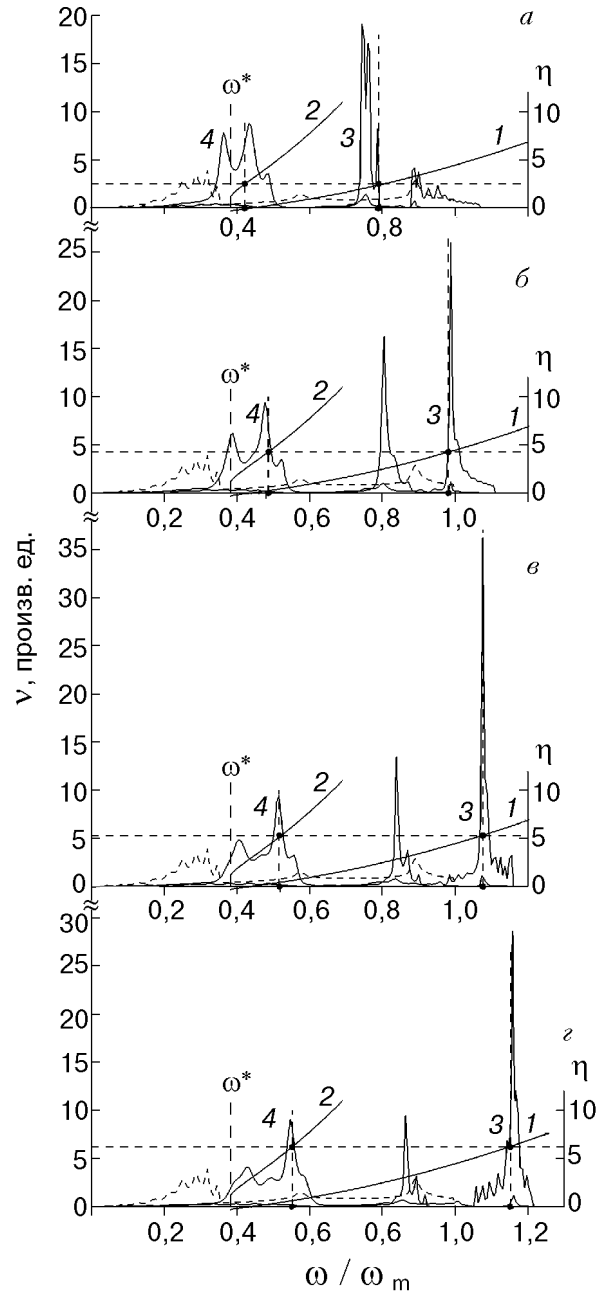


Рис. 3. Иллюстрация квазиодномерного поведения колебаний, локализованных вблизи легкого ( $\tilde{m}/m = 0,5$ ) сильно связанного ( $\tilde{\alpha}_{\perp} \gg \gamma\alpha_{\parallel}^{(1)}$ ) примесного монослоя, находящегося в глубине сильноанизотропного слоистого кристалла ( $\gamma = 0,01$ ):  $\tilde{\alpha}_{\perp} = 0,1\alpha_{\perp}^{(1)}$  (а);  $0,125\alpha_{\perp}^{(1)}$  (б);  $0,15\alpha_{\perp}^{(1)}$  (в) и  $0,175\alpha_{\perp}^{(1)}$  (г). Кривые 1 и 2 — зависимости (4)  $\omega_{l1}(\eta)$  (при  $\varepsilon \equiv (\tilde{m} - m)/m = -0,5$ ) и  $\omega_{l2}(\eta)$ ; кривые 3 и 4 — спектральные плотности  $v(\omega)$ , порожденные смещениями вдоль направления слабой связи атомов примесного монослоя и слоев, соседних с примесным, в противофазе друг к другу соответственно. Пунктирной кривой показана полная фононная плотность идеальной решетки.

ны зависимости спектральных плотностей (как функций частоты), порожденных смещениями вдоль направления слабой связи: атомов примес-

ного монослоя (кривые 3) и слоев, соседних с примесным, в противофазе друг к другу (кривые 4) ( $\omega_m$  — верхняя граница полосы сплошного спектра идеального слоистого кристалла). На кривых 3 имеются резкие резонансные максимумы, соответствующие колебаниям, локализованным в основном на самом примесном монослое. Распространение этих колебаний в плоскости монослоя (например, благодаря нецентральному взаимодействию между атомами) обуславливает наличие еще одного («сателлитного») максимума, высота которого резко убывает с выходом частоты основного максимума за пределы полосы сплошного спектра идеального кристалла. В частотных спектрах атомов других слоев (даже слоев, ближайших к примесному монослою) колебания с частотами обоих этих максимумов практически отсутствуют. Существенное размытие квазилокальных максимумов на кривых 4 также обусловлено распространением колебаний в плоскости соответствующих слоев.

Эффективная максимальная частота, входящая в выражения (4) как множитель, подобрана по частоте локального колебания, порождаемого легкой изотопической примесью в интересующей нас трехмерной структуре. Степень локализации такого колебания очень высока. Данная частота обозначена символом  $\omega^* \approx \omega_m \sqrt{C_{33}/C_{11}}$  (отношение упругих модулей  $C_{33}/C_{11} \sim 0,1$ , как у многих слоистых полупроводников).

Частоты квазилокальных максимумов на кривых 3 и 4 хорошо согласуются с частотами  $\omega_{11}$  и  $\omega_{12}$  при одном и том же значении параметра  $\eta$ , который для слоистого кристалла играет роль некоторого эффективного изменения межслоевого взаимодействия. Такое совпадение свидетельствует о квазиодномерном поведении локализованных вблизи примесного монослоя колебаний. Характер распространения колебаний в плоскостях дефектных слоев (например, будут ли «сателлитные» максимумы на кривых 3 на рис. 3,2 всегда острыми) зависит от характера межатомного взаимодействия в плоскости слоя (т.е. от выбранной модели). Частоты же локализованных колебаний от выбора модели практически не зависят и определяются выражениями (4), описывающими частоты локальных колебаний в линейной цепочке, несмотря на то, что локальные частоты за пределами полосы сплошного спектра являются полюсами функции Грина линейной цепочки, а квазилокальные пики на соответствующих спектральных плотностях слоистого кристалла лежат в полосе его сплошного спектра и в рассматриваемом случае такими полюсами быть не могут.

## Заключение

Таким образом, в сильноанизотропном слоистом кристалле происходит квазирасщепление колебательных мод, поляризованных параллельно и перпендикулярно слоям. При частотах больших частоты особенности Ван Хова  $\omega_2$ , соответствующей переходу от замкнутых изочастотных поверхностей к открытым вдоль направления слабой связи, фононы, поляризованные вдоль слоев, являются практически двумерными.

В идеальной слоистой решетке частоты фононов, поляризованных вдоль направления слабой связи, в основном ниже  $\omega_2$  и поэтому никаких одномерных особенностей в их поведении обнаружить нельзя. Вместе с тем имеющие такую же поляризацию колебания атомов примесей или примесных монослоев могут иметь частоты, лежащие выше  $\omega_2$ , и поэтому проявлять квазиодномерный характер.

Если для примесных атомов (или атомов примесных монослоев) межслоевое взаимодействие выше, чем для атомов основной слоистой решетки, то квазилокальные колебания с частотами, большими  $\omega_2$  (но меньшими частоты верхней границы полосы непрерывного спектра идеального кристалла), будут обусловлены не только соответствующими смещениями самих примесных атомов, но и противофазным смещением в данном направлении атомов слоев, соседних с примесным, которые вместе с примесным монослоем образуют некоторую дефектную систему.

Оба эти типа локализованных колебаний будут иметь квазиодномерный характер. Их характеристики (частота и степень локализации) практически не будут зависеть от геометрии слоев и характера внутрислоевого взаимодействия, т.е. тех свойств решетки, которые следуют из конкретной рассматриваемой модели. Такие локализованные колебания можно описывать с помощью точных аналитических выражений (4), полученных для моделей линейных цепочек с примесями.

1. A. N. Darinski and M. Weihnacht, *J. Appl. Phys.* **88**, 471 (2000).
2. A. M. Kosevich, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev, *Phys. Low-Dim. Struct.* **3**, 47 (1994).
3. R. Niclow, N. Wakabayashi, and H. G. Smith, *Phys. Rev.* **B5**, 4951 (1972).
4. N. Wakabayashi, H. G. Smith, and R. Shanks, *Phys. Lett.* **A50**, 367 (1974).
5. N. Wakabayashi, H. G. Smith, and R. Niclow, *Phys. Rev.* **B12**, 659 (1975).
6. W. P. Velon, R. Sherm, and C. Wetlier, *Solid State Commun.* **15**, 391 (1974).
7. S. Jandl, G. Z. Brebner, and B. M. Powell, *Phys. Rev.* **B13**, 686 (1976).

8. D. E. Monton, J. D. Axe, and F. J. Di Savio, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 734 (1975).
9. W. G. Stirling, B. Dorner, and J. D. N. Cheeke, *Solid State Commun.* **18**, 931 (1976).
10. B. M. Powell, S. Jandl, and F. Levy, *J. Phys.* **C10**, 3039 (1977).
11. A. Polian, K. Kune, and J. Rossat-Mignod, *J. Phys (Paris) suppl. collog.* **C6**, 42 (1981).
12. B. Dorner, R. E. Ghoh, and G. Harbeke, *Phys. Status Solidi* **B73**, 655 (1976).
13. G. Z. Brebner, S. Jandl, and B. M. Powell, *Nuovo Cimento* **B38**, 263 (1977).
14. H. G. Smith and N. Wakabayashi, in: *Dynamics of Solids and Liquids by Neutron Scattering*, S. W. Lovesey and T. Springer (eds.), Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York (1980), p. 97.
15. С. Б. Феодосьев, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **7**, 1214 (1981).
16. М. А. Иванов, А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, И. А. Господарев, Ю. В. Скрипник, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **19**, 434 (1993).
17. S. B. Feodosyev, I. A. Gospodarev, A. M. Kosevich, and E. S. Syrkin, *Phys. Low-Dim. Struct.* **10/11**, 209 (1995).
18. A. M. Kosevich, *The Crystall Lattice. Phonons, Solitons, Dislocations*, WILEY-VCH, Berlin (1999).
19. A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. N. Weiss, and I. P. Ipatova, *Lattice Dynamics and Models of Interatomic Forces, Springer Series in Solid State Sciences*, vol. 34, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1982).
20. G. Leibfried and P. Breuer, *Point Defects in Metals. Introduction to the Theory*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1978).
21. Н. Бöttger, *Principles of the Theory of Lattice Dynamics*, Akademie-Verlag, Berlin (1983).
22. В. И. Пересада, в сб.: *Физика конденсированного состояния*, № 2, Харьков (1968) с. 172.
23. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, *ЖЭТФ* **58**, 135 (1970).
24. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
25. R. Haydock, in: *Solid State Physics*, H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (eds.), Academic Press, New York (1980), p. 216.
26. И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **22**, 475 (1952).
27. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **8**, 760 (1982).
28. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, О. Я. Шамфарова, *ФНТ* **17**, 746 (1991).
29. С. Б. Феодосьев, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **9**, 528 (1983).
30. А. М. Гуревич, Б. Я. Сухаревский, А. В. Алапина, *ФНТ* **8**, 1111 (1982).
31. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **8**, 1115 (1982).
32. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **20**, 586 (1994).
33. М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **25**, 72 (1999).
34. S. B. Feodosyev, I. A. Gospodarev, M. A. Mamalui, and E. S. Syrkin, *J. Low Temp. Phys.* **111**, 441 (1998).

### Oscillations localized near impurity monolayers in a layered crystal

V. I. Grishaev, M. A. Mamalui, P. A. Minaev, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev

It is shown that in strongly anisotropic layered crystals the interaction between vibrational modes polarized along and perpendicular to the layers is very weak at frequencies above the Van Hove frequency which corresponds to the transition from closed isofrequency surfaces to those opened along the direction of weak coupling. This quasi-splitting of the oscillatory modes leads to a quasi-2D behavior of phonons polarized along the layers and to a quasi-1D behavior of phonons polarized in the direction perpendicular to the layers and localized near light or strongly bound impurity atoms or monolayers.