Физика низких температур, 1997, т. 23, № 1, с. 92–96

Колебания рэлеевского типа, локализованные у свободной поверхности ГЦК кристалла

А. М. Косевич, Д. В. Мацокин, С. Е. Савотченко

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

Статья поступила в редакцию 13 августа 1996 г.

В рамках модели центрального взаимодействия ближайших соседей описаны волны, локализованные вблизи свободной поверхности (001) ГЦК кристалла и распространяющиеся вдоль направления [110]. Частоты этих волн попадают в щели внутри спектра частот объемных гармонических колебаний при фиксированном значении компоненты волнового вектора k вдоль поверхности. Аналитически изучен длинноволновой предел и случай волновых векторов, близких к границе зоны Бриллюэна. Эти предельные зависимости находятся в согласии с результатами, полученными ранее другими авторами численными методами. Аналитические расчеты в предельных интервалах вектора k дополнены численными расчетами для любых значений волновых векторов. Существенно, что изученные волны имеют компоненту смещения, перпендикулярную поверхности кристалла, а потому могут изучаться стандартными методами неупругого рассеяния атомов гелия.

У рамках моделі центральної взаємодії найближчих сусідів описано хвилі, які локалізовані поблизу вільної поверхні (001) ГЦК кристала і розповсюджуються в напрямку [110]. Частоти цих хвиль потрапляють до щілин усередині спектра частот об'ємних гармонічних коливань при фіксованому значенні компоненти хвильового вектора вздовж поверхні. Аналітично досліджено довгохвильову границю і випадок хвильових векторів, які близькі до межі зони Бриллюена. Ці граничні залежності находяться у згоді з результатами, одержаними раніше іншими авторами, які використовували числові методи. Аналітичні розрахунки в граничних інтервалах вектора k доповнені числовими розрахунками для будь-яких значень хвильових векторів. Істотно, що досліджені хвилі мають компоненту зміщення, перпендикулярну до поверхні кристала, а тому можуть бути досліджені стандартними методами непружного розсіяння атомів гелію.

PACS: 63.20.Pw

Введение

И. М. Лифшиц был инициатором теоретического изучения локализованных колебаний в кристалле с дефектами (см. , например, обзоры [1,2]). Он рассмотрел локальные колебания вблизи точечных дефектов и ввел общепринятую в настоящее время классификацию локальных колебаний, связанную с размерностью дефектов, определяющих локализацию колебаний кристаллической решетки: колебания вблизи точечных дефектов (примесей), вблизи линейных дефектов (дислокаций) и вблизи двумерных или плоских дефектов (включая свободную поверхность кристалла). Хотя изучение поверхностных волн в теории упругости (волн Рэлея) имеет столетнюю историю, изучение поверхностных волн в динамической теории дискретной кристаллической решетки остается актуальным и в настоящее время. Использование многослойных кристаллических систем в электронике и акустоэлектронике, часто основанное на резонансных свойствах таких систем, требует анализа особенностей спектра колебаний, связанных с поверхностями, разделяющими отдельные монокристалические слои. Целью настоящей работы является решение подобной проблемы на простой модели ГЦК кристалла с взаимодействием ближайших соседей.

В разд. 1 формулируется модель центрального взаимодействия ближайших соседей, характеризующаяся всего одним свободным параметром. Но даже эта примитивная модель, неоднократно использовавшаяся ранее [3–5,7], дает возможность обнаружить особенности колебаний, локализованных у плоского дефекта. Если плоскость дефекта совпадает с кристаллографической плоскостью (001), то в локализованной волне, бегущей в направлении [110], происходит разделение динамики волны со смещением, параллельным поверхности (сдвиговая волна), и динамики волны рэлеевского типа (с вектором смещения, имеющим вертикальную составляющую и лежащим в сагиттальной плоскости). Поверхностная волна первого

© А. М. Косевич, Д. В. Мацокин, С Е. Савотченко, 1997

типа, являющаяся однокомпонентной, была проанализирована в работах [3,5]. В настоящей работе изучаются колебания второго типа, являющиеся двухпарциальными. Последнее обстоятельство значительно усложняет аналитические расчеты, делая их очень громоздкими, но все же допускает подробное описание предельных случаев (малые волновые векторы — длинноволновой предел и волновые векторы, близкие к границе зоны Бриллюэна).

В разд. 2 исследуется зависимость частоты поверхностной волны от волнового вектора. Согласно общей теории Лифшица, локализованные колебания обладают частотами, лежащими вне сплошного спектра частот гармонических колебаний кристаллической решетки. В рассматриваемом случае бегущие гармонические колебания с фиксированным волновым вектором в указанном выше направлении имеют спектр, обладающий щелью под наинизшей частотой, примыкающей к длинноволновой частоте одной из поперечных волн, а также щелью внутри спектра частот гармонических колебаний [4,6] при волновых векторах вблизи границы зоны Бриллюэна (рис. 1). Именно в эти щели должны попадать частоты колебаний, локализованных у свободной поверхности. Для нахождения возможных частот поверхностных колебаний берутся те локализованные решения объемных уравнений колебаний кристалла, которые удовлетворяют граничным условиям на поверхности кристалла.

В разд. 3 анализируются полученные результаты. Отмечено существование двух типов локализованных волн: низкочастотной, существующей при всех волновых векторах внутри зоны Бриллюэна, и высокочастотной волны, существующей лишь в окне спектра объемных колебаний при волновых векторах вблизи границы зоны Бриллюэна. Скорость низкочастотной волны в длинноволновом пределе совпадает со скоростью квазипоперечной объемной волны. Поэтому, в соответствии с известными ранее результатами, доказано, что не существует волны Рэлея, бегущей вдоль направления [110] в ГЦК кристалле. Подтверждено совпадение предельных случаев закона дисперсии поверхностных волн с результатами численного расчета [4,6], а также качественное совпадение общего вида зависимости частот поверхностных колебаний от волнового вектора с картиной для поверхностных волн, локализованных вблизи свободной поверхности (110) в ГЦК кристалле [8].

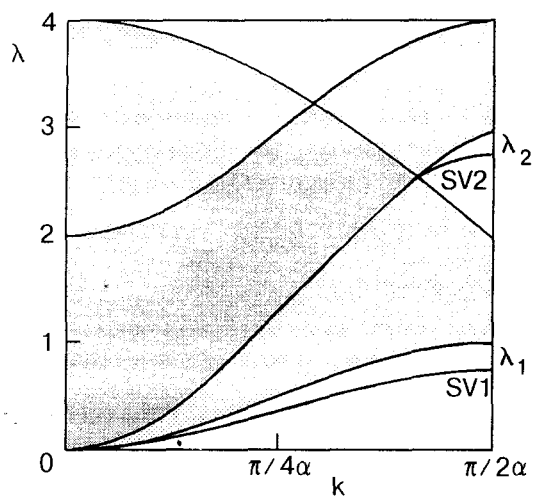

Рис. 1. Зависимость квадрата частоты $\lambda = m\omega^2/4\alpha$ от компоненты волнового вектора k вдоль поверхности кристалла для поверхностных волн SV1 и SV2. Заштрихованные области соответствуют объемным колебательным состояниям.

1. Теоретическая модель

Рассмотрим динамику простого ГЦК кристалла, состоящего из одинаковых атомов массой m, ограничиваясь центральным взаимодействием ближайших соседей. Выберем координатные оси стандартным для кубического кристалла образом, определив координаты ближайших к выделенному атому соседей в виде $a(\pm1,\pm1,0)$, $a(\pm1,0,\pm1)$, $a(0,\pm1,\pm1)$. Уравнения движения атомов кристалла в гармоническом приближении имеют вид

$$mu_i(\mathbf{n}) = -\sum_{\mathbf{n}'} A_{ik}(\mathbf{n}-\mathbf{n}')u_k(\mathbf{n}')\,, \qquad (1)$$

где $\mathbf{n}$ — номер-вектор атома в выбранной системе координат; $A_{ik}(\mathbf{n})$ — динамическая матрица силовых постоянных кристалла, которая учитывает симметрию задачи и обеспечивает трансляционную и вращательную инвариантность энергии кристалла. Силовая матрица с учетом взаимодействия ближайших и следующих за ними соседей получена в [7]. Мы воспользуемся приближением только ближайших соседей. Тогда отличные от нуля силовые матрицы $A_{ik}(\mathbf{n})$ в объеме кристалла имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} A_{ik}(0,0,0) &= 8\alpha\delta_{ik}\,,\\ A_{ik}(1,1,0) &= -\alpha\left(\delta_{i1}+\delta_{i2}\right)\left(\delta_{k1}+\delta_{k2}\right)\,,\\ A_{ik}(1,0,1) &= -\alpha\left(\delta_{i1}+\delta_{i3}\right)\left(\delta_{k1}+\delta_{k3}\right)\,,\\ A_{ik}(0,1,1) &= -\alpha\left(\delta_{i2}+\delta_{i3}\right)\left(\delta_{k2}+\delta_{k3}\right)\,, \end{aligned} \qquad (2)$$

где α — единственная силовая константа принятой модели ($\alpha > 0$). Аналогичным образом записывается силовая матрица для остальных ближайших соседей.

Пусть изучаемый кристалл занимает полупространство $z < 0$. Наличие свободной поверхности ($z = 0$) учитывается в уравнениях движения атомов граничного слоя изменением соответствующих матриц силовых постоянных: взаимодействие с атомами в области $z > 0$ равно нулю, а элемент «самодействия» можно представить как

$$A_{ik}(0, 0, 0) = \alpha \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Ищем решение уравнения (1) в виде волны, локализованной вблизи свободной поверхности. В качестве направления распространения волны выберем линию симметрии ΓX, считая волну распространяющейся в направлении ближайшего соседа: $\mathbf{k} = (k, k, 0)$. Тогда можно записать

$$u_i(\mathrm{n}, t) \equiv u_i\left(n_x, n_y, -s, t\right) = u_i^0 q^s \exp\left(iak(n_x + n_y) - i\omega t\right), \qquad (3)$$

где q — величина, ответственная за убывание амплитуды волны в глубь кристалла ($|q| < 1$); s нумерует плоскости в глубь кристалла ($s = 0$ для граничной плоскости). Подставляя (2) и (3) в (1), получаем следующие уравнения в объеме кристалла:

$$\begin{gathered}
\left[3 - \cos 2ka - \left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka - \frac{m\omega^2}{2\alpha}\right]u_x^0 + \left[1 - \cos 2ka\right]u_y^0 + \left[i\left(q - \frac{1}{q}\right)\sin ka\right]u_z^0 = 0, \\
\left[1 - \cos 2ka\right]u_x^0 + \left[3 - \cos 2ka - \left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka - \frac{m\omega^2}{2\alpha}\right]u_y^0 + \left[i\left(q - \frac{1}{q}\right)\sin ka\right]u_z^0 = 0, \qquad (4) \\
\left[i\left(q - \frac{1}{q}\right)\sin ka\right]u_x^0 + \left[i\left(q - \frac{1}{q}\right)\sin ka\right]u_y^0 + \left[4 - 2\left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka - \frac{m\omega^2}{2\alpha}\right]u_z^0 = 0.
\end{gathered}$$

Легко видеть, что система (4) распадается на уравнение для сдвиговой горизонтальной волны $u_x^0 = -u_y^0$, $u_z^0 = 0$ с законом дисперсии

$$\omega^2 = \frac{2\alpha}{m}\left[2 - \left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka\right]$$

и систему уравнений для волны рэлеевской поляризации ($u_x^0 = u_y^0$, $u_z^0 \neq 0$)

$$\begin{cases}
\left[4 - 2\cos 2ka - \left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka - 2\lambda\right]u_x^0 + \left[i\left(q - \frac{1}{q}\right)\sin ka\right]u_z^0 = 0, \\
\left[i\left(q - \frac{1}{q}\right)\sin ka\right]u_x^0 + \left[2 - \left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka - \lambda\right]u_z^0 = 0,
\end{cases} \qquad (5)$$

где обозначено $\lambda = m\omega^2/4\alpha$.

Из условия разрешимости системы (5) следует очевидное соотношение

$$\left[2 - \left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka - \lambda\right]\left[4 - 2\cos 2ka - \left(q + \frac{1}{q}\right)\cos ka - 2\lambda\right] + \left(q - \frac{1}{q}\right)^2 \sin^2 ka = 0. \qquad (6)$$

Оно определяет две ветви зависимости $q = q_\beta(\lambda, k)$, $\beta = 1, 2$. Последнее означает, что поверхностная волна с вертикальной поляризацией (SV) является двухпарциальной:

$$\mathrm{u} = \left(\mathrm{u}_1^0 q_1^s + \mathrm{u}_2^0 q_2^s\right)\exp\left(iak(n_x + n_y) - i\omega t\right). \qquad (7)$$

Следует отметить, что если в (6) положить $q = e^{i\varphi}$ ($|q| = 1$), то соотношение (6) определит спектр возможных объемных колебаний обсуждаемой поляризации при фиксированном k. Области этих состояний заштрихованы на рис. 1.

2. Закон дисперсии поверхностной волны рэлеевской поляризации

Чтобы найти закон дисперсии волны (7), т.е. зависимость $\omega = \omega(k)$, подставим (7) в уравнение движения поверхностных атомов ($z = 0$). В результате получим

$$\begin{aligned}\left(3 - 2\cos 2ka - 2\lambda\right)(u_{1x} + u_{2x}) - \cos ka(q_1 u_{1x} + q_2 u_{2x}) + i \sin ka(q_1 u_{1z} + q_2 u_{2z}) = 0\,,\\ i \sin ka(q_1 u_{1x} + q_2 u_{2x}) + (1 - \lambda)(u_{1z} + u_{2z}) - \cos ka(q_1 u_{1z} + q_2 u_{2z}) = 0\,,\end{aligned} \tag{8}$$

где для упрощения записи опущен индекс «0» у амплитуды волны.

Поскольку компоненты $u_{\alpha x}$ и $u_{\alpha z}$ ($\alpha = 1, 2$) связаны вытекающим из (5) соотношением

$$u_{\alpha x} = i\,\frac{2 - (q_\alpha + 1/q_\alpha)\cos ka - \lambda}{(q_\alpha - 1/q_\alpha)\sin ka}\,u_{\alpha z}\,, \tag{9}$$

однородная линейная система (8) определяет две амплитуды (например, u_{1z} и u_{2z}). Приравнивая нулю определитель этой однородной системы, получаем уравнение для закона дисперсии поверхностной волны. К сожалению, нахождение явного аналитического выражения для $\omega(k)$ не представляется возможным, поскольку получающийся определитель приводит к алгебраическому уравнению высокой степени. Поэтому мы вынуждены ограничиться рассмотрением очевидных предельных зависимостей, дополняя их численными расчетами на ЭВМ.

3. Анализ результатов

Наиболее просто исследуется длинноволновой предел ($k \to 0$) поверхностных колебаний. Вблизи свободной поверхности ГЦК кристалла существует только одна локализованная волна (SV1). Однако скорость этой волны в длинноволновом пределе равна скорости объемной звуковой поперечной волны:

$$\omega_1(k) = s_1 k\,,\quad s_1^2 = \frac{4\alpha}{m}\,a^2\,. \tag{10}$$

Поэтому с точки зрения теории упругости в направлении [110] не существует локализованной вблизи свободной поверхности волны. Этот вывод, естественно, согласуется с известными результатами теории упругости (см., например, [9]).

Отщепление закона дисперсии поверхностной волны от звукового спектра при малых k имеет порядок величины

$$\frac{s_1 k - \omega_1(k)}{s_1 k} \sim (ak)^2$$

и очевидным образом возрастает с ростом k.

В пределе $ak = \pi/2$ квадрат частоты волны SV1 равен $\omega_1^2 = 4\alpha\lambda_1/m$, где

$$\lambda_1 = \frac{1}{4}\left(7 - \sqrt{17}\right)\,. \tag{11}$$

В основном приближении по малым $\xi = (\pi/2) - ak$ можно получить следующее разложение:

$$\omega_1(k) = \omega_1 - 0{,}6\omega_V\left(\frac{\pi}{2} - ak\right)^2\,, \tag{12}$$

где $\omega_V^2 = 4\alpha/m$.

Помимо волны SV1, вблизи границы зоны Бриллюэна существует высокочастотное локализованное колебание (SV2), попадающее в «окно» колебательного спектра (рис. 1). Предельный квадрат частоты волны SV2 равен $\omega_2^2 = 4\alpha\lambda_2/m$, где

$$\lambda_2 = \frac{1}{4}\left(7 + \sqrt{17}\right)\,. \tag{13}$$

При малых ξ закон дисперсии волны SV2 можно представить в виде

$$\omega_2(k) = \omega_2 - 0{,}7\omega_V\left(\frac{\pi}{2} - ak\right)^2\,. \tag{14}$$

Предельные значения квадратов частот волн SV1 и SV2, а именно величины (11) и (13), совпадают с полученными ранее при численном расчете [4,6].

График зависимости $\omega = \omega(k)$ вдали от границы зоны Бриллюэна можно построить путем численного расчета. В полном соответствии с выводом работы [6], этот график заканчивается в той точке «окна» в спектре объемных колебаний, где пересекаются нижняя граница псевдопродольных объемных волн с верхней границей псевдопоперечных объемных волн (рис. 1). Аналогичный результат описан в работе [8], где изучались поверхностные волны у свободной поверхности ГЦК кристалла другой ориентации (а именно, (110)). В работах [6,8] сделан вывод о том, что продолжением графика закона дисперсии волны SV2 в сплошном спектре служит зависимость $\omega = \omega(k)$ для так называемых резонансных состояний. Однако опыт изучения квазилокализованных поверхностных

волн в изотропной среде [10,11] показывает, что эта проблема должна быть рассмотрена специально.

В заключение отметим, что изученные в настоящей работе поверхностные волны имеют составляющую смещения, перпендикулярную поверхности кристалла и, следовательно, коротковолновые участки их спектра могут наблюдаться в экспериментах, например, по рассеянию атомов гелия на кристаллической поверхности. Именно перпендикулярная поверхности кристалла составляющая дает основной вклад в такое рассеяние [12].

Авторы выражают благодарность Е. С. Сыркину и А. В. Тутову за обсуждение полученных результатов. Работа выполнялась частично при поддержке грантами ISF U2I200 и ISSEP 042032, а также в рамках проекта Государственного комитета Украины во вопросам науки, техники и промышленной политики «Двойник».

1. I. M. Lifshits, *Nuovo Cim. Suppl.* 3, 716 (1956).
2. I. M. Lifshits and A. M. Kosevich, *Rept. Progr. Phys.* 29, 217 (1966). (Русский перевод в кн.: И. М. Лифшиц, *Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987) с. 142.)
3. И. М. Гельфгат, *ФТТ* 19, 1711 (1972).
4. В. И. Пересада, Е. С. Сыркин, *ФНТ* 3, 229 (1977).
5. А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, А. В. Тутов, *ФНТ* 22, 804 (1996).
6. R. E. Allen, G. P. Alldredge, and F. W. de Wette, *Phys. Rev.* B4, 1661 (1971).
7. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*, Наука, Москва (1963).
8. A. Franchini, G. Santoro, V. Bortolani, and R. F. Wallis, *Phys. Rev.* B38, 12139 (1988).
9. D. C. Gazis, R. Herman, and R. F. Wallis, *Phys. Rev.* 119, 533 (1960).
10. А. М. Косевич, А. В. Тутов, *ФНТ* 11, 1273 (1993).
11. A. M. Kosevich and A. V. Tutov, *Phys. Lett.* A213, 265 (1996).
12. G. Braco, R. Tatarek, F. Tommasini, V. Linke, and M. Persson, *Phys. Rev.* B36, 2928 (1987).

Rayleigh oscillations localized near free surface of a fcc crystal

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

The waves, which are localized near the free (001) surface of a fcc crystal and propagate in the [110] direction, are described using the model of central interaction of the nearest neighbors. The frequencies of these waves come into the gaps within the frequency spectrum of bulk harmonic oscillations with a fixed wave vector k component along the surface. The long-wave limit and the case of wave vectors close to the Brillouin band boundary are studied analytically. These limit dependences are in agreement with other autors' results which were obtained by numerical methods. Analytical calculations in the limit intervals of k are supplemented by numerical calculations for any values of the wave vector. It is essential that these waves have a displacement component which is perpendicular to the crystal surface and can, therefore, be studied by methods of He atoms inelastic scattering.