

Однокомпонентные однопарциальные поверхностные акустические волны в кубических кристаллах с учетом поверхностной дисторсии

М.С. Ключко

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

Статья поступила в редакцию 12 ноября 2013 г., опубликована онлайн 21 апреля 2014 г.

Рассмотрены поверхностные волны и зоны объемных колебаний с учетом взаимодействия между ближайшими и ближайшими соседями в кубическом кристалле. Получены выражения для законов дисперсии, величин отщепления частот поверхностных волн от объемного спектра и параметров убывания амплитуды для кристаллических систем, в которых поверхностные волны являются однокомпонентными и однопарциальными. Вычисления выполнены с учетом дискретности кристаллической решетки при произвольных значениях двумерного волнового вектора. Проведенный анализ показал полное соответствие полученных результатов в длинноволновом пределе с результатами, найденными в рамках линейной нелокальной теории упругости. Изучено влияние адсорбированного на поверхности монослоя на характеристики поверхностных волн.

Розглянуто поверхневі хвилі та зони об'ємних коливань із урахуванням взаємодії між найближчими та найближчими сусідами у кубічному кристалі. Отримано вирази для законів дисперсії, величин відщеплення частот поверхневих хвиль від об'ємного спектра та параметрів загасання для кристалічних систем, у яких поверхневі хвилі є однокомпонентними та однопарціальними. Розрахунки виконано із урахуванням дискретності кристалічної ґратки за довільних значеннях двовимірного хвильового вектора. Аналіз, який проведено, показав повну відповідність отриманих результатів у довгохвильовому ліміті із результатами, які знайдено у рамках лінійної нелокальної теорії пружності. Вивчено вплив адсорбованого на поверхні моношару на характеристики поверхневих хвиль.

PACS: 63.20.-e Фононы в кристаллических решетках;

63.20.D- Фононные состояния и зоны, нормальные моды и дисперсия фононов.

Ключевые слова: фононы, объемные и поверхностные волны, дискретность решетки, поверхностная дисторсия.

1. Введение

Огромный интерес к изучению поверхностных волн не ослабевает как в фундаментальных исследованиях, так и в значительно расширившейся сфере их применения в технологических приложениях. Упругие поверхностные волны чрезвычайно важны в геофизике (при землетрясениях именно поверхностные волны обладают наибольшей разрушительной силой), а в настоящее время область их применения существенно расширена. К примеру, ультразвуковой контроль (используются ультразвуковые поверхностные волны) является одним из самых распространенных методов неразрушающего контроля. С помощью ультразвуковых поверхностных волн можно не только обнаружить

дефект в образце практически любой формы, но и определить свойства тонкого поверхностного слоя.

Кроме того, применение поверхностных волн в технологических приложениях [1] (фильтры, линии задержки, усилители, сенсоры и т.д.) является очень перспективным. По сравнению с объемными волнами поверхностные обладают рядом существенных преимуществ, таких как уменьшение скорости распространения, доступность всего пути следования при распространении волны вдоль волновода и более широкие возможности для усиления. Исследование как уже известных, так и еще неизученных типов поверхностных волн представляет большой интерес в контексте технологических применений.

Кроме хорошо известных волн Рэлея [2], особый интерес представляют чисто сдвиговые поверхностные волны с горизонтальной поляризацией (SH волны) [3,4]. Для рэлеевских волн справедливо, что $u_x, u_z \neq 0, u_y = 0$ (ось x направлена вдоль направления распространения волны, а z вдоль нормали к поверхности). В случае SH волн выполняется следующее: $u_x, u_z = 0, u_y \neq 0$. Такие волны гораздо чувствительнее к характеристикам поверхности, чем волны рэлеевской поляризации [3,4]. Это связано с тем, что глубина проникновения чисто сдвиговых поверхностных волн в длинноволновом пределе гораздо больше, чем у волн Рэлея. В том случае если рассматриваемый кристалл обладает достаточно высокосимметричной геометрией, чисто сдвиговые поверхностные волны отщепляются от волн Рэлея и являются однокомпонентными [4].

Поэтому при изучении таких поверхностных волн, не теряя общности, можно рассматривать так называемые скалярные модели, которые характеризуется одним вектором смещения. К примеру, спиновые волны в магнитоупорядоченных системах в одномагнитном приближении описываются с помощью такой модели [5].

В настоящей работе на микроскопическом уровне изучены зоны объемных колебаний и свойства однокомпонентных поверхностных волн, отщепляющихся от непрерывного спектра, в зависимости от ориентации поверхности, направления двумерного волнового вектора и его значений в двумерной зоне Бриллюэна. Мы изучаем высокосимметричные случаи, в которых поверхностные волны являются не только однокомпонентными, но и однопарциальными. Кроме того, рассмотрено влияние учета вторых соседей для простой кубической (ПК) решетки и гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки с ориентационной плоскостью (001). Показано, что в ПК (001) с учетом взаимодействия только между ближайшими соседями поверхностная волна (ПВ) не возникает, а возникает при учете, по крайней мере, вторых соседей, и также при наличии адсорбированного поверхностью примесного монослоя. Вычисления проведены на основе метода, изложенного в работах [4,6,7]. Использованный метод обладает достаточно широкой общностью и может быть использован в моделях, близких к реальным системам, для изучения как непрерывных, так и дискретных спектров колебаний кристалла [8–10].

Работа структурирована следующим образом.

Во втором разделе рассмотрены в модели простой кубической решетки как объемные зоны, так и поверхностные колебания с учетом взаимодействия между первыми и вторыми соседями, а также поверхностной дисторсии. В третьем разделе аналогичный анализ проведен для гранецентрированного кубического кристалла. В разделе четыре изучено влияние адсорбированного монослоя на характеристики поверхностных волн. В пятом разделе изложены выводы.

2. Простая кубическая решетка

Рассмотрим зоны объемных колебаний и поверхностные волны с учетом взаимодействия между первыми и вторыми соседями, а также учет поверхностной дисторсии в ПК.

2.1. Зоны объемных колебаний

В одноатомной простой кубической решетке с выбранной ориентационной плоскостью (001) в глубине кристалла уравнение движения атомов с учетом взаимодействия между первыми n' и вторыми n'' соседями имеет следующий вид:

$$m\ddot{u}(n,t) = -\alpha_1 \sum_{n'} u(n',t) - \alpha_2 \sum_{n''} u(n'',t), \quad (1)$$

где α_1 и α_2 — коэффициенты межатомного взаимодействия между первыми и вторыми соседями, m — масса атома, u — его смещение.

Будем искать решение уравнения движения атомов в кристалле в виде

$$u(n) = u(0) \exp [i(k_1 a_0 + k_2 a_0 + k_3 a_0 - \omega t)]. \quad (2)$$

Компоненты волнового вектора \mathbf{k} направлены следующим образом: k_1 вдоль оси x , k_2 вдоль y , а k_3 вдоль z ; a_0 — параметр решетки. В такой модели каждый атом обладает шестью ближайшими соседями и двенадцатью вторыми соседями.

Просуммировав по всем атомам, получаем закон дисперсии для колебаний атомов в глубине кристалла (объемные колебания):

$$\begin{aligned} \frac{m\omega_v^2}{\alpha_1} = & 6 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2 - 2\cos k_3 - \\ & - y [12 - 4\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \times \\ & \times \cos \left[k_3 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4\cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_3 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right]], \quad (3) \end{aligned}$$

где $y = \alpha_2/\alpha_1$.

На рис. 1 представлены зоны объемных колебаний как функция двумерного волнового вектора $\chi(k_1, k_2)$ при фиксированных k_3 в случае ближайших и следующих соседей. С увеличением параметра y меняется и ширина зоны объемных колебаний. При

$$y = -\frac{1}{2(\cos k_1 + \cos k_2)} \quad (4)$$

зона обращается в точку. Предельное значение $y = 0,25$, при котором это происходит, соответствует граничной точке зоны Бриллюэна $k_1 = k_2 = k = \pi$. При дальнейшем усилении связи между вторыми соседями такая точка попадает внутрь зоны Бриллюэна.

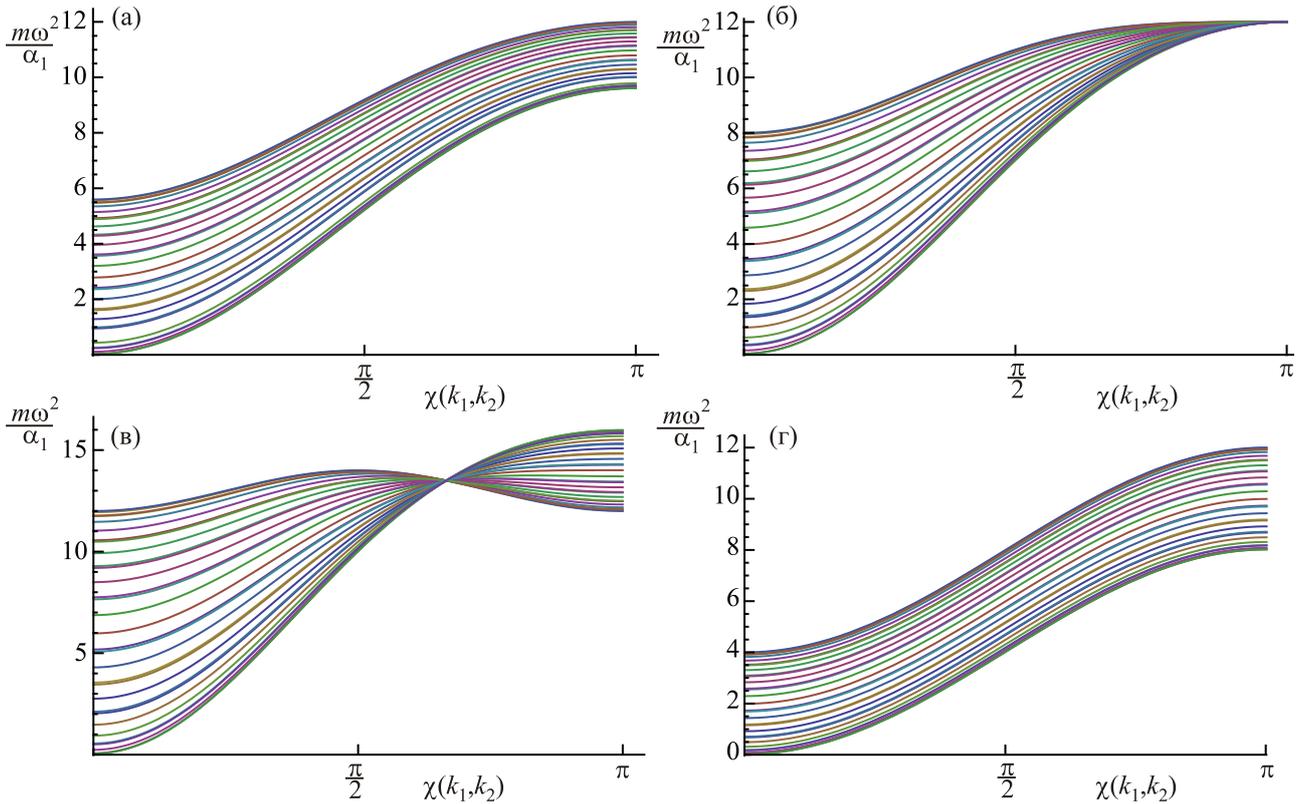


Рис. 1. (Онлайн в цвете) Зона объемных колебаний в простой кубической решетке, ориентационная плоскость (001): $y = 0,1$ (а), $y = 0,25$ (б), $y = 0,5$ (в) (с учетом первых и вторых соседей), $y = 0$ (г) (с учетом первых соседей).

Законы дисперсии нижней и верхней границ зоны сплошного спектра равны:

$$\frac{m(\omega_v^2)_{\min}}{\alpha_1} = 4 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2 + y \left[12 - 4\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \times \right. \\ \left. \times \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4\cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right], \quad (5)$$

$$\frac{m(\omega_v^2)_{\max}}{\alpha_1} = 8 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2 + y \left[12 - 4\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \times \right. \\ \left. \times \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + 4\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + 4\cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right]. \quad (6)$$

Ширина объемной зоны, равная разности частот верхней и нижней границы сплошного спектра, для каждого из рассмотренных случаев равна:

$$d = \frac{m(\omega_v^2)_{\max}}{\alpha_1} - \frac{m(\omega_v^2)_{\min}}{\alpha_1} = \\ = 4 + 8y \left[\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right]. \quad (7)$$

В отличие от случая приближения ближайших соседей ($y = 0$), когда ширина сплошного спектра постоянна ($d = 4$), при учете вторых соседей d зависит от $\chi(k_1, k_2)$.

Перейдем теперь к изучению поверхностных волн и покажем, что многие характеристики этих волн связаны со свойствами рассмотренных объемных зон.

2.2. Поверхностные волны

Пусть плоскость с ориентацией (001) выходит на поверхность. Подставляя (2) в (1), получаем следующее выражение:

$$m\omega^2 u(n) = \alpha_1 \sum_{n'} u(n') + \alpha_2 \sum_{n''} u(n''). \quad (8)$$

Уравнение для смещения атома, расположенного в глубине кристалла, имеет вид

$$\frac{u(n)m\omega_s^2}{\alpha_1} = u(n) [6 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2] - \\ - [u(n-1) + u(n+1)] + y [u(n)(12 - 4\cos k_1 \cos k_2) - \\ - 2(\cos k_1 + \cos k_2)(u(n-1) + u(n+1))]. \quad (9)$$

Решение будем искать в виде

$$u(n) = u(0)q^n. \quad (10)$$

Здесь q — параметр, определяющий затухание амплитуды поверхностной волны с удалением ее от поверхности кристалла, $|q| < 1$. Характеристическое уравнение (уравнение движения для слоя, находящегося в глубине кристалла) имеет вид

$$\begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} u(0) = u(0)(5 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2) - u(1) + y[u(0)(8 - 4\cos k_1 \cos k_2) - 2u(1)(\cos k_1 + \cos k_2)], & n=0, \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} u(1) = u(1)(6 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2) - [u(0) + u(2)] + y[u(1)(12 - 4\cos k_1 \cos k_2) - 2(\cos k_1 + \cos k_2)(u(0) + u(2))], & n=1. \end{cases} \quad (12)$$

Система линейных однородных уравнений (12) имеет единственное решение при условии равенства нулю детерминанта системы. Из условия обращения определителя в нуль с использованием характеристического уравнения (11) получаем следующие решения:

$$\begin{cases} q = \frac{1 + 2y(\cos k_1 + \cos k_2)}{1 + 4y} \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 5 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2 + 8y - 4y\cos k_1 \cos k_2 - \frac{[1 + 2y(\cos k_1 + \cos k_2)]^2}{1 + 4y}. \end{cases} \quad (13)$$

Если мы ограничимся учетом только ближайших соседей, то поверхностная волна не возникнет ($q = 1$ при $y = 0$). При учете вторых соседей выполняется условие $|q| < 1$ т.е. в этой модели поверхностная волна возникает (выражение (13)). Величина отщепления Δ поверхностной волны от сплошного спектра:

$$\Delta = \frac{m(\omega_v^2)_{\min}}{\alpha_1} - \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = (1 + 4y)(1 - q)^2. \quad (14)$$

Величина Δ всегда больше нуля при $y > -1/4$. Законы дисперсии для ПК (001) при $y = 0,1$, $y = 0,25$ и $y = 0,5$ представлены на рис. 2.

Учтем наличие поверхностной дисторсии, т.е. изменение межатомного взаимодействия в приповерхностной области по сравнению с взаимодействием в объеме. Положим, что α'_1 — параметр взаимодействия между плоскостями $n = 0$ (поверхностный слой) и $n = 1$ (подповерхностный слой); нумерует слои вдоль оси z (рис. 3(а)).

Поскольку взаимодействие между слоями с номерами 0 и 1 отлично от взаимодействия между атомами в остальной части кристалла, будем искать реше-

$$\begin{aligned} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} &= 6 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2 - \left(q + \frac{1}{q}\right) + \\ &+ y(12 - 4\cos k_1 \cos k_2) - 2y\left(q + \frac{1}{q}\right)(\cos k_1 + \cos k_2). \end{aligned} \quad (11)$$

Уравнения для дефектного ($n = 0$) и промежуточного ($n = 1$) слоев в ПК с ориентацией плоскости поверхности (001) в рассматриваемом приближении:

ние в следующем виде, и затем подставим это выражение в (1):

$$u(n) = u(1)q^n. \quad (15)$$

Здесь q — параметр, определяющий затухание амплитуды поверхностной волны с удалением ее от поверхности кристалла, $|q| < 1$. Из-за учета дисторсии $u(0)$ в эту последовательность не входит.

Характеристическое уравнение (для $n > 1$) в приближении ближайших соседей имеет вид (11) при $y = 0$.

Граничные условия для поверхностного и подповерхностного слоев (при $n = 0$ и $n = 1$):

$$\begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 5 + \frac{\alpha'_1}{\alpha_1} - 2\cos[k_1 a_0] - 2\cos[k_2 a_0] - \frac{\alpha'_1}{\alpha_1} - q, & n=1, \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 4 + \frac{\alpha'_1}{\alpha_1} - 2\cos[k_1 a_0] - 2\cos[k_2 a_0] - \frac{\alpha'_1}{\alpha_1}, & n=0. \end{cases} \quad (16)$$

Нетрудно показать, что из уравнений (11) и (16) решений, соответствующих $|q| < 1$, не существует при любом соотношении α'_1/α_1 , т.е. в рассматриваемой геометрии в приближении ближайших соседей поверхностных волн не возникает как без учета дисторсии, так и с учетом дисторсии рассмотренного вида.

Учтем теперь изменение связей внутри поверхностного слоя (рис. 3(б)). Будем искать решение в виде (10),

$$\begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 6 - 2\cos[k_1 a_0] - 2\cos[k_2 a_0] - 1 - q, & n=1, \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 4 \frac{\alpha'_1}{\alpha_1} + 1 - 2 \frac{\alpha'_1}{\alpha_1} \cos[k_1 a_0] - 2 \frac{\alpha'_1}{\alpha_1} \cos[k_2 a_0] - 1, & n=0. \end{cases} \quad (17)$$

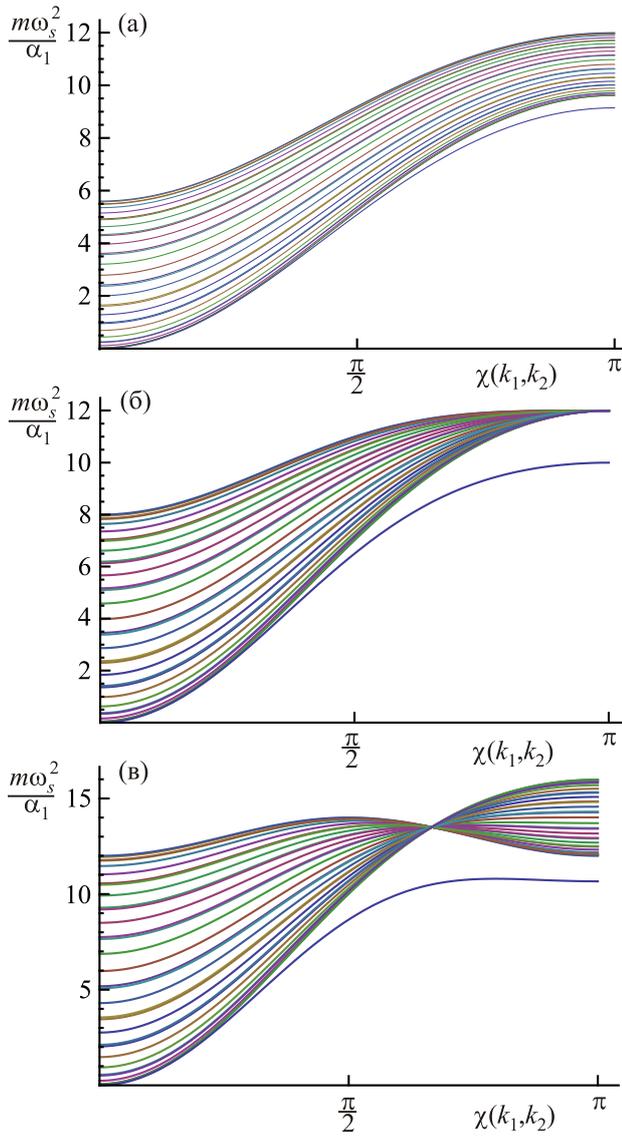


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Объемные колебания (заштрихованная область) и поверхностная волна в ПК решетке с ориентацией (001) плоскости поверхности: $y = 0,1$ (а), $y = 0,25$ (б), $y = 0,5$ (в).

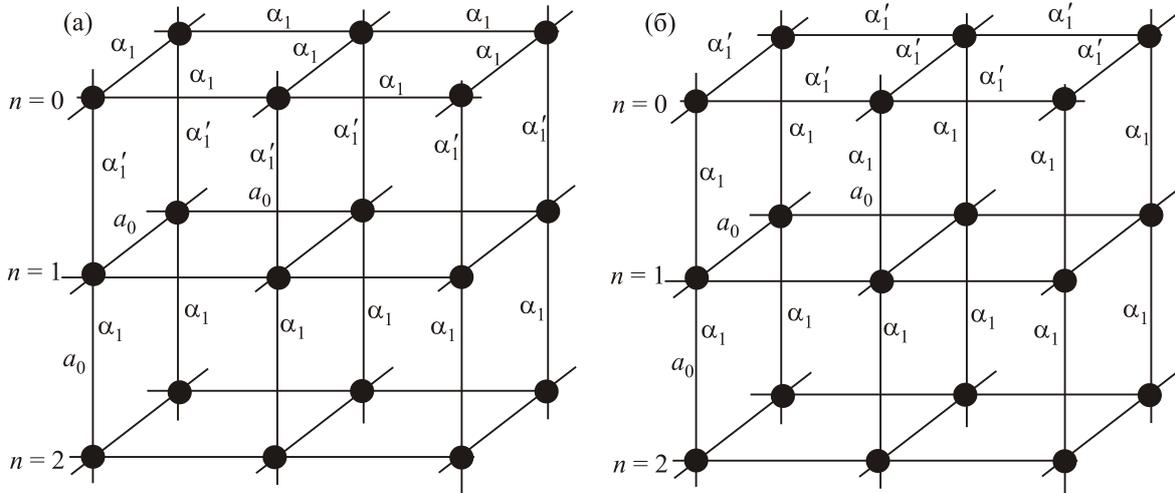


Рис. 3. Простая кубическая решетка с плоскостью (001) ориентации поверхности и взаимодействием α_1' : между слоями $n = 0$ и 1 (а), в слое $n = 0$ (б).

Отсюда

$$\begin{cases}
 q = \frac{1}{5 - 4\frac{\alpha_1'}{\alpha_1} - 2\left(\frac{\alpha_1'}{\alpha_1} - 1\right)(\cos[k_1 a_0] + \cos[k_2 a_0])}, \\
 \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 6 - 2(\cos[k_1 a_0] + \cos[k_2 a_0]) - \\
 \left(5 - 4\frac{\alpha_1'}{\alpha_1} - 2\left(\frac{\alpha_1'}{\alpha_1} - 1\right)(\cos[k_1 a_0] + \cos[k_2 a_0])\right) \cdot \\
 \frac{1}{5 - 4\frac{\alpha_1'}{\alpha_1} - 2\left(\frac{\alpha_1'}{\alpha_1} - 1\right)(\cos[k_1 a_0] + \cos[k_2 a_0])}.
 \end{cases} \quad (18)$$

Законы дисперсии поверхностных волн при различных соотношениях $\alpha_1'/\alpha_1 < 1$ представлены на рис. 4.

В случае $\alpha_1'/\alpha_1 = 1$ поверхностная волна отсутствует, поскольку решение уравнения совпадает с нижней границей сплошного спектра $m(\omega_v^2)_{\min}/\alpha_1$ (что соответствует выражению (5) при $y = 0$) и параметр «затухания» q , естественно, обращается в единицу.

Проанализируем теперь законы дисперсии и глубину проникновения в рассмотренных случаях в длинноволновом приближении, т.е. при $ka \ll 1$, где k — двумерный волновой вектор, a — параметр решетки. Для ПК (001) в приближении $y \ll 1$ из (15) получаем следующее:

$$\Delta = \frac{4y^2(ka)^4}{1 + 4y}. \quad (19)$$

Величина отщепления пропорциональна квадрату параметра затухания q (см. выражение (14)), т.е. $q \sim (ka)^2$. Глубина проникновения l волны в кристалл — величина, обратно пропорциональная q [7,9]. В случае волн Рэлея она пропорциональна длине волны $l \sim 1/k \sim \lambda$, в то время как для рассматриваемых нами волн глубина проникновения гораздо больше: $l \sim 1/k^2 \alpha \sim \lambda^2$. Сле-

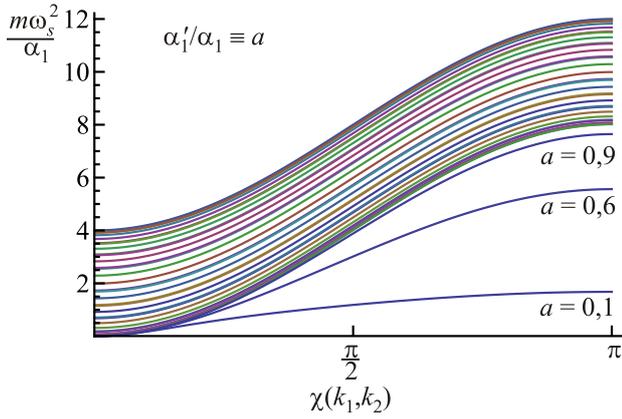


Рис. 4. (Онлайн в цвете) Зона объемных колебаний и поверхностные волны в ПК решетке, ориентационная плоскость поверхности (001) с учетом поверхностной дисторсии.

довательно, исследуемые нами волны, которые являются аналогом чисто сдвиговых поверхностных волн с горизонтальной поляризацией в длинноволновом пределе в векторной модели, являются квазиобъемными, поскольку их глубина проникновения значительно больше рэлеевских в длинноволновом пределе (отщепление рассматриваемой поверхностной волны от объемного спектра гораздо меньше, чем отщепление рэлеевской волны).

3. Гранецентрированный кубический кристалл

3.1. Зоны объемных колебаний

Рассмотрим гранецентрированную кубическую решетку с ориентационной плоскостью (001), расположенной в глубине кристалла. Выберем компоненты волнового вектора \mathbf{k} в виде двумерного волнового вектора $\chi(k_1, k_2)$, расположенного в плоскости (xy) и k_3 , перпендикулярного плоскости. В ГЦК (001) атом обладает двенадцатью ближайшими и шестью вторыми соседями. Закон дисперсии объемных колебаний имеет вид

$$\frac{m\omega_v^2}{\alpha_1} = 12 - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \times \cos \left[k_3 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4 \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_3 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + y [6 - 2 \cos 2k_1 - 2 \cos 2k_2 - 2 \cos 2k_3]. \quad (20)$$

На рис. 5 приведены зоны объемных колебаний как функция двумерного волнового вектора $\chi(k_1, k_2)$ при фиксированных k_3 в случае ближайших ($y = 0$, рис. 5(в)) и следующих соседей ($y \neq 0$, рис. 5(а), (б)).

Зона объемных колебаний построена для высокосимметричных направлений двумерного волнового вектора $\chi(k_1, k_2)$ двумерной зоны Бриллюэна (рис. 6).

Законы дисперсии для нижней и верхней границы зоны объемных колебаний:

$$\frac{m(\omega_v^2)_{\min}}{\alpha_1} = 12 - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 4 \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + y [4 - 2 \cos 2k_1 - 2 \cos 2k_2], \quad (21)$$

$$\frac{m(\omega_v^2)_{\max}}{\alpha_1} = 12 - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + 4 \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + y [8 - 2 \cos 2k_1 - 2 \cos 2k_2]. \quad (22)$$

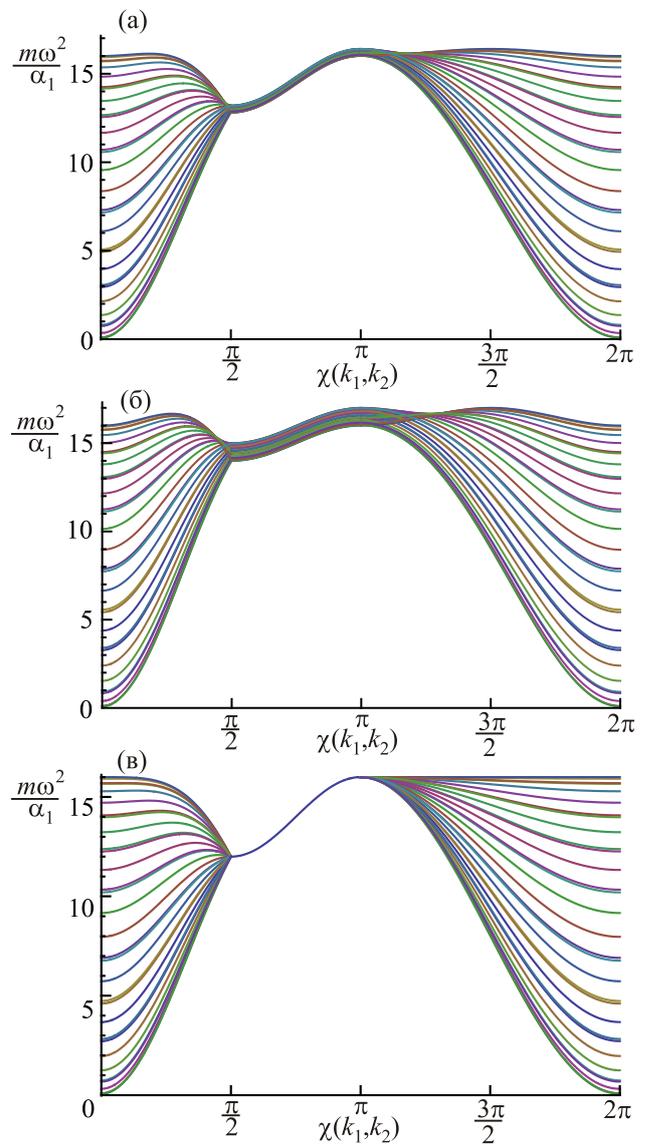


Рис. 5. (Онлайн в цвете) Зона объемных колебаний в гранецентрированном кубическом кристалле с ориентационной плоскостью (001), расположенной в глубине кристалла: $y = 0,1$ (а), $y = 0,25$ (б), $y = 0$ (в).

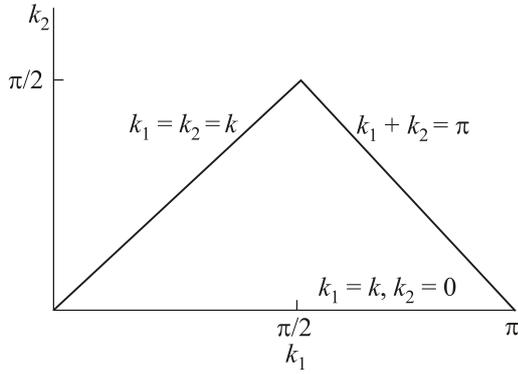


Рис. 6. Двумерная зона Бриллюэна в ГЦК кристалле.

Ширина объемной зоны в рассматриваемом приближении равна:

$$d = 8 \left(\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right) + 4y. \quad (23)$$

Сплошной спектр становится шире при увеличении значения параметра y . Ширина объемной зоны вдоль рассматриваемых симметричных линий двумерной зоны Бриллюэна (рис. 6) имеет вид

$$k_1 = k_2 = k, \quad d = 16 \cos \left[k \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + 4y; \quad (24)$$

$$k_1 + k_2 = \pi, \quad d = 4y; \quad (25)$$

$$k_2 = 0, \quad k_1 = k, \quad d = 16 \cos^2 \left[k \frac{a_0}{2\sqrt{2}} \right] + 4y. \quad (26)$$

Отметим, что чем больше вклад вторых соседей, тем шире зона объемных колебаний в этой области (рис. 5(а), (б)). В такой геометрии в приближении вторых соседей поверхностные волны являются двухпарциальными.

Ширина объемной зоны в приближении ближайших соседей (рис. 5(в)) имеет вид

$$d = \frac{m(\omega_v^2)_{\max}}{\alpha_1} - \frac{m(\omega_v^2)_{\min}}{\alpha_1} = 8 \left(\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right), \quad (27)$$

и для различных областей $\chi(k_1, k_2)$ в двумерной зоне Бриллюэна равна:

$$k_1 = k_2 = k, \quad d = 16 \cos \left[k \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right]; \quad (28)$$

$$k_1 + k_2 = \pi, \quad d = 0; \quad (29)$$

$$k_2 = 0, \quad k_1 = k, \quad d = 16 \cos^2 \left[k \frac{a_0}{2\sqrt{2}} \right]. \quad (30)$$

Отметим, что при $k_1 + k_2 = \pi$ коэффициент при $\cos \left[k_3 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right]$ обращается в нуль, зависимость по k_3 исчезает, и ширина зоны обращается в нуль, т.е. зона объемных колебаний исчезает. Это означает, что колебания вдоль линии $k_1 + k_2 = \pi$ локализованы в одном слое.

В случае ПК решетки исчезновение зоны объемных колебаний происходит в одной точке, определяемой выражением (4), а в случае ГЦК кристалла такая локализация колебаний возникает вдоль линии $k_1 + k_2 = \pi$.

3.2. Поверхностные колебания

В случае идеального ГЦК кристалла характеристическое уравнение при учете ближайших соседей ($y = 0$) равно:

$$\frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 12 - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 2 \left(1 + \frac{1}{q} \right) \left\{ \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right\}, \quad n \geq 1, \quad (31)$$

а уравнения для дефектного ($n = 0$) и промежуточного ($n = 1$) слоев:

$$\begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 12 - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 2 \left(1 + \frac{1}{q} \right) \left\{ \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right\}, & n = 1 \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 8 - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - 2q \left\{ \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right\}, & n = 0. \end{cases} \quad (32)$$

Отсюда:

$$\begin{cases} q = \frac{1}{2} \left(\cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \right), \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 8 - 4 \cos \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] \cos \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] - \cos^2 \left[k_1 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right] + \cos^2 \left[k_2 \frac{a_0}{\sqrt{2}} \right]. \end{cases} \quad (33)$$

На рис. 7 показана поверхностная волна, отщепляющаяся от сплошного спектра.

Величина отщепления поверхностной волны от сплошного спектра равна

$$\Delta = \frac{m(\omega_v^2)_{\min}}{\alpha_1} - \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 4(1-q)^2 > 0. \quad (34)$$

Следовательно, в отличие от ПК (001) в ГЦК решетке с ориентационной плоскостью поверхности (001) поверхностная волна отщепляется от объемного спектра

в приближении первых соседей. В длинноволновом приближении первый не исчезающий член разложения величины отщепления по двумерному волновому вектору равен $\Delta = (ka)^4/4$. С учетом вторых соседей поверхностные волны становятся двухпарциальными.

Учтем наличие поверхностной дисторсии с коэффициентом взаимодействия между слоями с номерами 0 и 1 равным α'_1 .

Уравнения для ($n = 0$) и ($n = 1$) слоев:

$$\begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 8 + 4\frac{\alpha'_1}{\alpha_1} - 4\cos\left[k_1\frac{a_0}{\sqrt{2}}\right]\cos\left[k_2\frac{a_0}{\sqrt{2}}\right] - 2\left(1 + \frac{1}{q}\right)\left\{\cos\left[k_1\frac{a_0}{\sqrt{2}}\right] + \cos\left[k_2\frac{a_0}{\sqrt{2}}\right]\right\}, & n=1, \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 4\frac{\alpha'_1}{\alpha_1} - 2\frac{\alpha'_1}{\alpha_1}q\left\{\cos\left[k_1\frac{a_0}{\sqrt{2}}\right] + \cos\left[k_2\frac{a_0}{\sqrt{2}}\right]\right\}, & n=0 \end{cases} \quad (35)$$

Проведенный анализ показал, что учет поверхностной дисторсии (за исключением длинноволнового предела [11]) на результаты фактически не влияет. Это связано с тем, что в ГЦК кристалле с такой ориентацией поверхности поверхностные волны возникают уже в приближении ближайших соседей в отличие от простой кубической решетки.

4. Адсорбированный поверхностный монослой

Рассмотрим простую кубическую решетку с ориентационной плоскостью поверхности (001), на которой находится адсорбированный монослой из примесных атомов. Будем учитывать взаимодействие только между первыми соседями. Уравнения движе-

ния атомов в поверхностном адсорбированном монослое ($n = 0$) и слое, лежащим под ним ($n = 1$), записываются следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{m_0\omega_s^2}{\alpha_1}U_0 = (5 - 2\cos[k_1a_0] - 2\cos[k_2a_0])U_0 - U_1, \\ \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1}U_1 = (6 - 2\cos[k_1a_0] - 2\cos[k_2a_0])U_1 - U_0 - U_1q, \end{cases} \quad (36)$$

Здесь m_0 — масса атома примесного слоя, m — масса атома решетки. Для q в общем случае получаем

$$q = \frac{-[m_0(6-A) - m(5-A)] \pm \sqrt{[m_0(6-A) - m(5-A)]^2 + 4m_0(m-m_0)}}{2(m-m_0)}. \quad (37)$$

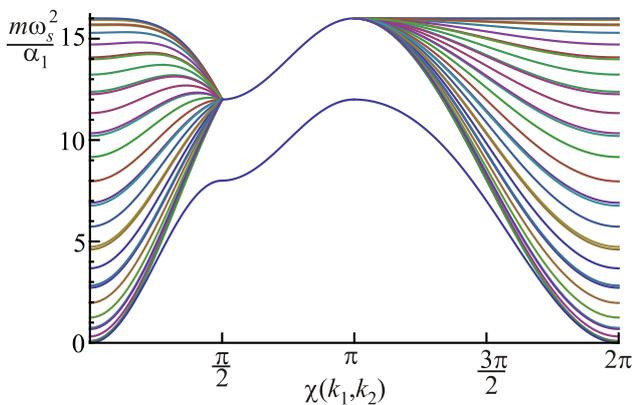


Рис. 7. (Онлайн в цвете) Зона объемных колебаний и поверхностная волна в ГЦК кристалле с плоскостью (001) ориентации поверхности.

Здесь и далее введено обозначение $A = 2\cos[k_1a_0] + 2\cos[k_2a_0]$. Зная значение q , найдем закон дисперсии поверхностных волн $m\omega_s^2/\alpha_1$ при различных отношениях m_0/m .

Рассмотрим случай, когда атомы адсорбированного слоя легче, чем атомы решетки ($m_0 < m$, рис. 8), и случай тяжелых атомов ($m_0 > m$, рис. 9).

1. *Легкие примесные атомы* ($m_0 < m$). При $m_0/m = 1/2$ имеем:

$$\frac{m_0}{m} = \frac{1}{2} : \begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = 6 - A + \sqrt{A^2 - 8A + 20}, \\ q = \frac{4 - A - \sqrt{A^2 - 8A + 20}}{2}. \end{cases} \quad (38)$$

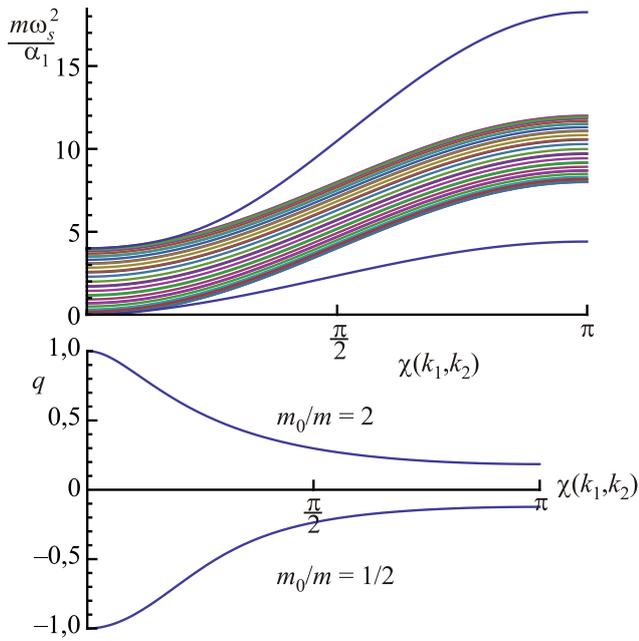


Рис. 8. (Онлайн в цвете) Зоны объемных колебаний и поверхностные волны в ПК (001) при наличии адсорбированного монослоя ($m_0/m = 2$ и $1/2$) (а); зависимость q двумерного волнового вектора для $m_0/m = 2$ и $1/2$ (б).

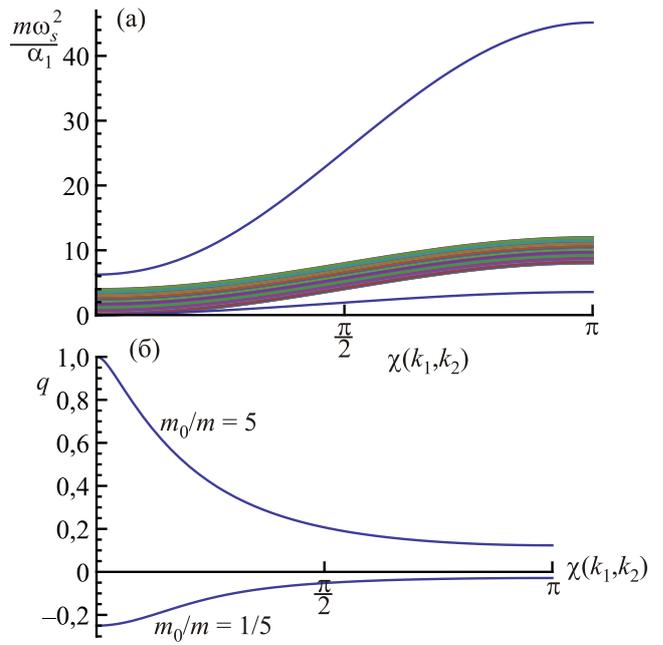


Рис. 9. (Онлайн в цвете) Зоны объемных колебаний и поверхностные волны в ПК (001) при наличии адсорбированного монослоя ($m_0/m = 5$ и $1/5$) (а); зависимость q двумерного волнового вектора для $m_0/m = 5$ и $1/5$ (б).

В случае $m_0/m = 1/5$:

$$\frac{m_0}{m} = \frac{1}{5} : \begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = \frac{105 - 20A + 5\sqrt{16A^2 - 152A + 377}}{8}, \\ q = \frac{19 - 4A - \sqrt{16A^2 - 152A + 377}}{8}. \end{cases} \quad (39)$$

Для адсорбированного монослоя из легких атомов $q < 0$, т.е. амплитуда колебаний по мере удаления от поверхности уменьшается осциллирующим образом (немонотонно). Определим величину отщепления поверхностной волны от сплошного спектра. Для рассматриваемых случаев легких атомов справедливо неравенство

$$\Delta = \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} - \frac{m(\omega_v^2)_{\max}}{\alpha_1} > 0. \quad (40)$$

В случае $m_0/m = 1/2$ получаем:

$$\Delta = 8 - A - 2q > 0. \quad (41)$$

Для $m_0/m = 1/5$:

$$\Delta = 17 - 4A - 5q > 0. \quad (42)$$

Здесь q — соответствующие данным соотношениям параметры затухания, приведенные в (36) и (37).

2. Тяжелые примесные атомы ($m_0 > m$). Рассмотрим $m_0/m = 2$ и $m_0/m = 5$.

$$\frac{m_0}{m} = 2 : \begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = \frac{3 - A + \sqrt{A^2 - 14A + 41}}{4}, \\ q = \frac{7 - A - \sqrt{A^2 - 14A + 41}}{2}. \end{cases} \quad (43)$$

$$\frac{m_0}{m} = 5 : \begin{cases} \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} = \frac{15 - 4A + \sqrt{16A^2 - 200A + 545}}{20}, \\ q = \frac{25 - 4A - \sqrt{16A^2 - 200A + 545}}{8}. \end{cases} \quad (44)$$

Величина отщепления равна:

$$\Delta = \frac{m(\omega_v^2)_{\min}}{\alpha_1} - \frac{m\omega_s^2}{\alpha_1} > 0. \quad (45)$$

При $m_0/m = 2$ имеем:

$$\Delta = \frac{3 - A + q}{2} \geq 0, \quad (46)$$

а в случае $m_0/m = 5$:

$$\Delta = \frac{10 - 3A + 2q}{5} \geq 0. \quad (47)$$

Выражения для q приведены в (43) и (44). Поскольку для тяжелых атомов выполняется условие $q > 0$, амплитуда колебаний в таком случае убывает монотонно.

При уменьшении массы примесных атомов в монослое величина отщепления частоты поверхностной волны от верхней границы сплошного спектра возрастает. При суммировании по всем трем значениям волнового вектора $\mathbf{k}(k_1, k_2, k_3)$ частота поверхностной волны попадает в сплошной спектр. Тем не менее можно найти настолько легкую массу примесного монослоя, что образуется щель между зоной объемных колебаний и поверхностной волной. Определим такое отношение масс примесных атомов к массам атомов матрицы, при котором возникает щель.

Для ПК (001) $m(\omega_v^2)_{\max}/\alpha_1 = 12$. Найдем m/m_0 , при котором $m\omega_s^2/\alpha_1 > m(\omega_v^2)_{\max}/\alpha_1$. Из выражения (6) в точке $k_1 = k_2 = k = \pi$ при $y = 0$ находим значения параметра затухания q :

$$q = -5 + \sqrt{24} \approx -0,101, \quad (48)$$

$$\frac{m}{m_0} \approx 11. \quad (49)$$

т.е. щель в спектре появится в том случае, если атомы примесного поверхностного монослоя будут легче атомов решетки подложки примерно в 11 раз.

5. Выводы

Исследованы характеристики поверхностных волн в кубических кристаллах (аналог SH волн в векторной модели) в приближении первых и вторых соседей. Получены выражения для законов дисперсии, параметров отщепления поверхностной волны от зоны объемных колебаний и значения параметров затухания амплитуды поверхностной волны. Изученные поверхностные волны однопарциальны. При учете поверхностной дисторсии в простом кубе поверхностная волна отщепляется от сплошного спектра объемных колебаний. В кристалле, в котором поверхностная дисторсия отсутствует, в приближении ближайших соседей поверхностные волны не отщепляются. Это связано с тем, что в рассматриваемой модели поверхностный атом имеет всего на одного соседа меньше, чем объемный, т.е. интенсивность дефекта в этом случае недостаточна для образования локализованных состояний.

Показано, что в случае ПК (001) в приближении вторых соседей поверхностные волны возникают и являются однопарциальными.

Проведен анализ полученных законов дисперсий в длинноволновом приближении ($ka \ll 1$). Показано, что для возникающих поверхностных волн величина отщепления поверхностной волны от объемного спектра порядка $(ka)^4$ в отличие от рэлеевских волн, где отщепление пропорционально $(ka)^2$.

Кроме того, исследованы случаи атомов адсорбированного на поверхности монослоя как более легких, чем атомы решетки, так и более тяжелых. В случае

легких атомов примесного монослоя частота поверхностных волн отщепляется от верхней границы сплошного спектра, и амплитуда такой волны уменьшается и осциллирует по мере удаления вглубь кристалла. В случае тяжелых атомов частота поверхностной волны отщепляется от нижней границы сплошного спектра, и амплитуда колебаний монотонно убывает по мере удаления от поверхности. Показано, что при суммировании по трем компонентам волнового вектора щель в спектре появляется в случае $m/m_0 \geq 11$.

Проанализирована зона объемных колебаний в ПК кристалле. Показано, что объемная зона сужается с увеличением параметра y , и при значениях y , соответствующих выражению (4), объемная зона вырождается в точку. Минимальное значение y , при котором это происходит, равно 0,25 ($k_1 = k_2 = k = \pi$, на границе зоны Бриллюэна). При больших значениях k_1 и k_2 такая точка попадает внутрь зоны Бриллюэна.

В случае ГЦК (001) в приближении вторых соседей волна двухпарциальна. Вдоль линии $k_1 + k_2 = \pi$ двумерной зоны Бриллюэна в приближении первых соседей получаем линию (локализованные в одном слое колебания), а при учете вторых соседей — зону, ширина которой тем больше, чем больше параметр y .

1. J.V. Barth, G. Constantini, and K. Kern, *Nature* **437**, 671 (2005).
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Физматлит, Москва (2003).
3. G.P. Alldredge, *Phys. Lett. A* **41**, 281 (1972).
4. И.М. Гельфгат, *ФТТ* **19**, 1711 (1977).
5. D. Royer and E. Dieulesaint, *J. Acoust. Soc. Amer.* **76**, 1438 (1984).
6. И.М. Гельфгат, Е.С. Сыркин, *ФНТ* **3**, 899 (1977) [*Low Temp. Phys.* **3**, 437 (1977)].
7. Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин, *ЖЭТФ* **62**, 1282 (1985).
8. А.С. Ковалев, Е.С. Сыркин, *Кристаллография* **44**, 806 (1999).
9. A.S. Kovalev, N.V. Rysich, and E.S. Syrkin, *Phys. Low-Dim. Struct.* **3**, 99 (2002).
10. А.М. Косевич, Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин, *ЖЭТФ* **88**, 1089 (1985).
11. И.М. Гельфгат, Е.С. Сыркин, *ФНТ* **4**, 141 (1978) [*Low Temp. Phys.* **4**, 69 (1978)].

Single-component one-partial acoustic surface waves in cubic crystals with surface distortion taken into account

M.S. Klochko

The surface waves and volume vibration bands are considered with taking into account the interaction between the nearest and more distant neighbors in a cu-

bic crystal. Expressions for dispersion relations, splitting values of surface waves off the bulk spectrum and decreasing amplitude parameters are obtained for crystalline systems in which the surface waves are the single-component and one-partial ones. The calculations are made with account for the crystal lattice discrete nature at arbitrary values of the two-dimensional wave vector. The analysis demonstrates a complete agreement of the results obtained in the long-wavelength limit with those calculated in the framework of linear non-

local elasticity theory. The influence of an adsorbed surface monolayer on the characteristics of the surface waves is studied.

PACS: **63.20.-e** Phonons in crystal lattices;
63.20.D– Phonon states and bands, normal modes, and phonon dispersion.

Keywords: phonons, volume and surface waves, lattice discreteness, surface distortion.