

Особенности резонансного рассеяния фононов плоским дефектом в ГЦК кристалле

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*

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

Статья поступила в редакцию 24 июля 1998 г., после переработки 8 сентября 1998 г.

Изучены резонансные особенности процессов рассеяния фононов плоским дефектом в ГЦК кристалле с центральным взаимодействием ближайших соседей. Показано, что резонансные эффекты связаны с взаимодействием фононов двух ветвей спектра на плоском дефекте. Получены дисперсионные зависимости частот резонансного отражения и прохождения. Для выяснения физической природы обсуждаемых резонансов рассчитаны законы дисперсии локализованных у дефекта колебаний в широком интервале длин волн. Установлено, что линии частот локализованных колебаний симметричного типа продолжают в сплошном спектре в виде дисперсионных кривых частот резонансного прохождения фононов через дефект.

Вивчено резонансні особливості процесів розсіяння фононів плоским дефектом в ГЦК кристалі з центральною взаємодією найближчих сусідів. Показано, що резонансні ефекти пов'язані із взаємодією фононів двох гілок спектра на плоскому дефекті. Одержано дисперсійні залежності частот резонансного відбиття і проходження. Для встановлення фізичної природи таких резонансів розраховано закони дисперсії локалізованих поблизу дефекту коливань в широкому інтервалі довжин хвиль. Встановлено, що лінії частот локалізованих коливань симетричного типу продовжуються в суцільному спектрі у вигляді дисперсійних кривих частот резонансного проходження фононів крізь дефект.

PACS: 63.20. Mt

Введение

Изучение взаимодействия различных типов волн в средах с плоскими дефектами имеет долгую историю и представляет не только теоретический, но и значительный прикладной интерес. Примерами плоских дефектов в кристаллах могут служить двойниковые и межфазные границы, двумерные дефекты упаковки. В недавних работах [1,2] описано резонансное рассеяние поперечных упругих волн плоским дефектом. Оказалось, что фазовые скорости резонансно отраженных или прошедших через дефект упругих волн находятся в интервале между скоростями поперечной и продольной акустических волн. Представляет интерес обобщить эти результаты, полученные в рамках теории упругости, на случай колебаний дискретной решетки и изучить осо-

бенности резонансного рассеяния в широком интервале длин волн. В настоящей работе предлагается описание резонансных особенностей процессов рассеяния фононов плоским дефектом и собственных колебаний рэлеевской поляризации в модели дискретной ГЦК решетки с взаимодействием ближайших соседей. Ясно, что из сформулированных в рамках рассматриваемой решеточной модели граничных условий можно получить граничные условия теории упругости путем предельного перехода в длинноволновом приближении [2,3]. Выбор для изучения рэлеевской поляризации колебаний обусловлен их широким применением в технике. Тот факт, что фононы, поляризованные в сагиттальной плоскости, имеют перпендикулярную поверхности компоненту смещения, облегчает их наблюдение в экспериментах [4,5].

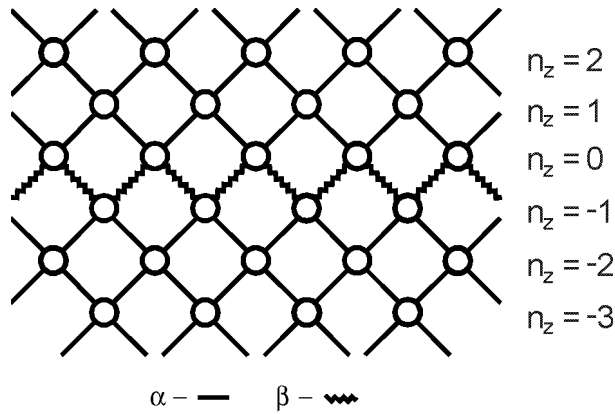


Рис. 1. Схематическое изображение плоского дефекта в кристалле.

В [6-8] мы уже убедились в том, что рассмотрение проблемы взаимодействия колебаний кристалла с плоским дефектом методами динамики кристаллической решетки позволяет описать высокочастотные особенности процессов рассеяния фононов плоским дефектом, а также новые существенно коротковолновые локальные колебания в широком интервале длин волн.

Общая теория резонансных явлений обсуждаемого типа была недавно предложена в работе [9]. Условия резонансного отражения и прохождения определяют частоты несимметричных относительно плоскости дефекта стационарных колебаний, возникновение которых возможно благодаря наличию двух ветвей сплошного спектра. Резонансному отражению фонона соответствует стоячая волна одной из объемных ветвей (например, поперечной) только в одном полупространстве при наличии локализованной моды другой ветви по обе стороны от дефекта. Резонансному прохождению соответствуют также волны двух мод — бегущая в одну и ту же сторону по обе стороны от дефекта объемная волна и волна, локализованная также с двух сторон от дефекта.

1. Граничные условия и анализ объемного спектра колебаний

Рассмотрим простейшую модель плоского дефекта, совпадающего с кристаллографической плоскостью (001) ГЦК кристалла. Оси координат направлены вдоль ребер куба; ось Oz перпендикулярна плоскости дефекта. Ограничимся учетом взаимодействия атомов только с ближайшими соседями. Пусть взаимодействие атомов характеризуется силовой константой α во всем объеме кристалла, кроме взаимодействия между слоями $n_z = 0$ и -1 , где оно характеризуется параметром β , отличным от α (рис. 1). Ребро куба обозначим

как $2d$. В дальнейшем для удобства записи примем $d = 1$.

Начнем с анализа объемного закона дисперсии, необходимого для определения областей спектра, в которых могут быть найдены частоты собственных локализованных и псевдолокализованных колебаний, а также частоты резонансных процессов рассеяния волн дефектом.

Смещения атомов можно представить в виде

$$\mathbf{u}(\mathbf{n}) = \begin{cases} \mathbf{u}^+(n_z) e^{i(k_x n_x + k_y n_y - \omega t)}, & n_z \geq 0, \\ \mathbf{u}^-(n_z) e^{i(k_x n_x + k_y n_y - \omega t)}, & n_z < 0, \end{cases}$$

$\mathbf{u}^\pm(n_z)$ — зависимость амплитуды смещения от номера слоя.

Выберем направление $[110]$ как направление распространения волны вдоль плоского дефекта ($k_x = k_z = k$) и напомним основные характерные черты фононов, поляризованных в сагиттальной плоскости xOz ($\mathbf{u} = (u_x, 0, u_z)$).

Запишем систему уравнений движения идеального кристалла (бесконечного кристалла, не содержащего дефекта) как

$$\hat{L}(\mathbf{k}, \lambda) \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

где

$$L_{11}(q) = 2 - \cos 2k - \cos k \cos q - \lambda;$$

$$L_{12}(q) = L_{21}(q) = \sin k \sin q;$$

$$L_{22}(q) = 1 - \cos k \cos q - \frac{\lambda}{2}; \quad \lambda = \frac{m\omega^2}{4\alpha};$$

m — масса атома; $\mathbf{u}(n_z) = \mathbf{u}_0 \exp[i(qn_z)]$ — изменение амплитуды колебаний с глубиной. Из равенства нулю определителя системы (1) следует характеристическое уравнение объемных колебаний кристалла

$$L_{11}L_{22} = L_{12}^2. \quad (2)$$

Решая (2) относительно λ , получаем закон дисперсии двух ветвей объемных колебаний

$$\lambda_{\pm}(k, q) = \frac{1}{2}(4 - \cos 2k - 3 \cos k \cos q \pm \sqrt{D}), \quad (3)$$

$$D = (4 - \cos 2k - 3 \cos k \cos q)^2 - 8 [2 + (\cos 2k - 3) \cos k \cos q - \cos^2 k + \cos^2 q],$$

где знак «+» соответствует более высокочастотной (условно — продольной) l -ветви колебаний, а знак «-» — более низкочастотной (условно — поперечной), t -ветви. На рис. 2 изображены

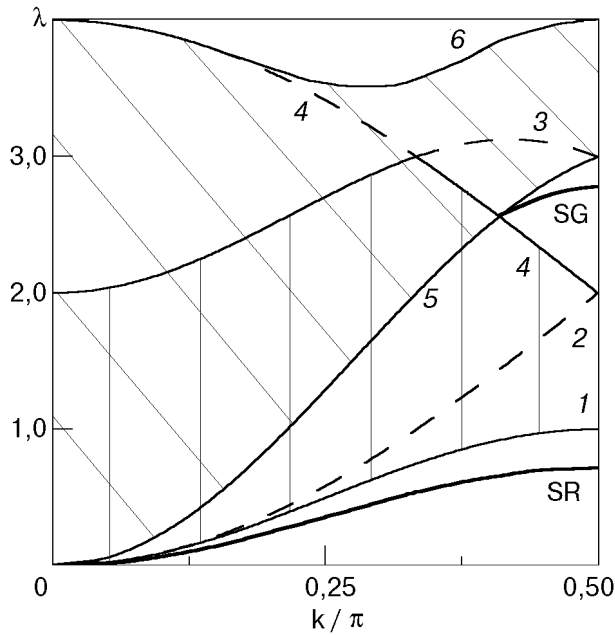


Рис. 2. Спектры частот поверхностных волн (линии SR и SG) и объемных колебаний (заштрихованные области) в зависимости от волнового числа k . Вертикальная штриховка соответствует псевдопоперечной ветви, наклонная — псевдопродольной.

спектры колебаний этих двух ветвей объемных колебаний вдоль направления $[110]$ ГЦК кристалла в пределах первой зоны Бриллюэна. Нижняя граница сплошного спектра $\lambda_{t\min}(k)$ (рис. 2, кривая 1) представляет собой огибающую наименьших значений частот при различных q , а линия

$$\lambda_{0t}(k) = 2(1 - \cos k) \quad (4)$$

(рис. 2, кривая 2) образована из (3) при $q = 0$ и ограничивает область t -ветви, в которой каждому значению k соответствует пара вещественных корней характеристического уравнения (2) $\pm q_t(k)$ и пара комплексно сопряженных $q_l(k) = \pm i\kappa_l$.

$$\begin{cases} u_x^+(0)[4 - \varepsilon - 2\lambda - 2 \cos 2k] - u_x^+(1) \cos k - u_z^+(1)i \sin k - u_x^-(-1)(1 - \varepsilon) \cos k + u_z^-(-1)i(1 - \varepsilon) \sin k = 0, \\ u_x^+(1)i \sin k + u_z^+(1) \cos k - u_z^+(0)(2 - \varepsilon - \lambda) - u_x^-(-1)i(1 - \varepsilon) \sin k + u_z^-(-1)(1 - \varepsilon) \cos k = 0 \end{cases} \quad (7)$$

и для слоя $n_z = -1$ как

$$\begin{cases} u_x^-(-1)[4 - \varepsilon - 2\lambda - 2 \cos 2k] - u_x^-(-2) \cos k + u_z^-(-2)i \sin k - u_x^+(0)(1 - \varepsilon) \cos k - u_z^+(0)i(1 - \varepsilon) \sin k = 0, \\ u_x^-(-2)i \sin k - u_z^-(-2) \cos k + u_z^-(-1)(2 - \varepsilon - \lambda) - u_x^+(0)i(1 - \varepsilon) \sin k - u_z^+(0)(1 - \varepsilon) \cos k = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где $\varepsilon = (\alpha - \beta)/\alpha$ — параметр, характеризующий относительное изменение силового взаимодействия атомов вблизи границы раздела.

Сверху эта область ограничена нижней границей l -ветви (рис. 2, кривая 5)

$$\lambda_{l\min}(k) = 2 - \cos 2k - \cos k, \quad (5)$$

получающейся из (7) при $q = 0$. Верхняя граница l -ветви представляет собой огибающую линии наибольших значений частот в (3) (рис. 2, кривая 6), а верхняя граница t -ветви получается из (3) при $q = \pi$ (рис. 2, сплошные участки кривых 3 и 4).

Границы псевдопоперечной и псевдопродольной ветвей пересекаются в точке $\lambda_0(k_0) = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{17})$ при $k_0 = \arccos \frac{1}{4}(\sqrt{17} - 3)$, образуя щель в сплошном спектре, в которой могут находиться частоты локальных колебаний.

Поперечная и продольная фазовые скорости ($c = \omega/k$) акустических волн в длинноволновом приближении $kd \ll 1$ (длина волны много больше постоянной решетки) вдоль направления $[110]$ могут быть получены из (3) при $q = 0$:

$$c_t^2 = \frac{4\alpha}{m}, \quad c_l^2 = \frac{10\alpha}{m}. \quad (6)$$

Известно [10], что сечения изочастотных поверхностей плоскостью kOq вдоль направления $[110]$ ГЦК кристалла всегда невыпуклые при соответствующем параметре анизотропии $\eta = (c_{11} - c_{12})/2c_{44} = 1/2$, где упругие модули кубического кристалла выражены через силовые константы взаимодействия: $c_{11} = 4\alpha$, $c_{12} = c_{44} = 2\alpha$.

Поэтому в ГЦК кристалле поверхностные волны могут иметь скорости, не превышающие значения $c_{\min}^2 = c_t^2 4(\sqrt{5} - 2)$. Эта минимальная скорость определяется из выражения для $\lambda_{t\min}(k)$ в длинноволновом пределе $kd \ll 1$.

Обсудив свойства объемных колебаний, запишем динамические уравнения для атомных слоев, примыкающих к плоскому дефекту ($n_z = 0, -1$). Эти уравнения отличаются от (1) и могут быть представлены для слоя $n_z = 0$ в виде

Из (7) и (8) легко получить граничные условия на плоском дефекте для динамических уравнений теории упругости. Считаем, что плоский дефект сосредоточен в плоскости $z = 0$. Разложим смещения в динамических уравнениях (7), (8) относительно выбранных узлов решетки по степеням (n_x, n_z) , ограничившись первыми членами. Это дает нам следующие граничные условия:

$$\sigma_{iz}^+ - \sigma_{iz}^- = \Lambda_i \frac{\partial}{\partial x} (u_j^- - u_j^+),$$

$$\sigma_{iz}^+ + \sigma_{iz}^- = \frac{\Omega_i}{d} (u_i^+ - u_i^-) + \Lambda_i \frac{\partial}{\partial x} (u_j^+ - u_j^-),$$

$$i, j = x, z; \quad i \neq j,$$

где σ_{ij}^+ и σ_{ij}^- — тензоры напряжений соответственно сверху и снизу от дефекта, компонентами которых в рассматриваемой модели являются

$$\sigma_{xz} = 2\alpha \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right), \quad \sigma_{zz} = 4\alpha \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right),$$

а эффективные параметры дефекта выражаются через силовую постоянную взаимодействия между граничными слоями β :

$$\Lambda_x = 2\beta, \quad \Lambda_z = \Omega_x = 4\beta, \quad \Omega_z = 8\beta.$$

Такие граничные условия (с точностью до обозначений) формулировались феноменологически в рамках уравнений теории упругости [2]. Возможность перехода от уравнений динамики решетки к граничным условиям в теории упругости на плоском дефекте ранее была проиллюстрирована на примере гексагонального кристалла [8].

Выясним, какого типа колебания могут характеризоваться частотами, лежащими как в разных участках объемного спектра, так и вне его (рис. 2). Из анализа корней характеристического уравнения (2) следует, что

1) в областях $\omega < \omega_{t\min}(k)$ (под спектром), $\omega_{t\max}(k) < \omega < \omega_{l\min}(k)$ при $k > k_0$ (в щели) и $\omega > \omega_{l\max}$ (над спектром) характеристическое уравнение (2) имеет четыре комплексных корня, из которых можно выбрать пару $ik_\mu = q_\mu(k)$ ($\mu = l, t$) удовлетворяющих условию затухания колебаний при удалении от дефекта в глубину кристалла ($\text{Re } \kappa_\mu > 0$ при $z > 0$). В этих областях спектра могут находиться частоты двупарциальных локализованных волн рэлеевской поляризации;

2) в областях $\omega_t(k, q = 0) < \omega < \omega_{l\min}(k)$, $\omega_{t\max}(k) < \omega < \omega_{l\max}(k)$ характеристическое уравнение (2) имеет два вещественных и два комплексно сопряженных корня, из которых выбира-

ется пара вещественных $\pm q$ и чисто мнимое решение $\pm ik$ со знаком, обеспечивающим затухание волны в глубь кристалла. В этих областях сплошного спектра могут существовать псевдолокализованные фононы;

3) в области $\omega_{l\min}(k) < \omega < \omega_{t\max}(k)$ уравнение (2) имеет четыре вещественных корня $q(k)$, из которых можно выбрать пару q_t и $-q_l$ (или $-q_t$ и q_l), которая определяет процессы трансформации волны при отражении от дефекта. (Волны трансформации были подробно рассмотрены в [8].)

2. Собственные колебания, локализованные у дефекта

Из граничных уравнений (7) и (8) видно, что решения задачи на собственные колебания могут быть двух видов — симметричные

$$u_x^+(n_z + 1) = -u_x^-(n_z), \quad u_z^+(n_z + 1) = u_z^-(n_z)$$

и антисимметричные

$$u_x^+(n_z + 1) = u_x^-(n_z), \quad u_z^+(n_z + 1) = -u_z^-(n_z)$$

где u_i^+ — смещение в верхнем полупространстве ($n_z \geq 0$), u_i^- — смещение в нижнем полупространстве ($n_z < 0$).

Вследствие линейности уравнений можно анализировать по отдельности симметричные и антисимметричные решения. Тогда для такого анализа мы можем из граничных условий (7), (8) взять любое (например, (7)).

Анализ характеристического уравнения (2) показал, что вне сплошного спектра решения граничной задачи следует искать при $n_z \geq 0$ в виде

$$\begin{cases} u_x^+(n_z) = u_t^0 e^{-\kappa_t n_z} + u_l^0 e^{-\kappa_l n_z}, \\ u_z^+(n_z) = u_t^0 \Gamma_t e^{-\kappa_t n_z} + u_l^0 \Gamma_l e^{-\kappa_l n_z}, \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\Gamma_\mu \equiv \frac{u_{z\mu}^0}{u_{x\mu}^0} = -\frac{L_{11}(q_\mu)}{L_{12}(q_\mu)} = -\frac{L_{12}(q_\mu)}{L_{22}(q_\mu)},$$

$\mu = l, t$ — собственные векторы объемных уравнений движения (1). Корни характеристического уравнения (2) κ_μ ($\mu = l, t$) выбраны при условии $\text{Re } \kappa_\mu > 0$. Смещения в нижнем полупространстве определяются выбором симметрии колебаний. Подставив (9) в граничные условия (7), получаем систему граничных уравнений

$$\sum_{\mu = l, t} u_\mu^0 C_{j\mu}^{(A,S)} = 0 \quad (j = 1, 2), \quad (10)$$

$$\begin{cases} C_{1\mu}^{(A,S)} = 3 - 2\lambda - 2 \cos 2k - (1 - \varepsilon)(1 \mp \cos k) - e^{-\kappa_\mu} \cos k - i\Gamma_\mu [e^{-\kappa_\mu} \pm (1 - \varepsilon)] \sin k, \\ C_{1\mu}^{(A,S)} = \Gamma_\mu [1 - \lambda - e^{-\kappa_\mu} \cos k + (1 - \varepsilon)(1 \pm \cos k)] - i[e^{-\kappa_\mu} \mp (1 - \varepsilon)] \sin k. \end{cases} \quad (11)$$

Верхние знаки в (11) для антисимметричных состояний (индексы «A»), нижние знаки — для симметричных (индексы «S»). Из равенства нулю определителя системы (10) следует дисперсионное уравнение для нахождения частот собственных локализованных колебаний

$$C_{1t}^{(A,S)} C_{2t}^{(A,S)} - C_{1l}^{(A,S)} C_{2t}^{(A,S)} = 0. \quad (12)$$

Это уравнение может быть решено аналитически только в граничных точках зоны Бриллюэна, а для произвольных значений k оно решено численно (на компьютере). Анализ уравнения (12) показывает, что в случае ослабления взаимодействия между граничными атомными слоями $\beta < \alpha$ ($0 < \varepsilon < 1$) ниже сплошного спектра объемных колебаний возникают частоты локализованных колебаний.

Линии частот антисимметричных локализованных колебаний лежат несколько выше частот симметричных колебаний при одном и том же значении ε при $0 < k < \pi/2$. На границе зоны Бриллюэна эти линии сходятся в одну точку (рис. 3). При изменении параметра дефекта в интервале $0 < \varepsilon < 1$ частоты локальных фононов

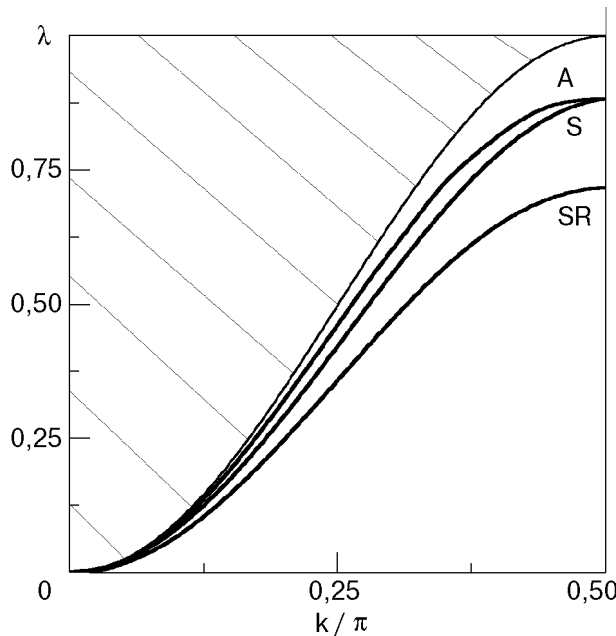


Рис. 3. Спектры частот локализованных низкочастотных колебаний симметричного (линия S) и антисимметричного (линия A) видов при $\beta = \alpha/4$, SR — дисперсионная кривая частот локализованной у свободной поверхности волны рэлеевского типа ($\beta = 0$). Заштрихованные области соответствуют сплошному спектру.

заполняют область $\omega_{\text{Re}}(k) < \omega < \omega_{t\text{min}}(k)$, где $\omega_{\text{Re}}(k)$ — закон дисперсии локализованной у свободной поверхности рэлеевской волны при $\varepsilon = 1$ ($\beta = 0$) (кривая SR на рис. 2, 3). В длинноволновой области фазовая скорость SR волны $c_{\text{Re}} \approx 0,85 c_t$, а значение частоты в другом предельном случае (на границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$) равно $\lambda_{\text{Re}}(\pi/2) = (7 - \sqrt{17})/4$.

Амплитуды симметричных и антисимметричных колебаний убывают по обе стороны от дефекта осциллирующим образом (т.е. ведут себя подобно обобщенным поверхностным волнам), так как параметры затухания $\kappa_\mu(k)$ являются комплексными.

При усилении связи между граничными атомными слоями $\beta > \alpha$ ($-\infty < \varepsilon < 0$) возникают локализованные колебания с частотами выше сплошного спектра (кривые S и A на рис. 4 — соответственно симметричная и антисимметричная моды). Антисимметричные состояния возникают уже при бесконечно малом возмущении ($\varepsilon < 0$) беспороговым образом, их частоты в граничной точке $k = 0$ будут $\lambda_A = 4\beta^2 / [\alpha(2\beta - \alpha)]$.

Частоты антисимметричных колебаний лежат выше частот симметричных колебаний при одном и том же ε . На границе зоны Бриллюэна ($k = \pi/2$) кривые симметричных и антисимметричных колебаний сходятся в одну точку. Эта точка отходит от верхнего края сплошного спектра беспороговым образом при усилении связи между дефектными слоями. Симметричные колебания над спектром существуют при $k > k_S^*(\varepsilon)$, где $k_S^*(\varepsilon)$ — точка, в которой линия частот симметричных колебаний касается границы сплошного спектра. При $k < k_S^*(\varepsilon)$ кривая локальных частот симметричных колебаний продолжается в сплошном спектре в виде выделенной линии частот полного прохождения t -фонона через плоский дефект (см. разд. 3). Частоты симметричных колебаний в точке $k = 0$ соответствуют $\lambda_S = 2\beta^2 / [\alpha(2\beta - \alpha)]$.

В этой области локальные моды симметричного вида образуются при $\beta > \beta_c \equiv \alpha(2 + \sqrt{2})$.

Свойства описанных локализованных высокочастотных колебаний аналогичны особенностям, обнаруженным при изучении сдвиговых волн горизонтальной поляризации [6].

В щели сплошного спектра могут возникать симметричные и антисимметричные колебания

как в случае ослабления дефектной связи ($\beta < \alpha$), так и в случае ее усиления ($\beta > \alpha$) (рис. 5). При малом возмущении $\varepsilon > 0$ в случае ослабления взаимодействия между граничными слоями от нижней границы l -ветви объемного спектра вниз отщепляются частоты щелевых локализованных колебаний. В случае свободной поверхности ($\beta = 0$) кривая частот щелевой поверхностной волны (рис. 2, линия SG) начинается из точки пересечения t - и l -ветвей объемных колебаний $\lambda_0(k_0) = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{17})$ при $k_0 = \arccos \frac{1}{4}(\sqrt{17} - 3)$ и приходит при $k = \pi/2$ в точку $\lambda_{\text{gap}}(\pi/2) = \frac{1}{4}(7 + \sqrt{17})$.

При малом возмущении другого знака $\varepsilon < 0$ щелевые локальные моды симметричного и антисимметричного вида отщепляются от верхней границы объемной t -ветви (рис. 5, кривые $S2$ и $A2$). На границе зоны Бриллюэна линии частот щелевых колебаний обоих видов при одном и том же значении параметра дефекта сходятся в одну точку. Дисперсионные кривые антисимметричных щелевых колебаний начинаются из точки $\lambda_0(k_0)$ для любых значений ε . Щелевые колебания симметричного вида входят либо в нижнюю границу l -ветви, либо в верхнюю границу t -ветви объемных колебаний в зависимости от знака возмущения.

3. Особенности резонансного рассеяния фононов плоским дефектом

Рассмотрим проблему резонансного рассеяния плоским дефектом фононов с частотами, находя-

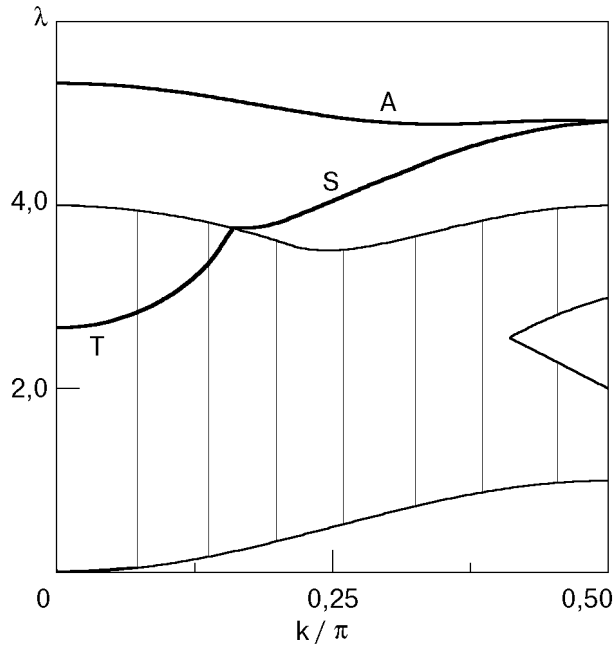


Рис. 4. Спектры высокочастотных локализованных колебаний симметричного (линия S) и антисимметричного (линия A) видов и частот резонансного прохождения (линия T) при $\beta = 2\alpha$. Заштрихованная область — сплошной спектр частот объемных колебаний.

щимися внутри одной из ветвей собственных колебаний кристалла, но оказывающимися вне собственных частот другой ветви. В таких областях, определенных в разд. 1, могут существовать псевдолокализованные состояния (квазиповерхностные фононы). Такой псевдолокализованный фонон состоит из падающей и отраженной волн одной из объемных ветвей, а также локализованной у дефекта моды другой объемной ветви.

В резонансно рассеивающейся волне в разных участках объемного спектра локализованной может быть либо l -, либо t -ветвь. Будем условно обозначать индексом « a » величины, относящиеся к объемной ветви, а индексом « b » — к локализованной. При частотах $\omega < \omega_{\text{min}}(k)$ величины $b = l$, $a = t$ и при $\omega > \omega_{\text{max}}(k)$ $b = t$, $a = l$. Вектор смещения волны рэлеевского типа в задаче о рассеянии имеет вид

$$\begin{cases} u_x^+(n_z) = e^{-iq_a n_z} + R e^{iq_a n_z} + M e^{-\kappa_b n_z}, \\ u_z^+(n_z) = -\Gamma_a e^{-iq_a n_z} + R \Gamma_a e^{iq_a n_z} + M \Gamma_b e^{-\kappa_b n_z}, \\ u_x^-(n_z) = T e^{-iq_a n_z} + N e^{\kappa_b n_z}, \\ u_z^-(n_z) = -T \Gamma_a e^{-iq_a n_z} - N \Gamma_b e^{\kappa_b n_z}, \end{cases} \quad (13)$$

где q_a — вещественный волновой вектор (корень характеристического уравнения (2)); $i\kappa_b$ — комплексный корень (2), удовлетворяющий условию локализации решений $\text{Re } \kappa_b > 0$. Подставляя (13) в граничные условия (7), (8), получаем матрич-

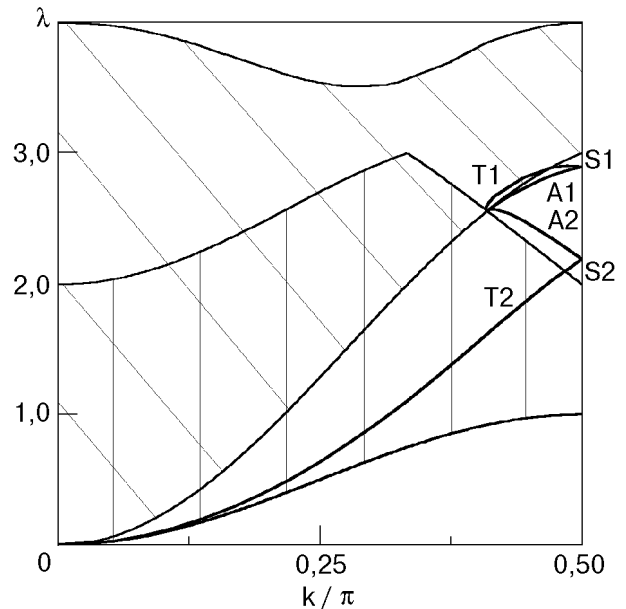


Рис. 5. Дисперсионные зависимости частот резонансного прохождения $T1$ и локализованных щелевых колебаний симметричного $S1$ и антисимметричного $A1$ видов при $\beta = 0,35\alpha$ и $T2, S2, A2$ — при $\beta = 3\alpha$. Заштрихованная область — сплошной спектр частот объемных колебаний.

ную систему неоднородных линейных уравнений для амплитуд R, T, M, N

$$\begin{pmatrix} R \\ M \\ T \\ N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{1R} & D_{1M} & D_{1T} & D_{1N} \\ D_{2R} & D_{2M} & D_{2T} & D_{2N} \\ D_{3R} & D_{3M} & D_{3T} & D_{3N} \\ D_{4R} & D_{4M} & D_{4T} & D_{4N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где коэффициенты равны

$$D_{1R} = D_{3T} = 4 - \varepsilon - 2\lambda - 2 \cos 2k - e^{iq_a}(\cos k + i\Gamma_a \sin k);$$

$$D_{1M} = D_{3N} = 4 - \varepsilon - 2\lambda - 2 \cos 2k - e^{-\kappa_b}(\cos k + i\Gamma_b \sin k);$$

$$D_{1T} = D_{3R} = (\varepsilon - 1)(\cos k + i\Gamma_a \sin k);$$

$$D_{1N} = D_{3M} = (\varepsilon - 1)(\cos k + i\Gamma_b \sin k); \quad (15)$$

$$D_{2R} = D_{4T} = -\Gamma_a(2 - \varepsilon - \lambda) + e^{iq_a}(\Gamma_a \cos k + i \sin k);$$

$$D_{2M} = D_{4N} = -\Gamma_b(2 - \varepsilon - \lambda) + e^{-\kappa_b}(\Gamma_b \cos k + i \sin k);$$

$$D_{2T} = D_{4R} = (\varepsilon - 1)(\Gamma_a \cos k + i \sin k);$$

$$D_{2N} = D_{4M} = (\varepsilon - 1)(\Gamma_b \cos k + i \sin k);$$

$$D_1 = -D_{1R}^*; D_2 = D_{2R}^*; D_3 = -D_{3R}^*; D_4 = D_{4R}^*$$

(* – комплексное сопряжение).

Нетрудно записать коэффициенты отражения $|R|^2$ и прохождения $|T|^2$:

$$|T|^2 = \left| \frac{\Delta_T}{\Delta} \right|^2, \quad |R|^2 = \left| \frac{\Delta_R}{\Delta} \right|^2, \quad (16)$$

где

$$\Delta = \begin{vmatrix} D_{1R} & D_{1M} & D_{1T} & D_{1N} \\ D_{2R} & D_{2M} & D_{2T} & D_{2N} \\ D_{3R} & D_{3M} & D_{3T} & D_{3N} \\ D_{4R} & D_{4M} & D_{4T} & D_{4N} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_T = \begin{vmatrix} D_{1R} & D_{1M} & D_1 & D_{1N} \\ D_{2R} & D_{2M} & D_2 & D_{2N} \\ D_{3R} & D_{3M} & D_3 & D_{3N} \\ D_{4R} & D_{4M} & D_4 & D_{4N} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_R = \begin{vmatrix} D_1 & D_{1M} & D_{1T} & D_{1N} \\ D_2 & D_{2M} & D_{2T} & D_{2N} \\ D_3 & D_{3M} & D_{3T} & D_{3N} \\ D_4 & D_{4M} & D_{4T} & D_{4N} \end{vmatrix}.$$

Выполнение условий резонансного отражения $|T|^2 = 0$ или прохождения $|R|^2 = 0$ возможно при определенной связи частоты ω с волновым числом k , которая находится из следующих уравнений соответственно для отражения и прохождения:

$$|\Delta_T(\omega, k, \varepsilon)| = 0 \quad (17)$$

и

$$|\Delta_R(\omega, k, \varepsilon)| = 0. \quad (18)$$

Явный вид уравнений (17), (18) чрезвычайно громоздкий, поэтому здесь не приводится. По той же причине представим лишь результаты расчета.

Проанализируем подробнее ситуацию резонансного отражения. Решение уравнений движения (7), (8) в этом случае является суперпозицией полей $\mathbf{u} = \mathbf{u}_a + \mathbf{u}_b$ несимметричного вида, где локализованная мода

$$\mathbf{u}_b(n_z) = \begin{cases} \mathbf{M}e^{-\kappa_b n_z}, & n_z \geq 0, \\ \mathbf{N}e^{\kappa_b n_z}, & n_z < 0, \end{cases} \quad (19)$$

$\mathbf{M} = (M, 0, M\Gamma_b)$, $\mathbf{N} = (N, 0, -N\Gamma_b)$ а объемная стоячая волна a существует только в одном полу-пространстве

$$\mathbf{u}_a(n_z) = \begin{cases} \mathbf{A}(\cos q_a n_z + \delta), & n_z \geq 0, \\ 0, & n_z < 0, \end{cases}$$

где $\mathbf{A} = (2e^{i\delta}, 0, 2\Gamma_a e^{i\delta})$; фаза волны δ находится из условия $R = e^{2i\delta}$.

Условие (17) определяет частоту резонансного отражения $\omega_R = \omega_R(k, \varepsilon)$. Спектр частот резонансного отражения существенно зависит от характеристики дефекта. При ослаблении взаимодействия между граничными слоями ($\beta < \alpha$) частоты резонансного отражения лежат в области t -ветви сплошного спектра $\omega_t^0(k, q=0) < \omega_R < \omega_p(k)$ (нижняя область существования псевдолокализованных состояний), где

$$\omega_p(k) = \begin{cases} \omega_{l\min}(k), & 0 < k < k_0, \\ \omega_{t\max}(k), & k_0 < k < \frac{\pi}{2}. \end{cases}$$

На рис. 6 изображен график зависимости частоты резонансного отражения от волнового числа при $\beta = 0,1\alpha$ (кривая 1). Из анализа уравнения

(17) следует, что в предельном случае $\beta \rightarrow \alpha$ ($\epsilon \rightarrow 0$) такая частота стремится к нижней границе l -ветви объемных колебаний (5).

Аналогичные выводы были сделаны в работах [1,2,11] относительно фазовых скоростей резонансно отражающейся упругой волны в длинноволновом пределе $kd \ll 1$: $c_R = \omega_R/k \rightarrow c_l$.

$$\lambda(k) = \begin{cases} 2 - \cos 2k + \cos k, & k < \pi/3 & \text{(рис. 2, сплошная часть кривой 3),} \\ 2(1 + \cos k), & \pi/3 < k < k_0 & \text{(рис. 2, сплошная часть кривой 4),} \\ 2 - \cos 2k - \cos k, & k_0 < k < \pi/2 & \text{(рис. 2, сплошная часть кривой 5),} \end{cases}$$

а сверху дисперсионными кривыми

$$\lambda(k) = \begin{cases} 2(1 + \cos k), & k < \pi/3 & \text{(рис. 2, пунктирная часть кривой 4),} \\ 2 - \cos 2k + \cos k, & \pi/3 < k < \pi/2 & \text{(рис. 2, пунктирная часть кривой 3).} \end{cases}$$

На рис. 6 представлены графики рассчитанных частот резонансного отражения при различных значениях $\beta > \alpha$ (кривые 2–4). Отщепляясь от $\omega_{t\min}$ при малых ϵ , частоты ω_R при $k = 0$ существуют в сплошном спектре до значения $\beta \approx 3,345 \alpha$. При дальнейшем возрастании параметра дефектной связи β кривые резонансных частот начинаются на верхней границе сплошного спектра $\omega_{l\max}(k)$ в некоторой точке $k_R^*(\epsilon)$ (рис. 6, кривая 4). Все такие кривые при $\epsilon < 0$ пересекаются в точке $\lambda_{t\max}(\pi/3) = 3$.

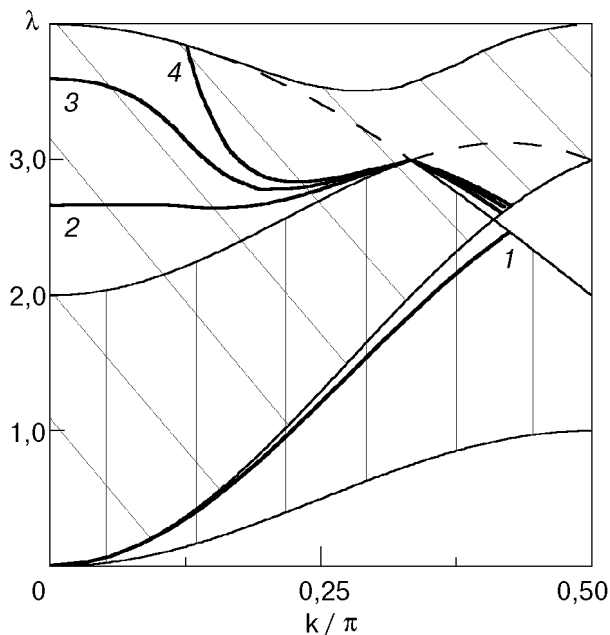


Рис. 6. Дисперсионные кривые частот полного отражения фононов от дефекта при различных величинах β : $0,1 \alpha$ (1); 2α (2); 3α (3); 5α (4).

В случае усиления взаимодействия между дефектными слоями $\beta > \alpha$ ($\epsilon < 0$) возникают новые высокочастотные особенности резонансного отражения фононов. Дисперсионные кривые $\omega_R(k, \epsilon)$ в этом случае находятся в верхней части спектра псевдолокальных состояний: в области l -ветви объемных колебаний, ограниченной снизу зависимостью

При выполнении условия $|R|^2 = 0$ t -фонон полностью проходит через плоский дефект. Резонансные частоты прохождения $\omega_T(k, \epsilon)$ определяются из уравнения (18). Анализ показал, что в случае ослабления дефектной связи уравнение (18) имеет решения в коротковолновой области над нижней границей l -ветви от k_0 до некоторого значения волнового числа $k_{T1}^*(\epsilon)$. Начиная с этой точки кривые частот пропускания переходят в дисперсионные кривые щелевых локализованных колебаний симметричного типа (рис. 5, кривая $T1$).

В случае усиления взаимодействия между граничными слоями возникают две ветви частот полного прохождения $\omega_T(k, \epsilon)$ при одном и том же значении параметра дефекта. Одна ветвь частот прохождения (рис. 4, кривая T) существует в сплошном спектре (в высокочастотной области псевдолокальных состояний) до некоторого значения волнового числа $k_{T2}^*(\epsilon)$, а при $k > k_{T2}^*(\epsilon)$ выходит из спектра объемных колебаний в виде локальных частот симметричных высокочастотных мод при том же ϵ . Резонансное прохождение может осуществляться в этой области спектра только при значениях параметра дефекта $\alpha < \beta < \beta_c$, где $\beta_c = \alpha(2 + \sqrt{2})$. При $k = 0$ частоты пропускания будут равны $\lambda_T^0 = 2\beta^2 / [\alpha(2\beta - \alpha)]$.

Другая ветвь частот прохождения находится в нижней области существования псевдолокализованных состояний. Такие линии (рис. 5, кривая $T2$) отщепляются от нижней границы этой области (4) и с ростом параметра дефекта β попадают начиная с $k_{T3}^*(\epsilon)$ в щель сплошного спектра, где продолжают дисперсионными кривыми ще-

левых локальных симметричных колебаний при том же значении β .

Описанное выше поведение дисперсионных кривых резонансного прохождения и отражения согласуется с выводами в [11] о том, что линии частот полного прохождения продолжают вне сплошного спектра частотными зависимостями локальных колебаний, а линии частот резонансного отражения оканчиваются на границе спектра объемных колебаний.

Заключение

Полученные результаты позволяют конкретизировать выводы общей теории [9] о физической природе резонансного взаимодействия фононов с плоским дефектом на примере дискретной ГЦК решетки. Частоты и волновые векторы резонансных особенностей процесса рассеяния расположены в областях спектра колебаний идеального кристалла, допускающих существование квазилокализованных колебательных состояний. Возникновение таких состояний связано с тем, что указанные области спектра объемных колебаний отвечают условиям существования волн сплошного спектра одной ветви колебаний и частот локализованных колебаний, отцепившихся от сплошного спектра другой ветви колебаний.

Резонансный характер рассеяния упругой волны на плоском дефекте проявляется в наличии частот ω и волновых векторов k , при которых либо коэффициент отражения обращается в нуль (полное прохождение волны), либо коэффициент прохождения обращается в нуль (полное отражение волны), если не учитывается поглощение волны в объеме. Определены линии резонансных явлений на плоскости (k, ω) . Показано, что для одного и того же значения параметра дефекта существуют две линии резонансного прохождения. Кривые частот резонансного прохождения начиная с некоторого значения волнового числа продолжают вне сплошного спектра в виде линий частот симметричных локальных колебаний.

Работа выполнена при поддержке проекта 2.4/163 Министерства Украины по делам науки и технологий.

1. A. N. Darinskii and G. A. Maugin, *Wave Motion*, **23**, 363 (1996).
2. A. M. Kosevich and A. V. Tutov, *Phys. Lett.* (1998) **A248**, 271 (1998).
3. A. M. Kosevich and A. V. Tutov, *Phys. Lett.* **A213**, 256 (1996).
4. J. Strocio, M. Persson, S. Bare, and W. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 428 (1985).
5. G. Braco, R. Tatarek, F. Tomasini, V. Link, and M. Persson, *Phys. Rev.* **B36**, 2928 (1987).
6. А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, А. В. Тутов, *ФНТ* **22**, 804 (1996).
7. А. М. Косевич, Д. В. Мацокин, С. Е. Савотченко, *ФНТ* **23**, 92 (1997).
8. А. М. Косевич, Д. В. Мацокин, С. Е. Савотченко, *ФНТ* **24**, 992 (1998).
9. А. М. Косевич, *ЖЭТФ* (1998) (в печати).
10. А. М. Косевич, Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, *ФТТ* **88**, 1089 (1985).
11. А. М. Kosevich and D. A. Semagin, *Cond. Matt. Phys.* (Lviv) (1998) (in press).

The peculiarities of the resonance phonon scattering from a plane defect in FCC crystal

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

The resonance features of phonon scattering from a plane defect in a FCC crystal with the central nearest neighbour interaction are studied. It is shown that the resonance effects are connected with the interaction between the phonons of two spectral branches at a plane defect. The dispersion dependences of the frequencies of the resonance reflection and transmission are found. To clear up the physical nature of the resonances in question, the dispersion dependences of the vibrations localized at the defect are calculated for a wide range of wavelengths. It is found that the frequency curves of the localized symmetric-type vibrations continue inside the bulk spectrum as dispersion curves of the frequencies of the resonance transmission of the phonons through the defect.