

Акустические сдвиговые волны, локализованные вблизи плоского дефекта в ГЦК кристалле

А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, А. В. Тутов

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

Статья поступила в редакцию 21 ноября 1995 г., после переработки 3 января 1996 г.

На основе уравнений динамики кристаллической решетки изучены сдвиговые волны, локализованные вблизи плоской границы раздела двух ГЦК кристаллов. Основное внимание обращено на особенности локализованных волн, обусловленные дискретностью кристаллической решетки, а потому не проявляющиеся в континуальной теории упругости. При обсуждении качественной стороны вопроса используются простейшие модели плоского дефекта в глубине кристалла. Показано, что рассматриваемая краевая задача имеет собственные решения (моды) двух типов — симметричные и антисимметричные волны, локализованные вблизи дефекта; исследованы частотные интервалы их существования. Эти моды различаются фазой колебаний атомных плоскостей, близлежащих к дефекту. Проанализированы характеристики локализованных волн обоих типов как в низко-, так и в высокочастотной области для всех длин волн.

На підставі рівнянь динаміки кристалеві гратки вивчено зсувані хвилі, локалізовані поблизу плоского дефекту, що розмежує два однакові ГЦК кристали. Основну увагу спрямовано на особливості локалізованих хвиль, що обумовлено дискретністю кристалеві гратки, а через те не проявлено у континуальній теорії пружності. При обміркуванні якісної сторони питання використовуються найпростіші моделі плоского дефекту у глибині кристала. Показано, що розглянута крайова задача має власні рішення (моди) двох типів — симетричні та антисиметричні хвилі, що локалізовані поблизу дефекту; досліджено частотні інтервали їх існування. Ці моди різняться фазою коливань прилеглих до дефекту атомних площин. Проаналізовано характеристики локалізованих хвиль обох типів як у низько-, так і у височастотній області для усіх довжин хвиль.

Введение

Исследования распространения упругих волн в средах, содержащих дефекты и неоднородности, имеют богатую историю, однако они актуальны и в настоящее время, о чем свидетельствуют монографии [1,2]. Характеристики упругих волн в кристалле дают информацию о таких процессах, как рост кристалла, образование дефектов типа дефекта упаковки и зон Гинье—Престона, а также о явлениях, связанных с наличием границ раздела, когда число приповерхностных атомов есть величина такого же порядка, как и число атомов в объеме кристалла [3–9].

Среди большого числа упругих поверхностных волн особый интерес представляет изучение в упругих средах поверхностных волн нерэлеевской поляризации — чисто сдвиговых волн с горизонтальной поляризацией (SH-волны). Такие волны обладают весьма любопытными свойствами [10–14]. В рамках линейной и локальной теории упругости изотропных сред они отсутствуют на свободной поверхности. Но при изменении свойств среды или поверхности SH-волны могут стать локализованными.

Так, при наличии на поверхности тонкой пленки (волны Лява [15]) или адсорбированного монослоя, в пьезокристаллах [16,17], при учете нелинейности в изотропной среде [18] и т.д., эти волны становятся поверхностными, причем в длинноволновом пределе они являются глубоко проникающими. Такие глубоко проникающие поверхностные волны являются чрезвычайно чувствительными к приповерхностным искажениям [19], что необходимо учитывать в их практическом применении.

В настоящей работе исследуются чисто сдвиговые поверхностные волны, которые локализованы вблизи плоского дефекта, являющегося границей раздела двух ГЦК кристаллов.

Уравнение движения атомов кристалла с простой решеткой в рамках гармонического приближения имеет следующий вид:

$$m \frac{\partial^2 u_i(\mathbf{n})}{\partial t^2} = - \sum_{\mathbf{n}'} \Phi^{ik}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u_k(\mathbf{n}'), \quad (1)$$

где m — масса атома; $u_k(\mathbf{n})$ — k -я проекция смещения атома из положения равновесия в кристалле с номер-вектором \mathbf{n} (n_1, n_2, n_3); $\Phi^{ik}(\mathbf{n})$ — матрица си-

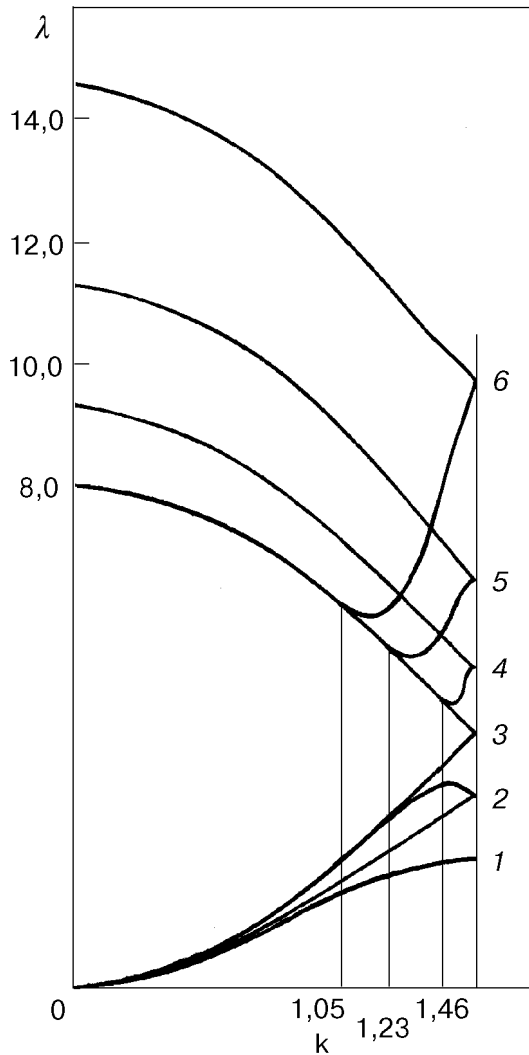


Рис. 1. Закон дисперсии SH-волн, локализованных вблизи пассивной границы раздела в случаях $\epsilon = 1$ (1), 0,5 (2), 0 (3), -0,5 (4), -1 (5), -1,5 (6).

ловых постоянных, которая учитывает симметрию кристалла и подчиняется ряду соотношений [20], обеспечивающих трансляционную и вращательную инвариантность энергии кристалла. Основные элементы матрицы $\Phi^{ik}(\mathbf{n})$ кристалла ГЦК с учетом только центрального взаимодействия между ближайшими соседями имеют вид [20]

$$\Phi^{ik}(0) = 8\alpha\delta_{ik}, \quad (2)$$

$$\Phi^{ik}(\mathbf{n}_0) = -\alpha n_i^0 n_k^0, \quad (3)$$

где α — силовая константа, а n_0 — один из номер-векторов, соединяющих ближайших соседей в кристалле: $(\pm 1, \pm 1, 0)$, $(0, \pm 1, \pm 1)$, $(\pm 1, 0, \pm 1)$.

Выберем следующую геометрию задачи. Пусть плоскость дефекта совпадает с плоскостью (001) кристалла (плоскостью $z = 0$), а исследуемая сдвиговая волна горизонтальной поляризации распространяется вдоль направления $[1, 1, 0]$ в указанной

плоскости, т.е. $k_x = k_y = k$, где (k_x, k_y) — двумерный волновой вектор. При таком направлении распространения волны смещение атомов в направлении $[1, -1, 0]$ описывается отдельным уравнением и имеет следующие временную и координатную зависимости:

$$u_n = u(n_3) \exp(ik_j n_j) \exp(-i\omega t), \quad (4)$$

где подразумевается суммирование по $j = 1, 2$; ω — частота колебаний; $u(n_3)$ определяет зависимость амплитуды волны от координаты z , перпендикулярной плоскости дефекта. Представим амплитуду волны $u(n)$ в объеме в виде (вместо n_3 впредь будем писать n)

$$u(n) = \begin{cases} Aq^n, & n = 1, 2, \dots, \\ Bq^{-n}, & n = -1, -2, \dots, \end{cases} \quad (5)$$

причем для существования локализованных вблизи границы раздела волн необходимо, чтобы

$$|q| < 1 \quad (6)$$

(здесь A и B — смещения пограничных слоев). Условие (6) указывает на уменьшение амплитуды волны в глубину кристалла при удалении от плоскости дефекта.

1. Колебания вблизи пассивной границы раздела

При анализе упругих колебаний вблизи любого дефекта в кристалле на основе динамики кристаллической решетки, явно учитывающей дискретность кристаллической структуры, неизбежно должны приниматься во внимание конечные размеры дефекта, которые не могут быть меньше межатомных размеров. Это обстоятельство приводит к тому, что локализованные вблизи дефекта колебания приобретают особенности, которые не могут быть исследованы при непрерывном описании упругих колебаний в рамках теории упругости. В частности, при изучении плоского дефекта в кристалле возможны такого типа колебания, когда противоположные берега плоского дефекта колеблются в противофазе. Нам представляется, что подобные особенности обусловлены дискретностью кристалла и конечными размерами дефекта, а не конкретной структурой дефекта. В связи с этим мы хотели бы продемонстрировать отмеченные особенности локализованных колебаний на примере предельно простой модели плоского дефекта. В такой простейшей модели плоский дефект может быть рассмотрен как когерентный контакт двух кристаллических полупространств, связанных межатомным взаимодействием, отличающимся от межатомного взаимодействия каждого из полупро-

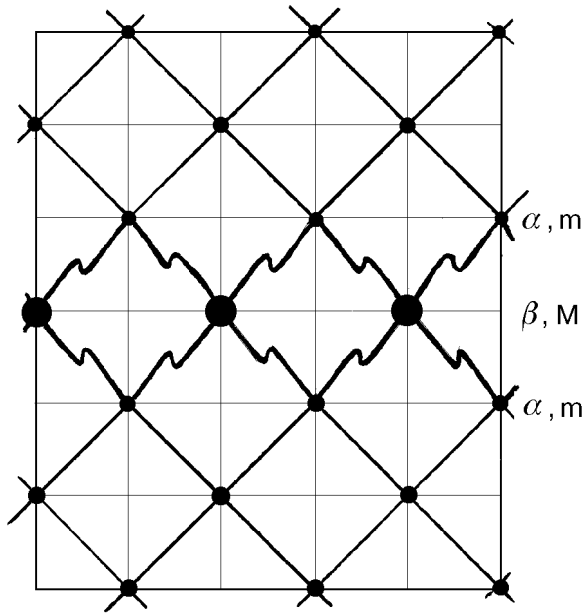


Рис. 2. Схематическое изображение моноатомной плоской прослойки в кристалле.

странств. В длинноволновом приближении эта модель приводит к ситуации, изученной ранее [3–6]. Пусть константа взаимодействия между атомами в плоскостях на противоположных берегах границы раздела (обозначим ее β) отлична от силовой константы α внутри кристаллов. Предположим, что граница раздела проходит между двумя соседними атомными плоскостями $n_z = \text{const}$. Тогда для удобства записи дальнейших формул будем нумеровать атомные плоскости, начиная с $n = 1$ для $n_z > 0$ и с $n = -1$ для $n_z < 0$. Используя соотношения (1)–(6), получаем систему граничных условий на дефекте в следующем виде:

$$\begin{cases} \lambda A = A(4 - 2\varepsilon - 2q \cos k) - 2B(1 - \varepsilon) \cos k, \\ \lambda B = B(4 - 2\varepsilon - 2q \cos k) - 2A(1 - \varepsilon) \cos k, \end{cases} \quad (7)$$

где $\lambda \equiv m\omega^2/(4\alpha)$, и закон дисперсии (зависимость частоты от волнового вектора) имеет вид

$$\lambda = 4 - 2\left(q + \frac{1}{q}\right) \cos k. \quad (8)$$

В (7) введена величина $\varepsilon = 1 - \beta/\alpha$, характеризующая относительное изменение силового взаимодействия вблизи границы раздела. Усиление (ослабление) связи между двумя плоскостями в дефектной области соответствует $\varepsilon < 0$ ($\varepsilon > 0$). Дисперсионное соотношение, определяющее характеристики локализованных волн, является условием разрешимости системы линейных алгебраических уравнений (7) относительно смещений A, B и имеет вид

$$\left(\varepsilon - \frac{\cos k}{q}\right)^2 = (1 - \varepsilon)^2 \cos^2 k. \quad (9)$$

Существуют два решения уравнения (9) относительно неизвестной величины q :

$$q_s = \frac{\cos k}{\cos k + \varepsilon(1 - \cos k)}, \quad (10)$$

$$q_a = \frac{\cos k}{\varepsilon(1 + \cos k) - \cos k}. \quad (11)$$

Решение (10) соответствует симметричным относительно плоскости дефекта колебаниям, когда смещения близлежащих к плоскости дефекта слоев совпадают, т.е. $A = B$. Решение (11) соответствует антисимметричным относительно плоскости дефекта колебаниям, когда смещения слоев кристалла, образующих дефект (монослой $n = -1$ и $n = 1$), разного знака, т.е. $A = -B$. Колебания (10), (11) могут отвечать квадратам частот, лежащих как ниже, так и выше сплошного спектра квадратов частот объемных колебаний.

Случай полного разрыва силовых связей атомных монослоев $n = -1$ и $n = 1$ соответствует значению параметра $\varepsilon = 1$ и означает свободную поверхность (001) ГЦК кристалла. Сдвиговые поверхностные волны на свободной поверхности ГЦК кристалла рассматривались ранее неоднократно [11,12,21,22]. Их закон дисперсии естественно следует из (8) и (11) при $\varepsilon = 1$ и имеет вид

$$q = q_s = \cos k, \quad (12)$$

$$\lambda = \lambda_s = 2 \sin^2 k. \quad (13)$$

Отщепление локальной частоты от нижней границы сплошного спектра объемных колебаний кристалла имеет вид

$$\lambda_{\min} - \lambda = 2(1 - q)^2 \quad (14)$$

и в длинноволновом пределе $\lambda_{\min} - \lambda \sim k^4$. Такое слабое отщепление локальной частоты от зоны объемных колебаний кристалла не позволяет описать поверхностные СН-волны в рамках локальной теории упругости и является причиной чрезвычайно глубокого проникновения длинноволновых колебаний в глубь кристалла.

Нижняя и верхняя границы частот сплошного спектра объемных колебаний вдоль направления $\mathbf{k}(k, k, 0)$ определяются зависимостью (8) при $q = \pm 1$ и имеют вид

$$\lambda_{\min} = 4(1 - \cos k), \quad (15)$$

$$\lambda_{\max} = 4(1 + \cos k). \quad (16)$$

В случае $0 < \varepsilon < 1$ (ослабление межатомной связи) колебания типа (10), отвечающие частотам ниже сплошного спектра, существуют при любых

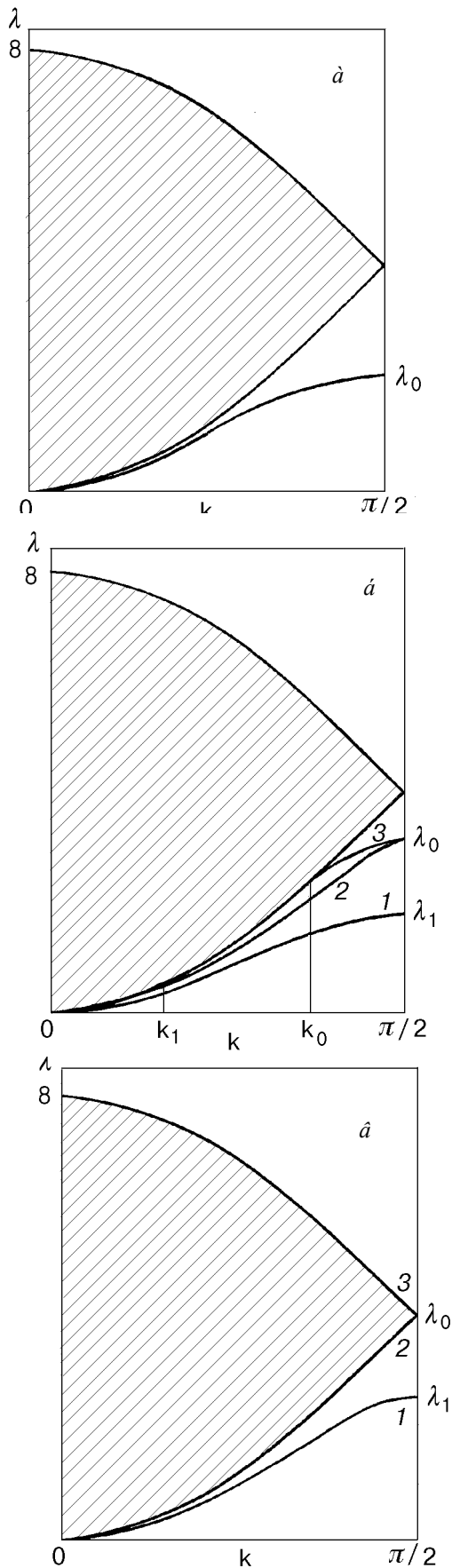


Рис. 3. Дисперсионные зависимости SH-волн, локализованных вблизи тяжелой моноатомной прослойки в ГЦК кристалле в случае неотрицательных ϵ : $\epsilon = 1$ (а); $0 < \epsilon < 1$ (б); $\epsilon = 0$ (в).

значениях k . При этом смещения в близлежащих к дефекту слоях совпадают: $A = B$ (симметричные колебания). Колебания типа (11) с частотами ниже границы сплошного спектра отвечают антисимметричным модам $A = -B$ и имеют место при значениях волнового вектора $k > k_0^H$, где

$$\cos k_0^H = \frac{\epsilon}{2 + \epsilon} . \quad (17)$$

Отщепление локальных частот от зоны сплошного спектра частот объемных колебаний для волн типа (10) определяется формулой

$$\lambda = \lambda_{\min} - \frac{2\epsilon^2(1 - \cos k)^2}{\cos k + \epsilon(1 - \cos k)} , \quad (18)$$

а для колебания типа (11)

$$\lambda = \lambda_{\min} - \frac{2(2 \cos k - \epsilon(1 + \cos k))^2}{\epsilon(1 + \cos k) - \cos k} . \quad (19)$$

При этом $q > 0$, и амплитуда колебаний монотонно убывает в глубь кристалла с ростом n . Колебания типа (19) существуют при $k > k_0^H$ и имеют точку окончания кривых при $\lambda_S^H = 8/(2 + \epsilon)$. Вблизи этой точки кривая, описываемая выражением (19), приближается к границе зоны объемных колебаний по следующему закону:

$$\lambda_S^H - \lambda = T(k - k_0^H)^4 , \quad (20)$$

где

$$T = \frac{16}{\epsilon^2} (1 - \epsilon)(2 - \epsilon) . \quad (21)$$

Случай отсутствия дефекта силового взаимодействия $\epsilon = 0$ соответствует кривым 3 на рис. 1, совпадающим с границами сплошного спектра объемных колебаний (15), (16).

В случае $\epsilon < 0$ (усиления межатомной связи) колебания отвечают частотам выше границы сплошного спектра. Антисимметричные колебания типа (11) существуют при любых значениях k . Колебания типа (10) с частотами выше границы сплошного спектра отвечают симметричным модам $A = B$ и имеют место при значениях волнового вектора $k > k_0^B$, где $\cos k_0^B = |\epsilon|/(2 + |\epsilon|)$. Отщепление локальных частот от зоны сплошного спектра частот объемных колебаний для волн типа (10) определяется формулой

$$\lambda = \lambda_{\max} + \frac{2\epsilon^2(1 + \cos k)^2}{\cos k - \epsilon(1 + \cos k)} , \quad (22)$$

а для мод типа (11)

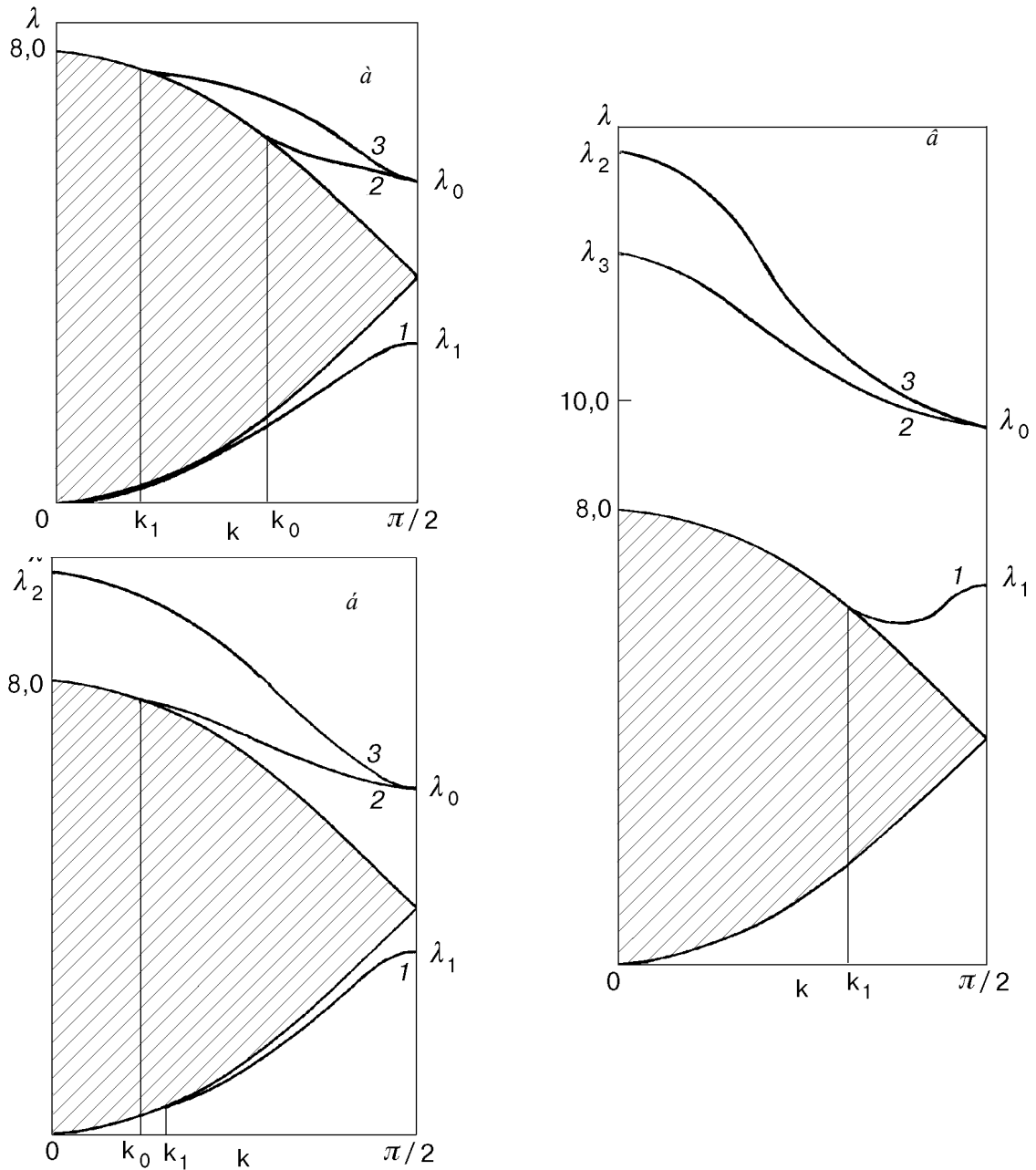


Рис. 4. Закон дисперсии SH-волн, локализованных вблизи тяжелой моноатомной прослойки в ГЦК кристалле при $\epsilon < 0$: $0 < |\epsilon| < \eta/(\eta + 2)$ (а); $\eta/(\eta + 2) < |\epsilon| < \eta$ (б); $\eta < |\epsilon|$ (в).

$$\lambda = \lambda_{\max} + \frac{2(2 \cos k + \epsilon(1 - \cos k))^2}{\epsilon(\cos k - 1) - \cos k} \quad (23)$$

При этом $q < 0$, и амплитуда колебания немонотонно убывает с ростом n в глубь кристалла (осциллируя). Точки окончания кривых на границе зоны объемных колебаний соответствуют $\lambda_S^B = 8(1 + |\epsilon|)/(2 + |\epsilon|)$, а приближение кривой (23) к верхней границе сплошного спектра — формулой

$$\lambda - \lambda_S^B = T(k - k_0^B)^4 \quad (24)$$

При уменьшении ϵ от предельного значения $\epsilon = 1$ до значения $\epsilon = 0$ дисперсионные кривые низкочастотных поверхностных волн, отвечающих как симметричным, так и антисимметричным колебаниям, приближаются к нижней границе сплошного спектра (16).

В предельно длинноволновой области при фиксированном значении параметра ϵ существуют лишь симметричные колебания. Легко оценить отщепление локальной частоты симметричных низкочастотных колебаний и относительное изменение фазовой скорости $\Delta v_{\text{ph}} = v_{\text{ph}} - v_{\text{ph}}^{(0)}$ локализованной волны в длинноволновом пределе:

$$\omega_S = 2 \sqrt{2\alpha/m} k(1 - (k^2/24)[1 + 6\epsilon]) , \quad (25)$$

$$\Delta v_{ph}/v_{ph}^{(0)} = -\frac{3}{4} \epsilon^2 k^2 , \quad k \rightarrow 0 . \quad (26)$$

Здесь v_{ph} — фазовая скорость волны, локализованной вблизи дефекта, а $v_{ph}^{(0)}$ — фазовая скорость объемной волны с минимальной частотой сплошного спектра (15) в длинноволновой области. В коротковолновом пределе $k = \pi/2$ кривые двух типов колебаний смыкаются и описывают в этой точке колебания, локализованные в одном атомном слое. Однако к этой точке дисперсионные кривые двух типов колебаний с частотами ниже сплошного спектра подходят по-разному:

$$\lambda = 2(2 - \epsilon) \pm 2(1 - \epsilon)[k - \pi/2] , \quad k \rightarrow \pi/2 . \quad (27)$$

При $\epsilon = +0$ кривые дисперсионной зависимости объемных колебаний совпадают с нижней границей сплошного спектра колебаний кристалла.

Области значений параметра $\epsilon < 0$ отвечают высокочастотные колебаний. Для высокочастотных колебаний в длинноволновом случае величина отщепления частоты поверхностной волны от верхней границы сплошного спектра равна

$$\lambda - \lambda_{\max} = \frac{4\epsilon^2}{1 + 2|\epsilon|} \left[1 + \frac{1}{2} k^2 \frac{|\epsilon|}{1 + 2|\epsilon|} \right] . \quad (28)$$

По-прежнему в окрестности точки $k = \pi/2$ колебания двух типов описываются следующими формулами:

$$\begin{cases} \lambda A_1 = 2A_1(2 - \epsilon - q \cos k) - 2B_1(1 - \epsilon) \cos k , \\ \frac{M}{m} \lambda B_1 = 4B_1(1 - \epsilon) - 2A_1(1 - \epsilon) \cos k - 2C_1(1 - \epsilon) \cos k , \\ \lambda C_1 = 2C_1(2 - \epsilon - q \cos k) - 2B_1(1 - \epsilon) \cos k , \end{cases} \quad (30)$$

где A_1 , B_1 и C_1 — амплитуды колебаний границы верхнего кристалла, промежуточного примесного монослоя и границы нижнего кристалла соответственно; $\epsilon = 1 - \beta/\alpha$. Из (30) и (8) получаем дисперсионное соотношение для локализованных волн, связывающее величину q с волновым числом k :

$$\begin{aligned} \{ \cos k - q\epsilon \} \{ -\epsilon a q^3 \cos k + q^2 [b + c \cos^2 k] - \\ - qd \cos k + a \cos^2 k \} = 0 , \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$\begin{aligned} a = 1 - \eta , \quad b = 2\epsilon(\epsilon + \eta) , \quad c = 1 + \eta - 2(1 - \epsilon)^2 , \\ d = 3\epsilon + \eta(2 + \epsilon) , \quad \eta = \frac{M - m}{m} . \end{aligned}$$

$$\lambda = 2(2 + |\epsilon|) \pm 2(1 + |\epsilon|)[k - \pi/2] , \quad k \rightarrow \pi/2 , \quad (29)$$

где знак «+» соответствует симметричным (10), а «-» — антисимметричным (11) колебаниям.

Зная величину относительного изменения фазовой скорости сдвиговой поверхностной волны (26), можно оценить изменение силового взаимодействия на плоском дефекте ϵ с помощью акустических методов измерения [23].

2. Локализованные колебания вблизи моноатомной плоской прослойки

Интересным случаем плоского дефекта является планарный дефект в глубине кристалла, образованный монослоем чужеродных атомов, не нарушающих общую симметрию ГЦК кристалла, но изменяющих силовое взаимодействие вблизи дефекта. Моделью такого дефекта служит «сэндвич» из двух полупространств ГЦК кристалла с прослойкой чужеродных атомов (см. рис. 2). На рисунке M — масса чужеродного атома, m — масса объемного атома, постоянная β характеризует связь чужеродного слоя с берегами кристалла, α — силовое взаимодействие внутри кристалла. В длинноволновом приближении такой дефект может описываться моделью, предложенной в [24–29]. Система граничных условий, описывающих дефект, имеет вид

Закон дисперсии (31) описывает три независимые ветви колебаний. Одно решение записывается в явном виде

$$q = \frac{1}{\epsilon} \cos k \quad (32)$$

и приводит к закону дисперсии

$$\lambda = 4 - 2\epsilon \left[1 + \frac{1}{\epsilon^2} \cos^2 k \right] . \quad (33)$$

Закон дисперсии (33) соответствует противофазным колебаниям полупространств $n > 0$ и $n < 0$ при неподвижном дефектном слое: $B_1 = 0$, $A_1 = -C_1$. Естественно считать $\beta > 0$, тогда $\epsilon < 1$, и в зависимости от величины β параметр ϵ может быть как положительным, так и отрицательным.

В случае $\varepsilon = 1$, что соответствует разрыву связи между полупространствами $n > 0$ и $n < 0$, кривая закона дисперсии (33) совпадает с графиком закона дисперсии поверхностной волны (см. (12), (13)) (рис. 3,а).

При значении параметра ε в интервале $0 < \varepsilon < 1$ антисимметричные колебания (33) существуют при конечных значениях волновых чисел $k > k_0$, где $\cos k_0 = \varepsilon$, а $\lambda = \lambda_0 = 4(1 - \varepsilon)$ соответственно. Формула (33) дает квадраты частот, лежащих ниже границы сплошного спектра (15), но выше значений λ_0 . График закона дисперсии локализованных волн (кривая 3 на рис. 3,б) на границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$ имеет максимум $\lambda = 2(2 - \varepsilon)$.

При значении параметра ε в интервале $-1 < \varepsilon < 0$, что соответствует ослаблению связи вблизи дефектного слоя, колебания (33) характеризуются частотами, превышающими частоты сплошного спектра (16), и существуют при $k > k_1$, где $\cos k_1 = |\varepsilon|$. На границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$ кривая закона дисперсии (33) имеет минимум $\lambda = 2(2 + |\varepsilon|)$. Параметр убывания локализованных волн q отрицателен ($-1 < q < 0$) при $\varepsilon < 0$, и убывание амплитуды волны от дефекта в глубь кристалла происходит с осцилляциями. Графики закона дисперсии для разных значений ε изображены кривой 2 на рис. 4,а, 4,б.

В случае $\varepsilon < -1$ локализованные колебания высокочастотны и возможны при любых k . Минимальные из допустимых частот (кривая 2 на рис. 3,в) соответствуют $k = \pi/2$, а максимальные частоты достигаются при $k = 0$. При значениях параметра ε в интервале $-1 < \varepsilon < 1$ кривая антисимметричных колебаний стремится к точке k_0 по закону

$$\lambda = 4(1 - \varepsilon) + \frac{1}{2\varepsilon}(k - k_0)^4 \quad (34)$$

и приближается к границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$ по следующему закону:

$$\lambda = 2(2 - \varepsilon) - \frac{2}{\varepsilon} \left(k - \frac{\pi}{2} \right)^2. \quad (35)$$

Закон дисперсии локализованных колебаний других типов описывается уравнением

$$[\cos k - q\varepsilon][2q(1 - \varepsilon) + \frac{M}{m}(q^2 \cos k - 2q + \cos k)] - 2q^2(1 - \varepsilon)^2 \cos^2 k = 0. \quad (36)$$

Уравнение (36) определяет две ветви локализованных колебаний с $|q| < 1$, симметричных относительно дефектной плоскости (третье решение не удовлетворяет условию (6) и нами не рассматривается). Возможны два независимых типа колебаний: де-

фектный слой смещается в одном направлении с близлежащими атомными слоями (симметричные синфазные колебания) либо в противофазе с ближайшими атомными слоями (симметричные противофазные колебания). Симметричные противофазные колебания должны обладать более высокими частотами, чем симметричные синфазные колебания.

На примере тяжелой примесной прослойки ($M > m$) подробно рассмотрим особенности законов дисперсии, отвечающих локализованным колебаниям.

В случае $0 < \varepsilon < 1$ симметричные противофазные колебания существуют для достаточно больших значений волновых чисел $k > k_1^H$, где

$$\cos k_1^H = \varepsilon \frac{M/m - (1 - \varepsilon)}{M/m - (1 - \varepsilon)^2}, \quad (37)$$

и частоты — ниже границы сплошного спектра (15). Из соотношения (37) следует, что для тяжелого примесного слоя ($M > m$) справедливо

$$\begin{aligned} \cos k_1^H - \cos k_0 &= \\ &= \frac{\varepsilon(1 - \varepsilon)^2}{(M/m - 1) + 1 - (1 - \varepsilon)^2} > 0, \end{aligned} \quad (38)$$

а потому $k_1^H < k_0$ для положительных значений параметра ε . При значении параметра ε близком к единице выражение для характеристик локализованной волны можно записать в явном виде. В этом случае локализованные колебания приобретают следующие характеристики ($\varepsilon = 1 - \xi$, $\xi \ll 1$):

$$q = (1 + \xi) \cos k, \quad \lambda = \lambda_0^s + 2\xi \sin^2 k, \quad (39)$$

где $\lambda_0^s = 2 \sin^2 k$. Локализованные колебания (39) возможны для волновых чисел $k > k_1^H$, где $k_1^H \approx \sqrt{2\xi}$. Минимально возможным значениям k соответствуют минимальные частоты локализованных колебаний $\lambda = 4(1 - \cos \sqrt{2\xi})$. На границе зоны Бриллюэна кривая, соответствующая закону дисперсии $\lambda(k)$, имеет максимум $\lambda = 2(1 + \xi)$ и проходит ближе к границе сплошного спектра (15), чем кривая по закону дисперсии поверхностной волны (13). Этот закон дисперсии (38) проиллюстрирован кривой 2 на рис. 3,б. Таким образом, ветвь закона дисперсии (31), отвечающая антисимметричным колебаниям (33) (кривая 3 на рис. 3,б), проходит ближе к границе сплошного спектра (15) и существует для больших волновых чисел, чем ветвь симметричных противофазных колебаний (кривая 2 на рис. 3,б). Эти кривые совпадают на границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$ в точке

$$\lambda_0 = 2(2 - \varepsilon) . \quad (40)$$

В случае $\varepsilon = 0$ колебания обоих типов возможны только на границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$ с частотой $\lambda_0 = 4$ (рис. 3, в).

В случае отрицательных значений ε , что соответствует усилению связи вблизи дефектного слоя, симметричные противофазные колебания (кривая 3, рис. 4, а) обладают частотами, лежащими выше верхней границы сплошного спектра объемных колебаний кристалла (16). При значениях $-1 < (1 - M/m)/(1 + M/m) < \varepsilon < 0$ такие колебания возможны для достаточно больших волновых чисел $k > k_1^B$, где

$$\cos k_1^B = |\varepsilon| \frac{M/m - (1 + |\varepsilon|)}{M/m - (1 + |\varepsilon|)^2} \quad (41)$$

и

$$\cos k_1^B > \cos k_0 \quad (k_0 > k_1^B).$$

Ветвь симметричных противофазных колебаний (кривая 3, рис. 4, а, 4, б, 4, в) лежит выше других ветвей локализованных колебаний при $\varepsilon < 0$. Для значений $|\varepsilon| > |\varepsilon|_{kp} = (M/m - 1)/(M/m + 1)$ симметричные противофазные колебания существуют для любых волновых чисел (кривые 3 на рис. 4, б, 4, в).

При $\varepsilon < 0$ симметричные противофазные колебания имеют максимальные частоты в длинноволновой области ($k = 0$) и минимальные частоты на границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$.

При значениях параметра $(1 - M/m)(1 + M/m)^{-1} < \varepsilon < 1$ кривая симметричных противофазных колебаний стремится к точкам k_1^H и k_1^B по следующим законам:

$$\lambda = 4 \frac{(M/m - 1)(1 - \varepsilon)}{M/m - (1 - \varepsilon)^2} + G_H^2 (k - k_1^H)^4, \quad k \rightarrow k_1^H, \quad (42)$$

$$\lambda = 4 \frac{(M/m - 1)(1 + |\varepsilon|)}{M/m - (1 + |\varepsilon|)^2} - G_B^2 (k - k_1^B)^4, \quad k \rightarrow k_1^B, \quad (43)$$

где

$$G_H = \frac{2\alpha_H(\alpha_H - 1)}{(1 - \varepsilon)[-1 + 2\alpha_H(1 - \varepsilon)] - M/m(\alpha_H - 1)}, \quad (44)$$

$$\alpha_H \equiv \cos k_1^H,$$

$$G_B = \frac{2\alpha_B(\alpha_B - 1)}{(1 - \varepsilon)[1 + 2\alpha_B(1 - \varepsilon)] - M/m(\alpha_B - 1)}, \quad (45)$$

$$\alpha_B \equiv \cos k_1^B.$$

Кривая, соответствующая закону дисперсии симметричных противофазных колебаний, стремится к границе зоны Бриллюэна по закону

$$\lambda = 2(2 - \varepsilon) - \frac{2}{\varepsilon} (k - \frac{\pi}{2})^2, \quad k \rightarrow \pi/2. \quad (46)$$

Теперь рассмотрим другую ветвь колебаний — симметричные синфазные колебания. Для значений параметра $0 < \varepsilon < 1$ кривая, соответствующая закону дисперсии (кривая 1 на рис. 3, б, 3, в), проходит ниже границы сплошного спектра объемных колебаний кристалла (15) с наименьшей частотой $\lambda = 0$ при $k = 0$ и наибольшей частотой на границе зоны Бриллюэна:

$$\lambda_1 = 4 \frac{m}{M} (1 - \varepsilon). \quad (47)$$

Эта ветвь закона дисперсии действительно описывает симметричные синфазные колебания, поскольку, согласно второму уравнению системы (30), в случае симметричных колебаний ($A_1 = C_1$) имеем

$$A_1(1 - \varepsilon) \cos k = \frac{1}{4} \frac{M}{m} (\lambda_1 - \lambda) B_1. \quad (48)$$

Таким образом, движение дефектного слоя происходит в одном направлении с движением близлежащих атомных слоев.

При $\varepsilon = 0$ эта ветвь закона дисперсии описывает локализованные колебания вблизи тяжелого изотопического монослоя (кривая 1 на рис. 3, в). Отщепление локальной частоты от нижнего края сплошного спектра, а также относительная фазовая скорость локализованной вблизи изотоп-дефекта волны в длинноволновом пределе имеет вид

$$\lambda - \lambda_{\min} = \frac{1}{2} \eta^2 k^2, \quad (49)$$

$$\frac{\Delta v_{\text{ph}}}{v_{\text{ph}}^{\min}} = \eta^2 k^2, \quad (50)$$

где $v_{\text{ph}}^{\min} = 2\sqrt{2\alpha/m}$. В случае дефекта с прослойкой изотопа удвоенной массы ($M = 2m$) в этой модели существуют локализованные колебания с характеристиками, совпадающими с характеристиками поверхностной волны (13).

При $(1 - M/m)/(1 + M/m) < \varepsilon < 0$

В случае значений параметра

$$(1 - M/m) < \varepsilon < (1 - M/m)/(1 + M/m)$$

синфазные симметричные колебания существуют для достаточно больших волновых чисел $k > k_1^H$, где k_1^H находится из соотношения (37), с частотами ниже границы сплошного спектра (15) и выше минимальной частоты

$$\lambda = 4 \frac{(M/m - 1)(1 + |\varepsilon|)}{M/m - (1 + |\varepsilon|)^2}.$$

Максимально возможные частоты λ_1 достигаются на границе зоны Бриллюэна ($k = \pi/2$) (кривая 1, рис. 4,б).

В случае значений параметра $\varepsilon < 1 - M/m$ симметричные синфазные колебания имеют частоты выше границы сплошного спектра (16) и существуют для достаточно больших волновых векторов $k > k_1^B$, где k_1^B определяется из соотношения (41) (кривая 1, рис. 4,б). Симметричные синфазные колебания имеют минимальную частоту

$$\lambda = 4 \frac{(M/m - 1)(1 + |\varepsilon|)}{(1 + |\varepsilon|)^2 - (M/m - 1)}$$

при $k = k_1^B$ и максимальную частоту λ_1 на границе зоны Бриллюэна при фиксированном значении параметра $\varepsilon < 1 - M/m$.

При значениях параметра $\varepsilon < -(M/m - 1)(M/m + 1)^{-1}$ кривая симметричных синфазных колебаний стремится к точкам k_1^H и k_1^B по законам

$$\lambda = 4 \frac{(M/m - 1)(1 + |\varepsilon|)}{M/m - (1 + |\varepsilon|)^2} + G_H^2(k - k_1^H)^4, \quad k \rightarrow k_1^H \quad (51)$$

$$\lambda = 4 \frac{(M/m - 1)(1 + |\varepsilon|)}{M/m - (1 + |\varepsilon|)^2} - G_B^2(k - k_1^B)^4, \quad (52)$$

$$k \rightarrow k_1^B.$$

Кривая закона дисперсии симметричных синфазных колебаний стремится к границе зоны Бриллюэна $k = \pi/2$ по закону

$$\lambda = 4 \frac{m}{M} (1 - \varepsilon) + \frac{(k - \pi/2)^2}{(1 - m/M) + \varepsilon m/M}. \quad (53)$$

В заключение сравним результаты, полученные на микроскопическом уровне, с результатами феноменологического исследования локализованных волн вблизи плоского дефекта [24–29]. Считая упругие характеристики дефектного слоя слабо отличающимися от упругих характеристик кристалла, из уравнения (31), пользуясь теорией возмущений, оценим поправку $\kappa = 1 - q$ к параметру затухания q ($\kappa \ll 1$) в длинноволновом пределе:

$$\kappa = \frac{1}{2} k^2 \left\{ \frac{M - m}{M} + 2 \frac{\alpha - \beta}{\alpha} \right\}, \quad k \rightarrow 0. \quad (54)$$

Согласно [29], поправка κ к параметру затухания сдвиговой поверхностной волны имеет вид

$$\kappa = \frac{1}{2} k^2 \left\{ \frac{\rho_s - \rho}{\rho_s} + \frac{\mu - \mu_s}{\mu} \right\}, \quad k \rightarrow 0, \quad (55)$$

где ρ, ρ_s (μ, μ_s) — плотности (модули сдвига) материнского кристалла и дефектного слоя соответственно. Сравнение результатов (54) и (55) позволяет предположить соответствие двух подходов описания SH-волн, локализованных вблизи плоского дефекта. Массы M и m в формуле (54) после усреднения по физически малому объему перейдут в плотности ρ_s и ρ , а силовые константы центрального взаимодействия в объеме α и дефектном слое β в представленных модели и приближении соответствуют модулям сдвига μ и $1/2 (\mu + \mu_s)$ при описании SH-волн в рамках теории упругости.

Работа выполнена при поддержке грантами U21200 Международного научного общества и 21247/93 INTAS, а также грантами 042032 и 052128 ISSEP.

1. S. L. Shinde and D. A. Rudman, *Interfaces in HT_c Superconducting Systems*, Springer-Verlag, New York (1994).
2. S. D. Bodar and M. K. Hundert, *Interface Effects in Elastic Wave Scattering*, Springer-Verlag, Heidelberg (1994).
3. А. М. Косевич, В. И. Хохлов, *ФТТ* **10**, 56 (1968).
4. А. М. Косевич, В. И. Хохлов, *ФТТ* **12**, 2570 (1970).
5. V. R. Velasco and B. Djafari-Rouhani, *Phys. Rev.* **B26**, 1929 (1982).
6. V. R. Velasco and F. Garcia-Moliner, *Phys. Scr.* **20**, 111 (1979).
7. B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, V. R. Velasco, and F. Garcia-Moliner, *Surface Science* **110**, 129 (1981).
8. B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, and P. Masri, *Ann. Phys. Fr.* **6**, 259 (1981).
9. S. L. Cunningham, L. Dobrzynski, and A. A. Maradudin, *Phys. Rev.* **B7**, 4643 (1973).
10. G. P. Alldredge, *Phys. Lett.* **A41**, 281 (1972).
11. И. М. Гельфгат, *ФТТ* **22**, 2815 (1980).
12. И. М. Гельфгат, *Кристаллография* **25**, 838 (1980).
13. С. В. Бирюков, Ю. В. Гуляев, В. В. Крылов, В. П. Плесский, *Поверхностные акустические волны в неоднородных средах*, Наука, Москва (1990).
14. V. V. Krylov, *Progr. Surf. Sci.* **32**, 39 (1990).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1990).
16. Ю. В. Гуляев, *Письма в ЖЭТФ* **9**, 63 (1969).
17. J. L. Bleustein, *Appl. Phys. Lett.* **13**, 412 (1968).
18. V. G. Mozhaev, *Phys. Lett.* **A139**, 333 (1989).
19. Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, *Письма в ЖТФ* **13**, 1439 (1987).
20. G. Leibfried, *Gittertheorie der Mechanischen und Thermischen Eigenschaften der Kristalle*, Springer, Berlin-Gottindhem-Heidelberg (1955).
21. И. М. Гельфгат, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **4**, 141 (1978).
22. И. М. Гельфгат, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **3**, 899 (1977).
23. А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, М. В. Воинова, *Акуст. журн.* **39**, 944 (1993).
24. L. J. Pyrak-Nolte and N. G. W. Cook, *Geophys. Res. Lett.* **14**, 1107 (1987).
25. L. J. Pyrak-Nolte, J. Xu, and G. M. Haley, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3650 (1992).
26. Yu. A. Kosevich and E. S. Syркин, *J. Phys.* **C2**, 5047 (1990).
27. Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **20**, 660 (1994).
28. Yu. A. Kosevich and E. S. Syркин, *Phys. Lett.* **A122**, 178 (1987).
29. А. М. Косевич, Yu. A. Kosevich, and E. S. Syркин, *Progr. Surf. Sci.* (1996) (in press).

Acoustic shear waves localized near a planar defect in fcc crystal

A. M. Kosevich, E. S. Syркин, and A. V. Tutov

Shear waves localized near the planar defect separating two identical fcc crystals are studied using the equations of the crystal lattice dynamics. Most attention has been concentrated on the peculiarities of the localized waves which appear due to the lattice discreteness and, hence, do not show up in the elasticity theory. The simplest models of the planar defect in the bulk are used for the discussion of the problem in principle. It is shown that the boundary problem under consideration has the eigen solutions (modes) of two types (symmetrical and antisymmetrical) localized near the planar defect waves, and the frequency intervals of their existence are analyzed. These modes differ by the phases of vibrations of the atom planes on the opposite sides of the defect. The characteristics of the localized waves of both types are analyzed both in the low- and high-frequency ranges for all the wave lengths.