

## ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И ПСЕВДОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ПОВЕРХНОСТНЫЕ ВОЛНЫ В ГЦК КРИСТАЛЛЕ

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

*В рамках простейшей модели центральносилового взаимодействия ближайших соседей описаны волны, локализованные вблизи свободной поверхности (001) и распространяющиеся вдоль направления [110] в ГЦК кристалле. Частоты этих волн попадают в щели внутри спектра частот объемных гармонических колебаний при фиксированном значении компоненты волнового вектора  $k$ , перпендикулярной к свободной поверхности. Аналитически изучен длинноволновый предел и случай волновых векторов, близких к границе зоны Бриллюэна. Показано, что в этом случае существуют щелевая и низкочастотная поверхностные волны вертикальной поляризации. Аналитические результаты в предельных интервалах волнового вектора  $k$  дополнены численными расчетами для любых его значений. Рассмотрены также двукомпонентные псевдолокальные волны, частоты которых находятся внутри спектра одной из ветвей объемных колебаний. Закон дисперсии в этом случае зависит от фазы волны. Получена зависимость в длинноволновом приближении скорости псевдолокальной волны от фазы. Указана область существования псевдолокальных колебаний в пределах зоны Бриллюэна.*

Поверхностные волны изучаются как экспериментально, так и теоретически уже в течение многих лет. Локализованные и псевдолокализованные колебания вблизи различных дефектов в кристаллах неоднократно рассматривались в рамках теории упругости (волны Рэлея) и в рамках динамики дискретной кристаллической решетки [1]. Однако эти проблемы остаются актуальными и в наше время. Например, в акустоэлектронике часто приходится иметь дело с многослойными кристаллическими системами, основанными на резонансных свойствах, и поэтому необходим анализ особенностей спектра колебаний, связанных с плоскими дефектами, разделяющими отдельные монокристаллические слои.

Целью данной работы является анализ спектра различных типов поверхностных волн в простейшей модели центрального взаимодействия ближайших соседей в ГЦК кристалле. Если выбрать свободную поверхность в кристаллографической плоскости (001) и направление распространения волны вдоль линии симметрии ГХ, то представляется возможным отдельно рассмотреть динамику волны со смещением, параллельным поверхности (сдвиговая волна), и динамику двупарциальных волн с вектором

смещения, имеющим вертикальную составляющую и лежащим в сагиттальной плоскости.

Как хорошо известно, частоты локализованных волн лежат вне сплошного спектра гармонических колебаний решетки без дефектов. В рассматриваемом ГЦК кристалле спектр для бегущих в направлении [110] волн имеет щели под нижней граничной частотой псевдопоперечной моды и также вблизи границы зоны Бриллюэна между псевдопродольной и псевдопоперечной ветвями объемных колебаний (рис.1). В эти щели должны попадать возможные частоты локализованных поверхностных волн [2, 3, 4, 5].

Помимо описанных выше поверхностных волн в кристалле могут существовать псевдолокальные волны [7]. Возможные частоты колебаний такого типа лежат внутри сплошного спектра объемных колебаний, причем фазовые скорости этих волн лежат в интервале  $c_t < c < c_l$ , где  $c_t$  и  $c_l$  - скорости псевдопоперечной и псевдопродольной объемных волн, распространяющихся в данном направлении соответственно. Плотность колебаний  $g(\omega)$  псевдолокальных волн имеет резкие максимумы на определенных резонансных частотах [8, 9, 10]. Поэтому рассматриваемый тип колебаний часто называют поверхностными резонансными модами.

## 1. Локализованные поверхностные волны

Уравнения движения атомов в дискретной кристаллической решетке, состоящего из одинаковых атомов массы  $m$ , в гармоническом приближении имеют вид:

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

где  $n$  - номер-вектор атома в системе координат, которая выбрана для кубического кристалла таким образом, что координаты ближайших к выделенному атому соседей будут  $a(\pm 1, \pm 1, 0)$ ,  $a(\pm 1, 0, \pm 1)$ ,  $a(0, \pm 1, \pm 1)$ . Динамические матрицы силовых постоянных  $A_{ik}(n)$ , учитывающие симметрию задачи и обеспечивающие трансляционную и вращательную инвариантность энергии кристалла, с учетом только лишь центрального взаимодействия ближайших соседей, имеют вид:

$$A_{ik}(0,0,0) = 8\alpha\delta_{ik}, \quad A_{ik}(n_0) = -\alpha n_{0i} n_{0k},$$

где  $n_0$  - номер вектор ближайшего к выделенному атому соседа.

Свободная поверхность кристалла ( $z=0$ ), занимающего полупространство  $z>0$ , вносит изменения в уравнения движения атомов граничного слоя с матрицами силовых постоянных, у которых взаимодействие с атомами в области  $z<0$  равно нулю, а элемент «самодействия» будет:

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

где  $\alpha > 0$  единственный параметр задачи - постоянная силового взаимодействия.

Номера атомных слоев  $n$  отсчитываются от граничной поверхности ( $n=0$ ) в объем кристалла. Далее для упрощения записи переходим к безразмерному волновому числу  $ka \rightarrow k$ . Известно, что существуют локализованные волны, распространяющиеся вдоль линии симметрии ГХ в направлении ближайшего соседа. В работах [2, 3] показано, что система уравнений движения атомов внутренних слоев распадается на две независимые подсистемы. Из одной получается сдвиговая волна горизонтальной поляризации.

В [2, 4] было показано, что существуют две поверхностные волны. Изучаемые локализованные волны удовлетворяют граничным условиям, роль которых играют уравнения движения поверхностных атомов  $n=0$  с соответствующими измененными матрицами силовых постоянных. Это двупарциальные волны вертикальной поляризации, которые состоят из псевдопродольной  $u_l$  и псевдопоперечной  $u_t$  локализованных мод:

$$u(n) = \{u_l e^{-\kappa_l n_z} + u_t e^{-\kappa_t n_z}\} e^{i(k_x n_x + k_y n_y - \omega t)}, \quad (2)$$

где  $\kappa_\mu$  - затухание амплитуды колебаний соответствующей моды ( $\mu=l,t$ ) с глубиной.

Закон дисперсии одной волны лежит ниже спектра объемных колебаний (низкочастотная поверхностная волна SV1), а частоты другой волны попадают в щель этого спектра между псевдопродольной и псевдопоперечной модами (высокочастотная или щелевая волна SV2). Скорость распространения у таких типов волн с ростом волнового числа уменьшается и обращается в нуль при  $k=\pi/2$  (рис. 1). Частоты поверхностных волн для

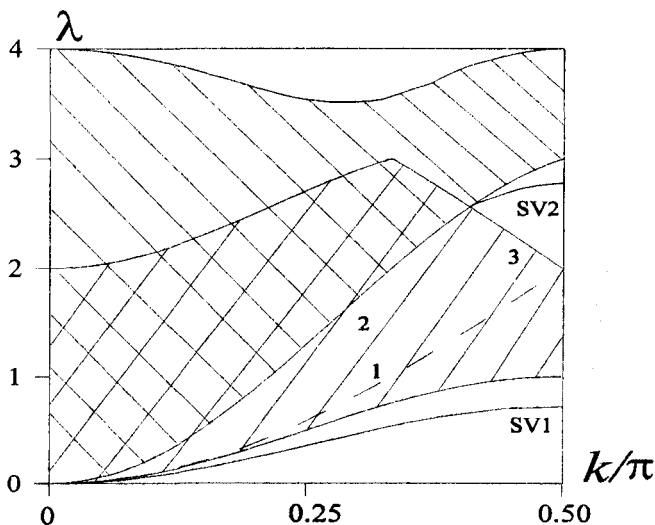


Рис. 1. Зависимость квадрата частоты  $\lambda = \frac{m\omega^2}{4\alpha}$  от продольного волнового числа  $k$  волн рэлееской поляризации SV1 и SV2. Заштрихованная область соответствует сплошному спектру объемных колебаний ГЦК кристалла при фиксированных значениях поперечного волнового числа  $k_x$ .

произвольных значений волнового числа в пределах зоны Бриллюэна получены численным образом. Аналитически представляется возможным описание законов дисперсии поверхностных волн в случаях предельных значений  $k$  вблизи граничных точек зоны Бриллюэна.

В длинноволновом приближении (длина волны много больше межатомного расстояния в кристалле) при  $k \ll 1$  существует одна поверхностная волна SV1 со скоростью:

$$c_R^2 = c_t^2 \frac{7 - \sqrt{17}}{4} \quad (3)$$

Нетрудно показать, что затухание в такой волне комплексное, а значит в длинноволновом пределе SV1 переходит в обобщенную волну Рэлея. Фазовые скорости псевдопоперечной и псевдопродольной волн в длинноволновом приближении в рассматриваемой модели равны соответственно

$$c_t = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}, \quad c_l = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}.$$

Видно, что условие локализации колебаний у поверхности  $c_R < c_t$  выполняется.

Вблизи границы зоны Бриллюэна при  $k \rightarrow \frac{\pi}{2}$ , как показано в [5, 6], существуют две поверхностные волны. Низкочастотная псевдопоперечная локализованная волна SV1 имеет в этом пределе закон дисперсии:

$$\lambda(k) = \lambda_t - 1,1 \left( \frac{\pi}{2} - k \right)^2, \quad (k \rightarrow \pi/2), \quad (4)$$

где  $\lambda = \frac{m\omega^2}{4\alpha}$ ,  $\lambda_t = \frac{1}{4}(7 - \sqrt{17})$  - значение квадрата частоты на границе зоны при  $k = \frac{\pi}{2}$ .

У щелевой поверхностной волны типа SV2 поляризация от слоя к слою не изменяется и амплитуды колебаний затухают по экспоненте. Она попадает в «окно» спектра объемных колебаний (рис.1) в точке  $k_0 = \arccos\left(\frac{\sqrt{3}-1}{2}\right)$ . Предельный закон дисперсии волны SV2 вблизи границы зоны Бриллюэна равен

$$\lambda(k) = \lambda_t - 2,2 \left( \frac{\pi}{2} - k \right)^2, \quad (k \rightarrow \pi/2), \quad (5)$$

где  $\lambda_1 = \frac{1}{4}(7 + \sqrt{17})$ .

Следует отметить, что поляризованные в сагиттальной плоскости кристалла поверхностные волны имеют перпендикулярную поверхности компоненту вектора смещения. Это обстоятельство позволяет экспериментально исследовать спектры поверхностных возбуждений в кристалле.

## 2. Псевдолокальные колебания

Помимо локализованной волны (2), у которой затухание  $\kappa_\mu$  - комплексная величина в кубическом кристалле, уравнение (1) может иметь собственное решение в виде так называемой псевдолокализованной волны, в одной из компонент  $\kappa_t = -ik_z^{(t)}$  будет чисто мнимой величиной, а в другой компоненте затухание  $\kappa_l$  остается комплексной величиной. Такая волна является двухкомпонентной и, в отличие от локализованной, ее амплитуда убывает в глубь кристалла, но остается конечной. Псевдолокализованная волна состоит из падающей и отраженной псевдопоперечной волн (одна компонента) и локализованной у свободной поверхности моды (другая компонента):

$$\begin{cases} u_x(n) = \{u_l e^{-\kappa_l n_z} + u_t (e^{ik_z^{(t)} n_z} + B e^{-ik_z^{(t)} n_z})\} e^{i(k_x n_x + k_y n_y - \omega t)}, \\ u_z(n) = \{u_l \Gamma_l e^{-\kappa_l n_z} + u_t \Gamma_t (e^{ik_z^{(t)} n_z} - B e^{-ik_z^{(t)} n_z})\} e^{i(k_x n_x + k_y n_y - \omega t)}, \end{cases} \quad (6)$$

где собственные векторы объемных уравнений движения (1)  $\Gamma_\mu = \frac{u_z^{(\mu)}}{u_x^{(\mu)}}$ ,

$\mu = l, t$ .

Усредненная по периоду колебаний z-ая компонента плотности потока энергии на бесконечности должна быть равной нулю  $j_z(z \rightarrow 0) = 0$ . Так как задача стационарная и внешняя поверхность кристалла свободна, то из этого условия вытекает требование  $|B|^2 = -1$ . Тогда можно положить  $B = e^{2i\varphi}$ , где  $\varphi$  - фаза колебаний. В рамках теории упругости эта волна рассматривалась в [7, 8] в изотропной среде с плоским дефектом.

Уравнения движения поверхностных атомов можно получить, подставив решения (6) в (1) с учетом измененных матриц силовых постоянных. Полученные граничные условия (они очень громоздки, и поэтому здесь не приводятся) представляют собой алгебраические уравнения относительно амплитуд колебаний. Приравнявая нулю определитель этой системы, получаем уравнение для закона дисперсии псевдолокализованной волны. К сожалению, нахождение явного аналитического выражения для функции  $\omega(k, \varphi)$  не представляется возможным, поскольку возникший определитель

приводит к алгебраическому уравнению высокой степени. Однако удается получить аналитические решения в области длинноволновых колебаний.

Как и следует из общей теории псевдолокализованных колебаний, частоты исследуемых волн находятся между наименьшими граничными частотами псевдопродольной и псевдопоперечной ветвей спектра объемных колебаний кристаллической решетки. В рассматриваемом направлении распространения волны в ГЦК кристалле возникает не одна частота псевдолокальных колебаний, а непрерывный спектр частот, зависящих от параметра

$$\varphi \left( -\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2} \right).$$

Можно показать, что псевдолокальные колебания существуют в области сплошного спектра под нижней границей псевдопродольной объемной ветви (кривая 2 на рис. 1) при  $k < k_0$

$$\lambda = 2 - \cos 2k - \cos k, \quad (7)$$

а при  $k > k_0$  ниже верхней границы псевдопоперечной объемной моды (кривая 3 на рис. 1)

$$\lambda = 2(1 + \cos k), \quad (8)$$

и выше закона дисперсии псевдопоперечных колебаний при (кривая 1 на рис. 1)

$$\lambda = 2(1 - \cos k). \quad (9)$$

Это область, в которой сечения изочастотных поверхностей плоскостью  $kk_z$  (сагиттальная плоскость  $xz$ ) остаются выпуклыми относительно направления распространения волны, и каждому произвольному значению продольного волнового числа  $k$  соответствует пара одинаковых по модулю поперечных волновых чисел  $\pm ik_z^{(1)}$ .

В длинноволновом приближении можно показать, что закон дисперсии псевдолокальных колебаний имеет акустический вид  $\omega(k, \varphi) = c(\varphi)k$ , а зависимость скорости волны от фазы задается соотношением

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{(\Gamma_1 + \kappa_1)(1 - k_z^{(1)} \Gamma_1)}{(\Gamma_1 - k_z^{(1)})(1 - \kappa_1 \Gamma_1)}, \quad (10)$$

где собственные векторы объемных уравнений движения в данном пределе

$$\Gamma_1 = \frac{(c_1^2 - c^2) \frac{k^2}{c_1^2} + k_z^{(1)}}{2kk_z^{(1)}}, \quad \Gamma_1 = \frac{(c_1^2 - c^2) \frac{2k^2}{c_1^2} - \kappa_1}{2k\kappa_1}, \quad (11)$$

а затухание и поперечное волновое число имеют вид

$$\begin{aligned} \kappa_1^2 &= k^2 \left( \frac{3c^2}{2c_t^2} - 1 + \sqrt{\frac{1}{4} \left( \frac{c^2}{c_t^2} \right)^2 + 4 \left( \frac{c^2}{c_t^2} - 1 \right)} \right), \\ (k_z^{(1)})^2 &= k^2 \left( 1 - \frac{3c^2}{2c_t^2} + \sqrt{\frac{1}{4} \left( \frac{c^2}{c_t^2} \right)^2 + 4 \left( \frac{c^2}{c_t^2} - 1 \right)} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

На рис.2 показана зависимость скорости от фазы. Видно, что при  $\varphi \rightarrow 0$  скорость псевдолокальной волны стремится к скорости продольной объемной звуковой волны  $c \rightarrow c_1$ , при  $\varphi \rightarrow \pi/2$  скорость псевдолокальной волны стремится к скорости поперечной объемной звуковой волны  $c \rightarrow c_t$ , а также существует еще одно значение скорости  $c \rightarrow c_1$ ,  $c_1 = \frac{2c_t}{\sqrt{3}}$ . Вблизи  $\varphi = \pi/2$  можно получить разложение для скорости волны по малому параметру  $\delta\varphi = \pi/2 - \varphi \ll 1$ :  $\delta c \approx \sqrt{3}c_t \delta\varphi$ ,  $\delta c = c - c_t$ , а затухание будет  $\kappa_1 \approx 3\delta\varphi$ . В спектре псевдолокальных колебаний появляется выделенная скорость  $c_1$ , соответствующая скорости поперечной волны, рассеивающейся поверхностью кристалла под углом  $\pi/4$ .

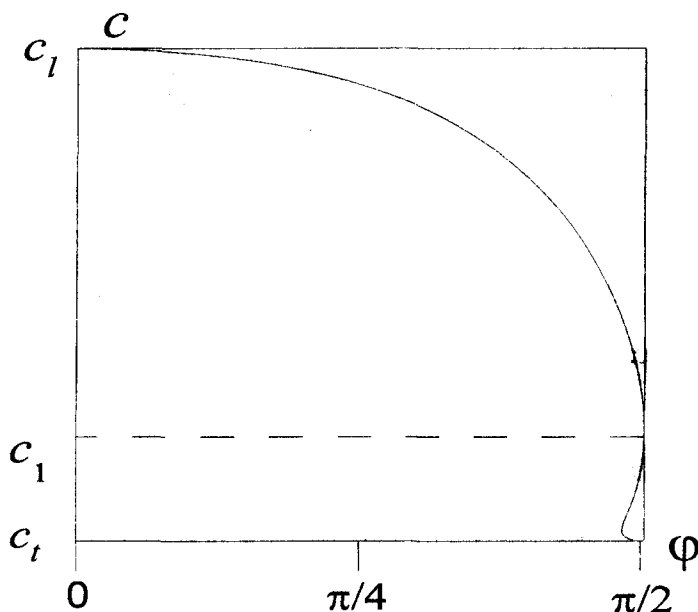


Рис. 2. Зависимость скорости длинноволновых псевдолокальных волн от фазы колебаний у поверхности кристалла.

Спектр рассматриваемого типа волн лежит в области, где существует лишь одна из ветвей объемных колебаний кристалла, а именно: псевдопоперечная. Однако в работах [6, 9, 10] отмечается наличие поверхностных резонансных мод вдоль направления [110], которые попадают в область сплошного спектра, где существуют обе ветви объемных колебаний. Такие резонансные состояния, продолжающие поверхностную волну SV2 в непрерывном спектре, наблюдались в эксперименте, а значит вектор смещения имеет составляющую перпендикулярную свободной поверхности кри-

стала. Предполагается, что такие резонансные моды относятся к другому, не рассматриваемому в настоящей работе, типу псевдолокальных волн, и поэтому требуют специального изучения.

Авторы выражают благодарность Е.С.Сыркину за обсуждение полученных результатов.

Работа частично выполнялась при поддержке грантов ISF U21200 и ISSEP 042032, а также проекта ГКНТ Украины «Двойник».

## ЛИТЕРАТУРА

1. Lifshits I.M. and Kosevich A.M., Rept. Progr. Phys., □29, 217 (1966). (Русский перевод: И.М.Лифшиц. Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем. -М.: Наука, 1987. -С.142-176.
2. Косевич А.М., Мацокин Д.В., Савотченко С.Е., ФНТ 23, 92 (1997).
3. Косевич А.М., Сыркин Е.С., Тутов А.В., ФНТ 22, (1996).
4. Гельфгат И.М., ФТТ 19, 1711 (1972).
5. Пересада В.И., Сыркин Е.С., ФНТ 3, 229 (1977).
6. Franchini A., Santoro G., Bortolani V., Wallis R.F., Phys. Rev. B38, 12139 (1988).
7. Косевич А.М., Тутов А.В., ФНТ 19, 1273 (1993).
8. Kosevich A.M., Tutov A.V., Phys. Lett. A213, 265 (1996).
9. Strocio J.A., Persson M., Bare S.R., Ho W., Phys. Rev. Lett. 54, 1428 (1985).
10. Kern K., David R., Comsa G., Surf. Sci. 164, L831 (1985).

## ДВИЖЕНИЕ МАГНИТНОГО СОЛИТОНА В НЕОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**В.В. Гани, А.И. Жуков, В.П. Воронов**

Теоретические исследования нелинейной динамики магнетиков ведут свое начало с работы Ландау и Лифшица [1], в которой было рассмотрено движение доменной границы в ферромагнетике. В работе [2] были получены решения типа магнитных солитонов. В настоящее время имеется обширная литература, посвященная нелинейным свойствам ферро- и антиферромагнетиков [3, 4]. Развита общая теория возмущений для солитонов [5, 6], в рамках которой, в частности, изучено движение солитона в слабо неоднородной среде [7].

В данной работе исследовано движение солитона в одноосном ферромагнетике, помещенном в медленно меняющееся в пространстве магнитное поле. В адиабатическом приближении получено уравнение для движения