

тельно заряженной вакансии и дивакансии искажения фоонного спектра кристалла  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  совпадают. Все квазилокальные колебания анизотропны. Это позволяет осуществить экспериментальную проверку полученных данных. В работе [2] в спектрах КР монокристаллов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  при  $6.61 \leq x \leq 6.79$  обнаружена дополнительная полоса около 6.9 ТГц, имеющая аномальную температурную зависимость. Кроме того, аналогичная полоса в спектре КР наблюдалась в геометрии  $(xx)$  [3]. В спектрах ИК нестехиометрических образцов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  зарегистрирована дополнительная полоса на частоте  $\sim 6.6$  ТГц [3].

Все рассчитанные нами частоты квазилокальных колебаний в оптической части спектра группируются в области от 5.5 до 9.1 ТГц. Учитывая что в спектрах КР дополнительная мода на частоте 6.9 ТГц наблюдается в геометрии  $(xx)$ , можно сделать вывод о связи этого колебания с одиночными вакансиями и дивакансиями с локализацией на них части электронной плотности. Расхождение результатов расчетов с экспериментом обусловлено приближениями модели жестких ионов, а также пренебрежением релаксацией решетки.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] International Tables for X-Ray Crystallography. V. 1. Birmingham, Kynock Press, 1952. P. 558.
- [2] Поносов Ю. С., Болотин Г. А., Гурин О. В., Чеботаев Н. М., Самохвалов А. А., Наумов С. В. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 48. № 7. С. 380—383.
- [3] Feile R. // Physica C. 1989. V. 159. N 1. P. 1—32.
- [4] Мазуренко В. Г., Кортов В. С. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 10. С. 3034—3037.
- [5] Паршин П. П., Землянов М. Г., Парфенов О. Е., Чернышев А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. № 7. С. 380—382.

Уральский политехнический институт  
им. С. М. Кирова  
Свердловск

Поступило в Редакцию  
25 февраля 1991 г.

УДК 539.219.3

© Физика твердого тела, том 33, № 8, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 8, 1991

## ВОЛНА ДЕФОРМАЦИИ СДВИГА ПРИ ДИФФУЗИОННОМ ПЕРЕМЕЩЕНИИ АТОМА ПО РЕШЕТКЕ

В. В. Мещеряков

В недавних работах [1, 2] вновь обсуждаются вопросы о роли упругих деформаций решетки при диффузии атомов и, как следствие, о сдвиговой неустойчивости реальных кристаллов при высоких температурах. В связи с этим возникает необходимость решения динамической задачи о возмущении решетки единичным диффузионным пробегом атома.

Возмущением в этой задаче является плотность силы  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ , действующей на решетку со стороны диффундирующего атома. Полагая, что характерная область движения атома  $r(t) \ll r$  — расстояния до точки наблюдения, представим  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$  мультипольным разложением

$$F_i(\mathbf{r}, t) = f_i(t) \delta(\mathbf{r}) - P_{in}(t) \partial_n \delta(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Монопольная и дипольная составляющие (1) определяются силой  $\mathbf{f}(t) = m \ddot{\mathbf{r}}(t)$ , где  $m$  — масса атома, и силовой диадой  $\mathbf{P}(t) = [\mathbf{f}_0 + \mathbf{f}(t)] \times [\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}(t)]$ . Постоянные векторы  $\mathbf{f}_0$  и  $\mathbf{r}_0$  характеризуют начальное состояние решетки ( $\mathbf{f}_0 \times \mathbf{r}_0 = 0$ ) и определяют тензор статических силовых диполей

$\mathbf{P}_0$  [3], который имеет вид диады  $\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{r}_0$  и описывает поле упругой деформации вакансии.

Плотность силы  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$  исключает физическое перемещение монополей в пространстве, что приводит к независимости динамики деформирования решетки от начальной статической деформации типа сдвига. Тем не менее структура возмущения (1) достаточно сложна, чтобы оправдать попытку качественной оценки отклика решетки в модели сплошной среды

$$\rho_0 \partial_t^2 s_i(\mathbf{r}, t) = H_{ik, mn} \partial_m \partial_n s_k(\mathbf{r}, t) + F_i(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

где  $\rho_0$  — плотность,  $H_{ik, mn}$  — тензор Хуанга. Если  $\mathbf{f}(0) = 0$ , то уравнения (2) принимают правильный вид статической задачи с тензором  $\mathbf{P}_0$  [3].

В приближении  $H_{ik, mn} = c_{44} \delta_{ik} + (c_{11} - c_{44}) \delta_{ikmn}$ , где  $c_{11}$  и  $c_{44}$  — упругие постоянные, определяющие продольную  $c_l = (c_{11}/\rho_0)^{1/2}$  и поперечную  $c_t = (c_{44}/\rho_0)^{1/2}$  скорости распространения деформаций, решение уравнений (2) можно найти, если воспользоваться разложением запаздывающего интеграла по малому параметру  $x(\tau)/c_t \tau$ , где  $x(\tau)$  и  $\tau$  — длина и время пробега атома.

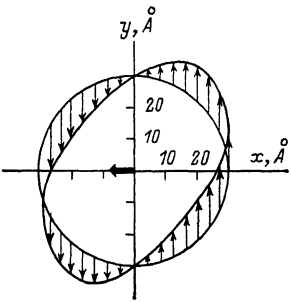


Рис. 1. Деформации сдвига при  $\xi = 0.82$  ( $T = 1000$  К).

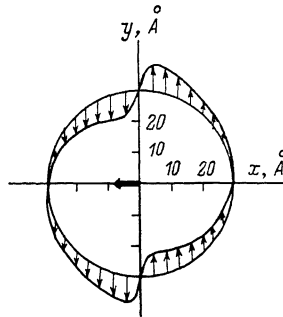


Рис. 2. Деформации сдвига при  $\xi = 0.2$ .

Задание кинематики атома, не противоречащей условию статического равновесия решетки на концах интервала  $\tau$ , определяет структуру поля смещений в волновой зоне. Например,

$$s_y = \frac{f_0 f_m (1 - \cos \omega_m t')}{4\pi \omega_m c_t c_{44}} \frac{\xi x}{r^2}, \quad (3)$$

где  $\xi = (c_{44}/c_{11})^{1/2}$ ,  $t' = t - r/c_t$ ,  $r = (x^2 + \xi^2 y^2 + z^2)^{1/2}$ .

Из (3) следует, что если в момент времени  $t=0$  атом начал движение, то через время  $t_0 = r/c_t$  в точке  $r$  возникает смещение среды, которое в силу нечетности относительно координаты  $x$  имеет пространственное распределение, соответствующее волне сдвига. Длится процесс от момента времени  $r/c_t$  до  $r/c_t + \tau$ .

Физической причиной, обуславливающей волну сдвига, является перенос начального упругого поля вакансии по решетке, который определяется сдвиговыми компонентами диад  $\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{r}(t)$  и  $\mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{r}_0$ .

Помимо (3) решение уравнений (2) содержит монопольную волну, обусловленную первым слагаемым (1), и дипольную объемную волну, определяемую тензором  $\mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{r}(t)$ .

Поля деформации, вычисленные для волновой зоны, убывают с расстоянием по закону  $r^{-1}$ , что приводит к конечной величине интенсивности упругого излучения на бесконечности и позволяет рассмотреть начальный период диффузионного акта как процесс поглощения энергии волн решетки. В таком подходе энергия активации самодиффузии складывается из энергий, соответствующих данному типу волны:  $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{vol}} + E_{\text{dis}}$ , где энергия  $E_{\text{kin}}$  обусловлена изменением кинетической энергии атома,  $E_{\text{vol}}$  и  $E_{\text{dis}}$  — изменением дипольного момента решетки.

Параметры смещений (3):  $\omega_m$ ,  $f_0$  и  $f_m$  можно оценить приближенно на основании законов сохранения энергии и того обстоятельства, что объемный эффект статического дефекта определяется в основном электростатикой решетки [4]. Это приводит к значениям  $\omega_m = (16c_t c_{44}/m)^{1/3}$ ,  $f_0 = mc_t \omega_m$ ,  $f_m = 0.35mc_t \omega_m$ .

Вычисления, выполненные для Na, дают следующие результаты: длина волны поглощения  $\lambda = 8.6 \text{ \AA}$ ; максимальная скорость атома  $v(\tau) = 0.7 c_t$ ; длина пробега, соответствующая максимальной скорости атома,  $x(\tau) = 1.5 \text{ \AA}$ .

На рис. 1, 2 показаны значения  $s_y \cdot 10^2$  в  $30 \text{ \AA}$  от диффундирующего атома, вычисленные по формуле (3) при  $\omega_m t' = \pi/2$ . Стрелкой в начале координат обозначена сила  $f(t)$ . Рис. 1 иллюстрирует мгновенную структуру поля сдвиговой деформации для  $\xi = 0.82$ , что имеет место при  $T = 100 \text{ K}$  [5]. С повышением температуры упругая постоянная  $c_{44}$  уменьшается быстрее, чем  $c_{11}$ , и, например, при  $\xi = 0.2$  возможно развитие сдвиговой неустойчивости (рис. 2).

Потенциальная энергия смещений (3) определяется величиной  $E_{\text{dis}}$ , нижней границей которой является энергия релаксации статической решетки, содержащей вакансию. Например, для щелочных металлов  $E_{\text{rel}} = 0.03 \div 0.04 \text{ эВ}$  [6].

#### Список литературы

- [1] Manning J. R. // Diffus. Anal. and Appl.: Proc. Sump. TMS Fall Meet. Chicago, 1989. P. 3—17.
- [2] Akbar S. A., Sato H. // J. Phys. and Chem. Solids. 1989. 50. № 7. P. 729—733.
- [3] Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах. М., 1981. 439 с.
- [4] Мецераков В. В. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 1. С. 77—82.
- [5] Landolt-Bornstein H. Zahlenwerte and Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik. Gr. III, B 11. 1979. 854 p.
- [6] Братковский А. М., Зейн И. Е. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 9. С. 2561—2569.

Московский институт стали и сплавов

Поступило в Редакцию  
27 февраля 1991 г.

УДК 537.311.3

© Физика твердого тела, том 33, № 8, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 8, 1991

## ОПТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ GaAs и InAs

Ю. А. Пусеп, А. Г. Милёхин, М. П. Синюков

Измерение отражения двухатомных кристаллов в области полосы остаточных лучей позволяет определить частоты продольных и поперечных оптических фононов  $\nu_{LO}$  и  $\nu_{TO}$  соответственно. По виду спектров отражения можно установить характер наблюдаемых колебаний: поперечные колебания соответствуют максимумам отражения, а продольные — минимумам. Вследствие резонансного характера поглощения электромагнитного излучения на частоте поперечных колебаний их наблюдение возможно в достаточно тонких пленках (даже когда толщина пленки  $d \ll \ll \lambda/n$ , где  $\lambda$  — длина электромагнитной волны,  $n$  — коэффициент преломления), в то время как обнаружение продольных колебаний из-за слабого поглощения вблизи частоты  $\nu_{LO}$  оказывается затруднительным. Вместе с тем именно продольные колебания, такие как плазменные и плазмон-фононные моды, несут информацию о электрофизических свойствах полупроводниковых пленок.