[5] *Гегузина С. Я., Кривоглаз М. А.* ФТТ, 1967, т. 9, № 11, с. 3095—3103.
[6] *Yamada T., Iwasaki H., Niizeki N.* J. Appl. Phys., 1972, vol. 43, N 3, p. 771—775.
[7] *Блистанов А. А.* и др. Акустические кристаллы. М.: Наука, 1982. 632 с.

Уральский государственный
университет им. А. М. Горького
Свердловск

Поступило в Редакцию
11 ноября 1987 г.

УДК 538.913 : 539.211

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

СТРУКТУРЫ С БОЛЬШИМИ ПЕРИОДАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА И ФОНОННЫЙ СПЕКТР

Э. Б. Сонин, Н. В. Фомин

В настоящее время широко исследуются поверхности со сверхструктурой, имеющей период, заметно превышающий объемный период в кристалле. К ним относятся двумерные и одномерные решетки из линий (рядов) адсорбированных инородных атомов, а также реконструированные поверхности. В ряде случаев такие структуры представляют собою ряды из «лишних» атомов (или вакансий) как, например, структуры $2\times n$, обнаруженные на поверхности Si [1]. При определении равновесных и динамических свойств таких структур важную роль играют взаимодействия с упругими модами кристалла. Они определяют прежде всего характер фазового перехода на поверхности. Первоначально такие переходы исследовались в модели Френкеля и Конторовой [2], в которой ряды адсорбированных атомов (в случае реконструированной поверхности это атомы того же вещества) могли размещаться в жестко закрепленных периодически расположенных одномерных потенциальных ямах. В этом случае взаимодействие между рядами атомов, соответствующих солитонам уравнений синус Гордона, экспоненциально спадет с расстоянием между рядами.

Как показали Виллэн и Гордон [3], учет упругих деформаций в объеме кристалла, созданных добавленными рядами атомов, приводит к степенному взаимодействию на больших расстояниях. Однако ошибка в вычислениях привела их к выводу, что в зависимости от значения модуля Пуассона σ (для изотропного кристалла) между рядами возможно как притяжение, так и отталкивание. Притяжение означало бы, что переход к сверхструктуре (реконструкция поверхности) был бы переходом первого, а не второго рода. Покажем, что ряды всегда отталкиваются.

Если к поверхности кристалла приложено поле сил $F(x)$, направленных по оси x и не зависящих от y, то граничные условия для тензора деформаций имеют вид: $\sigma_{xz}(x)=F(x)$, $\sigma_{zz}=0$. Используя двумерную теорию упругости [4], энергию системы из двух рядов можно записать в виде

$$\mathcal{E}=\frac{1}{2}\int dx\sigma_{iz}u_i=\frac{1-\sigma^2}{\pi E}\int\int dxdx'F(x)\,F(x')\ln|x-x'|. \tag{1}$$

В случае, когда расстояние между рядами l много больше поперечного размера ряда d (области локализации $F(x)$), в главном порядке по d/l, исключая из (1) самодействие, имеем для энергии взаимодействия

$$\mathcal{E}_{\text{int}}=\frac{2(1-\sigma^2)P^2}{\pi El^2}, \tag{2}$$

где $P = \int F(x)\, x dx$ — дипольный момент силы, создаваемый рядом.[1] Поскольку $\sigma < 1$, то энергия взаимодействия всегда положительна. Конкретное значение P можно вычислить в непрерывном пределе модели Френкеля и Конторовой, в которой плотность силы $F = \frac{2\pi V}{a} \sin \frac{2\pi u_x}{a}$, смещение адатомов $u_x = \frac{2a}{\pi} \operatorname{arctg} [\exp (x/d)]$, a — период кристаллической решетки, V — амплитуда поверхностного потенциала, $d = \sqrt{A/V}$ — поперечный размер ряда, а A характеризует упругое взаимодействие адатомов между собой. Вычисление дипольного момента дает

$$P = \frac{8\pi V}{a} \int dx \frac{x \operatorname{sh} (x/d)}{\operatorname{ch}^2 (x/d)} = \frac{8\pi^2 A}{a}. \tag{3}$$

Упругое взаимодействие солитонов модели Френкеля—Конторовой через подложку вычислял также Люксютов [5]. Он тоже получил отталкивание, но другой величины, поскольку при расчете упругих полей использовал другие граничные условия, не соответствующие, на наш взгляд, исследуемой физической задаче.

Выясним теперь, как реконструкция поверхности с образованием правильной решетки из добавленных рядов будет проявляться в спектре поверхностных волн. Мы будем предполагать, что каждая из линий может совершать малые колебания относительно выделенных дискретностью кристаллической решетки положений равновесия, которые в свою очередь испытывают смещения при прохождении звуковой волны. При этом для смещений рядов u_A имеем уравнение

$$m_A \frac{\partial^2 u_A}{\partial t^2} = m_A \omega_A^2 (u_x - u_A), \tag{4}$$

где u_x — смещение поверхности в точке нахождения линии. Процедура определения мод колебаний кристалла с реконструированной поверхностью $z=0$ отличается от изложенной в книге Ландау и Лифшица [7] тем, что компоненты тензора напряжений σ_{xz} не обращаются в нуль в местах нахождения рядов

$$\sigma_{xz} = - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta (x - nl)\, m_A \frac{\partial^2 u_A}{\partial t^2}. \tag{5}$$

Решая совместно уравнения теории упругости и уравнения (4) и (5), получаем следующее дисперсионное уравнение для плоской волны $\sim \exp (ikx - i\omega t)$, распространяющейся нормально к рядам,

$$1 + \frac{\omega^4 \omega_A^2 m_A}{\rho l c_t^4 (\omega^2 - \omega_A^2)} \sum_G \frac{\varkappa_t (k + G)}{D (k + G,\ \omega)} = 0, \tag{6}$$

$$\varkappa_t^2 (p) = p^2 - \left(\frac{\omega}{c_t}\right)^2, \quad \varkappa_l^2 = p^2 - \left(\frac{\omega}{c_l}\right)^2, \quad D (p,\ \omega) = \left[2p^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right]^2 - 4\varkappa_l \varkappa_t p^2,$$

ρ — плотность кристалла, c_l и c_t — скорости продольного и поперечного звуков. Суммирование ведется по векторам обратной решетки $G = \frac{2\pi}{l} n$. В пределе больших l поправки к невозмущенным спектрам $\omega = \omega_A$ (колебаний рядов) и $\omega = c_R k$ (рэлеевских волн) могут быть найдены по теории возмущений. Приведем выражение для щели в спектре рэлеевских волн $\delta\omega_1$ на границе зоны Бриллюэна при $k = \pi/l$ и для расщепления $\delta\omega_2$ частот колебаний при $k = \omega_A/c_R$ (в точке пересечения невозмущенных спектров колебаний рядов и рэлеевских волн)

$$\delta\omega_1 = \frac{m_A \omega_A^2}{\rho l c_t} a, \tag{7}$$

[1] Такое же выражение было получено для энергии упругого взаимодействия между ступеньками на поверхности кристалла [6].

$$\delta\omega_2 = \left[\frac{m_A\omega_A^3}{\rho l c_t}\alpha\right]^{1/2} \tag{8}$$

$$\alpha = \frac{c_R c_l \sqrt{c_t^2 - c_R^2}}{4c_t^2\left\{\left[\left(\frac{c_R}{c_t}\right)^2 - 2\right]c_l + c_t\left(\sqrt{\frac{c_l^2 - c_R^2}{c_t^2 - c_R^2}} + \sqrt{\frac{c_t^2 - c_R^2}{c_l^2 - c_R^2}}\right)\right\}}. \tag{9}$$

Экспериментальное обнаружение щели в спектре рэлеевских волн для реконструированной поверхности описано в [8].

Звуковая волна является чисто поверхностной, когда $\varkappa_t$ и $\varkappa_l$ вещественные. Возникновение мнимой части у $\varkappa_t$ и $\varkappa_l$ соответствует возможности излучения колеблющимися адатомами поперечной и продольной звуковых волн, в результате чего поверхностная волна затухает. В пределе $k \ll \omega/c_l$ в сумме по G в уравнении (6) достаточно оставить лишь слагаемое с $G=0$, и для мнимой добавки к частоте получаем

$$\operatorname{Im}\delta\omega = -\frac{m_A\omega_A^2}{\rho l c_t}. \tag{10}$$

Выведенные нами формулы могут быть использованы для получения информации об устройстве реконструированной поверхности с помощью экспериментов со звуком.

Литература

[1] *Martin J. A., Savage D. E., Moritz W., Lagally M. G.* Phys. Rev. Lett., 1986, vol. 56, N 18, p. 193—197.
[2] *Покровский В. Л., Талапов А. Л.* ЖЭТФ, 1980, т. 78, № 1, с. 269—293.
[3] *Gordon R., Villian S.* J. Phys. C, 1978, vol. 6, p. L151—154.
[4] *Тимошенко С. П., Гудьнр Дж.* Теория упругости. М.: Наука, 1979. 150 с.
[5] *Люксютов И. Ф.* ЖЭТФ, 1982, т. 82, № 4, с. 1267—1276.
[6] *Марченко В. И., Паршин А. Я.* ЖЭТФ, 1980, т. 79, № 7, с. 257—260.
[7] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория упругости. М.: Наука, 1987, с. 134—138.
[8] *Kern K., David R., Palmer R. L., Comsa G.* Phys. Rev. Lett., 1986, vol. 56, N 19, p. 2064—2067.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
13 ноября 1987 г.

УДК 621.315.592

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

ОТКЛОНЕНИЕ ОТ ЗАКОНА КЮРИ В ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ $Pb_{0.82}Sn_{0.18}Se\langle Mn\rangle$

И. В. Мисюра

В последние годы особый интерес вызывает изучение влияния магнитных примесей на энергетический спектр узкощелевых полупроводников. Реализация в таких материалах локальных магнитоупорядоченных состояний [1-3] открывает новые перспективы изготовления оптоэлектронных устройств, управляемых магнитным полем [4]. Присутствие магнитных ионов в решетке обусловливает обменное взаимодействие между свободными носителями заряда (СНЗ) и локализованными на ионах примеси d-электронами, что приводит к изменению энергетического спектра в магнитном поле, причем это изменение определяется состоянием магнитной подсистемы и пропорционально среднему значению магнитного момента M (H, T) примесных ионов. Изучение поведения примеси Mn в твердых