

Упругие волны в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка

© И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 9 марта 2006 г.

В окончательной редакции 15 июня 2006 г.)

Рассмотрены упругие волны в кубических кристаллах. Предложена новая классификация кубических кристаллов в соответствии с их упругими свойствами. Показано, что все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной и отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка. Вид спектра колебательных ветвей для кристаллов этих двух типов различается качественно. Проанализированы угловые зависимости векторов поляризации. Показано, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах мал и им можно пренебречь. Вклад продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым: максимальное значение продольных компонент составляет 16.5% для кристаллов Ge и достигает 27% для кристаллов KCl.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 05-02-16912, программы президиума РАН № 12, ведущей научной школы № НШ 5869.2006.2, а также „Фонда содействия отечественной науке“.

PACS: 62.20.Dc, 62.30.+d

При изучении поглощения ультразвука [1–4], фононного транспорта [5,6] и термоэдс электрон-фононного увлечения [7] в полупроводниковых и диэлектрических кристаллах возникает проблема корректного расчета частот релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния с учетом анизотропии упругих свойств. Эта проблема является особенно актуальной для исследования решеточной теплопроводности [8–10] и коэффициента поглощения ультразвука [11] в изотопически высокообогащенных кристаллах германия, кремния и алмаза. Приближение изотропной среды, которое обычно использовалось для оценки вероятности ангармонических процессов рассеяния [5,6,8–10], не является адекватным для кристаллов германия, кремния и алмаза, а также таких полупроводниковых соединений, как InSb, GaAs, CaF₂ и т.д., имеющих кубическую симметрию с существенной анизотропией упругих модулей как второго, так и третьего порядка.

Адекватным приближением для этих задач является модель анизотропного континуума [12,13]. Для некоторых металлов кубической симметрии расчеты спектров фононов были проведены в работах [14,15]. Аналогичная задача для гексагональных кристаллов рассмотрена в [16]. В упругоизотропном приближении спектр и векторы поляризаций фононов для кристаллов Ge и Si вычислялись в [17]. Определенный прогресс в этом направлении достигнут в работах [18], где было получено выражение для упругой энергии, обусловленной ангармонизмом колебаний решетки для кристаллов кубической симметрии, через экспериментально определенные упругие модули второго и третьего порядка

и рассчитаны частоты релаксации фононов для ряда ангармонических процессов релаксации.

Однако анализ, проведенный в [18], выполнен в квазиизотропном приближении: не учитывалось влияние кубической анизотропии на спектр и векторы поляризации фононов. Это приближение может приводить к большой погрешности при расчете частот релаксации фононов различных поляризаций и соответственно коэффициентов поглощения ультразвука. Поэтому в настоящей работе проведен анализ спектра и векторов поляризации фононов в модели анизотропного континуума для большого числа кубических кристаллов. Предложена новая классификация кубических кристаллов в соответствии с их упругими свойствами. Показано, что все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной (тип I) и отрицательной (тип II) анизотропией упругих модулей второго порядка. Вид спектра колебательных ветвей для кристаллов этих типов различается качественно, тогда как внутри одного типа кристаллов спектры фононов различаются лишь количественно. Проведен детальный анализ угловых зависимостей векторов поляризации для двух наиболее актуальных случаев: для волновых векторов, лежащих в плоскостях граней куба или диагональных плоскостях. Показано, что при классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию, а разделение поперечных мод на быстрые и медленные [1,2] в ряде случаев не является физически корректным. Установлено, что поперечная компонента квазипродольных колебаний для кубических кристаллов типа I и II мала и ей можно пренебречь. В противоположность этому продольная компонента квазипоперечных волн для куби-

ческих кристаллов не является малой, и при усреднении по векторам поляризации квазипоперечных фононов в частотах релаксации необходимо учитывать продольную компоненту этих волн.

Рассмотрим спектр фононов в кубических кристаллах в модели анизотропного континуума [1,12,13]. В этой модели предполагается, что волновой вектор фонона \mathbf{q} гораздо меньше дебаевского волнового вектора \mathbf{q}_d , и спектр фононов с поляризацией λ может быть представлен в виде

$$\omega_q^\lambda = S^\lambda(\theta, \varphi)q. \quad (1)$$

Анизотропия спектра определяется анизотропией фазовой скорости $S^\lambda(\theta, \varphi)$, зависящей от угловых переменных θ и φ вектора \mathbf{q} . Для кубических кристаллов в координатах, направленных по ребрам куба, компоненты векторов поляризации e_j и спектр фононов могут быть определены из системы уравнений [1], которая в обозначениях Саймонса [9] может быть представлена в виде

$$\sum_j e_j \left\{ (n_i n_j - \varepsilon \delta_{ij}) + (k-1)n_i n_j (1 - \delta_{ij}) \right\} = 0. \quad (2)$$

Здесь $n_j = q_j/q$ — проекции единичного вектора фонона $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ на соответствующие оси координат, $k = \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{11} - c_{44}}$, $\varepsilon = \frac{S(\theta, \varphi)^2 \rho - c_{44}}{c_{11} - c_{44}}$, c_{ij} — упругие модули второго порядка. Параметр $k-1$ характеризует упругую анизотропию кубических кристаллов.

Из условия существования нетривиального решения системы уравнений (2)

$$\varepsilon^3 - \varepsilon^2 - (k^2 - 1)\varepsilon\xi - (1-k)^2(2k+1)\eta = 0, \quad (3)$$

где $\xi = n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2$, $\eta = n_1^2 n_2^2 n_3^2$ — кубические гармоники, находим фазовую скорость для акустических ветвей фононного спектра

$$S_\lambda(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon_\lambda \right)^{1/2}, \quad \varepsilon_\lambda = \frac{1}{3} + z_\lambda. \quad (4)$$

Величины z_λ для продольных (L) и поперечных фононов ($t1, t2$) определяются выражениями

$$z_L = 2r \cos \frac{Q}{3}, \quad z_{t1, t2} = 2r \cos \left(\frac{Q}{3} \mp \frac{2\pi}{3} \right),$$

$$r = \frac{1}{3} \sqrt{1 + 3(k^2 - 1)\xi},$$

$$\cos Q = \left\{ \frac{1 + 4.5(k^2 - 1)\xi + 13.5\eta(1 - 3k^2 + 2k^3)}{\sqrt{(1 + 3(k^2 - 1)\xi)^3}} \right\}. \quad (5)$$

Решения кубического уравнения (2) ε_{t1} и ε_{t2} , определяемые формулами (4) и (5), соответствуют быстрой (верхней) и медленной (нижней) поперечным колебательным модам. Далее покажем, что при классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию,

а разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды в ряде случаев не является физически корректным.

Подстановка решений (4) и (5) в систему уравнений (2) позволяет определить векторы поляризации фононов различных колебательных ветвей

$$e_j^\lambda = \frac{1}{A_\lambda} \left\{ \frac{n_j}{\psi_j^\lambda} \right\}, \quad A_\lambda = \pm \sqrt{\sum_j \frac{n_j^2}{(\psi_j^\lambda)^2}},$$

$$(\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}) = \frac{1}{A_\lambda} \sum_j \frac{n_j^2}{\psi_j^\lambda}, \quad \psi_j^\lambda = \varepsilon_\lambda + (k-1)n_j^2. \quad (6)$$

Нетрудно убедиться, что для векторов поляризации выполняются соотношения

$$(e^\lambda, e^{\lambda'}) = \delta_{\lambda, \lambda'}.$$

Отметим, что, хотя формулы (6) весьма просты, использование их при расчетах частот релаксации фононов затруднено из-за возникающих при этом неопределенностей типа 0/0 для конкретных симметричных направлений (см. далее). Для определения величин e_j в этих направлениях приходится возвращаться к исходной системе (2).

Для каждого направления волнового вектора в кристалле существует три независимые волны со своими скоростями $S^\lambda(\theta, \varphi)$ и взаимно перпендикулярными смещениями. В общем случае ни одно из этих смещений не совпадает ни с нормалью к фронту волны, ни с перпендикулярным направлением к нормали, т.е. волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными [1]. Однако в кубических кристаллах в симметричных направлениях, таких как [100], [110] и [111], распространяются чистые моды, причем в направлениях типа [100] и [111] поперечные моды вырождены (рис. 1). Для упругоизотропных сред параметр k равен единице, и поперечные моды вырождены для всех направлений. Как видно из рис. 1, для кубических кристаллов скорости звука и соответственно спектры фононов существенно отличаются от характерных для изотропных сред. Следует отметить, что анизотропия спектра и наличие точек вырождения в колебательных модах поперечных фононов приводят к существенным отличиям частот релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния в кубических кристаллах от изотропных сред [19,20].

Важную роль в анизотропии спектра и угловой зависимости векторов поляризации фононов играют абсолютная величина и знак параметра $\Delta C = c_{12} + 2c_{44} - c_{11}$. В соответствии со знаком величины ΔC все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной $\Delta C > 0$ (параметр $k > 1$) и отрицательной $\Delta C < 0$ (параметр $k < 1$) анизотропией упругих модулей второго порядка (см. таблицу). К типу I относятся кристаллы Ge, Si, алмаза, GaSb и т.д. Для них в направлениях [100] скорость продольных фононов минимальна, а поперечных фононов максимальна, тогда как скорость

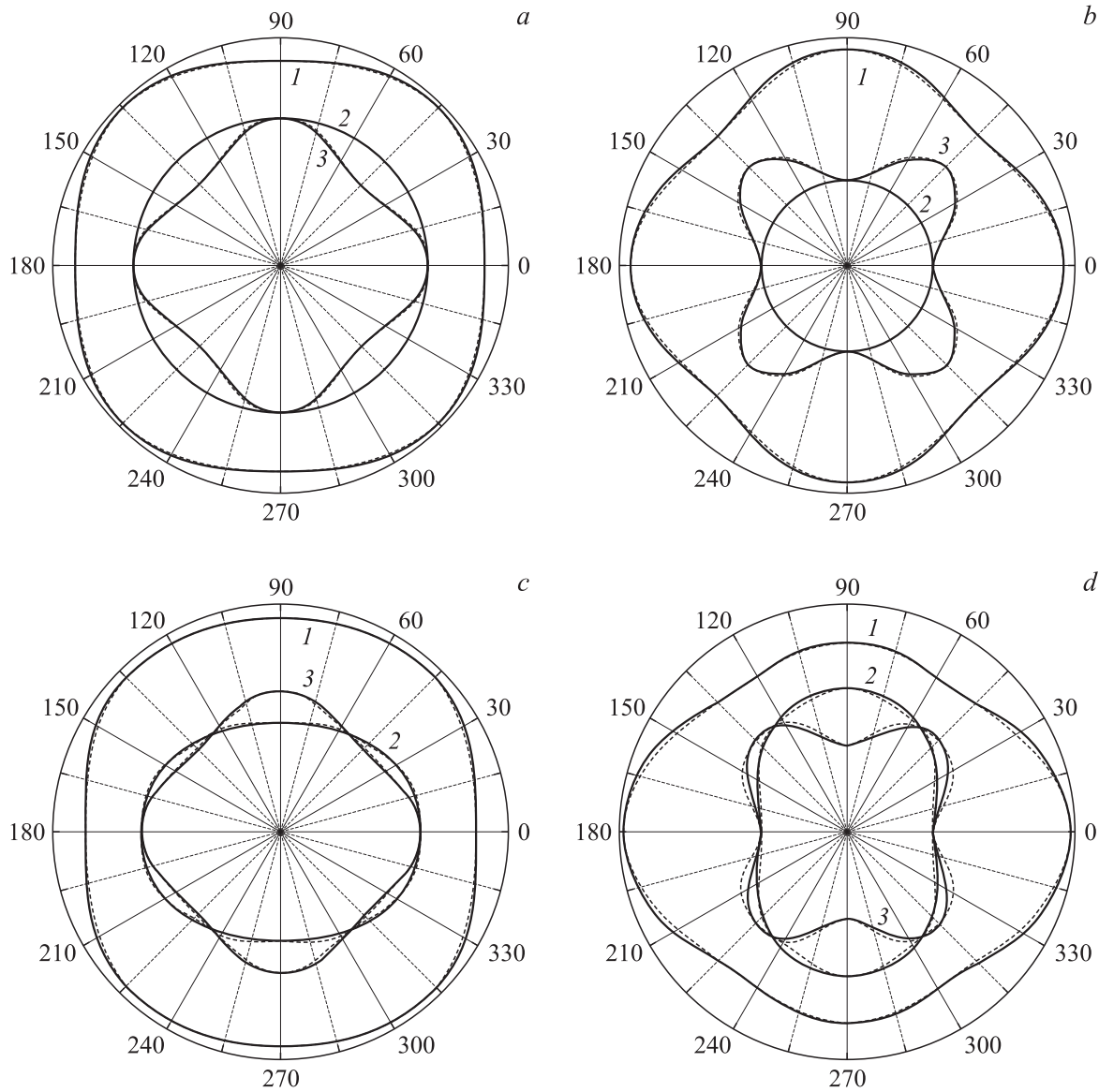


Рис. 1. Угловые зависимости скоростей звука $S^l(\theta, \varphi)$ в кристаллах Ge (*a, c*) и KCl (*b, d*) для волнового вектора, лежащего в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (*a, b*) и в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) (*c, d*). Сплошные кривые 1 — для квазипродольных волн, кривые 2 и 3 — для квазипоперечных мод; штриховые кривые соответствуют аппроксимации формулами (8) и (9).

продольных фононов максимальна в направлениях [111], а поперечных фононов минимальна в направлениях [110] (рис. 1, *a, c*)

$$\begin{aligned}
 S_{100}^L &= \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}, & S_{111}^L &= S_{100}^L \left(1 + \frac{\Delta C}{3c_{11}}\right)^{1/2}, \\
 S_{110}^L &= S_{100}^L \left(1 + \frac{\Delta C}{2c_{11}}\right)^{1/2}, \\
 S_{100}^T &= \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}, & S_{111}^T &= S_{100}^T \left(1 - \frac{\Delta C}{3c_{44}}\right)^{1/2}, \\
 S_{110}^T &= S_{100}^T, & S_{110}^T &= S_{100}^T \left(1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}}\right)^{1/2}. \quad (7)
 \end{aligned}$$

К типу II кубических кристаллов ($\Delta C < 0$) относятся кристаллы KCl, NaCl и т.д. (см. таблицу). Как видно из сравнения рис. 1, *a, b* и *c, d*, вид спектров колебательных ветвей для кристаллов типа I и II качественно различается, тогда как внутри одного типа кристаллов спектры фононов различаются лишь количественно. Для кристаллов типа II (в отличие от кристаллов типа I) скорость продольных фононов максимальна в направлении типа [100] и минимальна в направлении [111], скорость поперечных фононов максимальна в направлении [110] и минимальна в направлении [100] (рис. 1, *b, d*). Хотя Ge, Si и алмаз, входящие в первую группу кубических кристаллов, являются ковалентными, а KCl, NaCl и CaF₂ — ионными кристаллами, проведенное нами разделение кубических кристаллов на два типа по их упругим

Параметры анизотропии ΔC и k (в единицах 10^{12} дуп/см²) и упругие модули второго порядка для кубических кристаллов типа I и II (данные взяты из работ [1,21])

Тип	Кристалл	Плотность, g/cm ³	c_{11}	c_{12}	c_{44}	ΔC	k	Степень ионности связи
I	Ge	5.32	1.289	0.483	0.671	0.54	1.867	0
	Si	2.33	1.657	0.638	0.796	0.57	1.67	0
	Алмаз	3.51	10.76	1.25	5.758	2.01	1.4	0
	InSb	5.76	0.672	0.367	0.302	0.3	1.81	0.32
	GaSb	5.62	0.885	0.404	0.433	0.385	1.85	0.26
	LiF	2.6	1.144	0.426	0.628	0.54	2.4	0.92
	MgO	3.58	2.86	0.87	1.48	0.97	1.703	0.84
	Al	2.7	1.069	0.626	0.285	0.127	1.162	Металл
	Cu	8.94	1.684	1.214	0.754	1.038	2.116	»
	Au	19.32	1.86	1.57	0.42	0.55	1.382	»
	Ag	10.49	1.22	0.915	0.448	0.591	1.766	»
	Li	0.55	0.148	0.125	0.108	0.193	5.825	»
	K	0.91	0.0457	0.0374	0.0263	0.044	3.284	»
	Na	1.01	0.0615	0.0469	0.0592	0.104	46.13	»
	Pb	11.34	0.466	0.392	0.144	0.214	1.655	»
Ni	8.9	2.465	0.473	1.247	0.502	1.412	»	
II	KCl	1.98	0.398	0.062	0.0625	-0.211	0.37	0.95
	NaCl	2.16	0.487	0.124	0.126	-0.11	0.69	0.94
	GaAs	5.31	0.192	0.0599	0.0538	-0.024	0.823	0.32
	PbS	7.5	1.27	0.298	0.248	-0.476	0.534	
	CaF ₂	3.18	1.644	0.502	0.347	-0.45	0.655	0.89
	SrF ₂	2.44	1.24	0.43	0.31	-0.185	0.796	0.89
	Mo	10.19	4.6	1.76	1.1	-0.64	0.817	Металл
	W	19.2	5.01	1.98	1.514	-0.002	0.999	»

свойствам не связано с характером их химической связи. Следует отметить, что в первую группу попали полупроводниковые кристаллы GaSb и InSb, а во вторую — близкий к ним по электрофизическим свойствам и степени ионности полупроводник GaAs. С другой стороны, ионные соединения LiF и MgO оказались в первой группе. Отметим, что металлы кубической симметрии также попали и в первую, и во вторую группу. По-видимому, нет другого физического критерия, позволяющего разделить кубические кристаллы на два типа, кроме приведенного выше.

Отклонение скоростей звука в кубических кристаллах, таких как Ge, от типичных для упругоизотропных сред относительно невелико (не превышает 20%). Это позволяет учитывать анизотропию спектра по теории возмущений. Для упрощения аналитических расчетов частот релаксации фононов с учетом кубической анизотропии выражения для скоростей звука (4), (5) с хорошей точностью могут быть аппроксимированы в линейном приближении по кубическим гармоникам $\xi(\theta, \varphi)$ и $\eta(\theta, \varphi)$ следующим образом:

$$S_2(\theta, \varphi) = S_{100}^2 \{1 + a_1^2 \xi(\theta, \varphi) + a_2^2 \eta(\theta, \varphi)\}. \quad (8)$$

Коэффициенты a_1^2 и a_2^2 находятся из условия, что во всех кристаллографических направлениях типа [100], [110]

и [111] выражения (8) совпадают с точным решением:

$$\begin{aligned} a_1^l &= 4 \left[\sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{11}}} - 1 \right], \\ a_2^l &= 27 \left[\sqrt{1 - \frac{2\Delta C}{3c_{11}}} + \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{11}}} \right], \\ a_1^{t1} &= 0, \quad a_2^{t1} = 27 \left[\sqrt{1 + \frac{\Delta C}{3c_{44}}} - 1 \right], \\ a_1^{t2} &= 4 \left[\sqrt{1 + \frac{\Delta C}{2c_{44}}} - 1 \right], \\ a_2^{t2} &= 27 \left[\sqrt{1 + \frac{\Delta C}{3c_{44}}} + \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \sqrt{1 + \frac{\Delta C}{2c_{44}}} \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

Проведенный анализ показал, что аппроксимация формулами (8) и (9) (штриховые линии на рис. 1) хорошо воспроизводит все особенности колебательных ветвей фононов в кубических кристаллах для произвольного направления. Погрешность аппроксимации в случае волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба, составляет примерно 1% для Ge и 2% для KCl, тогда как в случае диагонального сечения максимальная погрешность составляет менее 3% для Ge и 7% для KCl.

Что касается векторов поляризации фононов, то для произвольного направления (не совпадающего ни с одним из симметричных направлений) в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания. При этом вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах обоих типов мал, и им можно пренебречь. Оценки показывают (кривые 1' и 2' на рис. 2), что величина $(\mathbf{e}^L \mathbf{n}) = 1 - \delta_L$ мало отличается от единицы, при этом параметр $\delta_L < 0.02$ для кристаллов типа Ge, Si, алмаз, GaSb и $\delta_L < 0.03$ для кристаллов типа KCl. Ситуация с векторами поляризации квазипоперечных колебаний в общем случае более сложная, и продольная составляющая для квазипоперечных мод может быть значительной. Этот вопрос относится к слабо изученным.

Поэтому далее рассмотрим угловые зависимости векторов поляризации для двух наиболее актуальных случаев: 1) для волновых векторов, лежащих в плоскостях граней куба; 2) для волновых векторов, лежащих в диагональных плоскостях. Для волнового вектора фонона, расположенного в плоскости XZ, величина $\mathbf{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, функции $\xi = n_1^2 n_2^2 = \sin^2 \theta \cos^2 \theta$, $\eta = 0$, а кубическое уравнение сводится к виду

$$\varepsilon(\varepsilon^2 - \varepsilon - (k^2 - 1)\xi) = 0. \quad (10)$$

Его решение для поперечных мод имеет вид

$$\varepsilon_{i1} = 0, \quad \varepsilon_{i2} = 1/2 - \sqrt{1/4 + (k^2 - 1)\xi},$$

$$S_{i1} = S'_{i100}, \quad S_{i2} = S'_{i100} \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon_{i2}}. \quad (11)$$

Подстановка этих решений в (2) (или использование (6)) дает выражение для векторов поляризации

$$e^{i1}(\theta) = \{0, 1, 0\}, \quad (\mathbf{e}^{i1} \mathbf{n}_1) = 0, \quad e_x^{i2} = \frac{n_x \psi_z \operatorname{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2},$$

$$e_y^{i2} = 0, \quad \psi_{x,z} = \varepsilon_{i2} + (k - 1)n_{x,z}^2,$$

$$e_z^{i2} = \frac{n_z \psi_x \operatorname{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} = -\sqrt{1 - (e_x^{i2})^2},$$

$$\psi_2 = \sqrt{\varepsilon_{i2}(1 + 4(k - 1)\xi) + 2k(k - 1)\xi},$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}^{i2} \mathbf{n}) = \delta_{i2} &= \frac{\operatorname{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} (\varepsilon_{i2} + 2(k - 1)\xi) \\ &= \cos(\theta_e - \theta), \end{aligned} \quad (12)$$

где θ_e — угол между вектором поляризации \mathbf{e}^{i2} и осью Z. Итак, мода ε_{i1} является чисто поперечной с вектором поляризации, направленным вдоль оси Y. Она является быстрой для кубических кристаллов с положительной анизотропией второго порядка ($\Delta C > 0$) и медленной для кристаллов с отрицательной анизотропией ($\Delta C < 0$). Мода ε_{i2} в общем случае является

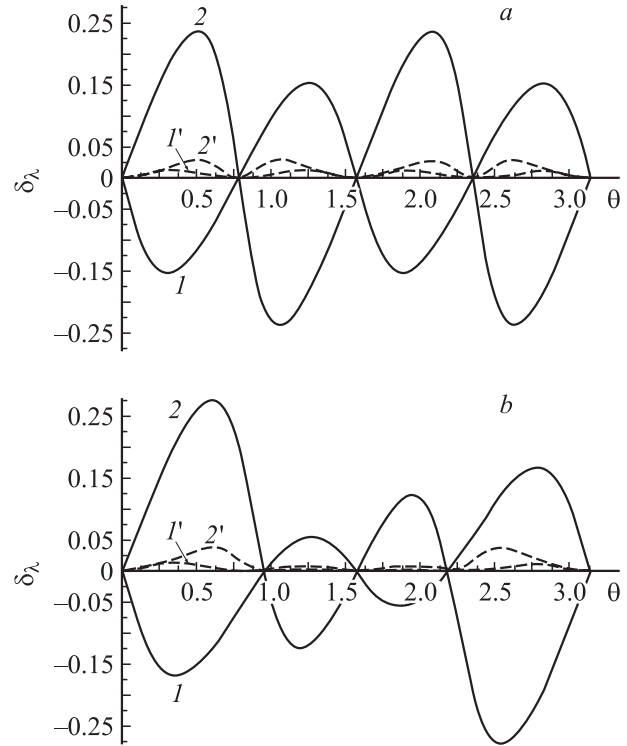


Рис. 2. Угловые зависимости величин δ_L и δ_{i2} , характеризующих отклонения векторов поляризации от чистых мод, для волновых векторов фононов, лежащих в плоскости грани куба (a) и в диагональной плоскости (b). 1, 2 — для квазипоперечных, 1', 2' — для квазипродольных мод. 1, 1' — для кристаллов Ge, 2 и 2' — для KCl.

смешанной поперечно-продольной. Для нее вектор поляризации лежит в плоскости XZ. Причем в кристаллах типа I (Ge, Si) она соответствует медленной моде, а в кубических кристаллах типа II (KCl, NaCl) она является быстрой поперечной модой (рис. 1). Величина δ_{i2} характеризует отклонение вектора поляризации \mathbf{e}^{i2} от чистой моды. Максимальные значения продольных компонент этой моды δ_{i2} составляет 15.5% для кристаллов Ge и достигают 24% для KCl. Абсолютные значения величины $|k - 1|$, которые характеризуют анизотропию упругих свойств кубических кристаллов, убывают при переходе от кристаллов Ge к кристаллам Si, алмаза и GaAs, поэтому максимальные значения δ_{i2} уменьшаются до 12.6% для кристаллов Si, 8.4% для алмаза, 9.1% для NaCl и 4.9% для GaAs.

Из рис. 3, a видно, что значения x -компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{i2} квазипоперечных мод в кристаллах Ge и KCl и соответствующих им компонент чистой моды $\mathbf{e}_0^{i2} = (\cos \theta, -\sin \theta)$, для которой величина $(\mathbf{e}_0^{i2} \mathbf{n}) = 0$ для обоих видов кристаллов, различаются более значительно, чем величины δ_{i2} . Как видно из рис. 2 и 3, для кристаллов типа I (Ge, Si) в области углов $0 < \theta < \pi/4$ угол θ_e между волновым вектором и вектором поляризации \mathbf{e}^{i2} превосходит значение $\pi/2$, и величина $\delta_{i2} < 0$, а для области углов $\pi/4 < \theta < \pi/2$ угол θ_e меньше $\pi/2$,

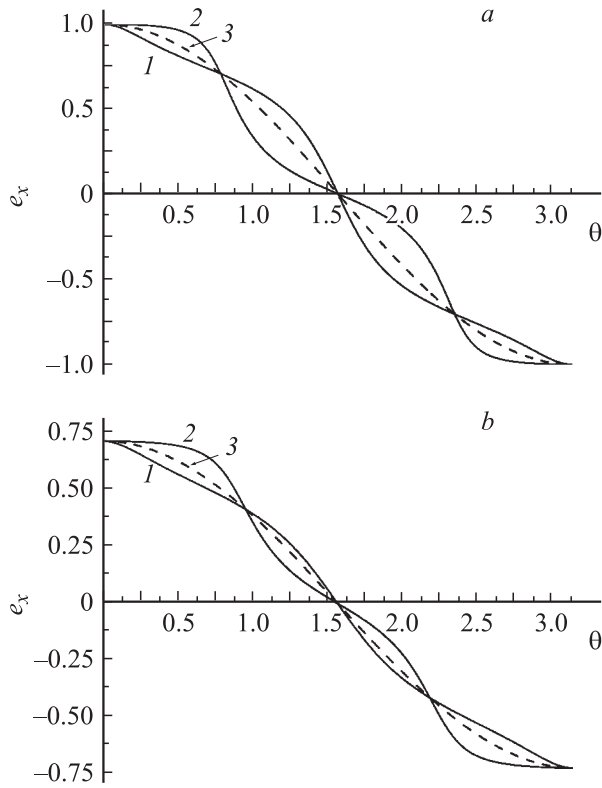


Рис. 3. Угловые зависимости x -компоненты векторов поляризации \mathbf{e}^{i2} квазипоперечных мод в кристаллах германия (1) и KCl (2) для волновых векторов фононов, расположенных в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). Штриховые кривые 3 — для соответствующих компонент чистых мод.

и величина $\delta_{r2} > 0$. Для кристаллов типа II (KCl, NaCl) ситуация обратная (кривые 2 на рис. 2, 3).

Более интересные результаты дает анализ спектра и векторов поляризации для диагонального сечения: $\varphi = \pi/4$, $\mathbf{n} = (\sin \theta/\sqrt{2}, \sin \theta/\sqrt{2}, \cos \theta)$, $\xi = 2n_x^2 \times (1 - 3/2n_x^2)$, $\eta = n_x^4(1 - 2n_x^2)$. В этом случае кубическое уравнение (3) может быть факторизовано для функции $\psi_x = \varepsilon + (k - 1)n_x^2$:

$$\psi_x [\psi_x^2 - \psi_x (1 + 3(k - 1)n_x^2) + 2k(k - 1)n_x^2(3n_x^2 - 1)] = 0. \quad (13)$$

Одно из решений этого уравнения $\psi_x^{i1} = 0$ дает

$$\varepsilon_{i1} = -\frac{1}{2}(k - 1) \sin^2 \theta,$$

$$S_{i1} \left(0, \frac{\pi}{4}\right) = S_{i100}^t \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}} \sin^2 \theta}. \quad (14)$$

Проведенный анализ показал, что вектор поляризации для этой моды перпендикулярен диагональной плоско-

сти и это решение является единственным

$$\mathbf{e}^{i1} = (-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0), \quad (\mathbf{e}^{i1}, \mathbf{n}) = 0. \quad (15)$$

Таким образом, эта мода является чисто поперечной, несмотря на то что спектр фононов для нее является анизотропным (рис. 1, *c, d*). Этот результат на первый взгляд может показаться неожиданным, поскольку, согласно представлениям, основанным на модели изотропной среды, чистым модам соответствуют изотропные спектры колебательных ветвей, а анизотропия спектра поперечных колебательных мод должна приводить к отклонению от взаимной перпендикулярности волнового вектора фонона и вектора поляризации. Однако из симметричного анализа упругих волн в кристаллах [13] следует, что для волновых векторов, лежащих в плоскости симметрии или в плоскости, перпендикулярной оси симметрии четного порядка, одна из трех нормальных волн будет чисто поперечной, а ее смещение будет перпендикулярным рассматриваемой плоскости. Диагональная плоскость ($\varphi = \pi/4$) является плоскостью симметрии кубического кристалла, поэтому полученный выше результат согласуется с анализом, проведенным в [13]. Отметим, что мода ε_{i1} является быстрой для кубических кристаллов типа I (и медленной для кристаллов типа II) в областях углов $-\theta_{111} < \theta < \theta_{111}$ и $\pi - \theta_{111} < \theta < \pi + \theta_{111}$ (θ_{111} — угол между осью Z и направлением [111]), а в областях углов $\theta_{111} < \theta < \pi - \theta_{111}$ и $\pi + \theta_{111} < \theta < 2\pi - \theta_{111}$ она является медленной для кубических кристаллов типа I (и быстрой для кристаллов типа II).

Два других решения уравнения (13) соответствуют продольной и второй поперечной моде

$$\begin{aligned} \psi_x^{L,i2} &= 1/2(1 + 3(k - 1)n_x^2) \\ &\pm \sqrt{1/4(1 + 3(k - 1)n_x^2)^2 - 2k(k - 1)n_x^2(3n_x^2 - 1)}, \\ S_{i1} &= S_{i100}^t \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon_{i2}}, \quad \varepsilon_{i2} = \psi_x^{i2} - (k - 1)n_x^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Мода ε_{i2} в общем случае является смешанной поперечно-продольной. Отметим, что мода ε_{i2} является медленной для кубических кристаллов типа I (и быстрой для кристаллов типа II) в областях углов $-\theta_{111} < \theta < \theta_{111}$ и $\pi - \theta_{111} < \theta < \pi + \theta_{111}$, а в областях углов $\theta_{111} < \theta < \pi - \theta_{111}$ и $\pi + \theta_{111} < \theta < 2\pi - \theta_{111}$ она является быстрой для кубических кристаллов типа I (и медленной для кристаллов типа II) (рис. 1). Таким образом, в направлении [111] происходит не касание верхней и нижней поперечных ветвей, а пересечение поперечных мод. Итак, разделение поперечных мод на быстрые и медленные в этом случае не является физически корректным, и при классификации поперечных мод необходимо учитывать их векторы поляризации. Вектор поляризации для моды ε_{i2} лежит в диагональной

плоскости и имеет вид

$$e_x^{i2} = e_y^{i2} = \frac{n_x \psi_z \operatorname{sign}(n_z \psi_z)}{\psi^2},$$

$$e_z^{i2} = \frac{n_z \psi_x \operatorname{sign}(n_z \psi_z)}{\psi^2} = -\sqrt{1 - 2(e_x^{i2})^2},$$

$$\psi_x = \psi_y = \varepsilon_{i2} + (k - 1)n_x^2,$$

$$\psi_z = \varepsilon_{i2} + (k - 1)n_z^2, \quad \psi_2 = \sqrt{2n_x^2 \psi_z^2 + n_z^2 \psi_x^2},$$

$$(\mathbf{e}^{i2} \mathbf{n}) = \delta_{i2} = \frac{(2n_x^2 \psi_z + n_z^2 \psi_x)}{\psi_2} \operatorname{sign}(n_z \psi_z)$$

$$= \cos(\theta_e - \theta). \quad (17)$$

Максимальное значение продольной компоненты этой моды δ_{i2} составляет 16.5% для кристаллов Ge и достигает 27% для кристалла KCl (рис. 2). Поскольку анизотропия упругих свойств кубических кристаллов убывает при переходе от кристаллов Ge к кристаллам Si, алмаза и GaAs, максимальные значения δ_{i2} уменьшаются до 13.8% для Si, 9.3% для алмаза, 10.4% для NaCl и 5.5% для GaAs.

Из рис. 3, *b* видно, что величины x -компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{i2} квазиперечных мод в кристаллах Ge и KCl и соответствующих им компонент для чистой моды $\mathbf{e}_0^{i2} = (\cos \theta / \sqrt{2}, \cos \theta / \sqrt{2}, -\sin \theta)$, для которой величина $(\mathbf{e}_0^{i2} \mathbf{n}) = 0$ для обоих видов кристаллов, различаются более значительно, чем величины δ_{i2} . Из выражений (17) следует, что z -компоненты векторов поляризации \mathbf{e}^{i2} могут быть однозначно определены через x -компоненты. Поэтому мы их не приводим. Как видно из рис. 2 и 3 (кривые 1) для кристаллов типа I в области углов $0 < \theta < \pi/4$ угол θ_{i2} превосходит $\pi/2$, и величина $\delta_{i2} < 0$, а для области углов $\pi/4 < \theta < \pi/2$ угол θ_{i2} меньше $\pi/2$, и величина $\delta_{i2} > 0$. Для кристаллов типа II ситуация со знаками величины δ_{i2} обратная (кривые 2 на рис. 2, 3). Итак, поведение векторов поляризации в кристаллах типа I и II существенно различается.

Проведенный анализ показал, что для волновых векторов, лежащих в плоскостях с углом $\varphi \neq 0, \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$, обе квазиперечные моды являются смешанными поперечно-продольными модами с точкой вырождения в направлении [001]. Они могут быть классифицированы как быстрые и медленные моды, поскольку $S_{i1}(\theta, \varphi) \geq S_{i2}(\theta, \varphi)$. Их векторы поляризации \mathbf{e}^{i1} и \mathbf{e}^{i2} в значительной степени отличаются от векторов поляризации чистых мод $\mathbf{e}_0^{i1} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$ (перпендикулярного плоскости $\varphi = \text{const}$) и $\mathbf{e}_0^{i2} = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta)$ (лежащего в плоскости $\varphi = \text{const}$). Как видно из рис. 4, вектор поляризации быстрой квазиперечной моды \mathbf{e}^{i1} при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору \mathbf{e}_0^{i1} , т.е. к направлению, перпендикулярному плоскости $\varphi = \text{const}$, а при увеличении угла θ он отклоняется от вектора \mathbf{e}_0^{i1} и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору \mathbf{e}_0^{i2} , т.е. переходит в плоскость

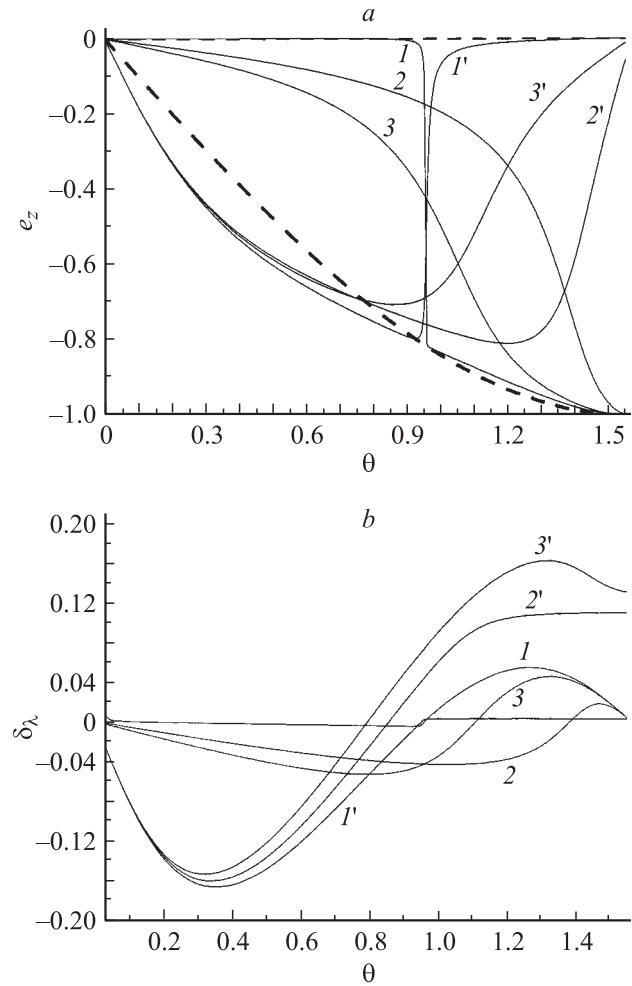


Рис. 4. Угловые зависимости z -компоненты векторов поляризации \mathbf{e}^{i1} и \mathbf{e}^{i2} (*a*) и величин δ_{i1} и δ_{i2} (*b*) для квазиперечных мод в кристаллах германия. 1–3 — для быстрой моды (ε_{i1}), 1'–3' — для медленной моды (ε_{i2}). 1, 1' — для угла $\varphi = \pi/4$, 2, 2' — для угла $\varphi = \pi/16$, 3, 3' — для угла $\varphi = \pi/6$. Штриховые линии — для чистых поперечных мод.

$\varphi = \text{const}$ (рис. 4, *a*). С другой стороны, вектор поляризации медленной моды \mathbf{e}^{i2} при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору \mathbf{e}_0^{i2} , лежащему в плоскости $\varphi = \text{const}$, а при увеличении угла θ он выходит из этой плоскости и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору \mathbf{e}_0^{i1} , т.е. к направлению, перпендикулярному плоскости $\varphi = \text{const}$. Чем ближе угол φ к значению $\pi/4$, тем более резко изменяются угловые зависимости компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{i1} и \mathbf{e}^{i2} в окрестности угла $\theta = \theta_{111}$ (рис. 4, *a*). Максимальные значения продольных компонент квазиперечных мод δ_{i1} и δ_{i2} не превышают 17% для кристаллов Ge и 27% для KCl. Однако величины и угловые зависимости компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{i1} и \mathbf{e}^{i2} квазиперечных мод и соответствующих им чистых мод \mathbf{e}_0^{i1} и \mathbf{e}_0^{i2} различаются более значительно. Заметим, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в этом случае также мал, им можно пренебречь.

Отметим интересное следствие полученных результатов. Поскольку электрон-фононное взаимодействие в металлах и полупроводниках пропорционально скалярному произведению $(\mathbf{e}^A \mathbf{q})$, из-за наличия продольной компоненты в квазипоперечных колебаниях импульс электронов может „релаксировать“ на этих колебаниях. С другой стороны, квазипоперечные моды могут передавать свой импульс электронам и усиливать эффект электрон-фононного увлечения в таких полупроводниковых кристаллах, как Ge, Si, GaSb и InSb.

Итак, основные результаты настоящей работы могут быть сформулированы следующим образом.

1) Все кубические кристаллы могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной и отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка. Вид спектра и поведение векторов поляризации колебательных мод для кристаллов этих типов качественно различаются.

2) Вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания для кубических кристаллов обоих типов мал, и им можно пренебречь.

3) При классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию, а принятое в работах [1,2] разделение поперечных мод на быстрые и медленные в ряде случаев не является физически корректным.

4) Для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба или диагональной плоскости, поперечные моды с векторами поляризации, перпендикулярными этим плоскостям, являются чистыми модами, а колебательные моды с векторами поляризации, лежащими в указанных плоскостях, являются смешанными поперечно-продольными модами. Для квазипоперечных мод продольная компонента не является малой: ее максимальное значение составляет 16.5% в случае Ge и достигает 27% в случае KCl.

Таким образом, при расчете частот релаксации фононов и затухания ультразвука в кубических кристаллах для направлений, отличающихся от симметричных, необходимо учитывать продольную составляющую поперечно-продольных мод. Полученные результаты будут использованы при расчете поглощения ультразвука и фононного транспорта в кубических кристаллах.

Авторы выражают благодарность А.П. Танкееву и А.В. Инюшкину за обсуждение результатов работы и критические замечания.

Список литературы

- [1] B. Truel, C. Elbaum, B.B. Chick. Ultrasonic methods in solid state physics. Academic Press, N. Y.–London (1969).
- [2] Дж. Такер, В. Рэмптон. Гиперзвук в физике твердого тела. Мир, М. (1975).
- [3] В.Л. Гуревич. Кинетика фононных систем. Наука, М. (1980).
- [4] H.J. Maris. Phys. Acoustics VII, 280 (1971).
- [5] Б.М. Могилевский, А.Ф. Чудновский. Теплопроводность полупроводников. Наука, М. (1972).
- [6] Р. Берман. Теплопроводность твердых тел. Мир, М. (1979).
- [7] В.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. Наука, М. (1985).
- [8] M. Asen-Palmer, K. Bartkowski, E. Gmelin, M. Cardona, A.P. Zhernov, A.V. Inyushkin, A.N. Taldenkov, V.I. Ozhogin, K.M. Itoh, E.E. Haller. Phys. Rev. B **56**, 9431 (1997).
- [9] А.П. Жернов, А.В. Инюшкин. Изотопические эффекты в твердых телах. РИЦ „Курчатовский институт“, М. (2001).
- [10] А.П. Жернов, А.В. Инюшкин. УФН **171**, 827 (2001); **172**, 573 (2002).
- [11] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, А.В. Инюшкин, В.И. Ожогин. ЖЭТФ **128**, 370 (2005).
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987).
- [13] Ф.И. Федоров. Теория упругих волн в кристаллах. Наука, М. (1965).
- [14] M.J.P. Musgrave. Proc. Roy. Soc. A **226**, 339 (1954).
- [15] G. Miller, M.J.P. Musgrave. Proc. Roy. Soc. A **236**, 352 (1956).
- [16] И.Я. Коренблит. ФТП **2**, 1425 (1968).
- [17] А.Г. Самойлович, В.Д. Искра. ФТТ **2**, 327 (1960).
- [18] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ЖЭТФ **126**, 129 (2004); ФТТ **47**, 300 (2005).
- [19] S. Simons. Proc. Cambridge Phil. Soc. **53**, 702 (1957).
- [20] C. Herring. Phys. Rev. **95**, 954 (1954).
- [21] И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Наук. думка, Киев (1982).