ЖЭТФ, 2001, том 119, вып. 2, стр. 374–387

ЛОКАЛЬНАЯ ГЕОМЕТРИЯ ИЗОЧАСТОТНОЙ ФОНОННОЙ ПОВЕРХНОСТИ И СТРУКТУРА СПЕКТРА ОБОБЩЕННЫХ ВОЛН ЛЭМБА В ОГРАНИЧЕННОМ СЕГНЕТОЭЛАСТИКЕ

С. В. Тарасенко[*]

Донецкий физико-технический институт им А. А. Галкина
Национальной академии наук Украины
340114, Донецк, Украина

Поступила в редакцию 22 августа 2000 г.

На примере пластины одноосного сегнетоэластика, испытывающего собственно сегнетоэластический фазовый переход из параэлектрической фазы в сегнетоэлектрическую, изучены особенности спектра объемных поляризованных в сагиттальной плоскости акустических фононов, индуцированные аномалиями отражения этого типа нормальных упругих колебаний на границе кристалла.

PACS: 62.30.+d, 68.60.Bs

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее интригующих особенностей взаимодействия упругой волны, поляризованной в плоскости падения, с поверхностью кристаллического тела является возможность одновременного возбуждения при определенных условиях четырех нормальных упругих колебаний, обладающих одними и теми же частотой возбуждения ω и проекцией волнового вектора $\mathbf{k}$ на поверхность кристалла [1]. При этом две из этих волн принадлежат спектру квазипоперечной волны, поляризованной в плоскости падения (эффект акустического двулучепреломления без изменения ветви).

Теория этого явления на примере кубического кристалла была развита в работе [2], из которой, в частности, следует, что если среда, в которой распространяются фононы, обладает упругой анизотропией, то характер отражения и преломления нормальной упругой волны на границе кристалла, поляризованной в плоскости падения, однозначно связан с формой поверхности обратных фазовых скоростей. Так, если сечение такой изочастотной поверхности плоскостью падения волны является выпуклой кривой, то характер отражения (преломления) как квазипродольной, так и квазипоперечной упругой волны от границы кристалла качественно не отличается от случая упругоизотропной среды. Если же анизотропия упругих свойств достаточно высока, для того чтобы на сечении изочастотной поверхности квазипоперечной упругой волны было возможно формирование участков с отрицательной гауссовой кривизной (поверхность волновых векторов квазипродольной волны всегда выпукла), то в этом случае возможно возникновение эффекта двулучеотражения (двулучепреломления): формирование двух одинаково поляризованных в плоскости падения квазипоперечных упругих волн, обладающих одной и той же частотой и проекцией волнового вектора на плоскость границы раздела сред, но имеющих разные значения проекции волнового вектора на направление нормали к границе раздела сред.

Аналогичный эффект, как известно, может быть реализован и в пьезокристаллах определенной симметрии для поперечной упругой волны, поляризованной перпендикулярно плоскости падения. Сравнение обоих случаев показывает, что необходимым условием формирования таких аномалий на поверхности волновых векторов квазипоперечной упругой волны является наличие сопутствующего поверхностного квазипродольного упругого колебания, которое не относится к числу собственных колебаний системы, а формируется лишь в присутствии падающей на поверхность кристалла объемной упругой

[*]E-mail: tarasen@host.dipt.donetsk.ua

квазипоперечной волны. В случае пьезокристаллов формирование эффекта двулучеотражения (двулучепреломления) без изменения ветви для сдвиговой упругой SH-волны связано с наличием сопутствующего поверхностного колебания электростатического или магнитостатического типа. Во всех случаях учет сопутствующего поверхностного колебания является принципиально важным для анализа характера взаимодействия акустической волны с поверхностью кристалла. Присутствие поверхностного колебания делает возможным на кривой, представляющей собой результат сечения поверхности рефракции сагиттальной плоскостью, появление как параболических точек (участков с нулевой кривизной), так и вогнутых участков (т. е. обладающих отрицательной гауссовой кривизной). С точки зрения отражения (преломления) объемной упругой волны на границе кристалла наличие такого участка может, в частности, привести к исчезновению сопутствующего поверхностного колебания и к формированию, наряду с нормальной отраженной волной, дополнительной объемной упругой волны той же поляризации (эффект многолучевого отражения волн без изменения ветви) [2].

Естественно, что локальная геометрия поверхности волновых векторов рассматриваемого типа нормальных объемных колебаний неограниченного кристалла должна проявляться и в структуре спектра этого типа нормальных объемных колебаний в ограниченном кристалле, поскольку пространственное распределение амплитуды объемных колебаний является результатом интерференции падающих и отраженных от границ образца объемных волн.

Однако условия, необходимые для практической реализации указанного эффекта (формирования на поверхности волновых векторов нормальной упругой волны участка с отрицательной гауссовой кривизной), накладывают достаточно жесткие ограничения на относительную величину упругих взаимодействий в кристалле, и потому их выполнения можно ожидать прежде всего вблизи неизоморфных структурных фазовых переходов типа мягкой моды.

Существует, как известно [3], обширный класс непрерывных структурных фазовых переходов, связанных с таким изменением симметрии кристалла, при котором в качестве параметра порядка может быть выбрана одна из недиагональных (сдвиговых) компонент тензора упругих деформаций u_{ik}. В модели бесконечного кристалла это приводит к возможности резкого замедления (смягчения) вблизи границы устойчивости данного кристаллического состояния фазовой скорости сдвиговой волны при условии, что ее волновое число мало отличается от нуля, а поляризация и направление распространения определенным образом связаны с симметрийными свойствами параметра порядка [4–6]. В окрестности сдвигового структурного фазового перехода для образца конечных размеров эффекты интерференции такой смягчающей акустической волны, многократно отраженной от поверхности образца, приводят к существенной модификации спектра соответствующих типов как поверхностных, так и объемных упругих мод [7–9]. Аналогичные особенности в фононной динамике ограниченного кристалла могут иметь место и при фазовом переходе в поляризованных средах в том случае, если он является собственным ферроэластическим, т. е. для него многокомпонентный (в общем случае) параметр порядка преобразуется по одному и тому же представлению, что и некоторая (в общем случае) линейная комбинация компонент тензора деформации u_{ik} [8, 10, 11]. Детальное исследование основных аномалий, возникающих в фононном спектре вблизи границы устойчивости данного кристаллического состояния, имеет не только академический, но и практический интерес, поскольку, во-первых, позволяет исследовать критическую динамику кристалла хорошо развитыми методами акустической и оптической спектроскопии, а во-вторых, существует целый ряд кристаллов, в которых аналогичная структура фононного спектра может формироваться уже вдали от области структурного фазового перехода в силу резко анизотропного характера межмолекулярных взаимодействий среды (квазинизкоразмерные кристаллы) либо в силу искусственно созданной дополнительной трансляционной симметрии (сверхрешетки и т. д.).

Особый интерес имеет анализ перестройки вблизи непрерывного структурного сдвигового перехода той части фононных колебаний, для которых вектор смещений $\mathbf{u}$ решетки поляризации лежит в сагиттальной плоскости кристалла. В случае, когда образец представляет собой механически свободную пластину, эти волны называются волнами Лэмба, а если такая пластина входит в состав акустически сплошной структуры типа «слой + полупространство» или «полупространство + слой + полупространство», то такие волны называются обобщенными волнами Лэмба [1].

Подавляющее число работ, посвященных анализу влияния анизотропии упругих модулей на дисперсионные свойства и условия распространения волн Лэмба, связано с изучением волны Рэлея в полуограниченном кристалле, что с точки зрения упругих колебаний пластины соответствует, как известно, коротковолновому приближению для спектра поверхностных лэмбовских волн, который, как показано в [12, 13], состоит из двух ветвей. Основные эффекты, найденные в рамках этой модели и связанные с влиянием упругой анизотропии на структуру спектра поверхностной волны Рэлея, сводятся к следующему (считаем, что распространяющаяся упругая волна не является дипольно-активной, т. е. не сопровождается магнито- или электростатическим полем)[1]:

1) замедляется фазовая скорость [14];

2) поляризация стремится к поперечной [14];

3) растет глубина проникновения волны (снижается степень локализации волны вблизи поверхности кристалла) [14];

4) возможен плавный переход от обобщенной волны Рэлея к поверхностной [7, 8];

5) имеется взаимнооднозначная связь между параметрами поверхностной волны Рэлея и структурой поверхности обратных фазовых скоростей соответствующего типа нормальных упругих волн в неограниченном кристалле [7, 8].

Что же касается анализа влияния упругой анизотропии на характер спектра волн Лэмба в пластине в длинноволновом пределе, то к числу основных результатов, полученных в этом направлении, следует отнести (недипольно-активные волны) следующие выводы:

1) все моды, принадлежащие спектру квазипоперечных волн Лэмба, в окрестности непрерывного сдвигового структурного фазового перехода замедляются [7, 11];

2) для заданной величины волнового числа и отношения упругих модулей в механически свободной пластине возможно распространение одной или двух поверхностных волн Лэмба;

3) дисперсионная кривая для симметричной поверхностной волны Лэмба при уменьшении волнового числа $k_\perp$ может плавно переходить при $k_\perp \neq 0$ в дисперсионную кривую объемной продольной лэмбовской волны с $\nu = 1$;

4) возможно формирование при некотором $k_\perp \neq 0$ точки вырождения лэмбовской волны и поперечной упругой волны SH-типа.

Однако до сих пор

1) рассматривались в основном только низшие моды лэмбовского спектра (продольная и изгибная) анизотропной пластины;

2) игнорировались эффекты, связанные с влиянием пространственной дисперсии, которые, как известно, самым существенным образом могут влиять на критическую динамику параметра порядка при фазовых переходах типа мягкой моды (одним из примеров которых как раз и является обсуждаемый класс непрерывных сдвиговых структурных фазовых переходов);

3) рассматривался только случай анизотропных пластин с механическими свободными граничными условиями несмотря на то, что анализ особенностей перестройки спектра обобщенных волн Лэмба представляет несомненный интерес в связи с бурно развивающейся физикой композитных материалов;

4) не исследовалась связь между структурой спектра объемных лэмбовских волн и особенностями отражения на границе образца нормальных упругих волн, поляризованных в плоскости падения; в то же время этот тип упругих колебаний анизотропной пластины является результатом интерференции квазипоперечных и квазипродольных фононов, которые, многократно отражаясь от границ пластины, могут трансформироваться друг в друга, причем обе компоненты вектора смещений решетки $\mathbf{u}$ лежат в плоскости падения волны и имеют многопарциальную структуру.

Дополнительным аргументом в пользу того, что конфигурация поверхности рефракции должна существенно влиять на структуру спектра объемных упругих колебаний, является также и тот факт, что, как показано в работах [7, 8], наличие на поверхности участка с отрицательной гауссовой кривизной является достаточным условием формирования для механически свободной поверхности полуограниченного гексагонального кристалла обобщенной волны Рэлея. В то же время в [12, 13] показано, что для пластины этого кристалла закон дисперсии симметричной ветви спектра рэлеевских поверхностных (в коротковолновом пределе) волн по мере уменьшения волнового числа $k_\perp$ при $k_\perp \neq 0$ плавно переходит в дисперсионную кривую для объемной продольной волны Лэмба.

До сих пор, однако, связь локальной геометрии изочастотной поверхности нормальных упругих колебаний неограниченного кристалла со структурой спектра лэмбовских фононов пластины кристалла, испытывающего непрерывный сдвиговый структурный фазовый переход, не исследовалась.

В связи со сказанным выше цель данной работы состоит в определении связи между конфигура-

[1] Это может иметь место не только в неполярных средах, но также, например, и для однокомпонентных дипольно-активных сегнетоэластических фазовых переходов при определенной ориентации плоскости распространения упругой волны.

цией поверхности волновых векторов нормальных упругих колебаний, поляризованных в плоскости падения в неограниченном кристалле, и аномалиями спектра объемных лэмбовских фононов на примере однокомпонентного собственного сегнетоэластического фазового перехода в пластине сегнетоэлектрика, не имеющего центра симметрии (т. е. обладающего пьезоэлектрическим эффектом) в параэлектрической фазе [3]. Работа построена следующим образом. Во втором разделе приведены основные соотношения и дана постановка краевой сегнетоупругой задачи. Анализ (без учета влияния пространственной дисперсии) структуры спектра объемных акустических колебаний, поляризованных в сагиттальной плоскости кристаллической сегнетоэлектрической пленки, испытывающей структурный фазовый переход, содержится в третьем разделе. Результаты анализа формы сечения изочастотной поверхности нормальных упругих колебаний рассматриваемого сегнетоэластика сагиттальной плоскостью и ее связи с найденными аномалиями фононного спектра представлены в четвертом разделе. В пятом разделе рассмотрены особенности спектра обобщенных волн Лэмба, индуцированные наличием ромбической анизотропии в сагиттальной плоскости. Дополнительные аномалии фононного спектра, связанные с необходимостью учета в окрестности фазового перехода корреляционных эффектов в сегнетоэлектрической подсистеме кристалла (пространственной дисперсии), рассмотрены в шестом разделе. В Заключении приведены основные выводы, следующие из полученных результатов.

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

В качестве примера однокомпонентного сегнетоэластического фазового перехода рассмотрим, следуя [4], переход из параэлектрического в сегнетоэлектрическое состояние, имеющий место, например, в кристаллах KDP при $T \to T_K$ (T_K — температура Кюри). Структура соответствующего термодинамического потенциала может быть представлена в виде [3, 14]

$$W = \frac{\delta}{2}(\nabla P_z)^2 + \frac{b}{2}P_z^2 + \gamma P_z u_{xy} + \frac{1}{2}c_{11}(u_{xx}^2 + u_{yy}^2) + \\ + \frac{1}{2}c_{33}u_{zz}^2 + c_{12}u_{xx}u_{yy} + \\ + c_{13}(u_{xx}u_{zz} + u_{zz}u_{yy}) + 2c_{44}(u_{zx}^2 + u_{zy}^2) + 2c_{66}u_{xy}^2. \quad (1)$$

Здесь $\delta, b > 0$ и γ — константы, характеризующие соответственно пространственную дисперсию, анизотропию и пьезоэлектрическое взаимодействие, c_{ik} — константы упругого взаимодействия.

В данной работе нас интересует недипольно-активная динамика рассматриваемой модели сегнетоэлектрического кристалла. Поэтому, как следует из (1), необходимо, чтобы $\mathbf{k} \in xy$ ($k_z = 0$). В этом случае соответствующая замкнутая система уравнений, связывающая между собой только вектор поляризации P_z и вектор упругих смещений решетки $\mathbf{u}$ (ρ — плотность) [15], имеет вид

$$\frac{\delta W}{\delta P_z} = f\frac{\partial^2 P_z}{\partial t^2}, \quad \rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial u_{ik}}. \quad (2)$$

В случае ограниченной сегнетоэлектрической пластины система динамических уравнений (2) должна быть дополнена необходимыми краевыми условиями. В качестве граничного условия для вектора поляризации $\mathbf{P}$ выберем соотношение [15]

$$\delta\frac{\partial P_z}{\partial \zeta} + aP_z = 0, \quad \zeta = \pm d, \quad (3)$$

отвечающее частичному ($a \neq 0$) пиннингу вектора поляризации на обеих поверхностях рассматриваемой сегнетоэлектрической пленки. Что же касается упругих граничных условий, то всюду в дальнейшем будем полагать, что на обеих поверхностях пластины имеют место соотношения, отвечающие границе с тангенциальным проскальзыванием ($\hat{\varepsilon}$ — единичный антисимметричный тензор) [1]:

$$\varepsilon_{ijk}\frac{\partial W}{\partial u_{ik}}n_k n_l = 0, \quad \mathbf{u}\cdot\mathbf{n} = 0. \quad (4)$$

Как известно, именно этот тип граничных условий реализуется на границе раздела двух твердых тел при условии их полностью некогерентного сопряжения [16]. При этом в (4) предполагается, что граничащая с пластиной упругая среда вдоль нормали к границе раздела сред может быть рассмотрена как абсолютно жесткая ($\mathbf{u}\cdot\mathbf{n} = 0$). Таким образом в данной работе рассматривается слоистая структура типа «полупространство + слой + полупространство».

Вычисления показывают, что для исследуемой модели неограниченного сегнетоэлектрика спектр связанных сегнетоупругих колебаний с $\mathbf{u}, \mathbf{k} \perp [001]$ и $P_z \neq 0$ в параэлектрической тетрагональной фазе можно представить в виде ($\hat{\Lambda}$ — тензор Кристоффеля)

$$(\Lambda_{11} - \omega^2)(\Lambda_{22} - \omega^2) = \Lambda_{12}^2. \quad (5)$$

При выводе соотношения (5) считалось, что в соответствующих компонентах тензора Кристоффеля упругий модуль c_{66} умножается на параметр

$$\theta = \frac{\omega_0^2 + c^2k^2 - \omega^2}{\omega_0^2 + \omega_{pe}^2 + c^2k^2 - \omega^2}.$$

Здесь ω_{pe} — сегнетоупругая щель, ω_0 — активация спектра поляризационных колебаний, обусловленная одноосной анизотропией b, $c^2 = \delta/f$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. Несложно показать, что в пренебрежении пьезоэлектрическим взаимодействием, $\gamma \to 0$, уравнения (5) факторизуются и полученные дисперсионные соотношения описывают два физически различных набора собственных колебаний рассматриваемой динамической системы, каждый из которых соответственно описывает как спектр фононов в неполярном тетрагональном или кубическом кристалле, поляризованных в плоскости падения, так и спектр объемных колебаний z-компоненты вектора электрической поляризации $\mathbf{P}$ без учета влияния решетки. При $\gamma \neq 0$ соотношение (5) позволяет определить связь нормальной к поверхности пленки ($\mathbf{n} \perp [001]$) компоненты волнового вектора с частотой ω и волновым числом $k_\perp$ распространяющейся объемной эластоупругой волны, т. е. представляет собой характеристическое уравнение для решения краевой задачи при $\mathbf{n}, \mathbf{u}, \mathbf{k} \in xy$. В результате из соотношения (5) следует, что как при $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и при $\mathbf{n} \parallel [110]$ структура нормальной к $\mathbf{n}$ компоненты вектора упругих смещений решетки $\mathbf{u}$ может быть представлена в виде (τ — текущая координата вдоль направления распространения волны $\boldsymbol{\tau} \perp \mathbf{n}$; $q^2 \equiv -(\mathbf{k}\cdot\mathbf{n})^2$)

$$u = \sum_{\nu=1}^{3} A_\nu \exp(-q_\nu \zeta) \exp(i\omega t - ik_\perp \tau). \tag{6}$$

Пользуясь (5) и (6), можно провести классификацию возможных типов распространяющихся упругих волн в зависимости от характера их локализации вблизи поверхности магнетика ($\zeta \geq 0$), определяемой $q_{1,2}$. Чтобы упростить дальнейший расчет, введем ряд упрощающих предположений, отвечающих целям нашей работы.

1) Поскольку, как известно, смягчение акустической поверхностной волны происходит в длинноволновой области спектра сегнетоупругих колебаний, мы в дальнейшем будем считать, что частота и волновое число рассматриваемых фононов таковы, что с хорошей степенью точности выполнено соотношение (динамику поляризационной подсистемы кристалла будем рассматривать в квазистатическом пределе)

$$\omega^2 \ll \omega_{pe}^2 + \omega_0^2. \tag{7}$$

Это приводит к тому, что краевая задача для z-компоненты вектора электрической поляризации $\mathbf{P}$ принимает вид

$$\begin{gathered} c^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2} + \frac{\partial^2}{\partial\tau^2}\right) P_z - (\omega_0^2 + \omega_{pe}^2) P_z = \gamma f^{-1} u_{xy}, \\ \delta\frac{\partial P_z}{\partial\zeta} + aP_z = 0, \quad \zeta = \pm d. \end{gathered} \tag{8}$$

Если воспользоваться аппаратом уравнений Фредгольма, то с помощью функции Грина $G(\zeta, t)$ [17] вида

$$\begin{gathered} G(t,\zeta) = \\ = \begin{cases} \Delta^{-1}\,\mathrm{sh}\,(p(t-\zeta_-))\,\mathrm{sh}\,(p(t-\zeta_+))\,, \\ \qquad -d \leq \zeta < t, \\ \Delta^{-1}\,\mathrm{sh}\,(p(t-\zeta_+))\,\mathrm{sh}\,(p(t-\zeta_-))\,, \\ \qquad t \leq \zeta < d, \end{cases} \\ \Delta \equiv p\,\mathrm{sh}\,(p(\zeta_- - \zeta_+))\,, \quad p^2 \equiv \omega_0^2 + \omega_{pe}^2 + c^2 k_\perp^2, \\ a\delta^{-1} \equiv p\,\mathrm{cth}\,(p(\zeta_+ - d))\,, \\ a\delta^{-1} = p\,\mathrm{cth}\,(p(\zeta_- + d))\,, \end{gathered} \tag{9}$$

как при $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и при $\mathbf{n} \parallel [110]$ можно исключить $\mathbf{P}_z$ из уравнений для вектора смещений решетки $\mathbf{u}$. В результате рассматриваемая краевая задача сводится к анализу только упругой краевой задачи для компонент вектора $\mathbf{u}$.

2) Поскольку из анализа условий отражения (преломления) упругих волн, поляризованных в плоскости падения, известно, что изменение локальной кривизны поверхности обратных фазовых скоростей возможно только для квазипоперечной ветви спектра нормальных упругих колебаний неограниченного кристалла, мы будем считать, что скорости квазипродольной s_l и квазипоперечной s_t акустических волн связаны условием

$$s_t/s_l \ll 1, \tag{10}$$

и в дальнейшем ограничимся анализом особенностей фононного спектра сегнетоэлектрической пластины с участием только поляризованной в плоскости падения квазипоперечной ветви спектра нормальных упругих колебаний фононов ($\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2$, $\mathrm{tg}\,\vartheta = k_x/k_y$). Таким образом, соответствующее дисперсионное уравнение для спектра квазипоперечных фононов с $\mathbf{u} \in xy$ в неограниченном кристалле можно представить в виде ($\eta \equiv 2c_{66}\theta/(c_{11} - c_{12})$, $\xi \equiv c_{66}\theta/c_{11}$, $s_0^2 = c_{66}\theta/\rho$ при $\mathbf{n} \parallel [100]$)

$$\omega^2 \approx s_0^2 k^2 \left(1 + r\sin^2 2\vartheta\right), \quad r \equiv \frac{(1-\eta)(\eta-\xi)}{\eta^2}. \tag{11}$$

Из (1), (2) и (6) с учетом сделанных приближений следует, что в области частот (11) как при $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и при $\mathbf{n} \parallel [110]$ в зависимости от величины и знака параметров η и r возможны следующие типы распространяющихся нормальных упругих колебаний ($c \to 0$).

I. Объемные волны первого типа ($q_1^2 > 0; q_2^2 < 0$):

$$\begin{aligned} &\omega^2 > s_0^2 k_\perp^2, \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ &\omega^2 > s_0^2(1+r)k_\perp^2, \quad \mathbf{n} \parallel [110]. \end{aligned} \tag{12}$$

II. Обобщенные поверхностные волны ($q_1^2 = (q_2^2)^*$):

$$\begin{aligned} &\omega^2 < \omega_+^2 \equiv 4 s_t^2 k_\perp^2 \left[r^{1/2}(1+r)^{1/2} - r \right], \quad r > 0, \quad \mathbf{n} \parallel [110], \\ &\omega^2 < \omega_+^2 \equiv 4 s_t^2 k_\perp^2 \left[|r|^{1/2} - |r| \right], \quad r < 0, \quad \mathbf{n} \parallel [100]. \end{aligned} \tag{13}$$

III. Поверхностные волны ($q_{1,2}^2 > 0$):

$$\begin{aligned} &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2 k_\perp^2, \quad r < 0, \quad |r| < 1/4, \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2(1+r)k_\perp^2, \quad 0 < r < 1/3, \quad \mathbf{n} \parallel [110]. \end{aligned} \tag{14}$$

IV. Объемные волны второго типа ($q_{1,2}^2 < 0$):

$$\begin{aligned} &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2 k_\perp^2, \quad |r| > 1/4, \quad r < 0, \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2(1+r)k_\perp^2, \quad r > 1/3, \quad \mathbf{n} \parallel [110]. \end{aligned} \tag{15}$$

Если же $r > 0$ при $\mathbf{n} \parallel [100]$ или $r < 0$ при $\mathbf{n} \parallel [110]$, то, как показывает анализ, все найденные выше соотношения остаются в силе за исключением того, что теперь в них надо считать, что $\omega_+^2 \equiv 0$ при любом $k_\perp$, т. е. формирование обобщенных поверхностных волн как при $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и при $\mathbf{n} \parallel [110]$ для $\mathbf{k} \in xy$ невозможно. Таким образом, для распространения вдоль исследуемой сегнетоэлектрической пластины объемных фононов, отвечающих квазипоперечной ветви спектра нормальных упругих волн, необходимо, чтобы их частота ω и волновое число $k_\perp$ лежали в области I или IV. В этом случае бегущая вдоль пленки трехпарциальная упругая волна рассматриваемой поляризации будет иметь по крайней мере одну объемную компоненту.

Многократное отражение фононов этого типа от границы пластины приводит в результате интерференции к формированию нормальных упругих мод, поляризованных в сагиттальной плоскости исследуемой сегнетоэлектрической пленки (волн Лэмба). В следующем разделе рассмотрим основные особенности фононного спектра пластины одноосного сегнетоэлектрика в параэлектрической фазе, испытывающего однокомпонентный сегнетоэластический фазовый переход $42m \to mm2$, без учета корреляционных эффектов (т. е. считаем, что $\delta \to 0$, а $\theta = \omega_0^2/(\omega_0^2 + \omega_{pe}^2)$).

3. СЛУЧАЙ УПРУГИХ КОЛЕБАНИЙ, ПОЛЯРИЗОВАННЫХ В САГИТТАЛЬНОЙ ПЛОСКОСТИ

Из краевой задачи (4) следует, что спектр объемных сегнетоупругих колебаний с $\mathbf{k} \in xy$ ($\mathbf{u} \perp [001]$) в этом случае может быть представлен в виде (Λ_{ik} — тензор Кристоффеля, $\mathbf{n} \parallel [100]$, $m_\nu = \pi\nu/2d$, $\nu = 1, 2, \ldots$)

$$\Omega_\nu^2(k_\perp) = \frac{N_1}{2} \pm \left(\left(\frac{N_1}{2} \right)^2 - N_2 \right)^{1/2}, \tag{16}$$

$$N_1(k_\perp) = \Lambda_{11}^* + \Lambda_{22}^*,$$

$$N_2(k_\perp) = \Lambda_{11}^* \Lambda_{22}^* - (\Lambda_{12}^*)^2,$$

$$\Lambda_{ik}^* \equiv \Lambda_{ik}, \quad k_x = m_\nu, \quad k_y = k_\perp, \quad k_z = 0.$$

Поскольку соответствующее характеристическое уравнение (4) является биквадратным относительно $\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}$, в дальнейшем для упрощения аналитических вычислений будем считать выполненными условия

$$c_{11}, c_{12} \gg c_{66}. \tag{17}$$

В этом пределе соотношения (11) и (16) соответственно можно представить в следующем виде [2] при $\mathbf{n} \parallel [110]$:

$$\begin{aligned} &\omega^2 \approx s_0^2 k^2 (1 + r\cos^2 2\vartheta), \\ &\Omega_\nu^2(k_\perp) \approx s_0^2 \left(k_\perp^2 + m_\nu^2 + r\frac{(k_\perp^2 - m_\nu^2)^2}{k_\perp^2 + m_\nu^2} \right), \end{aligned} \tag{18}$$

при $\mathbf{n} \parallel [100]$:

$$\begin{aligned} &\omega^2 \approx s_0^2 k^2 (1 + r\sin^2 2\vartheta), \\ &\Omega_\nu^2(k_\perp) \approx s_0^2 \left(k_\perp^2 + m_\nu^2 + 4r\frac{k_\perp^2 m_\nu^2}{k_\perp^2 + m_\nu^2} \right). \end{aligned} \tag{19}$$

Из анализа (18), (19) следует, что в кристалле с заданным соотношением упругих модулей (без учета пьезоэлектрического взаимодействия) форма дисперсионной кривой объемной моды с номером ν качественно меняется в зависимости от ориентации нормали $\mathbf{n}$ к поверхности пленки ($\mathbf{n} \parallel [100]$

или $\mathbf{n} \parallel [110]$) в плоскости распространения волны (001)). В частности, расчет показывает, что наиболее существенная трансформация фононного спектра (18), (19) имеет место в том случае, когда уже без учета пьезоэлектрического взаимодействия ($\gamma = 0$) для упругих модулей кристалла выполняется условие

$$\eta > 1, \quad r < 0 \tag{20}$$

(условие $\xi < 1$ выполнено всегда). В этом случае из анализа (18), (19) следует, что дисперсионные кривые, описывающие спектр объемных квазипоперечных упругих колебаний при $\mathbf{n} \parallel [110]$, независимо от номера моды ν и величины волнового числа $k_\perp$ при $|r| < 1/3$ относятся к волнам прямого типа ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp > 0$), при этом на них возможно формирование двух точек перегиба $k_{\nu 1,2} \neq 0$, которые являются действительными корнями уравнения

$$\partial\Omega_\nu^2/\partial k_\perp^2 = 0.$$

Однако по мере приближения к области сегнетоэластического фазового перехода начинается сближение точек перегиба дисперсионной кривой с фиксированным номером моды ν, которые сливаются при $\eta = 1$ ($r = 0$). По мере дальнейшего приближения к точке фазового перехода (роста $|r|$, $r > 0$) рассматриваемая дисперсионная кривая становится все более пологой до тех пор, пока при $r > 1/3$ на ней при $k_\perp = k_{*\nu}$,

$$k_{*\nu}^2 = m_\nu^2 \left[(4r/(1+r))^2 - 1\right], \tag{21}$$

не становится возможным формирование минимума. В результате при $k_\perp > k_{*\nu}$ соответствующий участок дисперсионной кривой (18) относится к волне прямого типа ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp > 0$), тогда как при $k_\perp < k_{*\nu}$ в рассматриваемой пленке имеет место распространение упругой волны обратного типа ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp < 0$). Кроме того, в случае $r > 1/3$ для мод спектра (18) с номерами ν и ρ становится возможным при $k_\perp = k_{\nu\rho} \neq 0$ формирование точки кроссовера (пересечения) соответствующих дисперсионных кривых:

$$\Omega_\nu(k_{\nu\rho}) = \Omega_\rho(k_{\nu\rho}).$$

Качественно иной характер носит трансформация спектра рассматриваемого типа объемных фононов в случае, когда условие $\eta > 1$ ($r < 0$) выполняется в пленке с нормалью $\mathbf{n} \parallel [100]$ (19). Анализ показывает, что, в отличие от рассмотренного выше случая $\mathbf{n} \parallel [110]$ (18), для данной геометрии распространения упругой волны длинноволновая асимптотика дисперсионной кривой моды с фиксированным номером ν даже при $k_\perp \to 0$ и вдали от области структурного фазового перехода может существенно зависеть от величины $|r|$. Так, формирование волны обратного типа ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp < 0$) независимо от номера моды ν имеет место, если $|r| > 1/4$, тогда как для $|r| < 1/4$ соответствующая дисперсионная кривая является волной прямого типа при любой величине волнового числа $k_\perp$. Что же касается формы дисперсионной кривой моды с номером ν в случае $|r| > 1/4$, то, как показывает расчет, для нее при $k_\perp = k_{*\nu}$,

$$k_{*\nu}^2 = m_\nu^2 \left(2|r|^{1/2} - 1\right), \tag{22}$$

формируется точка минимума, кроме того, для мод с номерами ν и ρ ($\nu \neq \rho$) возможно формирование при $k_\perp = k_{\nu\rho}^{\pm}$ точки вырождения дисперсионных кривых $\Omega_\nu(k_\perp)$ и $\Omega_\rho(k_\perp)$, принадлежащих спектру (19).

По мере приближения рассматриваемого кристалла к точке сегнетоэластического фазового перехода величина $|r|$ начинает убывать, оставаясь отрицательной ($r \to -1/4$, $r > -1/4$), вследствие чего, как следует из (19), волновые числа $k_{*\nu}$ и $k_{\nu\rho}$, отвечающие соответственно точке минимума на дисперсионной кривой с номером ν и точке вырождения дисперсионных кривых $\Omega_\nu(k_\perp)$ и $\Omega_\rho(k_\perp)$ спектра, будут уменьшаться по абсолютной величине. По мере дальнейшего приближения к точке рассматриваемого структурного сдвигового фазового перехода величина r будет все больше уменьшаться по модулю и уже для любых r из области $-1/4 < r$ все дисперсионные кривые, описываемые соотношениями (19) и принадлежащие спектру лэмбовских волн рассматриваемого типа, независимо от номера моды ν и волнового числа $k_\perp$ будут являться волнами прямого типа ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp > 0$), причем для любых номеров мод ν и ρ будет справедливо неравенство

$$\Omega_\nu(k_\perp) \neq \Omega_\rho(k_\perp).$$

Анализ соотношений (18), (19) показывает, что в окрестности непрерывного структурного сдвигового фазового перехода перестройка спектра исследуемого типа объемных фононов будет иметь место также и в случае, когда по своим упругим свойствам рассматриваемый кристалл при $\gamma = 0$ является упругоизотропной средой ($\eta = 1$ или $r = 0$). В этом случае, как следует из (18), (19), форма дисперсионных кривых мод, принадлежащих спектру акустических фононов данного типа, как при $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и при $\mathbf{n} \parallel [110]$, независимо от величины $k_\perp$ и номера моды ν определяется неравенствами $\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp > 0$ и

$\partial^2\Omega_\nu/\partial k_\perp^2 > 0$ (при $k_\perp \to 0$, $\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp \to 0$). Наличие в кристалле пьезоэлектрического взаимодействия (в (1) $\gamma \neq 0$) приводит к тому, что при приближении к области исследуемого сегнетоэластического фазового перехода ($T \to T_K$) трансформация спектра лэмбовских фононов рассматриваемого типа (18), (19) в зависимости от ориентации $\mathbf{n}$ в плоскости (001) будет различной. Так, при $\mathbf{n} \parallel [100]$ форма дисперсионной кривой моды $\Omega_\nu(k_\perp)$ с фиксированным ν не изменится по сравнению со случаем $\gamma = 0$: она будет соответствовать волне прямого типа $\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp > 0$, однако по мере роста r возможно формирование двух точек перегиба ($\partial^2\Omega_\nu/\partial k_\perp^2 > 0$) при $k_{*\nu} \neq 0$. Если же при $\gamma \neq 0$ нормаль к поверхности упругоизотропной (при $\gamma = 0$) пластины $\mathbf{n}$ совпадает с направлением [110], то, как показывает анализ соотношений (18), для нее при $r > 1/3$ становится возможным формирование, во-первых, минимума при $k_\perp \neq 0$ для дисперсионной кривой с номером ν из (18) и, во-вторых, точки кроссовера при $k_{\nu\rho} \neq 0$ дисперсионных кривых с номерами ν и ρ, принадлежащих спектру (18) ($k_{\nu\rho}$ — действительный корень уравнения $\Omega_\nu(k_\perp) = \Omega_\rho(k_\perp)$). Качественно аналогичная рассмотренной выше для $r = 0$, $\gamma = 0$ картина перестройки в окрестности структурного сдвигового фазового перехода спектра объемных квазипоперечных фононов, поляризованных в сагиттальной плоскости анизотропной пластины, будет иметь место и при $r > 0$ для $\mathbf{n} \parallel [100]$ или $\mathbf{n} \parallel [110]$. Для этого необходимо, чтобы в пределе $\gamma = 0$ выполнялись условия $r < 1/3$ для $\mathbf{n} \parallel [110]$ или $r < 1/4$ для $\mathbf{n} \parallel [100]$.

Наконец, из анализа (18), (19) следует, что в случае, когда уже без учета пьзоэлектрического взаимодействия $\gamma = 0$ упругие свойства кристалла рассматриваемого типа удовлетворяют условиям $r > 1/3$ для $\mathbf{n} \parallel [110]$ или $r > 1/4$ для $\mathbf{n} \parallel [100]$, форма дисперсионных кривых мод (18), (19), описывающих спектр объемных квазипоперечных упругих колебаний, не будет претерпевать качественных изменений по мере приближения к границе устойчивости данного кристаллического состояния, независимо от направления нормали $\mathbf{n}$ в сагиттальной плоскости пленки ($\mathbf{n} \parallel [100]$ или $\mathbf{n} \parallel [110]$). В частности, при $\mathbf{n} \parallel [100]$ при произвольных ν и $k_\perp$ дисперсионные кривые спектра (19) будут относиться к волнам прямого типа ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp > 0$). В случае выполнения при $k_\perp \neq 0$ соотношения $\partial\Omega_\nu^2/\partial k_\perp^2 = 0$ на соответствующей кривой моды с заданным номером ν будет возможно формирование двух точек перегиба. Если же $\mathbf{n} \parallel [110]$, то дисперсионная кривая моды спектра (18) с номером ν будет обладать при $k_\perp \neq 0$ минимумом, т. е. в длинноволновом пределе $k_\perp \to 0$ она будет волной обратного типа ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp < 0$). Кроме того, при выполнении условия $\Omega_\nu(k_\perp) = \Omega_\rho(k_\perp)$ для мод с номерами ν и ρ формируется точка вырождения рассматриваемого фононного спектра.

Анализ показывает, что физической причиной наличия минимума на дисперсионной кривой, принадлежащей спектру объемных лэмбовских фононов исследуемого типа, является существование в рассматриваемой области частот и волновых чисел сопутствующего поверхностного упругого колебания квазипродольного типа. Если же при некоторых ω и $k_\perp$ это сопутствующее колебание превращается в дополнительную объемную волну, то в этом случае для дисперсионных кривых, принадлежащих спектру лэмбовских фононов обсуждаемого типа, становится возможным формирование точки кроссовера при $k_\perp \neq 0$.

Поскольку, как указывалось во Введении, наличие в кристалле сопутствующего поверхностного колебания существенно связано с конфигурацией поверхности рефракции соответствующей нормальной упругой волны неограниченного кристалла [1, 2], следующий раздел работы мы посвятили анализу связи локальной геометрии поверхности рефракции нормальной поляризованной в плоскости падения квазипоперечной упругой волны неограниченного кубического кристалла с найденными выше аномалиями спектра объемных лэмбовских фононов для пластины сегнетоэластика в парафазе с $\mathbf{n} \parallel [100]$ или $\mathbf{n} \parallel [110]$ и $\mathbf{k} \in xy$.

4. СВЯЗЬ С ФОРМОЙ ПОВЕРХНОСТИ РЕФРАКЦИИ

Так как волновой вектор рассматриваемой волны в соотношениях (18), (19) лежит в плоскости (001), то для решения поставленной задачи необходимо с помощью (11) изучить форму сечения в $\mathbf{k}$-пространстве поверхности обратных фазовых скоростей рассматриваемой квазипоперечной ($\mathbf{u} \perp [001]$) упругой волны ($\omega = \mathrm{const}$) плоскостью (001). При учете приближений (7) и (11) соответствующее выражение может быть представлено в виде ($k_x^2/\mathbf{k}^2 \equiv \sin^2\vartheta$, $\mathbf{k}^2 \equiv k_x^2 + k_y^2$, $\delta \to 0$)

$$\mathbf{k}^2 = \frac{\omega^2}{s_0^2(1 + r\sin^2 2\vartheta)}\,. \tag{23}$$

Анализ экстремальных точек кривой (23) [1] и их сопоставление с найденными выше особенностями формы дисперсионных кривых (18), (19) показывают, что наличие локального минимума на дисперсионной кривой исследуемого волноводного фонона (18), (19) связано с формированием в неограниченном кристалле на соответствующем сечении поверхности рефракции нормальной квазипоперечной волны той же поляризации (23) участка с максимальной отрицательной кривизной (для $\vartheta = \pi/4$ при $r > 1/3$ и для $\vartheta = 0$ при $r < -1/4$). Его положение на кривой (23) в $\mathbf{k}$-пространстве определяется условием $\partial k/\partial\vartheta = 0$ и однозначно связано с частотой ω, номером моды ν, толщиной пленки $2d$ и волновым числом $k_\perp$ исследуемого волноводного фонона (18), (19).

Если рассмотреть сечения кривой (23) прямыми, определяемыми условиями $k_x = \mathrm{const}$ или $k_y = \mathrm{const}$, то анализ общих точек такой прямой и поверхности рефракции (23) позволяет получить информацию о структуре спектра соответствующего волноводного фонона для заданного волнового числа $k_\perp$, частоты ω, а также номера моды ν (в данном случае кривых (18), (19)). В частности, если направление нормали $\mathbf{n}$ к поверхности пленки в плоскости волновых векторов k_x, k_y совпадает с осью ординат ($\mathbf{n} \parallel [100]$), то число общих точек прямой $k_z = k_\perp$ и кривой (23) определяет номера мод ν спектра рассматриваемого типа объемных лэмбовских фононов, которые могут распространяться вдоль оси [010] исследуемой кристаллической пленки толщиной $2d$ с одинаковым волновым числом $k_\perp$ и частотой ω (т. е. точки кроссовера). В этой же геометрии наличие общих точек кривой (23) и прямой $k_x = m_\nu$ позволяет определить, с какими волновыми числами $k_\perp$ может распространяться вдоль пластины толщиной $2d$ исследуемого сегнетоэлектрика данный тип волноводного лэмбовского фонона с фиксированными номером моды ν и частотой ω. Поскольку внешняя нормаль к поверхности рефракции совпадает с направлением групповой скорости волны [1], из совместного анализа (18), (19) и (23) следует, что анализ локальной геометрии сечения изочастотной поверхности (23) позволяет судить о том, к какому типу волны (прямому или обратному) относится соответствующий участок дисперсионной кривой волноводного фонона, определяемый из (18), (19) заданными ω, m_ν и $k_\perp$. В частности, в рассматриваемом случае $\mathbf{k} \parallel [010]$ ($\mathbf{n} \parallel [100]$) распространяющаяся вдоль пленки объемная лэмбовская волна (19) будет волной обратного типа, если проекция внешней нормали к поверхности рефракции на направление [100] в точке пересечения этой поверхности с прямой $k_y = m_\nu$ имеет отрицательный знак, если же проекция положительна, то соответствующая волна при заданных k, ω и m_ν будет волной прямого типа. Если при некотором $k_\perp \neq 0$ проекция на ось x равна нулю, то такая ситуация будет возможна, когда на дисперсионной кривой моды с номером ν, принадлежащей спектру объемных колебаний, бегущих вдоль поверхности пленки толщиной $2d$ ($\mathbf{n} \parallel [100]$), имеется экстремум для этого значения волнового числа $k_\perp$. Будет эта точка максимумом или минимумом, определяется знаком локальной гауссовой кривизны кривой (23) в этой точке.

До сих пор весь анализ был проведен на примере кристаллической пластины, для которой упругие свойства как вдоль направления нормали к поверхности пленки, так и вдоль направления распространения упругой волны заданной поляризации, были идентичными. Поэтому несомненный интерес представляет ответ на вопрос, как повлияет упругая анизотропия в сагиттальной плоскости на найденные выше необходимые условия существования как точки кроссовера $k_{\nu\rho}$, так и точки минимума $k_{*\nu}$ (формирование обратной волны $\partial\Omega_\nu(k_\perp)/\partial k_\perp < 0$) для дисперсионной кривой моды $\Omega_\nu(k_\perp)$, принадлежащей спектру объемных лэмбовских фононов анизотропной пластины. С этой целью в следующем разделе рассмотрено влияние ромбической анизотропии в сагиттальной плоскости анизотропной пластины на условия формирования найденных выше аномалий в спектре объемных лэмбовских фононов рассматриваемого типа. В качестве примера рассмотрим однокомпонентный сегнетоэластический фазовый переход из парафазы в сегнетоэлектрическое состояние для пластины кристалла, обладающего в парафазе пьезоэлектрическим эффектом $222 \to 2$ (сегнетова соль) [3].

5. ЭФФЕКТЫ РОМБИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ

Для удобства сравнения с результатами приведенных выше расчетов в дальнейшем будем считать, что для рассматриваемого однокомпонентного сегнетоэластического фазового перехода полярной осью является ось z ([001]), тогда соответствующую данной модели плотность термодинамического потенциала можно представить в виде

$$W = \frac{\delta}{2}(\nabla P)^2 + \frac{b}{2}P_z^2 + \gamma P_z u_{xy} + \frac{1}{2}c_{11}u_{xx}^2 + \frac{1}{2}c_{22}u_{yy}^2 + \frac{1}{2}c_{33}u_{zz}^2 + c_{12}u_{xx}u_{yy} + c_{13}u_{xx}u_{zz} + c_{23}u_{zz}u_{yy} + 2c_{55}u_{zx}^2 + 2c_{44}u_{zy}^2 + 2c_{66}u_{xy}^2. \quad (24)$$

По-прежнему будем считать, что векторы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{n}$ лежат в плоскости (001), и ограничимся анализом спектра распространяющихся вдоль пленки объемных упругих непьезоактивных колебаний, поляризованных в сагиттальной плоскости. Рассмотрим только случаи $\mathbf{n} \parallel [100]$ и $\mathbf{n} \parallel [010]$ при условии, что на обеих поверхностях пластины выполнены соотношения (3), (4).

Расчет показывает, что в пределе (7) для рассматриваемой модели неограниченного сегнетоэлектрика спектр связанных сегнетоупругих колебаний с $\mathbf{u}$, $\mathbf{k} \perp [001]$ и $P_z \neq 0$ в параэлектрической тетрагональной фазе можно представить в виде ($k^2 = k_x^2 + k_y^2$, ϑ отсчитывается в сагиттальной плоскости и равен нулю при $\mathbf{k} \parallel [010]$, Λ_{ik} — компоненты тензора Кристоффеля)

$$\Omega_\nu^2(k_\perp) = 0.5(\Lambda_{11} + \Lambda_{22}) \pm \pm 0.5\left((\Lambda_{11} - \Lambda_{22})^2 + 4\Lambda_{12}^2\right)^{1/2}. \quad (25)$$

Соотношения (24), (25) позволяют определить связь нормальной к поверхности пленки с $\mathbf{n} \perp [001]$ компоненты волнового вектора $\mathbf{k}$ с частотой ω и волновым числом $k_\perp$ распространяющейся объемной эластоупругой волны, т. е. представляет собой характеристическое уравнение для решения краевой задачи при $\mathbf{n}$, $\mathbf{u}$, $\mathbf{k} \in xy$. Из (24), (25) следует, что как при $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и при $\mathbf{n} \parallel [010]$ структура нормальной к $\mathbf{n}$ компоненты вектора упругих смещений решетки $\mathbf{u}$ может быть представлена в виде (6). Пользуясь (6) и (25), можно провести классификацию возможных типов распространяющихся упругих волн в зависимости от характера их локализации вблизи поверхности магнетика ($\zeta \geq 0$), определяемой $q_{1,2}$. Если всюду в дальнейшем ограничиться областью частот ω и волновых чисел $k_\perp$ таких, что

$$\begin{aligned} &c_{11}, c_{12} \gg c_{66}, \quad \omega^2 \ll c_{11}/\rho \quad \text{при} \quad c_{11} \ll c_{22}, \\ &c_{22}, c_{12} \gg c_{66}, \quad \omega^2 \ll c_{22}/\rho \quad \text{при} \quad c_{11} \gg c_{22}, \end{aligned} \quad (26)$$

то весь последующий анализ влияния ромбической анизотропии на структуру спектра распространяющихся объемных упругих волн, поляризованных в сагиттальной плоскости сегнетоэлектрической пленки, можно выполнить на основе учета только поляризованной в плоскости падения (001) квазипоперечной ветви спектра нормальных упругих колебаний неограниченного кристалла (25) ($\chi \equiv c_{22}/c_{11}$):

$$\begin{aligned} &\omega^2 \approx s_0^2 k^2 \left(1 + r_* 4k_x^2 k_y^2/(k_x^2 + \chi k_y^2)\right), \\ &r_* \equiv \frac{c_{11}^2\chi + c_{66}^2\theta^2 - (c_{12} + c_{66}\theta)^2 - (1+\chi)c_{11}c_{66}\theta}{c_{11}c_{66}\theta}. \end{aligned} \quad (27)$$

В результате из (6), (27) следует, что для выбранной ориентации нормали $\mathbf{n}$ к поверхности пленки ($\mathbf{n} \parallel [100]$ или $\mathbf{n} \parallel [010]$) и плоскости распространения волны (001) в зависимости от характера локализации вблизи поверхности кристалла плоскости пленки $\zeta = 0$ как при $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и при $\mathbf{n} \parallel [010]$ возможны следующие типы распространяющихся нормальных квазипоперечных упругих волн.

I. Объемные волны первого типа ($q_1^2 > 0$; $q_2^2 < 0$):

$$\begin{aligned} &\omega^2 > s_t^2 k_\perp^2, \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ &\omega^2 > s_t^2 k_\perp^2, \quad \mathbf{n} \parallel [010]. \end{aligned} \quad (28)$$

II. Обобщенные поверхностные волны ($q_1^2 = (q_2^2)^*$):

$$\begin{aligned} &\omega^2 < \omega_+^2 \equiv s_t^2 k_\perp^2 \left[1 - \chi + 4\left(\chi^{1/2}|r_*|^{1/2} - |r_*|\right)\right], \\ &2|r|^{1/2} > \chi^{1/2}, \quad r < 0, \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ &\omega^2 < \omega_+^2 \equiv s_t^2 k_\perp^2 \left[1 - 1/\chi + 4\left(|r_*|^{1/2} - |r_*|\right)/\chi\right], \\ &|r_*| > 1/4, \quad r_* < 0, \quad \mathbf{n} \parallel [010]. \end{aligned} \quad (29)$$

III. Поверхностные волны ($q_{1,2}^2 > 0$):

$$\begin{aligned} &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2 k_\perp^2, \quad 2|r_*|^{1/2} < \chi^{1/2}, \\ &r_* < 0, \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2 k_\perp^2, \\ &|r_*| < 1/4, \quad r < 0, \quad \mathbf{n} \parallel [010]. \end{aligned} \quad (30)$$

IV. Объемные волны второго типа ($q_{1,2}^2 < 0$):

$$\begin{aligned} &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2 k_\perp^2, \quad 2|r_*|^{1/2} > \chi^{1/2}, \\ &r_* < 0, \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ &\omega_+^2 < \omega^2 < s_t^2 k_\perp^2, \quad |r_*| > 1/4, \quad \mathbf{n} \parallel [010]. \end{aligned} \quad (31)$$

Если же $r_* > 0$ то, как показывает анализ, все найденные выше соотношения остаются в силе за исключением того, что теперь в них надо считать, что $\omega_+^2 \equiv 0$ при любом $k_\perp$, т. е. формирование обобщенных поверхностных волн невозможно.

Таким образом, необходимым условием распространения вдоль рассматриваемой сегнетоэлектрической пластины объемных лэмбовских фононов, отвечающих поляризованной в плоскости падения квазипоперечной ветви спектра нормальных упругих волн, является требование, чтобы их частота и волновое число $k_\perp$ принадлежали области I или IV. В этом случае бегущая вдоль пленки двухпарциальная упругая волна соответствующей поляризации будет иметь по крайней мере одну объемную компоненту.

Многократное отражение фононов рассматриваемого типа от границы пластины дает в результате интерференции нормальные упругие моды, поляризованные в сагиттальной плоскости исследуемой сегнетоэлектрической пленки. Для рассматриваемой геометрии ($\mathbf{k} \in xy$, $\mathbf{n} \parallel [100]$ или $\mathbf{n} \parallel [010]$) спектр этих объемных фононов может быть найден в явном виде:

$$\Omega_\nu^2(k_\perp) \approx s_0^2 k^2 \left(1 + \frac{r_* 4 m_\nu^2 k_\perp^2}{m_\nu^2 + \chi k_\perp^2}\right), \quad \mathbf{n} \parallel [100], \quad (32)$$

$$\Omega_\nu^2(k_\perp) \approx s_0^2 k^2 \left(1 + \frac{r_* 4 \chi k_\perp^2 m_\nu^2}{k_\perp^2 + \chi m_\nu^2}\right), \quad \mathbf{n} \parallel [010]. \quad (33)$$

Расчет показывает, что с учетом сделанных выше предположений сечение сагиттальной плоскостью (001) изочастотной поверхности квазипоперечной ветви спектра нормальных упругих волн, поляризованных в плоскости падения, описывается следующим соотношением ($\operatorname{tg}\vartheta \equiv k_y/k_x$):

$$k^2 \approx \frac{\omega^2}{s_0^2} \left(1 + \frac{r_* \sin^2 2\vartheta}{\cos^2\vartheta + \chi \sin^2\vartheta}\right)^{-1}. \quad (34)$$

Как и в рассмотренном выше случае, при определенных соотношениях между модулями упругости на изочастотной поверхности квазипоперечных нормальных упругих колебаний возможно формирование участков с отрицательной гауссовой кривизной, максимумы которых в плоскости xy совпадают с направлениями [100] и [010]. Однако теперь ромбическая симметрия кристалла приводит к тому, что при $\mathbf{k} \parallel [100]$ наличие вогнутого участка на кривой (34) становится возможным при

$$4|r_*| > \chi, \quad (35)$$

тогда как для $\mathbf{k} \parallel [010]$ формирование участка с отрицательной кривизной на поверхности медленности (34) имеет место при выполнении условия

$$4|r_*| > 1. \quad (36)$$

Таким образом, в данном случае условия существования участка с отрицательной гауссовой кривизной на поверхности рефракции вдоль нормали $\mathbf{n}$ к поверхности пластины и вдоль направления распространения объемной упругой волны, $\mathbf{k}_\perp \perp \mathbf{n}$, могут выполняться не одновременно. Проанализируем теперь, как связано это обстоятельство со структурой спектра распространяющихся объемных квазипоперечных упругих колебаний, поляризованных в сагиттальной плоскости рассматриваемой кристаллической пластины.

Анализ соотношений (32), (33) показывает, что теперь исследуемая пластина вдоль направлений, связанных с векторами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{k}_\perp$, является анизотропной по своим упругим свойствам. В результате при заданном параметре ромбичности кристалла ($\chi \neq 1$) необходимым условием формирования минимума на дисперсионной кривой фононной моды с заданным номером ν является выполнение соотношений

$$\begin{aligned} &4|r_*| > 1, \quad \mathbf{n} \parallel [010], \\ &2|r_*| > \chi^{1/2}, \quad \mathbf{n} \parallel [100]. \end{aligned} \quad (37)$$

Что же касается необходимого условия формирования точки вырождения дисперсионных кривых мод с номерами ν и ρ, принадлежащих спектру лэмбовских фононов рассматриваемого типа объемных, то теперь оно для заданного направления распространения волны и нормали $\mathbf{n}$ к поверхности пленки ($\mathbf{k}, \mathbf{n} \in xy$) может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} &2|r_*| > \chi^{1/2}, \quad \mathbf{n} \parallel [010], \\ &4|r_*| > 1, \quad \mathbf{n} \parallel [100]. \end{aligned} \quad (38)$$

Совместный анализ (18), (19) и (32), (33) показывает, что дополнительные по отношению к рассмотренным выше при $\chi = 1$ особенности спектра объемных лэмбовских фононов в анизотропной пластине с $\mathbf{n} \parallel [100]$ (или $\mathbf{n} \parallel [010]$) возникают, если при $r_* < 0$ выполнены соотношения

$$\begin{aligned} &\chi > 4|r_*| > 1, \\ &\chi < 4|r_*| < 1. \end{aligned} \quad (39)$$

В этом случае возможна реализация (помимо исследованных выше для $\chi = 1$) двух дополнительных вариантов перестройки спектра фононов рассматриваемой поляризации:

1) при любом номере моды ν соответствующая дисперсионная кривая имеет минимум при $k_\perp = k_{*\nu}$, однако при любом $k_\perp$ и номерах мод ν и ρ нет точек кроссовера, если $\mathbf{n} \parallel [100]$, $\chi > 1$ или $\mathbf{n} \parallel [010]$, $\chi < 1$;

2) при любом $k_\perp$ и номере моды ν нет точек минимума на дисперсионной кривой $\Omega_\nu(k_\perp)$ ($\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp > 0$), но для любых ν и ρ существует точка вырождения соответствующих дисперсионных кривых $\Omega_\nu(k_\perp) = \Omega_\rho(k_\perp)$; для $\mathbf{n} \parallel [100]$ необходимо, чтобы $\chi < 1$, тогда как при $\mathbf{n} \parallel [010]$ требуется, чтобы $\chi > 1$.

Таким образом, проведенный анализ показывает, что формирование и этих дополнительных вариантов перестройки спектра объемных лэмбовских фононов связано с изменением локальной геометрии изочастотной поверхности нормальных поляризованных в плоскости падения квазипоперечных фононов неограниченного кристалла. До сих пор весь анализ влияния локальной геометрии изочастотной поверхности нормальной упругой волны в неограниченном кристалле на структуру спектра объемных фононов соответствующего типа, распространяющихся вдоль пластины кристалла в окрестности непрерывного сдвигового структурного фазового перехода, мы проводили в пределе $\delta \to 0$, т. е. без учета корреляционных эффектов в сегнетоэлектрической подсистеме кристалла. Таким образом, приведенные выше результаты в первую очередь справедливы для пластин сильно анизотропных кристаллов вдали от области устойчивости данного кристаллического состояния. Что же касается перестройки спектра объемных фононов непосредственно в области сегнетоэластического фазового перехода, то для нее необходимо одновременно с эффектами формы изочастотной поверхности нормальных акустических колебаний неограниченного кристалла учесть также и корреляционные эффекты, что в рамках рассматриваемой модели соответствует отказу от приближения $\delta = 0$. Результаты этого рассмотрения на примере модели ромбического кристалла изложены в следующем разделе.

6. ЭФФЕКТЫ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ

Анализ граничной задачи с учетом как упругих (4), так дополнительных (3) граничных условий показывает, что при любых χ, совместимых с условиями упругой устойчивости кристалла, спектр лэмбовских волн рассматриваемого типа при тех же приближениях, как и раньше, может быть найден в явном виде при любой величине волнового числа $k_\perp$ при $a = \infty$ как для $\mathbf{n} \parallel [100]$, так и для $\mathbf{n} \parallel [010]$.

Если взять для примера ромбический кристалл, то для рассматриваемой геометрии ($\mathbf{k} \in xy$, $\mathbf{n} \parallel [100]$ или $\mathbf{n} \parallel [010]$) спектр объемных фононов исследуемого типа может быть найден в явном виде ($\kappa_\nu \equiv \pi\nu/2d$, $\nu = 1, 2, \ldots$):

$$\begin{aligned} \Omega_\nu^2(k_\perp) &\approx s_0^2 k^2 \left(1 + r_* 4\kappa_\nu^2 k_\perp^2/(\kappa_\nu^2 + \chi k_\perp^2)\right), \quad \mathbf{n} \parallel [100], \\ \Omega_\nu^2(k_\perp) &\approx s_0^2 k^2 \left(1 + r_* 4\chi k_\perp^2 \kappa_\nu^2/(k_\perp^2 + \chi \kappa_\nu^2)\right), \quad \mathbf{n} \parallel [010], \end{aligned} \tag{40}$$

$$r_* \equiv \frac{c_{11}^2\gamma + c_{66}^2\theta^2 - (c_{12} + c_{66}\theta)^2 - (1+\gamma)c_{11}c_{66}\theta}{c_{11}c_{66}\theta}. \tag{41}$$

Сравнительный анализ (32), (33) и (40), (41) показывает, что с влиянием пространственной дисперсии упругих модулей ($\delta \neq 0$) на спектр объемных лэмбовских фононов рассматриваемого типа связаны следующие дополнительные эффекты.

1) При $\omega_0^2 + c^2(\pi\nu/d)^2 \ll c^2 k_\perp^2 \ll \omega_{pe}^2$ фазовая скорость моды с номером ν становится зависящей от величины волнового числа $k_\perp$.

2) Фазовая скорость лэмбовских мод с номерами $\nu \neq 0$ не обращается в нуль на границе устойчивости данного кристаллического состояния.

3) Пространственная дисперсия упругого модуля c_{66} приводит для мод с номерами ν и ρ к исчезновению точек кроссовера в спектре объемных лэмбовских фононов рассматриваемого типа (за счет частичного поверхностного закрепления) и расталкиванию (диссипация отсутствует) соответствующих дисперсионных кривых. Так, для рассмотренного выше случая ромбического кристалла при $0 \neq a \ll 1$ в окрестности имевшейся при $\delta = 0$ точки вырождения мод $\Omega_\nu(k_\perp)$ и $\Omega_\rho(k_\perp)$ структура дисперсионных кривых мод с номерами ν и ρ с учетом соотношений (40), (41) приближенно может быть представлена в виде ($|W_{\nu\rho}^2| < 1$, $W_{\nu\rho}^2 \approx a^2$)

$$\left(\omega^2 - \Omega_\nu^2(k_\perp)\right)\left(\omega^2 - \Omega_\rho^2(k_\perp)\right) - W_{\nu\rho}^2 \Omega_\nu^2(k_\perp)\Omega_\rho^2(k_\perp) \approx 0. \tag{42}$$

В том случае, когда в точке вырождения $k_\perp = k_{\nu\rho}$ ($W_{\nu\rho}^2 = 0$) имело место пересечение дисперсионных кривых, относящихся соответственно к волнам прямого и обратного типов, снятие вырождения ($W_{\nu\rho}^2 \neq 0$) приводит к исчезновению точки вырождения и формированию в окрестности этой точки двух точек экстремума: минимума для ветви, частота которой $\omega > \Omega_\nu(k_{\nu\rho})$, и максимума при $\omega < \Omega_\nu(k_{\nu\rho})$.

4) Если для фононной моды с номером ν выполнено соотношение $c^2(\pi\nu/d)^2 \gg \omega_{pe}^2$, то учет пространственной дисперсии в сегнетоэлектрической подсистеме кристалла ($\delta \neq 0$) будет приводить к тому, что структура спектра такой упругой моды не только вдали, но и вблизи области исследуемого сегнетоэластического фазового перехода будет определяться только соотношением упругих модулей в пределе $\gamma \to 0$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе показано следующее.

1) Существует взаимнооднозначное соответствие между наличием участков с отрицательной гауссовой кривизной на сечении сагиттальной плоскостью изочастотной поверхности нормальных квазипоперечных колебаний, поляризованных в плоскости падения, и некоторыми аномалиями спектра (типом волны, наличием точек экстремума и точек кроссовера) дисперсионных кривых мод, принадлежащих соответствующему типу объемных обобщенных лэмбовских волн анизотропной пластины.

2) Характер упругой анизотропии может существенно влиять на структуру спектра лэмбовских фононов рассматриваемого типа.

3) Последовательный учет эффектов пространственной дисперсии в сегнетоэлектрической подсистеме кристалла может оказаться принципиально важным для корректного описания трансформации спектра объемных лэмбовских фононов рассматриваемого типа в окрестности собственно сегнетоэластического фазового перехода.

В настоящей работе мы рассматривали особенности трансформации спектра объемных лэмбовских волн при условии, что их сагиттальная плоскость совпадает с плоскостью симметрии рассматриваемого кристалла. В этом случае, как известно, имеет место независимое распространение SH-волн и фононов лэмбовского типа. Если же рассматриваемый кристалл является гексагональным и ось шестого порядка совпадает с направлением нормали $\mathbf{n}$ к поверхности пленки, на обеих поверхностях которой по-прежнему выполнены условия (4), то несложно убедиться, что вследствие упругой изотропии такой пленки найденные в данной работе аномалии (при соответствующем соотношении упругих модулей) будут иметь место для любого направления распространения объемной лэмбовской волны $\mathbf{k}_\perp/|\mathbf{k}_\perp|$ в плоскости пленки. В частности, в этом случае указанные выше характерные точки кроссовера и экстремумов при $k_\perp \neq 0$ будут образовывать замкнутые линии в $\mathbf{k}$-пространстве, целиком лежащие в плоскости с нормалью вдоль $\mathbf{n}$.

Существование в законе дисперсии нормальных колебаний $\Omega_\nu(k_\perp)$ таких точек, в которых одна или несколько компонент групповой скорости $(\partial\Omega_\nu/\partial k_\perp)$ равны нулю, приводит, как известно, к формированию особенностей в плотности состояний соответствующего типа квазичастиц (в данном случае фононов). Такие точки носят название критических, и с ними связано наличие особенностей в термодинамических, кинетических и оптических свойствах кристалла. Формирование критических точек, как известно [18], может быть связано с симметрийными свойствами кристалла (симметричные критические точки). Кроме того, могут существовать также и критические точки, наличие которых никак не связано с симметрией кристалла. Они носят название динамических критических точек [18]. Анализ условий существования критических точек в магнонном спектре исследовался в работах [19, 20], но до сих пор анализ проводился только для модели неограниченного кристалла. В настоящей работе впервые показано, что последовательный учет анизотропии упругих модулей позволяет определить механизмы формирования в окрестности непрерывного сдвигового структурного фазового перехода в фононном спектре кристаллической пластины целого ряда новых критических точек, отсутствующих в модели неограниченного кристалла.

Как известно [21], структура спектра тех мод нормальных объемных колебаний, амплитуда которых обладает узлами по толщине пластины, слабо зависит от характера граничных условий, а потому можно ожидать, что найденные в работе для частного случая упругих и добавочных граничных условий эффекты в спектре объемных лэмбовских волн будут иметь место для этого типа объемных акустических колебаний и при других типах граничных условий (за исключением, может быть, того, что вырождение мод будет сниматься и в области точек кроссовера дисперсионные кривые мод с разными номерами будут расталкиваться).

В данной работе мы в качестве примера рассматривали собственно сегнетоэластический фазовый переход в кристаллической пластине. Естественно однако, что основные эффекты, найденные в данной работе, могут быть реализованы и для пластин магнитных кристаллов, испытывающих собственно ферроэластический фазовый переход.

Необходимо подчеркнуть, что мы изучали только случай трансформации спектра в окрестности сегнетоэластического фазового перехода для недипольноактивных объемных фононов, поляризованных в сагиттальной плоскости кристаллической пластины. Анализу особенностей спектра объемных фононов в случае дипольноактивных упругих колебаний в анизотропной пластине будет посвящена отдельная работа.

В заключение автор выражает глубокую благодарность Е. П. Стефановскому и Т. Н. Тарасенко за поддержку идеи данной работы и плодотворные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. А. Красильников, В. В. Крылов, *Введение в физическую акустику*, Наука, Москва (1984).

2. М. К. Балакирев, И. А. Гилинский, *Волны в пьезокристаллах*, Наука, Новосибирск (1982).

3. Б. А. Струков, А. П. Леванюк, *Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах*, Наука, Москва (1983).

4. Р. Блинц, Б. Жекш, *Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики*, Мир, Москва (1975).

5. В. Г. Барьяхтар, И. М. Витебский, Ю. Г. Пашкевич, В. Л. Соболев, В. В. Тарасенко, ЖЭТФ **89**, 189 (1985).

6. И. Е. Дикштейн, В. В. Тарасенко, В. Г. Шавров, ФТТ **19**, 1107 (1977).

7. Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, ФТТ **26**, 2927 (1984).

8. Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, ЖЭТФ **89**, 2221 (1985).

9. А. М. Косевич, Ю. А. Косевич, Е. С. Сыркин, ЖЭТФ **88**, 1089 (1985).

10. Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, Изв. вузов. Физика **31**, 6 (1988).

11. Ю. В. Гуляев, И. Е. Дикштейн, В. Г. Шавров, УФН **167**, 735 (1997).

12. В. Н. Любимов, Кристаллография **25**, 675 (1980).

13. В. И. Альшиц, Е. Лоте, В. Н. Любимов, Кристаллография **28**, 635 (1983).

14. С. В. Герус, И. Е. Дикштейн, В. В. Тарасенко, В. Д. Харитонов, ФТТ **19**, 218 (1977).

15. M. G. Cottam, D. R. Tilley, and B. Zeks, J. Phys. C **17**, 1793 (1984).

16. А. Г. Хачатурян, *Теория фазовых превращений и структура твердых растворов*, Наука, Москва (1974).

17. Ф. Трикоми, *Дифференциальные уравнения*, Изд-во иностр. лит., Москва (1962).

18. Дж. Бирман, *Пространственная симметрия и оптические свойства твердых тел*, т. 1, Мир, Москва (1978).

19. В. Г. Барьяхтар, А. Г. Квирикадзе, В. А. Попов, ЖЭТФ **59**, 898 (1970).

20. В. В. Еременко, С. А. Звягин, Ю. Г. Пашкевич, В. В. Пишко, В. Л. Соболев, С. А. Федоров, ЖЭТФ **93**, 2075 (1987).

21. Л. М. Бреховских, *Волны в слоистых средах*, Наука, Москва (1973).