

## ПОВЕРХНОСТНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ФОНЫ В ОДНООСНЫХ КРИСТАЛЛАХ

В. В. Брыксин, Д. Н. Мирлин, И. И. Решина

Поверхностные оптические колебания решетки в изотропных ионных кристаллах были недавно рассмотрены теоретически [1, 2] и исследованы экспериментально [3 - 5]. Учет анизотропии кристалла приводит к целому ряду интересных особенностей в поведении поверхностных мод при их теоретическом описании [6 - 8]. Дисперсионные соотношения, полученные в [7, 8], могут быть записаны для полубесконечного кристалла в удобном для анализа виде:

$$\epsilon = - \frac{\left[ \frac{\epsilon_x}{\epsilon_L} (\kappa_x^2 - \epsilon_L) \right]^{1/2}}{(\kappa_x^2 - 1)^{1/2}} ; \quad \kappa_x = q_x \frac{c}{\omega} . \quad (1)$$

При этом предположено, что ось  $z$  направлена по нормали к поверхности кристалла, а диэлектрический тензор  $\epsilon_{ij}$  в системе координат  $x, y, z$  диагонален:  $\epsilon_{ij} = \epsilon_i \delta_{ij}$ . Формула (1) справедлива для  $p$ -поляризации, когда вектор электрического поля лежит в плоскости  $xz$ ,  $q_x$  - волновой вектор поверхностного колебания (в рассматриваемой геометрии  $q_y = 0$ ).

Из (1) видно, что поверхностные моды колебаний в области действительных частот могут существовать в двух случаях: 1)  $\epsilon_x < 0, \epsilon_z < 0$ ; 2)  $\epsilon_x < 0, \epsilon_z > \kappa_x^2$ . Поверхностные моды типа 1 при больших  $\kappa_x$  сохраняются и могут быть получены при рассмотрении без учёта запаздывания, учет которого лишь деформирует их дисперсионную кривую (в области  $\kappa_x^2 < |\epsilon_z|$  эти моды соответствуют случаю слабой анизотропии в [8]). Колебания типа 2 при больших  $\kappa_x$  исчезают (случай сильной анизотропии в [8])<sup>1)</sup>. Точка  $\kappa_x = \sqrt{\epsilon_z}$  для них особая, так как

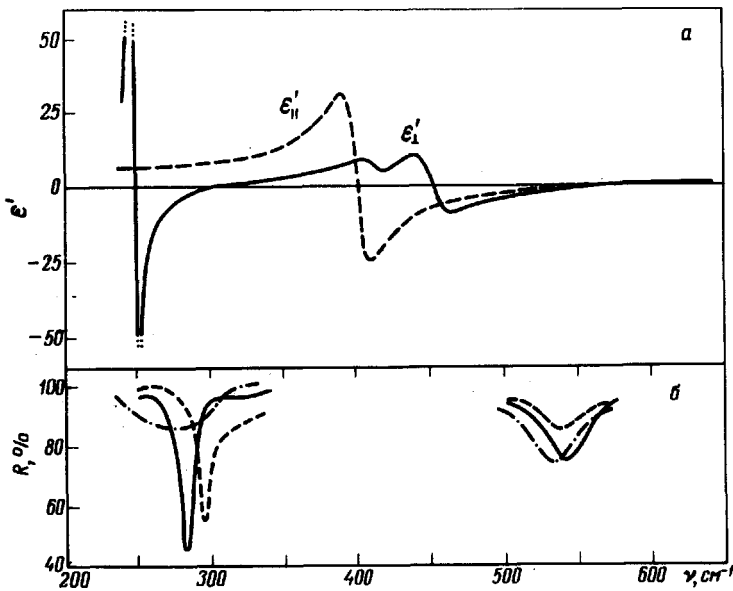
<sup>1)</sup> Сделанное в [8] допущение, что  $\epsilon_{\infty}^{\parallel} = 1$  в (2), приводит к потере части решений для поверхностных мод, появляющихся в реальном случае  $\epsilon_{\infty}^{\parallel} > 1$ .

при дальнейшем увеличении  $\kappa_x$  уровень поверхностного колебания уширяется и частота поверхностного колебания, найденная из (1), становится комплексной величиной.

Экспериментально исследовался спектр поверхностных колебаний в одноосных кристаллах со структурой рутила —  $MgF_2$  и  $TiO_2$ . В этих кристаллах спектр дипольных колебаний, в отличие от ситуации, рассмотренной в [7, 8], определяется тремя переходами, поляризованными перпендикулярно оптической оси  $c$ , и одним переходом, поляризованным параллельно  $c$ :

$$\epsilon_{\perp} = \epsilon_{\infty}^{\perp} + \sum_{i=1}^3 \frac{A_i}{\omega_{Ti}^2 - \omega^2}; \quad \epsilon_{\parallel} = \epsilon_{\infty}^{\parallel} + \frac{B}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (2)$$

Рассмотрим три ориентации кристалла (вектор электрического поля при всех ориентациях лежит в плоскости  $xz$ ): а)  $c \parallel z$ , при этом в (1) нужно положить  $\epsilon_z = \epsilon_{\parallel}$ ,  $\epsilon_x = \epsilon_{\perp}$ ; б)  $c \parallel x$ ,  $\epsilon_z = \epsilon_{\perp}$ ,  $\epsilon_x = \epsilon_{\parallel}$ ; в)  $c \parallel y$ ,  $\epsilon_x = \epsilon_z = \epsilon_{\perp}$ .



а) Частотная зависимость  $\epsilon'_{\parallel}$  и  $\epsilon'_{\perp}$  для кристаллов  $MgF_2$ . Расчет выполнен с численными параметрами из [9]  
 б) спектры НРВО для  $MgF_2$ . Пунктир соответствует ориентации а) ( $c \parallel z$ ), штрих-пунктирная кривая — б) ( $c \parallel x$ ), сплошная — в) ( $c \parallel y$ )

Частотная зависимость  $\epsilon_{\parallel\perp} = \text{Re } \epsilon_{\parallel\perp}$  для  $MgF_2$  приведена на рис. а, откуда видно, что два высокочастотных резонанса в  $\epsilon'_{\perp}$  находятся в области  $\epsilon'_{\parallel} < 0$ , а один (низкочастотный) — при  $\epsilon'_{\parallel} > 0$ . Отсюда следует, что для  $MgF_2$  при ориентации а) имеются два поверхностных колебания типа I в интервалах  $\omega_{T2} \div \omega_{L2}$  и  $\omega_{T3} \div \omega_{L3}$  ( $\omega_{T1} < \omega_{T2} < \omega_{T3}$ ).

а также одно колебание типа 2 в интервале  $\omega_{T1} + \omega_{L1}$ . При ориентации б) имеются только два решения (высокочастотные) типа 1, а при ориентации в) — три решения типа 1<sup>1)</sup>.

Такое своеобразное поведение поверхностных мод колебаний действительно наблюдалось нами на опыте. Экспериментальное исследование было выполнено модифицированным методом полного внутреннего отражения (НПВО). Методика измерений была сходна с использованной в [3]. На рис. 6 приведен спектр НПВО для трех ориентаций кристалла (а), б), в). В соответствии с вышеизложенным при ориентации б) ( $c \parallel x$ ) минимум в низкочастотной области значительно слабее и шире, чем для других ориентаций. Низкочастотный минимум при ориентации а) ( $c \parallel z$ ) соответствует, по всей вероятности, поверхностному фону типа 2, так как в данном спектре  $\kappa_x^2 = 3,9$ , а  $\epsilon_z = 7,8$ , т. е. условие  $\epsilon_z > \kappa_x^2$  выполнено. В пользу такой интерпретации свидетельствуют два обстоятельства. Во-первых, он сдвинут в сторону более высоких частот по сравнению с минимумом для ориентации в) ( $c \parallel y$ ), что согласуется с расчетом (см. таблицу). Во-вторых, эксперимент показал, что при увеличении  $\kappa_x$ , когда  $\kappa_x^2$  становится больше  $\epsilon_z$ , и условие  $\epsilon_z > \kappa_x^2$  перестает выполняться, этот минимум сильно уширяется и ослабляется.

#### Экспериментальные и расчетные частоты поверхностных фононов в $MgF_2$

| Ориентация      | Частоты поверхностных фононов |                   |
|-----------------|-------------------------------|-------------------|
|                 | экспер., $см^{-1}$            | расчет, $см^{-1}$ |
| $c \parallel z$ | 295                           | 300               |
|                 | 541                           | 543               |
| $c \parallel x$ | —                             | —                 |
|                 | 541                           | 543               |
| $c \parallel y$ | 283                           | 291               |
|                 | 543                           | 545               |

Расчет выполнен численным решением уравнения (1) с использованием параметров из [9]. В расчете, в соответствии с условиями эксперимента,  $\kappa_x^2 = 3,9$  для низкочастотного фонона и  $\kappa_x^2 = 4,2$  для высокочастотного фонона.

<sup>1)</sup> Как видно из рис. а, ангармонизм очень сильно влияет на ход диэлектрической проницаемости  $\epsilon'_1$  в районе второго резонанса, так что  $\epsilon'_1$  здесь даже не принимает отрицательных значений. Поэтому на эксперименте вклад от этого резонанса не обнаруживается.

В  $\text{TiO}_2$  области отрицательных значений  $\epsilon'_1$  и  $\epsilon'_2$  перекрываются во всех трех областях частот, и, соответственно с этим, для этого кристалла наблюдались три поверхностных фонона типа 1 при всех ориентациях.

Физико-технический институт  
им. А.Ф.Иоффе  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
7 августа 1972 г.

### Литература

- [ 1 ] K.L.Kleiver, R.Fuchs. Phys. Rev., 140, A2076, 1965; 144, 495, 1966.
- [ 2 ] R.Ruppin, R.Englman. Rep. Progr. Phys., 33, 149, 1970.
- [ 3 ] В.В. Брыксин, Ю.М.Гербштейн, Д.Н.Мирлин. ФТТ, 13, 2125, 1971; 14, 543, 1972; Phys. Stat. Sol. (b), 51, 901, 1972.
- [ 4 ] N.Marschall, B.Fischer. Phys. Rev. Lett., 28, 811, 1972.
- [ 5 ] И.И.Решина, Ю.М.Гербштейн, Д.Н.Мирлин. ФТТ, 14, 1280, 1972.
- [ 6 ] В.М.Агранович. Теория экситонов. М., изд. Наука, 1968, гл. 6.
- [ 7 ] О.А.Дубовский. ФТТ, 12, 3054, 1970.
- [ 8 ] В.Н.Любимов, Д.Ф.Санников. ФТТ, 14, 675, 1972.
- [ 9 ] A.S.Barker. Phys. Rev., 136, 1290, 1964.