

PACS: 43.00.00, 63.20.-e, 61.72.-y

В.В. Румянцев, С.А. Федоров, К.В. Гуменник, Ю.А. Паладян

## ИССЛЕДОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В НЕИДЕАЛЬНОЙ ФОНОННОЙ 1D-СВЕРХРЕШЕТКЕ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 10 декабря 2020 года

*Исследованы особенности распространения акустических возбуждений через не-совершенную 1D-сверхрешетку. В рамках приближения виртуального кристалла (ПВК) выполнено численное моделирование зависимости ширины нижней запрещенной акустической зоны и удельного угла вращения плоскости поляризации упругой волны неидеального (разупорядоченного как по составу, так и по толщине слоев) двухподрешеточного 1D-фононного кристалла от концентрации структурных дефектов.*

**Ключевые слова:** акустические возбуждения, неидеальный 1D-фононный кристалл, акустически активная среда, приближение виртуального кристалла

### Введение

Исследования распространения звука в веществе на макро- и микроскопическом уровнях, составляющие предмет физической акустики [1,2], занимают сегодня видное место при решении многих прикладных задач. Таких, например, как снижение уровня нежелательных звуков (борьба с шумом), поиск способов выделения полезных звуковых сигналов, решение проблемы акустического обнаружения объектов (эхолот). В связи с этим важное место занимает разработка и совершенствование акустической техники, способной измерять соответствующие физические свойства с помощью звука, и создание новых акустических метаматериалов, позволяющих контролировать распространение звуковых волн в среде. Совершенствование техники эксперимента, развитие теоретических представлений расширяют диапазон частот акустических возбуждений и делают акустические методы незаменимыми в исследованиях структуры твердых тел.

В настоящее время имеется значительное число работ [3–8], посвященных расчетам спектров электромагнитных и акустических возбуждений в сверхрешетках. Эти расчеты основываются на использовании метода Т-матрицы и решении системы уравнений для коэффициентов разложения соответствующих полей в ряд Фурье. При нахождении конкретных физических характеристик (например, коэффициентов прохождения электромагнитного излучения, зонного спектра) осуществить точный расчет в общем случае не

представляется возможным, поэтому используются приближенные методы. Так, в работе [9] показано, что вблизи зоны Бриллюэна можно приближенно представить в аналитической форме зависимость соответствующих частот от блоховского волнового вектора. Заметим, что реальные акустические сверхрешетки – это неидеальные системы [10–12].

Распространенным методом расчета нормальных мод в неупорядоченных сверхрешетках со случайным распределением структурных дефектов по всему объему является ПВК, которое заключается [13–15] в замене конфигурационно зависимых параметров гамильтониана задачи на конфигурационно усредненные их значения. При исследовании [7,8] электромагнитных возбуждений неидеальных одномерных (1D) систем, содержащих инородные (дефектные) слои, распределенные случайным образом в объеме сверхрешетки, авторы данной работы применили развитый для идеальных сверхрешеток подход [9], с помощью которого соответствующие оптические характеристики неидеальных сверхрешеток получены [7,8] с использованием именно ПВК. Ниже при изучении акустических возбуждений в слоистой системе применяется приближение жесткой связи, которое, очевидно, справедливо для малых колебаний и предполагает отсутствие «проскальзываний» между слоями.

Особый интерес представляют исследования влияния пространственной дисперсии на распространение акустических возбуждений в кристаллических структурах, которая обуславливает акустическую активность (аналогично оптической активности [16]) таких сред (например, нецентросимметричных).

Заметим, что задача о нахождении нормальных упругих волн, необходимых для расчета характеристик пространственно диспергирующих 1D-сверхрешеток, к настоящему времени не решена. Тем не менее очевидно, что при толщинах слоев многослойника, значительно больших характерных масштабов пространственной дисперсии, расчет соответствующих величин может быть выполнен приближенно, если рассматривать вклад каждого слоя в акустическую активность как независимый. Это означает, что для нахождения исследуемого в настоящей работе удельного угла вращения  $\varphi(\omega)$  плоскости поляризации достаточно знания лишь слоевых удельных углов вращения  $\varphi_{n\alpha}(\omega)$  ( $\omega$  – частота акустического возбуждения,  $n$  – номер элементарной ячейки 1D-сверхрешетки,  $\alpha$  – номер слоя в этой ячейке) и концентрации инородных слоев (при их наличии).

В представленной работе развитый авторами ранее подход в рамках идеологии [16] перенесен на аналогичные расчеты характеристик акустических возбуждений, распространяющихся в несовершенном 1D-фононном кристалле – системе плоскопараллельных слоев с анизотропными (в отличие от исследованных в [17] массивов изотропных слоев) примесными слоями, отличающимися упругими характеристиками. Полученное выражение для  $\varphi(\omega)$  позволяет осуществлять численное моделирование концентрационной зависимости акустической активности сложных одномерных неидеальных систем.

Теоретическая модель

*Упругие волны в неидеальных 1D-сверхрешетках.* Рассмотрим подробнее акустические возбуждения в 1D-неоднородной вдоль оси  $z$  слоистой среде, полученной в результате случайной замены слоев идеальной сверхрешетки инородными однородными одноосными примесными слоями. Причем «ячейки» трансформированной «сверхрешетки» отличаются от соответствующих ячеек идеальной системы как по составу, так и по толщине. В данном случае в точном смысле понятия нет ячеек (поскольку нарушена трансляционная инвариантность), однако сохраняется взаимно однозначное соответствие между слоями идеальной и неидеальной систем. В рамках представленной модели соответствующие характеристики вещества – плотность  $\rho(z)$  и упругие модули  $\hat{\Lambda}(z)$  – можно представить, применяя  $\theta$ -функцию:

$$\rho(z) = \sum_{n,\alpha} \rho_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z), \quad \hat{\Lambda}(z) = \sum_{n,\alpha} \hat{\Lambda}_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z). \quad (1)$$

В дальнейшем удобно использовать величину  $\hat{B}(z) = \hat{\Lambda}(z)/\rho(z)$ , которую можно записать аналогично (1) в следующей форме:

$$\hat{B}(z) = \sum_{n,\alpha} \hat{B}_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z), \quad \hat{B}_{n\alpha} \equiv \frac{\hat{\Lambda}_{n\alpha}}{\rho_{n\alpha}}, \quad (2)$$

где

$$\theta_{n\alpha}(z) = \theta \left[ z - (n-1)d - \left( \sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} - a_{n\alpha} \right) \right] - \theta \left[ z - (n-1)d - \sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} \right]. \quad (3)$$

Здесь  $\rho_{n\alpha}$ ,  $\hat{\Lambda}_{n\alpha}$  и  $a_{n\alpha}$  – соответственно слоевые характеристики (плотность вещества и модули упругости) и толщина слоя, причем  $n$  – номер «ячейки»,  $\alpha$  – номер элемента «ячейки».

Простейшим приближением, позволяющим выявлять особенности и трансформацию спектра элементарных возбуждений, обусловленные наличием в исследуемой системе дефектных слоев, является ПВК. Это приближение дает возможность получить спектр акустических возбуждений в зависимости от концентрации дефектов в неидеальной 1D-сверхрешетке в результате конфигурационного усреднения соответствующих параметров гамильтониана задачи. Процедура усреднения «преобразует» исследуемую неидеальную систему в так называемый виртуальный кристалл, в котором восстановлена трансляционная симметрия.

В отличие от идеальной сверхрешетки в случае несовершенного 1D-фононного кристалла с варьируемыми составом и толщиной слоев тензор  $\hat{B}_{n\alpha}$  и величина  $a_{n\alpha}$  являются конфигурационно зависимыми. При использовании случайных величин  $\eta_{n\alpha}^v$  они представимы в виде

$$\hat{B}_{n\alpha} = \sum_{\nu(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \hat{B}_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \eta_{Cn\alpha}^{\nu(\alpha)}, \quad a_{n\alpha} = \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{\mu(\alpha)} \eta_{Tn\alpha}^{\mu(\alpha)}, \quad (4)$$

причем  $\eta_{Cn\alpha}^{\nu} = 1$ , если в узле  $(n\alpha)$  1D-кристалла находится слой  $\nu(\alpha)$ -го сорта;  $\eta_{Cn\alpha}^{\nu} = 0$  – в ином случае;  $\eta_{Tn\alpha}^{\mu} = 1$ , если в узле  $(n\alpha)$  находится слой  $\mu(\alpha)$ -й толщины;  $\eta_{Tn\alpha}^{\mu} = 0$  – в ином случае. В дальнейшем полагаем, что эти факторы разупорядочения независимы друг от друга. После применения в соответствии с ПВК (аналогично квазичастичному подходу [14,16]) процедуры конфигурационного усреднения (обозначенной угловыми скобками) из (4) следует, что

$$\langle \hat{B}_{n\alpha} \rangle = \sum_{\nu(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \hat{B}_{\alpha}^{\nu(\alpha)} C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)}, \quad \langle a_{n\alpha} \rangle = \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{\mu(\alpha)} C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)}. \quad (5)$$

Здесь  $C_{C\alpha}^{\nu}$ ,  $C_{T\alpha}^{\mu}$  – концентрации примесного слоя  $\nu$ - и  $\mu$ -го сортов соответственно по составу (нижний индекс  $C$ ) или по толщине (нижний индекс  $T$ ) в  $\alpha$ -й подрешетке;  $\sum_{\nu(\alpha)}^{s(\alpha)} C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} = 1$ ;  $\sum_{\mu(\alpha)}^{r(\alpha)} C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} = 1$ . Как и в случае неидеальной

сверхрешетки задача нахождения фоновых характеристик сводится к соответствующей задаче для «виртуального кристалла», слоевые характеристики которого характеризуются величинами  $\hat{B}_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$  с толщинами слоев  $a_{\alpha} \left( \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)$  и периодом ячеек  $d \left( \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)$  (фигурные скобки содержат совокупность переменных  $C_{C\alpha}^{\nu}$ ,  $C_{T\alpha}^{\mu}$  для различных значений  $\nu, \mu$ ). В указанном подходе соответствующие величины (спектр, ширина щели и т.д.) являются функциями концентрации инородных слоев  $C_{C(T)\alpha}^{\nu(\alpha)}$ .

**Акустически активные неидеальные 1D-кристаллические решетки.**

Рассмотрим распространение линейно поляризованного акустического возбуждения вдоль слоевой акустической оси, перпендикулярной плоскостям слоев исследуемой неидеальной сверхрешетки. При этом полагаем, что в данной слоистой структуре все акустические оси параллельны друг другу. В соответствии с феноменологическим подходом [18–20] угол поворота плоскости поляризации акустической волны в неидеальной топологически упорядоченной 1D-сверхрешетке, состоящей из  $N$  элементарных ячеек, описывается следующим выражением:

$$\varphi(\omega) = \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \varphi_{n\alpha}(\omega) a_{n\alpha}. \quad (6)$$

где  $a_{n\alpha}$  и  $\varphi_{n\alpha}(\omega)$  – конфигурационно зависимые соответственно толщина  $\alpha$ -го слоя  $n$ -й элементарной ячейки и удельный угол вращения плоскости поляризации акустической волны частоты  $\omega$ ;  $\sigma$  – число слоев элементарной ячейки.

Полагаем, что количество ячеек  $N$  достаточно велико (чтобы можно было проводить конфигурационное усреднение). По аналогии с предыдущим разделом для конфигурационно зависимых величин  $\varphi_{n\alpha}(\omega)$  и  $a_{n\alpha}$  получаем следующие выражения:

$$\varphi_{n\alpha}(\omega) = \sum_{\mu(\alpha)}^{r(\alpha)} \varphi_{\alpha}^{\mu(\alpha)}(\omega) \eta_{C_{n\alpha}}^{\mu(\alpha)}, \quad a_{n\alpha} = \sum_{\nu(\alpha)}^{s(\alpha)} a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \eta_{T_{n\alpha}}^{\nu(\alpha)}. \quad (7)$$

После выполнения процедуры конфигурационного усреднения находим угол вращения плоскости поляризации упругой волны в неидеальной 1D-сверхрешетке:

$$\langle \varphi(\omega) \rangle = N \left[ \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \varphi_{\alpha}^{(1)}(\omega) a_{\alpha}^{(1)} + a_{\alpha}^{(1)} \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} \Delta \varphi_{\alpha}^{\mu(\alpha)}(\omega) C_{C_{\alpha}}^{\mu(\alpha)} + \varphi_{\alpha}^{(1)} \sum_{\nu(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \Delta a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} C_{T_{\alpha}}^{\nu(\alpha)} + \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} \sum_{\nu(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \Delta \varphi_{\alpha}^{\mu(\alpha)}(\omega) \Delta a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} C_{C_{\alpha}}^{\mu(\alpha)} C_{T_{\alpha}}^{\nu(\alpha)} \right], \quad (8)$$

где  $\Delta \varphi_{\alpha}^{\mu(\alpha)} = \varphi_{\alpha}^{\mu(\alpha)} - \varphi_{\alpha}^{(1)}$ ;  $\Delta a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} = a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} - a_{\alpha}^{(1)}$ ;  $C_{C_{\alpha}}^{\mu(\alpha)}$ ,  $C_{T_{\alpha}}^{\nu(\alpha)}$  – концентрации слоев-дефектов, отличных от слоев базового вещества соответственно по составу и толщине. Первое слагаемое в (8) соответствует углу вращения плоскости поляризации акустической волны идеальной 1D-сверхрешетки, составленной из слоев (1)-го сорта (это вещество полагаем базовым). Второе слагаемое обусловлено разупорядочением сверхрешетки по составу – оно обращается в нуль при отсутствии вариации состава. Третье слагаемое отражает разупорядочение по толщине (при его отсутствии это слагаемое обращается в нуль). Последнее слагаемое обусловлено одновременным разупорядочением сверхрешетки и по составу, и по толщине слоев. Отсутствие хотя бы одного из разупорядочений приводит к обращению в нуль четвертого слагаемого (8). Каждое из четырех слагаемых (8) имеет смысл угла вращения, приходящегося на одну элементарную ячейку. Эти углы, в отличие от удельного угла  $\varphi_{n\alpha}^{\mu(\alpha), \nu(\alpha)}$  (который измеряется в градусах на единицу длины) имеют размерность «градус».

## 2. Результаты и их обсуждение

**Зависимость величины запрещенной зоны исследуемой сверхрешетки от концентрации примесных слоев.** Рассмотрим распространение упругой монохроматической волны с блоховским вектором  $\mathbf{K} = (0, 0, K)$  в полученном в результате конфигурационного усреднения 1D-фононном «виртуальном кристалле» – идеальной системе с периодом решетки  $d$ . Таким образом,  $\rho(z) = \rho(z + d)$ ,  $a_{n\alpha} \equiv a_{\alpha}$ ,  $\rho_{n\alpha} \equiv \rho_{\alpha}$  (аналогичные равенства выполняются и относительно тензора  $\hat{\Lambda}$ ). После несложных вычислений получим следующую

щую систему уравнений для фурье-амплитуд  $U_K^m(g)$  поля упругих смещений [18]:

$$\omega^2 U_K^i(g) = \sum_{g'} \left[ B_{izzm}(g-g')(K+g')^2 - iA_{izm}(g-g')(K+g') \right] U_K^m(g'), \quad (9)$$

где  $g = \frac{2\pi}{d}p$  ( $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) – векторы соответствующей обратной решетки. Легко показать, что для случая 1D-сверхрешетки с характеристиками слоев, удовлетворяющими (9), тензор  $A_{izm}(g)$  обращается в нуль. Фурье-образ тензора  $\hat{B}$ , который получен с использованием выражения (9), имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{B}(p) = & -\frac{i}{2\pi p} \sum_{\alpha, \nu(\alpha)} \hat{B}_\alpha^{\nu(\alpha)} C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \left\{ \exp \left[ i \frac{2\pi}{d \left( \{C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)}\} \right)} p \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \left( \{C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)}\} \right) \right] - \right. \\ & \left. - \exp \left[ i \frac{2\pi}{d \left( \{C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)}\} \right)} p \left( \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \left( \{C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)}\} \right) - a_\alpha \left( \{C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)}\} \right) \right) \right] \right\}. \quad (10) \end{aligned}$$

При наличии примесных одноосных слоев при выборе  $\mathbf{K}$  вдоль оси симметрии  $\mathbf{K} = (0, 0, K)$  отличны от нуля следующие компоненты тензора  $\hat{B}(p)$  [19]:  $B_{zzzz}(p)$ ,  $B_{xzzx}(p) = B_{yzzp}(p)$ . В этом случае происходит продольно-поперечное расщепление фононного возбуждения, и система уравнений (10) распадается на две независимые подсистемы. Первая, которая содержит лишь величины  $B_{zzzz}$ , описывает распространение продольных звуковых возбуждений, а вторая, в которой фигурирует лишь  $B_{xzzx} = B_{yzzp}$ , описывает поперечные возбуждения. Очевидно, что такое расщепление оказалось возможным, благодаря выбору геометрии задачи.

Законы дисперсии соответствующих акустических возбуждений определяются бесконечной системой уравнений, которая в общем случае (для произвольных  $K$ ) решается с помощью приближенных численных методов (аналогично нахождению экситон-поляритонных возбуждений в диэлектрических сверхрешетках [3]). Тем не менее, как будет показано ниже, для значений волнового вектора  $K$ , близких к границе зоны Бриллюэна ( $\left| K - \frac{2\pi}{d} \right| \approx K$ ), зависимость  $\omega = \omega(K)$  можно записать в аналитической форме. Действительно, из (6) видно, что в этом случае наибольшими являются величины  $U_K^i(g)$  для  $g$  с  $p = 0, -1$  при выполнении условия  $\omega^2 \approx K^2 B_{\parallel, \perp}^{(0)}$  (аналогично (6.1.23) в [7]). Здесь  $B_{\parallel, \perp}^{(0)} \equiv B_{zzzz, xzzx}(p=0)$ ,  $B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \equiv B_{zzzz, xzzx}(p=-1)$  – фурье-коэффициенты [19]. Оставляя в системе (9) только слагаемые, соответствующие резонансу указанных плоских волн,  $p = 0, -1$ , получаем следующий закон дисперсии акустических возбуждений:

$$\omega_{\pm, \parallel, \perp}^2 \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) = K^2 \left[ B_{\parallel, \perp}^{(0)} \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \pm B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \right]. \quad (11)$$

При изучении особенностей распространения акустических возбуждений важной для физических приложений величиной является ширина запрещенной зоны  $\Delta\omega = |\omega_+ - \omega_-|$ . Корни уравнения (11)  $\omega_+$ ,  $\omega_-$  определяют границы спектральной полосы: при частотах  $\omega(K) < \omega < \omega_+(K)$  корни комплексные (запрещенная зона), при этом акустические волны – затухающие (брэгговское отражение), область частот  $\omega < \omega_-, \omega > \omega_+$  соответствует распространяющимся волнам. В исследуемом случае согласно (11) ширина нижней запрещенной зоны

$$\frac{\Delta\omega \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)}{\omega} = \left| \sqrt{1 + \left| B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \right| / B_{\parallel, \perp}^{(0)} \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)} - \sqrt{1 - \left| B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \right| / B_{\parallel, \perp}^{(0)} \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)} \right|. \quad (12)$$

Величины  $B_{\parallel, \perp}^{0, -1} \left( \left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)$ , зависящие от концентрации инородных (по отношению к идеальной сверхрешетке) слоев, определяются количеством подрешеток и такими характеристиками материала, как коэффициенты Ламэ  $\lambda$ ,  $\mu$  (для однородных систем), плотность  $\rho$  вещества и коэффициенты упругости (для одноосной подсистемы). Поэтому концентрационное поведение запрещенной зоны  $\Delta\omega$  может быть весьма разнообразным в зависимости от соответствующих параметров задачи.

Численное моделирование выполним для конкретного случая системы, в которой варьируется лишь вторая подрешетка как по составу, так и по толщине. Причем в данном двухподрешеточном 1D-фононном кристалле первая подрешетка – слои дюралюминия (с модулем Юнга  $E_1 = 70$  ГПа, коэффициентом Пуассона  $\sigma_1 = 0.31$  и плотностью  $\rho_1 = 2800$  кг/м<sup>3</sup>), вторая подрешетка – слои целлулоида ( $E_2^{(1)} = 1.9$  ГПа,  $\sigma_2^{(1)} = 0.39$ ,  $\rho_2^{(1)} = 1400$  кг/м<sup>3</sup>). В качестве примесных по составу вторая подрешетка содержит одноосные слои  $\alpha$ -кварца с концентрацией  $C_C$ . Поскольку эта подрешетка варьируется также и по толщине, усредненный период исследуемого 1D-фононного кристалла имеет вид

$$d(C_T) = a_1 \left[ 1 + \frac{a_2^{(1)}}{a_1} + \left( \frac{a_2^{(2)}}{a_1} - \frac{a_2^{(1)}}{a_1} \right) C_T \right], \quad (13)$$

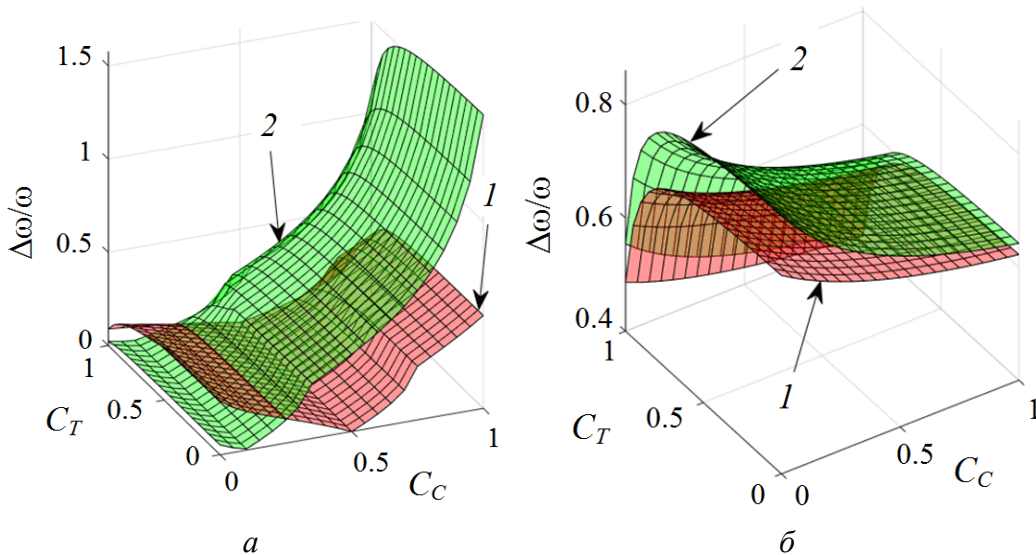
где  $a_1$  – толщина слоев первой подрешетки,  $a_2^{(1)}$  – толщина слоев второй подрешетки идеальной сверхрешетки,  $a_2^{(2)}$  – толщина примесных слоев второй подрешетки с концентрацией  $C_T$ .

Подробный расчет на основе соотношения (10) приводит к следующим выражениям:

$$\begin{aligned}
 B_{\parallel,\perp}^{(0)} &= \frac{a_1}{d(C_T)} \left[ B_{(\parallel,\perp)1} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} - \left( B_{(\parallel,\perp)2}^{(2)} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} \right) C_C^{(2)} \right], \\
 B_{\parallel,\perp}^{(-1)} &= \frac{1}{\pi} \left\{ B_{(\parallel,\perp)1} + \left[ B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} + \left( B_{(\parallel,\perp)2}^{(2)} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} \right) C_C^{(2)} \right]^2 - \right. \\
 &\quad \left. - 2B_{(\parallel,\perp)1} \left[ B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} + \left( B_{(\parallel,\perp)2}^{(2)} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} \right) C_C^{(2)} \right] \right\}^{1/2} \sin \frac{\pi a_1}{d(C_T)}.
 \end{aligned} \tag{14}$$

Здесь согласно [19]  $B_{(\parallel)1} = \frac{E_1(1-\sigma_1)}{\rho_1(1+\sigma_1)(1-2\sigma_1)}$ ,  $B_{(\perp)1} = \frac{E_1}{2\rho_1(1+\sigma_1)}$ ,  
 $B_{(\parallel)2}^{(1)} = \frac{E_2^{(1)}(1-\sigma_2^{(1)})}{\rho_2^{(1)}(1+\sigma_2^{(1)})(1-2\sigma_2^{(1)})}$ ,  $B_{(\perp)2}^{(1)} = \frac{E_2^{(1)}}{2\rho_2^{(1)}(1+\sigma_2^{(1)})}$ , а для одноосных примес-  
ных слоев в соответствие с (5)  $B_{(\parallel)2}^{(2)} \equiv B_{(zzzz)2}^{(2)} = \frac{\Lambda_{(zzzz)2}^{(2)}}{\rho_2^{(2)}}$ ,  $B_{(\perp)2}^{(2)} \equiv B_{(xzzx)2}^{(2)} = \frac{\Lambda_{(xzzx)2}^{(2)}}{\rho_2^{(2)}}$ .

Рассмотрим особенности зависимости приведенной ширины щели  $\Delta\omega/\omega$  исследуемой сверхрешетки от концентрации примесных слоев при вариации их по составу и по толщине во второй подрешетке. В этом случае зависимость  $\Delta\omega(C_C, C_T)/\omega$  представлена на рис. 1. Анализ поведения поверхностей  $\Delta\omega(C_C, C_T)/\omega$  показывает, что при конкретных параметрах задачи и величинах концентрации примесных слоев значения  $\Delta\omega$  существенно различны.



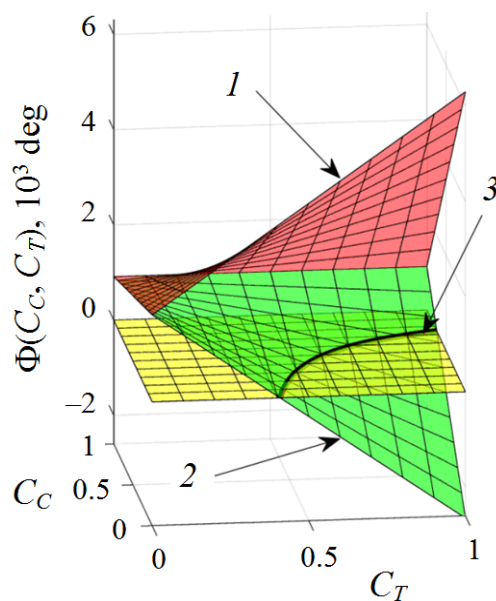
**Рис. 1.** Зависимость величины приведенной запрещенной зоны  $\Delta\omega/\omega$  исследуемой сверхрешетки от концентрации примесных слоев при вариации их по составу  $C_C$  и по толщине  $C_T$ : *а* – при  $a_2^{(1)}/a_1 = 5$ ,  $a_2^{(2)}/a_1 = 0.1$ ; *б* – при  $a_2^{(1)}/a_1 = 10$ ,  $a_2^{(2)}/a_1 = 0.5$ ; поверхности 1 и 2 соответствуют продольной и поперечной модам



Для определенных  $C_C$ ,  $C_T$  значения ширины щели  $\Delta\omega$  велики, т.е. многослойная система является акустически слабопроницаемой, а для других значений концентрации структурных дефектов величина  $\Delta\omega$  (в рамках используемой модели) мала. Причем она обращается в нуль лишь при определенном значении  $C_C$  и произвольных  $C_T$ , следовательно, акустические возбуждения определенной частоты проходят беспрепятственно через многослойники с соответствующими характеристиками материала.

**Моделирование концентрационной зависимости удельного угла вращения неидеального 1D-многослойника.** На основе приведенной выше теории рассмотрим конкретную модельную двухподрешеточную систему, состоящую из слоев парателлуриата – первая подрешетка и слоев  $\alpha$ -кварца – вторая подрешетка, которая варьируется как по составу (с замещением на слои парателлуриата, концентрация такого рода дефектов  $C_C$ ), так и по толщине (концентрация таких дефектов  $C_T$ ). Полагаем, что в идеальном случае толщина слоев обеих подрешеток одинаковая. Учтем также, что удельное вращение плоскости поляризации упругой волны  $\varphi_1^{(1)} = \varphi_2^{(2)}$  в направлении акустической оси в слоях парателлуриата составляет 913 deg/cm при 30 МГц, что более чем в 8000 раз превышает ту же величину в слоях  $\alpha$ -кварца в направлении оси [21,22], благодаря более сильной анизотропии упругих свойств и меньшей скорости упругих волн в кристалле парателлуриата [21] по сравнению с кварцем. Отсюда следует, что в выражении (8)  $\Delta\varphi_1^{(1)} = 0$ ,  $\Delta\varphi_2^{(1)} = 0$ ,  $\Delta\varphi_2^{(2)} = \varphi_2^{(2)} - \varphi_2^{(1)} \approx \varphi_2^{(2)}$ . В результате несложных расчетов получена концентрационная зависимость угла вращения плоскости поляризации упругой волны в исследуемой неидеальной 1D-сверхрешетке:

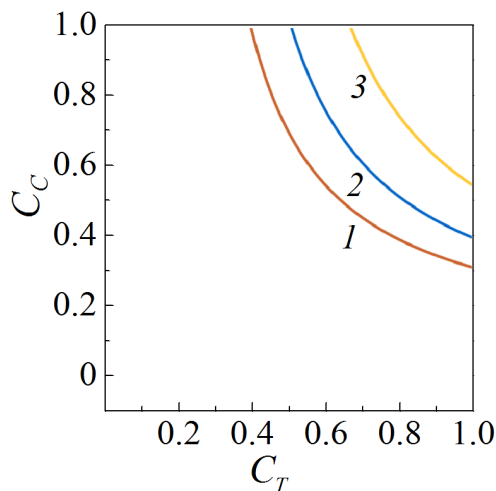
$$\Phi(\omega, C_C, C_T) \equiv \langle \varphi(\omega) \rangle / N a_1^{(1)} = \varphi_1^{(1)}(\omega) \left[ 1 + C_C + C_C C_T \left( a_2^{(2)} / a_1^{(1)} - a_2^{(1)} / a_1^{(1)} \right) \right]. \quad (15)$$



**Рис. 2.** Концентрационная зависимость угла вращения плоскости поляризации  $\Phi(C_C, C_T)$  упругой волны в неидеальной 1D-сверхрешетке: 1 –  $a_2^{(2)} / a_1^{(1)} - a_2^{(1)} / a_1^{(1)} > 0$ ; 2 –  $a_2^{(2)} / a_1^{(1)} - a_2^{(1)} / a_1^{(1)} < 0$ ; 3 – линия нулей функции  $\Phi(C_C, C_T)$

На рис. 2 представлены соответствующие поверхности  $\Phi(C_C, C_T)$  при конкретных значениях параметров:  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 5$ ,  $a_2^{(2)}/a_1^{(1)} = 0.1$ .

**Нули функции концентрационной зависимости.** Представляет интерес исследование нулей концентрационной функции  $\Phi(C_C, C_T)$ , т.е. получение условия отсутствия акустической активности исследуемой фоновой структуры. В общем случае (8) такое исследование сложно. Рассмотрим представленный в предыдущем разделе вариант двухподрешеточной сверхрешетки, в которой разупорядочена (и по составу, и по толщине) только вторая подрешетка. Из соотношения (15) следует, что  $\Phi(C_C, C_T) = 0$  на кривой, лежащей в концентрационной плоскости  $(C_C, C_T)$ . Очевидно, физический смысл имеют лишь области  $(C_C, C_T)$ , ограниченные плоскостью квадрата:  $(C_C, C_T) \in (0, 1)$ . Линия нулей  $\Phi(C_C, C_T) = 0$  попадает в указанный квадрат (рис. 3) при значениях параметров  $a_2^{(2)}/a_1^{(1)}$ ,  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)}$ , удовлетворяющих соотношению  $1 > C_T > 2a_1^{(1)}/(a_2^{(1)} - a_2^{(2)})$ .



**Рис. 3.** Нули функции  $\Phi(C_C, C_T)$  концентрационной зависимости акустической волны в неидеальной 1D-фоновой структуре. При этом  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 5$ , а отношение  $a_2^{(2)}/a_1^{(1)}$  принимает значения 0.1 (для случая 1), 1 (2), 2 (3)

Из выполненных выше расчетов следует, что при определенных значениях толщины слоев изучаемой фоновой структуры величина угла вращения плоскости поляризации  $\Phi(C_C, C_T)$  упругой волны не только обращается в нуль (т.е. структура перестает быть акустически активной), но и становится отрицательной (т.е. направление вращения плоскости поляризации меняется на противоположное, см. рис. 2).

### Заключение

В работе проведено исследование зависимости ширины запрещенной зоны  $\Delta\omega$  и угла вращения  $\Phi(\omega)$  плоскости поляризации упругой волны в неидеальной 1D-сверхрешетке от концентрации структурных дефектов при вариации слоев системы по составу и толщине. Показано, что концентрационное поведение этих величин зависит от конкретных параметров сверхрешетки, поляризации акустических волн, а также от отношения величин

$a_2^{(2)}/a_1^{(1)}$ ,  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)}$ , которые определяют и условие отсутствия акустической активности исследуемой сверхрешетки. Отметим, что на одной и той же частоте звуковой волны для одной и той же сверхрешетки не обязательно найдутся такие значения концентраций  $C_C$ ,  $C_T$ , при которых поперечная и/или продольная моды удовлетворяют условию  $\Delta\omega = 0$ . Как показано на рис. 1, это условие выполняется лишь для определенной области значений  $C_C$ .

Выполненное в работе исследование зависимости ширины нижайшей запрещенной акустической зоны и угла вращения плоскости поляризации упругой волны неидеальных 1D-сверхрешеток от концентрации примесных слоев может оказаться полезным при конструировании акустических композитных материалов, используемых при различных режимах эксплуатации.

1. Л.М. Бреховских, Волны в слоистых средах, Наука, Москва (1973).
2. S. Zhang, C. Xia, N. Fang, Phys. Rev. Lett. **106**, 024301 (2011).
3. J.D. Joannopoulos, S.G. Johnson, J.N. Winn, R.D. Meade, Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, Princeton University Press (2008).
4. В.Ф. Шабанов, С.Я. Ветров, А.В. Шабанов, Оптика реальных фотонных кристаллов, СО РАН, Новосибирск (2005).
5. А.М. Косевич, Письма в ЖЭТФ **74**, 633 (2001).
6. J.B. Pendry, Jensen Li, New J. Phys. **10**, 115032 (2008).
7. V. Rumyantsev, S. Fedorov, E. Shtaerman, Superlattices Microstruct. **47**, 29 (2010).
8. V.V. Rumyantsev, S.A. Fedorov, K.V. Gumennyk, in: Photonic Crystals: Optical Properties, Fabrication and Applications. Chapter 8, W.L. Dahl (ed.), Nova Science Publishers, Inc., NY (2011).
9. А. Яриу, П. Юх, Оптические волны в кристаллах, Мир, Москва (1987).
10. Feng-Ming Li, Yue-Sheng Wang, Int. J. Solids Struct. **42**, 6457 (2005).
11. A.-Li Chen, Yue-Sheng Wang, Physica. **B392**, 369 (2007).
12. Zhi-Zhong Yan, Chuanzeng Zhang, Yue-Sheng Wang, Wave Motion **47**, 409 (2010).
13. R.H. Parmenter, Phys. Rev. **97**, 587 (1955).
14. Дж. Займан, Модели беспорядка, Мир, Москва (1982).
15. T.G. Dargan, R.B. Capaz, Koiler Belita, Braz. J. Phys. **27/A**, 299 (1997).
16. В.В. Румянцев, С.А. Федоров, К.В. Гуменник, Оптика и спектроскопия **110**, 799 (2011).
17. В.В. Румянцев, С.А. Федоров, К.В. Гуменник, Акустический журнал **60**, 327 (2014).
18. А.М. Косевич, Физическая механика реальных кристаллов, Наукова думка, Киев (1981).
19. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская, Основы кристаллофизики, Наука, Москва (1975).
20. Дж. Най, Физические свойства кристаллов, Мир, Москва (1967).
21. А.Ф. Крячко, А.Р. Бестугин, О.В. Шакин, Системы синхронизации, формирования и обработки сигналов № 4, 12 (2017).
22. A.S. Pine, J. Acoust. Soc. Am. **49**, 1026 (1971).

V.V. Rumyantsev, S.A. Fedorov, K.V. Gumennyk, Yu.A. Paladyan

## STUDY OF ACOUSTIC EXCITATIONS IN A NON-IDEAL PHONON 1D-SUPERLATTICE

The specific features of propagation of acoustic excitations through an imperfect 1D-superlattice are studied. Within the frameworks of virtual crystal approximation прибли-

жения (VCA), structural defect concentration dependence of the width of the lowest forbidden acoustic zone an specific angle of rotation of the polarization plane of an elastic wave of a non-ideal (disordered both in the composition and the layer thickness) two-sublattice 1D-phonon crystal is modeled.

**Keywords:** acoustic excitations, non-ideal 1D-phonon crystal, active acoustic medium, virtual crystal approximation

**Fig. 1.** Concentration dependence of reduced forbidden zone of the studied superlattice  $\Delta\omega/\omega$  when the doping layers differ in composition  $C_C$  and in thickness  $C_T$ :  $a$  – at  $a_2^{(1)}/a_1 = 5$ ,  $a_2^{(2)}/a_1 = 0.1$ ;  $\bar{b}$  – at  $a_2^{(1)}/a_1 = 10$ ,  $a_2^{(2)}/a_1 = 0.5$ ; surfaces 1 and 2 are related to the longitudinal and transversal modes, respectively

**Fig. 2.** Concentration dependence of the rotation angle of the polarization plane  $\Phi(C_C, C_T)$  for an elastic wave in a non-ideal 1D-superlattice: 1 –  $a_2^{(2)}/a_1^{(1)} - a_2^{(1)}/a_1^{(1)} > 0$ ; 2 –  $a_2^{(2)}/a_1^{(1)} - a_2^{(1)}/a_1^{(1)} < 0$ ; 3 – zero line of function  $\Phi(C_C, C_T)$

**Fig. 3.** Zeroes of  $\Phi(C_C, C_T)$  concentration dependence of an acoustic wave in an non-ideal 1D-phonon structure. Here  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 5$ , ratio  $a_2^{(2)}/a_1^{(1)}$  is equal to 0.1 (case 1), 1 (2), 2 (3)