

# Скорости распространения продольной и поперечной акустических волн и ангармонизм колебаний кристаллической решетки

© Д.С. Сандитов,<sup>1,2</sup> А.А. Машанов,<sup>1</sup> М.Д. Дармаев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Бурятский государственный университет,  
670000 Улан-Удэ, Россия

<sup>2</sup> Отдел физических проблем Бурятского научного центра СО РАН,  
670047 Улан-Удэ, Россия  
e-mail: Sanditov@bsu.ru

(Поступило в Редакцию 12 января 2009 г.)

Для кристаллических твердых тел установлена линейная корреляция между параметром Грюнайзена и отношением скоростей продольной ( $v_L$ ) и поперечной ( $v_S$ ) акустических волн. Предполагается, что скорости  $v_L$  и  $v_S$  в отдельности являются гармоническими характеристиками, а их отношение ( $v_L/v_S$ ) — ангармонической величиной и определяется отношением сдвиговой и изгибной жесткостей межатомных связей.

PACS: 05.70.-a, 61.43.Fs, 63, 63.20.-c

## Введение

Параметр Грюнайзена  $\gamma_D$  входит в уравнение состояния твердого тела и служит характеристикой ангармонизма колебаний решетки и нелинейности силы межатомного взаимодействия [1]. Величина  $\gamma_D$  определяется изменением частоты колебаний решетки в зависимости от изменения объема системы и обычно определяется из уравнения Грюнайзена по известным экспериментальным данным коэффициента объемного теплового расширения  $\beta$ , изотермического модуля объемного сжатия  $B$ , молярного объема  $V$  и молярной теплоемкости  $C_V$ :

$$\gamma_D = \frac{\beta BV}{C_V}. \quad (1)$$

Беломестных В.Н. [2] на основе уравнения Грюнайзена (1) и выражений, связывающих упругие, тепловые и акустические характеристики кристалла, установил, что параметр Грюнайзена является функцией скоростей распространения продольных ( $v_L$ ) и поперечных ( $v_S$ ) звуковых волн

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left[ \frac{3x^2 - 4}{x^2 + 2} \right], \quad (2)$$

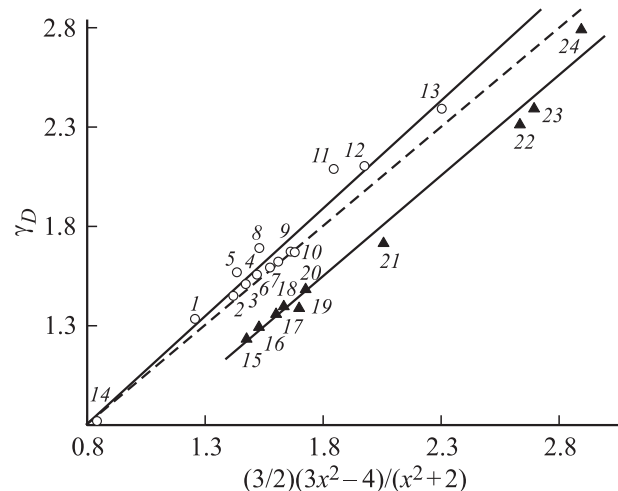
где  $x = v_L/v_S$ .

Настоящая работа посвящена дальнейшему исследованию зависимости параметра Грюнайзена от отношения скоростей продольных и поперечных акустических волн для различных кристаллов.

## Результаты и их обсуждение

Для детальной проверки соответствия формулы Беломестных уравнению Грюнайзена построен график в координатах, соответствующих зависимости (2).

На рис. 1 пунктиром представлена теоретическая зависимость  $\gamma_D(x)$  по соотношению Беломестных (2). На этот рисунок нанесены экспериментальные данные для различных кристаллических твердых тел [2–4]. Как видно, наблюдается значительный разброс точек по отношению к данной зависимости, лишь в первом грубом приближении ее можно принять за линейную. Здесь  $\gamma_D$  — термодинамический параметр Грюнайзена, определяемый по уравнению Грюнайзена (1). Для исследуемых кристаллов используются значения  $\gamma_D$  из работ [2,3].



**Рис. 1.** Зависимость параметра Грюнайзена от функции отношения скоростей продольной ( $v_L$ ) и поперечной ( $v_S$ ) акустических волн  $x = (v_L/v_S)$  для ряда кристаллов. Использованы данные [2–4]. Группа I (○): 1 — LiF, 2 — NaCl, 3 — LiCl, 4 — KCl, 5 — NaF, 6 — NaBr, 7 — LiBr, 8 — KBr, 9 — Fe, 10 — KI, 11 — Co, 12 — Al, 13 — Ag, 14 — Be; группа II (▲): 15 — Y, 16 — NaNO<sub>3</sub>, 17 — NaClO<sub>3</sub>, 18 — Th, 19 — Mg, 20 — RbBr, 21 — Ta, 22 — AgBr, 23 — Pd, 24 — Au.

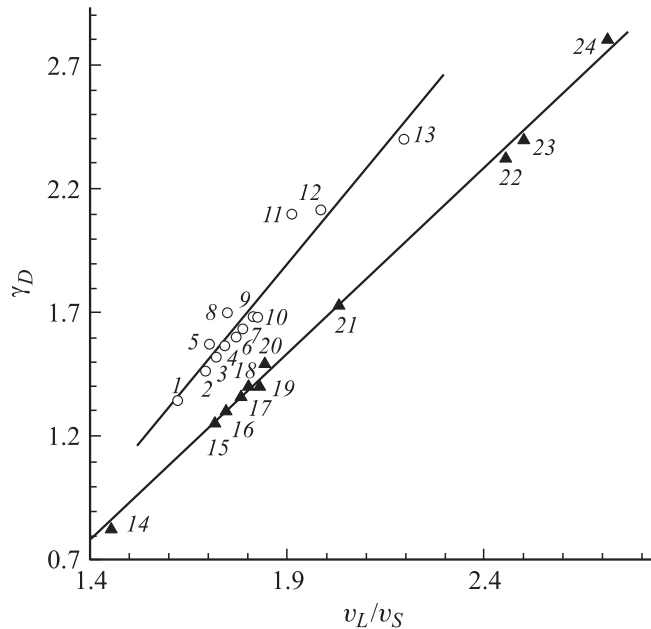
При внимательном изучении графиков рис. 1 можно разделить рассматриваемые кристаллы на две группы, для каждой из которых справедлива линейная зависимость. Для первой группы, в которую входят в основном щелочно-галогидные кристаллы с решеткой типа NaCl, прямая проходит через начало координат, но тангенс угла ее наклона превышает теоретическое значение, равное единице. Прямая для второй группы твердых тел расположена ниже теоретической прямой и практически параллельна последней. Она не проходит через начало координат.

Интересно было проверить характер зависимости  $\gamma_D$  непосредственно от отношения скоростей звука ( $v_L/v_S$ ), а не от сложной функции этого отношения. С этой целью по данным, приведенным на рис. 1, был построен график зависимости  $\gamma_D$  от  $(v_L/v_S)$ , который по внешнему виду оказался практически аналогичным предыдущему, состоящему из двух прямых (рис. 2). В качестве различий можно отметить следующие два момента. Во-первых, разброс точек на рис. 2 вблизи прямых I и II несколько меньше, чем на рис. 1 (см., например, точки 5, 19, 21, 22, 24). Во-вторых, бериллий (точка 14) на рис. 1 входит в первую группу твердых тел, а на рис. 2 — во вторую группу кристаллов.

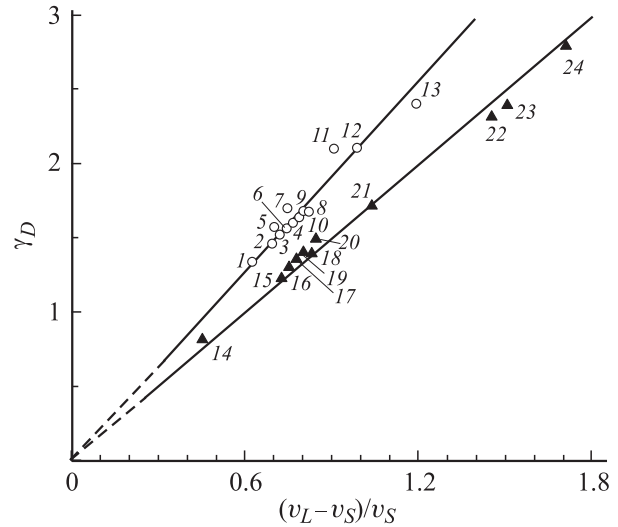
Прямые  $\gamma_D - (v_L/v_S)$  описываются эмпирическим соотношением

$$\gamma_D = C_1 \left( \frac{v_L}{v_S} \right) - C_2,$$

причем оказывается, что у каждой группы твердых тел постоянные  $C_1$  и  $C_2$  практически совпадают ( $C_1 \approx C_2$ ),



**Рис. 2.** Корреляция между параметром Грюнайзена и отношением скоростей звука ( $v_L/v_S$ ). Номера точек соответствуют номерам кристаллов на рис. 1. В первую группу ( $\circ$ ) входят кристаллы (1–13), а во вторую группу ( $\blacktriangle$ ) — кристаллы (14–24).



**Рис. 3.** Корреляция между параметром Грюнайзена и относительной разностью скоростей распространения продольной и поперечной акустических волн. Номера точек соответствуют номерам кристаллов на рис. 1.

поэтому это выражение принимает вид

$$\gamma_D = C \left( \frac{v_L - v_S}{v_S} \right), \quad (3)$$

где  $C \approx \text{const} \approx C_1 \approx C_2$ . У первой группы кристаллов с решеткой NaCl  $C \approx 2$ , а у второй группы —  $C \approx 1.5$ . Следовательно, параметр Грюнайзена для рассмотренных твердых тел определяется относительной разностью значений скоростей распространения продольной и поперечной звуковых волн.

Рис. 3 подтверждает справедливость зависимости (3) для кристаллов, приведенных на рис. 1. Экспериментальные данные в координатах  $\gamma_D$  от  $(v_L - v_S)/v_S$  ложатся на две прямые, проходящие через начало координат.

С целью рассмотрения природы взаимосвязи между параметром Грюнайзена и отношением скоростей распространения продольной и поперечной акустических волн обратимся к модели ансамбля твердых частиц, линейно-упруго взаимодействующих друг с другом при контакте [5,6]. В месте контакта случайно упакованные частицы (сферы) взаимодействуют взаимно перпендикулярными силами: нормальной к плоскости контакта (центральной)  $f_L = k_L x_L$  и тангенциальной (трение)  $f_S = k_S x_S$ , где  $k_L$  и  $k_S$  — нормальная (изгибная) и тангенциальная (сдвиговая) жесткости;  $x_L$  и  $x_S$  — нормальное и тангенциальное смещения частиц из равновесного положения.

Для такой системы коэффициент Пуассона  $\mu$  определяется отношением тангенциальной и нормальной жесткостей  $\lambda = k_S/k_L$  [5]

$$\mu = \frac{1 - \lambda}{4 + \lambda}.$$

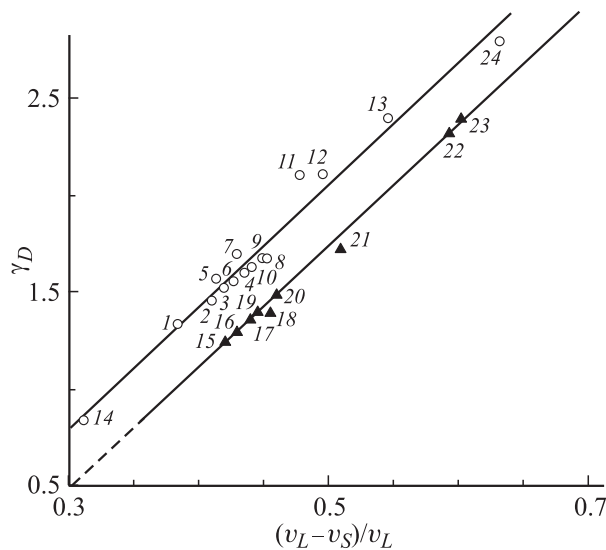


Рис. 4. Зависимость  $\gamma_D$  от  $(v_L - v_S)/v_L$ . Номера точек соответствуют номерам твердых тел на рис. 1.

В свою очередь коэффициент Пуассона однозначно связан с параметром Грюнайзена [3]

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left( \frac{1 + \mu}{2 - 3\mu} \right).$$

Из этих соотношений следует, что  $\gamma_D$  является функцией отношения сдвиговой и изгибной жесткостей межатомных связей  $\lambda$

$$\gamma_D = \frac{3}{2(1 + \lambda)}. \quad (4)$$

При  $\lambda = 0$  ( $k_S \ll k_L$ ) имеем  $\gamma_D = 1.5$ , что соответствует ансамблю частиц с центральными силами, например, кристаллу NaCl ( $\gamma_D \approx 1.6$ ). С ростом  $\lambda$  значение  $\gamma_D$  уменьшается, поскольку чем больше сила трения между частицами ( $k_S$  относительно  $k_L$ ), тем устойчивее система и тем меньше интенсивность ангармонических колебаний решетки ( $\gamma_D$ ).

Мерой  $\lambda$  может служить отношение квадратов поперечной и продольной скоростей звука

$$\lambda = \frac{k_S}{k_L} \cong \frac{G}{E} \cong \frac{\rho v_S^2}{\rho v_L^2} = \left( \frac{v_S}{v_L} \right)^2, \quad (5)$$

где  $G$  — модуль сдвига,  $E$  — модуль упругости одноосного растяжения,  $E = B_A + (4G/3)$ ,  $\rho$  — плотность. Значительным ангармонизмом  $\gamma_D = 2-3$  обладают такие мягкие пластичные материалы, как золото, серебро, медь, характеризующиеся небольшими значениями  $\lambda = (v_S/v_L)^2 \approx 0.1-0.2$ , а низкий ангармонизм присущ твердому бериллию ( $\gamma_D = 0.83$ ) с большим значением  $\lambda = (v_S/v_L)^2 \approx 0.5$ . Ионный кристалл NaCl с центральными силами взаимодействия частиц ( $\gamma_D = 1.6$ ) занимает промежуточное положение между ними  $\lambda = (v_S/v_L)^2 \approx 0.3$ .

Подставив (5) в уравнение (4), получаем следующую связь между параметром Грюнайзена и скоростью звука

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \frac{v_L^2}{(v_L^2 + v_S^2)}. \quad (6)$$

Можно убедиться, что экспериментальные данные для приведенных выше кристаллов (рис. 1) в координатах  $\gamma_D - v_L^2/(v_L^2 + v_S^2)$  ложатся на аналогичные прямые, как и на рис. 1 (с небольшими различиями).

Все известные потенциалы взаимодействия атомов (молекул) являются или центральными, или значительно более жесткими в нормальном направлении, чем в тангенциальном ( $\lambda < 1$ ). Например, жесткость химических связей существенно выше жесткости валентных углов. При малых  $\lambda$  выражение (4) можно преобразовать ( $1 + \lambda \approx (1 - \lambda)^{-1}$ ) и с учетом (5) привести к виду

$$\gamma_D \approx \frac{3}{2} \left( \frac{v_L^2 - v_S^2}{v_L^2} \right). \quad (7)$$

Зависимость  $\gamma_D$  от  $(v_L^2 - v_S^2)/v_L^2$  на графике оказывается линейной и аналогичной (6), что указывает на оправданность перехода от равенства (6) к его аналогу (7). Легко убедиться, что получается практически такая же закономерность (линейная зависимость), если в равенстве (7) скорости звука брать не в квадрате, а в первой степени (рис. 4). Это можно объяснить тем, что в преобразованном варианте соотношения (7)

$$\gamma_D \approx \frac{3}{2} A_1 \left( \frac{v_L - v_S}{v_L} \right) \quad (8)$$

множитель  $A_1 = (v_L + v_S)/v_L$  является практически постоянным или слабой функцией  $v_L$  и  $v_S$  в сравнении со вторым множителем (по крайней мере, у твердых тел одного структурного типа).

Таким образом, между параметром Грюнайзена и отношением скоростей звука, а также их относительной разностью наблюдается вполне определенная взаимосвязь.

Поскольку  $\gamma_D$  является сугубо ангармонической величиной, необходимо предположить, что отношение скоростей продольной и поперечной звуковых волн ( $v_L/v_S$ ) зависит от ангармонизма — нелинейности силы межатомного взаимодействия. По-видимому, скорости звука  $v_L$  и  $v_S$  в отдельности относятся к гармонической характеристике, а отношение ( $v_L/v_S$ ) оказывается ангармонической величиной.

## Заключение

Уравнение Беломестных (2) лишь в первом приближении согласуется с экспериментальными данными. По отношению к данному уравнению (зависимости) исследованные кристаллы делятся на две группы. Параметр Грюнайзена является линейной функцией относительной разности значений скоростей распространения продольной и поперечной акустических волн, а также отношения этих скоростей.

Основной причиной взаимосвязи между параметром Грюнайзена и отношением скоростей звуковых волн служит их однозначная зависимость от отношения сдвиговой и изгибной жесткостей межатомных связей.

Авторы выражают благодарность Беломестных В.Н. за обсуждение результатов и внимание к работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 05-01-00071а.

## Список литературы

- [1] *Лейбфрид Г., Людвиг В.* Теория ангармонических эффектов в кристаллах. М.: ИИЛ, 1963. 232 с.
- [2] *Беломестных В.Н.* // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. Вып. 3. С. 14–19.
- [3] *Беломестных В.Н., Теслева Е.П.* // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 8. С. 140–142.
- [4] *Anderson O.* // Physical Acoustics. Vol. III. Part B. Lattice Dynamics / Ed. by W.P. Mason. NY–London: Academic, 1965. P. 62–121.
- [5] *Берлин Ал.Ал., Ротенбург Л., Басэрст Р.* // Высокомолек. соед. А. 1992. Т. 34. № 7. С. 6–32.
- [6] *Берлин Ал.Ал., Ротенбург Л., Басэрст Р.* // Высокомолек. соед. А. 1993. Т. 35. № 7. С. 857–863.