

- Continuous Wave, Time and Frequency Domain Technology / Ed. B. Chance et al.: Proc. SPIE. 1996. **2925**. P. 160.
13. *Prahl S., Welch A.* // Tissue Optics / Ed. V.V. Tuchin: SPIE. 1994. **VMS 102**. P. 129.
14. *Tuchin V.V.* // Tissue Optics. / Ed. V.V. Tuchin: SPIE. 1994. **VMS 102**. P. 621.
15. *Тучин В.В.* // УФН. 1996. **167**, № 5. С. 157.
16. *Anderson R.R., Parrish J.A.* // Tissue Optics / Ed. V.V. Tuchin: SPIE. 1994. **VMS 102**. P. 29.
17. *Kolinko V.G., de Mul F.F.M., Greve J., Priezzhev A.V.* // J. Biomed. Opt. 1998. **3**, No. 2.

Поступила в редакцию
02.07.97

АКУСТИКА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА

УДК 534.222.2

АНОМАЛИИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И АКУСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛА ТГС В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В УСЛОВИЯХ НЕОДНОРОДНОГО ДАВЛЕНИЯ

О. Ю. Сердобольская, В. А. Румянцева

(кафедра акустики)

Рассчитаны температурные зависимости диэлектрической проницаемости, скорости и затухания звука вблизи фазового перехода второго рода в условиях неоднородного одноосного давления. Наличие градиента давления приводит к расширению температурной области, в которой наблюдаются аномалии физических свойств. Наиболее сильное изменение затухания звука происходит, когда градиент давления перпендикулярен волновому вектору акустической волны.

При исследовании свойств кристаллов вблизи фазовых переходов часто возникает необходимость подвергнуть образцы механическим одноосным напряжениям. При этом практически невозможно обеспечить постоянное напряжение по всему объему образца, что отражается на измеряемых температурных зависимостях физических характеристик. Поскольку температура перехода зависит от давления, при неоднородном давлении каждой точке в объеме образца соответствует своя локальная температура перехода, и общий эффект усредняется.

Пусть в одноосном сегнетоэлектрике имеется переход второго рода типа порядок–беспорядок с квадратичной связью параметра порядка и деформации, который описывается термодинамическим потенциалом вида

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{A}{2}P^2 + \frac{B}{4}P^4 + \frac{c}{2}u^2 + quP^2, \quad (1)$$

где параметром порядка является поляризация P вдоль полярной оси, u — деформация, $A = A_0(T - T_0)$, $B > 0$, c — модуль упругости, q — электрострикционная постоянная. Температура фазового перехода T_0 зависит от внешнего напряжения линейно; для одноосного давления σ_i вдоль i -й оси $T_0 = T_c - a_i\sigma_i$. Температура перехода может как повышаться, так и понижаться с давлением, что зависит от знака соответствующей электрострикционной константы.

Согласно теории Ландау, зависимость обратной диэлектрической восприимчивости от температуры в области фазового перехода имеет вид [1]

$$\chi^{-1}(\sigma, T) = \begin{cases} A_0(T - T_0), & T > T_0, \\ -2A_0(T - T_0), & T < T_0. \end{cases} \quad (2)$$

Рассмотрим влияние неоднородности давления на температурное поведение диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика. Дальнейшие расчеты будут проведены для кристалла триглицинсульфата (ТГС) — классического представителя одноосных сегнетоэлектриков, имеющего фазовый переход второго рода при температуре $T_c = 49,5^\circ\text{C}$ (полярная ось 2). Для простоты предположим, что одноосное давление $\sigma = \sigma_2$ направлено вдоль полярной оси Y , градиент давления также направлен вдоль полярной оси и распределение давления равновероятно в интервале $\sigma_0 - \Delta\sigma < \sigma < \sigma_0 + \Delta\sigma$. Тогда температурная зависимость усредненной обратной диэлектрической восприимчивости χ_2 может быть получена интегрированием (2):

$$\chi^{-1}(Y) = (2\Delta\sigma)^{-1} \int \chi^{-1} d\sigma = \begin{cases} K(-Y + \sigma_0), & Y < \sigma_0 - \Delta\sigma, \\ (2\Delta\sigma)^{-1} \left[\frac{K}{2}(\sigma_0 + \Delta\sigma - Y)^2 + (\sigma_0 - \Delta\sigma - Y)^2 \right], & \sigma_0 - \Delta\sigma < Y < \sigma_0 + \Delta\sigma, \\ -K(Y + \sigma_0), & Y > \sigma_0 + \Delta\sigma. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $Y = (T - T_c)/a_i$, $K = a_i A_0$, $A_0 = 3,4 \times 10^{-3} \text{ м} \cdot \Phi^{-1} \cdot \text{град}^{-1}$, $a_2 = 9,1 \cdot 10^{-8} \text{ град/Па}$, $a_3 = 16 \cdot 10^{-8} \text{ град/Па}$. Минимальное значение обратной восприимчивости $\chi_{2\text{min}}^{-1} = 2K\Delta\sigma/3$ соответствует точке $Y = \sigma_0 + (\Delta\sigma/3)$, а не $Y = \sigma_0$. Если считать, что распределение давления не зависит от самого давления, и $\Delta\sigma$ пропорционально σ_0 , то видно, что минимальное значение обратной восприимчивости линейно возрастает с давлением. Соответственно уменьшается максимум диэлектрической проницаемости при фазовом переходе. На рис. 1 представлены результаты расчета обратной диэлектрической восприимчивости при различных величинах внешнего давления и градиенте давления $\Delta\sigma = 0, 3\sigma_0$.

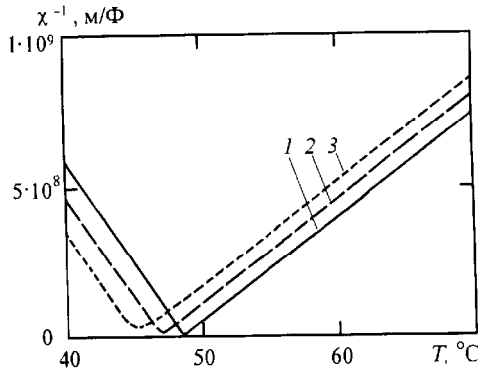


Рис. 1. Температурные зависимости обратной диэлектрической проницаемости ТГС при неоднородном давлении: $\Delta\sigma/\sigma_0 = 0, 3$; $\sigma_0 = 10^7$ (1), $3 \cdot 10^7$ (2), $5 \cdot 10^7$ Па (3)

Теперь рассмотрим, как влияет неоднородность давления на измеряемое температурное поведение акустических характеристик — скорости и затухания звука. При использовании обычной импульсной методики для плоских объемных волн измерение скорости и затухания сводится к измерению фазы (времени задержки) и амплитуды сигнала. В отсутствие градиентов давления при переходе второго рода скорость звука v испытывает скачок Δv в точке T_0 , а изменение затухания с температурой:

$$\alpha = \frac{\Delta v}{v^2} \frac{\omega^2 \tau}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad T - T_0 < 0, \quad (4)$$

$$\alpha = 0, \quad T - T_0 > 0.$$

Здесь τ — время релаксации параметра порядка, ω — частота звука. Для ТГС в сегнетоэлектрической фазе $\tau = (2LA_0(T_0 - T))^{-1}$, где $2LA_0 = 3,5 \times 10^{-11} \text{ К}^{-1} \cdot \text{с}$. Здесь L — кинетический коэффициент в уравнении релаксации. Дальнейшие расчеты проведены для продольной волны вдоль оси Z в ТГС, для которой относительное изменение скорости звука $\Delta v/v = 0,06$, и $v = 4,02 \cdot 10^3 \text{ м/с}$ — значение скорости звука в параэлектрической фазе.

Переходя к неоднородному давлению, можно рассмотреть два случая для $\sigma = \sigma_3$.

1. Градиент давления направлен вдоль волнового вектора (по оси Z). Геометрическим местом точек

с одинаковой температурой перехода является плоскость, параллельная волновому фронту, следовательно, фронт волны при распространении звука остается плоским. Эффективный коэффициент затухания имеет вид

$$\langle \alpha \rangle = \frac{1}{2\Delta\sigma} \int_{\sigma_0 - \Delta\sigma}^{\sigma_0 + \Delta\sigma} \alpha(\sigma, T) d\sigma, \quad (5)$$

где подынтегральное выражение берется из (4) с учетом зависимости T_0 от давления, откуда можно получить выражения для $\langle \alpha \rangle$ в виде

$$\langle \alpha \rangle = \begin{cases} 0, & T > T_c + a_3(\sigma_0 + \Delta\sigma), \\ \frac{\Delta v}{2v^2} \frac{\omega^2/A_0L}{2a_3\Delta\sigma} \times \\ \times \ln \frac{(\omega/2A_0L)^2 + (T_c + a_3(\sigma_0 + \Delta\sigma) - T)^2}{(\omega/2A_0L)^2}, & T_c + a_3(\sigma_0 - \Delta\sigma) < T < \\ < T_c + a_3(\sigma_0 + \Delta\sigma), \\ \frac{\Delta v}{2v^2} \frac{\omega^2/A_0L}{2a_3\Delta\sigma} \times \\ \times \ln \frac{(\omega/2A_0L)^2 + (T_c + a_3(\sigma_0 + \Delta\sigma) - T)^2}{(\omega/2A_0L)^2 + (T_c + a_3(\sigma_0 - \Delta\sigma) - T)^2}, & T < T_c + a_3(\sigma_0 - \Delta\sigma). \end{cases} \quad (6)$$

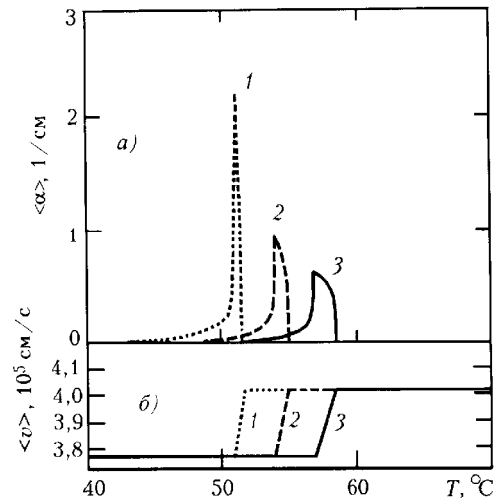


Рис. 2. Температурные зависимости коэффициента затухания (а) и скорости звука (б) в ТГС при продольном градиенте давления: $\Delta\sigma/\sigma_0 = 0, 1$; $\sigma_0 = 10^7$ (1), $3 \cdot 10^7$ (2), $5 \cdot 10^7$ Па (3)

Результаты расчета температурной зависимости эффективных величин коэффициента затухания $\langle \alpha \rangle$ и скорости звука $\langle v \rangle$ представлены на рис. 2, 3 для продольной волны на частоте $\omega/2\pi = 30 \text{ МГц}$. Одноосное давление направлено вдоль оси Z . На рис. 2 кривые 1–3 соответствуют различным значениям среднего давления и одному и тому же значению $\Delta\sigma/\sigma_0 = 0, 1$. Как видно из рис. 2, величина максимального затухания при увеличении давления уменьшается, а сами пики затухания расширяются,

сохраняя несимметричный вид, характерный для сегнетоэлектрических переходов второго рода без пьезоэффекта в парафазе. Максимум затухания при неоднородном давлении смещен в сторону низких температур. Если при однородном давлении он соответствует температуре $T_{\max} = T_0 - (\omega/2LA)$, то при наличии градиента давления максимум усредненного коэффициента затухания соответствует температуре $T_{\max} = T_0 - [(a_3\Delta\sigma)^2 + (\omega/2La_3)^2]$. Эффективная скорость звука линейно зависит от температуры в интервале $T_0 \pm (a_3\Delta\sigma)$ и не зависит от T вне этого интервала.

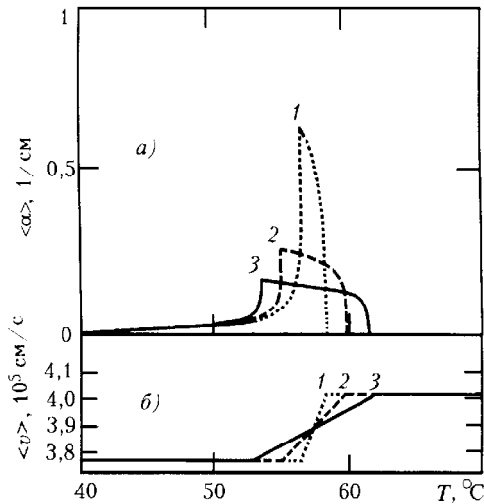


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициента затухания (а) и скорости звука (б) в ТГС при продольном градиенте давления: $\sigma_0 = 5 \cdot 10^7$ Па; $\Delta\sigma/\sigma_0 = 0, 1$ (1), 0,3 (2) и 0,5 (3)

На рис. 3 показаны семейства температурных зависимостей затухания и скорости звука при фиксированной величине давления и различных значениях $\Delta\sigma/\sigma_0$.

2. Градиент давления направлен перпендикулярно волновому фронту. В этом случае картина существенно усложнится, так как волновой фронт нельзя считать плоским, и сигнал на приемном конце акустической линии будет результатом интерференции волн, пришедших с различной скоростью. В приближении геометрической акустики усредненный сигнал с приемного преобразователя можно представить следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{A_0}{N} \sum_{i=1}^N \exp(-\alpha_i l + j\omega l/v_i), \quad (7)$$

где l — длина акустической линии. Модуль и фаза усредненного сигнала позволяют определить эффективные скорость и затухание звука. При расчете на ЭВМ генерируется N случайных значений σ_i , равномерно распределенных в интервале $\sigma_0 - \Delta\sigma < \sigma_i < \sigma_0 + \Delta\sigma$. Для каждого значения вычисляется соответствующая температура перехода, скорость и

затухание звука. При расчетах длина акустической линии выбиралась равной 0,7 см. Расчетные кривые, представленные на рис. 4, получены для разных значений σ_0 и $\Delta\sigma/\sigma_0 = 0, 1$. Рисунок 5 соответствует фиксированному значению σ_0 и различным значениям $\Delta\sigma/\sigma_0$. Обращает на себя внимание тот факт, что температурные зависимости эффективного затухания становятся все более симметричными и изрезанными при увеличении давления и градиента давления. Максимальное значение затухания с ростом $\Delta\sigma$ практически не меняется. Местоположение отдельных пиков затухания случайно, но общий характер кривых сохраняется при выборе других значений σ_i .

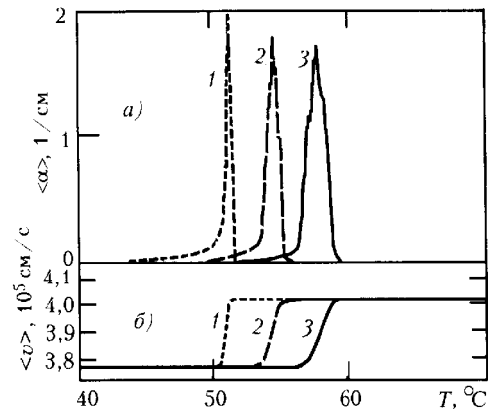


Рис. 4. Температурные зависимости коэффициента затухания (а) и скорости звука (б) в ТГС при поперечном градиенте давления: $\Delta\sigma/\sigma_0 = 0, 1$; $\sigma_0 = 10^7$ (1), $3 \cdot 10^7$ (2) и $5 \cdot 10^7$ Па (3)

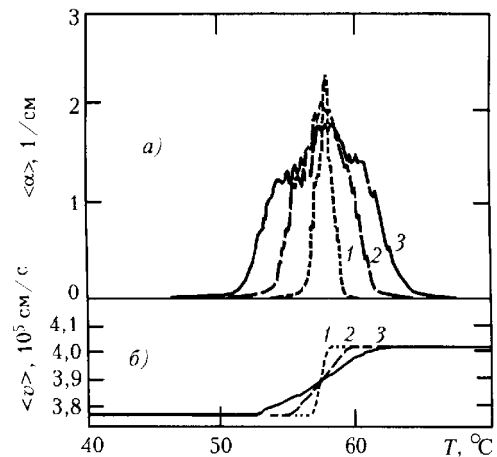


Рис. 5. Температурные зависимости коэффициента затухания (а) и скорости звука (б) в ТГС при поперечном градиенте давления $\sigma_0 = 5 \cdot 10^7$ Па; $\Delta\sigma/\sigma_0 = 0, 1$ (1), 0,3 (2), 0,5 (3)

Приведенные теоретические исследования показали, что неоднородность давления, которой в экспериментах практически невозможно избежать, значительно влияет на измеряемые диэлектрические и акустические характеристики кристаллов в области фазового перехода. Вследствие неоднородности давления температурные зависимости этих характерис-

тик сильно размываются, что экспериментально наблюдалось в работах [2, 3]. Заметим, что «старение» кристаллов, связанное с увеличением числа дефектов, также приводит к размытию диэлектрических и акустических аномалий в области перехода за счет возникновения локальных электрических полей, упругих напряжений и их градиентов.

Литература

1. Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнето-электрических явлений в кристаллах. М., 1983.
2. Itai K.J. // Phys. Soc. Japan. 1974. No. 4. P. 1069.
3. Зарембо Л.К., Красильников В.А., Румянцев В.А., Сердобольская О.Ю. // Акуст. журн. 1995. 41, № 5. С. 784.

Поступила в редакцию
24.06.97

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.1

РАСЧЕТ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ МЕТАЛЛОВ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛОТНОЙ УПАКОВКОЙ

В. М. Силюнов, И. А. Гляненько

(кафедра физики твердого тела)

Методом модельного потенциала в гармоническом приближении с учетом взаимодействия до четвертой координационной сферы проведен расчет упругих постоянных Mg, Zr и Ti. Как в случае Mg, так и в случае переходных металлов Zr и Ti рассчитанные значения упругих постоянных оказались близкими к экспериментальным. Для Zr и Ti наиболее близкими к экспериментальным оказались значения упругих постоянных C_{12} , C_{13} , C_{33} , а для C_{11} и C_{44} расхождения составили около 20%.

В настоящее время метод модельного потенциала достаточно широко применяется для изучения многих важных свойств металлов и сплавов, таких как энергия упорядочения, устойчивость фаз, фононные спектры, плотность электронных состояний и т.п. Наиболее успешным оказалось применение псевдопотенциалов для металлов с ОЦК и ГЦК структурами [1–3]. В то же время недостаточно полно исследована возможность использования модельных потенциалов для расчета подобных характеристик ГПУ металлов и сплавов, в частности переходных элементов. Упругие постоянные ГПУ металлов могут быть рассчитаны, если известны значения потенциалов межатомного взаимодействия $F(r)$. В работе [4] при вычислении $F(r)$ предполагается знание распределения электронной плотности вокруг ядер. В этой работе проводился расчет упругих постоянных для Mg с применением потенциала, построенного на основе распределения электронной плотности в рамках метода функционала плотности. Однако применение использовавшихся в [4] достаточно громоздких формул для переходных элементов представляет значительные трудности. В то же время расчет упругих постоянных как для простых, так и для переходных металлов может быть проведен в рамках метода модельного потенциала. Целью данной работы является применение метода модельного потенциала для вычисления упругих постоянных ряда металлов с ГПУ структурой.

Методика расчета

Как отмечалось в работе [4], в гармоническом приближении для расчета упругих постоянных элементов с ГПУ структурой можно ограничиться рассмотрением координационных сфер до четвертой включительно. В этом приближении упругие постоянные могут быть рассчитаны с использованием выражений [5, 6]:

$$C_{11} = \sqrt{3}(3\alpha - A_1 - L)/2c,$$

$$C_{12} = C_{11} - \frac{1}{\sqrt{3}c} \times \\ \times [3(\alpha - 3A_1) - 3B_1 - B_2 - 12G_1 - 4G_2 + P],$$

$$L = \left[(2B_2 + G_2 + 3G_1)(3B_1 + B_2 + 8G_2) + \right. \\ \left. + 2G_2(3B_1 + B_2) \right] / 3(B_1 + B_2 + G_1 + G_2),$$

$$C_{13} = \frac{2}{a}(2G_4 - B_4) - C_{44},$$

$$C_{33} = \frac{c}{\sqrt{3}a^2} [-3(B_3 + G_3) + 4\delta],$$

$$C_{44} = -\frac{2}{\sqrt{3}c} (3A_2 + B_3 + 4G_3),$$

$$P = \frac{(B_1 - B_2 - 2G_1 + 2G_2)^2}{B_1 + B_2 + G_1 + G_2},$$

$$\alpha = -[k_1(1) + C_B(1)], \quad A_1 = A_2 = C_B(1), \quad A_3 = 0,$$