ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 534.2

ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ В α- И β-ФАЗАХ КВАРЦА

К. Н. Баранский, И. В. Шляхов

(*кафедра физики полимеров и кристаллов*)

E-mail: slakhov@polly.phys.msu.ru

Определены направления фокусировки фононов в α- и β-фазах кварца в интервале температур от 20 до 600 °C, включающем переход второго рода при $T_c = 573$ °C. Исследовано изменение фокусировки с температурой как в плоскости симметрии, так и в пространстве. Показано, что с повышением температуры фокусировка фононов в α-фазе ослабляется, а в β-фазе исчезает: все волны становятся практически обыкновенными.

Упругие, пьезоэлектрические и диэлектрические свойства кварца изучены во всем интервале температур от -273 до 600 °C [1–4]. Это позволяет исследовать температурную зависимость условий распространения в нем акустических волн и явления фокусировки фононов. Фокусировкой фононов принято называть концентрацию направлений векторов лучей $\mathbf{s}$, групповых скоростей $\mathbf{W}$ и потоков энергии акустических волн и тепловых фононов около направлений, соответствующих локальным максимумам их групповой скорости. К этим направлениям отклоняются векторы $\mathbf{W}$ необыкновенных волн от направлений их волновых нормалей $\mathbf{n}$ [5]. Фокусировка фононов в кварце при 20 °C уже рассмотрена нами [6]. Особый интерес представляет окрестность температуры $T_c = 573$ °C фазового перехода второго рода из α-фазы в β-фазу кварца. Упругие константы в α-фазе уменьшаются с ростом температуры от -273 °C до комнатной температуры линейно. При дальнейшем повышении температуры скорость уменьшения их величины возрастает по мере приближения к T_c, при которой они достигают своих минимальных значений. В β-фазе упругие константы с увеличением температуры медленно растут.

Для определения условий распространения волн и направлений фокусировки рассчитываются векторы групповой $\mathbf{W}$ и фазовой $\mathbf{V}$ скоростей волн каждой поляризации, соответствующие заданному равномерному распределению волновых нормалей $\mathbf{n}$. Сначала рассматриваются направления $\mathbf{n}$ в одной из трех плоскостей симметрии X_2OX_3. На рис. 1 эта плоскость представлена в кристаллофизической системе координат: абсцисса и ордината графика направлены соответственно по осям симметрии кристалла OX_2 и OX_3. Концы векторов скоростей, выходящих из начала координат, образуют контуры сечений поверхностей фазовых и групповых скоростей. По осям координат графика отложены компоненты векторов скоростей $\mathbf{W}$ и $\mathbf{V}$ в м/с. Ось OX_1 в центре. Внешний круг — шкала угла θ, отсчитываемого от положительного направления оси OX_3. Векторы $\mathbf{W}$ отклоняются от направлений $\mathbf{n}$, не выходя из плоскости симметрии. Последовательно с постоянным шагом $\Delta\theta_n = 1^\circ$ перебираются направления нормали $\mathbf{n}$, задаваемые углом θ_n.

Значками изображены полученные контуры сечения поверхностей групповых скоростей $\mathbf{W}$ и тонкими линиями — фазовые скорости $\mathbf{V}$ квазипродольных QL-волн (внешний контур), квазипоперечных QT-волн (контур с самопересечениями) и поперечных T-волн (контур в виде овала). Представлены сечения поверхностей скоростей для температур 20, 510, 571 и 600 °C до и после фазового перехода.

Видно, что при 20 °C сгущения (фокусировка) и разряжения (дефокусировка) векторов $\mathbf{W}$ образуются около направлений касания контуров $\mathbf{W}$ и $\mathbf{V}$, по которым распространяются обыкновенные волны ($\mathbf{V} = \mathbf{W}$). На внешнем контуре QL-волн направлениями фокусировки служат продольные нормали $\theta_n \approx -27^\circ$ и $+46^\circ$, а продольная нормаль $\theta_n \approx -73^\circ$ — направлением дефокусировки. На контуре T-волн направлением фокусировки является большая ось его овала, $\theta_s \approx -33^\circ$. На контуре $\mathbf{W}$ QT-волн видны особенности в форме ласточкиных хвостов около его самопересечений, ограниченные точками заострения. Между точками заострения концентрируются векторы $\mathbf{W}$ QT-волн так, что каждому направлению в этих областях соответствуют три вектора $\mathbf{W}$ QT-волн с разными $\mathbf{n}$.

На рис. 1 видно, что уже при 510 °C, за 63 °C до T_c исчезла одна область ласточкина хвоста ($5^\circ < \theta < 15^\circ$ на контуре QT-волн и осталось лишь обычное направление фокусировки около максимума $\mathbf{W}$. При температуре 571 °C в окрестности T_c в α-фазе видно, что перед фазовым переходом сузился и второй ласточкин хвост и резко уменьшились скорости и их зависимость от направления. Существенно уменьшилась концентрация векторов $\mathbf{W}$ около направлений фокусировки. При температуре 600 °C видно, что в β-фазе отсутствует фокусировка фононов и значительно расширились области касания контуров $\mathbf{V}$ и $\mathbf{W}$, по которым распространяются

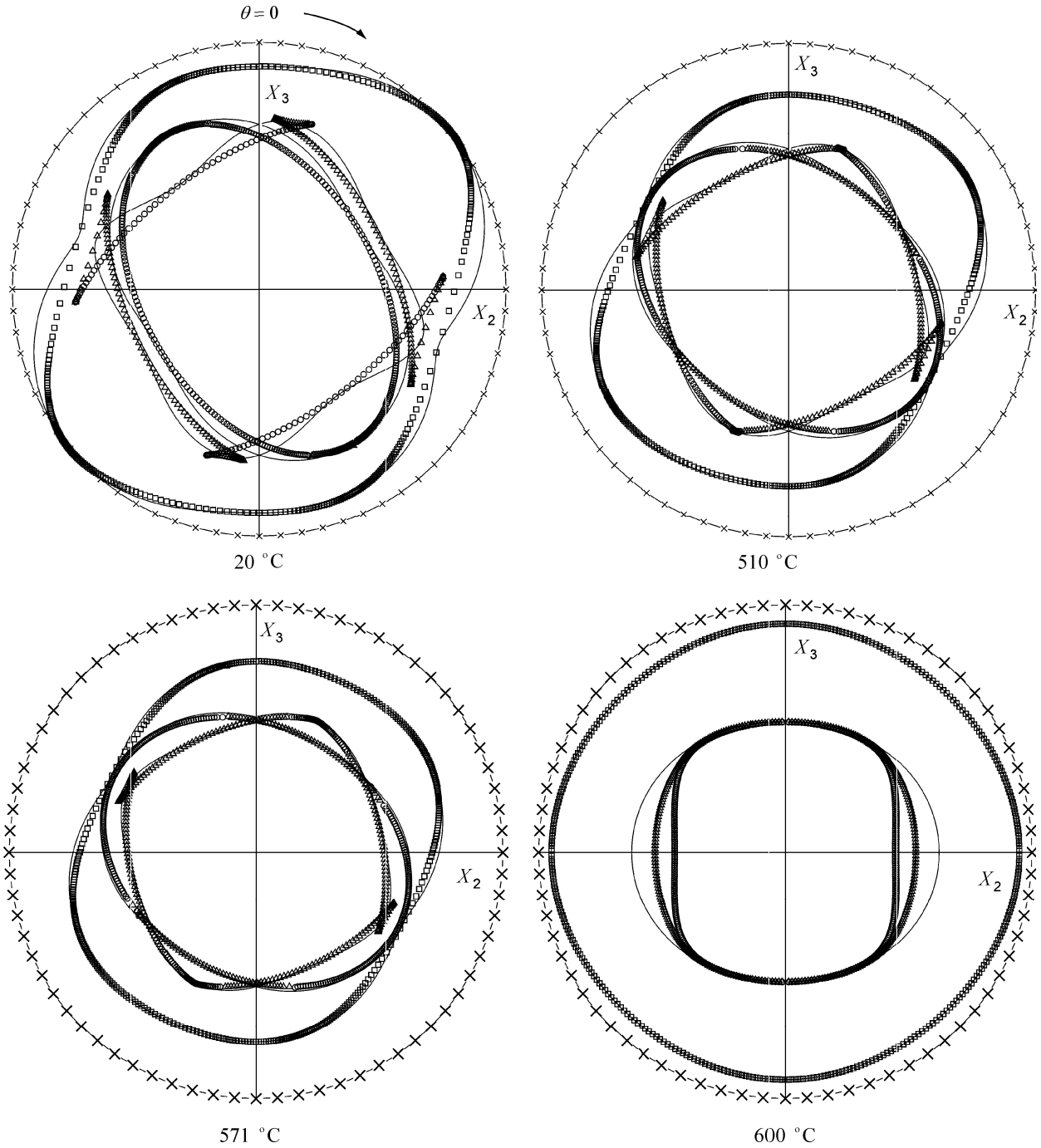

Рис. 1. Сечения поверхностей фазовых (сплошные линии) и групповых (значки) скоростей акустических волн в кварце плоскостью симметрии его упругих свойств X_2OX_3 при температурах 20, 510, 571 °C (α-кварц) и 600 °C (β-кварц)

обыкновенные волны. Полностью исчезли ласточкины хвосты в контуре QT-волн.

Количественной оценкой фокусировки векторов $\mathbf{W}$ в плоскости симметрии служит отношение $M = \Delta\theta_n/\Delta\theta_s$ для выбранного направления $\mathbf{n}$ к интервалу $\Delta\theta_s$, в котором оказываются соответствующие направления векторов $\mathbf{W(n)}$. Температурная зависимость M для направления продольной нормали $\theta_n = +46°$ представлена на рис. 2. Ее вид, подобный температурной зависимости упругих постоянных, типичен для фазовых переходов второго рода.

Для получения картины пространственного распределения лучей необыкновенных продольных QL-волн рассчитывались векторы $\mathbf{s}$ при равномерном распределении их нормалей $\mathbf{n}$. Перебирались значения θ_n и угла φ_n, отсчитываемого от положительного направления оси OX_1, которые определяют направления нормалей. Их шаги перебора $\Delta\theta_n$ и $\Delta\varphi_n$ выбирались так, чтобы всем выбранным направлениям нормалей соответствовал заданный телесный угол $\Delta\Omega_n = \sin\theta_n\Delta\theta_n\Delta\varphi_n = \mathrm{const}$. Из этого условия при постоянном шаге $\Delta\theta_n$ для каждого θ_n определялся шаг $\Delta\varphi_n$. На рис. 3 точками изображены рассчитанные для этих нормалей $\mathbf{n}$ направления

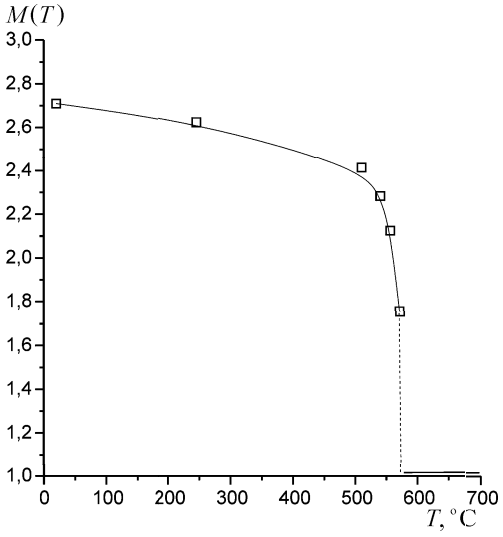

Рис. 2. Температурная зависимость параметра фокусировки $M = \Delta\theta_n/\Delta\theta_s$ около направления продольной нормали $\theta = +46°$

лучей **s**. Полученные картины пространственного распределения лучей **s** необыкновенных QL-волн даны для 20, 510, 571 и 600 °C. Центр картин соответствует оси OX_3, внешний круг служит шкалой углов φ_s, а по радиусу линейно отсчитываются углы θ_s, определяющие направления векторов лучей **s** QL-волн, изображенные квадратиками. Точка $\varphi_s = 0$ соответствует оси OX_1, а точка $\varphi_s = 90°$ — оси OX_2. Видно, что области фокусировки расположены около направлений продольных нормалей, $\theta_n = +46°$, лежащих в трех плоскостях симметрии X_2OX_3. Сравнивая картины фокусировки фононов, полученные для этих температур видно, что если картины для 20 и 510 °C практически одинаковы, то

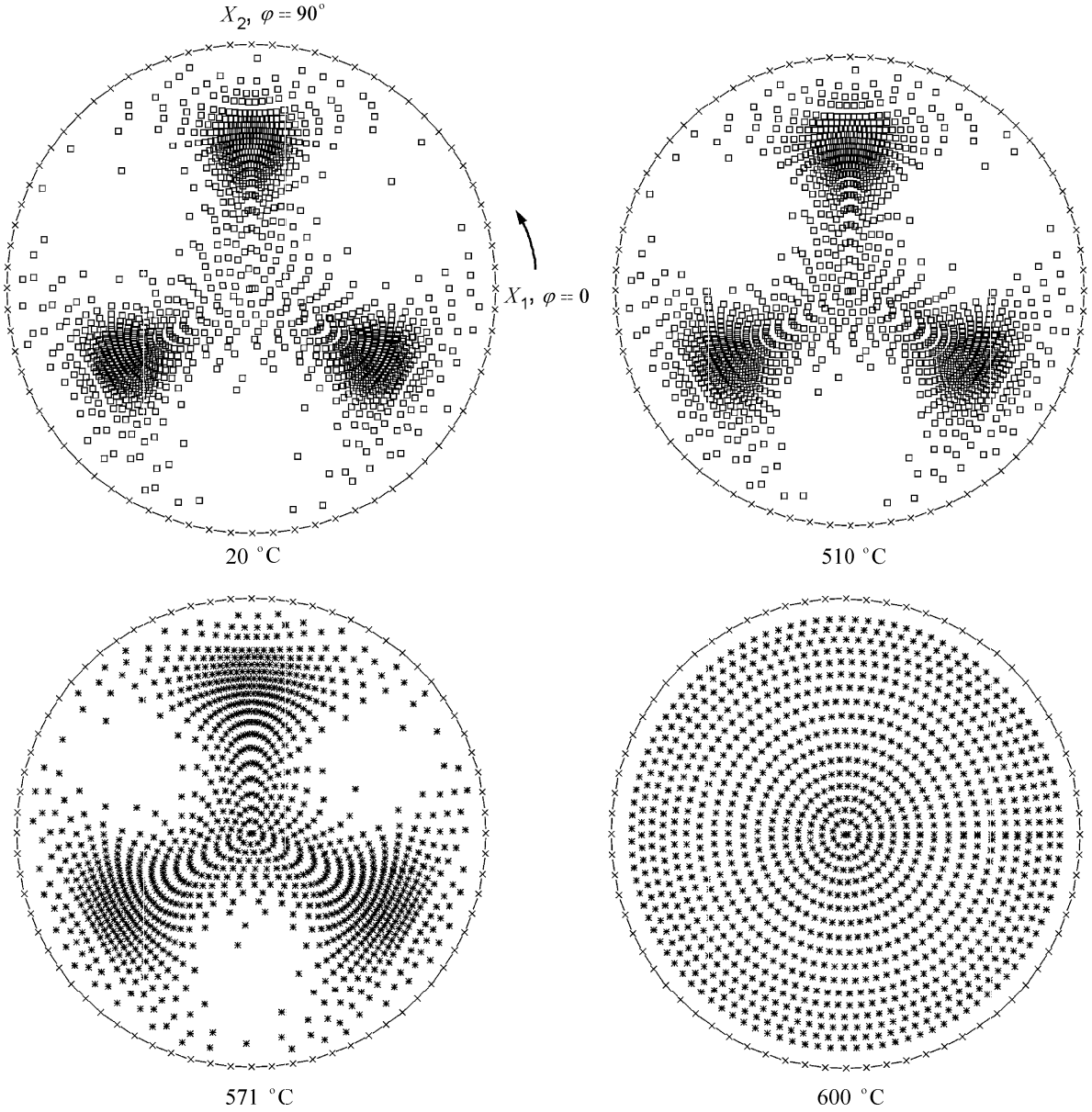

Рис. 3. Фокусировка лучей **s** квазипродольных QL-волн в пространстве верхней полусферы при температурах 20, 510, 571 °C (α-кварц) и 600 °C (β-кварц)

перед переходом при 571 °C фокусировка существенно уменьшилась. В β-фазе при 600 °C картина пространственного распределения лучей практически изотропная, фокусировка фононов в пространстве отсутствует.

Литература

1. *Mason W.R.* // J. Bell. System Techn. 1951. **30** P. 366.
2. *Зубов В.Г., Фирсова М.М.* // Кристаллография. 1962. **7**. С. 469.
3. *Landolt-Bernstein.* // Zaylenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik. Piezocrystals. Berlin, 1971.
4. Акустические кристаллы: Справочник / Под ред. М. П. Шаскольской. М., 1982. С. 632.
5. *Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П.* Основы кристаллофизики. М., 1975.
6. *Баранский К.Н., Шляхов И.В.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1996. № 5. С. 94.

Поступила в редакцию
29.12.03