А.А. СТУПКА

Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
(Просп. Гагаріна, 72, Дніпропетровськ 49010; e-mail: antonstupka@mail.ru)

УДК 530.1

ЗВУКОВІ КОЛИВАННЯ В ІОННОМУ КРИСТАЛІ ПРИ ВРАХУВАННІ КОРЕЛЯЦІЙ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ

Розглянуто малі коливання в твердому діелектрику в самоузгодженому електричному полі, яке має в рівновазі рівний нулю перший момент і відмінний від нуля другий момент напруженості. У рівнянні Ейлера запроваджено нову змінну – другий момент напруженості електричного поля, для якого отримано часове рівняння на основі рівнянь Максвелла в гідродинамічному наближенні. Отримано хвильове рівняння та знайдено дві поперечні та поздовжню звукові гілки коливань. Обчислено значення швидкості поперечного звуку, які відповідають з точністю порядку 10 відсотків знайденим за модулем зсуву значенням.

Ключові слова: звукові коливання, кореляція електричного поля, рівняння Ейлера.

Розглянемо низькочастотні довгохвильові звукові коливання в іонному кристалі. Ми будемо вважати, що іони взаємодіють лише через посередність самоузгодженого електростатичного поля [1]. Цей підхід узагальнює розгляд [2] звукових коливань у металі, де за допомогою самоузгодженого електромагнітного поля було описано лише взаємодію між протилежно зарядженими підсистемами. Для простоти припустимо однорідність та ізотропію системи. Будемо здійснювати спільний опис позитивної і негативної компонент єдиними локальними значеннями густини маси ρ, тиску P і масової швидкості $\mathbf{v}$. Окрім цих чисто гідродинамічних величин однак, в кристалі присутнє мікроскопічне електричне поле, відповідальне як за притяжіння іонів на великих відстанях, так і за відштовхування на малих. Це поле є випадковою величиною з рівним нулю першим моментом напруженості електричного поля $\mathbf{E}$ (ми не розглядаємо п'єзоелектрики) і відмінним від нуля другим після усереднення за фізично малим об'ємом. У стандартне рівняння Ейлера входить квадратичний по електричному полю тензор напружень Максвелла [3], який в нашому наближенні повністю визначається тензором $\langle E_l E_m \rangle$. Для останнього ми побудуємо часове рівняння в гідродинамічному наближенні. Як відомо [4], у випадку ідеального кристала без дефектів типу вакансій або зайвих атомів у міжвузлях, який тільки ми і розглядаємо, швидкість точок середовища збігається з похідною за часом від їх зсуву $\mathbf{v} = \partial \mathbf{u}/\partial t$, де u_α є полем зсуву (вектором деформації [4]), що характеризує переміщення точки такого середовища. Тому ми можемо описувати динаміку кристала масовою швидкістю.

Випишемо стандартні рівняння ідеальної гідродинаміки для діелектрика, нехтуючи усіма дисипативними ефектами (в'язкістю, теплопровідністю) [3]. Рівняння неперервності

$$\partial_t \rho + \mathrm{div} \rho \mathbf{v} = 0 \tag{1}$$

і рівняння Ейлера

$$\partial_t (\rho v_i) + \partial_k \pi_{ik} = 0, \tag{2}$$

тут запроваджено позначення для похідної $\partial/\partial x_k = \partial_k$ і для тензора потоку імпульсу:

$$\pi_{ik} = \rho v_i v_k + P \delta_{ik} - \left(\langle E_i E_k \rangle - \left\langle E^2 \right\rangle \delta_{ik}/2 \right) \varepsilon/(4\pi). \tag{3}$$

Діелектричну проникність ε вважаємо сталою. Як видно, в (3) входить тензор напружень Максвелла, який повністю визначається другим моментом $\langle E_i E_k \rangle$. Часове рівняння для вказаного моменту отримаємо з рівняння Максвелла для електричного поля як випадкової величини

$$\partial \varepsilon \mathbf{E}/\partial t = c \,\mathrm{rot} \mathbf{B} - 4\pi\sigma \mathbf{v}, \tag{4}$$

Швидкості поперечного звуку для деяких галоїдів лужних металів

Кристал	ρ, г/см^3	$G \cdot 10^{10}$, дін/см^2	$u_s^G \cdot 10^5$, см/с	$W \cdot 10^{-11}$, ерг	$u_s^\perp \cdot 10^5$, см/с	$u_s^\perp / u_s^G$
LiF	2,601	51,2	4,44	1,68	5,10	1,15
NaF	2,805	31,4	3,35	1,49	3,77	1,13
NaCl	2,165	15,2	2,65	1,27	2,95	1,11
NaBr	3,200	11,8	1,92	1,21	2,17	1,13
KCl	1,990	12,7	2,53	1,15	2,49	0,99
KBr	2,750	10,2	1,93	1,10	1,93	1,00
KI	3,130	7,0	1,50	1,04	1,59	1,06
RbCl	2,799	8,9	1,78	1,11	1,92	1,08
RbBr	3,351	7,5	1,50	1,06	1,60	1,07
RbI	3,554	6,1	1,31	1,01	1,38	1,05

(тут σ – густина електричного заряду) помноживши (4) на E_k у тій самій просторово-часовій точці і симетризуючи по тензорних індексах. Аналогічно рівняння для другого моменту магнітної індукції у магнітогідродинамічному наближенні отримано у [5]. Врахуємо, що рівноважне поле $\mathbf{E}$ існує в нерухомій системі координат, тому, згідно з перетвореннями Галілея [3], $\mathbf{B}' = \mathbf{B} + [\mathbf{v}, \mathbf{E}]\varepsilon/c$:

$$\partial \varepsilon E_i E_k / \partial t = c\,\mathrm{rot}_i \left(\mathbf{B} + [\mathbf{v}, \mathbf{E}]\varepsilon/c\right) E_k +$$

$$+ c\,\mathrm{rot}_k \left(\mathbf{B} + [\mathbf{v}, \mathbf{E}]\varepsilon/c\right) E_i - 4\pi\sigma \left(v_i E_k + v_k E_i\right). \quad (5)$$

Тепловими флуктуаціями поля будемо нехтувати. Після усереднення по малому об'єму останній доданок буде нелінійним і його можна опустити. Для не магнітоактивної речовини внутрішнє магнітне поле мале порівняно з електричним, тому будемо нехтувати кореляціями електричного і магнітного полів. Зважаючи на ізотропію задачі маємо

$$\left\langle E_l E_m \right\rangle_0 = \left\langle E^2 \right\rangle_0 \delta_{lm}/3 = \mathrm{const}. \quad (6)$$

Тому, використовуючи (6), маємо з (5) лінеаризоване рівняння

$$\partial \left\langle E_i E_k \right\rangle / \partial t = \left(\partial_k v_i + \partial_i v_k - 2\partial_l v_l \delta_{ik}\right) \left\langle E^2 \right\rangle_0 /3. \quad (7)$$

У тензор потоку імпульсу (2) входить відхилення ентропії, але звук є адіабатичним процесом, тому після лінеаризації маємо

$$\partial_t v_i + \partial_k \left\{ \delta_{ik} v_s^2 \rho - \left(\left\langle E_i E_k \right\rangle - \left\langle E_l E_l \right\rangle \delta_{ik}/2\right) \varepsilon/4\pi \right\} / \rho_0 = 0. \quad (8)$$

Тут $v_s^2 = \left(\partial P/\partial \rho\right)_s$, ρ_0 – рівноважне значення густини маси. Використовуючи (1) і (7) можна продиференціювати (8) за часом:

$$\partial_t^2 v_i - v_s^2 \partial_i \partial_k v_k - \partial_k \left(\partial_i v_k + \partial_k v_i\right) \left\langle E^2 \right\rangle_0 \varepsilon/(12\pi\rho_0) = 0. \quad (9)$$

Таким чином, отримано хвильове рівняння (9) для звукових коливань в ізотропному твердому тілі. Тут зручно перейти до фур'є-компонент за правилом

$$\mathbf{v}\left(\mathbf{x}, t\right) = \int d^3k d\omega \mathbf{v}\left(\mathbf{k}, \omega\right) e^{i\mathbf{kx} - i\omega t}/(2\pi)^4. \quad (10)$$

Підставляючи (10) у рівняння (9), знаходимо дисперсійні рівняння для двох поперечних $\omega^2 = \left\langle E^2 \right\rangle_0 \varepsilon/(12\pi\rho_0)k^2$ та поздовжньої $\omega^2 = \left(v_s^2 + \left\langle E^2 \right\rangle_0 \varepsilon/(6\pi\rho_0)\right) k^2$ гілок звукових коливань. А отже, маємо швидкості поперечних

$$u_s^\perp = \sqrt{\left\langle E^2 \right\rangle_0 \varepsilon/(12\pi\rho_0)} \quad (11)$$

та поздовжньої

$$u_s^\parallel = \sqrt{v_s^2 + \left\langle E^2 \right\rangle_0 \varepsilon/(6\pi\rho_0)} \quad (12)$$

звукових хвиль. Як можна бачити з (12), якщо $\left\langle E^2 \right\rangle_0 = 0$, ми отримуємо швидкість звуку в рідині $u_s^\parallel = \sqrt{\left(\partial P/\partial \rho\right)_s}$ [6]. Як відомо з теорії пружності, поперечна швидкість звуку у твердому тілі може бути виражена через модуль зсуву G [4]:

$$u_s^G = \sqrt{G/\rho_0}. \quad (13)$$

Тепер, як легко бачити з виразу (11), запроваджена рівноважна кореляція поля також може бути виражена через модуль зсуву:

$$G = \left\langle E^2 \right\rangle_0 \varepsilon/(12\pi). \tag{14}$$

Вона забезпечує пружні властивості в системі. Як відомо [7], в іонних кристалах енергія когезії $-W$ майже повністю є електростатичною. Це означає, що через її густину можна оцінити запроваджену кореляцію електричного поля:

$$Wn_0 \approx \left\langle E^2 \right\rangle_0 \varepsilon/(8\pi). \tag{15}$$

Тут n_0 – густина пар іонів, бо когезійна енергія в іонному кристалі вимірюється саме в розрахунку на іонну пару. Припущення (15) дозволяє оцінити значення швидкості поперечного звуку (11):

$$u_s^{\perp} = \sqrt{2W/(3M)}, \tag{16}$$

де $M = M_+ + M_-$ – маса іонної пари. Порівнявши чисельні значення швидкості поперечного звуку для деяких галоїдів лужних металів, що отримано з (13) та з (16) (див. таблицю), бачимо добре збігання.

Густину ρ та модуль зсуву G взято з [8]. Енергію когезії взято з роботи [7, табл. 20.5]. Всі дані – при $T = 298$ К.

Отже, виходячи з гідродинамічної моделі опису малих коливань в іонному кристалі, завдяки врахуванню самоузгодженого електричного поля, яке має рівний нулю перший момент та ненульовий другий момент, отримано дві поперечні та поздовжню гілки звукових коливань. Показано, що величина швидкості поперечних коливань з точністю порядку 10 відсотків відповідає значенням, що отримані з теорії пружності.

1. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела* (Наука, Москва, 1978).
2. A.A. Stupka, Metallofiz. Noveish. Tekhnol.**34**, 605 (2012).
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред* (Наука, Москва, 1982).
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости* (Наука, Москва, 1987).
5. A.A. Stupka, Magnetohydrodynamics **46**, No. 2, 137 (2010).
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Гидродинамика* (Наука, Москва, 1986).
7. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твёрдого тела* (Мир, Москва, 1979), т. 2.
8. И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута, *Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник* (Наукова думка, Киев, 1982).

Одержано 17.02.13

А.А. Ступка

ЗВУКОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ В ИОННОМ КРИСТАЛЛЕ ПРИ УЧЁТЕ КОРРЕЛЯЦИЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Р е з ю м е

Рассмотрены малые колебания в твердом диэлектрике в самосогласованном электрическом поле, которое имеет в равновесии равный нулю первый момент и отличный от нуля второй момент напряженности. В уравнении Эйлера введена новая переменная – второй момент напряженности электрического поля, для которого получено временное уравнение на основе уравнений Максвелла в гидродинамическом приближении. Получено волновое уравнение и найдены две поперечные и продольная звуковые ветви колебаний. Вычислены значения скорости поперечного звука, которые отвечают с точностью порядка 10 процентов найденным по модулю сдвига значениям.

A.A. Stupka

SOUND VIBRATIONS IN IONIC CRYSTAL TAKING ELECTRIC FIELD CORRELATIONS INTO ACCOUNT

S u m m a r y

Small vibrations in a solid insulator in the presence of a self-consistent electric field with the first strength moment at the equilibrium equal to zero and the second one different from zero have been considered. A new variable, the second moment of electric field strength, was introduced into the Euler equation, and a temporal equation for this variable was derived on the basis of Maxwell equations in the hydrodynamic approximation. A wave equation was obtained, and its solutions – two transverse and one longitudinal sound vibration branches – are found. The transverse sound velocity is calculated; the results obtained correspond to those calculated using the shear modulus to an accuracy of about 10%.