

J. Berdowski  
Instytut Fizyki

REGUŁY WYBORU CIEPLNEGO ROZPRASZANIA ŚWIATŁA  
W KRYSZTAŁACH O STRUKTURZE HEKSAGONALNEJ

**Streszczenie.** Badanie ciepłego rozpraszania światła w kryształach daje wiele informacji o strukturze i własnościach kryształów. Poniżej przedstawiono teoretyczne opracowanie przebiegu ciepłego rozpraszania światła w kryształach o strukturze heksagonalnej. Opracowanie takie jest niezbędne ażeby eksperyment mógł być prawidłowo ustawiony i wyniki eksperymentu dawały maksymalną ilość informacji.

Ogólne wyjaśnienie zjawiska rozpraszania światła w ciałach stałych podano w [1], [3], tutaj tylko dla przypomnienia oznaczeń przedstawiono podstawowe wzory.

Niech płaska fala hiperdźwiękowa rozchodząca się w kryształach dana jest równaniem

$$\vec{u} = \vec{A} \left[ e^{i(\Omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})} + e^{-i(\Omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})} \right] \quad (1)$$

$\vec{A} = A \vec{y}$  - amplituda fali hiperdźwiękowej,

$\vec{q} = q \vec{x}$  - wektor falowy,

$\Omega$  - częstość fali.

Związek między własnościami sprężystymi kryształu a jego odkształceniem w danym kierunku jest

$$(C_{iklm} q_k q_l - \rho \Omega^2 \delta_{im}) u_m = 0 \quad (2)$$

$C_{iklm}$  - stałe sprężyste,

$\rho$  - gęstość kryształu,

$\delta_{im}$  - delta Croneckera.

Równanie to ma nietrywialne rozwiązania, jeżeli zeruje się następujący wyznacznik:

$$\left| c_{iklm} q_k q_l - \frac{\rho \Omega^2}{q^2} \delta_{im} \right| = 0, \quad (3)$$

co prościej można zapisać stosując podstawienie

$$Q_{im} = c_{iklm} \alpha_k \alpha_l; \quad X = \frac{e\Omega^2}{q^2} = \epsilon v^2 \quad (4)$$

$$[Q_{im} - X\delta_{im}] = 0. \quad (5)$$

Układ równań (2) ma dla danego wektora falowego trzy rozwiązania tzn., że w każdym kierunku kryształu mogą rozchodzić się trzy płaskie fale sprężyste.

Sprężysta fala wywołuje zmianę tensora przenikalności dielektrycznej wyrażoną wzorem

$$\Delta\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} iqA\phi_{ij} [e^{i(\Omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})} - e^{-i(\Omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})}] \quad (6)$$

gdzie

$$\phi_{ij} = n_i^2 n_j^2 p_{ij\alpha\beta} \alpha_\beta \beta_\alpha \quad (7)$$

$p_{ij\alpha\beta}$  - stałe elastoptyczne,

$n_i, n_j$  - współczynniki załamania kryształu.

W większości przypadków  $n_i \approx n_j$  i otrzymujemy

$$\phi_{ij} = n^4 \phi'_{ij}$$

gdzie

$$\phi'_{ij} = p_{ij\alpha\beta} \alpha_\beta \beta_\alpha \quad (8)$$

Niech na kryształ pada fala świetlna opisana równaniem

$$\vec{E} = E_0 \beta_j e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}, \quad (9)$$

a po rozproszeniu na fali hiperdźwiękowej wychodzi z kryształu fala świetlna o równaniu

$$\vec{E}' = E'_0 \alpha_i e^{i(\omega t - \vec{k}' \cdot \vec{r})}. \quad (10)$$

Podczas tego rozpraszania są spełnione zasady zachowania energii i pędu

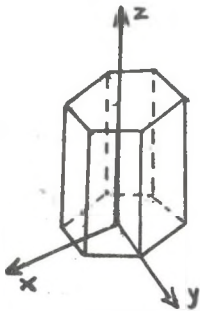
$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad i \quad \omega' = \omega \pm \Omega \quad (11)$$

W celu określenia efektywności rozpraszania wprowadza się współczynnik rozpraszania światła, który po wyliczeniach wyraża się wzorem

$$R = \frac{\pi^2}{\lambda^4} \frac{k T}{\rho v^2} (\varphi_{1j} - \alpha_1 \beta_j)^2 \quad (12)$$

Macierze stałych sprężystych i elastoptycznych struktury heksagonalnej mają postać [4]

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{13} & p_{13} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(p_{11}-p_{12}) \end{bmatrix} \quad (13)$$



Rys. 1. Kierunek osi układu współrzędnych dla struktury heksagonalnej

jak widać, każda z tych macierzy ma po 5 niezależnych stałych, trzeba więc tak ustawić eksperyment aby można wyznaczyć wszystkie dziesięć niewiadomych z najmniejszej liczby pomiarów.

Wybrano układ współrzędnych skierowany jak na rys. 1, oś z zgodna z osią symetrii trzeciego rzędu, oś y leży w płaszczyźnie symetrii, a oś x prostopadła do tej płaszczyzny.

Dla struktury heksagonalnej składowe tensora  $Q_{im}$  z równania (4) są wyrażone

$$\begin{aligned} Q_{xx} &= c_{11}x_x^2 + \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12})x_y^2 + c_{44}x_z^2 \\ Q_{yy} &= \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12})x_x^2 + c_{11}x_y^2 + c_{44}x_z^2 \\ Q_{zz} &= c_{44}x_x^2 + c_{44}x_y^2 + c_{33}x_z^2 \\ Q_{yz} &= (c_{13} + c_{44})x_y x_z \\ Q_{zx} &= (c_{13} + c_{44})x_z x_x \\ Q_{xy} &= \left[ c_{12} + \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}) \right] x_x x_y, \end{aligned} \quad (14)$$

a składowe tensora  $\phi'_{ij}$  z równania (8) mają postać

$$\begin{aligned}\phi'_{xx} &= P_{11} \delta_x^x \delta_x^x + P_{12} \delta_y^y \delta_x^x + P_{13} \delta_z^z \delta_x^x \\ \phi'_{yy} &= P_{12} \delta_x^x \delta_y^y + P_{11} \delta_y^y \delta_y^y + P_{13} \delta_z^z \delta_y^y \\ \phi'_{zz} &= P_{13} \delta_x^x \delta_z^z + P_{13} \delta_y^y \delta_z^z + P_{33} \delta_z^z \delta_z^z \\ \phi'_{yz} &= P_{44} (\delta_y^y \delta_z^z + \delta_z^z \delta_y^y) \\ \phi'_{zx} &= P_{44} (\delta_z^z \delta_x^x + \delta_x^x \delta_z^z) \\ \phi'_{xy} &= \frac{1}{2} (P_{11} - P_{12}) (\delta_x^x \delta_y^y + \delta_y^y \delta_x^x).\end{aligned}\tag{15}$$

Niech światło pada wzdłuż osi  $x$ , a światło rozproszone jest badane wzdłuż osi  $y$  (rys. 2) i niech będzie spełniona zasada (12) ze znakiem dodatnim

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q},$$

wtedy

$$\vec{q} = (-k, k, 0)$$

oraz

$$\alpha_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \alpha_y = \frac{1}{\sqrt{2}}, \alpha_z = 0.\tag{16}$$

Rys. 2. Pierwsza orientacja eksperymentu

Równania (14) upraszczają się do postaci

$$\begin{aligned}Q_{xx} &= Q_{yy} = \frac{1}{4} (3c_{11} - c_{12}) \\ Q_{zz} &= c_{44} \\ Q_{yz} &= Q_{zx} = 0 \\ Q_{xy} &= -\frac{1}{4} (c_{12} + c_{11})\end{aligned}\tag{17}$$

Dla tego przypadku układ równań (5) ma trzy następujące rozwiązania

$$X_I = c_{44}; \quad \delta_x = \delta_y = 0; \quad \delta_z = 1 \text{ - fala poprzeczna}$$

$$X_{II} = \frac{1}{2} (c_{11} - c_{12}); \quad \delta_x = \delta_y = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \delta_z = 0 \text{ - fala poprzeczna} \quad (18)$$

$$X_{III} = c_{11}; \quad \delta_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \delta_y = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \delta_z = 0 \text{ - fala podłużna.}$$

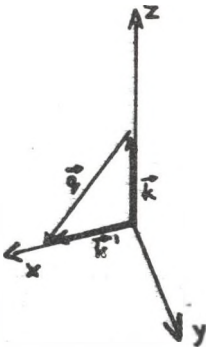
Padające światło może mieć dwie polaryzacje: wzdłuż osi  $z$  lub wzdłuż osi  $y$ , a światło rozproszone może być spolaryzowane wzdłuż osi  $z$  lub wzdłuż osi  $x$ . Korzystając z tych założeń wyliczono z (15) składowe  $\rho'_{ij}$ , a następnie wstawiono do (12). Wyniki wyliczeń przedstawiono w tabelicy 1. Pierwszy indeks przy  $R'$  oznacza polaryzację światła padającego, a drugi polaryzację światła rozproszonego.

Tabela 1

$v$	$R'_{zz}$	$R'_{zx}$	$R'_{yz}$	$R'_{yx}$
$v_I = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$	0	$\frac{1}{2} \frac{p_{44}^2}{c_{44}}$	$\frac{1}{2} \frac{p_{44}^2}{c_{44}}$	0
$v_{II} = \sqrt{\frac{1}{2\rho} (c_{11} - c_{12})}$	0	0	0	0
$v_{III} = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$	$\frac{p_{13}^2}{c_{11}}$	0	0	$\frac{1}{8} \frac{(p_{11} - p_{12})^2}{c_{11}}$

Współczynniki  $R$  uzyskujemy mnożąc stałe  $R'$  przez stały czynnik równy

$$A = \frac{\pi^2}{\lambda^4} n^8 kT.$$



Rys. 3. Druga orientacja eksperymentu

Jak widać z tabelicy 1, w tej orientacji można zaobserwować pierwszą falę poprzeczną i falę podłużną. Można z tego wyliczyć stałe  $c_{11}$ ,  $c_{44}$  oraz  $p_{13}$ ,  $p_{44}$  i uzyskujemy równanie będące kombinacją stałych  $p_{11}$  i  $p_{12}$ .

Założmy następnie, że światło pada wzdłuż osi  $z$  a światło rozproszone jest badane w kierunku osi  $x$  i jest spełniona zasada (12) ze znakiem dodatnim.

Sytuację taką przedstawia rys. 3, widać, że fale sprężystą można opisać następującymi parametrami:

$$q = (k, 0, -k)$$

$$\alpha_x = \frac{1}{\sqrt{2}}, \alpha_y = 0, \alpha_z = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (19)$$

W tym przypadku współczynniki  $Q_{ij}$  można przedstawić następująco:

$$Q_{xx} = \frac{1}{2} (c_{11} + c_{44})$$

$$Q_{yy} = \frac{1}{4} (c_{11} - c_{12} + 2 \cdot c_{44})$$

$$Q_{zz} = \frac{1}{2} (c_{44} + c_{33}) \quad (20)$$

$$Q_{yz} = Q_{xy} = 0$$

$$Q_{zx} = -\frac{1}{2} (c_{13} + c_{44}).$$

Układ równań (5) ma teraz następujące trzy rozwiązania:

$$\bar{I}_I = \frac{1}{4} (c_{11} - c_{12} + 2c_{44}); \quad \beta_x = \beta_z = 0, \quad \beta_y = 1 - \text{fala poprzeczna}$$

$$\bar{I}_{II} = \frac{1}{4} (c_{11} + c_{33} + 2c_{44}) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{4} (c_{11} - c_{33})^2 + (c_{13} + c_{44})^2}$$

$$\beta_x = \beta_z \approx \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \beta_y \approx 0 - \text{fala quasipoprzeczna,}$$

$$\bar{I}_{III} = \frac{1}{4} (c_{11} + c_{33} + 2c_{44}) - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{4} (c_{11} + c_{33})^2 + (c_{13} + c_{44})^2}$$

$$\beta_x \approx \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \beta_y \approx 0, \quad \beta_z \approx -\frac{1}{\sqrt{2}} - \text{fala quasipodłużna.}$$

W tym przypadku padające światło może być spolaryzowane wzdłuż osi  $x$  lub wzdłuż osi  $y$ , a światło rozproszone może być spolaryzowane wzdłuż osi  $y$  lub wzdłuż osi  $z$ . Wzniki wyliczeń współczynników  $R$  dla tej orientacji są przedstawione w tabelicy 3. Przy tej orientacji można zaobserwować wszystkie fale sprężyste rozchodzące się w kryształach. Przyjmując jako znane stałe wyliczone z poprzedniej orientacji można teraz wyliczyć dalsze stałe:  $c_{11}$ ,  $c_{13}$ ,  $c_{33}$  oraz  $p_{12}$ ,  $p_{11}$ .

Tablica 2

v	$R'_{xy}$	$R'_{xz}$	$R'_{yy}$	$R'_{yz}$
$v_I = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{c_{11} - c_{12} + 2c_{44}}{\rho}}$	$\frac{(p_{11} - p_{12})^2}{8x_I}$	0	0	$\frac{p_{44}^2}{2x_I}$
$v_{II} = \left[ \frac{1}{4\rho} (c_{11} + c_{33} + 2c_{44}) + \frac{1}{2\rho} \sqrt{\frac{1}{4} (c_{11} - c_{33})^2 + (c_{13} + c_{44})^2} \right]^{\frac{1}{2}}$	0	0	$\frac{(p_{12} - p_{13})^2}{4x_{II}}$	0
$v_{III} = \left[ \frac{1}{4\rho} (c_{11} + c_{33} + 2c_{44}) - \frac{1}{2\rho} \sqrt{\frac{1}{4} (c_{11} - c_{33})^2 + (c_{13} + c_{44})^2} \right]^{\frac{1}{2}}$	0	$\frac{p_{44}^2}{x_{III}}$	$\frac{(p_{12} + p_{13})^2}{x_{III}}$	0

Przeprowadzając eksperymenty w obu przedstawionych orientacjach można wyliczyć wszystkie pięć stałych sprężystych oraz cztery stałe elastoop-tyczne.

Opierając się na przedstawionych wyliczeniach w najbliższym czasie zostaną przeprowadzone pomiary prędkości propagacji hiperdźwięków, stałych sprężystych oraz stałych elastoop-tycznych w kryształach CdS i ZnO mających strukturę heksagonalną.

#### LITERATURA

1. L. Fabieliński, Moljekuljarnoje rassiejanie swieta. Izd.Nauka, Moskwa 1967.
2. W. Wolkensztein, Moljekuljarnaja optika. G.E.T.T. - Leningrad, 1957.
3. J. Berdowski, Z. Kleszczewski, A. Opilski, Zeszyty Naukowe Politechniki Śląskiej (w druku).
4. R. Truell, Ch. Elbaum, B. Chick, Ultrasonic Methods in Solid State Physics. Acad. Press New York, 1969..

#### ПРАВИЛА ОТБОРА ТЕПЛОВОГО РАССЕИВАНИЯ СВЕТА В ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

#### Резюме

Из исследования теплового рассеивания света в кристаллах можно получить много информации о структуре и свойствах кристаллов.

В этой статье представлены теоретические вычисления теплового рассеивания в гексагональных кристаллах. Такая теоретическая обработка нужна для того чтобы эксперимент был правильно проведён и из него можно было получить максимальное количество информации.

#### SELECTION RULES FOR THE THERMAL LIGHT SCATTERING IN HEXAGONAL CRYSTALS

#### Summary

The investigation of the thermal light scattering in crystals gives more information about the structure and the properties of crystals.

The paper presents the theoretical description of the process of thermal light scattering in hexagonal crystals. This theoretical analysis is necessary for correct selection of the experimental procedure and for acquisition of the maximum reliable information.