ZESZYTY NAUKOWE POLITECHNIKI ŚLĄSKIEJ 1979

Seria: MATEMATYKA-FIZYKA z. 33 Nr kol. 622

Marta KRZESIŃSKA

TEMPERATURA DEBYE'A DLA $Bi_{12}GeO_{20}$

Streszczenie. W pracy niniejszej przedstawiono metodę wyznaczania temperatury Debye'a z pomiarów stałych sprężystych. Obliczenia przeprowadzono dla $Bi_{12}GeO_{20}$. Tak wyznaczoną temperaturę Debye'a porównano z metodami przybliżonymi de Launay'a i Marcusa.

Teoria ciepła właściwego Debye'a, bazująca na dość prostym modelu widma częstotliwości ciała stałego, dostarcza praktycznego kryterium porównywania własności termicznych. Zgodnie z tym modelem związek pomiędzy temperaturą charakterystyczną Θ_D a maksymalną częstotliwością drgań ν_{max} jest następujący:

$$k\Theta_D/h = \nu_{max},$$

gdzie k i h stałe Boltzmanna i Plancka.

Częstotliwość maksymalną ν_{max} można wyznaczyć znając liczbę drgań dz w przedziale częstotliwości ν, $\nu + d\nu$

$$dz = \frac{4\pi V}{v_{śr}^3}\nu^2 d\nu, \qquad N = \int_0^{\nu_{max}} \frac{4\pi V}{v_{śr}^3}\nu^2 d\nu, \tag{1}$$

Stąd

$$\nu_{max} = v_{śr}\sqrt[3]{\frac{3N}{4\pi V}} = v_{śr}\sqrt{\frac{3n}{4\pi}},$$

gdzie n liczba atomów w jednostce objętości.

Ostatecznie temperaturę Debye'a można zapisać w postaci:

$$\Theta_D = \frac{h}{k}\left(\frac{3qN\rho}{4\pi M}\right)^{1/3} v_{śr} \tag{2}$$

gdzie:

q - liczba atomów w cząsteczce,

N - liczba Avogadro,

M - masa cząsteczkowa w kilogramach

ρ - gęstość.

Dla ciała izotropowego można prędkość średnią wyrazić poprzez prędkość fali podłużnej i dwóch poprzecznych:

$$\frac{3}{v_{śr}^3} = \frac{1}{v_1^3} + \frac{2}{v_t^3}. \tag{3}$$

Wzór (3) na $v_{śr}$ jest słuszny tylko dla ciała izotropowego. W krysztale anizotropowym prędkości zależą od kierunku i $v_{śr}$ trzeba uśredniać po wszystkich kętach wyznaczających kierunek, czyli:

$$\frac{3}{v_{śr}^3} = \frac{1}{4\pi}\int_0^{4\pi}\left(\frac{1}{v_1^3} + \frac{1}{v_2^3} + \frac{1}{v_3^3}\right)d\Omega, \qquad d\Omega = \sin\Theta d\Theta d\Phi \tag{4}$$

Całkowanie można zastąpić sumowaniem:

$$\frac{3}{v_{śr}^3} = \frac{S}{4\pi}\sum_{\Theta=0}^{\Theta=\Theta_s-\Delta\Theta}\ \sum_{\Phi=0}^{\Phi=\Phi_s-\Delta\Phi}\left(\frac{1}{v_1^3} + \frac{1}{v_2^3} + \frac{1}{v_3^3}\right)\Delta\Omega \tag{5}$$

gdzie S stała symetrii zależna od granic sumowania (dla układu kubicznego S = 8 przy $\Theta_s = \Phi_s = 90^0$)

$$\Delta\Omega = \int_{\Theta}^{\Theta+\Delta\Theta}\int_{\Phi}^{\Phi+\Delta\Phi}\sin\Theta d\Theta d\Phi = \left[\cos\Theta - \cos(\Theta+\Delta\Theta)\right]\Delta\Phi \tag{6}$$

v_1, v_2, v_3 są pierwiastkami równania [2], [3]:

$$\begin{vmatrix} l^2a-H & nlb & nlb \\ lm & m^2a-H & mnb \\ nlb & mnb & n^2a-H \end{vmatrix} = 0, \tag{7}$$

które można przedstawić w postaci:

$$H^3 - aH^2 + c(a+b)\Sigma H - c^2(a+2b)\Pi = 0$$

$$\Sigma = m^2n^2 + n^2l^2 + l^2m^2 \tag{7a}$$

$$\Pi = l^2m^2n^2$$

gdzie l, m, n cosinusy kierunkowe wektorów prędkości fazowej:

$$a = c_{11} - c_{44}$$

$$b = c_{12} + c_{44}$$

$$c = c_{11} - c_{12} - 2c_{44}$$

$$H = \varrho v^2 - c_{44}$$

Pierwiastki równania (7) spełniają relację:

$$v_1 < v_2 < v_3,$$

gdzie v_3 oznacza prędkość fali podłużnej a v_1 i v_2 prędkości fal poprzecznych.

Poszukiwanie pierwiastków równania (7) i obliczenia temperatury Debye'a realizowano na maszynie cyfrowej ODRA 1325 za pomocą programu napisanego w języku FORTRAN. Wartości stałych sprężystych c_{11}, c_{12}, c_{44} i gęstości zaczerpnięto z pracy [4]. $\Delta\Theta$ i $\Delta\phi$ ustalono na 5°.

Rysunek 1 przedstawia przekrój powierzchni prędkości fazowej fali w $Bi_{12}GeO_{20}$. Przekroje w płaszczyznach (100), (010), (001) są identyczne. Prędkość średnia wyliczona z równania (5) dla $Bi_{12}GeO_{20}$ wynosi 2092.7 m/sek, a temperatura Debye'a 248.4 K.

Przeprowadzono również porównanie z metodami przybliżonymi Marcusa [5] i de Launay'a [5] dla kryształów kubicznych.

Temperatura Debye'a wg Marcusa wyraża się wzorem:

$$\Theta_D = \frac{h}{k}\left(\frac{3N}{4\pi V}\right)^{1/3}\left(\frac{c_{11}}{\varrho}\right)^{1/2} g \tag{8}$$

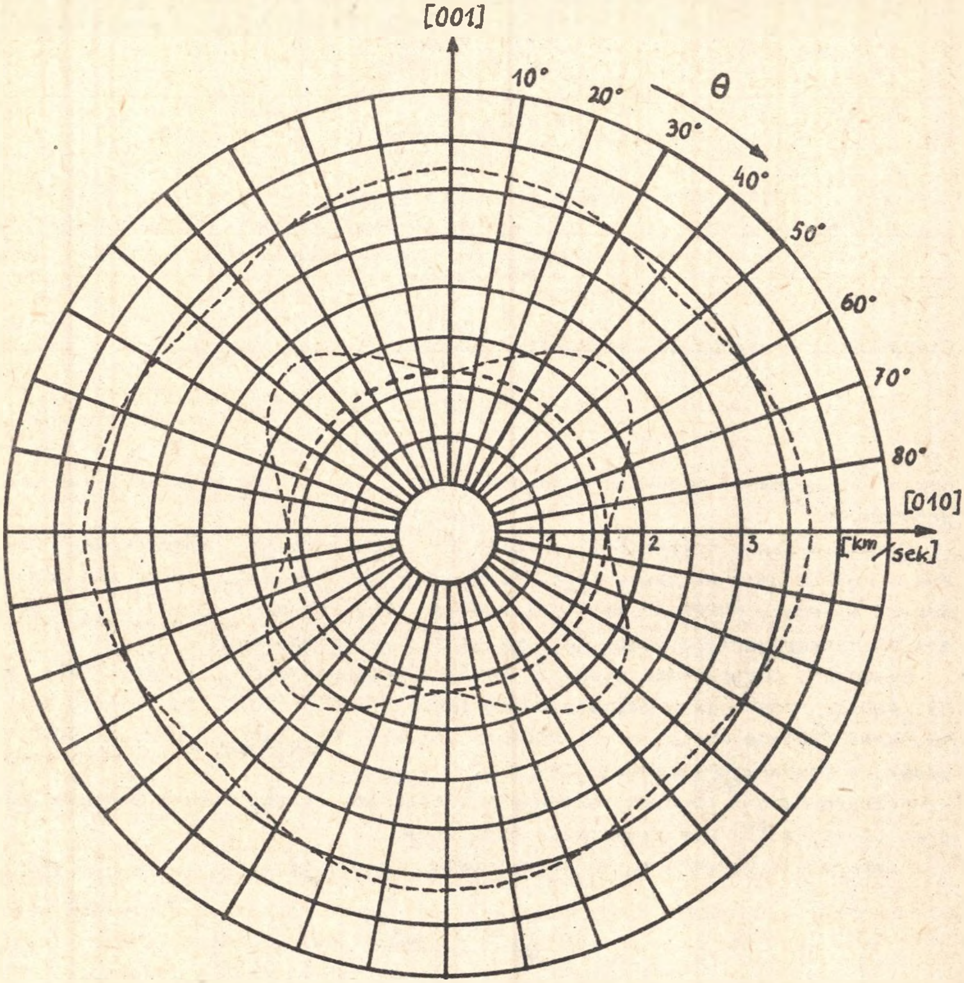
g wyznacza się z krzywych u = u(v), gdzie:

$$u = \frac{c_{11} - c_{12}}{2c_{11}} \qquad V = \frac{c_{44}}{c_{11}}$$

dla $Bi_{12}GeO_{20}$ u = 0,38, v = 0,199 a g = 0,56.
Temperatura Debye'a w tym przybliżeniu wynosi 247.6 K.

Według de Launay'a [5] temperatura Debye'a dla kryształu kubicznego jest postaci:

$$\Theta_D = \frac{h}{k}\left(\frac{9N}{4\pi V}\right)^{1/3}\left(\frac{c_{44}}{\varrho}\right)^{1/2}\left[\frac{9}{18 + \sqrt{3}} f\right]^{1/3},$$



Rys. 1. Przekrój powierzchni prędkości fazowej fali w $Bi_{12}GeO_{20}$ w płaszczyźnie (100), (010), (001)

f wyznacza się z tablic wg parametrów s i t:

$$s = \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{12} + c_{44}} \qquad t = \frac{c_{12} - c_{44}}{c_{44}}.$$

Dla $Bi_{12}GeO_{20}$ $f = 1.45$ a $\theta_D = 248$ K.

Jak widać wartości przybliżone różnią się niewiele od wartości wyznaczonej z prędkości średniej dla kryształu anizotropowego.

LITERATURA

[1] Robie R.A., Edwards J.L.: J. Appl. Phys. 37, 2659 (1966).
[2] Musgrave M.J.: Proc. Roy. Soc. A226, 339 (1954).
[3] Miller G.F., Musgrave J.P.: Proc. Roy. Soc. A236, 352 (1956).
[4] Slobodnik A.J., Sethares J.C.: J. Appl. Phys. 43, 247 (1972).
[5] Physical Acoustics pod red. W. Masona t. III B.

ТЕМПЕРАТУРА ДЕБАЯ ДЛЯ $Bi_{12}GeO_{20}$

Р е з ю м е

В работе показано метод определения температуры Дебая из измерений упругих постоянных. Вычисления сделано для $Bi_{12}GeO_{20}$ Так определённую температуру Дебая сравнено с методами Де-Лонея и Маркуса.

THE DEBYE TEMPERATURE OF $Bi_{12}GeO_{20}$

S u m m a r y

The method of designation of the Debye temperature from the elastic constant measurements has been presented in the paper. The computations have been made for $Bi_{12}GeO_{20}$. The Debye temperature from this computations has been compared with the results of the de Launay and Marcus methods.