Известия НАН Армении, Физика, т.45, №4, с.281-284 (2010)

УДК 548.7

РАСЧЕТ ФУНКЦИИ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ КРИСТАЛЛА ПРИ НАЛИЧИИ ТЕМПЕРАТУРНОГО ГРАДИЕНТА

А.Е. МОВСИСЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 25 марта 2010 г.)

Решено уравнение теплопроводности в соответствии с условиями проведенных экспериментов. Получено выражение для функции смещения. Предложен метод расчета функций смещения для разных осей симметрии кристалла, позволяющий определить фактор Дебая-Валлера.

1. Введение

Изучение дифракционных особенностей ангстремных длин волн при внешних воздействиях (температурный градиент, акустическое поле) [1-4] представляет большой интерес, так как оно позволяет получить управляемые в пространстве и во времени рентгеновские лучи с высокой монохроматичностью и большой интенсивностью. В частности, в работе [1] экспериментально показано, что при наличии определенных условий (температурного градиента (ТГ) и акустических волн) происходит полная переброска рентгеновских лучей от направления прохождения в направление отражения. Для изучения этих явлений возникает необходимость задать вид функции смещения для деформированных кристаллов.

Настоящая работа посвящена изучению температурного поля внутри кристалла и пространственного распределения функции смещения от положения равновесия атомов, когда кристалл помещен в разных средах с разными коэффициентами теплоотдачи.

2. Теория

При заданном ТГ, в связи с теплообменом между кристаллом и окружающей средой, по толщине пластинки монокристалла в направлении от центра кристалла к его боковым граням появляется дополнительный ТГ, приводящий к деформациям атомных плоскостей. Задача сводится к нахождению температурного поля и, следовательно, к решению уравнения теплопроводности для анизотропной среды (кристалл).

Предположим, что кристалл имеет форму прямого параллелепипеда с размерами a, $2b$, $2c$. Тогда, исходя из симметрии, координатные оси можно выбрать по главным осям симметрии кристалла $0 < x < a, \; -c < y < c, \; -b < z < b$ (см. рис.1).

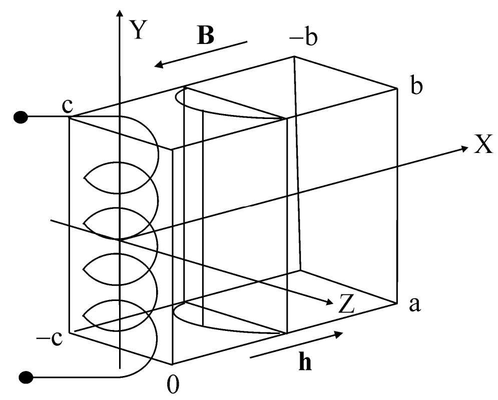

Рис.1. Схематическая картина воздействия температурного градиента на монокристалл кварца.

Допустим, что на поверхности кристалла $x = 0$ поддерживается температура T_1, а на $x = a$ (где a – размер кристалла по оси x) температура T_2. Тогда на поверхностях $z = b$, $z = -b$ и $y = c$, $y = -c$ имеет место свободный теплообмен со средой с температурой T_2.

Задача сводится к решению системы уравнений

$$\begin{aligned}
&\chi_1 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \chi_3 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \chi_3 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \\
&T(0, y, z) = T_1, \; T(a, y, z) = T_2, \\
&\frac{\partial T}{\partial z} + h(T - T_2) = 0, \; z = b, \; \frac{\partial T}{\partial z} - h(T - T_2) = 0, \; z = -b, \\
&\frac{\partial T}{\partial y} + h(T - T_2) = 0, \; y = c, \; \frac{\partial T}{\partial y} - h(T - T_2) = 0, \; y = -c,
\end{aligned} \tag{1}$$

где χ_1, χ_2, χ_3 $(\chi_2 = \chi_3)$ – коэффициенты теплопроводности по осям x, y и z, соответственно, а $h = H/\chi_3$, где H – коэффициент теплоотдачи кристалл–среда.

Решая систему уравнений (1), получим:

$$T(x,y,z) = T_2 + 4h^2 (T_1 - T_2) \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sinh\left[l(a-x)\right] \cos \sqrt{\frac{\chi_1}{\chi_2}} \gamma_i y \cos \sqrt{\frac{\chi_1}{\chi_2}} \beta_j z}{\sinh(la) \cos \beta_j b \cos \gamma_i c [(\beta_j{}^2 + h^2) b + h][(\gamma_i{}^2 + h^2) c + h]}, \tag{2}$$

где β_n – решение следующих трансцендентных уравнений:

$$\gamma_i \tan \gamma_i c = h, \quad \beta_j \tan \beta_j b = h, \quad l^2 = i^2 + j^2. \tag{3}$$

Функция смещения атомов от положения равновесия $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ в общем случае является тензором:

$$u_i = e_{ij} x_j, \qquad (4)$$

где $e_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ являются компонентами симметричного полярного тензора 2-го ранга деформаций.

При однородном изменении температуры на величину ΔT кристалл испытывает однородную деформацию, описываемую уравнением

$$e_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T, \qquad (5)$$

где α_{ij} – компоненты тензора 2-го ранга теплового расширения по соответствующим координатным осям. Но при выборе координатных осей вышеуказанным способом (см. рис.1) тензор принимает диагональный вид:

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j, \\ \alpha_i & i = j, \end{cases} \qquad (6)$$

где α_i – главные коэффициенты теплового расширения. В частности, для кварца $\alpha_1 = \alpha_2$.

Из (4) и (5) для смещения имеем:

$$\partial u_i \big/ \partial x_j = \alpha_{ij} \Delta T. \qquad (7)$$

Следует учесть, что в задачах дифракции заметный вклад в дифракционные процессы дает та компонента вектора смещения $\mathbf{U}(\mathbf{r})$, которая направлена вдоль вектора дифракции $\mathbf{h}$ [5,6]. В частности, если вектор дифракции направлен вдоль x, то для U_x имеем

$$U_x = \int_0^x \alpha_1 \Delta T(\xi, y, z) d\xi. \qquad (8)$$

Подставляя (2) в (8), для компонента вектора смещения U_x получаем

$$U_x(x,y,z) = -4h^2 (T_1 - T_2) \sum_i^{\infty} \sum_j^{\infty} \frac{\mathrm{ch}(a-x) \cos \sqrt{\frac{\chi_1}{\chi_2}} \gamma_i y \cos \sqrt{\frac{\chi_1}{\chi_2}} \beta_j z}{lshla \cos \beta_j b \cos \gamma_i c \{(\beta_i{}^2 + h^2) b + h\} \{(\gamma_j{}^2 + h^2) c + h\}}. \qquad (9)$$

На рис.2 представлено пространственное распределение температурного поля внутри кристалла кварца. Для атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ кристалла кварца пространственная картина функции смещения показана на рис.3.

Отметим, что полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [7].

Таким образом, показано, что приложенный перпендикулярно к атомным плоскостям температурный градиент приводит к изгибу атомных плоскостей. Фактически предложен метод для расчета функций смещения при разных осях симметрии кристалла, т.е. для определения фактора Дебая–Валлера.

Автор выражает благодарность академику А.Р. Мкртчяну за постановку задачи и полезные обсуждения.

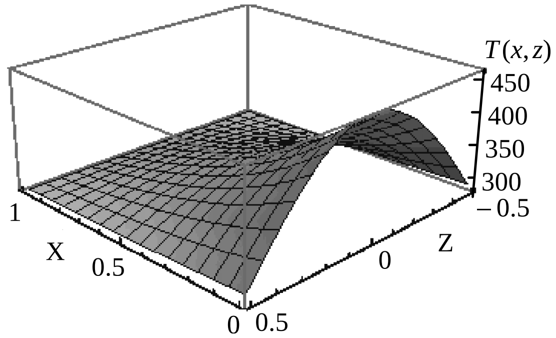

Рис.2. Пространственное распределение температурного поля внутри кристалла кварца.

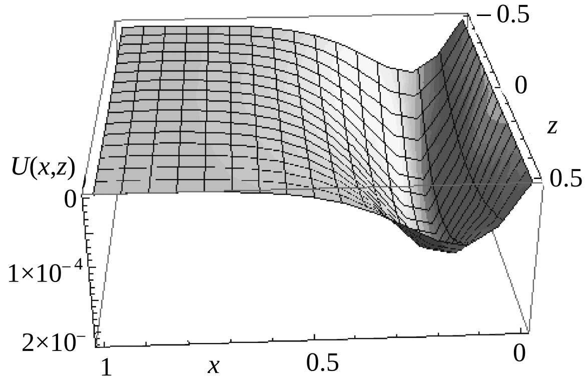

Рис.3. Пространственное распределение функции смещения для атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ кристалла кварца.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.Р.Мкртчян, М.А.Навасардян, В.К.Мирзоян.** Письма в ЖТФ, **8**, 677 (1982).
2. **A.R.Mkrtchyan, M.A.Navasardyan, R.G.Gabrielyan.** Phys. Lett. A, **116**, 444 (1986).
3. **A.R.Mkrtchyan et al.** Solid State Commun., **59**, 147 (1986).
4. **А.Р.Мкртчян, Р.Г.Габриелян, А.А.Асланян, А.Г.Мкртчян, Х.В.Котанджян.** Изв. АН Арм.ССР, Физика, **25**, 297 (1986).
5. **S.Takagi.** Acta Cryst., **15**, 1211 (1962)
6. **S.Takagi.** J. Phys. Soc. Japan, **26**, 1239 (1969)
7. **С.Н.Нореян, В.К.Мирзоян, В.Р.Кочарян.** Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 1, 18 (2004).

CALCULATION OF DISPLACEMENT FUNCTION OF CRYSTAL ATOMS IN THE PRESENCE OF TEMPERATURE GRADIENT

A.E. MOVSISYAN

The thermal conductivity equation is solved with allowance for experimental conditions. An expression for the displacement function is derived. A method for calculation of displacement functions for different axes of symmetry of a crystal is offered.