

**МОДЕЛЮВАННЯ ЗАКОНОМІРНОСТЕЙ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ПРУЖНИХ ХВИЛЬ У ЛУЖНО-ГАЛОЇДНИХ МОНОКРИСТАЛАХ**

*Побудована модель розповсюдження пружних хвиль від чинника кристалографічного напрямку  $R$  у монокристалах кубічної сингонії, як анізотропного тіла, коли площини пружної симетрії не співпадають з координатними площинами. Проведена лінеаризація моделі. Дану модель апробовано для всіх груп лужно-галоїдних монокристалів та встановлено майже функціональний зв'язок швидкості поздовжніх пружних хвиль  $VL(R)$  ( $r > 0,999$ ) для будь-якого кристалографічного напрямку всіх ЛГК.*

***Ключові слова:** моделювання, лужно-галоїдні кристали, пружні хвилі, кристалографічні напрямки.*

## Постановка завдання

На основі підходів теорії розповсюдження пружних хвиль у монокристалах, теорії пружності анізотропного тіла, хімії галогенідів лужних металів та підходів кристалографії побудувати математичну модель, що дозволить дати кількісний прогноз швидкості пружних хвиль для будь-якого лужно-галоїдного кристала, кристалографічного напрямку цього кристала та експериментально підтвердити дану модель.

## Аналіз останніх досліджень і публікацій

Лужно-галоїдні кристали (ЛГК) відіграють особливу роль у фізиці, механіці, оптиці, електродинаміці, кристалографії, лазерній і біомедичній техніці, теорії пружності анізотропного тіла і квантовій хімії [1–22] – і перш за все, як зручний модельний об'єкт, що дозволяє вивчати природу взаємодії міжатомних сил з врахуванням квантово-хімічних особливостей, анізотропії, взаємодії між атомами галогенів та лужних металів саме в конденсованому монокристалічному стані [7].

Після аварії на ЧАЕС (1986) та ряді інших аварій в ядерній енергетиці виникла гостра необхідність створення доступних, надійних і достовірних засобів контролю індивідуальної накопиченої дози опромінення для великої кількості людей – як персоналу ліквідаторів наслідків аварії, так і цивільного населення. І найдоступнішими в дозиметрії виявилися саме ЛГК [2–7]. ЛГК знайшли широке застосування в оптиці [5], фізиці руйнування [12–13, 15–16], медицині [16], електро-імпульсних технологіях [14] тощо.

ЛГК з домішками металів III та IV груп відомі, як люмінофори, чутливі до іонізаційного опромінення, та ще й з ефектом пам'яті, що дозволяє на їх основі створювати нові рентгеночутливі матеріали [1].

У [2] продемонстровано високу ефективність ЛГК у контролі явищ, що виникають у природі, в результаті руйнування озонового шару, побудована модель змін в системі «ЛГК – повітря» під дією високоенергетичних чинників. Показано, що вміст нітратів в ЛГК є важливим екологічним чинником, що характеризує трансформацію аерозолів в атмосфері.

ЛГК – надзвичайно зручні об'єкти для міждисциплінарного вивчення: акустики, оптики, радіофізики, радіології, теорії пружності, електродинаміки, квантової хімії, синергетики, теорії міжатомного зв'язку тощо.

## Математична модель

Відомо, що будь-яке порушення рівноваги в суцільному середовищі призводить до розповсюдження збурення, тобто до руху хвиль [18]. При цьому хвиля характеризується набором параметрів: швидкість, частота, хвильовий вектор. Хвильове рівняння для суцільного середовища:

$$\frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = v^2 \frac{d^2 \mathbf{u}}{dx^2}$$

Для ОЦК і ГЦК монокристалів швидкість поздовжніх хвиль  $V_{hkl}^L$  :

$$\rho V_{Lhkl}^2 = M_{hkl} \quad (1)$$

Де для базових орієнтацій монокристала [21]:

$$M_{100} = C_{11}; \quad (2)$$

$$M_{110} = \frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2} \quad (3)$$

$$M_{111} = \frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3} \quad (4)$$

З іншої сторони, для узагальненого закону Гука [17,23]:

$$\sigma_{ij} = A_{ijkl} \cdot \varepsilon_{ij} \quad (5)$$

де [23] :

$$A_{ijkl} = Q_{ijkl} + r(P_{ijk}^x + P_{ijk}^y + P_{ijk}^z)$$

$$r = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$$

Тоді

$$\sigma_{zz} = [(C_{11} + 2C_{44}) + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) \cdot (v_3^4 + m_3^4 + n_3^4)] \varepsilon_{zz} \quad (6)$$

де направляючі косинуси:  $\lambda_3 = \cos \theta \sin t$ ;  $\mu_3 = \sin \theta$ ;  $\nu_3 = \cos \theta \cos t$

Раніше [23–24] нами показано, що

$$\sin \theta = \frac{K}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}; \quad \cos \theta = \frac{\sqrt{h^2 + l^2}}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (7)$$

$$\sin t = \frac{h}{\sqrt{h^2 + l^2}}; \quad \cos t = \frac{l}{\sqrt{h^2 + l^2}}$$

Тоді

$$\lambda_3^4 = \cos^4 \theta \sin^4 t = \frac{(h^2 + l^2)^2 \cdot h^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2 \cdot (h^2 + l^2)^2} = \frac{h^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2}$$

$$\mu_3^4 = \sin^4 \theta = \frac{k^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2}$$

$$\nu_3^4 = (\cos \theta \cos t)^4 = \frac{(h^2 + l^2)^2 \cdot l^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2 \cdot (h^2 + l^2)^2} = \frac{l^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2}$$

Звідки маємо:

$$\lambda_3^4 + \mu_3^4 + \nu_3^4 = \frac{h^4 + k^4 + l^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2} = R \quad (8)$$

де R – фактор кристалографічної орієнтації.

З врахуванням (4):

$$M_{hkl} = (C_{12} + 2C_{44}) + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})R \quad (9)$$

Знаходимо R для [100], [110] та [111] та підставляємо в (7):

$$M_{100} = (C_{12} + 2C_{44}) + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) \cdot 1 = C_{11}$$

$$M_{110} = (C_{12} + 2C_{44}) + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) \cdot \frac{1}{2} = \frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2} \quad (10)$$

$$M_{111} = (C_{12} + 2C_{44}) + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) \cdot \frac{1}{3} = \frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3} -$$

у повній відповідності з (2)–(4) – див. [21].

Але (7) дозволяє визначити модуль пружності для будь-яких значень індексів Міллера [hkl] і приваблює суттєвим спрощенням розрахунку модулів поздовжньої пружності ОЦК і ГЦК кристалів для будь-яких значень індексів Міллера [hkl].

Спільний розв'язок (1) і (7) дає:

$$V_{Lhkl} = \sqrt{\frac{M_{hkl}}{\rho}} = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sqrt{(C_{12} + 2C_{44}) + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) \frac{h^4 + k^4 + l^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2}} \quad (11)$$

(11) легко лінеаризується та з високим значенням коефіцієнта кореляції, як буде показано нижче, приводиться до виду

$$V_{hkl}^L = V_0 \pm a_1 \frac{h^4 + k^4 + l^4}{(h^2 + k^2 + l^2)^2} = a_0 + a_1 * R \quad (12)$$

## Результати моделювання

На рис.1–5 наведені залежності швидкості поздовжніх пружних хвиль для 18 лужно-галогенідних монокристалів різних кристалографічних орієнтацій при 298К.

Значення  $M_{hkl}$  для базових кристалографічних напрямів визначалися за (2) – (4), або (6) – (10),

де  $C_{11}; C_{12}; C_{44}$  – пружні константи [17–22].

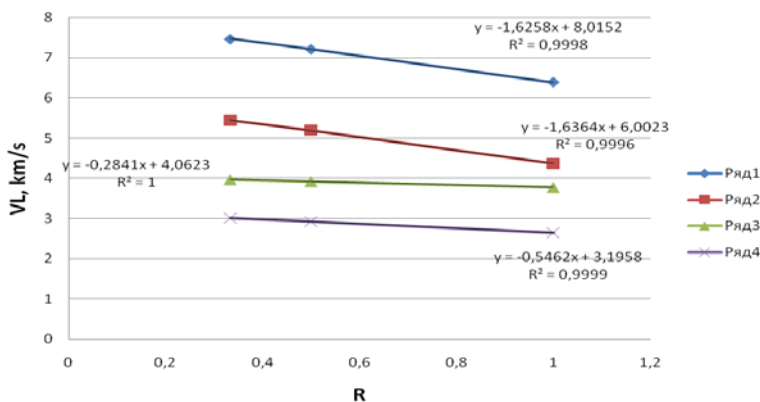


Рис. 1. Галогеніди літія – LiF(1); LiCl(2); LiBr(3); LiI(4)

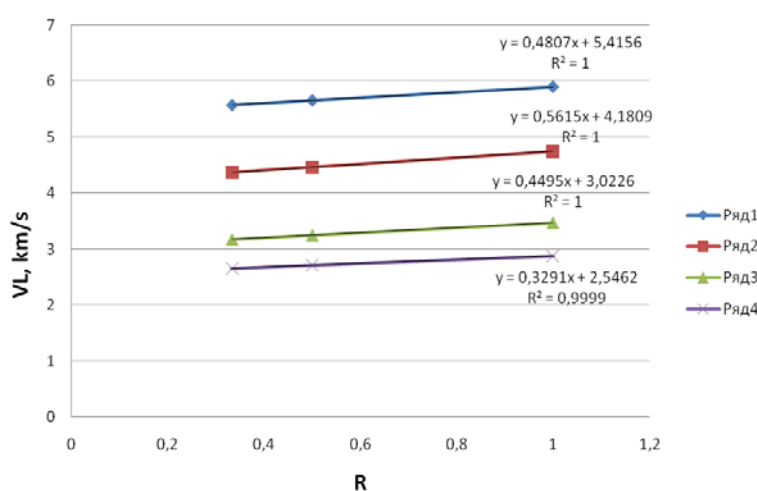


Рис. 2. Галогеніди натрія – NaF(1); NaCl(2); NaBr(3); NaI(4)

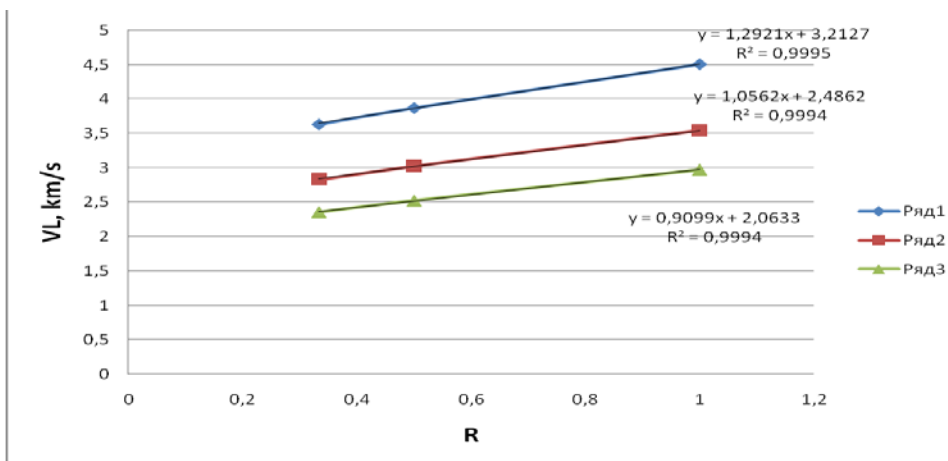


Рис. 3. Галогеніди калія – KCl(1); KBr(2); KI(3)

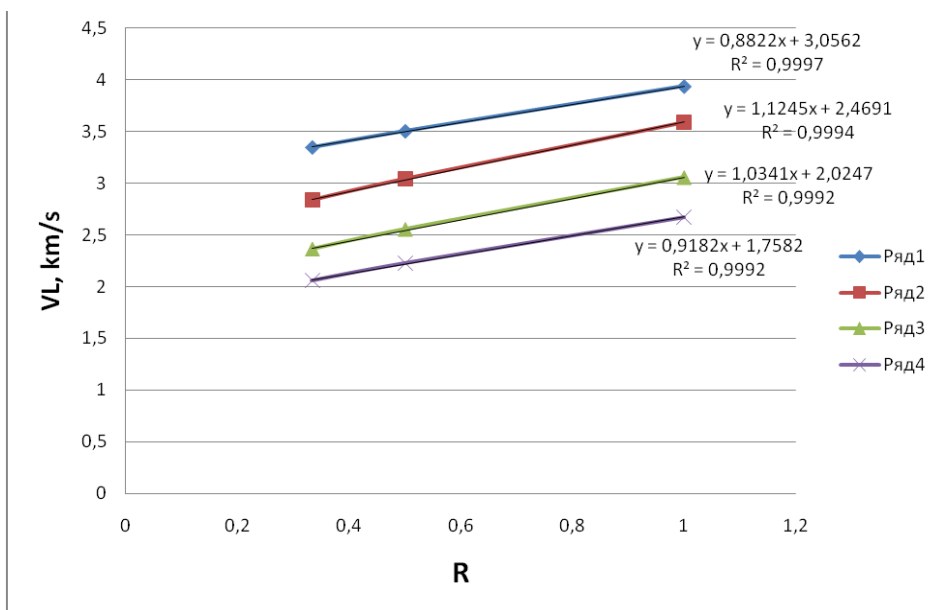


Рис. 4. Галогеніди рубідія – RbF(1); RbCl(2); RbBr(3); RbI(4)

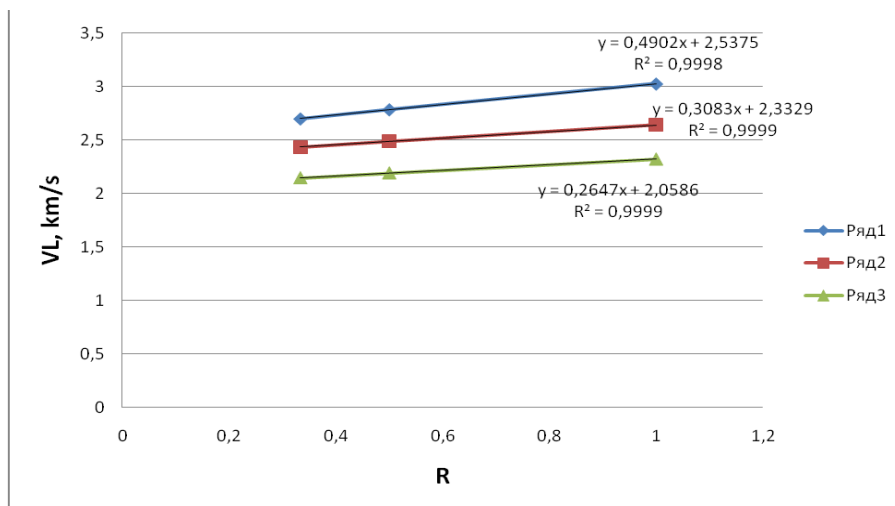


Рис. 5. Галогеніди цезія – CsCl(1); CsBr(2); CsI(3)

На рис. 6 зображено залежності VL(R) для хлоридів в автомобельному просторі.

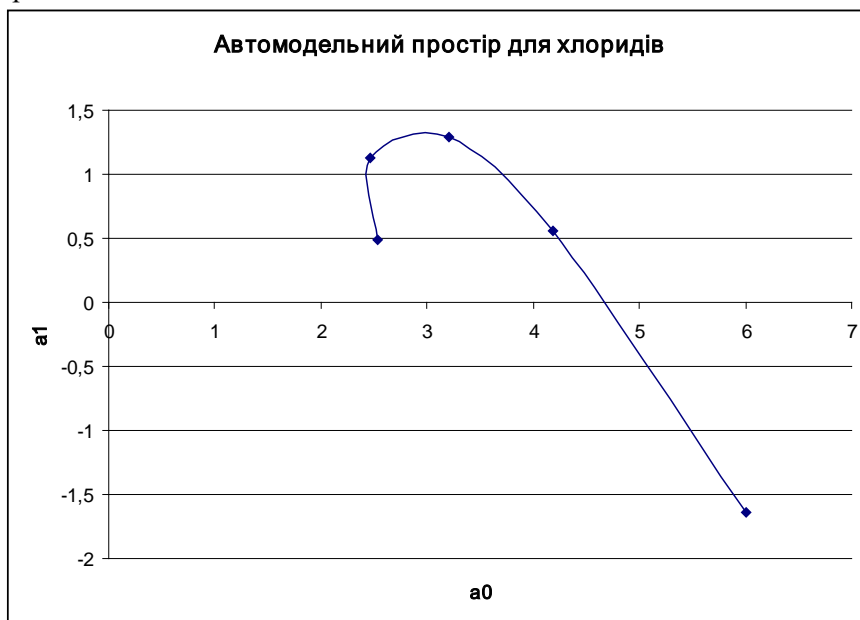


Рис. 6. Взаємозв'язок параметрів  $a_0$  та  $a_1$  рівняння (12) для хлоридів ЛГК. Аналогічні нелінійні автомобельні залежності побудовані для фторидів, бромідів та іодидів ЛГК

## Висновки та перспективи подальших досліджень

1. Вперше з єдиних методологічних позицій побудовані узагальнені залежності швидкості пружних хвиль від кристалографічного напрямку для всіх лужно-галоїдних монокристалів та отримані кореляційні залежності  $VL(R)$  з надзвичайно високим значенням коефіцієнта кореляції ( $r_{11} > 0,999$ ) для всіх вказаних монокристалів.

2. При цьому виявлено лінійний характер даних залежностей в ЛГК всіх груп – фторидів, хлоридів, бромідів та йодидів – від фактора кристалографічної орієнтації  $R$ , що є функцією індексів Міллера.

3. Встановлено, що  $VL(R)$  є лінійні зростаючі функції для галогенідів натрію, калію, рубідію і цезію, тоді як дані залежності для всіх галогенідів літію є лінійними спадаючими функціями, як у типових металів.

4. Встановлено, що залежності  $VL(R)$  не утворюють пучки прямих, що не дає можливості застосування до них методів лінійної автотомельності [23]. Побудовані автотомельні залежності  $a_1(a_0)$  для всіх груп ЛГК та показано їх нелінійність.

5. Отримані узагальнення дозволяють запропонувати новий підхід як до кількісного ранжування ЛГК, так і дають підстави для встановлення нових, невідомих раніше, взаємозв'язків між фізичними властивостями ЛГК, накопиченими в акустиці, оптиці, радіофізиці, радіології, теорії пружності, фізиці руйнування, електродинаміці тощо, чому будуть присвячені наші наступні публікації.

## Література

1. Создание микрокристаллических ЩГС с примесью никеля и исследование их спектральных и структурных характеристик / Ю. Г. Конюхова, В. И. Кочубей, Д. И. Кочубей, В. П. Бабенко // Журнал структурной химии. – 2007. – Т. 48, № 6. – С. 1164–1169.

2. Губарева Т. В. Радиационная физика ЩГК и проблемы атмосферного озона / Т. В. Губарева // Systems. Methods. Technologies. – 2013. – № 1 (17). – С. 170–175.

3. Радиационные спектры окраски [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://books.ifmo.ru/file/pdf/362.pdf>.

4. Вараксин А. Н. Характеристики F-центров ЩГК в основном и возбужденном состоянии / А. Н. Вараксин, А. Б. Соболев, В. Г. Панов // Физика твердого тела. – 2006. – Т. 48, вып. 3. – С. 427–432.

5. Роголин В. Е. Оптическая стойкость прозрачных материалов для мощных импульсных CO<sub>2</sub>-лазеров [Электронный ресурс] / В. Е. Роголин. – Режим доступа: <http://www.physics-online.ru/PaperLogos/6365/6365.pdf>.

6. Ванина Е. А. Упорядочение радиационных дефектов в неорганических системах : монография / Е. А. Ванина, Е. М. Веселова, В. А. Рокосей. – Благовещенск, 2014. – 116 с.



7. Гришаев А. А. Независимый исследователь. О структуре и свойствах щелочно-галлоидных кристаллов: физические связи между атомами [Электронный ресурс] / А. А. Гришаев. – Режим доступа: <http://newfiz.info>.
8. Беломестных В. Н. Коэффициенты Пуассона ЦГК / В. Н. Беломестных, Э. Г. Соболева // Известия ТПУ. – 2012. – Т. 320, № 2. – С. 137–139.
9. Мамчуев М. О. Фазовый переход «диэлектрик-металл» в щелочно-галлоидных кристаллах в условиях высоких давлений : автореф. дисс. на соискание учен. степени канд. ф.-м. наук / М. О. Мамчуев. – Нальчик, 2011. – 22 с.
10. Красильников О. М. Ангармонизм решетки и фазовые переходы в твердых телах с кубической симметрией : дисс. ... доктора ф.-м. наук / О. М. Красильников. – М., 2007. – 321 с.
11. Магомедов М. Н. Расчет температуры Дебая ЦГК / М. Н. Магомедов // Теплофизика высоких температур. – 1992. – Т. 30, вып. 6. – С. 1110–1117.
12. Электризация щелочно-галлоидных кристаллов в процессе скола / В. М. Финкель, Ю. И. Тялин, Ю. И. Головин [и др.] // Физика твердого тела. – 1979. – Т. 21, вып. 7. – С. 1943–1947.
13. Тялин Ю. И. Скопления заряженных дислокаций и зарождение трещин в неметаллических кристаллах / Ю. И. Тялин, В. М. Финкель // Докл. АН СССР. – 1984. – Т. 279, № 5. – С. 1126–1130.
14. Усов А. Ф. Переходные процессы в установках электроимпульсной технологии / А. Ф. Усов, Б. В. Семкин, Н. Т. Зиновьев. – Л. : Наука, 1987. – 179 с.
15. Залечивание трещин в щелочно-галлоидных кристаллах / Ю. И. Тялин, В. А. Тялина, В. А. Федоров [и др.] // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, № 9. – С. 1614–1617.
16. Тучин В. В. Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях / В. В. Тучин. – М. : Физматлит, 2010. – 500 с.
17. Сиротин Ю. И. Основы кристаллофизики / Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. – [Изд. 2-е, доп. и перераб.]. – М. : Наука, 1979. – 640 с.
18. Дьелесан Э. Упругие волны в твердых телах / Э. Дьелесан, Д. Руайе. – М. : Наука, 1982. – 424 с.
19. Францевич И. Н. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов / И. Н. Францевич, Ф. Ф. Воронов, С. А. Бакута. – К. : Наук. думка, 1982. – 288 с.
20. Александров К. С. Упругие свойства кристаллов / К. С. Александров, Т. В. Рыжова // Кристаллография. – 1961. – № 6, вып. 2. – С. 289–314.
21. Физические величины: Справочник / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский [и др.] ; под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. – М. : Энергоиздат, 1991. – 1232 с.
22. Simmons G. Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties / G. Simmons // J. Grad. Res. Cent. – 1965. – 34, № 1/2. – P. 1–269.
23. Грабар І. Г. Термоактиваційний аналіз та синергетика руйнування / І. Г. Грабар. – Житомир, 2002. – 312 с.
24. Грабар І. Г. Фрактали і тензори в наукових дослідженнях / І. Г. Грабар, О. І. Грабар. – Житомир, 2007. – 69 с.