АКУСТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ, 2003, том 49, № 5, с. 700–710

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ЗАТУХАНИЕ УЛЬТРАЗВУКА В МОНОХАЛЬКОГЕНИДАХ ПРАЗЕОДИМА

© 2003 г. Р. Р. Ядав, Д. Сингх

Аллахабадский университет, физический факультет, Индия, 211002, Аллахабад

E-mail: rryadav1@rediffmail.com, devraj2001@rediffmail.com

Поступила в редакцию 17.06.2002 г.

Оценивается затухание ультразвука в интерметаллических монохалькогенидах празеодима вдоль кристаллографических осей ⟨100⟩, ⟨110⟩ и ⟨111⟩ в диапазоне температур 100–500 K для случаев продольных и сдвиговых волн. Проведено сравнение с монохалькогенидами лантана и другими подобными материалами. Температурная зависимость затухания ультразвука определяется в основном температурной зависимостью теплопроводности кристаллической решетки материала. Потери, связанные с термоупругостью, очень малы в сравнении с затуханием, вызванным фонон-фононным взаимодействием при высоких температурах.

ВВЕДЕНИЕ

В 1960–1970-х годах много внимания уделялось аномальным физическим свойствам монохалькогенидов редкоземельных элементов RX (R = La, Ce, Pr, Sm, …; X = S, Se, Te), поскольку они являются типичными сильно коррелированными системами с низкой концентрацией носителей, обладающими простой структурой типа NaCl [1–3]. Интерметаллические монохалькогениды празеодима широко используются как основной материал для угольных дуговых ламп, применяемых в киноиндустрии для освещения в студиях [3, 4]. Ультразвук позволяет определять и характеризовать микроструктуру материала и на основе физических механизмов предсказывать его свойства. Неоднородности структуры, упругие характеристики, включения, дислокации, зернистость, фазовые переходы, пористость, трещины, удельное электрическое сопротивление, теплопроводность и т.п. тесно связаны с частотной или температурной зависимостью затухания ультразвука и его скоростью. В настоящей статье обсуждаются некоторые характерные микроструктурные теплофизические параметры, которые вносят значительный вклад в температурную зависимость затухания ультразвука в PrS, PrSe и PrTe вдоль кристаллографических осей ⟨100⟩, ⟨110⟩ и ⟨111⟩. Для этого мы оценивали затухание ультразвука в связи с другими родственными параметрами и упругими константами второго и третьего порядка в зависимости от повышенной температуры.

ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Упругие константы второго и третьего порядка играют важную роль для оценки затухания ультразвука. Мы вычисляли эти константы в соответствии с определением Бруггера для упругих характеристик при абсолютном нуле (C^0_{IJ} и C^0_{IJK}) [5, 6]. Упругие константы второго и третьего порядков при различных значениях высокой температуры получены методом, разработанным Лейбфридом и Халном, а также Хики и Гхате [7–11] для кристаллов типа NaCl, поскольку монохалькогениды празеодима имеют развитую структуру этого типа. Параметры их кристаллической решетки очень близки к данным, приводимым в литературе [3, 12–14]. Монохалькогениды празеодима представляют собой соединения со связью ионно-металлического типа [3]. Предполагается, что потенциал взаимодействия $\phi_{\mu\nu}(r)$ является суммой кулоновского потенциала и потенциала Борна–Майера сил отталкивания ближнего действия, т.е.

$$\phi_{\mu\nu}(r) = \pm(e^2/r) + A\exp(-r/b).$$

Здесь e – заряд электрона, r – расстояние до ближайшего соседнего элемента, знак ± зависит от знака зарядов (подобных или противоположных), а A и b – параметры. Далее мы предполагаем, что A и b остаются теми же самыми при взаимодействиях между подобными (положительными или отрицательными) и противоположными ионами [9–11]. Все формулы, использованные при вычислении упругих констант второго и третьего порядков для PrS, PrSe и PrTe, взяты из нашей предыдущей работы [15].

Вторая часть нашей работы направлена на создание теории для оценки поглощения ультразвука в PrS, PrSe и PrTe, описывающей некоторые характерные свойства этих материалов. Для

изучения затухания ультразвука в монохалькогенидах празеодима при повышенной температуре (≅300 K) все еще широко и успешно используется теория У.П. Мейсона и Бейтмена [16, 17]. Она более надежна при исследовании ангармоничности кристаллов, так как при оценке коэффициента поглощения ультразвука (α) эта теория включает в себя упругие константы непосредственно через параметр нелинейности D.

Время тепловой релаксации [16, 17] для продольных волн вдвое превышает соответствующее значение для сдвиговых волн:

$$\tau_{th} = \tau_{sh} = \frac{1}{2}\tau_{long} = \frac{3K}{C_V \bar{V}^2}. \quad (1)$$

Здесь K – коэффициент теплопроводности, C_V – удельная теплоемкость при постоянном объеме, $\bar{V}$ – дебаевская средняя скорость ультразвуковой волны:

$$\frac{3}{\bar{V}^3} = \frac{1}{V_l^3} + \frac{2}{V_S^2}. \quad (2)$$

Термоупругие потери [16, 17] определяются как

$$(\alpha/f^2)_{th} = \frac{4\pi^2 \langle \gamma_i^j \rangle^2 KT}{2\rho V_{long}^5}, \quad (3)$$

где $\langle \gamma_i^j \rangle$ – средние значения параметра Грюнайзена, j – направление распространения, i – режим распространения, величина $\langle \gamma_i^j \rangle$ связана с упругими константами второго и третьего порядков [16], ρ – плотность материала, а T – температура по шкале Кельвина.

Коэффициент поглощения ультразвука, деленный на квадрат частоты, $(\alpha/f^2)_{Akh}$ (потери ахиезеровского типа) определяется выражением ($\omega\tau \le 1$) [15–17]

$$(\alpha/f^2)_{Akh} = \frac{E_0 (D/3) 4\pi^2 \tau}{2\rho V^3}, \quad (4)$$

где

$$D = 9\langle (\gamma_i^j)^2 \rangle - (3\langle \gamma_i^j \rangle^2 C_v T)/E_0, \quad (5)$$

D – параметр нелинейности для продольных и сдвиговых волн и E_0 – плотность тепловой энергии, которая определяется из таблиц физических величин при известном значении C_v.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Первые части упругих постоянных второго и третьего порядков (C_{IJ} и C_{IJK}) при различных температурах вычисляются, исходя из кратчайшего расстояния до соседнего элемента (параметр близкодействия) [3–12] r_0 = 2.855 Å, 2.96 Å и 3.14 Å для PrS, PrSe и PrTe соответственно и параметра Борна (параметр твердости) b = 0.315 Å (для всех трех материалов). Параметр Борна был определен в нашей предыдущей работе [15].

Таблица 1. Упругие постоянные второго и третьего порядков (10^{10} Па) для PrS в диапазоне температур 100–500 K

Темп. (K)	100	200	300	400	500
C_{11}	4.757	4.905	5.069	5.237	5.409
C_{12}	1.352	1.279	1.205	1.132	1.058
C_{44}	1.432	1.438	1.433	1.450	1.456
C_{111}	−75.576	−76.191	−76.972	−77.800	−78.686
C_{112}	−5.543	−5.272	−4.999	−4.726	−4.453
C_{123}	1.936	1.515	1.095	0.675	0.255
C_{144}	2.374	2.392	2.411	2.429	2.447
C_{166}	−5.849	−5.871	−5.896	−5.922	−5.949
C_{456}	2.355	2.355	2.355	2.355	2.355

Таблица 2. Упругие постоянные второго и третьего порядков (10^{10} Па) для PrSe в диапазоне температур 100–500 K

Темп. (K)	100	200	300	400	500
C_{11}	4.550	4.651	4.741	4.945	5.104
C_{12}	1.142	1.074	1.001	0.931	0.859
C_{44}	1.224	1.228	1.231	1.237	1.242
C_{111}	−73.102	−73.331	−73.375	−74.639	−75.418
C_{112}	−4.639	−4.396	−4.118	−3.848	−3.572
C_{123}	1.609	1.185	0.758	0.332	0.095
C_{144}	2.056	2.071	2.087	2.103	2.119
C_{166}	−4.990	−5.002	−5.013	−5.042	−5.064
C_{456}	2.039	2.039	2.039	2.039	2.039

Все вычисленные значения упругих постоянных второго и третьего порядков при температурах 100–500 K приведены в табл. 1–3 соответственно.

Упругие постоянные второго и третьего порядков для PrS, PrSe и PrTe несколько превышают соответствующие значения для подобных соединений LaS, LaSe и LaTe при всех значениях температуры [15]. Таким образом, можно считать, что теория для расчета упругих постоянных второго и третьего порядков существует. Это же показывает и обсуждение результатов в нашей предыду-

Таблица 3. Упругие постоянные второго и третьего порядков (10^{10} Па) для PrTe в диапазоне температур 100–500 K

Темп. (K)	100	200	300	400	500
C_{11}	4.002	4.120	4.263	4.413	4.567
C_{12}	0.870	0.803	0.734	0.666	0.597
C_{44}	0.944	0.947	0.951	0.955	0.959
C_{111}	−66.779	−67.205	−67.897	−68.67	−69.484
C_{112}	3.499	−3.232	−2.954	−2.674	−2.395
C_{123}	1.173	0.737	0.300	0.136	−0.573
C_{144}	1.623	1.635	1.648	1.661	1.673
C_{166}	−3.816	−3.829	−3.846	−3.863	−3.880
C_{456}	1.610	1.610	1.610	1.610	1.610

Таблица 4. Плотность (ρ, г/см^3), коэффициенты теплопроводности (K, 10^5 эрг/см с K), удельная теплоемкость (C_v, 10^8 эрг/см^3 град), внутренняя энергия (E_0, 10^8 эрг/см^3), скорости продольных и сдвиговых волн (V_l и V_s, 10^5 см/с), дебаевская средняя скорость ($\bar{V}$, 10^5 см/с) и время тепловой релаксации (τ_{th}, 10^{-11} с) для PrS в диапазоне температур 100–500 K

Темп. (K)	100	200	300	400	500
ρ	6.225	6.201	6.173	6.160	6.154
K	8.400	11.574	13.813	15.400	15.464
C_v	7.300	8.430	8.710	8.770	8.670
E_0	3.800	11.850	20.397	29.101	37.888
V_l	2.764	2.813	2.866	2.916	2.965
V_s	1.517	1.523	1.529	1.534	1.538
$\bar{V}$	1.671	1.769	1.689	1.695	1.701
τ_{th}	1.237	1.444	1.671	1.834	1.849

Таблица 5. Плотность (ρ, г/см^3), коэффициенты теплопроводности (K, 10^5 эрг/см с K), удельная теплоемкость (C_v, 10^8 эрг/см^3 град), внутренняя энергия (E_0, 10^8 эрг/см^3), скорости продольных и сдвиговых волн (V_l и V_s, 10^5 см/с), дебаевская средняя скорость ($\bar{V}$, 10^5 см/с) и время тепловой релаксации (τ_{th}, 10^{-11} с) для PrSe в диапазоне температур 100–500 K

Темп. (K)	100	200	300	400	500
ρ	7.205	7.102	7.042	6.932	6.812
K	5.413	7.280	8.960	9.520	9.927
C_v	7.010	7.760	7.871	7.812	7.573
E_0	3.942	11.357	19.055	26.546	33.799
V_l	2.513	2.559	2.595	2.671	2.737
V_s	1.303	1.315	1.322	1.336	1.350
$\bar{V}$	1.442	1.455	1.464	1.481	1.498
τ_{th}	1.115	1.329	1.594	1.668	1.753

Таблица 6. Плотность (ρ, г/см^3), коэффициенты теплопроводности (K, 10^5 эрг/см с K), удельная теплоемкость (C_v, 10^8 эрг/см^3 град), внутренняя энергия (E_0, 10^8 эрг/см^3), скорости продольных и сдвиговых волн (V_l и V_s, 10^5 см/с), дебаевская средняя скорость ($\bar{V}$, 10^5 см/с) и время тепловой релаксации (τ_{th}, 10^{-11} с) для PrTe в диапазоне температур 100–500 K

Темп. (K)	100	200	300	400	500
ρ	7.40	7.305	7.204	7.101	7.015
K	4.667	6.347	7.653	8.400	8.973
C_v	6.191	6.624	6.631	6.583	6.500
E_0	3.777	10.162	16.608	22.925	29.199
V_l	2.324	2.375	2.433	2.493	2.552
V_s	1.129	1.139	1.152	1.160	1.169
$\bar{V}$	1.254	1.265	1.280	1.291	1.302
τ_{th}	1.440	1.800	2.113	2.299	2.443

щей работе [15]. Для упругих постоянных не существует экспериментальных данных, поэтому сравнение с результатами экспериментов невозможно.

Однако можно еще до некоторой степени улучшить результаты вычисления упругих постоянных третьего порядка, полностью учитывая многочисленные взаимодействия между ионами, включая вандерваальсовское, и нелинейность материала [18].

Значения скоростей ультразвука (V_l и V_S), вычисленные в соответствии со значениями упругих постоянных второго порядка, дебаевской средней скорости ($\bar{V}$), времени тепловой релаксации (τ_{th}), теплопроводности (K), удельной теплоемкости (C_V) и плотности тепловой энергии (E_0), приведены в табл. 4–6.

Все вычисленные величины средних значений параметра Грюнайзена $\langle \gamma_i^j \rangle$, средних квадратов параметра Грюнайзена $\langle (\gamma_i^j)^2 \rangle$ и параметра нелинейности (D) вдоль осей ⟨100⟩, ⟨110⟩ и ⟨111⟩ даны в табл. 7–9. В табл. 10–12 представлены все вычисленные значения для температурных зависимостей $(\alpha/f^2)_{th}$, $(\alpha/f^2)_{Akh.long}$ и $(\alpha/f^2)_{Akh.shear}$. Вычисленные значения (α) при частоте 900 МГц и комнатной температуре, выраженные в дБ/мкс, для PrS, PrSe и PrTe в сравнении с соответствующими зна-

Таблица 7. Средние значения ультразвукового параметра Грюнайзена ($\langle\gamma_i^j\rangle_l$ для продольных волн), средние значения квадрата ультразвукового параметра Грюнайзена ($\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{long}$ для продольных волн и $\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{shear}$ для сдвиговых волн) и постоянные акустической связи (D_l для продольных волн и D_s для сдвиговых волн) для PrS, PrSe и PrTe в диапазоне температур 100–500 K вдоль кристаллографической оси ⟨100⟩

Материал	Темп. (K)	$\langle\gamma_i^j\rangle$	$\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_l$	$\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_s$	D_l	D_s
PrS	100	0.519	2.064	0.142	17.024	1.278
	200	0.501	1.942	0.140	16.394	1.260
	300	0.483	1.833	0.138	15.600	1.242
	400	0.462	1.740	0.137	14.888	1.233
	500	0.452	1.648	0.134	14.131	1.206
PrSe	100	0.511	2.094	0.136	17.453	1.224
	200	0.496	1.992	0.135	16.919	1.215
	300	0.482	1.900	0.134	16.236	1.206
	400	0.464	1.790	0.132	15.349	1.188
	500	0.448	1.703	0.131	14.650	1.178
PrTe	100	0.514	2.260	0.133	19.041	1.197
	200	0.496	2.135	0.132	18.253	1.188
	300	0.478	2.014	0.130	17.305	1.170
	400	0.461	1.909	0.129	16.449	1.161
	500	0.446	1.815	0.128	15.674	1.152

чениями для LaS, LaSe и LaTe, а также экспериментальные данные приведены в таблице 13.

На рис. 1–7 показана температурная зависимость параметра нелинейности (D). Температурная зависимость коэффициента затухания ультразвука, деленного на квадрат частоты, (α/f^2) для PrS, PrSe и PrTe вдоль кристаллографических осей приведена на рис. 8–17.

Упругие постоянные второго порядка, время тепловой релаксации, параметры нелинейности и теплопроводность вносят существенный вклад в поглощение ультразвука в PrS, PrSe и PrTe.

Поскольку все упругие постоянные второго и третьего порядков для PrS, PrSe и PrTe при 100–500 K несколько превышают соответствующие значения для LaS, LaSe и LaTe [15], значения скоростей ультразвука (V_l, V_S и $\bar{V}$) будут несколько превышать эти величины для монохалькогенидов лантана, и, наконец, значения (α/f^2) будут меньше по сравнению с этими значениями для монохалькогенидов лантана.

Время тепловой релаксации (τ_{th}) для монохалькогенидов празеодима меньше, чем в случае монохалькогенидов лантана.

Если сравнить значения параметра нелинейности для монохалькогенидов празеодима и лантана, можно заметить следующее.

Таблица 8. Средние значения ультразвукового параметра Грюнайзена ($\langle\gamma_i^j\rangle_l$ для продольных волн), средние значения квадрата ультразвукового параметра Грюнайзена ($\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{long}$ для продольных волн, $\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{shear1}$ для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси ⟨001⟩, и $\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{shear2}$ для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси $\langle 1\bar{1}10\rangle$), и постоянные акустической связи (D для продольных волн, D_{s1} для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси ⟨001⟩, и D_{s2} для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси $\langle 1\bar{1}0\rangle$), для PrS, PrSe и PrTe в диапазоне температур 100–500 K вдоль кристаллографической оси ⟨110⟩

Материал	Темп. (K)	$\langle\gamma_i^j\rangle$	$\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_l$	$\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{s1}$	$\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{s2}$	D_l	D_{s1}	D_{s2}
PrS	100	−0.788	2.262	0.319	3.081	17.367	4.365	26.757
	200	−0.755	2.082	0.286	2.970	16.575	3.699	25.578
	300	−0.725	1.921	0.260	2.870	15.252	3.168	24.471
	400	−0.686	1.721	0.225	2.737	14.104	2.961	23.886
	500	−0.655	1.604	0.203	2.633	12.963	2.421	22.158
PrSe	100	−0.788	2.262	0.319	3.018	17.045	2.871	27.729
	200	−0.755	2.082	0.286	2.970	16.401	2.574	26.730
	300	−0.725	1.921	0.260	2.870	15.335	2.340	25.830
	400	−0.686	1.742	0.225	2.737	14.017	2.025	24.633
	500	−0.655	1.604	0.203	2.633	13.438	1.287	26.001
PrTe	100	−0.783	2.338	0.215	3.403	18.028	1.935	30.627
	200	−0.744	2.134	0.193	3.264	17.043	1.737	29.376
	300	−0.706	1.944	0.173	3.124	15.705	1.577	28.116
	400	−0.670	1.783	0.156	3.001	14.501	1.404	27.009
	500	−0.638	1.645	0.143	2.889	13.446	1.289	26.011

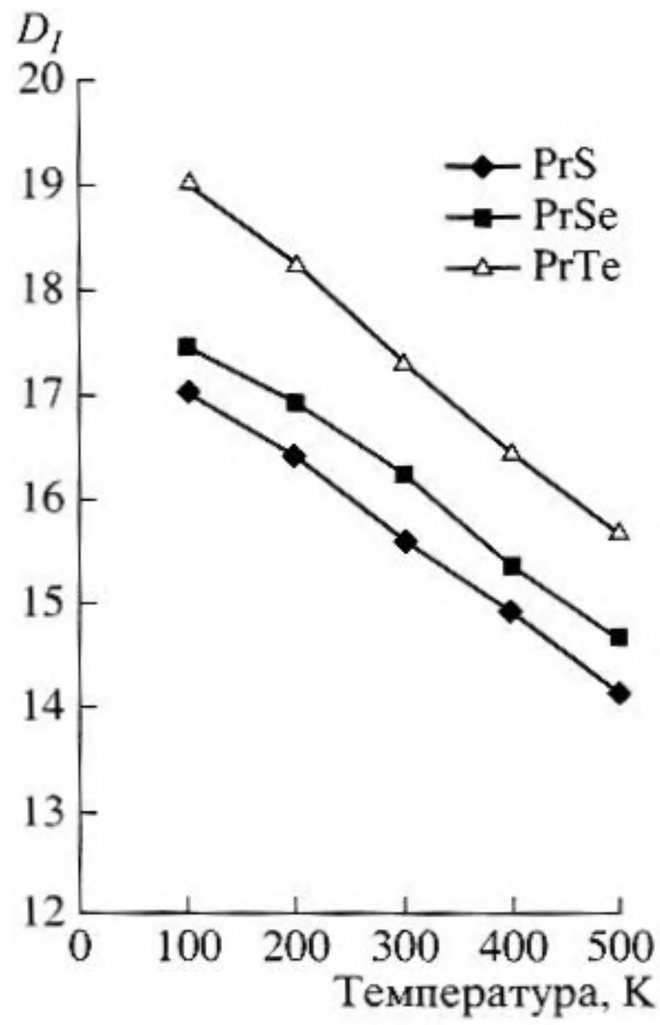

Рис. 1. Температурная зависимость D_I вдоль оси ⟨100⟩.

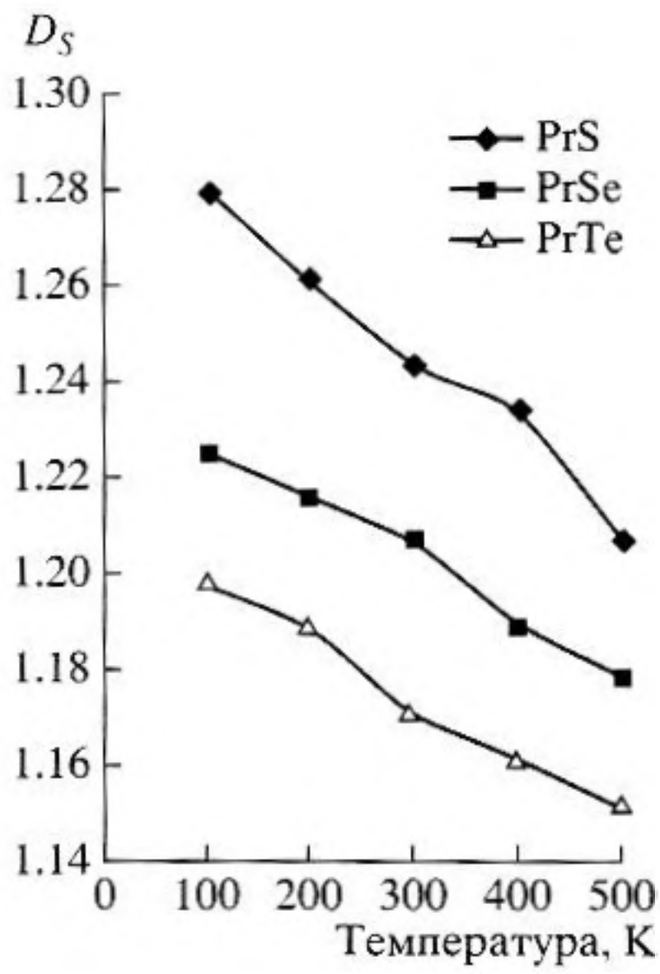

Рис. 2. Температурная зависимость D_S вдоль оси ⟨100⟩.

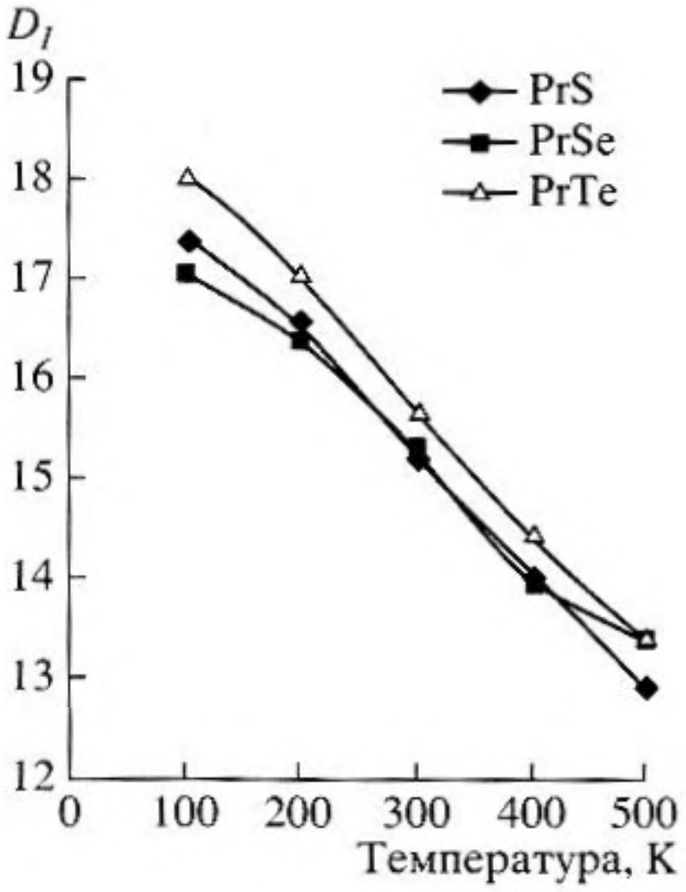

Рис. 3. Температурная зависимость D_I вдоль оси ⟨110⟩.

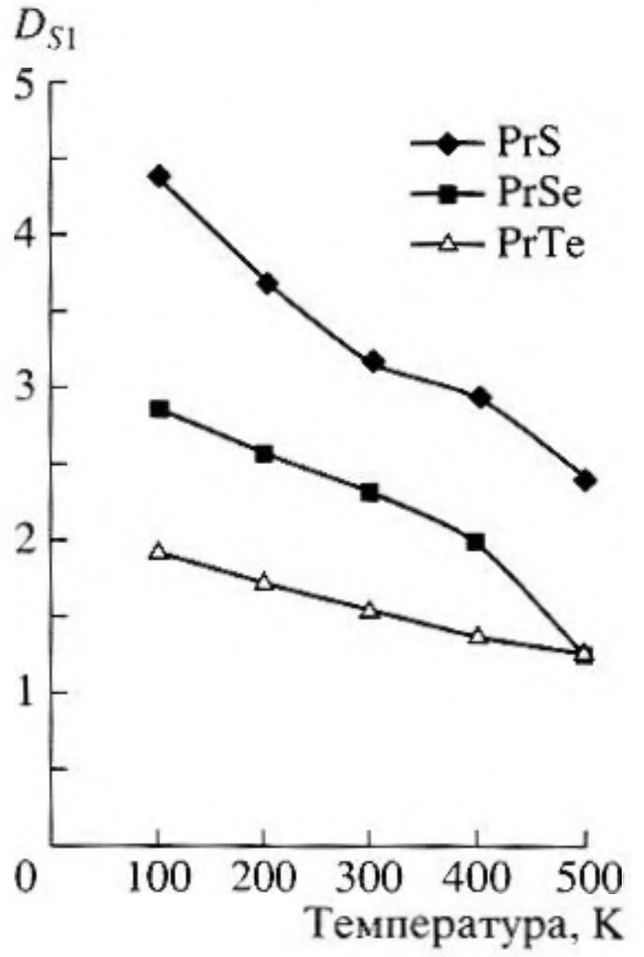

Рис. 4. Температурная зависимость D_{S1} вдоль оси ⟨110⟩ (сдвиговая волна, поляризованная вдоль оси ⟨001⟩).

При рассмотрении параметров нелинейности вдоль оси ⟨110⟩ для продольных волн D_1, вдоль оси ⟨110⟩ для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси ⟨001⟩, D_{S1}, и вдоль оси ⟨110⟩ для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси $\langle 1\bar{1}0 \rangle$, D_{S2} значения D_1 для монохалькогенидов празеодима будут меньше, чем для монохалькогенидов лантана; значения D_{S1} для монохалькогенидов празеодима больше, чем для монохалькогенидов лантана; значения D_{S2} для монохалькогенидов празеодима меньше, чем для монохалькогенидов лантана.

Из табл. 4–6 и [15] видно, что значения коэффициента теплопроводности для PrS, PrSe и PrTe меньше, чем соответствующие значения для LaS, LaSe и LaTe. Таким образом, в случае PrS, PrSe и PrTe все параметры, кроме параметра нелинейности D_{S1}, при различных значениях температуры вносят меньший вклад в коэффициенты поглощения ультразвука $(\alpha/f^2)_{th}$, $(\alpha/f^2)_L$ и $(\alpha/f^2)_S$ по сравнению со случаем LaS, LaSe и LaTe.

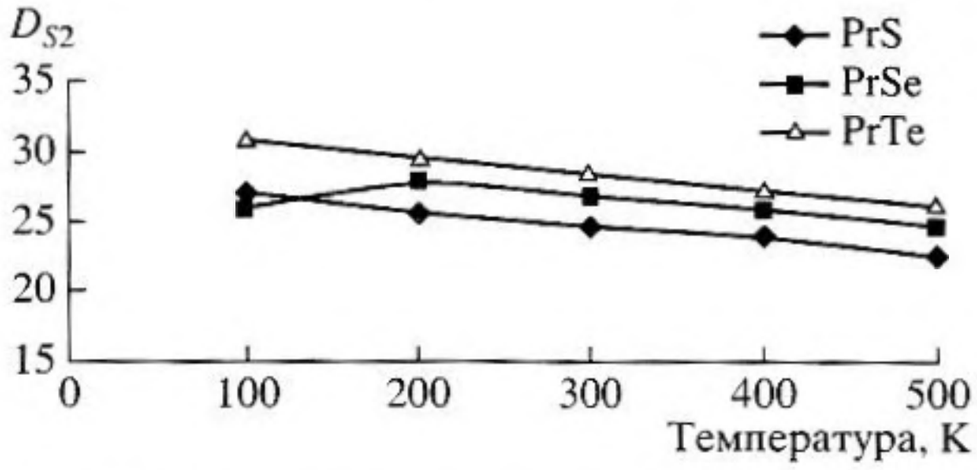

Рис. 5. Температурная зависимость D_{S2} вдоль оси ⟨110⟩ (сдвиговая волна, поляризованная вдоль оси $\langle 1\bar{1}0\rangle$).

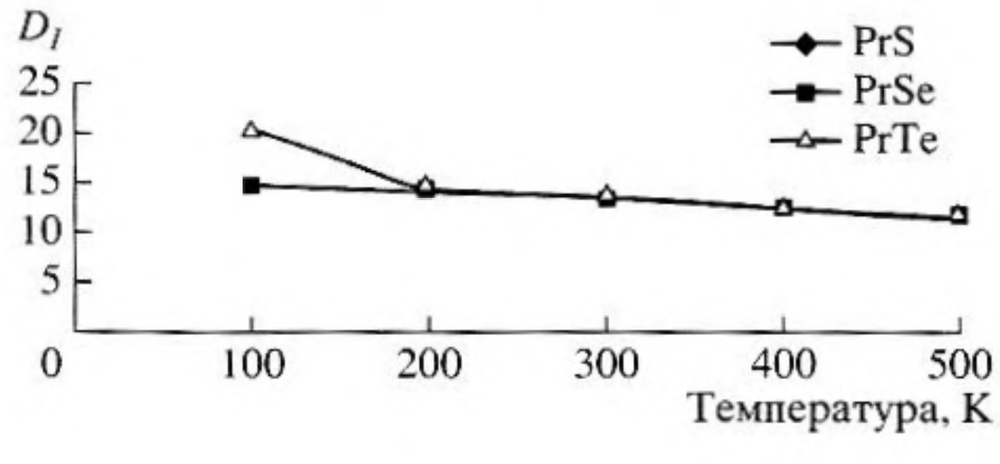

Рис. 6. Температурная зависимость D_l вдоль оси ⟨111⟩.

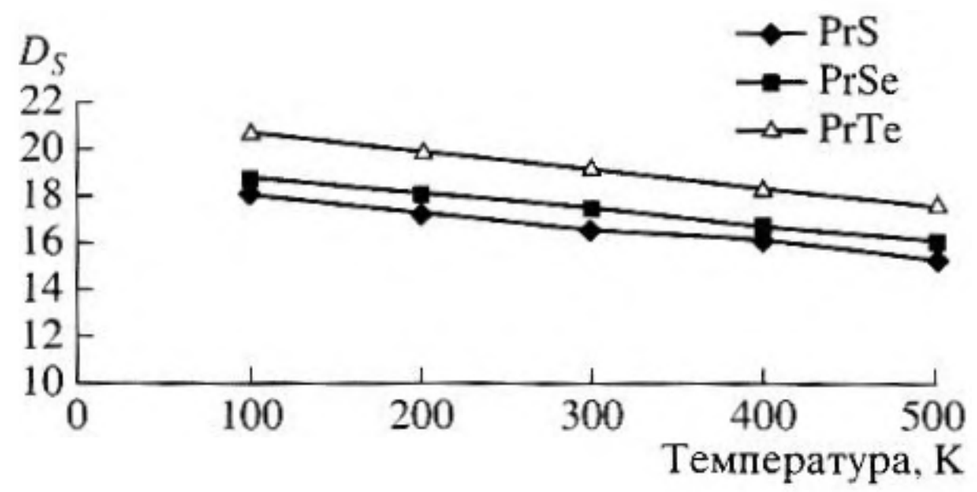

Рис. 7. Температурная зависимость D_S вдоль оси ⟨100⟩.

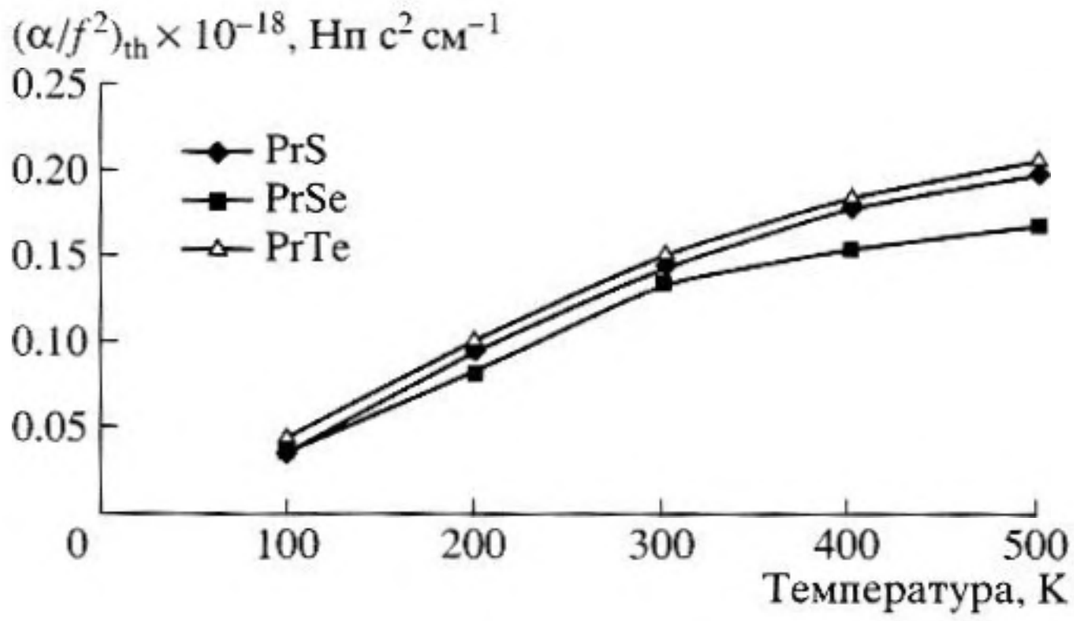

Рис. 8. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{th}$ вдоль оси ⟨100⟩.

Следовательно, в результате из табл. 11 и [15] можно видеть, что коэффициенты поглощения ультразвука для PrS, PrSe и PrTe при температуре 100–500 K вдоль оси ⟨110⟩ для продольных волн и вдоль оси ⟨110⟩ для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси $\langle 1\bar{1}0\rangle$, меньше соответствующих значений для LaS, LaSe и LaTe, в отличие от случая сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси ⟨001⟩ и распространяющихся вдоль оси ⟨110⟩, когда значения этих коэффициентов больше.

Кроме того, из рис. 4 из данной работы и рисунка 2 из [15] видно, что в случае монохалькогенидов лантана параметр D_{S1} почти постоянен по отношению к температуре, а в случае монохалькогенидов празеодима он уменьшается с температурой и влияет на температурную зависимость поглощения ультразвука вдоль оси ⟨110⟩ для сдвиговых волн, поляризованных вдоль оси ⟨001⟩.

В табл. 13 проведено также сравнение α, выраженного в дБ/мкс, для случаев PrS, PrSe и PrTe и LiF (эксперимент), а также LaS, LaSe и LaTe для других ориентаций при комнатной температуре и частоте 900 МГц [19–21].

В целом, из табл. 8–17 видно, что влияние высокой температуры на затухание ультразвука в PrS, PrSe и PrTe больше, чем в LaS, LaSe и LaTe.

Из табл. 5–7 видно, что параметры нелинейности D для всех трех веществ уменьшаются с температурой на очень маленькие величины вдоль всех ориентаций. Следовательно, они дают очень маленький вклад в температурную зависимость поглощения в PrS, PrSe и PrTe.

Несмотря на то, что в литературе нет экспериментальных данных по поглощению ультразвука в PrS, PrSe и PrTe, было проведено сравнение с данными для LaS, LaSe и LaTe. Можно также провести сравнение с другими подобными веществами, такими как NaCl. Экспериментальное значение поглощения ультразвука в NaCl [22] при комнатной температуре на частоте 100 МГц для продольных волн составляет 0.2 дБ/мкс. По результатам наших вычислений для указанных материалов значения поглощения ультразвука при 300 K составляют ≅0.10 дБ/мкс. Таким же образом для продольных волн вдоль кристаллографической оси ⟨110⟩ вычисленные нами значения для PrS, PrSe и PrTe составляют 0.06 дБ/мкс на частоте 100 МГц, а экспериментальное значение для NaCl на частоте 100 МГц равно 0.1 дБ/мкс. Одна-

Таблица 9. Средние значения ультразвукового параметра Грюнайзена ($\langle\gamma_i^j\rangle_l$ для продольных волн), средние значения квадрата ультразвукового параметра Грюнайзена ($\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{long}$ для продольных волн и $\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_{shear}$ для сдвиговых волн) и постоянные акустической связи (D_l для продольных волн и D_s для сдвиговых волн) для PrS, PrSe и PrTe в диапазоне температур 100–500 K вдоль кристаллографической оси ⟨111⟩. (*Сдвиговая волна, поляризованная вдоль $\langle\bar{1}10\rangle$)

Материал	Темп. (K)	$\langle\gamma_i^j\rangle$	$\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_l$	$\langle(\gamma_i^j)^2\rangle_s$	D_l	D_s
PrS	100	−0.630	1.883	2.005	14.659	18.045
	200	−0.603	1.723	1.918	13.955	17.262
	300	−0.578	1.581	1.837	12.945	16.533
	400	−0.549	1.463	1.796	12.077	16.164
	500	−0.533	1.348	1.695	11.157	15.255
PrSe	100	−0.625	1.848	2.080	14.548	18.720
	200	−0.602	1.713	2.007	13.931	18.063
	300	−0.581	1.592	1.942	13.073	17.478
	400	−0.555	1.455	1.855	12.008	16.695
	500	−0.533	1.348	1.787	11.174	16.083
PrTe	100	−0.639	2.452	2.300	20.061	20.700
	200	−0.612	1.768	2.210	14.448	19.890
	300	−0.585	1.616	2.118	13.314	19.062
	400	−0.560	1.486	2.038	12.264	18.342
	500	−0.538	1.372	1.965	11.382	17.685

Таблица 10. Коэффициенты затухания ультразвука, обусловленного фонон-фононным взаимодействием $(\alpha/f^2)_{Akh.long}$ для продольных волн и $((\alpha/f^2)_{Akh.shear}$ для сдвиговых волн) и термоупругими потерями $(\alpha/f^2)_{th}$, для PrS, PrSe и PrTe в диапазоне температур 100–500 K вдоль оси ⟨100⟩ (10^{-18} Нп $с^2$/см)

Кристалл	Темп. (K)	$(\alpha/f^2)_{th}$	$(\alpha/f^2)_{Akh.long}$	$(\alpha/f^2)_{Akh.shear}$
PrS	100	0.035	7.301	1.659
	200	0.096	24.400	5.907
	300	0.146	43.917	11.510
	400	0.186	62.411	17.744
	500	0.202	74.095	22.640
PrSe	100	0.035	8.048	2.023
	200	0.083	25.747	6.814
	300	0.136	48.096	13.501
	400	0.157	61.742	19.097
	500	0.172	74.562	24.996
PrTe	100	0.044	13.360	3.665
	200	0.102	40.873	12.069
	300	0.154	70.256	22.399
	400	0.188	94.565	33.150
	500	0.211	115.151	44.006

Таблица 11. Коэффициенты затухания ультразвука, обусловленного фонон-фононным взаимодействием ($(\alpha/f^2)_{Akh.long}$ для продольных волн и $(\alpha/f^2)_{Akh.shear}$ для сдвиговых волн) и термоупругими потерями $(\alpha/f^2)_{th}$, для PrS, PrSe и PrTe в диапазоне температур 100–500 K вдоль оси ⟨110⟩ (10^{-18} Нп $с^2$/см)

Кристалл	Темп. (K)	$(\alpha/f^2)_{th}$	$(\alpha/f^2)_{Akh.long}$	$(\alpha/f^2)^*_{Akh.shear1}$	$(\alpha/f^2)^\#_{Akh.shear2}$
PrS	100	0.0100	7.448	5.667	34.736
	200	0.228	24.961	17.547	121.335
	300	0.339	42.937	29.359	226.738
	400	0.408	59.125	42.611	343.738
	500	0.443	68.049	45.451	442.725
PrSe	100	0.084	7.860	4.744	45.820
	200	0.192	24.959	14.436	149.912
	300	0.307	45.426	26.195	289.965
	400	0.342	56.379	32.551	395.965
	500	0.347	68.394	27.285	551.239
PrTe	100	0.103	12.646	5.925	93.787
	200	0.229	38.161	17.647	298.451
	300	0.336	64.015	30.116	543.829
	400	0.397	83.647	40.089	771.194
	500	0.433	98.783	49.163	993.222

* Сдвиговые волны, поляризованные вдоль оси ⟨001⟩.
\# Сдвиговые волны, поляризованные вдоль оси ⟨110⟩.

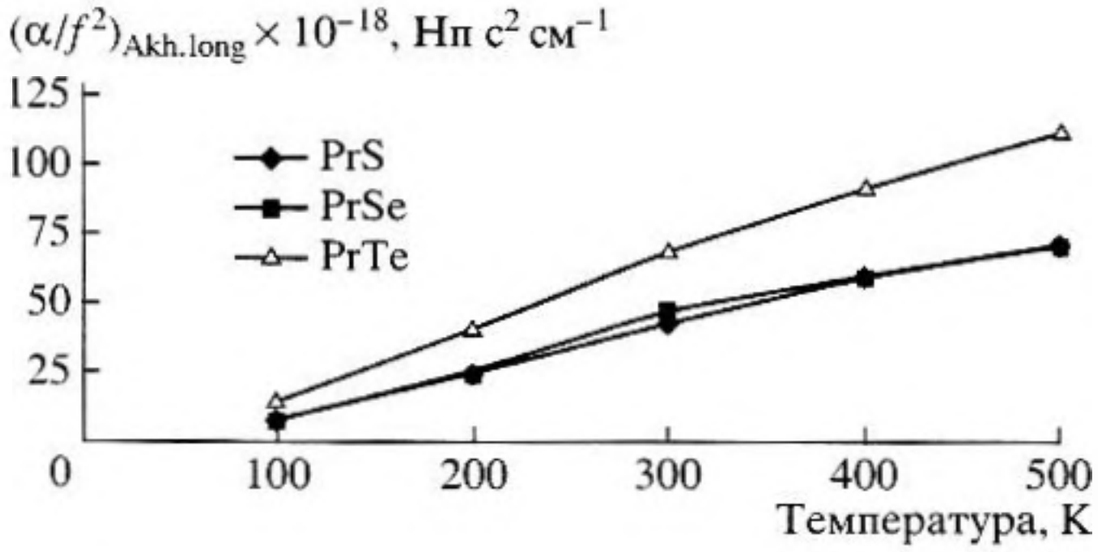

Рис. 9. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{Akh.long}$ вдоль оси ⟨100⟩.

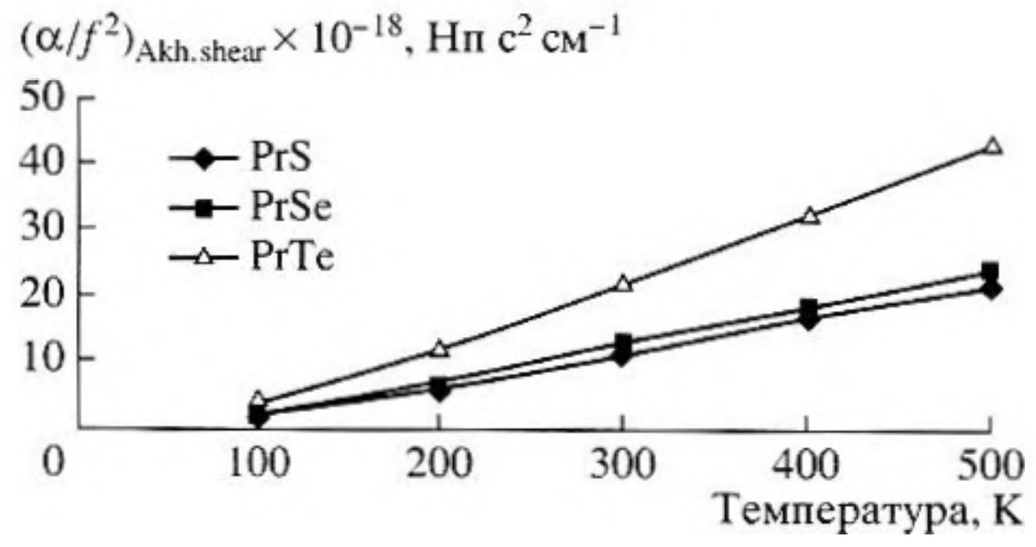

Рис. 10. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{Akh.shear}$ вдоль оси ⟨100⟩.

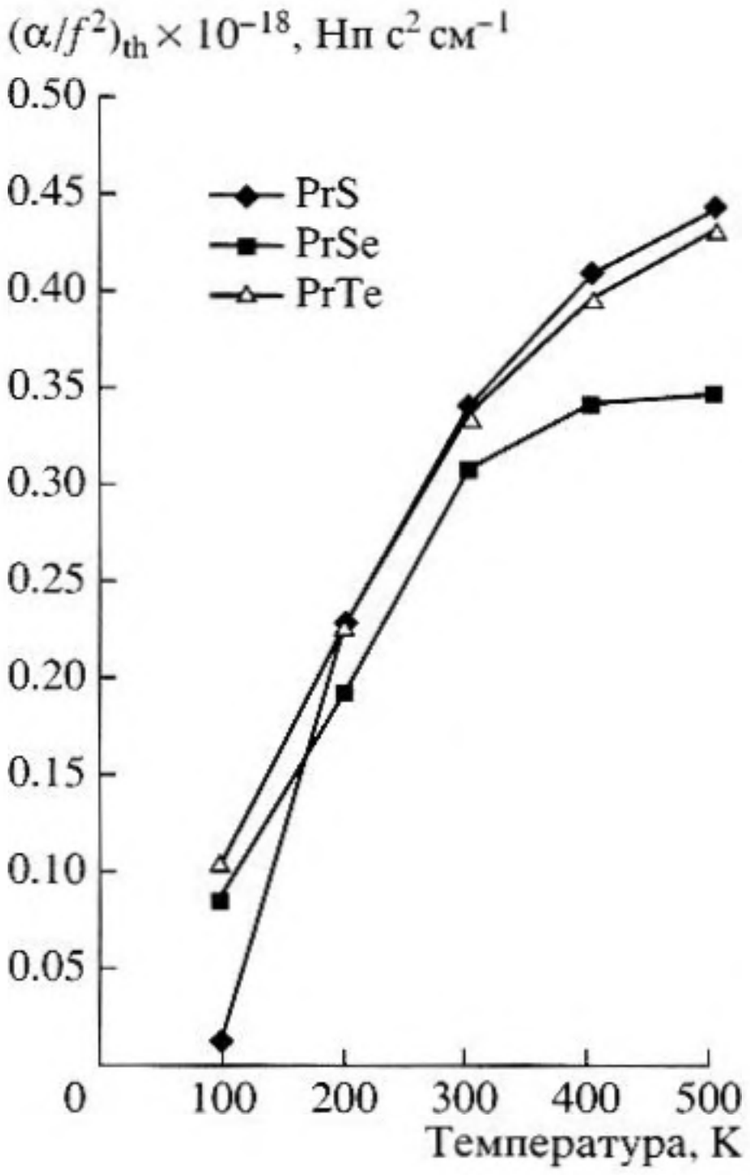

Рис. 11. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{th}$ вдоль оси ⟨110⟩.

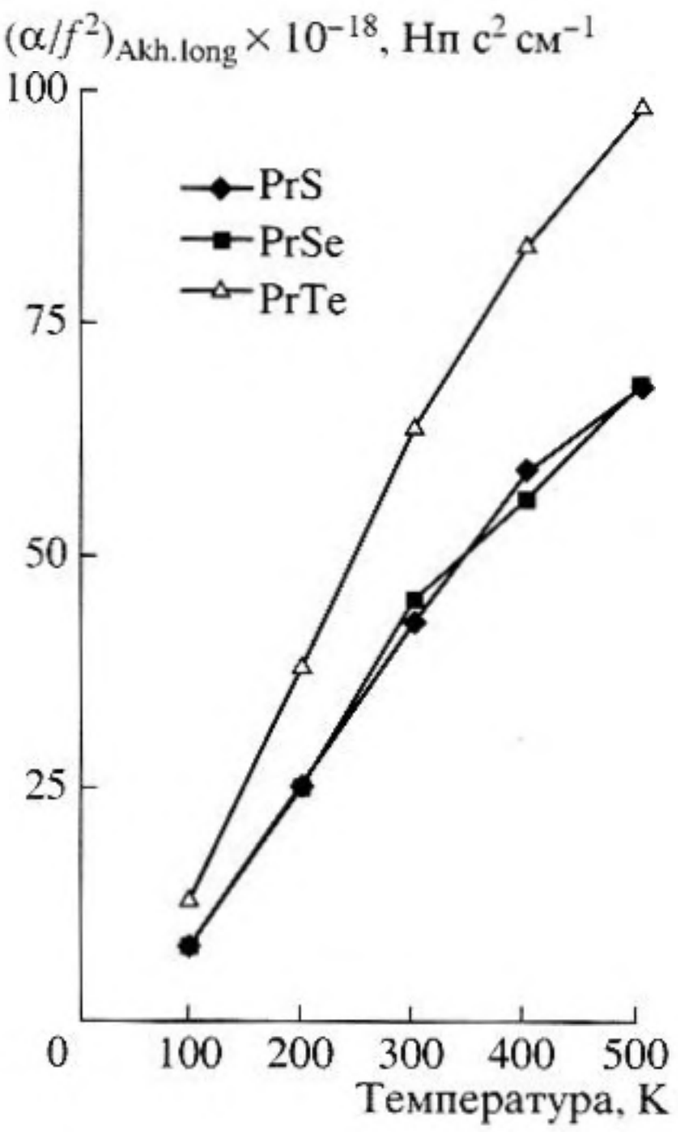

Рис. 12. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{Akh.long}$ вдоль оси ⟨110⟩.

ко из-за недостатка экспериментальных данных для всего температурного диапазона нельзя провести сравнение для различных температур. Тем не менее, изменение затухания уверенно подтверждает правильность настоящего подхода, который прямо связан с нашими оценками упругих постоянных второго и третьего порядков, основанных только на двух фундаментальных параметрах.

Как обсуждалось выше, параметр нелинейности D (постоянная акустической связи) не вносит существенного вклада в температурную зависимость затухания в монохалькогенидах празеодима. Дискретное поведение температурных зависимостей $(\alpha/f^2)_{Akh}$ и $(\alpha/f^2)_{th}$ совпадает с изменением полной теплопроводности этих соединений в диапазоне 100–500 K [3]. Характерной особенностью редкоземельных металлических соединений является малая электронная составляющая их теплопроводности, которая имеет аномальную температурную зависимость. В диапазоне 100–500 K электронная составляющая теплопроводности этих соединений уменьшается с температурой [3]. Следовательно, затухание в этих материалах обусловлено, в основном, решеточной составляющей теплопроводности, что непосредственно влияет на температурную зависимость затухания. Как и ожидалось, термоупругие поте-

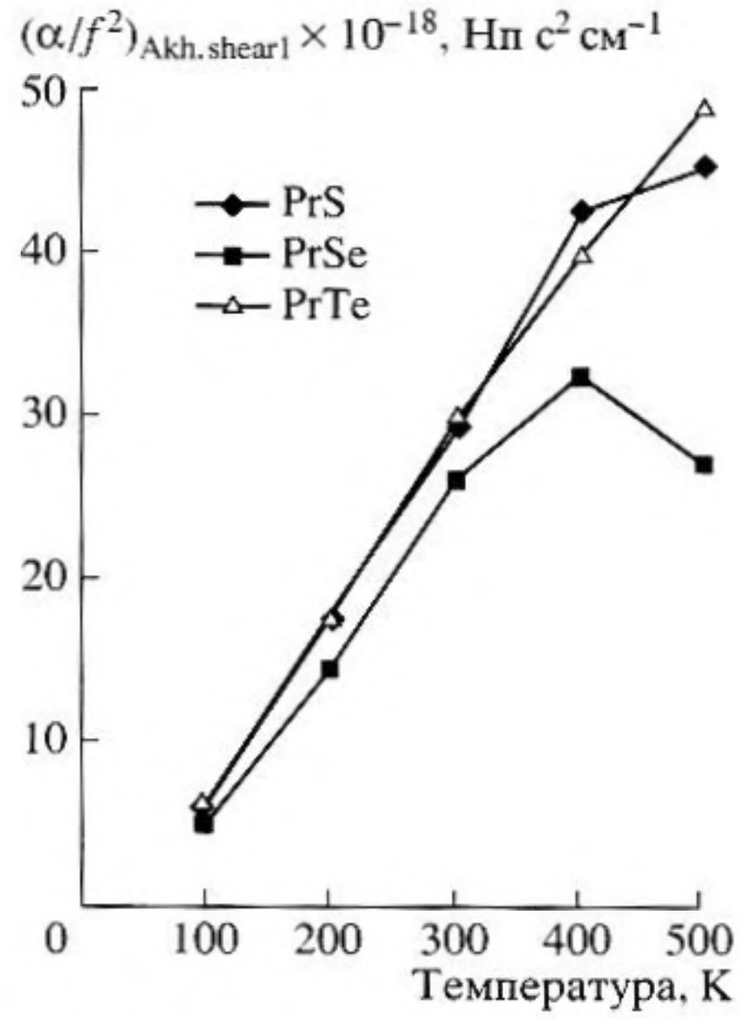

Рис. 13. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{\text{Akh.shear1}}$ вдоль оси ⟨110⟩ (поляризация вдоль оси ⟨001⟩).

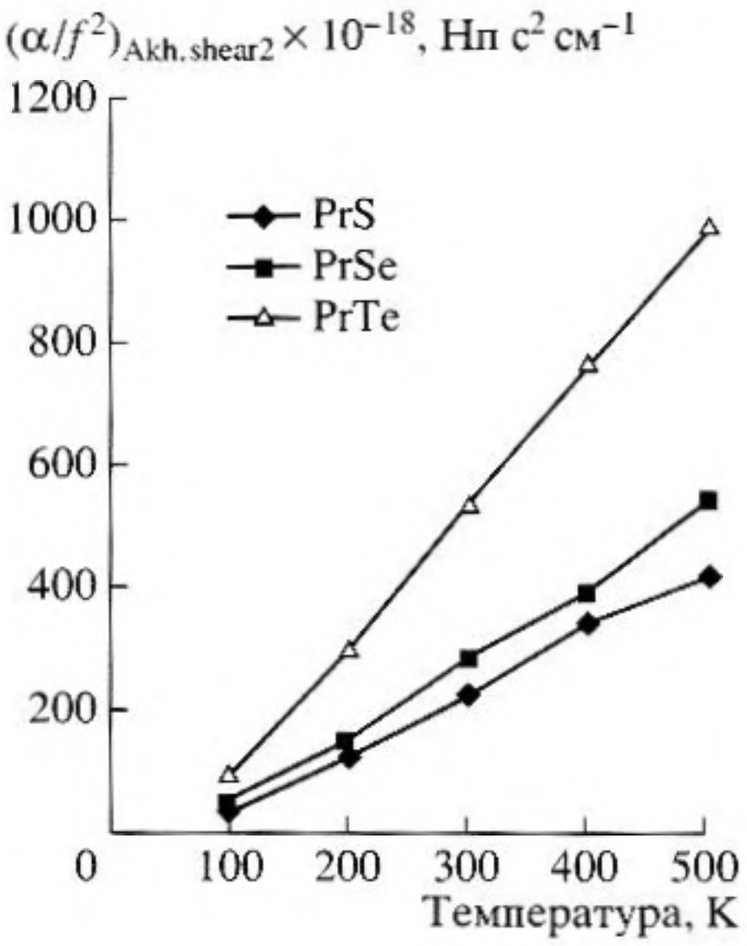

Рис. 14. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{\text{Akh.shear2}}$ вдоль оси ⟨110⟩ (поляризация вдоль оси ⟨1$\bar{1}$0⟩).

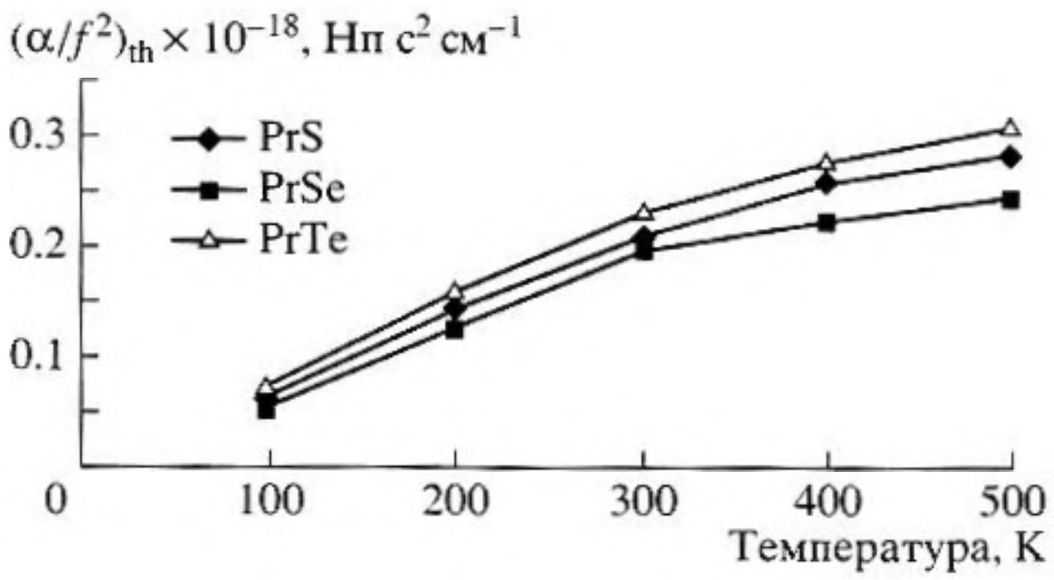

Рис. 15. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{\text{th}}$ вдоль оси ⟨111⟩.

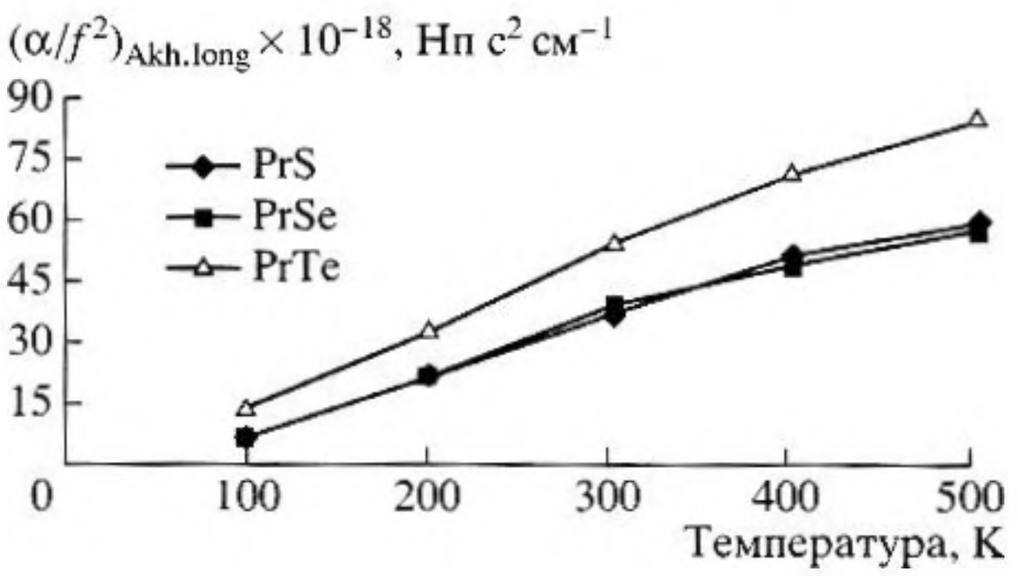

Рис. 16. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{\text{Akh.long}}$ вдоль оси ⟨111⟩.

ри пренебрежимо малы, благодаря низким значениям коэффициента теплопроводности.

Измерения подтвердили, что при температурах ниже 500 K затухание не зависит от числа дислокаций, поэтому его влияние здесь не рассматривается [23]. Благодаря многочисленным экспериментальным и теоретическим исследованиям было установлено, что фонон-фононное взаимодействие в основном определяет затухание ультразвука в твердых телах при повышенной температуре (≅ комнатной температуре), а электрон-фононные взаимодействия становятся основной причиной в случаях, когда присутствуют свободные электроны. В теории, использующей фонон-фононные взаимодействия, приняты несколько приближений, справедливых при повышенной температуре [24].

Таким образом, на основе выполненного сравнения значений затухания с его значениями для схожих веществ в диапазоне 100–500 K вдоль различных кристаллографических осей наш теоретический подход к температурной зависимости поглощения ультразвука, учитывающий влияние

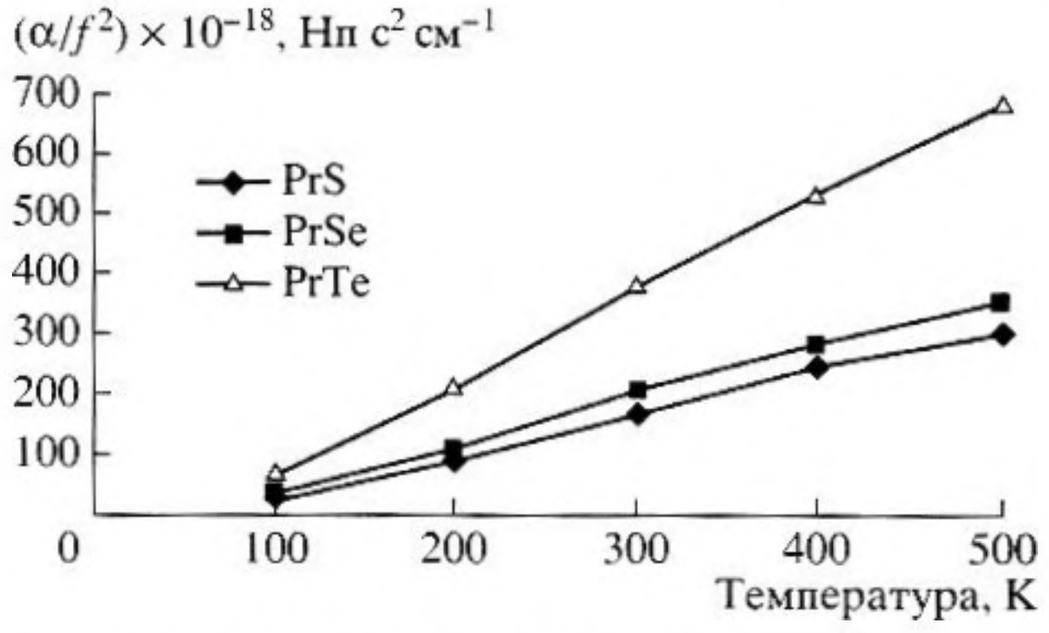

Рис. 17. Температурная зависимость $(\alpha/f^2)_{\text{Akh.shear}}$ вдоль оси ⟨111⟩ (поляризация вдоль оси ⟨$\bar{1}$10⟩).

Таблица 12. Коэффициенты затухания ультразвука, обусловленного фонон-фононным взаимодействием ($(\alpha/f^2)_{Akh.long}$ для продольных волн и $(\alpha/f^2)_{Akh.shear}$ для сдвиговых волн) и термоупругими потерями $(\alpha/f^2)_{th}$, для PrS, PrSe и PrTe в диапазоне температур 100–500 K вдоль оси ⟨111⟩ (10^{-17} Нп $с^2$/см)

Кристалл	Темп. (K)	$(\alpha/f^2)_{th}$	$(\alpha/f^2)_{Akh.long}$	$(\alpha/f^2)^*_{Akh.shear}$
PrS	100	0.060	6.287	23.427
	200	0.139	21.016	81.886
	300	0.209	36.442	153.216
	400	0.257	50.627	232.612
	500	0.281	58.502	286.378
PrSe	100	0.053	6.708	30.933
	200	0.112	21.200	101.304
	300	0.197	38.726	195.658
	400	0.224	48.298	268.365
	500	0.243	56.873	340.971
PrTe	100	0.068	14.075	63.388
	200	0.155	32.352	202.076
	300	0.231	54.270	368.703
	400	0.277	70.677	523.722
	500	0.308	83.617	675.556

* Сдвиговые волны, поляризованные вдоль оси ⟨$\bar{1}$10⟩.

Таблица 13. Сравнение коэффициентов поглощения ультразвука (α, дБ/мкс) в интерметаллидах со значениями этих коэффициентов в LiF при комнатной температуре на частоте 900 МГц

Материал	$\langle 100\rangle_l$	$\langle 100\rangle_s$	$\langle 110\rangle_l$	$\langle 110\rangle_{s1}$	$\langle 110\rangle_{s2}$	$\langle 111\rangle_l$	$\langle 111\rangle_{s3}$
LiF (эксп.)	3.5	0.8	1.3	0.8	10.0	0.8	5.0
LaS	1.3	0.2	1.5	0.2	4.5	0.1	0.3
LaSe	1.5	0.3	2.0	0.1	6.0	0.1	0.4
LaTe	2.6	0.4	3.3	0.1	10.0	0.2	0.8
PrS	0.9	0.1	0.9	0.3	2.5	0.7	1.7
PrSe	0.9	0.1	0.8	0.3	2.7	0.7	1.8
PrTe	1.2	0.2	1.0	0.3	4.4	1.5	3.0

Здесь нижние индексы при обозначениях кристаллографических осей имеют следующие значения: l – продольные волны; s – сдвиговые волны; s1 – сдвиговые волны, поляризованные вдоль оси ⟨001⟩; s2 – сдвиговые волны, поляризованные вдоль оси ⟨1$\bar{1}$0⟩; s3 – сдвиговые волны, поляризованные вдоль оси ⟨$\bar{1}$10⟩.

решеточной теплопроводности и некоторые важные характерные особенности, тесно связанные с ультразвуковыми характеристиками, можно считать справедливым.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Golubkov A.V., Debyatkova E.D., Zhuze V.P., Sergeeva V.M., Smirnov I.A.* Thermal conductivity of Lanthanum and its Monochalgenides // Soviet Physics-Solid State. 1966. V. 8. № 6. P. 1403–1410.
2. *Zhuze V.P., Golubkov A.V., Goncharova E.V., Sergeeva V.M.* Electrical properties of Rare-eartn Monochalcogenides (Ce Monochalgenides) // Soviet Physics-Solid State. 1964. V. 6. № 1. P. 205–212.
3. *Debyatkova E.D., Zhuze V.P., Golubkov A.V., Sergeeva V.M., Smirnov I.A.* Electrical properties of Rare-eartn Monochalcogenides (Ce Monochalgenides) // Soviet Physics-Solid State. 1964. V. 6. № 2. P. 343–346.
4. *Weast R.C.* (ed.). Properties of the Elements and Inorganic Compounds // CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press Inc. Ohio, 79th edition 1998–99. P. 4–23.
5. *Born M., Mayer J.E.* Zur Gittertheorie der Ionenkristalle // Zeitschrift für Physik. 1931. V. 75. P. 1–18.
6. *Brugger K.* Thermodynamic Definition of Higher Order Elastic Coefficients // Physical Review. 1964. V. 133. № 6A. P. A1611–A1612.
7. *Liibfried G., Haln H.* Zur Temperaturtabhangigkeit der elastichen Konstanten von Alkalihalogenidkristallen // Zeitschrift fur Physik. 1958. V. 150. P. 497–525.
8. *Leibfried G., Ludwig W.* Theory of Anharmonic Effect in Crystals // Solid State Physics (Academic Press, New York). 1964. V. 12. P. 275.
9. *Hiki Y.* Higher Order Elastic Constasnts // Annual Review of Material Science, Japan, 1981. V. 11.
10. *Chate P.B.* Third-order elastic constants of alkali hailide crystals // Physical Review. 1965. V. 139. № 5A. P. A1666–A1674.
11. *Mori S., Hiki Y.* Calculations of the trird- and fourth order elastic constants of alkali halide crystals // Journal of the Physical Society of Japan. 1978. V. 45. № 5. P. 1449–1456.
12. *Wychoff R.W.G.* (ed.). Crystal Structurs. New York: Interscience Publishers, 1963. P. 89.
13. *Chatterjee A., Singh A.K., Jayaraman A.* Pressure Induced Electronic Collapse and Structure Change in Rare-earth Monochalcogenides // Physical Review B. 1975. V. 6. № 6. P. 2285–2291.
14. *Bucher E., Andres K., di Salvo F.J., Maito J.P., Grossard A.C. Cooper A.S., Hull G.W.* Magnetic and Thermal Properties of Chalcogenides of Pr and Tm and a few other rare-earth // Physical Review B. 1975. V. 11. № 1. P. 500–513.
15. *Yadav R.R., Singh D.* Ultrasonic Attenuation in Lanthanum Monochalcogenides // Journal of the Physical Society of Japan, 2001. V. 70. № 6. P. 1825–1832.
16. *Mason W.P.* (ed.). Effect of Impurities and Phonon Processes on the Ultrasonic Attenauation of Germanium Crystal Quartz and Silicon // Physical Acoustics. New York: Academic Press, 1965. V. IIIB. P. 237–285.
17. *Mason W.P., Batemann T.B.* Relation between third order elastic moduli and thermal attenuation of ultrasonic waves in non conducting and metallic crystals // J. Acoust. Soc. of Amer., 1966. V. 40. № 4. P. 852–863.
18. *Puri D.S. and Verma M.P.* Many Body Effect on the Third Order Elastic Constants of Sodium Chloride struc-

ture Solids // Solid State Communications. 1976. V. 18. P. 1295–1298.

19. *Hanson R.C.* Attenuation of high Frequency Elastic Waves in LiF // J. Physics and Chemistry of Solids. 1967. V. 28. P. 475–483.
20. *Yadav R.R., Singh D.* Acoustucal Investigations on Plutonium Monochalgenides // J. Acoust. Soc. India. 2002. V. 30. № 1–2. P. 55–58.
21. *Singh D., Yadav R.R., Tiwari A.K.* Ultrasonic Attenuation in Semiconductors // Indian Journal of Pure & Applied Physics, 2002. V. 40. № 12. P. 845–849.
22. *Kor S.K., Khare R.P.* Temperature Dependence of Ultrasonic attenuation due to Phonon-Viscosity Mechanism in NaCl // Acustica 1984. V. 56. P. 280–282.
23. *Dobbs E.R., Chick B.B., Trull R.* Attenuation of Sound in a Germanium Crystal at Ultra High Frequency and low temperature // Physical Review Letters. 1959. V. 3. № 7. P. 332–334.
24. *Lambade S.D., Sahasrabudhe G.G., Rajgopalan S.* Temperature Dependence of the Acoustic Attenuation in Silicon // Physical Review B. 1995. V. 51. № 22. P. 15861–15866.

Effect of Thermal Conductivity on Ultrasonic Attenuation in Praseodymium Monochalcogenides

Raja Ram Yadav and Devraj Singh

The ultrasonic attenuation in intermetallic praseodymium monochalcogenides are evaluated in the temperature interval 100 K–500 K along the crystallographic directions <100>, <110>, and <111> for longitudinal and shear waves. A comparison has been made with lanthanum monochalcogenides and other similar materials. Ultrasonic attenuation at different temperatures is mainly affected by the lattice thermal conductivity values of the materials at these temperatures. Thermoelastic loss is very small in comparison to the attenuation due to phonon–phonon interaction mechanism at higher temperatures.