

石英中 Al^{3+} -空穴取向变化弛豫过程中的红外发散响应*

刘 砚 章 范 希 庆

河南省基础和应用研究所, 郑州大学物理系, 郑州 450052

(1992 年 12 月 29 日收到; 1993 年 6 月 10 日收到修改稿)

基于 α 石英的晶体结构, 将红外发散响应模型和双势阱模型应用到含 Al 杂质的 α 石英中 Al^{3+} -空穴的取向变化弛豫过程, 研究其低温介电损耗特性. 结果表明 $T < 6.5 \text{ K}$ 时, 介电损耗的主要贡献来自于单声子助隧道弛豫过程; $T > 10 \text{ K}$ 时, 主要贡献来自于热跃迁弛豫过程; 而在中间温区, 介电损耗是两种过程的迭加. 同一弛豫体不同的弛豫过程对应于不同的红外发散响应. 还讨论了同一弛豫体引起的超声弛豫损耗.

PACC: 7740; 6280

一、引 言

近年来, 由于超声器件和精确频率标准技术上的需要^[1,2], 含 Al 杂质的 α 石英的物理性质引起了人们的广泛注意. 在 α 石英晶体中 Al^{3+} 替代 Si^{4+} 的位置^[3,4]. 由于 Al^{3+} 比 Si^{4+} 的原子价低, 需要一个电荷的补偿机制, 这通常由束缚在 Al^{3+} 周围的填隙式 Na^+ , Li^+ 和 H^+ 杂质或束缚在 Al^{3+} 近邻氧离子上的空穴来完成, 从而形成 $\text{Al}^{3+}\text{-Na}^+$ 、 $\text{Al}^{3+}\text{-Li}^+$, $\text{Al}^{3+}\text{-OH}^-$ 或 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ (Al^{3+} -空穴) 杂质.

介电测量^[5-8]、超声测量^[9,10]、红外吸收^[11,12]以及电子自旋共振^[13]等技术已被用于研究这些杂质的结构以及杂质引起的有关损耗. 虽然 $\text{Al}^{3+}\text{-Na}^+$ 、 $\text{Al}^{3+}\text{-Li}^+$ 和 $\text{Al}^{3+}\text{-OH}^-$ 杂质引起的介电及超声损耗特性各不相同, 但当含这些杂质的 α 石英经适当的 X 射线或 γ 射线辐照后, 发现它们引起的介电及超声损耗特性均相同^[9,13]. 所以, 常用高能射线来清除 Na^+ , Li^+ 和 H^+ 杂质的影响, 而制备含高密度 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 的样品.

Toulouse 等人^[9]详细研究了 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 取向弛豫变化所引起的低温 (3.33—16.67 K) 介电损耗 $\tan\delta$. 在固定温度下, $\tan\delta$ 随测量频率 ω 变化出现一个峰, 峰宽随温度的升高而加大. 用德拜理论^[14]给出的极大值条件为 $\omega\tau = 1$, 可得弛豫时间 τ 随温度的变化, 由此他们推断, 多声子助隧道弛豫过程在 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 的取向变化弛豫过程中起主要作用. 在 Toulouse 等人^[9]的讨论中, 对损耗峰的宽度未作认真的分析; 而在该材料中, 损耗峰的宽度恰

* 河南省科学技术委员会资助的课题.

恰比德拜理论所预言的要宽。

众所周知,分析损耗峰的形状及其随温度的变化,可以揭示出更多的关于该弛豫过程的基本物理。本文在微观模型的基础上,采用双势阱模型并考虑“粒子”热跃迁过程中伴随着的红外发散的能元激发^[5],对含Al的 α 石英晶体的低温介电损耗特性给予了成功的解释。该模型还定性地解释了 α 石英中 $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 引起的超声吸收特性。

二、模型与理论

介电损耗起源于具有比晶体对称性低的杂质,这样的杂质通常具有几个结晶学上等价的取向,在外加电场的作用下,会择优地重新取向。杂质的重新取向过程是一个弛豫过程,从而产生介电损耗。 Al 取代 Si 后^[6], Al^{3+} 位于由4个氧离子 O^{2-} 组成的扭曲的四面体中心,该扭曲的四面体具有一个(如沿 x 方向的)二重对称轴(c_2),因而在结晶学上4个氧离子 O^{2-} 有两个不等价的位置,分别称为 α 位和 β 位。 α 位氧离子距 Si^{4+} 的距离为0.1613 nm,而 β 位为0.1608 nm,分别称为长键氧离子和短键氧离子。杂质 Al^{3+} 取代 Si^{4+} 后,在其周围氧离子上束缚一个空穴(h)。该空穴(h)将具有两个等价的 α 位和两个等价的 β 位。这样,空穴(h)的跃迁形式有三种,即 $\alpha \rightleftharpoons \alpha$, $\beta \rightleftharpoons \beta$ 和 $\alpha \rightleftharpoons \beta$ 跃迁。三种不同的跃迁应克服不同的势垒。最快的跃迁是空穴(h)在两个长键氧离子之间的跃迁,即 $\alpha \rightleftharpoons \alpha$ 跃迁。低温下的介电损耗峰及低温下的超声吸收峰应起源于 $\alpha \rightleftharpoons \alpha$ 跃迁^[6]。

电场作用下,杂质进行择优重新取向。假定对应的势能随取向的变化如图1所示,图1中纵坐标为 $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 的势能,横坐标为 $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 的取向角;两个势阱代表相邻的两个平衡位置;对于 $\alpha \rightleftharpoons \alpha$ 跃迁,非对称 $\Delta = E \cdot r$,其中 r 是从 α 位指向另一个 α 位的方向矢量。“粒子”在图1所示的两势阱间跃迁相当于 $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 电偶极子方向的变化。假定在所讨论的温区(3.3—17 K),“粒子”在两势阱之间跃迁可以热起伏引起的热激活过程也可以量子隧道过程来实现。由热起伏引起的热激活过程的弛豫率为^[17]

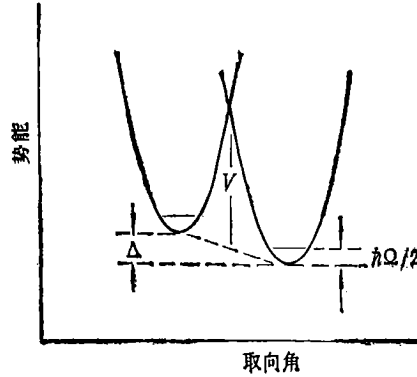


图1 $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 的势能曲线 势垒高度为 V ;非对称为 Δ ; $\hbar\Omega/2$ 为单个谐振子的基态能量

$$\tau_{10}^{-1} = \tau_{100}^{-1} \cosh \frac{\Delta}{2k_B T} \exp(-V/k_B T), \quad (1)$$

式中 $\tau_{100}^{-1} = 2\omega_0$ 为 $T \rightarrow \infty$ 时弛豫率。一般情况下, $\Delta \ll k_B T$, (1)式简化为

$$\tau_{10}^{-1} = \tau_{100}^{-1} \exp(-V/k_B T); \quad (2)$$

隧道过程的弛豫率为^[16]

$$\tau_{20}^{-1} = AT + BT^n, \quad (3)$$

上式中等号右端第一项描述单声子助隧道过程,第二项对应多声子助隧道过程; A , B 为常数,分别正比于单声子过程和多声子过程的声音-隧道耦合强度;根据不同的理论假

设^[18-21], 指数 m 的数值范围为 4—7。于是, “粒子”跃迁的总的弛豫率为

$$\tau_0^{-1} = \tau_{10}^{-1} + \tau_{20}^{-1}. \quad (4)$$

德拜理论^[14]给出损耗 $\tan \delta$ 的表达式为

$$\tan \delta \propto \omega \tau_0 / (1 + \omega^2 \tau_0^2), \quad (5)$$

式中 ω 为测量频率。(5)式常用来研究损耗随频率或温度的变化。正如引言中所述, α 石英晶体中 $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 引起的介电损耗曲线比(5)式所预言的要宽。解释这种非德拜型介电响应的一个模型是 Ngai 的红外发散响应模型^[15]。按照此模型, 在无序的固体中, 任一弛豫过程都伴随着低能关联态的激发和退激发, 从而产生具有红外发散性质的低能元激发。这些低能关联态涉及到大量的原子、原子核、电子、强键弱键等坐标。对于晶态的 α 石英晶体, 即使是完整的晶体, $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 的取向变化也必然涉及到电子坐标, 强键与弱键以及各种相互作用的变化, 即也必然伴随着低能关联态的激发与退激发。据 Ngai^[15] 的红外发散响应理论, 德拜型的弛豫率 τ_0^{-1} 被修改为与时间有关的函数

$$\omega(t) = \tau^{-1} = \tau_0^{-1} e^{-n\gamma} (E_c t)^{-n}, \quad (6)$$

式中 $\gamma = 0.577$ 为 Euler 常数; E_c 和 $n(0 \leq n < 1)$ 分别为低能元激发上截止能量和红外发散指数, 都是红外发散响应理论参数。

假定 t 时刻, 弛豫态仍保持初态 ($t=0$) 的概率为 $Q(t)$, 则红外发散响应理论给出

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\frac{Q(t)}{\tau} = -\tau_0^{-1} e^{-n\gamma} (E_c t)^{-n} Q(t). \quad (7)$$

利用初始条件 $t=0, Q(0)=1$, 可得

$$Q(t) = \exp \left[-\left(\frac{t}{\tau_p} \right)^{1-n} \right], \quad (8)$$

式中

$$\tau_p = [(1-n)e^{n\gamma} E_c^n \tau_0]^{-\frac{1}{1-n}}. \quad (9)$$

由(8)式可求出广义感应率

$$\chi(t) = -\beta D_0^2 \frac{dQ(t)}{dt}, \quad (10)$$

式中 $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B 为玻耳兹曼常数, T 为绝对温度, D_0 为 $\text{Al}^{3+}-\text{h}$ 的偶极矩。对(10)

式作傅氏变换可得复介电常数

$$\chi(\omega) = \beta D_0^2 \int_0^\infty e^{-x} \exp[i(\omega \tau_p x^{\frac{1}{1-n}})] dx. \quad (11)$$

损耗 $\tan \delta$ 正比于 $\chi(\omega)$ 的虚部

$$\tan \delta \propto \chi''(\omega), \quad (12)$$

而

$$\chi''(\omega) = \beta D_0^2 \int_0^\infty e^{-x} \sin(\omega \tau_p x^{\frac{1}{1-n}}) dx. \quad (13)$$

三、结果与讨论

1. 介电损耗与频率的关系

图2给出不同温度下含 Al^{3+} -h 杂质的 α 石英晶体的介电损耗与频率的关系。样品中Al杂质的含量为 1.3×10^{-5} 。图2中“+”为实验数据,取自文献[8],图2中实线为根据(13)式选择一定的 τ_p 和 n 值算出的。在计算过程中,令 $\omega' = \omega\tau_p$, 对一固定的 n 值,根据(13)式画出 χ''/χ''_m 随 $\log_{10} \frac{\omega'}{\omega'_m}$ 变化曲线,其中 χ''_m 为 χ'' 随 ω' 变化的极大值, ω'_m 为极值的频率。这样改变 n 值重复上面的计算可得一理论曲线族。在本文计算中 n 值的取值范围为 0.000—0.900, 间隔为 0.005, 因此得到了上百条理论曲线。为了将实验与理论进行比较,将文献[8]中的 $T \tan \delta \sim \ln \omega$ 曲线改画成 $\tan \delta / (\tan \delta)_m \sim \log_{10} \frac{\omega}{\omega_m}$ 曲线,其中 $(\tan \delta)_m$ 代表损耗的极大值, ω_m 代表极大值频率。这样,将实验曲线与理论曲线族对比即可确定该温度下的红外发散指数。另外,由(13)式,当 $\omega\tau_p \approx 1$ 时,损耗达极大值,于是,根据实验曲线中峰值位置由 $\omega_m\tau_p = 1$ 即可确定该温度下的 τ_p 。图2给出理论与实验的对比图,图3给出所确定的 τ_p 和 n 随温度 T 的变化。图3中“+”和“ Δ ”点分别为不同温度下的 τ_p 和 n , 图3中虚线画出其变化趋势,纵坐标分别为 $\log_{10} \tau_p^{-1}$ 和 n , 横坐标为 $1/T$ 。

由图2可知,理论曲线与实验曲线符合得很好。红外发散响应理论已被 Ngai 本人

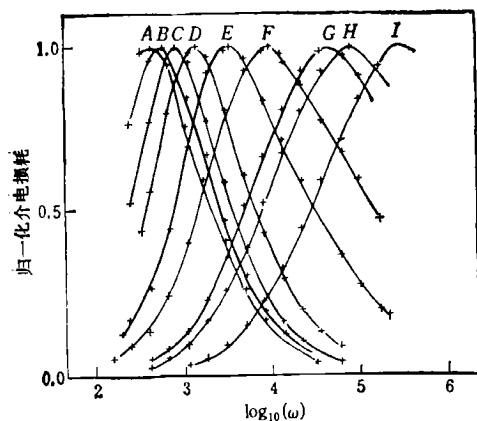


图2 不同温度下, α 石英的介电损耗随频率的变化 实线为理论曲线;“+”为实验数据,取自文献[8];各曲线所对应的温度和红外发散指数如下:

A 为 3.33K, $n = 0.005$; B 为 3.97K, $n = 0.005$; C 为 5K, $n = 0.005$; D 为 6.41K, $n = 0.005$; E 为 8.33K, $n = 0.3$; F 为 10K, $n = 0.45$; G 为 12.5K, $n = 0.55$; H 为 13.5K, $n = 0.575$; I 为 16.67K, $n = 0.575$

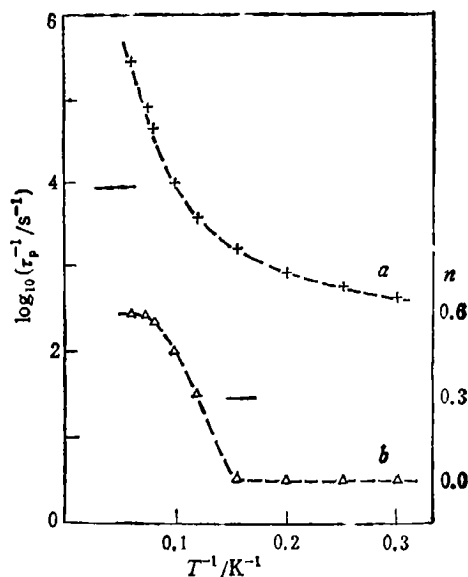


图3 红外发散指数 n 和表观弛豫时间的对数 $\log_{10}(\tau_p)$ 随温度 T 的变化
曲线 a 对应于 τ_p ; 曲线 b 对应于 n

用于电介质的研究^[5],现将它用来描述 α 石英的低温介电损耗特性获得成功,说明我们采用的模型是适当的。同时由不同温度下所对应的 n 值(见图 2 的说明),它说明在 $\text{Al}^{3+}-h$ 的取向变化弛豫过程中,温度大于 6.5 K 时,确实伴随着低能关联态的激发与退激发;而 $T < 6.5 \text{ K}$ 时,红外发散指数 $n = 0.005$ (接近于零),这意味着低温隧道弛豫过程中,不伴或伴随有很少的低能关联态的激发和退激发。

2. τ_p, n 的温度行为

图 3 中所示的 τ_p^{-1} 随温度的变化: 在温度 $T < 6.5 \text{ K}$ 时近似与 T 成正比,按(3)式,这对应于单声子助隧道过程;而在温度 $T > 10 \text{ K}$ 时, τ_p^{-1} 随温度 T 的变化满足 Arrhenius 关系。这意味着在所讨论的温区 (3.33—16.67 K) 有两种弛豫过程参与。根据 τ_p^{-1} 随 T 的这种变化关系以及(2),(3)和(4)式,可以认为在 $T < 6.5 \text{ K}$, $\text{Al}^{3+}-h$ 的跃迁主要通过单声子助隧道弛豫过程来实现,而在 $T > 10 \text{ K}$ 时,主要通过热起伏引起的热激活弛豫过程来实现,在中间温区 ($6.5 \text{ K} < T < 10 \text{ K}$), 两种过程同时存在。

从图 3 中 τ_p^{-1} 和 n 随 T 的变化趋势可知,在从单声子助隧道过程起主要作用到热激活过程起主要作用的温区,红外发散指数 $n(T)$ 增加很快,从 $T < 6.5 \text{ K}$ 时的 $n = 0.005$ 很快增加到 $T > 10 \text{ K}$ 时的饱和值 $n = 0.575$ 。这个结果意味着同一弛豫体不同的弛豫过程具有不同的红外发散指数。一个合理的推测是: 在单声子助隧道弛豫过程中,伴随着很少的低能关联态的激发和退激发,由红外发散指数 $n = 0.005$ 来表示;而在热起伏引起的弛豫过程中,伴随着较多的低能关联态的激发和退激发,由 $n = 0.575$ 表示。这样 $T < 6.5 \text{ K}$ 时,对弛豫率的主要贡献来自于单声子助隧道弛豫过程,因而 $n = 0.005$; $T > 10 \text{ K}$ 时,主要贡献则来自于热起伏引起的弛豫过程,于是 $n = 0.575$; 而在 $6.5 \text{ K} < T < 10 \text{ K}$ 的温区,两种过程同等重要,它给出 n 随 T 的增长变化。

基于图 3 中的结果和以上分析,可以将图 3 中的 τ_p^{-1} 随温度的变化近似为

$$\tau_p^{-1} = \tau_{p1}^{-1} + \tau_{p2}^{-1} \approx A_p T + \tau_{p100}^{-1} \exp(-V^*/k_B T). \quad (14)$$

通过拟合,(14)式给出在整个温区内 (3.33—16.67 K) 与图 3 中的 τ_p^{-1} 随 T 的变化很好地相符。由此得出

$$A_p = 140 \text{ s}^{-1}, \tau_{p100} = 2.3 \times 10^{-8} \text{ s}, V^* = 7.5 \text{ meV}.$$

3. 热起伏过程的热激活能

从(9)式看出, τ_p 并不是弛豫体的微观弛豫时间。由(14)式,温度高于 10 K 时,单声子助隧道过程引起的弛豫率可以忽略,因而有 $\tau_p^{-1} \approx \tau_{p1}^{-1}$ 。再由(2)和(9)式,对于热起伏引起的弛豫过程有

$$\begin{aligned} \tau_p &\approx \tau_{p1} = [(1-n)e^{nV} E_c^* \tau_{100}]^{\frac{1}{1-n}} \\ &= [(1-n)e^{nV} E_c^* \tau_{100}]^{\frac{1}{1-n}} \exp\left[\frac{V}{(1-n)/k_B T}\right]. \end{aligned} \quad (15)$$

比较(14)与(15)两式可得出

$$\tau_{p100} = [(1-n)e^{nV} E_c^* \tau_{100}]^{\frac{1}{1-n}}, V^* = V/(1-n),$$

其中 τ_{p100} 和 V^* 分别称为表观热起伏时间参量和表观热激活能。这里的表观热激活能

V^* 包括了红外发散的影响,即粒子在跃迁过程中,不仅要克服能量为 V 的势垒,还要付出跃迁过程中伴随着的低能元激发的能量。由 $n = 0.575$ 可得真正的势垒高度为 $V = V^*(1 - n) = 3.2 \text{ meV}$ 。这或许可用来说明不同的测量过程(直流和交流)可以得两个不同的热激活能;其物理过程的根本区别在于有没有红外发散响应的存在。(15)式中的 E_c 具有 10^{11} s^{-1} 的数量级^[22],从而给出微观热起伏时间参量 τ_{100} 具有 $10^{-9} - 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ 的数量级,比观察到的小一到两个数量级。

另外,由(14)式及低温条件 $T < 6.5 \text{ K}$, $\tau_p^{-1} \approx \tau_{p2}^{-1}$, 因而有

$$\tau_p = \tau_{p2} = [(1 - n)e^{**}E_c^* \tau_{20}]^{\frac{1}{1-n}}, \quad (16)$$

但此时单声子助隧道弛豫过程起主要作用, $n = 0.005$, 因而表观弛豫时间 $\tau_{p2} \approx \tau_{20}$, (14)式的表观常数 A_p 也近似等于(3)式中真正的常数 A 。

4. 介电损耗峰与超声吸收峰

至此,我们详细分析了 3.33—16.67 K 温区内不同频率下的介电损耗数据,得出在此温区内有两种弛豫过程参与,即单声子助隧道弛豫过程和热起伏弛豫过程;且该两种过程伴随有不同的红外发散响应。正如在第二节所提出的,我们把此温区的介电损耗归因于空穴(h)的 $\alpha \rightleftharpoons \alpha$ 跃迁。除了 $\alpha \rightleftharpoons \alpha$ 跃迁外, $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 的转向还有 $\beta \rightleftharpoons \beta$ 和 $\alpha \rightleftharpoons \beta$ 跃迁。在所研究的温区内 (3.33 — 16.67 K), 现有的介电损耗实验曲线上未有显示。这可能是由于 $\beta \rightleftharpoons \beta$ 和 $\alpha \rightleftharpoons \beta$ 跃迁热激活能高的缘故。Martin^[9] 测量了辐照后 α 石英由 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 引起的超声吸收,在 5—300 K 温区内出现了分别位于 23, 100 和 135 K 处的三个吸收峰。其中 135 K 处的吸收峰是一个比较宽广的峰。假定这三个峰都是热激活过程引起的, Martin 得出三个峰对应的热激活能分别为 8, 90 和 100 meV。考虑到样品的不同,超声吸收中位于 23 K 处的吸收峰所对应的热激活能 8 meV 与介电损耗中位于 3.33—16.67 K 温区内的损耗峰所对应的表观热激活能 7.5 meV 应基本一致;因此可以确认这两个不同类型的损耗峰起因于同一弛豫体 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 的 $\alpha \rightleftharpoons \alpha$ 跃迁。两种测量中峰温的不同起因于测量频率的不同。进而可以认为超声吸收位于 100 和 135 K 处的峰分别为由 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 的 $\beta \rightleftharpoons \beta$ 跃迁和 $\alpha \rightleftharpoons \beta$ 跃迁产生的。由于 $\alpha \rightleftharpoons \beta$ 跃迁的复杂性(例如: α 位和 β 位离子振动频率的不同以及不可忽略的非对称 Δ 等),使得位于 135 K 处的超声吸收峰的形状不同于位于 23 和 100 K 处的峰。由此很自然地推断,若在更宽的温区内对介电损耗进行测量也应出现另外对应 $\beta \rightleftharpoons \beta$ 和 $\alpha \rightleftharpoons \beta$ 跃迁的两个损耗峰。在这方面,进一步开展实验及理论工作无疑会给出更多的关于 $\text{Al}^{3+}\text{-h}$ 弛豫的信息。

5. 关于多声子过程

如果不考虑热激活过程,而认为介质损耗仅是由于单声子隧道和多声子隧道过程引起的,那么,按照前面所述的理论模型, τ_0^{-1} 就等于(3)式中的 τ_{20}^{-1} , 即

$$\tau_0^{-1} = AT + BT^m,$$

将上式代入(9)式的 τ_p^{-1} 表达式中,也能较好地拟合图 3 中 τ_p^{-1} 随 T 的变化,并且给出表观幂指数 $m^* = m/(1 - n) = 7$, 这个数值已接近多声子理论^[18-21]所给出的 $4 \leq m \leq 7$ 范围的上限。另一方面按本文的理论模型,微观幂指数 $m = m^*(1 - n) \simeq 3$ 。因此我们认

为, $\text{Al}^{3+}-h$ 在 $T > 6.5 \text{ K}$ 时的取向变化弛豫的多声子过程不是隧道过程, 而是热激活过程。

四、结 论

将 Ngai 的红外发散响应理论应用到 α 石英中 $\text{Al}^{3+}-h$ 取向变化弛豫过程, 描述了这种材料的低温介电损耗特性, 所得理论曲线与实验曲线符合得很好。纯德拜型的热弛豫理论给出的损耗曲线比实验曲线窄, 而考虑具有红外发散性质的元激发就能很好地与实验相符, 这恰好说明在热跃迁弛豫过程中伴随着低能元激发, 而它的低能谱叠加到热激活的高能谱中, 所以红外发散的元激发机制在 α 石英中的热弛豫中起着重要作用。分析结果还表明, 同一弛豫体不同的弛豫过程具有不同的红外发散指数, 意味着不同温度下低能元激发数不同。再者, 从介电损耗得到的表观激活能 7.5 meV 与超声吸收数据确定的 8 meV 相符合。按本文的理论模型, 介电损耗所涉及到的多声子过程是热激活过程, 而不是多声子隧道过程。

- [1] J. C. King and H. H. Sander, *Radiat. Eff.*, **26**(1975), 203.
- [2] J. C. King, *Bell Syst. Tech. J.*, **38**(1959), 572.
- [3] L. E. Halliburton, N. Koumvakalis, M. E. Marks and J. J. Martin, *J. Appl. Phys.*, **52**(1981), 3565.
- [4] R. W. G. Wyckoff, *Crystal Structures* (Wiley, New York, 1965), Vol.1.
- [5] J. M. Stevels and J. Volger, *Philips Res. Rep.*, **17**(1962), 283.
- [6] W. J. Devos and J. Volger, *Physica (Utrecht)*, **34**(1967), 272.
- [7] J. Toulouse and A. S. Nowick, *J. Phys. Chem. Solids*, **46**(1985), 1285.
- [8] T. Toulouse, S. Ling and A. S. Nowick, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 7070.
- [9] J. J. Martin, *J. Appl. Phys.*, **56**(1984), 2536.
- [10] D. B. Fraser, *J. Appl. Phys.*, **35**(1964), 2913.
- [11] A. Kats, *Philips Res. Rep.*, **17**(1962), 133.
- [12] R. N. Brown and A. Kahan, *J. Phys. Chem. Solids*, **36**(1975), 467.
- [13] M. E. Marks and L. E. Halliburton, *J. Appl. Phys.*, **50**(1979), 8172.
- [14] P. Debye, *Polar Molecules* (Dover, New York, 1945).
- [15] K. L. Ngai, *Comm. Solid State Phys.*, **9**(1979), 127.
- [16] F. Bridges, *Crit. Rev. Solid State Sci.*, **5**(1975), 1.
- [17] 范希庆、王国樑, *物理学报*, **35**(1986), 896.
- [18] J. A. Sussman, *J. Phys. Chem. Solids*, **28**(1967), 1643.
- [19] R. Pirc, B. Zeks, and P. Gosar, *J. Phys. Chem. Solids*, **27**(1966), 1219.
- [20] B. G. Dick and D. Strauch, *Phys. Rev.*, **B2**(1970), 2200.
- [21] A. B. Shore and L. M. Sander, *Phys. Rev.*, **B6**(1972), 1551.
- [22] K. L. Ngai and U. Strom, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 10350.

INFRARED DIVERGENCE RESPONSE IN REORIENTATIONAL RELAXATION PROCESS OF Al^{3+} -HOLE IN α QUARTZ

LIU YAN-ZHANG FAN XI-QING

Fundamental and Applied Science Research Institute of Henan, Department of Physics, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052

(Received 29 December 1992; revised manuscript received 10 June 1993)

ABSTRACT

The infrared divergence response theory is applied to reorientational relaxation process of Al^{3+} -hole in α -quartz containing Al impurity to study the behaviour of low temperature dielectric relaxation loss properties in this system. Our calculation results showed that the single phononassisted tunneling process makes the main contribution to the dielectric loss for $T < 6.5$ K; while for $T > 10$ K, the thermally activated relaxation process dominates the dielectric loss; as for $6.5 \text{ K} < T < 10 \text{ K}$, the dielectric loss is the superposition of the two relaxation process. It is pointed out that for the same relaxation unit, different relaxation process may have different infrared divergence response. The ultrasonic relaxation loss properties induced by the same relaxation unit is also discussed.

PACC: 7740; 6280