Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1964

Ф. И. ФЕДОРОВ

К ТЕОРИИ УПРУГИХ ВОЛН В КРИСТАЛЛАХ

Доказано, что в кристалле любой сингонии существует не менее двух направлений, вдоль которых могут распространяться чисто продольные волны. Показано, что используемая в некоторых работах форма тензора, определяющего свойства упругих волн в кристаллах, непригодна для тригональных (кварц), моноклинных и триклинных кристаллов. Рассмотрена характеристика некоторых свойств упругих волн в кристаллах с помощью свернутого по средним индексам тензора упругих констант.

Распространение плоских упругих волн в кристаллах описывается уравнением

$$\lambda\vec{u} = v^2\vec{u}, \tag{1}$$

где $\lambda = (\lambda_{kl})$ — тензор следующего вида*:

$$\lambda_{kl} = \lambda_{iklm}n_i; \ n_m. \tag{2}$$

Здесь $\lambda_{iklm} = \frac{1}{\rho}c_{iklm}$, c_{iklm} — тензор упругих постоянных, ρ — плотность среды, v — фазовая скорость волн, $\vec{u}$ — вектор смещения среды, n_i — компоненты единичного вектора волновой нормали $\vec{n}$. Таким образом, векторы смещения $\vec{u}$ являются собственными векторами, а соответствующие квадраты фазовых скоростей v^2 — собственными значениями тензора λ.

При произвольном выборе системы координат общее выражение (2) не упрощается. Если совместить ось x_3 с таким направлением, вдоль которого распространяется чисто продольная волна, а оси x_1 и x_2 направить вдоль соответствующих векторов смещений поперечных волн [5], то при этом

$$c_{34} = c_{35} = c_{45} = 0. \tag{3}$$

Однако такой выбор системы координат можно реализовать лишь в том случае, если в кристалле существуют направления, по которым могут распространяться чисто продольные волны. Всегда ли имеются такие направления в триклинном кристалле? Ответ на этот вопрос вытекает из следующего общего положения: *направления $\vec{n}$, вдоль которых*

* По повторяющимся индексам предполагается суммирование от 1 до 3. Компоненты c_{iklm} могут быть известным способом (см. [3, 4]) заменены компонентами с двумя индексами $c_{11}...c_{66}$.

могут распространяться чисто продольные волны, соответствуют экстремальным значениям инварианта $K=\lambda_{iklm}n_i n_k n_l n_m$. Для доказательства строим функцию $f=K-2\xi(\vec{n}^2-1)$, где (-2ξ) — неопределенный лагранжев множитель. Условия экстремума гласят: $\frac{1}{4}\frac{df}{dn_i}=\lambda_{iklm}n_k n_l n_m-\xi n_i=0$, или $\lambda\vec{n}=\xi\vec{n}$. Это уравнение, согласно (1), означает, что вдоль $\vec{n}$ распространяется чисто продольная волна, причем квадрат соответствующей скорости равен экстремальному значению инварианта K. Поскольку K есть заданная на поверхности сферы непрерывная ограниченная положительная функция, то она обязательно достигает и минимума и максимума. Следовательно, в любом кристалле, включая триклинный, существует по меньшей мере два различных направления, вдоль которых могут распространяться чисто продольные волны.

Поскольку в общем случае решение уравнения (1) представляет сложную задачу, то с целью упрощения иногда пытаются придать тензору λ более удобную форму. Так, в ряде работ (см. например [6]) используется представление тензора λ в виде

$$\lambda=\begin{pmatrix} A & pq & pr \\ qp & B & qr \\ rp & rq & C \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Однако эта форма не является пригодной для всех кристаллов, поскольку у тензора (3) равными нулю могут быть не менее двух недиагональных элементов одновременно. Между тем, например, выбирая в тригональном кристалле $\frac{n_3}{n_2}=\frac{c_{66}-c_{11}}{2c_{14}}$ мы обратим λ_{31} в нуль, хотя λ_{23} и λ_{12} будут отличны от нуля. Таким образом, в случае тригональных кристаллов форма (3) непригодна. То же относится к кристаллам моноклинной и триклинной сингоний. Кроме того, если все три компонента λ_{23}, λ_{31}, λ_{12} отличны от нуля, то согласно (4) их произведение всегда положительно: $p^2q^2r^2>0$, что также является ограничением, не вытекающим из физически обусловленных свойств тензора λ, которые сводятся к симметрии и положительной определенности. Отметим, что в упомянутых выше работах автор, используя форму (4), претендует на то, что построенная таким образом теория является общей. На самом же деле она неприменима даже к такому важнейшему кристаллу, как кварц.

Тензор λ_{iklm} дает исчерпывающую характеристику упругих свойств кристалла. Однако ряд сведений об упругих волнах в кристалле можно получить, рассматривая свойства симметричного тензора второго ранга μ, получающегося из λ_{iklm} путем свертывания по паре внутренних (или внешних) индексов

$$\mu_{kl}=\mu_{lk}=\lambda_{kiil}. \tag{5}$$

Чтобы выяснить, какие физические свойства характеризует тензор μ, образуем с его помощью квадратичную форму из компонентов вектора волновой нормали

$$S=\vec{n}\mu\vec{n}=n_i\mu_{ik}n_k. \tag{6}$$

Сравнивая это выражение с (2), видим, что квадратичная форма равна следу тензора λ

$$S=\lambda_{kk}=\lambda_c. \tag{7}$$

Как известно, след тензора равен сумме его собственных значений, которые в данном случае, согласно (1), равны квадратам скоростей трех волн, соответствующих заданной нормали $\vec{n}$. Следовательно,

$$S = \vec{n}\mu\vec{n} = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2. \tag{8}$$

Из общей теории квадратичных форм известно, что экстремальные значения формы $\vec{n}\mu\vec{n}$ при $\vec{n}^2=1$ являются собственными значениями тензора μ. Соответствующие собственные векторы (главные направления) тензора μ, очевидно, будут определять те направления волновой нормали, которым отвечают упомянутые экстремальные значения суммы квадратов скоростей волн *.

Нетрудно убедиться, что для всех сингоний, кроме моноклинной и триклинной, тензор μ принимает диагональную форму

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_3 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

При этом для изотропной среды

$$\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \vec{n}\,\mu\,\vec{n} = \lambda_c = 2c_{11} - c_{12} \tag{10}$$

и для кубического кристалла

$$\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \lambda_c = 2c_{44} + c_{11}. \tag{11}$$

В случае кристаллов средних сингоний тензор μ имеет «одноосную» структуру [1]

$$\mu_1 = \mu_2 = c_{11} + c_{44} + c_{66}, \quad \mu_3 = c_{33} + 2c_{44}, \tag{12}$$

$$\lambda_c = \vec{n}\mu\vec{n} = \mu_1 + (\mu_3 - \mu_1)\,n_3^2. \tag{13}$$

Для ромбических кристаллов

$$\mu_1 = c_{11} + c_{55} + c_{66}, \quad \mu_2 = c_{22} + c_{44} + c_{66}, \quad \mu_3 = c_{33} + c_{44} + c_{55}, \tag{14}$$

$$\lambda_c = \vec{n}\mu\vec{n} = \mu_1 n_1^2 + \mu_2 n_2^2 + \mu_3 n_1^2. \tag{15}$$

Для моноклинных кристаллов

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 & \mu_{12} & 0 \\ \mu_{21} & \mu_2 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_3 \end{pmatrix}, \tag{16}$$

$$\mu_{12} = \mu_{21} = c_{45} + c_{16} + c_{62}, \tag{17}$$

причем μ_1, μ_2, μ_3 те же, что в (14) и

$$\lambda_c = \vec{n}\mu\vec{n} = \mu_1 n_1^2 + \mu_2 n_2^2 + \mu_3 n_3^2 + 2\mu_{12} n_1 n_2. \tag{18}$$

Для триклинных кристаллов все компоненты μ в общем случае отличны от нуля, причем к компонентам (14), (17) добавляются следующие:

$$\mu_{13} = \mu_{31} = c_{15} + c_{35} + c_{46}, \quad \mu_{23} = \mu_{32} = c_{24} + c_{34} + c_{56}. \tag{19}$$

Инвариант λ_c выражается общей формулой (4).

---

* Заметим, что из компонентов λ_{iklm} можно построить еще один тензор второго ранга $\mu'_{kl} = \lambda_{ilkl}$ [8, 9], однако в применении к упругим волнам он не имеет такого значения, как μ.

Из полученных соотношений вытекает ряд выводов. Согласно (16)—(19) в кубических кристаллах, как и в изотропных средах, сумма квадратов скоростей трех волн S постоянна для любого направления волновой нормали [7]. Согласно (13) в кристаллах средних сингоний S постоянна для всех $\vec{n}$, лежащих на произвольном круговом конусе, ось которого совпадает с осью высшего порядка. Из (9)—(16) следует, что оси (плоскости) симметрии любого кристалла являются главными осями (плоскостями) тензора μ. При этом осям симметрии, или направлениям, перпендикулярным к плоскостям симметрии, соответствуют экстремальные значения S.

Согласно [1] тензор μ, как всякий симметричный тензор, можно представить в ковариантной форме

$$\mu = a_1 + a_2 (\vec{c}' \cdot \vec{c}'' + \vec{c}'' \cdot \vec{c}'), \quad \vec{c}'^2 = \vec{c}''^2 = 1, \tag{20}$$

где a_1 — среднее по величине собственное значение μ. При этом

$$S = n\mu n = a_1 + 2a_2 \vec{n}\vec{c}' \cdot \vec{n}\vec{c}''. \tag{21}$$

Следовательно, сумма квадратов скоростей постоянна для всех направлений $\vec{n}$, удовлетворяющих условию

$$\vec{n}\vec{c}' \cdot \vec{n}\vec{c}'' = C = \text{const}, \quad 0 \leqslant C \leqslant \frac{1 + \vec{c}'\vec{c}''}{2}. \tag{22}$$

Последнее уравнение определяет эллиптический конус второго порядка, ось которого направлена по вектору $(\vec{c}' + \vec{c}'')$. Пересекая этот конус плоскостью, перпендикулярной к $(\vec{c}' + \vec{c}'')$, получим эллипс, малая ось которого параллельна вектору $(\vec{c}' - \vec{c}'')$. При $C = 0$ указанный конус вырождается в две плоскости $\vec{n}\vec{c}' = 0$ и $\vec{n}\vec{c}'' = 0$.

Итак, в кристаллах низших сингоний сумма квадратов скоростей трех волн постоянна для всех $\vec{n}$, лежащих на конусе (22). В частности, в любом кристалле низшей сингонии существуют две плоскости, перпендикулярные $\vec{c}'$ и $\vec{c}''$ (20), в которых S постоянна и равна среднему собственному значению тензора μ. С помощью тензора μ можно осуществить естественный выбор осей координат в моноклинных и триклинных кристаллах. Как указывалось в [5], можно направлять ось x_3 вдоль смещения чисто продольной волны, а оси x_1 и x_2 — по соответствующим поперечным смещениям. Однако в случае триклинного кристалла такой выбор является неоднозначным, так как существует не одно направление, в котором может распространяться чисто продольная волна. Вместо этого можно выбрать в качестве осей координат главные оси тензора μ, причем μ станет диагональным [8, 9]. В случае моноклинного кристалла такой выбор согласно (16) приведет к следующему соотношению между параметрами:

$$\mu_{12} = c_{45} + c_{16} + c_{26} = 0, \tag{23}$$

с помощью которого можно исключить любую из величин c_{45}, c_{16}, c_{26}. Для триклинного кристалла (19) такой выбор, кроме (23), приведет еще к двум соотношениям

$$\mu_{23} = c_{24} + c_{34} + c_{56} = 0, \quad \mu_{31} = c_{15} + c_{15} + c_{46} = 0, \tag{24}$$

в результате чего число независимых констант c_{kl} сведется к 18.

С помощью тензора μ можно дать также некоторую геометрическую интерпретацию свойств упругих волн в кристаллах. Рассмотрим эллипсоид

$$\vec{r}\mu\vec{r}=1, \tag{25}$$

где $\vec{r}=|\vec{r}|\vec{n}$. Тогда, согласно (8)

$$\vec{n}\mu\vec{n}=\frac{1}{r^2}=v_1^2+v_2^2+v_3^2. \tag{26}$$

Таким образом, величина, обратная квадрату радиуса-вектора эллипсоида, равна сумме квадратов скоростей трех волн, имеющих нормаль, параллельную этому радиусу-вектору.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров Ф. И. Оптика анизотропных сред. Изд-во АН БССР, 1958.
2. Хантингтон Г. «Успехи физических наук», **74**, 461, 1961.
3. Мэзон У. Пьезоэлектрические кристаллы и их применение в ультраакустике. ИЛ, М., 1952.
4. Най Д. Физические свойства кристаллов. ИЛ, М., 1960.
5. Хаткевич А. Г. «Кристаллография», **6**, 700, 1961.
6. Musgrave M. Proc. Roy. Soc., **A226**, 339, 356, 1954.
7. Neighbours J. J. Acoust. Soc. Amer., **26**, 865, 1954.
8. Бехтерев П. ЖРФХО, 1925.
9. Новожилов В. В. Курс теории упругости. Судпромгиз, 1958.

Поступила в редакцию
25.11 1963 г.

Кафедра
физики кристаллов