

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

УДК 534-16 + 534.242

ВЫРОЖДЕННЫЕ ОТРАЖЕНИЯ В АКУСТИКЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ. III. КУБИЧЕСКИЕ КРИСТАЛЛЫ

© 2020 г. Д. А. Бессонов¹, В. Н. Любимов^{1,*}

¹ Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия

*E-mail: lyubvn36@mail.ru

Поступила в редакцию 29.01.2020 г.

После доработки 29.05.2020 г.

Принята к публикации 01.06.2020 г.

Проанализированы особые случаи отражения объемных акустических волн от свободной поверхности кубического кристалла, когда и плоскость падения, и поверхность кристалла – плоскости симметрии, которым параллельны векторы поляризации падающей и отраженных волн. Описаны условия, когда при отражении возникает только одна объемная отраженная волна, а не две, как обычно. Сопутствующая отраженная волна (объемная или локализованная) исчезает – отражение оказывается вырожденным. Возникает либо чистое отражение (падающая и отраженная волны принадлежат одной и той же акустической ветви), либо конверсионное отражение (данные волны принадлежат к разным ветвям).

DOI: 10.31857/S0023476120060077

ВВЕДЕНИЕ

Когда акустическая объемная волна в кристалле отражается от его свободной границы с вакуумом, возникает, вообще говоря, несколько отраженных волн. Во-первых, могут возникнуть три отраженные объемные волны; во-вторых, две отраженные объемные волны вместе с сопутствующей, локализованной у границы; в-третьих – одна отраженная объемная волна вместе с двумя локализованными. Реализуемость конкретного варианта зависит от симметрии кристалла, его упругой анизотропии, ориентации границы и плоскости падения, от той акустической ветви, которой принадлежит падающая волна, и, наконец, от направления падающей волны [1–4].

При некотором угле падения волны амплитуда одной из отраженных объемных волн может оказаться нулевой. Отражение оказывается вырожденным. Это может реализоваться в кристаллах произвольной симметрии [5–7]. Для гексагональных кристаллов вырожденные отражения рассматривались в [8].

Если в отношении упругих свойств кристалл имеет плоскость симметрии и если рассматривать ее как плоскость падения, то “отщепляется” чисто поперечная *SH*-волна с вектором упругого смещения, ортогональным плоскости падения. Отражение волн данной ветви при любом угле падения происходит независимо от волн двух других акустических ветвей. Происходит “чистое” отражение. При этом векторы поляризации волн

других двух ветвей параллельны выбранной плоскости падения. Данная ситуация реализуется во всех кристаллах, кроме триклинных. Участвующие в отражении волны с такими векторами поляризации связаны друг с другом. В этом случае падающая объемная волна может породить в качестве отраженных либо две объемные волны, либо одну объемную, сопровождаемую локализованной у границы волной. Подбирая угол падения, можно обеспечить ликвидацию одной из двух объемных отраженных волн или локализованной компоненты, сопровождающей объемную отраженную волну. Если при этом падающая и отраженная волны принадлежат одной и той же акустической ветви, то этот случай можно назвать чистым отражением, если разным – конверсионным отражением.

Анализ таких отражений проведен в [9] для случая ромбических кристаллов, когда и граница кристалла, и плоскость падения волны параллельны плоскостям симметрии. Плоскости симметрии ромбического кристалла совпадают с координатными плоскостями в стандартной кристаллографической системе координат [1]. Этим условиям удовлетворяют шесть различных конфигураций геометрии распространения. Ромбический кристалл характеризуется девятью независимыми модулями упругости. В каждой из шести различных по геометрии конфигураций отражения участвуют разные группы этих модулей. Описание отражений оказывается достаточно громоздким.

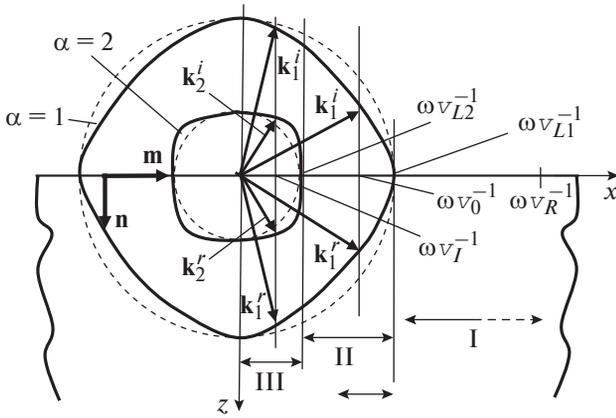


Рис. 1. Сечение поверхности рефракции кубического кристалла плоскостью падения (xz). Показаны линии в сечении двух полостей $\alpha = 1, 2$; v_{L1}, v_{L2} – скорости предельных волн, v_R – скорость рэлеевской волны, ω – частота; $(k_1^i, k_1^r)_{V_0}, (k_2^i, k_2^r)_{V_0}$ – чистые отражения, $(k_1^i, k_2^r)_{V_I}, (k_2^i, k_1^r)_{V_I}$ – конверсионные отражения, $k_{\alpha}^{i,r}$ – волновые векторы падающих (i) и отраженных (r) волн. Окружности, показанные штрихами, отвечают изотропному пределу.

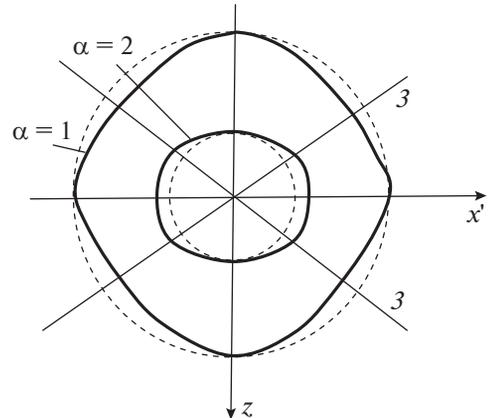


Рис. 2. Сечение поверхности рефракции кубического кристалла плоскостью ($x'z$).

Здесь введен параметр кубической анизотропии

$$c_{cub} = (c_{11} - 2c_{44} - c_{12})/2. \quad (2)$$

Далее потребуются модули упругости в другой системе координат x', y', z , оси которой x', y' повернуты вокруг общей оси z на угол $\pi/4$ относительно исходных осей x, y :

$$\begin{aligned} c'_{11} = c'_{22} &= c_{11} - c_{cub}, & c'_{33} &= c_{11}, \\ c'_{12} &= c_{11} - 2c_{44} - c_{cub}, \\ c'_{13} = c'_{23} &= c_{11} - 2c_{44} - 2c_{cub}, \\ c'_{44} = c'_{55} &= c_{44}, & c'_{66} &= c_{44} + c_{cub}. \end{aligned} \quad (3)$$

Модули упругости кубического кристалла в (2), (3) удовлетворяют следующим условиям устойчивости [1]:

$$c_{11} > |c_{12}|, \quad c_{11} + 2c_{12} > 0, \quad c_{44} > 0. \quad (4)$$

На рис. 1 и 2 представлены сечения поверхности рефракции кубического кристалла плоскостями симметрии (xz) и ($x'z$) (для простоты – в случае малой упругой анизотропии, когда $|c_{cub}| \ll c_{11}, c_{44}$).

На рис. 1 единичный вектор \mathbf{n} , ортогональный поверхности кристалла, задает ее ориентацию. Единичный вектор \mathbf{m} ($\mathbf{m} \perp \mathbf{n}$) задает общее направление распространения совокупного волнового поля вдоль выбранной поверхности. Плоскость векторов (\mathbf{m}, \mathbf{n}) является плоскостью падения. Параметр v на рис. 1 – приведенная скорость, которая связана с волновым вектором \mathbf{k} и частотой ω : $v = \omega/\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}$. Эта величина определяет углы падения (i) и отражения (r): $\angle\{\mathbf{k}^{i,r}(v), \mathbf{m}\}$. На рис. 1 скорости предельных волн v_{L1}, v_{L2} заданы соотношениями $\rho v_{L1}^2 = c_{44}, \rho v_{L2}^2 = c_{11}, c_{11} > c_{44}$ (ρ – плотность кристалла). Значения скоростей V объемных волн, распространяющихся вдоль осей симметрии, даны в табл. 1. Данные этой таблицы

Такая громоздкость исчезает, если осуществить предельный переход от описания ромбических кристаллов [9] к кубическим, упругие свойства которых характеризуются только тремя независимыми модулями упругости. Описанию вырожденных отражений в кубических кристаллах и посвящена настоящая работа, развивающая подход к данной проблеме, предложенный в [10, 11].

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Кубические кристаллы имеют два семейства симметрично эквивалентных плоскостей симметрии. Одно из них – это плоскость (xz) и ей эквивалентные (оси координат x, y, z параллельны осям симметрии 4). Другое семейство – плоскость ($x'z$) и ей эквивалентные (оси координат x', y' параллельны осям симметрии 2) [1]. В стандартной кристаллофизической системе координат x, y, z кубические кристаллы характеризуются модулями упругости c_{11}, c_{44}, c_{12} [1]. В матрице модулей упругости данных кристаллов можно выделить часть, отвечающую изотропному телу, которое характеризуется всего двумя модулями c_{11}, c_{44} (вырожденные отражения в этом пределе описаны в [12]). При этом отличные от нуля компоненты матрицы модулей упругости кубического кристалла можно записать в следующей форме:

$$\begin{aligned} c_{11} = c_{22} = c_{33}, \\ c_{12} = c_{13} = c_{23} = c_{11} - 2c_{44} - 2c_{cub}, \\ c_{44} = c_{55} = c_{66}. \end{aligned} \quad (1)$$

Таблица 1. Векторы поляризации **A** и скорости *V* объемных волн, распространяющихся в плоскостях (*xу*) и (*x'z*) вдоль осей симметрии в кубических кристаллах

Плоскость падения	k	A	ρV^2
(xz)	<i>x</i>	<i>x</i>	c_{11}
		2	c_{44}
	<i>x'</i>	<i>x'</i>	$c_{11} - c_{cub}$
(x'z)	<i>x'</i>	<i>y'</i>	$c_{44} + c_{cub}$
		<i>x'</i>	$c_{11} - c_{cub}$
	<i>z</i>	c_{44}	
	<i>z</i>	c_{11}	
	<i>x'</i>	c_{44}	
	3	3	$c_{11} - 4c_{cub}/3$
		A ⊥ 3	$c_{44} + 2c_{cub}/3$

позволили графически представить сечения поверхности рефракции на рис. 1 и 2.

ВАРИАНТЫ ВЫРОЖДЕННЫХ ОТРАЖЕНИЙ

Все кристаллографически различные варианты (1, 2, 3, 4) выбора поверхности кристалла и соответствующих плоскостей падения, когда поверхность и плоскость падения совпадают с плоскостями симметрии кристалла, собраны в табл. 2.

В табл. 2 приняты обозначения:

$$\kappa = c_{44}/c_{11}, \quad \sigma = c_{cub}/c_{11}. \tag{5}$$

Таблица 2. Геометрия распространения, заданная векторами **m** и **n**; параметр чистого отражения $\rho v_0^2/c_{11}$ и коэффициенты (*a, b, c, d*) уравнения (7) – функции величин κ, σ

Вариант	1	2	3	4
m	<i>x</i>	<i>x'</i>	<i>x'</i>	<i>z</i>
n	<i>y</i>	<i>y'</i>	<i>z</i>	<i>x'</i>
$\frac{\rho v_0^2}{c_{11}}$	$2(\kappa + \sigma)$	2κ	$\frac{\kappa}{2(1 - \kappa - \sigma)} A$	$\frac{\kappa(1 - \kappa)}{2 - 2\kappa - 3\sigma} A$
<i>a</i>	$1 - \kappa$	$\frac{1 - \kappa - 2\sigma}{1 - \sigma}$	$1 - \kappa$	$\frac{1 - \kappa - \sigma}{1 - \sigma}$
<i>b</i>	$-2A$	$-2A$	$-2A - \sigma$	$-2A + \frac{\sigma}{1 - \sigma}$
<i>c</i>			$A^2 + 2A$	
<i>d</i>			$-A^2$	
<i>A</i>	$\frac{4(1 - \kappa - \sigma)(\kappa + \sigma)}{\kappa}$	$\frac{4(1 - \kappa - \sigma)\kappa}{(\kappa + \sigma)(1 - \sigma)}$	$\frac{4(1 - \kappa - \sigma)(\kappa + \sigma) - \sigma}{\kappa}$	$\frac{4(1 - \kappa - \sigma)(\kappa + \sigma) - \sigma}{\kappa(1 - \sigma)}$

В этих обозначениях условия устойчивости (4) записываются в следующем виде:

$$1 > |1 - 2\kappa - 2\sigma|, \quad 3/4 - \kappa > \sigma, \quad \kappa > 0. \tag{6}$$

Данные табл. 2 получены в результате предельного перехода к кубическим кристаллам от соответствующих соотношений, полученных для ромбических кристаллов [9]. Анализ показал, что параметр чистых отражений $\rho v_0^2/c_{11}$ положителен во всех вариантах 1, 2, 3, 4 (при соблюдении условий устойчивости). Таким образом, нет никаких ограничений на существование чистых отражений во всех вариантах, представленных в табл. 2.

Что касается параметра конверсионных отражений $\xi^2 = \rho v^2/c_{44}$, то его величина определяется из бикубического уравнения

$$a\xi^6 + b\xi^4 + c\xi^2 + d = 0, \tag{7}$$

коэффициенты которого (*a, b, c, d*) приведены в табл. 2.

Все характеристики кубических кристаллов в табл. 2 зависят всего от двух безразмерных переменных κ, σ . В то же время в ромбических кристаллах аналогичные характеристики для каждой из шести рассмотренных в [9] геометрий распространения зависят от трех независимых переменных – каждой геометрии соответствует своя тройка переменных. Размерность пространства, в котором существуют исследуемые характеристики для кубических кристаллов, оказалась меньше. Теперь в двумерном пространстве – на плоскости переменных (κ, σ) – в явном виде можно выявить и области существования, и все характеристики рассматриваемых волновых полей.

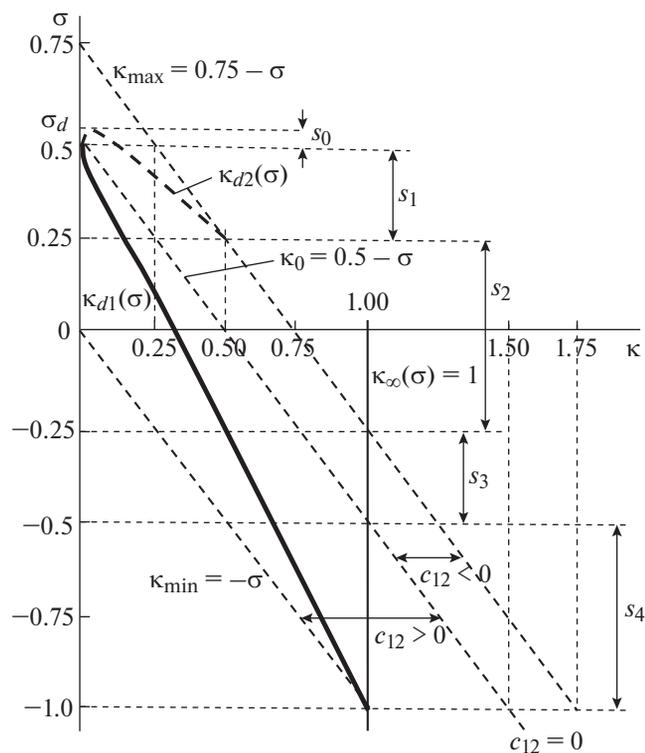


Рис. 3. Линия вырождения $\kappa_d = \kappa_{d1,2}(\sigma)$, отвечающая условию $\xi_I^2 = \xi_{II}^2 = \xi_d^2$, для геометрии варианта 1 (табл. 2).

Характер корней уравнения (7) определяется знаком следующей функции [13]:

$$D(\kappa, \sigma) = \left(\frac{b^3}{27} - \frac{abc}{6} + \frac{a^2d}{2} \right)^2 + \left(\frac{3ac - b^2}{9} \right)^3. \quad (8)$$

При любом знаке функции $D(\kappa, \sigma)$ один из трех корней уравнения (7), вещественный и положительный $\xi_R^2 > 0$, лежит в области I ($v_{L1}^{-1} < v_R^{-1}$ на рис. 1) и отвечает рэлеевской волне. Теоремы [14–16] гарантируют существование такого корня.

В области $D(\kappa, \sigma) \leq 0$ другие два корня ξ_I^2 и ξ_{II}^2 уравнения (7) вещественные. Если они положительные, то отвечают конверсионным отражениям. В области $D(\kappa, \sigma) > 0$ корни ξ_I^2 и ξ_{II}^2 комплексно сопряженные и отвечают нефизическим решениям. Области существования этих двух типов решений разделены условием $D(\kappa, \sigma) = 0$, при котором из трех действительных корней уравнения (7) два совпадают: $\xi_I^2 = \xi_{II}^2 = \xi_d^2$, т.е. имеет место вырождение. Данное условие задает линию вырождения корней ξ_I^2, ξ_{II}^2 уравнения (7) $\kappa_d = \kappa_{d1,2}(\sigma)$. Эта линия – граница между областями принципиально различных типов корней ξ_I^2, ξ_{II}^2 уравнения (7). Для геометрии 1 данная линия представлена (в области устойчивости) на рис. 3.

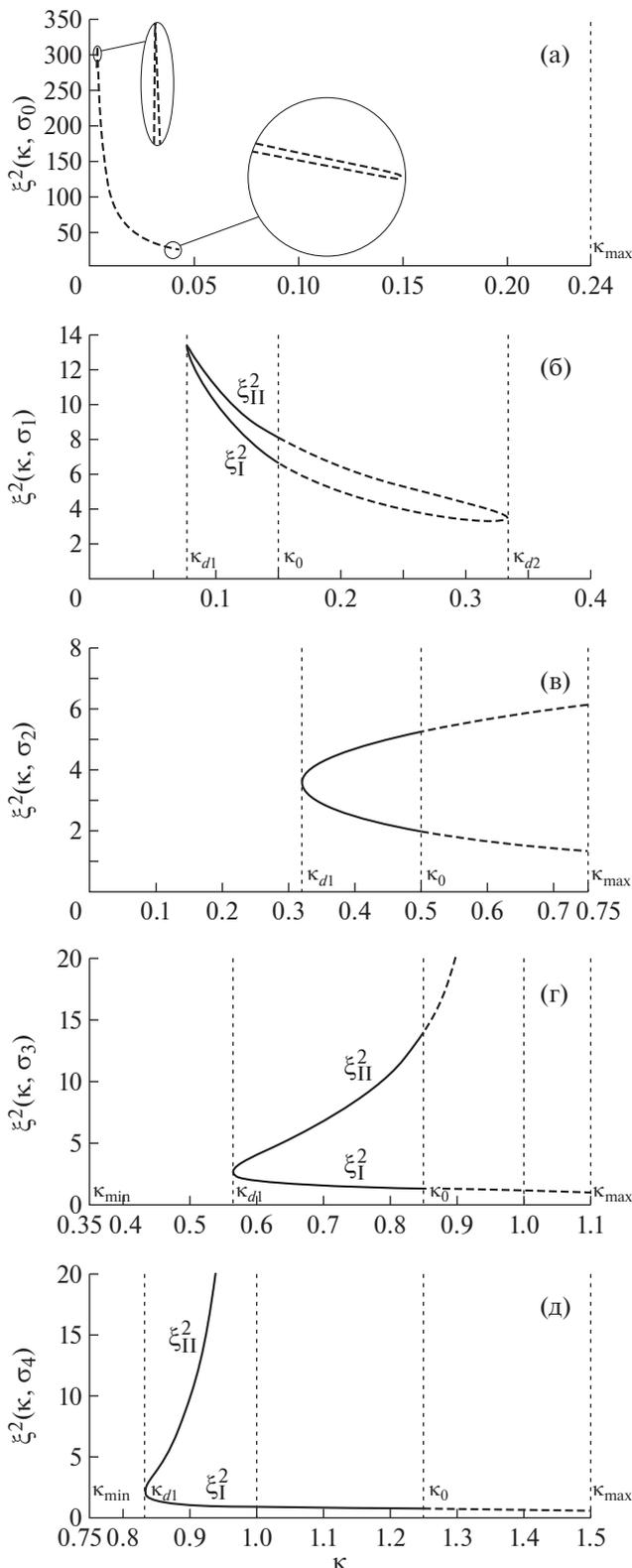


Рис. 4. Линии конверсионных отражений $\xi^2 = \xi_{I,II}^2(\kappa)_{\sigma=\text{const}}$ для геометрии 1 при различных значениях параметра $\sigma = \sigma_i = \text{const} \subset s_i$: а – $\sigma_0 = 0.51$, б – $\sigma_1 = 0.35$, в – $\sigma_2 = 0$ (изотропный предел), г – $\sigma_3 = -0.35$, д – $\sigma_4 = -0.75$. В кружках на (а) показаны увеличенные фрагменты кривой.

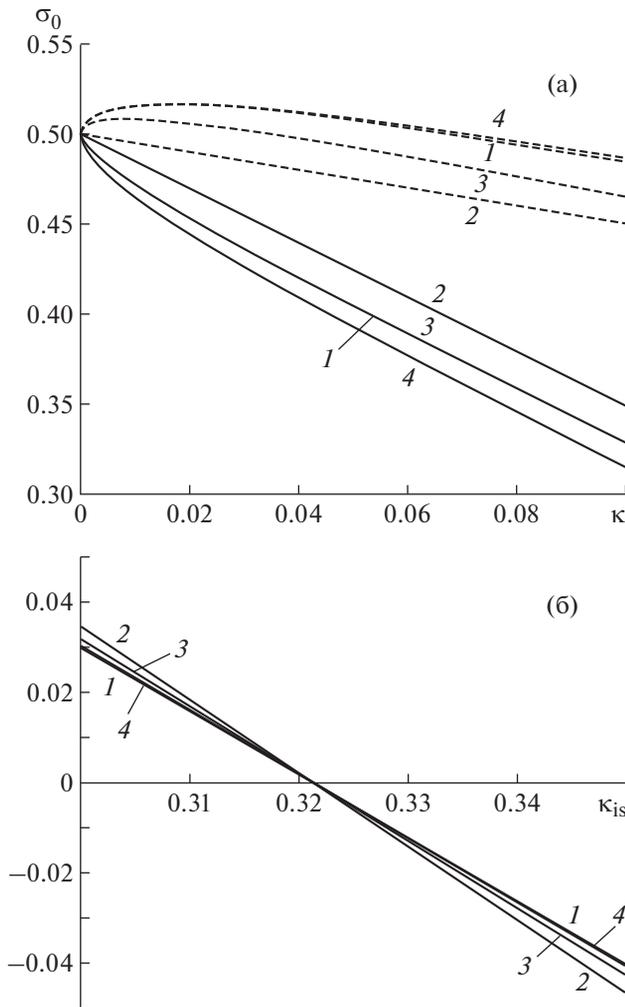


Рис. 5. Ход линий вырождения (варианты 1, 2, 3, 4) вблизи точек их пересечения на плоскости (κ, σ) : а – вблизи точки $(0, \sigma_0)$, $\sigma_0 = 0.5$; б – вблизи точки изотропии $(\kappa_{is}, 0)$, $\kappa_{is} \approx 0.321$.

Линия вырождения имеет две ветви: $\kappa_{d1}(\sigma)$ и $\kappa_{d2}(\sigma)$. Вторая ветвь дана штриховой линией; она лежит в области устойчивости, но отвечает случаю $c_{12} \leq 0$. Конкретные представители кристаллов с таким свойством, насколько известно авторам, не обнаружены.

Кривая вырождения (рис. 3) определяет на плоскости (κ, σ) несколько областей $(s_0, s_1, s_2, s_3, s_4)$, в которых структура линий конверсионных отражений $\xi^2 = \xi_{I,II}^2(\kappa)_{\sigma=\text{const}}$ (рис. 4) топологически различна.

Области s_i на рис. 3 и 4 заданы неравенствами

$$\left. \begin{aligned} 0.5 \leq \sigma < \sigma_d \approx 0.52 & (s_0); \\ 0.25 \leq \sigma < 0.5 & (s_1); \\ -0.25 < \sigma < 0.25 & (s_2); \\ -0.5 \leq \sigma \leq -0.25 & (s_3); \\ -1 < \sigma < -0.5 & (s_4). \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

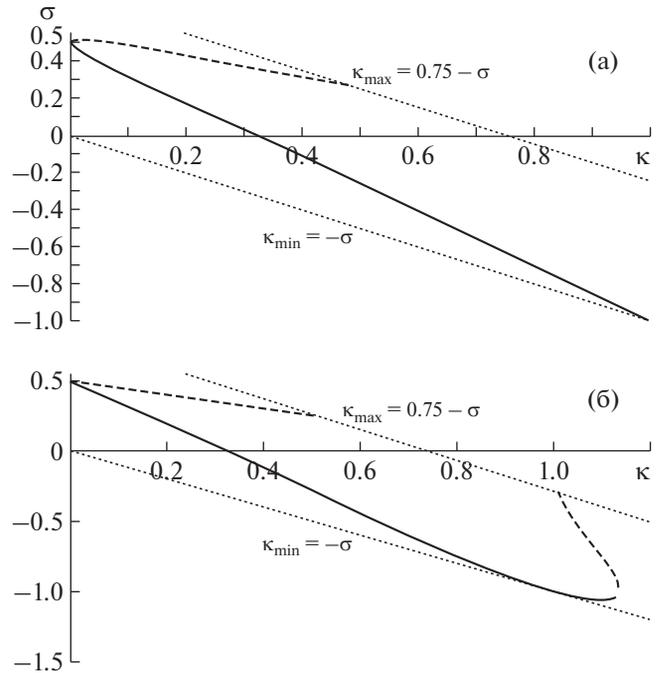


Рис. 6. Линии вырождения для вариантов 1 (а) и 2 (б).

Последовательность фрагментов рис. 4 отражает эволюцию представленных кривых при “включении” анизотропии кубического кристалла (изотропной среде отвечает рис. 4в). На рис. 4 приведены топологически различные картины поведения линий конверсионных отражений $\xi^2 = \xi_{I,II}^2(\kappa)_{\sigma=\text{const}}$ ($\sigma = \sigma_i = \text{const} \subset s_i$) во всех областях (9). Штриховые участки линий на рис. 3 и 4 отвечают случаям $c_{12} \leq 0$. Вся область s_0 отвечает вариантам $c_{12} \leq 0$.

Из рис. 4 видно, что решения существуют в ограниченном диапазоне κ . При этом в зависимости от области и диапазона κ возможны либо два, либо одно решение.

В областях s_0 и s_1 , где $\sigma > 0$, линии являются замкнутыми. При этом во всей области существования решений присутствуют два корня, за исключением крайних точек, в которых происходит вырождение.

В области s_2 , где $\sigma = 0$, правая из предельных точек вырождения пропадает (уходит из области устойчивости).

В областях s_3 и s_4 , где $\sigma < 0$, величина $\xi_{II}(\kappa)$ при $\kappa = 1$ стремится к бесконечности. При $\kappa \rightarrow 1$ коэффициент a при старшем члене уравнения (7) имеет особенность: $a = \kappa - 1 \rightarrow \pm\infty$. В связи с этим в данных областях при $\kappa > 1$ существует только одно решение уравнения (7), имеющее физический смысл – ξ_{II} (разумеется, решение, отвечающее рэлеевской волне ξ_R^2 , по-прежнему остается).

Таблица 3. Модули упругости $c_{\alpha\beta}$, c_{cub} (в GPa) и безразмерные параметры κ , σ (5) для нескольких кубических кристаллов

Кристалл	c_{11}	c_{44}	c_{12}	c_{cub}	κ	σ
Алмаз	107.6	57.6	12.5	-10.1	0.535	-0.093
Si	16.74	7.96	6.52	-2.85	0.476	-0.170
GaAs	11.88	5.94	5.38	-2.69	0.500	-0.226

Таблица 4. Параметры вырожденных отражений и рэлеевской волны ряда кубических кристаллов. Номера 1, 2, 3, 4 задают геометрию распространения – ориентации \mathbf{m} и \mathbf{n} – согласно данным табл. 2

Кристалл	Вариант	$\rho v_0^2/c_{11}$	$\rho v_1^2/c_{44}$	$\rho v_{II}^2/c_{44}$	$\rho v_R^2/c_{44}$
Алмаз	1	0.884	1.88	5.32	0.742
	2	1.07	2.06	4.09	0.691
	3	0.968	2.04	5.69	0.758
	4	0.893	1.87	4.78	0.750
Si	1	0.612	2.18	3.91	0.711
	2	0.952	2.46	3.37	0.592
	3	0.735	2.53	4.56	0.758
	4	0.654	2.16	3.50	0.742
GaAs	1	0.548	2.15	3.54	0.656
	2	1.00	2.47	3.10	0.513
	3	0.704	2.59	4.39	0.734
	4	0.609	2.12	3.10	0.711

Сопоставление вариантов 1, 2, 3, 4 показывает, что все линии вырождения на плоскости (κ , σ) идут очень близко друг к другу – в масштабе, принятом на рис. 3, их даже трудно разделить. Более того, следующие три точки на плоскости (κ , σ) (рис. 3):

$$(0, 0.5), \quad (0.5, 0.25), \quad (\approx 0.321, 0), \quad (10)$$

оказываются общими для всех четырех линий вырождения (последняя из этих точек отвечает пределу изотропной среды). Именно поэтому на рис. 3 представлен только вариант 1. Таким образом, топологически различные случаи, показанные на рис. 4, качественно могут иллюстрировать все рассматриваемые варианты (1, 2, 3, 4). В более крупном, чем на рис. 3, масштабе ход всех четырех линий вырождения в окрестности точек их пересечения (10) иллюстрирует рис. 5.

Отметим особенность, возникающую в варианте 2, – здесь в области устойчивости появляется дополнительная ветвь, правда для $c_{12} \leq 0$ (рис. 6).

ЧИСЛЕННЫЕ ОЦЕНКИ

Численные оценки проведены для нескольких кубических кристаллов, модули упругости которых взяты из [18] (табл. 3). Конкретные значения ключевых параметров вырожденных отражений для этих кристаллов представлены в табл. 4.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Заканчивая третью работу цикла, отметим, что описанные особенности акустических волн при их отражениях в кристаллах могут быть использованы при конструировании кристаллических звукопроводов. Существенно, что при описанных отражениях возникает только одна отраженная волна, а паразитные сопутствующие акустические поля заведомо отсутствуют.

Авторы выражают благодарность В.И. Альшицу за ряд полезных замечаний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. М.: Наука, 1965. 388 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1965. 204 с.
3. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973. 343 с.
4. Alshits V.I., Lothe J. // Wave motion. 1981. V. 3. P. 297.
5. Lothe J., Wang L. // Wave motion. 1995. V. 21. P. 163.
6. Wang L., Lothe J. // Wave motion. 1992. V. 16. P. 89.
7. Gundersen S.A., Wang L., Lothe J. // Wave motion. 1991. V. 14. P. 129.
8. Любимов В.Н., Альшиц В.И. // Кристаллография. 1982. Т. 27. Вып. 5. С. 851.
9. Любимов В.Н. // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 3. С. 386.
10. Любимов В.Н., Филиппов В.В. // Акуст. журн. 1980. Т. 26. Вып. 2. С. 225.
11. Любимов В.Н., Филиппов В.В. // Изв. АН БССР. 1980. Вып. 5. С. 121.
12. Любимов В.Н. // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 2. С. 270.
13. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике. М.: Наука, 1981. 723 с.
14. Barnett D.M., Lothe J. // J. Phys. F. 1974. V. 4. P. 671.
15. Lothe J., Barnett D.M. // J. Appl. Phys. 1976. V. 47. P. 428.
16. Barnett D.M., Lothe J. // Proc. R. Soc. London. A. 1985. V. 402. P. 135.
17. Landolt H.H., Börnstein R. Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik. Neue Serie. Gruppe III. Band 11 / Ed. Hellwege K.-H. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1979. 854 s.
18. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975. 680 с.