

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждения высшего профессионального образования

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ (ТУСУР)

ДАВЫДОВ В.Н.

**ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ
КРИСТАЛЛОВ НИОБАТА ЛИТИЯ**

Методические указания
по выполнению лабораторной работы

ТОМСК 2022

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ.....	3
2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ.....	3
2.1. Уравнение движения элемента объема кристалла.....	3
2.2. Распространение плоской упругой волны в анизотропном кристалле.....	4
2.3. Скорость переноса энергии в анизотропном кристалле.....	8
2.4. Уравнения плоской упругой волны в анизотропном пьезоэлектрике	9
2.5. Распространение плоской упругой волны в анизотропном пьезоэлектрике.....	11
2.6. Влияние симметрии кристалла на распространение упругой волны	13
3. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ.....	18
3.1. Задание к лабораторной работе №3	18
3.2. Схема расчета фазовых скоростей упругих волн в кристаллах	19
3.3. Задание к лабораторной работе №4	22
3.4. Схема расчета векторов поляризации упругих волн в кристалла.....	23
4. ТРЕБОВАНИЯ К СОДЕРЖАНИЮ И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА.....	23
5. ЛИТЕРАТУРА	24
Приложение. Материальные константы кристаллов LiNbO_3	25

1. ВВЕДЕНИЕ

Упругие волны, распространяющиеся в твердых телах, являются основным носителем информации в функциональных акустоэлектронных приборах анализа и обработки радиосигналов. Кроме того, в основе многих функциональных радиоэлектронных устройств лежат эффекты в анизотропных кристаллах, возникающие при взаимодействии упругих волн с электрическими и магнитными полями, свободными носителями заряда и световыми волнами.

Целью данной работы является изучение закономерностей распространения упругих волн в анизотропных кристаллах, расчет зависимостей фазовых скоростей упругих волн и их поляризаций от направления в кристаллах LiNbO₃ (точечная группа симметрии $3m$).

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Уравнение движения элемента объема кристалла

Пусть имеется кристалл, в котором установлена кристаллофизическая система координат, связанная с элементами симметрии его элементарной ячейки. Мысленно выделим в этом кристалле некоторый объем V , ограниченный поверхностью S . Если на каждый элемент поверхности dS действует сила $\bar{P} \cdot dS = \hat{\sigma} \cdot \bar{n} \cdot dS$, то на весь выделенный объем будет действовать сила:

$$\bar{F} = \oint_S \bar{P} \cdot dS = \oint_S \hat{\sigma} \cdot \bar{n} \cdot dS.$$

Здесь \bar{n} - единичный вектор к поверхности S , $\hat{\sigma}$ - тензор упругих напряжений в кристалле. Интеграл по замкнутой поверхности, согласно теореме Остроградского-Гаусса, можно заменить на интеграл по объему:

$$\bar{F} = \oint_S \hat{\sigma} \cdot \bar{n} \, ds = \int_V \text{Div} \hat{\sigma} \, dV .$$

С другой стороны, по второму закону Ньютона:

$$\bar{F} = \int_V \rho \cdot \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} \cdot dV,$$

$\bar{U}(\bar{r})$ - вектор смещения элемента объема кристалла, имеющего в кристаллофизической системе координат радиус – вектор \bar{r} , из состояния равновесия под действием внешней силы, вызвавшей появление упругого напряжения в данном элементе объема. Поэтому можно записать:

$$\int_V \text{Div} \hat{\sigma} \, dV = \int_V \rho \cdot \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} \cdot dv,$$

Так как это равенство справедливо при любом выборе V , то должны быть равны подинтегральные выражения:

$$\text{Div} \hat{\sigma} = \rho \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} \quad (1)$$

Это уравнение движения упругого тела называется **уравнением эластодинамики** или **уравнением Коши**. В равновесном состоянии

$$\text{Div} \hat{\sigma} = 0, \quad \rho \frac{\partial^2 \bar{U}}{\partial t^2} = 0;$$

2.2. Распространение плоской упругой волны в анизотропном кристалле

Плоская упругая волна может быть описана полем вектора смещения:

$$\bar{U}(\bar{r}, t) = A \cdot \bar{p} \cdot \exp(i\bar{k} \cdot \bar{r} - i\omega t). \quad (2)$$

Здесь \bar{r} - радиус – вектор выделенного элемента объема кристалла, A – амплитуда плоской волны; \bar{p} – единичный вектор поляризации волны, т.е. вектор вдоль на-

правления смещения частиц из положения равновесия; $\bar{k} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)\bar{m}$ – волновой вектор; $\omega = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) \cdot v$ – циклическая частота; λ – длина волны; v – фазовая скорость упругой волны; \bar{m} – единичный вектор волновой нормали. Действительные смещения частиц из положения равновесия равны вещественной части этого комплексного выражения (2). Для удобства перепишем его в виде:

$$\bar{U}(\bar{r}, t) = A \cdot \bar{\rho} \cdot \exp \left[i \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) \cdot (\bar{m} \cdot \bar{r} - v \cdot t) \right]. \quad (3)$$

Поле векторов смещений должно удовлетворять уравнениям эластодинамики:

$$C_{ijkl} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x_j \partial x_k} = \rho \frac{\partial^2 U_j}{\partial t^2}, \quad (4)$$

где C_{ijkl} – модули упругости кристалла, ρ – его плотность. Подставив в уравнение (4) смещение в форме (3) и заметив, что дифференцирование экспоненты по t сводится к умножению на $-\frac{2\pi}{\lambda}iv$, а по x_j – на $\frac{2\pi}{\lambda}i \cdot m_j$, получим основное уравнение теории упругих волн в кристалле, именуемое уравнением Кристоффеля:

$$C_{ijkl} m_j m_k p_l = \rho v^2 p_i. \quad (5)$$

Учитывая внутреннюю симметрию тензора \hat{C} в виде $[V^2]^2$, введем в рассмотрение симметричный тензор Кристоффеля, определив его следующим образом:

$$\Gamma_{il} = C_{ijkl} m_j m_k. \quad (6)$$

Поскольку тензор $\hat{\Gamma}$ зависит не только от материального тензора \hat{C} , но и направления распространения упругой волны, он не является материальным тензором, и поэтому его внешняя симметрия может быть ниже симметрии кристалла. Подставив этот тензор в уравнение движения материальной точки кристалла (5), получим уравнение Кристоффеля в виде:

$$\Gamma_{il} p_l = \rho v^2 p_i.$$

Часто в рассмотрение вводят приведенный тензор модулей упругости, определив его следующим образом:

$$L_{ijkl} = C_{ijkl} / \rho$$

и приведенным тензором Кристоффеля: $\Lambda_{ij} = L_{ijkl} m_j m_k$. С их введением уравнение Кристоффеля принимает вид:

$$\Lambda_{ij} p_j = v^2 p_i \quad (7)$$

или в тензорном виде: $\hat{\Lambda} \bar{p} = v^2 \bar{p}$. Данное уравнение показывает, что векторы поляризации \bar{p} упругих волн, распространяющихся в кристалле в направлении единичного вектора \bar{m} , являются собственными векторами приведенного тензора Кристоффеля. Если приведенный тензор Кристоффеля имеет три различных собственных значения, то в данном направлении \bar{m} могут распространяться три взаимно перпендикулярные упругие волны. Фазовая скорость $v(k)$ каждой из этих волн будет определяться собственным значением $v(k)$, соответствующим данному собственному вектору $\bar{p}(k)$.

То обстоятельство, что через кристалл могут распространяться лишь волны строго определенной поляризации, роднит кристаллоакустику с кристаллооптикой. В отличие от электромагнитных волн, в данном случае в каждом направлении \bar{m} распространяются три упругих волны, а не две. Та из них, вектор поляризации которой составляет наименьший угол с вектором волновой нормали, называется **квазипродольной**, а две другие – **квазипоперечными**. Может оказаться, что вектор поляризации одной из волн совпадает с вектором волновой нормали ($\bar{U}(k) \parallel \bar{m}$). Тогда она будет называться **чисто продольной**. При этом две другие обязательно **чисто поперечные**: у них векторы смещения $\bar{U}(i) \perp \bar{m}$, т.к. собственные векторы обязательно взаимно перпендикулярны. Такое направление вектора \bar{m} называется **продольной нормалью**. Может случиться, что только одна волна поперечна. При

этом угол между вектором поляризации квазипродольной волны и волновой нормалью равен углу между вектором поляризации квазипоперечной волны и плоскостью волнового фронта. В этом случае направление \bar{m} называют **поперечной нормалью** (см. рис. 1), где \bar{p}_l – вектор смещения квазипродольной волны, а \bar{p}_T – вектор квазипоперечной волны. Если два собственных значения тензора Кристоффеля совпадают, то в данном направлении \bar{m} может распространяться квазипродольная волна с вектором поляризации $\bar{p}(0)$, фазовая скорость которой $v(0)$ определяется однократным собственным значением $v^2(0)$, а также множество квазипоперечных волн с одинаковыми фазовыми скоростями $v(1)$, векторы поляризации которых имеют всевозможные направления, перпендикулярные $\bar{p}(0)$. Одна из этих волн чисто поперечная. Ее вектор поляризации $\bar{p}(1) \parallel [\bar{p}_0 \times \bar{m}]$. Направление \bar{m} в этом случае называется **акустической осью**. Если при этом направление, выделенное вектором \bar{m} , оказывается еще и продольной нормалью, т.е., то все упругие волны, поляризованные перпендикулярно $\bar{p}(0)$, поперечны и направление \bar{m} называется **продольной акустической осью**.

Чтобы вычислить фазовую скорость упругой волны, следует найти соответствующее собственное значение приведенного тензора Кристоффеля. По своей сути схема отыскания фазовых скоростей упругих волн и их векторов поляризаций аналогична той, что использовалась в кристаллооптике.

Таким образом, существует много общего в распространении упругих и световых волн: как и оптическая волна плоская упругая волна в анизотропной среде в общем случае расщепляется на три плоских упругих волны с различными фазовыми скоростями и взаимно перпенди-

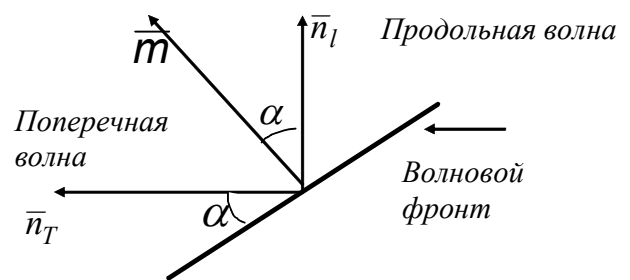


Рис. 1

кулярными векторами смещения в них. Величины фазовых скоростей определяются собственными значениями тензора Кристоффеля (или приведенного тензора Кристоффеля), а направления векторов смещения в этих волнах задается собственными векторами этого тензора.

Однако в поведении оптических и упругих волн в анизотропных кристаллах имеются и различия. В первую очередь они связаны с тем, что оптические волны всегда поперечны, чего нельзя утверждать относительно упругих волн. Наиболее важным следствием этого явилось наличие трех упругих волн в кристалле, а не двух как это имеет место в оптике.

2.3. Скорость переноса энергии в анизотропном кристалле

Когда упругая волна распространяется в анизотропной среде, поток энергии, вообще говоря, отклоняется от волновой нормали. Скорость этого потока энергии характеризуется вектором **лучевой** или **групповой скорости**:

$$\vec{v} = \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}} \quad \text{или} \quad v_j = \frac{\partial \omega}{\partial k_j} .$$

Чтобы увязать лучевую скорость с другими характеристиками упругой волны, умножим скалярно обе части уравнения Кристоффеля (5) на вектор поляризации \vec{p} , тогда получим:

$$C_{ijkl} p_i m_j m_k p_l = \rho v^2$$

Умножив обе части этого равенства на $\frac{4\pi^2}{\lambda^2}$, получим следующее уравнение:

$$C_{ijml} p_i k_j k_m p_l = \rho \omega^2$$

Продифференцируем его по \vec{k} и воспользуемся выражением для групповой скорости, тогда найдем:

$$\omega_j = \frac{1}{\rho\omega} C_{ijkl} p_i p_m k_l.$$

Симметричный тензор второго ранга $P_{jk} = C_{ijkl} p_i p_l$ называется **вторым тензором Кристоффеля**. Подставив его определение в выражение для групповой скорости, получим:

$$\omega_j = \frac{1}{\rho\omega} P_{jk} m_k. \quad (8)$$

Если направление лучевой скорости упругой волны совпадает с направлением волновой нормали, то такую волну называют **обыкновенной**, а в противном случае – **необыкновенной**. Из уравнения (8) следует, что упругая волна является обыкновенной только тогда, когда вектор волновой нормали является собственным вектором второго тензора Кристоффеля. Обыкновенными оказываются, в частности, все продольные волны. Действительно, у продольной волны вектор \bar{m} совпадает с вектором поляризации и потому является собственным вектором первого тензора Кристоффеля. Но по той же причине у продольной волны оба тензора Кристоффеля совпадают, так что вектор \bar{m} является собственным вектором и второго тензора Кристоффеля.

2.4. Уравнения плоской упругой волны в анизотропном пьезоэлектрике

Как показано в предыдущем параграфе, при распространении упругих волн вдоль направлений, связанными с элементами упругой симметрии кристалла, волны могут оказаться продольными, поперечными, обыкновенными и т.д. Исследование возникающих при этом возможностей основано на том, что оси симметрии тензоров Кристоффеля \hat{P} и \hat{G} совпадают с их собственными векторами. Собственные же вектора тензора \hat{G} служат векторами поляризации упругих волн с нормалью \bar{m} .

Рассмотренный кристалл в п.2.3 не проявлял каких-либо дополнительных свойств, кроме упругости. Однако в реальных кристаллах распространение упругой волны способно вызвать его поляризацию и это должно сказаться на распространении упругой волны, на всех ее параметрах. Если кристалл обладает пьезоэффектом (при механической деформации в кристалле возникает электрическое поле), то из физических соображений ясно, что его упругие свойства будут отличаться от упругих свойств непьезоэлектрика. Действительно, пьезоэлектрический кристалл будет вести себя как более жесткий непьезоэлектрик ввиду того, что часть энергии упругой волны будет расходоваться на создание электрического поля. Более того, поляризация кристалла в заданном направлении изменит группу внешней симметрии кристалла, а значит, скажется на значениях модулей упругости. Проанализируем закономерности распространения плоской упругой волны в пьезоэлектрическом кристалле.

Основой для анализа распространения упругих волн в пьезодиэлектрических кристаллах является система уравнений, включающая уравнение движения в виде (1), а также уравнения электростатики:

$$\frac{\partial D_j}{\partial x_j} = 0, \quad (9)$$

Состояния пьезокристалла определяется тензором упругости, который кроме упругой деформации ε_{kl} будет содержать дополнительное слагаемое, описывающее появление механического напряжения за счет обратного пьезоэффекта:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}^E \varepsilon_{kl} + e_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}. \quad (10)$$

Здесь e_{kij} - пьезомодули, φ - электростатический потенциал, созданный за счет прямого пьезоэффекта кристалла. Соответственно электрическая индукция будет слагаться из индукции, созданной прямым пьезоэффектом, и электрическим полем поляризации:

$$D_i = \epsilon_{ikl} \epsilon_{kl} - \chi_{in}^{\epsilon} \frac{\partial \varphi}{\partial x_n}, \quad (11)$$

где χ_{in}^{ϵ} - компоненты тензора диэлектрической проницаемости, измеренные при постоянной деформации кристалла – зажатом кристалле. Дополним эти уравнения уравнением, связывающим компоненты тензора деформации σ_{kl} с компонентами вектора упругого смещения U_k :

$$\epsilon_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_k}{\partial x_l} + \frac{\partial U_l}{\partial x_k} \right), \quad (12)$$

Здесь C_{ijkl}^E , e_{kij} и ϵ_{mnl}^u - компоненты тензоров модулей упругости при постоянном электрическом поле ($E = 0$) и пьезоэлектрических модулей.

Из уравнений (9) – (12) с учетом симметрии тензора C_{ijkl}^E по перестановке индексов можно получить систему уравнений для U_k и φ :

$$\rho \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} = C_{ijkl}^E \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_j \partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_k \partial x_j}, \quad (13)$$

$$e_{mkl} \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_m \partial x_l} - \chi_{mn}^{\epsilon} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_m \partial x_n} = 0, \quad (14)$$

2.5. Распространение плоской упругой волны в анизотропном пьезоэлектрике

Используемые в акустических линиях задержки, акустооптических модуляторах и других акустоэлектронных устройствах упругие волны обычно имеют плоский фазовый фронт. Поэтому представляет интерес решение уравнений (13) и (14) в виде плоских упругих волн, задаваемых в виде

$$U_j(\vec{r}, t) = U_{pj}^m \exp[i(\omega t - \vec{k}\vec{r})] = U^m p_j \exp[i(\omega t - km_j x_j)], \quad (15)$$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \varphi^m \exp[i(\omega t - km_j x_j)], \quad (16)$$

где U^m, φ^m - амплитуды упругого смещения и электрического потенциала в волне;
 $k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{v}$ - волновое число, ρ_i - компоненты единичного вектора упругого смещения, $\vec{m} = \frac{\vec{k}}{k}$ - единичный вектор волновой нормали. Подставляя U_i и φ в виде (15) и (16) в уравнения (13) и (14), получаем связь электростатического потенциала с упругими смещениями:

$$\varphi^m = \frac{\epsilon_{mkl} m_m m_l \rho_k U^m}{\chi_{in}^{\epsilon} m_m m_n}, \quad (17)$$

и уравнение Кристоффеля (7) в следующей форме

$$\left(\Pi_{ik} - \rho v^2 \delta_{ik} \right) \cdot \rho_k U^m = 0, \quad (18)$$

где обозначено:

$$\Pi_{ik} = \Gamma_{ik}^E + \Delta_{ik}^E, \quad (19)$$

$$\Gamma_{ik}^E = C_{ijkl}^E m_j m_l, \quad (20)$$

Γ_{ik}^E - компоненты тензора Кристоффеля, а

$$\Delta_{ik}^E = \frac{\dot{e}_i \dot{e}_k}{\chi^U}, \quad (21)$$

$\dot{e}_i = \epsilon_{kij} m_k m_j$ - компоненты пьезоэлектрического вектора, $\chi^U = \chi_{kn}^U m_k m_n$ - эффективная диэлектрическая проницаемость кристалла для данного направления волновой нормали \vec{m} , δ_{ik} - символ Кронекера (компоненты единичного тензора второго ранга). Использование уравнения Кристоффеля в форме (18) позволяет найти скорости нормальных упругих волн (волн, распространяющихся вдоль одной волновой нормали \vec{m}) и единичные упругого вектора смещения. Оно решается обычным способом: составляется характеристическое уравнение, представляющее собой условие равенства нулю определителя системы (18). Его решение дает собственные значения модифицированного тензора Кристоффеля (19). Под-

становка найденных собственных значений в исходное уравнение Кристоффеля позволяет найти компоненты векторов поляризации каждой из трех образующихся в кристалле упругих волн.

2.6. Влияние симметрии кристалла на распространение упругой волны в кристалле

Обычно рассматривая то или иное физическое свойство, представляет интерес влияние точечной симметрии кристалла на это физическое свойство. Здесь рассматривается влияние элементов точечной симметрии на упругие свойства кристалла и на распространение упругих волн.

Тензор $\hat{\Gamma} = \bar{m} \hat{C} \bar{m}$ определяется тензором упругих постоянных \hat{C} и диадой $\bar{m} \cdot \bar{m}$. Согласно принципу Кюри среди элементов симметрии этого тензора обязательно содержатся те, которые являются общими для тензора \hat{C} и $\bar{m} \cdot \bar{m}$.

Группа симметрии кристалла считается известной, а группа симметрии диады есть ∞/mmm , причем ось симметрии бесконечного порядка совпадает с направлением вектора \bar{m} . Аналогично рассуждая, можно определить группу симметрии тензора \hat{P} . Исходя из этих рассуждений, рассмотрим отдельные случаи.

1. Пусть вектор \bar{m} совпадает с одной из осей симметрии порядка $n > 2$. Тогда эта ось окажется осью симметрии того же порядка для тензора Кристоффеля $\hat{\Gamma}$. Но согласно теореме Германа все оси симметрии выше второго порядка для тензоров второго ранга служат осями симметрии бесконечного порядка. Поэтому тензор $\hat{\Gamma}$ будет иметь симметрию ∞/mmm . Два его собственных значения совпадут; один из собственных векторов будет направлен по оси бесконечного порядка (т.е. по направлению вектора \bar{m}), а остальные заполнят перпендикулярную ему плоскость. Из этого следует, что в кристаллах все оси симметрии с $n > 2$ являются про-

дольными акустическими осями кристалла. Упругие волны, распространяющиеся вдоль них, или продольны, или поперечны, причем поперечные волны могут иметь любую поляризацию в пределах плоскости, перпендикулярной направлению распространения упругой волны (\bar{m}). Фазовые скорости всех поперечных волн одинаковы.

Продольные волны по общему правилу обыкновенны, поперечные же следует рассмотреть подробнее. Поперечные волны обыкновенны уже в том случае, когда волновая нормаль направлена по оси симметрии второго порядка и выше. Так как в изотропном теле любое направление может служить осью симметрии бесконечного порядка, то указанным свойством должны обладать все упругие волны в изотропном теле, т.е. они все должны быть обыкновенны (вектор их фазовой скорости параллелен вектору групповой скорости). Поперечные же волны, распространяющиеся вдоль оси симметрии третьего порядка, являются необыкновенными.

2. Пусть вектор \bar{m} направлен по одной из осей симметрии второго порядка тензора упругих постоянных \hat{C} . Эта ось симметрии оказывается осью симметрии второго порядка и для тензора \hat{G} . Значит, по этой оси направлен один из собственных векторов, а два других ему перпендикулярны. Таким образом, оси симметрии тензора \hat{C} служат продольными нормальными кристалла, но не являются его акустическими осями. Наряду с продольной волной вдоль оси симметрии второго порядка распространяются две поперечные волны, имеющие различные фазовые скорости и строго определенные поляризации: вектора смещений в них перпендикулярны вектору \bar{m} . Если тензор \hat{C} кроме оси симметрии второго порядка, параллельной вектору \bar{m} , имеет перпендикулярную ей ось симметрии четного порядка, то один из поперечных векторов поляризации будет направлен по этой оси. В этом случае второй вектор поляризации попереч-

ной волны окажется осью симметрии второго порядка тензора \hat{C} , что вытекает из свойства пересекающихся осей симметрии.

Если же тензор \hat{C} не имеет перпендикулярных к оси симметрии второго порядка, которая параллельная направлению распространения упругой волны \bar{m} , других осей симметрии четного порядка, направления векторов поперечной поляризации определяется модулями упругости кристалла. Это имеет место, например, в кристаллах моноклинной и тригональной систем.

Следует отметить, что ось симметрии второго порядка для тензора \hat{C} может не являться таковой для кристалла. Например, кристалл симметрии m не имеет каких-либо осей симметрии. Однако его тензор \hat{C} наряду с плоскостью симметрии имеет перпендикулярную к ней ось симметрии второго порядка. Другой пример – кристаллы низших подсистем тетрагональной и тригональной систем ($3, 3m, 4, 4mm$ и т.п.) не имеют осей симметрии второго порядка, перпендикулярных главной оси симметрии, но их тензоры \hat{C} такие оси симметрии имеют.

Не только продольная волна, но и обе поперечные оказываются обыкновенными даже в общем случае, когда тензор \hat{C} не имеет осей симметрии четного порядка, перпендикулярных к оси симметрии второго порядка, параллельной вектору \bar{m} . Это объясняется тем, что эта ось симметрии второго порядка входит в группу пересечения группы симметрии тензора \hat{C} и диады векторов поляризации поперечных упругих волн: $\bar{p}_{(1)} \cdot \bar{p}_{(1)}, \bar{p}_{(2)} \cdot \bar{p}_{(2)}$ и потому она служит осью симметрии второго порядка для тензоров $\hat{P}(\bar{p}_{(1)})$ и $\hat{P}(\bar{p}_{(2)})$.

3. Пусть вектор \bar{m} перпендикулярен к оси симметрии второго порядка тензора \hat{C} или, что то же самое, лежит в одной плоскости с вектором

\bar{m} . Тогда эта ось симметрии второго порядка окажется одновременно осью симметрии второго порядка для диады $\bar{m} \cdot \bar{m}$, а следовательно, и для тензора \hat{G} . Значит, с этой осью симметрии, перпендикулярной вектору \bar{m} совпадет один из собственных векторов, являющийся вектором поляризации чисто поперечной упругой волны. Остальные два вектора поляризации, строго говоря, не являются ни продольными, ни поперечными. Таким образом, все направления, перпендикулярные к осям симметрии второго порядка тензора \hat{C} или лежащие в его плоскостях симметрии, являются поперечными нормальными. В данном случае нет оснований ожидать, что какая-либо из упругих волн окажется обыкновенной.

Заметим, что поскольку все оси симметрии четного порядка заодно являются и осями симметрии второго порядка, все сказанное выше относится и к направлениям, которые перпендикулярны этим осям. Что касается направлений, перпендикулярных осям симметрии третьего порядка, то на них это утверждение не распространяется.

4. Поскольку оси симметрии шестого порядка и четвертого порядка служат одновременно осями второго порядка, то направления, перпендикулярные этим осям, также являются поперечными нормальными. Но в отличие от направлений, перпендикулярных осям симметрии второго порядка, эти направления обладают рядом интересных свойств. Рассмотрим эти свойства на примере направлений, лежащих в плоскости (001) кристалла тетрагональной сингонии.

Для обсуждаемых направлений вектор волновой нормали можно записать в виде:

$$\bar{m} = \bar{e}_1 \cos \varphi + \bar{e}_2 \sin \varphi .$$

Тогда тензор Кристоффеля будет таков:

$$\Gamma_{ij} = C_{i11j} \cos^2 \varphi + C_{i22j} \sin^2 \varphi + (C_{i12j} + C_{i21j}) \sin \varphi \cos \varphi .$$

Здесь φ - угол между вектором \bar{m} и осью X_1 . Для кристаллов тетрагональной сингонии в обозначения Фохта это дает:

$$\| \Gamma_{il} \| = \begin{vmatrix} C_{11} \cos^2 \varphi + C_{66} \sin^2 \varphi & (C_{12} + C_{66}) \sin \varphi \cos \varphi & 0 \\ (C_{12} + C_{66}) \sin \varphi \cos \varphi & C_{22} \sin \varphi + C_{66} \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & C_{44} \end{vmatrix},$$

причем $C_{11} = C_{22}$. Отсюда видно, что направление вектора поляризации поперечной волны $\bar{\rho}_{(1)} = \bar{e}_3$, т.е. этот вектор направлен по главной оси симметрии кристалла, а фазовая скорость этой волны равна

$$v_{(1)} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}},$$

т.е. не зависит от направления волновой нормали к плоскости (001), т.е. от угла φ . Этот вывод следует из вида последней строки тензора.

Таким образом, плоскость (001) в кристалле тетрагональной сингонии изотропна относительно упругих волн, поляризованных перпендикулярно этой плоскости: все они распространяются с одинаковыми фазовыми скоростями. Такая плоскость имеется в гексагональной сингонии, в кубической сингонии это плоскость (100).

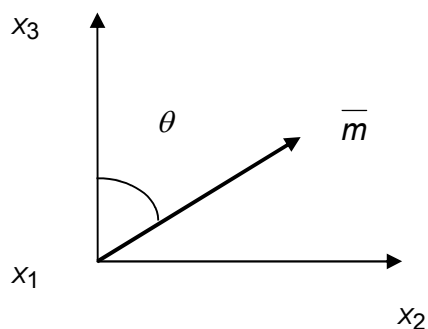
Мы рассмотрели все случаи, когда некоторые кристаллографические направления являются продольной нормалью, поперечной нормалью или акустической осью вследствие своего особенного положения относительно элементов симметрии тензора упругих постоянных. Однако это особенное положение направления относительно элементов симметрии тензора \hat{C} - есть достаточное, но отнюдь не необходимое условие того, что данное направление представляет продольную или поперечную нормаль, акустическую ось. В действительности продольные нормали есть в любом кристалле независимо от его симметрии и их положение в

кристаллофизической системе координат определяется численными значениями коэффициентов упругости.

3. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

3.1. Задание к лабораторной работе №3

3.1.1. Составьте схему расчета фазовых скоростей упругих волн, распространяющихся в плоскости X_2OX_3 кристалла симметрии $3m$ (рис. 2).



3.1.2. Получите аналитически выражения для фазовых скоростей упругих волн по составленной схеме расчета. Вид тензоров C_{ijkl} , e_{kij}

Рис.2

и χ_{kn} для кристаллов симметрии $3m$ приведен в приложении к данному описанию данной лабораторной работы.

3.1.3. Составьте программу для расчета фазовых скоростей на ЭВМ, используя макет "Mathcad" для углов вхождения упругой волны в кристалл, изменяющегося в диапазоне $\theta = (0 \div \pi)$ с шагом 0.1 радиана.

3.1.4. Используя составленную программу, проведите расчет фазовых скоростей для кристалла $LiNbO_3$. Результаты расчета представьте в виде графических зависимостей $v_\alpha(\theta)$ для всех трех упругих волн. Объясните полученные зависимости исходя из симметричных соображений, а также из общих закономерностей распространения упругих волн в анизотропных пьезоэлектрических кристаллах.

3.1.5. Проведите компьютерный эксперимент по влиянию пьезоэлектрического эффекта на фазовые скорости упругих волн. Для этого проведите расчет зависимостей $v_\alpha(\theta)$ для значений $e_{mij} = 0$. Сравните результаты расчета

фазовых скоростей с пьезоэффектов и без него. Объясните полученный результат.

3.1.6. Получите аналитические выражения для расчета векторов поляризации всех трех упругих волн. Составьте программу для расчета единичных векторов поляризации (упругого смещения) p^α .

3.1.7. Проведите расчет векторов p^α для значений θ , заданных преподавателем, для кристалла LiNbO_3 . Поясните полученные зависимости.

3.1.8. Проведите аналогичный расчет для случая отсутствия пьезоэффекта в кристалле и сравните полученные результаты с результатами для пьезоэлектрического кристалла. Объясните полученные результаты.

3.1.9. Составьте отчет о проделанной лабораторной работе.

3.2. Схема расчета фазовых скоростей упругих волн в кристаллах

3.2.1. Определение компонент единичного вектора волновой нормали m_j . Для этого производим проецирование вектора нормали к волновой плоскости на координатные оси (см. рис. 2). В результате проецирования получаем:

$$\begin{aligned}m_1 &= 0; \\m_2 &= \sin \theta; \\m_3 &= \cos \theta.\end{aligned}$$

3.2.2. Нахождение компонент тензора Кристоффеля $\Gamma_{ik}^E = C_{ijkl}^E m_j m_l$, пьезоэлектрического вектора $e'_i = e_{kij} m_k m_j$, эффективной диэлектрической проницаемости $\chi^\varepsilon = \chi_{kn}^\varepsilon m_k m_n$ с учетом вида соответствующих тензоров для данной группы точечной симметрии. Для отыскания компонент тензоров C_{ijkl} , e_{kij} необходимо перевести матричные обозначение Фохта приведенных в приложении тензоров в тензорные обозначения. Сделать это можно, преобразовав индексы воспользовавшись ниже приведенной таблицей

Тензорное обозначение	11	22	33	23,32	31,13	12,21
Матричное обозначение	1	2	3	4	5	6

Индексы преобразовываются попарно: либо первая и вторая пары (для четырех индексов), либо – последние два (для трех).

3.2.3. Нахождение компонент тензора $\Pi_{ik} = \Gamma_{ik}^E + \frac{e_i^\varepsilon e_k^\varepsilon}{\chi U}$. Составление

аналитических выражений для компонент модифицированного тензора упругих постоянных Π_{ik} производится следующим образом: задаются конкретные значения индексов i и k (от 1 до 3), остальным индексам поочередно присваиваются значения от 1 до 3. При этом учитывается, что, так как компонента m_1 вектора волновой нормали равна нулю и потому нет смысла присваивать индексам j и i значение 1. Продемонстрируем последовательность действий на примере компоненты Π_{11} .

В выражении для компонент модифицированного тензора Кристоффеля

$$\Pi_{ik} = \Gamma_{ik}^E + \frac{e_i^\varepsilon e_k^\varepsilon}{\chi U}$$

полагаем $i = k = 1$. Тогда получим:

$$\Pi_{11} = \Gamma_{11}^E + \frac{e_1^\varepsilon e_1^\varepsilon}{\chi U}. \quad (22)$$

Теперь приступим к отысканию первой компоненты тензора Кристоффеля Γ_{11}^E .

Начнем с выражения для этих компонент: $\Gamma_{ik}^E = C_{ijkl}^E m_j m_l$, которое для нашего случая примет следующий вид:

$$\Gamma_{11}^E = C_{1j1l}^E m_j m_l, \quad (23)$$

где индексы j и l принимают значения только 2 и 3 (для $i=1$ $m_1=0$). Тогда для каждого значения перебираемых индексов получим такие комбинации:

$$j=2 ; l=2; C_{1212}m_2m_2 = C_{66}m_2^2;$$

$$j=2 ; l=3; C_{1213}m_2m_3 = C_{65}m_2m_3;$$

$$j=3 ; l=2; C_{1312}m_3m_2 = C_{56}m_3m_2;$$

$$j=3 ; l=3 ; C_{1313}m_3m_3 = C_{55}m_3^2.$$

Складывая эти выражения и используя тензорные обозначения Фохта, получим требуемую компоненту тензора Кристоффеля:

$$\Gamma_{11}^E = C_{66}m_2^2 + C_{65}m_2m_3 + C_{56}m_3m_2 + C_{55}m_3^2$$

Теперь перейдем к определению второго слагаемого компоненты тензора Кристоффеля, описывающего влияние пьезоэффекта на упругие свойства кристалла:

$$\Delta_{11} = \frac{e_1^2}{\chi^u}$$

Выражения для вычисления числителя и знаменателя этой дроби таковы:

$$e_1 = e_{k1j}m_k m_j \quad k, j = 2, 3;$$

$$\chi^e = \chi_{kn}^e m_k m_n \quad \text{где } k, n = 2, 3.$$

Перебор индексов k и n от 1 до 3, а также переход от тензорных обозначений к фохтовскому по второму и третьему индексу, приводит к следующему выражению

$$\Delta_{11} = \frac{(e_{26}m_2^2 + e_{36}m_3m_2 + e_{25}m_2m_3 + e_{35}m_3^2)^2}{\varepsilon_{22}m_2^2 + \varepsilon_{32}m_3m_2 + \varepsilon_{23}m_2m_3 + \varepsilon_{33}m_3^2} \quad (24)$$

Сложив Γ_{11}^E и Δ_{11} , получим компоненту Π_{11} . Остальные компоненты тензора $\hat{\Pi}$ находятся аналогично.

3.2.4. Определение фазовых скоростей упругих волн начинается с записи уравнения Кристоффеля в координатной форме:

$$\begin{cases} (\Pi_{11} - \rho v^2)p_1 + \Pi_{12}p_2 + \Pi_{13}p_3 = 0 \\ \Pi_{21}p_1 + (\Pi_{22} - \rho v^2)p_2 + \Pi_{23}p_3 = 0 \\ \Pi_{31}p_1 + \Pi_{32}p_2 + (\Pi_{33} - \rho v^2)p_3 = 0 \end{cases} \quad (25)$$

3.2.5. Получим характеристическое уравнение для нахождения фазовых скоростей. Для этого приравняем к нулю определитель системы уравнений (25):

$$\begin{vmatrix} (\Pi_{11} - \rho v^2) & \Pi_{12} & \Pi_{13} \\ \Pi_{21} & (\Pi_{22} - \rho v^2) & \Pi_{23} \\ \Pi_{31} & \Pi_{32} & (\Pi_{33} - \rho v^2) \end{vmatrix} = 0 \quad (26)$$

В общем случае имеем уравнение третьей степени относительно v^2 , или – шестой относительно v . Но в данном случае оно распадается на линейную и квадратичную составляющие, поэтому данное уравнение можно решать с помощью теоремы Виета. В итоге получим три решения, каждое из которых определяет величину фазовой скорости упругой волны в кристалле, образовавшейся в результате расщепления вошедшей в кристалл одной плоской упругой волны.

3.3. Задание к лабораторной работе №4

3.3.1. Составьте схему расчета фазовых скоростей упругих волн, распространяющихся в плоскости X_2OX_3 кристалла симметрии $3m$ (рис. 2).

3.3.2. Получите аналитически выражения для векторов поляризаций упругих волн по составленной схеме расчета. Вид тензоров C_{ijkl} , e_{kij} и χ_{kn} для кристаллов симметрии $3m$ приведен в приложении к данному описанию данной лабораторной работы.

3.3.3. Составьте программу для расчета соотношения компонент векторов поляризаций упругих волн для заданных значений фазовых скоростей, используя макет "Mathcad" для углов вхождения упругой волны в кристалл, изменяющегося в диапазоне $\theta = (0 \div \pi)$ с шагом 0.1 радиана.

3.3.4. Используя составленную программу, проведите табуляцию компонент векторов поляризации упругих волн в кристалле LiNbO_3 . Результаты расчета представьте в виде графических зависимостей $p_i(\theta)$ для всех трех упругих волн. Объясните полученные зависимости исходя из симметричных соображений, а также из общих закономерностей распространения упругих волн в анизотропных кристаллах.

3.3.5. Проведите компьютерный эксперимент по влиянию пьезоэлектрического эффекта на компоненты векторов поляризации упругих волн. Для этого проведите расчет зависимостей $p_i(\theta)$ для значений $e_{mij} = 0$. Сравните результаты расчета с пьезоэффектов и без него. Объясните полученный результат.

3.3.6. Составьте отчет о проделанной лабораторной работе.

3.4. Схема расчета фазовых скоростей упругих волн в кристаллах

3.4.1. Для определения компонент вектора упругого смещения $\vec{p}^\alpha \left(p_1^\alpha \ p_2^\alpha \ p_3^\alpha \right)$, где $\alpha = 1, 2, 3$, каждой акустической волны (собственного вектора, соответствующему данному собственному значению ρv_α^2) в уравнение Кристоффеля подставить выбранное значение фазовой скорости значения v_α - одно из трех собственных значений, в систему (25)

$$\begin{cases} (\Pi_{11} - \rho v^2) \cdot p_1^\alpha + \Pi_{12} \cdot p_2^\alpha + \Pi_{13} \cdot p_3^\alpha = 0 \\ \Pi_{21} \cdot p_1^\alpha + (\Pi_{22} - \rho v^2) \cdot p_2^\alpha + \Pi_{23} \cdot p_3^\alpha = 0, \\ \Pi_{31} \cdot p_1^\alpha + \Pi_{32} \cdot p_2^\alpha + (\Pi_{33} - \rho v^2) \cdot p_3^\alpha = 0 \end{cases} \quad (27)$$

дополнив его условием нормировки вектора смещения:

$$(p_1^\alpha)^2 + (p_2^\alpha)^2 + (p_3^\alpha)^2 = 1.$$

При вычислении следует помнить, что в системе (27) необходимо использовать только два уравнения.

4. ТРЕБОВАНИЯ К СОДЕРЖАНИЮ И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА

4.1. Отчет по лабораторной работе в обязательном порядке должен содержать следующие разделы:

- цель лабораторной работы;
- изложение теоретической части работы;
- описание расчетной части лабораторной работы;
- конкретные данные на выполнение лабораторной работы (полученные аналитические соотношения, предварительные выводы и т.д.);
- полученные расчетные результаты в виде графиков зависимостей фазовых скоростей волн и их векторов поляризаций,
- объяснение полученных результатов на основе теоретических положений, симметрии кристалла.

4.2. Отчет должен быть набран в редакторе Word и представлен в скрепленном виде. Схемы и графики выполнены в графическом редакторе и вставлены в текст отчета. Рекомендуемые параметры для набора текста: шрифт Arial – 12, поля со всех сторон по 2 см, одиночный интервал между строк.

4.3. В случае выполнения работы несколькими студентами в конце отчета должно быть указано конкретное участие каждого в выполнении работы.

4.4. В соответствии с рейтинговой системой качество выполнения лабораторной работы и оформления отчета оценивается в баллах, которые суммируются с баллами по контрольным работам.

5. ЛИТЕРАТУРА

1. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М: Наука, 1979. - 640 с.
2. Най Дж. Физические свойства кристаллов. - М.: Мир, - 1967. - 388с.
3. Давыдов В.Н. Материалы электронной техники и методы их анализа. Томск, ТМЦ ДО, 1999, - 135 с.
4. Задорин А.С., Шандаров С.М., Шарангович С.Н. Акустические и акустооптические свойства монокристаллов. - Томск: Изд-во ТГУ, 1987.- 152 с.
5. Элементы электронной техники. Часть 2 «Физические свойства кристаллов»: Учебное пособие для студентов, обучающихся по очной форме направления подготовки 210100.62 / Давыдов В. Н. - 2013. 94 с.: Научно-образовательный портал ТУСУР, <https://edu.tusur.ru/publications/3719>
6. Учебное пособие «Материалы электронной техники»: Для направления подготовки 210100.62 «Электроника и наноэлектроника». Профиль: «Промышленная электроника» / Легостаев Н. С. - 2014. 239 с.: Научно-образовательный портал ТУСУР, <https://edu.tusur.ru/publications/4291>
7. Сорокин, В.С. Материалы и элементы электронной техники. Проводники, полупроводники, диэлектрики [Электронный ресурс] : учебник / В.С. Сорокин, Б.Л. Антипов, Н.П. Лазарева. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2015. — 448 с. : <https://e.lanbook.com/book/67462>
8. Сорокин, В.С. Материалы и элементы электронной техники. Активные диэлектрики, магнитные материалы, элементы электронной техники [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.С. Сорокин, Б.Л. Антипов, Н.П. Лазарева. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2016. — 384 с. : В другом месте, <https://e.lanbook.com/book/71735>

Материальные константы кристаллов LiNbO3

1. Упругие постоянные

$$\|C_{mn}\| = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ C_{41} & C_{42} & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & C_{56} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2. \quad \rho = 4700 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$$

где имеют место равенства:

$$C_{21} = C_{12}; C_{31} = C_{13}; C_{55} = C_{44}; C_{24} = -C_{14}; C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2; C_{22} = C_{11}; C_{32} = C_{13};$$

$$C_{56} = C_{14}; C_{42} = -C_{14}; C_{23} = C_{13}; C_{41} = C_{14}; C_{65} = C_{14} ,$$

причём:

$$C_{11} = 2.03; C_{13} = 0.75; C_{14} = 0.09; C_{33} = 2.45; C_{12} = 0.53; C_{44} = 0.6; C_{66} = 0.75 .$$

2. Пьезоэлектрические модули

$$\|e_{m\alpha}\| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & 0 & e_{24} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ Кл/м}^2$$

где имеют место следующие равенства:

$$e_{16} = -e_{22}; \quad e_{32} = e_{31}; \quad e_{31} = 0.2; \quad e_{21} = e_{22}; \quad e_{15} = 3.669; \quad e_{33} = 1.301$$

$$e_{24} = e_{15}; \quad e_{22} = 2.502 .$$

3. Диэлектрические постоянные

$$\|\chi_{mn}^{\varepsilon}\| = \begin{pmatrix} \chi_{11}^{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_2^{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_3^{\varepsilon} \end{pmatrix} \cdot 10^{-10}, \text{ Ф/м.}$$

$$\chi_{11}^{\varepsilon} = \chi_{22}^{\varepsilon};$$

$$\chi_{11}^{\varepsilon} = 3.894;$$

$$\chi_{33}^{\varepsilon} = 2.567.$$