Физика твердого тела, 2014, том 56, вып. 2

10,13

Отражение поверхностных акустических волн в объеме гексагонального монокристалла

© Ю.Н. Гандурин, В.В. Косачёв

Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
Москва, Россия

E-mail: ygandourin@mail.ru

(Поступила в Редакцию 24 июня 2013 г.)

Показано, что в некоторых гексагональных кристаллах поверхностные акустические волны (ПАВ) могут состоять не только из волн, уходящих от поверхности вглубь кристалла, но также и отраженных волн, то есть приходящих из глубины бесконечного монокристалла. Уходящая и отраженная волны экспоненциально затухают при удалении от поверхности. Найдено, что отраженная волна может существовать, если скорость ее распространения меньше критического значения, которое существует не для всех кристаллов. Численный счет показал, в каких реальных гексагональных кристаллах отраженная волна может существовать. Получены значения критической скорости для ряда гексагональных кристаллов.

1. Введение

При распространении акустических волн в кристаллах могут наблюдаться явления, связанные с анизотропией кристалла, не характерные для изотропных сред. Например [1], могут существовать запрещенные направления, вдоль которых волны в кубических кристаллах не распространяются. В данной работе исследуется возможность существования акустических волн отраженных не от какой-либо границы, а внутри полубесконечного свободного гексагонального кристалла. Так, в работе [2] при выводе функции Грина полубесконечного свободного гексагонального кристалла накладываются следующие условия на распространение ПАВ: волна должна экспоненциально затухать с глубиной и быть уходящей от поверхности. Когда эти условия одновременно выполнены быть не могут, это и есть условие существования отраженной волны. В настоящей работе показано, что удовлетворить обоим условиям одновременно в общем случае нельзя. В тех случаях, когда этого нельзя сделать, необходимо оставить только условие экспоненциального затухания.

2. Функция Грина полубесконечного гексагонального кристалла

Функция Грина получена в работе [2]. Приведем вкратце результат. В [2] рассматривается полубесконечный упругий гексагональный кристалл, граничащий с вакуумом. Ось симметрии шестого порядка направлена вдоль оси Z (z — срез). Кристалл занимает верхнюю полуплоскость $x_3 > 0$. Зависимость от времени поля смещения $u_\alpha(\mathbf{x})$ считается гармонической

$$u_\alpha(\mathbf{x}, t) = u_\alpha(\mathbf{x}) \exp(-i\omega t). \tag{1}$$

Уравнение движения для такой задачи приводится к виду

$$L_{\alpha\mu} u_\mu = 0, \tag{2}$$

где

$$L_{\alpha\mu} = \delta_{\alpha\mu}\omega^2 + \frac{1}{\rho}\,\delta(x_3)\sum_\nu C_{\alpha3\mu\nu}\,\frac{\partial}{\partial x_\nu} + \frac{1}{\rho}\sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu}\,\frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu}, \tag{3}$$

$C_{\alpha\beta\mu\nu}$ — коэффициенты тензора модулей упругости, ρ — плотность массы. Граничные условия для (2)

$$\frac{1}{\rho}\sum_{\mu\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu}\left(\frac{\partial u_\mu(\mathbf{x})}{\partial x_\nu}\right)_{x_3=0} = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3. \tag{4}$$

Далее в [2] ищется функция Грина, удовлетворяющая уравнению

$$L_{\alpha\mu} U_{\mu\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \delta_{\alpha\eta}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \tag{5}$$

На функцию Грина $U_{\mu\eta}$ накладываются следующие граничные условия: при $x_3 \to +\infty$ волна должна быть уходящей вглубь кристалла и должна экспоненциально затухать.

Функция $U_{\mu\eta}$ ищется в виде Фурье образа

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \omega) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \exp\big(i\mathbf{k}(\mathbf{x}_\parallel - \mathbf{x}'_\parallel)\big) d_{\alpha\beta}\big(\mathbf{k}\omega | x_3 x'_3\big), \tag{6}$$

где $\mathbf{x}_\parallel = (x_1, x_2, 0)$, $\mathbf{k} = (k_1, k_2, 0)$. Вводя преобразование

$$d_{\alpha\beta}(\mathbf{k}\omega | x_3 x'_3) = \sum_{\mu\nu} S_{\mu\alpha}(\mathbf{k}) S_{\nu\beta}(\mathbf{k}) g_{\mu\nu}(k\omega | x_3 x'_3) \tag{7}$$

получается следующий результат. Имеется пять отличных от нуля функций g_{xx}, g_{zx}, g_{xz}, g_{zz} и g_{yy}. Функции g_{xx}, g_{zx}, g_{xz}, g_{zz} зависят от x_3 и x'_3 посредством линейной комбинации функций:

$$\exp\big(-\alpha_1(x_3 + x'_3)\big),\ \exp\big(-\alpha_2(x_3 + x'_3)\big),$$

$$\exp\big(-\alpha_1 x_3 - \alpha_2 x'_3)\big),\ \exp\big(-\alpha_2(x_3 - \alpha_1 x'_3)\big),$$

$$\exp\big(-\alpha_1 |x_3 - x'_3|\big),\ \exp\big(-\alpha_2(x_3 - x'_3|\big), \tag{8}$$

а g_{yy} — зависит от x_3 и x_3' посредством линейной комбинации

$$\exp\left(-\alpha_t(x_3 + x_3')\right), \ \exp\left(-\alpha_t|x_3 - x_3'|\right), \tag{9}$$

где α_1, α_2 и α_t — комплексные функции, зависящие от коэффициентов тензора модулей упругости, k, ρ и ω. Исходя из требования, что при $x_3 \to +\infty$ волна должна экспоненциально затухать и быть уходящей, на реальную и мнимую части α_1, α_2 и α_t накладываются условия

$$\operatorname{Re}\alpha_{1,2,t} > 0, \tag{10}$$

$$\operatorname{Im}\alpha_{1,2,t} < 0. \tag{11}$$

3. Отражение

Рассмотрим подробнее условия (10) и (11). Функция α_t может быть либо вещественной, либо мнимой. При этом α_1 и α_2 имеют вид

$$\alpha_1^2 = \frac{1}{2}\left(x + \left(x^2 - 4y\right)^{1/2}\right),$$

$$\alpha_1^2 = \frac{1}{2}\left(x - \left(x^2 - 4y\right)^{1/2}\right), \tag{12}$$

где x и y — вещественные функции. Из (12) следует, что условия (10)–(11) могут быть выполнены только в том случае, если для любых значений k и ω

$$x^2 - 4y \geq 0. \tag{13}$$

Неравенство (13) преобразуется к виду

$$\left(\left(a - 2\frac{c_{13}}{c_{33}}\right)^2 - 4\frac{c_{11}}{c_{33}}\right)z^2 - 2z\left(\left(a - 2\frac{c_{13}}{c_{33}}\right)\left(1 + \frac{c_{44}}{c_{33}}\right) - 2\frac{c_{11}}{c_{33}}\left(1 + \frac{c_{44}}{c_{11}}\right)\right) + \left(1 - \frac{c_{44}}{c_{33}}\right)^2 \geq 0, \tag{14}$$

где c_{ij} — коэффициенты тензора модулей упругости,

$$a = \frac{c_{11}c_{33} - c_{13}^2}{c_{33}c_{44}}, \quad z = \frac{c_{44}k^2}{\rho\omega^2}. \tag{15}$$

Левая часть в (14) обращается в нуль в точках

$$z_{1,2} = \frac{\left(a - 2\frac{c_{13}}{c_{33}}\right)\left(1 + \frac{c_{44}}{c_{33}}\right) - 2\frac{c_{11}}{c_{33}}\left(1 + \frac{c_{44}}{c_{11}}\right) \pm 2\frac{c_{44}}{c_{33}}\left(1 + \frac{c_{13}}{c_{44}}\right)\sqrt{1 + \frac{c_{11} + 2c_{13}}{c_{33}} - a}}{\left(a - 2\frac{c_{13}}{c_{33}}\right)^2 - 4\frac{c_{11}}{c_{33}}}. \tag{16}$$

Из (14) и (16) следует что выполнение условий (10)–(11) эквивалентно следующим условиям

$$\begin{cases} \left(a - 2\frac{c_{13}}{c_{33}}\right)^2 - 4\frac{c_{11}}{c_{33}} \geq 0 \\ 1 + \frac{c_{11} + 2c_{13}}{c_{33}} - a \leq 0 \end{cases}. \tag{17}$$

Если условия (17) нарушены, то условие (11) не может быть выполнено и, следовательно, должна существовать волна, приходящая из глубины кристалла, но экспоненциально затухающая с увеличением глубины. Это похоже на отражение света в тумане.

Так как отраженная волна существует в тонком приповерхностном слое, то она может оказывать существенное влияние на распространение ПАВ, которые будут значительно более чувствительны ко всем поверхностным неоднородностям или шероховатости.

Отметим, что для изотропной среды условия (17) выполнены всегда, так как левая часть (13) представляет собой полный квадрат. Для изотропной среды вид коэффициентов c_{ij} является частным случаем гексагонального кристалла.

4. Численный анализ

Проверка условий (17) проводилась с использованием данных, приведенных в работе [3], в которой собраны характеристики различных кристаллов. Численный расчет показал, что среди приведенных в [3] гексагональных кристаллов условия (17) выполнены для: Be 293°C, CdS 293°C, Co 298°C, Ice 257°C, Ice 248°C, Ice 263°C, Ice 268°C, Mg 0°C, SiO_2 873°C, SiO_2 873°C (другой источник), ZnO 293°C, Y 4°C, Y 57°C, Y 200°C, Y 300°C, Y 400°C. Для остальных гексагональных кристаллов, приведенных в [3], условия (17) не выполняются, их перечень приведен в таблице. Отметим, что учет погрешности в параметрах гексагональных кристаллов приводит к тому, что выполнение или невыполнение

Максимальные скорости отраженной волны гексагональных кристаллов в сравнении со скоростями ПАВ

Гексагональный кристалл	T, °C	$v_{\max}$, km/sec	v_{SH}, km/sec	v_{R}, km/sec
$BaTiO_3$	293	2.404	2.763	2.805
Be	0	9.088	8.559	8.167
Be	100	9.093	8.556	8.166
Be	200	9.102	8.532	8.144
Be	300	9.083	8.477	8.091
$CaBaTiO_3$	293	2.295	2.859	2.647
Cd	0	1.282	2.272	1.556
Cd	80	1.259	2.249	1.531
Cd	200	1.292	2.169	1.474
Cd	300	1.275	2.077	1.416
Zn	4	2.521	3.150	2.199
Zn	77	2.488	3.131	2.171
Zn	200	2.402	3.062	2.102
Zn	295	2.327	2.987	2.043
Zn	400	2.236	2.901	1.974
Zn	500	2.137	2.794	1.891
Zn	600	2.027	2.672	1.802

Примечание. $v_{\max}$ — максимальная скорость отраженной волны, v_{SH} — скорость сдвиговой ПАВ, v_{R} — скорость Рэлея.

условий (17) лежит далеко за пределами погрешности выражений (17) для всех кристаллов. Численный расчет также показал, что для всех гексагональных кристаллов из [3] оба условия в (17) выполняются или не выполняются одновременно. Как следует из условия (14), отраженная волна существует не всегда, а лишь в той области, где нарушается это условие. Так как коэффициент при z^2 в левой части (14) отрицателен для кристаллов из таблицы, а при $z = 0$ выражение положительно, то отраженная волна существует в области

$$z > z_2, \tag{18}$$

где z_2 — положительное число, определяемое выражением (16) с нижним знаком. Из (15) и (18) следует

$$\frac{\omega}{k} < v_{\max}, \tag{19}$$

где

$$v_{\max} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho z_2}}. \tag{20}$$

Условие (19) определяет область, в которой существует отраженная волна. Значения $v_{\max}$ приведены в таблице. В таблице также приведены значения скоростей (ПАВ) на плоской поверхности z — среза гексагонального кристалла — волн Рэлея v_{R} и волн сдвиговой поляризации v_{SH}. Аналитические выражения для v_{R} и v_{SH} приведены, в частности, в [4]. Отметим, что ПАВ сдвиговой поляризации не могут существовать на плоской поверхности гексагонального кристалла (z — срез) и возникают либо за счет каких-либо поверхностных неоднородностей, либо за счет шероховатости поверхности.

Анализ таблицы показывает, что в Zn отраженной волной может быть волна Рэлея, а для Be это может быть волна как Рэлея, так и сдвиговой поляризации. Также на основе работы [3] следует, что у Be при температуре 293°C не существует отраженной волны, а при температурах ниже и выше она существует.

5. Заключение

В работе проведен аналитический и численный анализ условий, накладываемых на функцию Грина в [2]. Функция Грина в работе [2] получена для z-среза полубесконечного гексагонального кристалла, граничащего с вакуумом. Считается, что по поверхности распространяется поверхностная акустическая волна (ПАВ).

Получено, что в поверхностном слое z-среза гексагонального кристалла помимо уходящей от поверхности волны может существовать также и отраженная волна, экспоненциально затухающая при удалении от поверхности. При этом отражение происходит внутри объема однородного монокристалла, и отраженная волна распространяется к поверхности, а не от нее. Получены условия существования отраженной волны, из которых следует, что поверхностная волна может иметь отражение в том случае если ее скорость распространения меньше некоторого критического значения, зависящего только от коэффициентов тензора модулей упругости кристалла. Такая критическая скорость существует не для всех кристаллов. Численный анализ показал, что существуют гексагональные кристаллы, имеющие эффект „отражение“; найдены критические значения скорости ПАВ для таких кристаллов. Примерно треть исследованных кристаллов обладает отражением, результаты приведены в таблице.

Так как рассматриваемый эффект отражения проявляется в тонком поверхностном слое, он может оказывать существенное влияние на распространение ПАВ, которые в этом случае будут заметно более чувствительны ко всем поверхностным неоднородностям или шероховатости.

Список литературы

[1] А.В. Капцов, С.В. Кузнецов. Рэлеевские волны в анизотропных средах. Некоторые аналитические решения для кубических кристаллов. Институт проблем механики РАН. Препринт № 623, М. (1998). 25 с.

[2] L. Dobrzynski, A.A. Maradudin. Phys. Rev. B **14**, *6*, 2200 (1976); Erratum. Phys. Rev. B **15**, *4*, 2432 (1977).

[3] O.L. Anderson. Phis. Acoust. B **3**, 80 (1965).

[4] В.В. Косачев, Ю.Н. Гандурин, С.Е. Муравьёв. ФТТ **54**, *10*, 1983 (2012)