$$\Delta E_n = \pm \sqrt{\lambda_n^2 + \varepsilon_n^2}, \qquad (28)$$

где введены следующие обозначения:

$$\lambda_{n} = \frac{3c\hbar}{2} T_{(3)} \frac{mc^{2}}{E_{n}\Pi_{n}} \sqrt{\Pi_{n}^{2} - P_{n}^{2}} , \qquad (29)$$

$$\varepsilon_{n} = \frac{3c\hbar}{2} \left( \frac{cT_{(4)}\Pi_{n}}{E_{n}} + \frac{T_{(3)}P_{z}}{\Pi_{n}} \right), \qquad (30)$$

$$\Pi_{n} = \sqrt{P_{z}^{2} + 4m\hbar\Omega\pi} \quad . \tag{31}$$

В наиболее интересном с практической точки зрения случае Р, = 0 соотношения (29) и (30) существенно упрощаются и выражение (28) для  $\Delta E_n$  принимает вид:

$$\Delta E_{n} = \pm \frac{3c\hbar mc^{2}}{2E_{n}} \sqrt{T^{2}}_{(3)} + \frac{4\Omega\hbar n}{mc^{2}} T^{2}_{(4)}.$$
(32)

Заметим, что в нерелятивистском пределе, в котором для E<sup>0</sup> справедливо выражение  $E_n^0 \approx mc^2 + 2\Omega\hbar n$ , при выполнении условия  $|T_{(4)}| \leq |T_{(3)}|$ величина расшепления не зависит (!) от напряженности магнитного поля (от константы  $\Omega$ ):

$$\Delta E_n \approx \pm \frac{3c\hbar}{2} T_{(3)}$$

Данное обстоятельство, как нам представляется, может оказаться решающим при попытке экспериментального обнаружения поля кручения.

1. Пономарев В. Н., Барвинский А. О., Обухов В. Н. Геометродинамические методы и калибровочный подход к теории гравитационных взаимодействий. М., 1985.

действий. М., 1985. 2. H e h ł F. M. et al. // Rev. Mod. Phys. 1976. V. 48 № 3. P. 393. 3. Y a s s k i п P. B. // Phys. Rev. 1980. V. D 21. P. 2081. 4. Пронин П. И. // Экспериментальные тесты тсории гравитации: Сб. ст. М., 1989. С. 146. 5. Багров В. Г., Бухбиндер И. Л., Шапиро И. Л. // Известия вузов. Физика. 1992. № 3. С. 5. 6. Филд Дж., Пикасо Э., Комбли Ф. // УФН. 1979. Т. 127. Вып. 4. С 553

 С. 553.
 Горбацевич А. К. Квантовая механика в общей теории относительности. Мн., 1985.

8. A u d r e t s c h J. // Phys. Rev. 1981. V. D24. P. 1470. 9. Горбацевич А. К. // Гравитация и электромагнетизм. Сб. ст. Мн., 1988. C. 73.

10. Мицквич Н. В., Ефремов А. П., Нестеров А. И. Динамика полей в общей теории относительности. М., 1985.

Поступила в редакцию 15.05.95.

## УДК 534.213

## **Α. Η. ΦΥΡC**

## ПРИМЕНЕНИЕ ФЕДОРОВСКОЙ ПРОЦЕДУРЫ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В КРИСТАЛЛОАКУСТИКЕ

Approximate solutions of Cristoffel equation for the cubic crystals on the basis of the procedure proposed by F. I. Fedorov are obtained and evaluation of their accuracy is carried out. The solutions yielded by different approximate methods are compared. It is shown that the accuracy of the obtained solutions does not practically depend on the cubic crystal anisotrope.

Основным уравнением, описывающим распространение объемных упругих волн в кристаллах, является уравнение Кристоффеля [1]

$$\left(\Lambda^{n} - v^{2}\right) = 0, \tag{1}$$

где  $\Lambda^{n} = (\lambda_{iklm} n_{k} n_{l})$  — тензор Грина — Кристоффеля, n, v и u — фазовая

нормаль, скорость и поляризация объемной волны соответственно. В (1)  $v^2 = v^2 1$ , где  $1 = (\delta_{ab})$  — единичный тензор.

Для нахождения фазовых скоростей и поляризаций изонормальных волн при заданном направлении нормали  $n (n^2 = 1)$  необходимо решить характеристическое уравнение

$$|\Lambda^{n} - v^{2}| = 0, \qquad (2)$$

кубическое относительно  $v^2(|\alpha|)$  обозначает детерминант тензора  $\alpha$ ). Непосредственное применение формул Кардано к решению уравнения (2) приводит к громоздким вычислениям (см., напр., [12]). Поскольку значения модулей упругости  $\lambda_{klm}$  известны с невысокой точностью (~10<sup>-3</sup>), то целесообразно использовать приближенные методы решения уравнения (1). В работах Ф. И. Федорова [1-10] предложен ряд итерационных процедур решения основного уравнения (1). В частности, в [1-5] развит в ковариантной форме эффективный приближенный метод решения основной задачи теории упругих волн в кристаллах, основанный на нахождении параметров условной изотропной среды, наименее отличающейся от данного кристалла. В [1, 6, 7] предложен аналогичный метод сравнения параметров кристалла с ближайшей к нему по упругим свойствам поперечно-изотропной средой. Работы [8, 101 посвящены разработке методов приближенного решения уравнения  $\alpha \mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}$  и применению таких решений в теории упругих волн [9]. В частности, в работе [9] используется итерационная процелура применительно к вектору поляризации и объемной волны. Как правило, сходимость итерационных метолов [1-10] достаточно высока, и уже первое приближение является удовлетворительным для большинства кристаллов.

В работе [11] получены сравнительно простые (не содержащие громоздких радикалов) приближенные формулы для нахождения корней кубического уравнения с произвольными коэффициентами. Целью настоящей работы является применение общих результатов, полученных в [11], к решению уравнения (2) для кристаллов кубической сингонии, и оценка их точности.

Для кубических кристаллов тензор Грина—Кристоффеля имеет вид [1]

$$\Lambda^{\mathbf{n}} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{c}_3 \nu, \tag{3}$$

где

 $c_1 = \lambda_{44}, c_2 = \lambda_{12} + \lambda_{44}, c_3 = \lambda_{11} - \lambda_{12} - 2\lambda_{44}, \nu = diag(n_1^2, n_2^2, n_3^2).$ 

Введем тензор

$$\alpha = \mathbf{k}\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{v}, \quad \mathbf{k} = \mathbf{c}_2/\mathbf{c}_3, \tag{4}$$

собственные векторы которого совпадают с собственными векторами тензора  $\Lambda^n$ , а собственные значения  $v^2$  тензора  $\Lambda^n$  и собственные значения  $\lambda$  тензора  $\alpha$  связаны соотношением  $v^2 = c_1 + c_3 \lambda$ . Характеристическое уравнение для тензора  $\alpha$  принимает вид [9]

$$|\lambda - \alpha| = 0$$

или

$$\lambda^{3} - (1+k)\lambda^{2} + (1+2k)v_{1}\lambda - (1+3k)|v| = 0,$$
(5)

при этом

$$\overline{\nu}_{t} = \frac{1}{2} (1 - N_{1}), \quad |\nu| = n_{1}^{2} n_{2}^{2} n_{3}^{2}, \quad (6)$$

$$N_1 = n_1^4 + n_2^4 + n_3^4.$$

В (6) *v* — взаимный (присоединенный) к v тензор, а *v*<sub>t</sub> — его след. Введя новую переменную

$$z = \lambda - \frac{1}{3} \left( 1 + k \right), \qquad (7)$$

перейдем к неполному кубическому уравнению

$$z^{3} - az + b = 0,$$
 (8)

где

$$a = \frac{1}{3} (1+k)^{2} - (1+2k)\overline{v}_{t}, \qquad (9)$$
  
$$b = \frac{1}{3} (1+k) \left[ (1+2k)\overline{v}_{t} - \frac{2}{9} (1+k)^{2} \right] - (1+3k)|v|.$$

Коэффициент а неотрицателен при любых значениях k и для любого направления нормали п. Действительно, N<sub>1max</sub> = 1, если нормаль п направлена вдоль оси симметрии 4-го порядка, и N<sub>1min</sub> = 1/3, если нормаль п направлена вдоль оси симметрии 3-го порядка. Соответственно,  $\overline{v}_{t \min} = 0$ и  $\overline{v}_{t \max} = 1/3$ . При 1 + 2k <0 положительность коэффициента а очевидна. При 1 + 2k>0

$$a \ge \frac{1}{3} (1+k)^{2} - (1+2k)\overline{v}_{1\max} = \frac{1}{3}k^{2} \ge 0.$$

Знак коэффициента b может быть любым в зависимости от значения к и направления нормали п.

Введя 
$$x = z/\sqrt{a}$$
, уравнение (8) можно преобразовать к виду  
 $x^3 - x + c = 0$ ,  $c = \frac{b}{a^{3/2}}$ . (10)

Уравнение (8), согласно [11], имеет следующее приближенное решение

$$z_0 = -(\eta_0 b/a \pm \xi_0 \sqrt{a}),$$
 (11)

где

$$\xi_0 = 1,00388, \quad \eta_0 = 0,40192,$$
 (12)

при этом в (11) знак «плюс» следует брать при b>0, знак «минус» — при b<0. Относительная погрешность решения (11) не превышает 3,89 $\cdot$ 10<sup>-3</sup>. Два других корня (8) можно найти с тем же порядком точности, решив квадратное уравнение

$$z^{2} + z_{0}z - b/z_{0} = 0.$$

Таким образом, согласно (7), (9), (11), (12), одно из собственных значений тензора Л<sup>n</sup> (3) определяется формулами

$$\begin{cases} v_0^2 = c_1 + c_3 \lambda_0, \\ \lambda_0 = \frac{1}{3} (1+k) - (\eta_0 b/a \pm \xi_0 \sqrt{a}), \\ \xi_0 = 1,00388, \ \eta_0 = 0,40192, \\ a = \frac{1}{3} (1+k)^2 - (1+2k) \overline{\nu}_t, \\ b = \frac{1}{3} (1+k) \left[ (1+2k) \overline{\nu}_t - \frac{2}{9} (1+k)^2 \right] - (1+3k) |\nu|. \end{cases}$$

$$(13)$$

Приближенное значение собственного вектора  $u_0$ , соответствующего собственному значению  $v_0^2$  (13), находится согласно [1]

$$\mathbf{u}_0 = \overline{(\alpha - \lambda_0)} \mathbf{p}, \tag{14}$$

где **р** — произвольный вектор такой, что  $(\alpha - \lambda_0)$  р≠0. Положив **р** = **n**, из (4) и (14) получим

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{v}\mathbf{n} + \lambda_0 \left[ \mathbf{v}\mathbf{n} + (\lambda_0 - 1)\mathbf{n} \right]. \tag{15}$$

Оценим точность выражений (13). Так как тензор  $\Lambda^n$  симметричен и вещественен, то уравнения (5), (8), (10) имеют три вещественных корня, что соответствует неприводимому слечаю, для которого

$$c^2 = b^2 / a^3 \le 4/27, \tag{16}$$

причем при

$$c = \pm 2/\left(3\sqrt{3}\right) \tag{17}$$

два корня кубического уравнения (10) совпадают. Значения вырожденных корней равны  $\pm 1/\sqrt{3}$ , третьего невырожденного —  $\mp 2/\sqrt{3}$ . При выполнении условия (17) выражение (11) определяет приближенное значение именно невырожденного корня, причем с максимально возможной ошибкой [11]. Таким образом, при совпадении фазовых скоростей двух изонормальных квазипоперечных волн (т. е. когда нормаль п направлена вдоль акустической оси) формулы (13) определяют скорость квазипродольной волны с максимальной погрешностью. Можно показать, что и для других направлений нормали п выражения (13) позволяют найти скорость именно квазипродольной волны. Акустические оси являются наихудшими направлениями с точки зрения точности формул (13).

В кубических кристаллах акустическими осями являются оси симметрии 4-го и 3-го порядка [1]. Выбрав в первом случае вектор нормали  $\mathbf{n}_1 = (0,0,1)$ , во втором —  $\mathbf{n}_2 = (1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3})$ , согласно (13) и (15), получим

$$v_0^{(1)^2} = c_1 + 1,00224c_3 (1 + k),$$
  
 $u_0^{(1)} = n_1$  (18)

И

$$v_0^{(2)^2} = c_1 + c_3 (1,00224k + 1/3),$$
  
 $u_0^{(2)} = n_2.$  (19)

В обоих случаях формула (15) приводит к точным решениям для вектора поляризации, хотя фазовые скорости определяются приближенно. Точные решения для фазовых скоростей

 $v^{(1)^2} = c_1 + c_3 (1 + k),$  (20)

$$v^{(2)^{2}} = c_{1} + c_{3} (k + 1/3).$$
(21)

$$\delta^{(1)} = \frac{v^{(1)} - v_0^{(1)}}{v^{(1)}} = 0,00112 \frac{c_2 + c_3}{c_1 + c_2 + c_3},$$
(22)

$$\delta^{(2)} = \frac{v^{(2)} - v_0^{(2)}}{v_0^{(2)}} = 0,00112 \frac{c_2}{c_1 + c_2 + 1/3c_3}.$$
 (23)

Максимальная относительная погрешность определения фазовой скорости квазипродольной волны по формулам (13) составляет

$$\delta = \max\left(\delta^{(1)}, \delta^{(2)}\right). \tag{24}$$

Численные оценки для  $\delta^{(1)}$  (n = n<sub>1</sub>)и  $\delta^{(2)}$  (n = n<sub>2</sub>) в случае наиболее анизотропного натрия, меди со средней анизотропией, слабоанизотропного алюминия сведены в таблицу (строки 5, 6). Также определена относительная погрешность решений (13) для направления n<sup>2</sup> = (0,36718; 0,28175; 0,88645) (строка 7), являющимся наихудшим для точности метода теории возмущений [9]. В первом приближении теории возмущений скорость квазипродольной волны в кубических кристаллах [9, 10]

$$v_1^2 = c_1 + c_3 \lambda_1, \tag{25}$$

$$\lambda_1 = \lambda_0 + \frac{1}{\kappa} (\lambda_0 \rho - \sigma),$$

где

$$\begin{split} \lambda_0 &= k + N_1, \\ \kappa &= \lambda_0 \left( 2N_1 + k - 1 \right) + 3 \text{IvI}, \\ \sigma &= \text{IvI} \left( 3N_1 - 1 \right), \ \rho &= N_2 - N_1^2, \ N_2 = n_1^6 + n_2^6 + n_3^6. \end{split}$$

№ π/л	Константы, 10 <sup>11</sup> см <sup>2</sup> /с <sup>2</sup>	Na	Cu	Al	
1 2 3	c <sub>1</sub> c <sub>2</sub> c <sub>3</sub>	0,61 1,12 - 1,1	0,9067 2,292 - 1,245	1,056 3,326 - 0,374	
	Формула, направление	Относительные погрешности			
4 5 6 7	$\begin{array}{c}(25), n'\\(13), n_1\\(13), n_2\\(13), n'\end{array}$	$ \begin{array}{r} 8 \cdot 10^{-3} \\ 3,6 \cdot 10^{-5} \\ 9,2 \cdot 10^{-4} \\ 6,9 \cdot 10^{-4} \end{array} $	$9 \cdot 10^{-4} \\ 6,0 \cdot 10^{-4} \\ 9,2 \cdot 10^{-4} \\ 9,2 \cdot 10^{-4} \\ 9,2 \cdot 10^{-4}$	$ \begin{array}{c} 0\\ 8,2 \cdot 10^{-4}\\ 8,7 \cdot 10^{-4}\\ 8,4 \cdot 10^{-4} \end{array} $	

Соответствующие относительные погрешности приближенных решений (25) для направления п' также внесены в таблицу (строка 4).

Для всех кубических кристаллов, приведенных в таблице,  $\delta^{(2)} > \delta^{(1)}$  и, следовательно,  $\delta = \delta^{(2)}$ . Как и следовало ожидать, погрешность выражений (13) для направления п' не превышает максимальной относительной погрешности б.

Приближенные решения (13) основного уравнения кристаллоакустики, полученные в настоящей работе, содержат радикалы не выше второй степени и поэтому просты. Точность этих решений сравнима с точностью экспериментального определения упругих констант  $\lambda_{iklm}$  и практически не зависит от степени анизотропии рассматриваемого кубического кристалла. В то же время точность решений, полученных с использованием итерационных методов в более ранних работах Ф. И. Федорова [1-10], существенным образом зависит от степени анизотропии кристалла -с увелечением анизотропии точность решений уменьшается. Таким образом, формулы (13) целесообразно использовать для сильно анизотропных кристаллов. Разработанная Ф. И. Федоровым процедура приближенного решения уравнений [11] может быть легко обобщена для нахождения фазовых скоростей и поляризаций объемных волн в случае менее симметричных некубических кристаллов.

1. Федоров Ф. И. // Теория упругих волн в кристаллах. М., 1965. 2. Он же // Кристаллография. 1963. № 8. С. 213. 3. Он же // Там же. № 8. С. 398. 4. Он же // ДАН СССР. 1964. № 155. С. 792. 5. Быстрова Т. Г., Федоров Ф. И. // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук. 1965. № 1. С. 35. 6. Фелоров Ф. И. // НАЦ СССР. 1960. 140. С. 1960.

6. Федоров Ф. И. // ДАН СССР. 1963. 149. С. 1060. 7. Онже // Вестник МГУ. Сер. III. 1965. № 1. С. 9. 8. Онже // ДАН БССР. 1989. № 33. С. 873. 9. Федоров А. Ф., Федоров Ф. И. // Акуст. журн. 1992. № 38. C. 156.

10. Федоров Ф. И. // Весці АН БССР. Сер-фіз.-мат. навук. 1991. № 5. С. 35. 11. Он же // ДАН БССР. 1992. № 36. С. 497. 12. Еvегу А. G. // Phys. Rev. Lett. 1979. № 42. Р. 1065.

Поступила в редакцию 27.02.95.