



Title	水晶の弾性Compliance定数の数値計算
Author(s)	山形, 積治
Citation	北海道教育大学紀要. 第二部. A, 数学・物理学・化学・工学編, 21(2) : 51-57
Issue Date	1971-02
URL	http://s-ir.sap.hokkyodai.ac.jp/dspace/handle/123456789/5936
Rights	

水晶の弾性 *Compliance* 定数の数値計算

山 形 積 治

北海道教育大学旭川分校物理学教室

The Numerical Computation for Elartic Compliance Constant of Quartz Crystal

Sekiji YAMAGATA

Dpertment of Physics, Asahikawa Branch, Hokkaido University of Education

Summary

The elastic stiffness constants and compliance constants of many materials are well known experimentally.

Especially for the quartz crystals, these constants have been investigated by many experimenters. Generally stiffness constants can be expressed in terms of the compliance constants with the determinantal equation and converse holds good.

The author calculated numerically (with the electric computer) the compliance constants of quartz crystal from the experimental values of stiffness constants which have been reported by Voigt, Atanasoff, Mason, Anderson and Cady.

Consequently the author's calculated values derived from the Cady's data and the Anderson's data are very close to the values ($S_{11} = 1.269 \times 10^{-12}$, $S_{33} = 0.971 \times 10^{-12}$) measured by Perrier and de Mandort.

According to the author's calculation for the frequency of X-cut quartz bar the Anderson's values are better than the other's.

1. 序 論

弾性体の *stiffness* 定数, *compliance* 定数は各種の結晶について実測されている。特に水晶については実用性も大きいので *Voigt*, *Mason* ら多くの研究者によってくわしく測定されている¹⁾。一般にこれらの定数は双方とも互いに他のマトリックスの関係で示される。

従って *stiffness* 定数を測定して、それらより *compliance* 定数を計算することができる。通常このような方法で後者の定数は間接的に示される値である。しかしこれらの定数は主に 1940 年代に研究されたものが多く *compliance* 定数の計算は筆算かあるいは初期の計算機で行なわれたと思われるので、今日、電子計算機で行なうような精度は得られていないと予想されるので、検算の意味で大型電子計算機を用いて計算を行なってみた。その結果ある程度の修正が必要である定数も検出されたので報告する。

2. *stiffness* 定数・*compliance* 定数の定義

弾性体において応力 $X_x, Y_y, Z_z, Y_z, Z_x, X_y$ と歪 $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{yz}, e_{zx}, e_{xy}$ との間には一般に

$$\begin{pmatrix} X_x \\ Y_y \\ Z_z \\ Y_z \\ Z_x \\ X_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{pmatrix} \quad \dots\dots(1)$$

なる関係がある。ここで C_{ij} は *stiffness* 定数と呼ぶ。全く対称性のない結晶では 36 個の異った値が存在するが通常の結晶では幾通りかの対称要素をもっているので 36 個よりも少なくなる。(1) 式を $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{yz}, e_{zx}, e_{xy}$ について解けば

$$\begin{pmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_x \\ Y_y \\ Z_z \\ Y_z \\ Z_x \\ X_y \end{pmatrix} \quad \dots\dots(2)$$

となり S_{ij} は弾性 *compliance* 定数である。但し

$$S_{ij} = \frac{(-1)^{i+j} \Delta_{ij}^o}{\Delta^o} \quad \dots\dots(3)$$

なる関係より導かれる²⁾。但し (3) 式で Δ^o は (1) の C_{ij} の行列式の値であって Δ_{ij}^o は Δ^o の i 行 j 列をぬいた小行列式である。

これらの定数は 4 次のテンソルであるが便ぎ上添字の表示を簡単にするために

$$\left. \begin{array}{l} 1 = 11, \quad 2 = 22, \quad 3 = 33 \\ 4 = 23 = 32, \quad 5 = 13 = 31, \quad 6 = 21 = 12 \end{array} \right\} \quad \dots\dots(4)$$

なる書き換えによって 2 次の添字にしてある。

3. 水晶の *stiffness* 定数

水晶の結晶系は *trigonal system* に属し光軸 (z 軸) に対して 3 回の回転対称を有し、それと垂直な電気軸 (x 軸) について 2 回の回転対称を有する。従ってその対称要因によって (1) 式を整理すれば C_{ij} が全て存在するわけではなく *stiffness* のマトリックスは

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ C_{14} & -C_{14} & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & C_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{14} & \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12}) \end{pmatrix} \quad \dots\dots(5)$$

となることが知られている³⁾。(5) 式中の独立な定数 $C_{11}, C_{33}, C_{44}, C_{12}, C_{13}, C_{14}$ は実験により求められている。

それらの値を研究者毎に成表化したものが **Table 1** である。これらの値は後の S_{ij} の計算のデータとして用いる。

Table 1 Stiffness Constant of Quartz

References	C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{12}	C_{13}	C_{14}
Voigt* (Isothermal)	85.1	105.4	57.1	6.96	14.1	16.9
Voigt* (Adiabatic)	85.4	105.6	57.1	7.26	14.4	16.9
Atanasoff* (Adiabatic)	86.75	106.8	57.86	6.87	11.3	17.96
Nason 1643* (Adiabatic)	86.05	107.1	58.65	5.05	10.43	18.25
Anderson** (Adiabatic)	86.80	105.9	58.20	7.09	11.90	18.00
Cady* (Adiabatic)	87.5	107.9	57.3	7.62	15.1	17.2

Unit: $C_{ij} \times 10^{10}$ dyne cm^{-2}

* W. G. Cady: Piezoelectricity, VOL. One, p.135.

** W. P. Mason: Crystal Physics of Interaction Process, p. 67.

4. 水晶の compliance 定数

Table 2 Equation of S_{ij}

S_{ij}	Value of Determinant
S_{11}	$(C_{11}C_{33}C_{44} - C_{14}^2C_{33} - C_{13}^2C_{44})A/Q$
S_{12}, S_{21}	$(C_{13}^2C_{44} - C_{14}^2C_{33} - C_{12}C_{33}C_{44})A/Q$
S_{13}, S_{31}	$(C_{12}C_{13}C_{44} + 2C_{13}C_{14}^2 - C_{11}C_{13}C_{44})A/Q$
S_{14}, S_{41}	$(2C_{13}C_{14} - C_{11}C_{14}C_{33} - C_{12}C_{14}C_{33})A/Q$
S_{22}	$(C_{11}C_{33}C_{44} - C_{14}^2C_{33} - C_{13}^2C_{44})A/Q$
S_{22}, S_{32}	$(2C_{13}C_{14}^2 - C_{11}C_{13}C_{44} + C_{12}C_{13}C_{44})A/Q$
S_{24}, S_{42}	$(C_{12}C_{14}C_{33} - 2C_{13}^2C_{14} + C_{11}C_{14}C_{33})A/Q$
S_{25}, S_{52}	0
S_{26}, S_{62}	0
S_{33}	$(C_{11}^2C_{44} - 2C_{12}C_{14}^2 - 2C_{11}C_{14}^2 - C_{12}^2C_{44})A/Q$
S_{34}, S_{43}	0
S_{44}	$(C_{11}^2C_{33} + 2C_{12}C_{13}^2 - 2C_{11}C_{13}^2 - C_{12}^2C_{33})A/Q$
S_{55}	P/A
S_{56}	C_{14}/A
S_{66}	C_{44}/A

where $P = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$ $A = C_{44}P - C_{14}^2$
 $Q = (C_{33}T + 2C_{13}R)A$
 $T = (C_{11}^2C_{44} - 2C_{12}C_{14}^2 - 2C_{11}C_{14}^2 - C_{12}^2C_{44})$
 $R = (C_{12}C_{13}C_{44} + 2C_{13}C_{14}^2 - C_{11}C_{13}C_{44})$

(3) 式に従って S_{ij} を C_{ij} を用いて表わせば **Table 2** のようになる。(3) 式は対称行列であるから $S_{ij} = S_{ji}$ なる関係が存在する。但しこの表において

$$\left. \begin{aligned} P &= \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \\ A &= C_{44}P - C_{14}^2 \\ Q &= (C_{33}T + 2C_{13}R)A \\ T &= C_{11}^2C_{44} - 2C_{12}C_{14}^2 - 2C_{11}C_{14}^2 - C_{12}^2C_{44} \\ R &= C_{12}C_{13}C_{44} + 2C_{13}C_{14}^2 - C_{11}C_{13}C_{44} \end{aligned} \right\} \dots(6)$$

である。

5. S_{ij} の数値計算

S_{ij} の計算は **Table 2** で示される式に **Table 1** の6個の独立な値を代入して行なわれる。計算には北海道大学大型計算センターの **FACOM 230-60** を用いた。その結果を **Table 3 a~e** に示す。表中で最上列の数字の列は順に $C_{11}, C_{33}, C_{44}, C_{12}, C_{13}, C_{14}$ を示し下部の S_{ij} マトリックスを計算する時

のデータとして用いた値である。更に 0.8750 E-12 とは 0.8750×10^{-12} を意味する。 **EXX, EYY** = e_{xx}, e_{yy} あるいは **XX, YY**, = X_x, Y_y である。計算機の出力として小文字英字を打ち出せないのこようにした。**Table 3 a** は **Voigt** の等温状況の基で測定した C_{ij} より求めた S_{ij} マトリックスである。**Table 3 b** は **Voigt** が断熱的に測定した C_{ij} より求めたものであり、水晶振動子の解析の場合、断熱弾性定数が非常に重要である。

Table 3 c は **Atanasoff, Hart** の断熱 C_{ij} を用いて、**Table 3 d** は **Mason** が1943年に断熱的に求めた C_{ij} を用いて、**Table 3 e** は **Anderson** が数表にまとめたものを **Mason** が文献中²⁾ に引用した値よりそれぞれ計算したものである。

Table 3 a From Voigt's Data (Isothermal at 0°C)

 C_{ij} 0.8510E 12 0.1054E 13 0.5710E 12 0.6960E 11 0.1410E 12 0.1690E 12

	XX	YY	ZZ	YZ	ZX	XY
EXX	0.1300E-11	-0.1675E-12	-0.1515E-12	-0.4344E-12		
EYY	-0.1675E-12	0.1300E-11	-0.1515E-12	0.4344E-12		
EZZ	-0.1515E-12	-0.1515E-12	0.9893E-12			
EYZ	-0.4344E-12	0.4344E-12		0.2008E-11		
EXZ					0.2008E-11	0.8688E-12
EXY					0.8688E-12	0.2935E-11

Table 3 b From Voigt's Data (Adiabatic at 0°C)

 C_{ij} 0.8540E 12 0.1056E 13 0.5710E 12 0.7260E 11 0.1440E 12 0.1690E 12

	XX	YY	ZZ	YZ	ZX	XY
EXX	0.1297E-11	-0.1703E-12	-0.1537E-12	-0.4344E-12		
EYY	-0.1703E-12	0.1297E-11	-0.1537E-12	0.4344E-12		
EZZ	-0.1537E-12	-0.1537E-12	0.9889E-12			
EYZ	-0.4344E-12	0.4344E-12		0.2008E-11		
EXZ					0.2008E-11	0.8688E-12
EXY					0.8688E-12	0.2935E-11

Table 3 c From Atanasoff and Hart's Data (Adiabatic at 35°C)

 C_{ij} 0.8675E 12 0.1068E 13 0.5786E 12 0.6870E 11 0.1130E 12 0.1796E 12

	XX	YY	ZZ	YZ	ZX	XY
EXX	0.1276E-11	-0.1794E-12	-0.1160E-12	-0.4516E-12		
EYY	-0.1794E-12	0.1276E-11	-0.1160E-12	0.4516E-12		
EZZ	-0.1160E-12	-0.1160E-12	0.9609E-12			
EYZ	-0.4516E-12	0.4516E-12		0.2009E-11		
EXZ					0.2009E-11	0.9633E-12
EXY					0.9033E-12	0.2910E-11

Compliance Matrix, unit: S_{ij} cm² dyne⁻¹where XX, EXX → X_x , e_{xx} : E12, E-12 → 10¹², 10⁻¹²

Table 3 d From Mason's Data (Adiabatic at 25°C)

C_{ij} 0.8605E 12 0.1071E 13 0.5865E 12 0.5050E 11 0.1045E 12 0.1825E 12

	XX	YY	ZZ	YZ	ZX	XY
EXX	0.1279E-11	-0.1565E-12	-0.1096E-12	-0.4468E-12		
EYY	-0.1565E-12	0.1279E-11	-0.1096E-12	0.4468E-12		
EZZ	-0.1096E-12	-0.1096E-12	0.9551E-12			
EYZ	-0.4468E-12	0.4468E-12		0.1983E-11		
EXZ					0.1983E-11	0.8936E-12
EXY					0.8936E-12	0.2872E-11

Table 3 e From Anderson's Data (Adiabatic at 30°C)

C_{ij} 0.8680E 12 0.1059E 13 0.5820E 12 0.7090E 11 0.1190E 12 0.1800E 12

	XX	YY	ZZ	YZ	ZX	XY
EXX	0.1277E-11	-0.1810E-12	-0.1232E-12	-0.4510E-12		
EYY	-0.1810E-12	0.1277E-11	-0.1232E-12	0.4510E-12		
EZZ	-0.1232E-12	-0.1232E-12	0.9720E-12			
EYZ	-0.4510E-12	0.4510E-12		0.1997E-11		
EXZ					0.1997E-11	0.9020E-12
EXY					0.9020E-12	0.2916E-11

Table 5 From Cady's Accepted Values (Adiabatic)

C_{ij} 0.8750E 12 0.1077E 13 0.5730E 12 0.7620E 11 0.1510E 12 0.1720E 12

	XX	YY	ZZ	YZ	ZX	XY
EXX	0.1269E-11	-0.1687E-12	-0.1543E-12	-0.4316E-12		
EYY	-0.1687E-12	0.1269E-11	-0.1543E-12	0.4316E-12		
EZZ	-0.1543E-12	-0.1543E-12	0.9718E-12			
EYZ	-0.4316E-12	0.4316E-12		0.2004E-11		
EXZ					0.2004E-11	0.8631E-12
EXY					0.8631E-12	0.2875E-11

Compliance Matrix, unit: S_{ij} cm² dyne⁻¹

where XX, EXX → X_x , e_{xx} : E12, E-12 → 10¹², 10⁻¹²

6. ま と め

Table 3 a~e より数値的に

$$\left. \begin{aligned} S_{11} = S_{22}, \quad S_{44} = S_{55}, \quad S_{13} = S_{23} \\ S_{14} = -S_{24} = \frac{S_{56}}{2}, \quad S_{66} = 2(S_{11} - S_{12}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(7)$$

なる関係が存在しこの事をマトリックス表示で示せば

$$\begin{pmatrix} e_{xxx} \\ e_{yyy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{13} & -S_{14} & 0 & 0 \\ S_{13} & S_{13} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ S_{14} & -S_{14} & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 2S_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2S_{14} & 2(S_{11} - S_{12}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_x \\ X_y \\ Z_z \\ Y_z \\ Z_x \\ X_y \end{pmatrix} \dots\dots\dots(7')$$

となり、この場合もやはり独立な定数は $S_{11}, S_{33}, S_{44}, S_{12}, S_{13}, S_{14}$ の 6 個のみとなる事が知られる。この事は古賀⁴⁾によって導かれている理論式とよく一致する。

更に上記の 6 個の S_{ij} を先に各実験者が示してある値と対応させてまとめたのが Table 4 である。この表で、上段の値は文献に与えられている値で、下段のものは著者の計算したものである。単位は全て表の値に 10^{-12} を乗ずる。

Table 4 Compliance Constant of Quartz

References	S_{11}	S_{33}	S_{44}	S_{12}	S_{13}	S_{14}
Voigt* (Isothermal)	1.298	0.990	2.005	-0.166	-0.152	-0.431
	1.300	0.9893	2.008	-0.1675	-0.1515	-0.4344
Voigt* (adiabatic)	1.295	0.989	2.005	-0.169	-0.154	-0.431
	1.297	0.9889	2.008	-0.1703	-0.1537	-0.4344
Atanasoff* (adiabatic)	1.276	0.9609	2.009	-0.1794	-0.1160	-0.4516
Mason 1943* (Adiabatic)	1.279	0.956	1.978	-0.1535	-0.110	-0.446
	1.279	0.9551	1.983	-0.1565	-0.1096	-0.4468
Anderson** (Adiabatic)	1.277	0.9720	1.997	-0.1810	-0.1232	-0.4510
Cady* (Adiabatic)	1.269	0.9718	2.004	-0.1687	-0.1543	-0.4316

Unit: $S_{ij} \times 10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ dyne}^{-1}$, Upper: eoperimental values
Lower: computed values

* W. G. Cady: Piezoelectricity, Vol. One, p. 135.

** W. P. Mason: Crystal Physics of Interaction Process, p. 67.

次元は $\text{cm}^2 \text{ dyne}^{-1}$ で C_{ij} の逆である。有効数字は 3 桁であるが計算値は 4 桁まで示し、3 桁目がどのような数であるか知れるようにした。

Table 4 で Mason が 1943 年に示した S_{ij} 中で S_{11}, S_{33}, S_{14} は水晶の薄いバーより直接実験的に求めたものであるが著者の計算したものとよく一致する。又 Anderson の求めた C_{ij} より算出した $S_{11} = 1.277 \times 10^{-12}$, $S_{33} = 0.9720 \times 10^{-12}$ は Perrier, de Mandrot が実測⁵⁾した $S_{11} = 1.269 \times 10^{-12}$, $S_{33} = 0.971 \times 10^{-12}$ の値と一致する。しかし Table 1 の C_{ij} の値も Table 4 の S_{ij} の値も各研究者によってかなり大きな相違を示す。これは測定時における温度の違もあろうが温度が 20°C か

ら 60°C に変化した場合これらの定数はわずか 2% 変化するのみであるので、この原因は水晶の物性的バラツキかあるいは実験的誤差であろうと考えられるが判断の手がかりがない。しかし我々がこれらの定数を用いる場合より妥当性の大きいものを使う必要がある。

Cady は彼の著書¹⁾の中で C_{11} , C_{33} , C_{44} , C_{12} , C_{13} , C_{14} はそれぞれ 87.5×10^{10} , 107.7×10^{10} , 57.3×10^{10} , $7.6(2) \times 10^{10}$, 15.1×10^{10} , 17.2×10^{10} なる M. E. White によって与えられている値が信頼度が高いと論じている。但しカッコ内は誤差の含まれている桁である。著者はこの C_{ij} を用いて S_{ij} マトリックスを計算した。その値は Table 5 である。 S_{11} , S_{33} 等は前述した Perrier, de Mandrot の実測値にもよく一致する。しかし著者の X cut 水晶における周波数の計算では Table 1, Table 4 の Anderson の値が適切であった⁶⁾。この値は O. L. Anderson "Physical Acoustics" (Warren P. Mason, ed.), Vol. III B, Chapter II. Academic Press, New York, 1967. にあるものを Mason が前述の著者の中に引用している値である。更に先に論じたように Perrier, de Mandrot の実測値との一致もよい。

どの値がより妥当であるかと言う結論は数多くの実験にまたれるものであって今後の研究が期待される。

それぞれの S_{ij} に対する修正は Table 3 a~e 及び Table 4 の上段と下段の数値を比較すればよい。

本研究は日本学術振興会の流動研究員として北海道大学工学部電気工学科で行なったものである。電気回路学講座の安田一次教授を始め各位の協力を得ました。

北海道教育大学旭川分校物理学教授沢田孝士教授には論文をまとめる上での助言をいただいた。最後に北海道大学大型計算センターの各位に感謝する。

文 献

- 1) W. G. Cady: Piezoelectricity, Vol. One (Dover Publication, INC., New York, 1964) pp. 116-199.
- 2) W. P. Mason: Crystal Physics of Interaction Process (Academic Press, New York, 1966) p. 1467.
- 3) I. Koga; *Phys. Rev.*, Vol. 109, No. 5 (1958) p. 1467.
- 4) 古賀逸策: 圧電気と高周波 (オーム社 昭和13年) p. 13.
- 5) A. Perrier and de Mandrot: *Compt. rend.* 175, 622 (1922).
- 6) 山形積治, 安田一次: X cut 水晶振動子の振動時の歪分布 (昭和45年度電気四学会北海道支部大会予稿集).