УДК 534.2:621.37

А.В. Данилов, А.А. Радионов

РАСЧЕТ ОБЪЕМНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН, РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ В МОНОКРИСТАЛЛЕ НИОБАТ ЛИТИЯ (LI NB O_3)

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Рассчитаны дисперсионные характеристики объемных волн в монокристалле ниобата лития. Показано, что в любом направлении кристалла могут распространяться три волны. При распространении вдоль главной оси симметрии одна из этих волн является продольной, а две другие – квази-поперечными.

Ключевые слова: объемные акустические волны, кристалл ниобата лития, дисперсионное уравнение.

В настоящее время [1, 2] широкое распространение в радиолокации, радионавигации, измерительной технике получили СВЧ-резонаторы, фильтры и лини задержки, работающие на объемных акустических волнах в пьезокристаллах. К достоинствам подобных устройств следует отнести: технологичность изготовления; малые габариты и вес; хорошую сопрягаемость с блоками микроэлектронной аппаратуры: высокую стабильность в процессе эксплуатации и надежность работы, так как они выполняются обычно в виде монолитных твердотельных устройств.

Как известно [3, 4], уравнения пьезоакустики имеют следующий вид:

$$\varepsilon_{i\kappa}\,\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_i\partial x_\kappa}+e_{\kappa,rm}\frac{\partial^2 U_r}{\partial x_\kappa\partial x_m}=0; \tag{1}$$

$$\rho\frac{\partial^2 U_i}{\partial f^2}=C_{i\kappa lm}\frac{\partial^2 U_l}{\partial x_\kappa\partial x_m}+e_{m.i\kappa}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_m\partial x_\kappa}, \tag{2}$$

где обозначено: $C_{i\kappa lm}$, $e_{j,i\kappa j}$, ε_{pq} – тензоры упругих пьезоэлектрических и диэлектрических модулей кристалла соответственно; ρ – плотность кристалла.

Решение этой системы уравнений в общем случае представляет собой серьезные математические трудности. В настоящее время его удается выполнить только для плоских монохроматических волн. Решение уравнений (1) и (2) при этом можно представить в виде

$$U_i=U_i e^{i\,(kn_\kappa x_x-\omega t)}=0\,, \tag{3}$$

где U_i - компоненты амплитудного вектора упругих смешений в волне. Для неограниченного кристалла сопровождающее упругую деформацию электрическое поле изменяется синфазно упругим смещениям. Поэтому электрический потенциал выглядит аналогично (3):

$$\varphi=\varphi e^{i(kn_\kappa x_x-\omega t)}\,. \tag{4}$$

Подстановка (3) и (4) в (1) и (2) дает следующую систему алгебраических уравнений:

$$\Phi\big(\varepsilon_{pq}n_p n_q\big)-\,U_i e_{\kappa,jm}n_\kappa n_m=0\quad, \tag{5}$$

$$\mathcal{P}\vartheta^2 U_i-C_{i\kappa lm}n_\kappa n_m U_e-l_{m,i\kappa}n_\kappa n_m\Phi=0\,. \tag{6}$$

Система (5), (6) является системой уравнений 4-го порядка относительно неизвестных амплитуд $\Phi, U_1=U_x, U_2=U_y$ и $U_3=U_z$. Учитывая, что множитель в круглых скобках первого слагаемого в (5) представляет собой полную двухкратную тензорную свертку диэлектрических модулей кристалла с вектором волновой нормали $\vec{n}$, т.е. является скалярным, преобразуем (5) к виду

$$\Phi = \frac{e_{к,jm} n_к n_m}{\varepsilon_{pq} n_p n_q} U_i \quad . \tag{7}$$

С учетом (6) и (7) получаем систему трех алгебраических уравнений, относительно компонент амплитудного вектора упругих смещений

$$(\vartheta^2 \delta_{ie} - Q_{ie}) U_l = 0, \tag{8}$$

где $\delta_{il} = \begin{cases} 1, \text{если } i = l, \\ 0, \text{если } i \neq l. \end{cases}$

Величина Q_{il} в системе уравнений (8) образуют симметричный ($Q_{il} = Q_{li}$) тензор второго ранга. Его компоненты определяются равенством

$$Q_{il} = \frac{1}{\mathcal{P}} \left[C_{ikml} + \frac{l_{p,iq} n_p n_q e_к e_m}{(\varepsilon_{pq} n_p n_q} \right] n_k n_m \quad , \tag{9}$$

где обозначено C_{ikml} , $e_{p,iq}$ $(e_{к,} l_m)$,ε_{pq} элементы упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических модулей кристалла соответственно;
n_p, n_q $(n_к n_m)$ -компоненты вектора волновой нормали $\vec{n}$.

Записывая условие нетривиальности решений системы уравнений (8) (равенство нулю ее главного определителя), получаем дисперсионное уравнение для плоских объемных акустических волн, распространяющихся в произвольном направлении пьезокристалла:

$$\begin{vmatrix} Q_{11} - \vartheta^2 & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{12} & Q_{22} - \vartheta^2 & Q_{23} \\ Q_{13} & Q_{23} & Q_{33-\vartheta^2} \end{vmatrix} = 0. \tag{10}$$

После определения из (10) значений скоростей волн $\vartheta^{(j)}$ (j =1,2,3, - номер волны) каждое из них подставляем в исходную систему уравнений (5), (6). При этом для каждой волны получаем соотношение между компонентами вектора амплитудных смещений в виде:

$$\frac{U_x^{(j)}}{D_1^j} = \frac{U_y^i}{D_2^j} = \frac{U_z^i}{D_3^j} \quad , \tag{11}$$

где обозначено:

$$D_1^{(i)} = \begin{vmatrix} Q_{22} - \vartheta^{(j)2} & Q_{23} \\ Q_{23} & Q_{33} - \vartheta^{(j)2} \end{vmatrix}, \quad D_2^{(i)} = \begin{vmatrix} Q_{23} & Q_{12} \\ Q_{33} - \vartheta^{(j)2} & Q_{13} \end{vmatrix},$$
$$D_3^{(i)} = \begin{vmatrix} Q_{12} & Q_{22} - \vartheta^{(j)2} \\ Q_{13} & Q_{23} \end{vmatrix}, \tag{12}$$

учитывая то обстоятельство, что $U_к^{(i)} = N_к^{(i)} U^{(i)}$ и $N_1^{(i)2} + N_2^{(i)2} + N_3^{(i)2} = 1$,
где $N_к^{(i)}$ - направляющие косинусы, характеризующие поляризацию волны, получаем формулу для определения $N_к^{(j)}$:

$$N_k^{(j)} = \frac{D_k^{(j)}}{\sqrt{D_1^{(j)2} + D_2^{(j)2} + D_3^{(j)2}}}. \tag{13}$$

Правильность определения направляющих косинусов для всей тройки волн можно контролировать условием

$$\vec{N}^{(1)} \cdot \vec{N}^{(2)} \quad = \vec{N}^{(3)} \tag{14}$$

или ему эквивалентными условиями:

$$\vec{N}^{(2)} \cdot \vec{N}^{(3)} \quad = \vec{N}^{(1)}, \qquad , \tag{15}$$

$$\vec{N}^{(3)} \cdot \vec{N}^{(1)} \quad = \vec{N}^{(2)}. \tag{16}$$

Для упрощения процедуры раскрытия тензорных сверток в (1) и (2) перейдем от тензорной формы их представления к матричной.

Учитывая свойство симметрии модулей упругости $C_{iк} = C_{кi}$, а также равенства выполняющиеся между отдельными компонентами $C_{iк}$, для кристалла тригональной системы[5]: C_{22}=C_{11} , C_{55}=C_{44} , C_{24}=C_{14},C_{56}=C_{14},$C_{66} = \frac{1}{2}$ (C_{11} =C_{12}) , C_{23} =C_{13}, матрицу упругих модулей кристалла ниобат лития записываем в виде:

$$C_{1k} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ C_{14} & -C_{14} & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & C_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{14} & \frac{1}{2}\left(C_{11} - C_{12}\right) \end{pmatrix} \tag{17}$$

В итоге имеется всего шесть независимых модулей упругости, значения которых [5] приведены в табл. 1.

Таблица 1

C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{12}	C_{13}	C_{14}
$2{,}02\ 10^{11}\ \frac{\text{н}}{\text{м}^2}$	$2{,}4\cdot10^{11}\ \frac{\text{н}}{\text{м}^2}$	$0{,}607\cdot10^{11}\ \frac{\text{н}}{\text{м}^2}$	$0{,}557\cdot10^{11}\ \frac{\text{н}}{\text{м}^2}$	$0{,}69\cdot10^{11}\ \frac{\text{н}}{\text{м}^2}$	$0{,}0749\cdot10^{11}\ \frac{\text{н}}{\text{м}^2}$

Пьезоматрица имеет вид:

$$e_{j,\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{1,5} & e_{1,6} \\ e_{2,1} & e_{2,2} & 0 & e_{2,4} & 0 & 0 \\ e_{3,1} & e_{3,2} & e_{3,3} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Для кристаллов тригональной системы, класса $3m$, к которым относится кристалл ниобат лития, существует следующая связь между пьезомодулями в (18) [3, 4]:

$$e_{1,6} = -2e_{2,2}\ ,\ e_{2,1} = -e_{2,2}\ \text{ и } e_{3,2} = e_{3,1}\ .$$

Таким образом, пьезоматрица (18) для кристалла ниобат лития имеет четыре независимых пьезомодуля, которые имеют следующие значения [5]:

$$e_{1,5} = 3.83\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2};\ e_{2.2} = 2.37\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2};\ e_{3,1} = 0.2\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2},;\ e_{3,3} = 1{,}8\frac{\text{Кл}}{\text{м}^2}.$$

Матрица диэлектрических модулей для кристалла ниобат лития имеет вид [3, 4]:

$$\varepsilon_\beta = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}. \tag{19}$$

В (19) элементы матрицы имеют значения [5]: $\varepsilon_1 = 99{,}5$, $\varepsilon_3 = 38{,}5$.

Подставляя значения модулей матрицы упругости (17), пьезоматрицы (18) и матрицы диэлектрических модулей (19) кристалла ниобат лития в (9) и раскрывая стандартным образом тензорные свертки, получаем значения модулей в дисперсионном уравнении (10) для объемных акустических волн, распространяющихся в кристалле ниобат лития. При этом выражения Q_{ik} принимают следующий вид:

$$\begin{gathered}
Q_{11} = \frac{n_1^2C_{11} + n_3^2C_{44} + 4n_2n_3C_{14} + 2n_2^2(C_{11} - C_{12})}{\rho} + \frac{n_1^2\left[n_3\left(e_{1,5} + e_{3,1}\right) - 3n_2e_{2,2}\right]^2}{\rho\left[\varepsilon_1\left(n_1^2 + n_2^2\right) + \varepsilon_3n_3^2\right]};\\
Q_{12} = \frac{n_1\left(n_2C_{12} + n_3C_{14}\right)}{\rho} + \frac{n_1n_2\left[n_3\left(e_{1,5} + e_{3,1}\right) - 3n_2e_{2,2}\right]\left[n_1e_{2,2} + n_3\left(e_{1,5} + e_{3,1}\right)\right]}{\rho\left[\varepsilon_1\left(n_1^2 + n_2^2\right) + \varepsilon_3n_3^2\right]};\\
Q_{13} = \frac{n_1n_3C_{13}}{\rho} + \frac{n_1n_3^2e_{3,3}\left[n_3\left(e_{1,5} + e_{3,1}\right) - 3n_2e_{2,2}\right]}{\rho\left[\varepsilon_1\left(n_1^2 + n_2^2\right) + \varepsilon_3n_3^2\right]};\\
Q_{22} = \frac{n_2^2C_{11} + n_3^2C_{44} - 2n_2n_3C_{14}}{\rho} + \frac{n_2^2\left[n_1e_{2,2} + n_3\left(e_{1,5} + e_{3,1}\right)\right]^2}{\rho\left[\varepsilon_1\left(n_1^2 + n_2^2\right) + \varepsilon_3n_3^2\right]};\\
Q_{33} = \frac{n_3^2C_{33}}{\rho} + \frac{n_3^4e_{3,3}^2}{\rho\left[\varepsilon_1\left(n_1^2 + n_2^2\right) + \varepsilon_3n_3^2\right]};\\
Q_{23} = \frac{n_2n_3C_{13}}{\rho} + \frac{n_2n_3^2e_{3,3}\left[n_1e_{2,2} + n_3\left(e_{1,5} + e_{3,1}\right)\right]}{\rho\left[\varepsilon_1\left(n_1^2 + n_2^2\right) + \varepsilon_3n_3^2\right]},
\end{gathered} \tag{20}$$

где обозначено: $\rho = 4{,}8\ 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}}$ плотность кристалла; n_1, n_2, n_3 -проекции волнового вектора в выбранной системе координат.

Задаваясь направлением распространения объемных акустическх волн в кристалле ниобат лития, т.е. значениями проекций (n_1, n_2, n_3) волнового вектора n в выражениях (20), находим из решения дисперсионного уравнения (10) фазовые скорости волн, которые распространяются в кристалле в этом направлении. Для волн, распространяющихся вдоль оси z (кристаллографическая ось 3-го порядка симметрии), полагаем $n_1=n_2=0$, $n_3=1$. Решение уравнения (10) дает нам следующие значения скоростей:

$$V_1 = 3593{,}7\frac{\text{м}}{\text{с}};\ V_2 = 3593{,}7\frac{\text{м}}{\text{с}};\ V_3 = 7145{,}9\frac{\text{м}}{\text{с}}.$$

Первые две волны *поперечные* (сдвиговые) распространяются в любых взаимно ортогональных направлениях, перпендикулярных оси z.

Третья волна *продольная*, вектор ее поляризации направлен вдоль оси z, а направляющие косинусы $N_к^{(3)}$ имеют следующие значения:

$$N_1^{(3)} = N_2^{(3)} = 0, \quad N_3^{(3)} = 1.$$

Для волн, распространяющихся в любом другом направлении в кристалле, отличном от оси z, для определения волнового вектора n, необходимо проводить преобразование системы координат. При этом связь между направлениями волнового вектора в двух ортогональных системах координат задается табл. 2 [3, 4]:

Таблица 2

	n_1	n_2	n_3
n_1'	α_{11}	α_{12}	α_{13}
n_2'	α_{21}	α_{22}	α_{23}
n_3'	α_{31}	α_{32}	α_{33}

В табл. 2 обозначено n_1', n_2', n_3' – проекции волнового вектора, на координатные оси системы координат x'_1, x'_2, x'_3, к которой мы переходим от системы координат x_1, x_2, y_2 с проекциями волнового вектора n_1, n_2, n_3. Откуда имеем:

$$\begin{aligned} n_1' &= n_1\alpha_{11} + n_2\alpha_{12} + n_3\alpha_{13}, \\ n_2' &= n_1\alpha_{21} + n_2\alpha_{22} + n_3\alpha_{23}, \\ n_1' &= n_1\alpha_{31} + n_2\alpha_{32} + n_3\alpha_{33}. \end{aligned} \tag{21}$$

Наиболее простой вид элементы α_{ij} приобретают в том случае, когда поворот от одной ортогональной системы координат к другой происходит вокруг оси z (оси симметрии 3-го порядка) путем поворота на угол θ, отсчитываемый от оси $0X_1$ в сторону оси $0X_2$. В этом случае матрица элементов (α_{ij}) имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Определим направление волнового вектора для волны, распространяющейся вдоль кристаллографической оси y. В ортогональной системе координат (x_1, x_2, x_3), связанной с кристаллографическими осями, направим ось x_2 вдоль y. В этом случае имеем $n_1=0$, $n_2=1$, $n_3=0$. Ортогональная система отсчета, в которой необходимо решать дисперсионное уравнение (10), получается путем поворота системы координат (x_1, x_2, x_3) вокруг оси x_3 на угол $\theta=2\pi$-30° в направлении от оси x_1 к оси x_2. При этом из (21) с учетом (22) получаем $n_1'=0{,}866$, $n_2'=+0{,}5$, $n_3'=0$.

Результаты решения дисперсионного уравнения (10) для данных волн приведены в табл. 3.

Таблица 3

Номер решения	Скорость волны м/с	$N_1^{(j)}$	$N^{(j)}_2$	$N^{(j)}_3$	
1	V_1 =3581,9	0,04572	0,02637	-0,9986	$\vec{N}^{(2)}\times\vec{N}^{(3)}=\vec{i}\,0{,}0458+$ $+\vec{j}\,0{,}02638-\vec{\kappa}\,0{,}9986$
2	V_2 =6562,1	-0,5	0,866	-0,000022	$\vec{N}^{(3)}\times\vec{N}^{(1)}=-\vec{i}\,0{,}49999+$ $+\vec{j}\,0{,}8659-\vec{\kappa}\,0{,}0000209$
3	V =3945,015	0,8648	0,4993	0,05279	$\vec{N}^{(1)}\times\vec{N}^{2}=\vec{\imath}0.86478+$ $\vec{\jmath}0.4993+\vec{k}0.05311$

Кроме значений скоростей волн, распространяющихся в избранном направлении в кристалле, в табл. 3 приведены значения направляющих косинусов $N_\kappa^{(j)}$, определяющих поляризацию каждой волны номера (j), и выполнена проверка правильности определения векторов $\vec{N}^{(j)}$, а значит и решения дисперсионного уравнения. Результаты проверки приведены в шестом столбце таблицы. Как видно из таблицы, волны, распространяющиеся в кристалле в данном направлении, не являются чисто поперечными или чисто продольными. Их можно характеризовать как квази-поперечные или квази-продольные. Преимущественным направлением поляризации считается то направление, значение направляющего косинуса для которого максимально. Так, первая волна квази-поперечная и поляризована вдоль оси z , вторая – квази-продольная и поляризована вдоль оси y, третья – квази-поперечная и поляризована вдоль оси x.

Библиографический список

1. **Гуляев, Ю.В.** Резонаторы и фильтры сверхвысоких частот на объемных акустических волнах: современное состояние, тенденции развития / Ю.В. Гуляев, Г.Д. Мансфельд // Радиотехника, 2003. № 8. С. 42–54.
2. **Каринский, С.С.** Полупроводниковые преобразователи и их применение / С.С. Каринский. – М.: Наука, 1973.
3. **Сиротин, Ю.И.** Основы кристаллофизики / Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. – М.: Наука, 1979. – 639 с.
4. **Балакирев, М.К.** Волны в пьезокристаллах / М.К. Балакирев, И.А. Гилинский. – Новосибирск: Наука, 1982. – 239 с.
5. Акустические кристаллы: справочник / А.А. Блистанов [и др.]; под ред. М.П. Шаскольской. – М.: Наука,1982. – 632 с.

Дата поступления
в редакцию 03.12.2013

A.V. Danilov, A.A. Radionov

CALCULATION OF BULK ACOUSTIC WAVES PROPAGATING IN THE CRYSTAL LINBO$_3$

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alexeev

Purpose: In this work was researched dispersion characteristics of bulk waves in monokrystal LiNbO$_3$.
Design\methodology\approach: Derivation of the dispersion equation for bulk waves produced using equations piezoacoustics.
Finding: To find the velocity of bulk waves in piezocrystal determined eigenvalue Kristofell acoustic tensor.
Reseach limitations\implications: Was proved, that three waves are able to propagate in the direction of axis of symmetry: one longitudinal and two transverse. At random direction propagate quasi-longitudinal and quasi-transverse waves.
Originality\value: Conclusions able to be used during create acoustoelectronic devices, such as filters, resonators, delay lines.

Key words: bulk acoustic wave, cristal LiNbO$_3$, equation dispersion.