

Министерство образования и науки России  
Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов»

*На правах рукописи*  
*Теличко*

**Теличко Арсений Витальевич**

**ФИЗИЧЕСКИЕ И АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИНТЕТИЧЕСКОГО  
МОНОКРИСТАЛЛА АЛМАЗА IIa ТИПА И СЛОИСТЫХ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ  
СТРУКТУР НА ЕГО ОСНОВЕ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В АКУСТОЭЛЕКТРОНИКЕ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени кандидата  
физико-математических наук

Научный руководитель  
д.ф.-м.н., профессор Сорокин Б. П.

Москва 2015

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Список принятых аббревиатур и обозначений .....	4
Введение.....	8
ГЛАВА 1. РАСПРОСТРАНЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В КРИСТАЛЛАХ И СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ, В ТОМ ЧИСЛЕ, В УСЛОВИЯХ КОНЕЧНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ. АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В АКУСТОЭЛЕКТРОНИКЕ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР (ОБЗОР).....	21
1.1 Термодинамические потенциалы.....	21
1.2 Распространение объемных акустических волн.....	25
1.2.1 Обобщенный закон Гука.....	25
1.2.2 Уравнение движения частиц упругой среды.....	29
1.2.3 Тензор Кристоффеля.....	32
1.2.4 Поток энергии упругих волн.....	34
1.3 Типы акустических волн в слоистых пьезоэлектрических структурах	38
1.4 Зависимость акустических свойств кристаллов от давления. Коэффициенты управления.....	41
1.5 Параметр Грюнайзена.....	43
1.6 Расчет мощности упругих волн, излучаемых тонкоплёночным пьезоэлектрическим преобразователем. Форм-фактор.....	45
1.6.1 Система пьезоэлектрик – звукопровод.....	49
1.6.2 Система пьезоэлектрик – электроды – звукопровод.....	52
1.6.3 Система электрод – пьезоэлектрик – электрод – звукопровод.....	53
1.6.4 Описание программы NBAR ver. 2.3.....	56
1.7 Механизмы фонон-фононного затухания Ахиезера и Ландау-Румера	58
1.8 Типы акустических колебаний, используемых в резонаторах.....	59
1.9 Основные типы акустических резонаторов.....	63
Выводы к главе 1.....	69
ГЛАВА 2. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ КРИСТАЛЛОВ.....	70
2.1 Зависимость упругих постоянных второго порядка кристаллов от температуры.....	70
2.2 Температурные зависимости упругих постоянных 2-го порядка тригональных, гексагональных и тетрагональных кристаллов.....	73
2.3 Развитие температурной зависимости упругих постоянных 2-го порядка кубических кристаллов. Учет нелинейных упругих постоянных вплоть до 4-го порядка.....	76
Выводы к главе 2.....	84
ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ СИНТЕТИЧЕСКОГО МОНОКРИСТАЛЛА АЛМАЗА ПА ТИПА.....	85
3.1 Исследование распространения объемных акустических волн в синтетическом монокристалле алмаза.....	85
3.1.1 Экспериментальная установка.....	85
3.1.2 Исследуемые образцы.....	88
3.1.3 Экспериментальные результаты измерений скоростей звука в алмазе. Расчёт упругих постоянных. Анализ ошибок.....	91
3.2 Исследование зависимостей скоростей объемных акустических волн от давления в синтетическом монокристалле алмаза.....	93

3.2.1 Экспериментальная установка по приложению одноосного напряжения. Алгоритм определения упругих постоянных 3-го порядка.....	93
3.2.2 Экспериментальные результаты. Анализ ошибок.....	95
3.3 Определение упругих постоянных 3-го порядка синтетического монокристалле алмаза.....	97
Выводы к главе 3.....	99
ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ АЛМАЗА.....	101
4.1 Исследование качества слоистых пьезоэлектрических структур.....	101
4.1.1 Определение глубины нарушенного слоя.....	101
4.1.2 Исследование качества напыляемых пленок.....	104
4.2 Экспериментальные образцы составных акустических резонаторов...	108
4.3 Математическое моделирование с целью оптимизации конструкции составных акустических резонаторов на основе синтетического монокристалла алмаза.....	109
4.4 Экспериментальное исследование составных акустических резонаторов на алмазной подложке.....	114
4.4.1 Экспериментальная установка для СВЧ акустических исследований.....	114
4.4.2 Результаты экспериментального исследования СВЧ добротностей составных акустических резонаторов. Влияние температуры.....	116
4.5 Сравнение результатов моделирования составного акустического резонатора с экспериментальными данными.....	125
4.6 Исследование паразитных пиков АЧХ составного акустического резонатора.....	127
4.7 Затухание акустических волн в синтетическом монокристалле алмаза.....	133
4.7.1 Источники затухания СВЧ акустических волн в составных акустических резонаторах.....	133
4.7.2 Параметр качества. Смена режимов затухания в алмазе.....	135
4.7.3 Определение параметра Грюнайзена и времени термической релаксации в алмазе.....	138
Выводы к главе 4.....	139
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	142
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	144
ПРИЛОЖЕНИЯ.....	157

## СПИСОК

### принятых аббревиатур и обозначений

#### Аббревиатуры

<i>A</i>	антисимметричная волны Лэмба
CVD	Chemical vapor deposition, метод изготовления алмазных плёнок путём химического осаждения из газовой фазы
EBSD	Electron Back-Scattering Diffraction, дифракция обратно рассеянных быстрых электронов
FBAR	Thin Film Bulk Acoustic Resonator, композитный тонкопленочный резонатор
HBAR	High-overtone Bulk Acoustic Resonator, составной акустический резонатор
HPHT	High-Pressure High-Temperature, метод изготовления монокристаллов алмаза при сочетании высокого давления и высокой температуры
<i>S</i>	симметричная волна Лэмба
<i>SH</i>	волна с поперечно-горизонтальной поляризацией
SMR	Solidly Mounted Resonator, многослойный резонатор
АСМ	атомно-силовой микроскоп
АЧХ	амплитудно-частотная характеристика
САР	составной акустический резонатор
СВЧ	сверхвысокие частоты
КЛ	Кикучи линии
КЭМС	коэффициент электромеханической связи
НЛ	ниобат лития
ОАВ	объемная акустическая волна
ПАВ	поверхностная акустическая волна
ПГ	параметр Грюнайзена
РЭМ	растровый электронный микроскоп
ТКЛР	температурный коэффициент линейного расширения
ТКЧ	температурный коэффициент частоты
ТПП	тонкопленочный пьезоэлектрический преобразователь
ТЧХ	температурно-частотная характеристика
УП2П	упругие постоянные 2-го порядка
УП3П	упругие постоянные 3-го порядка
УП4П	упругие постоянные 4-го порядка
ФЧХ	фазово-частотная диаграмма
ЭУП	эффективные упругие постоянные

## Обозначения

$\alpha_{PQ}$	тензор линейного теплового расширения
$\alpha_i$	коэффициент управления скоростью ОАВ при воздействии давления
$\alpha(f)$	коэффициент затухания
$\beta_{PQ}$	нелинейная часть тензора теплового расширения
$\gamma$	параметр Грюнайзена
$\gamma_i^j$	частный параметр Грюнайзена
$\varepsilon_0$	электрическая постоянная
$\varepsilon_{ij}$	диэлектрическая проницаемость среды
$\eta_{ij}$	тензор деформаций
$\kappa$	коэффициент теплопроводности
$\lambda$	длина волны
$\lambda_i$	собственное значение тензора Грина -Кристоффеля
$\mu$	коэффициент Пуассона
$\rho$	плотность твердого тела в деформированном состоянии
$\rho_0$	плотность твердого тела в недеформированном состоянии
$\rho_1$	плотность твердого тела в текущей конфигурации
$\sigma_{ij}$	тензор механических напряжений
$\tau_d$	время групповой задержки
$\tau_t$	время термической релаксации фононов кристалле
$\tau_{ij}$	тензор термодинамических напряжений
$\varphi_n$	угол сдвига фаз
$\omega$	циклическая частота
$A$	параметр анизотропии
$B$	объемный модуль упругости кубического кристалла
$\vec{B}$	вектор магнитной индукции
$B_A$	адиабатический модуль объемного сжатия
$C_{ABCD}$	тензор 4-го ранга модулей упругости (упругие постоянные 2-го порядка (УП2П))
$C_{ABCDEF}$	тензор 6-го ранга нелинейных модулей упругости (упругие постоянные 3-го порядка (УП3П))
$C_{ABCDEF}$	тензор 6-го ранга нелинейных модулей упругости (упругие постоянные 3-го порядка (УП3П))

$C_{ABCD}^{эфф}$	эффективные упругие постоянные 2-го порядка
$C_V$	теплопроводность единицы объема теплопроводности
$D_k$	вектор электрической индукции
$E$	модуль Юнга
$E_i$	вектор электрического поля
$e_{ij}$	тензор малых деформаций
$e_{NAB}$	тензор пьезоэлектрических постоянных
$e_{NABKL}$	тензор нелинейных пьезоэлектрических постоянных
$f$	частота
$\Delta f$	частотный интервал между двумя обертонами
$\delta f$	полоса пропускания на уровне -3 дБ
$G$	модуль сдвига
$G_{NMAB}$	тензор электрострикции
$H_1$	электрическая энтальпия
$H_{NMAB}$	тензор электрострикции
$h$	постоянная Планка
$h_{NAB}$	тензор пьезоэлектрических постоянных
$h_{NABKL}$	тензор нелинейных пьезоэлектрических постоянных
$K$	коэффициент электромеханической связи
$k$	постоянная Больцмана
$k_l$	волновой вектор
$m$	часть форм-фактора, зависящая от частоты
$M_0$	форм-фактор
$M_i$	единичный вектор направления силы давления
$n_i$	единичный вектор, направленный нормально к элементарной площадке $ds$ в пространственном представлении
$N_R$	единичный вектор, направленный нормально к элементарной площадке $dS$ в материальном представлении (единичный вектор направления OAB)
$P$	величина давления
$P_i$	вектор Умова-Пойнтинга
$Q$	добротность
$R_A$	сопротивление акустического излучения

$R_a$	среднее арифметическое отклонение всех точек профиля шероховатости от средней линии
$R_{ms}$	среднеквадратичная шероховатость
$R_z$	шероховатость поверхности по выбранным пяти максимальным высотам и впадинам
$S$	энтропия
$S_{11}$	коэффициент отражения
$S_{POKL}^T$	тензор упругих податливостей, которые должны быть измерены при статическом нагружении образца
$TC_{ij}$	температурный коэффициент 1-го порядка упругого модуля $C_{ij}$
$T^2C_{ij}$	температурный коэффициент 2-го порядка упругого модуля $C_{ij}$
$T$	абсолютная температура
$U$	внутренняя энергия на единицу объема кристалла (плотность внутренней энергии)
$\tilde{U}_i$	вектор динамической деформации среды
$\bar{U}_i$	вектор конечной статической деформации среды
$U, U_i$	вектор поляризации ОАВ
$V$	объем тела
$v$	скорость движения частиц упругой среды
$v^e$	скорость переноса энергии (групповая скорость)
$v_L$	скорость продольной ОАВ
$v_R$	скорость поверхностной волны Рэлея
$v_T$	скорость сдвиговой ОАВ
$v_{OAB}$	скорость ОАВ
$W$	работа
$\Delta W$	потери энергии за период колебаний
$W_{full}$	энергия, запасенная в системе
$X_{L,i}$	градиент деформации
$Z$	акустический импеданс в расчете на единицу площади поверхности звукопровода
$Z_{11}$	полный импеданс
$Z_e$	«чистый» импеданс

## ВВЕДЕНИЕ

### Актуальность темы

В начале 21-го века развитие материаловедения и технологий производства привело к получению высококачественных синтетических объёмных и плёночных моно- и поликристаллов алмаза – материалов с уникальным сочетанием физико-химических параметров, превосходящих природные аналоги и перспективных в акустоэлектронике.

На данный момент широко исследуются акустоэлектронные свойства кристаллов и пьезоэлектрических слоистых структур, выполненных на кристаллической подложке [1-6]. Так, наличие надёжно определенных упругих постоянных 2-го порядка (УП2П) кристалла позволяют вычислять скорости продольных и сдвиговых объёмных акустических волн (ОАВ) в произвольном срезе кристалла [7]. Определение нелинейных упругих постоянных 3-го порядка (УП3П) позволяет предсказывать изменения скоростей звука либо резонансных частот под действием внешнего воздействия, например, изменений температуры или давления. Необходимо заметить, что наличие примесей и дефектов напрямую влияет на значения модулей УП3П кристаллов, поэтому исследования синтетических беспримесных кристаллов даёт более воспроизводимые результаты по сравнению с их природными аналогами. Без учета модулей УП2П и УП3П практически невозможна оптимальная конструкция акустических датчиков давления, температуры, ускорения. Следует заметить, что на момент начала работы отсутствовали экспериментальные значения УП3П синтетического монокристалла алмаза Па типа. Так как алмаз является самым твердым материалом, создание эффективных акустоэлектронных сенсоров давления на его основе является актуальной задачей.

В последнее время имеется тенденция к повышению рабочих частот акустических резонаторов, достигающих порой десятков ГГц. Известно, что акустические резонаторы являются незаменимыми устройствами для систем стабилизации частоты, вторичных стандартов частоты и времени, высокостабильных генераторов различного назначения и т.п. В последние годы акустические резонаторы рассматривают и как чувствительные элементы сенсоров физико-химических воздействий. Кварцевый резонатор, отлично служивший для целей акустоэлектроники на относительно низких частотах, не подходит для СВЧ по ряду причин. Для приборов, функционирующих на частотах ~ единиц и десятков ГГц, необходимо использовать высокочастотные подложки из кристаллов, обладающих сочетанием таких свойств, как низкое акустическое затухание, высокие скорости звука, высокий коэффициент электромеханической связи, хорошая термостабильность и т.д.

Рассматривая слоистую пьезоэлектрическую структуру, в которой толщины

преобразователя и электродов на порядки меньше толщины кристаллической подложки, говорят о составном акустическом резонаторе (САР). В англоязычной литературе для обозначения этого устройства принят термин High overtone Bulk Acoustic resonator (НВАР). Важной характеристикой акустических резонаторов является значение добротности на определенной частоте. Так как толщина звукопровода много больше толщин напыленных слоев, акустоэлектронные свойства САР определяются, в основном, свойством материала подложки. На данный момент самыми распространенными, и, соответственно, изученными структурами являются резонаторы с подложкой из кварца [1]. Также активно исследуются структуры на ниобате лития (НЛ) [2-4], плавленом кварце [1], кремнии [1], и т.д. Один из первых САР с малыми фазовыми шумами был представлен в [8]. Однако использование такого материала с низкими акустическими потерями на СВЧ, как сапфир [1], позволило получить одно из самых высоких значений параметра качества (произведение добротности на частоту). Для сапфира на 1 ГГц добротность оказалась 48000, что выше, чем у кварца (11600) и кремния (2800) на тех же частотах [1]. Использование кристаллов с низким акустическим затуханием позволяет увеличить диапазон рабочих частот. Алмаз обладает наивысшими скоростями звука среди известных монокристаллических материалов (вдоль [111] скорость продольной волны достигает ~ 18600 м/с) и низким акустическим затуханием, возможно возбуждение резонатора на частотах выше, чем при использовании сапфира (скорость звука до 11235 м/с), поскольку резонансная частота при одинаковой геометрии устройства пропорциональна скорости ОАВ. Необходимо заметить, что структуры на основе САР могут быть использованы для определения материальных свойств подложек и для тонких пленок [9]. С теоретической стороны распространение ультразвука в САР было изучено в работах [10-12] на примере структур Al/ZnO/Al/YAG и электрод/пьезоэлектрическая пленка/электрод/подложка. Особенности САР в режиме захвата энергии исследованы Г.Д. Мансфельдом с соавторами [13]. Возможные методы улучшения свойств резонаторов обсуждались в [14].

Использование СВЧ генераторов, управляемых напряжением, с низкими фазовыми шумами, работоспособных на нескольких гигагерцах, востребовано в радиолокации [15]. Использование таких генераторов актуально для детектирования объектов с низкой эффективной площадью рассеяния. Однако к моменту начала работы отсутствовали надежные данные по исследованию высокодобротных САР на подложке из синтетического монокристалла алмаза. Зачастую попытки создать высокодобротный резонатор на алмазе представляли собой устройство, выполненное на алмазной CVD подложке, заведомо уступающей по качеству монокристаллу. Таким образом, создание

высокодобротных генераторов с высокой добротностью и низкими фазовыми шумами является актуальной задачей акустоэлектроники

### Цели и задачи работы

Целью диссертации являлось изучение влияния упругой нелинейности на свойства кристаллов, включая влияние температуры и давления; комплексное исследование упругих свойств синтетического монокристалла алмаза как перспективного материала для составного акустического резонатора; изучение акустоэлектронных свойств резонатора, условий его эффективной работы; изучение особенностей СВЧ акустического затухания в монокристаллическом алмазе IIa типа.

Для достижения поставленной цели были поставлены следующие задачи:

- Развитие феноменологической теории температурной зависимости упругих постоянных 2-го порядка с учетом нелинейных модулей упругости 3-го и 4-го порядков;
- Определение скоростей ОАВ и вычисление модулей УП2П синтетического монокристалла алмаза IIa типа;
- Расчет коэффициентов управления скоростей ОАВ алмаза под давлением, выбор системы уравнений для отдельного определения модулей УП3П;
- Экспериментальное исследование зависимости скоростей ОАВ в ориентированных образцах алмазов от одноосного давления и вычисление модулей УП3П;
- Исследование добротности как функции частоты для составного акустического резонатора на основе слоистой пьезоэлектрической структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз»;
- Анализ зависимости  $Q(f)$  резонатора, определение эффективных частотных областей возбуждения САР;
- Определение вкладов в совокупное акустическое затухание в составном акустическом резонаторе с подложкой из синтетического монокристалла алмаза, изучение механизмов акустического затухания Ахиезера и Ландау-Румера.

Исследования проводились с использованием высокоточного измерительного оборудования: установки по измерению скоростей звука методом длинного импульса RITEC RAM-500, системы по измерению скоростей ОАВ импульсным эхо-методом, состоящей из осциллографа Tektronix DPO71254B и генератора Avtech AVRK-2-B, электромеханической испытательной машины INSTRON 5965, автоматизированной низкотемпературной магнитной системы Quantum Design EverCool 2, векторного анализатора цепей Agilent E5071C и рабочей станции M-150.

## Научная новизна

1. Проанализирована температурная зависимость модулей УП2П для кубических кристаллов. В расчёт впервые включены упругие постоянные высших порядков, а именно, модули упругости 4-го порядка (УП4П).

2. Для синтетического монокристалла алмаза Па типа акустическим методом впервые определены модули УП3П.

3. Впервые экспериментально исследована частотная зависимость добротности составного акустического резонатора с подложкой из синтетического монокристалла алмаза Па типа ориентации (100). Наличие характерных максимумов и минимумов в частотной зависимости добротности объяснены с точки зрения форм-фактора  $m$  тонкоплёночного пьезоэлектрического преобразователя. Показано, что для слоистой системы «внешний электрод/пьезопреобразователь/внутренний электрод/подложка» излучаемая акустическая мощность  $W \sim |m|^2$ , и частотная зависимость заключена в форм-факторе. Из изучения ряда экспериментальных данных показано, что частотные области с высокими значениями добротности можно связать с минимумами  $\text{Im}(m)$ , в то время как области с низким значением добротности ассоциируются с минимумами  $\text{Re}(m)$ .

4. Проанализирована частотная зависимость добротности составного акустического резонатора на (100) алмазной подложке и вклады в акустические потери от различных механизмов. Показано, что основной вклад в акустические потери вносит относительно толстый кристаллический слой.

5. Из исследования большой серии резонаторов было впервые показано, что изменение частотной зависимости параметра качества  $Q \times f$  происходит вблизи 1 ГГц: при частотах  $f < 1$  ГГц наблюдается постоянство параметра качества,  $Q \times f \approx 1.8 \cdot 10^{13}$  Гц, в то время как при  $f > 1$  ГГц выполняется  $Q \times f \approx 1.8 \cdot 10^4 \times f$  Гц. Получено, что согласование теоретических оценок с экспериментальными результатами соответствует частному параметру Грюнайзена для продольной акустической моды  $\gamma_{100}^L \approx 0.85$ , а время термической релаксации фононов при комнатной температуре составило  $\tau_i \approx 1.6 \cdot 10^{-10}$  с.

Работа выполнена по плану НИР ФГБНУ ТИСНУМ в том числе, в соответствии с Государственным контрактом № 16.513.12.3025 от 10 мая 2012 г. (Федеральная целевая программа «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007 – 2013 годы»).

## Научная и практическая значимость работы

Полученные в данной диссертации результаты расширяют знания о температурном поведении упругих постоянных кристаллов, могут быть широко использованы в

акустоэлектронных приборах и датчиках, СВЧ резонаторах и генераторах, при разработке эффективных сенсоров, работоспособных на частотах вплоть до  $\sim 10$  ГГц.

Так, уточнение температурной зависимости модулей УП2П может быть использовано для создания и уточнения эффективных сенсоров температуры, более точного предсказания температурных сдвигов рабочих частот, уточнения ориентации термостабильных срезов.

Данные по влиянию одноосного давления на изменение скоростей ОАВ монокристалла алмаза, наряду с полученными модулями УП3П, могут быть использованы для создания эффективных сенсоров сверхвысоких давлений. Результаты данной работы могут быть использованы для более точного учета сдвига рабочей частоты в зависимости от давления, а также для построения кривой «напряжение – деформация» в алмазе для любого избранного кристаллографического направления.

Экспериментально полученные АЧХ резонаторов на СВЧ в сочетании с высокими значениями параметра качества  $Q \times f$  синтетического монокристалла алмаза Па типа свидетельствуют о возможности создания высокодобротных микрорезонаторов, работоспособных на частотах вплоть до  $\sim 10$  ГГц. На отдельных образцах САР наблюдались резонансы на частотах вплоть до 20 ГГц, однако добротность данных резонансов не превышала 2500. Данный результат в будущем также может быть отправной точкой для дальнейшего повышения рабочих частот.

Экспериментально исследована температурная зависимость обертонов САР. Полученные значения температурного коэффициента частоты (ТКЧ,  $ТСf$ ) для обертонов, возбуждаемых на частотах 500 – 1100 МГц, оказались равны  $ТСf = (-4,5 \dots -6,5) \cdot 10^{-6}$  град $^{-1}$ . Наблюдались близкие к линейной зависимости добротности обертонов от температуры.

Обнаруженный переход смены механизма затухания от механизма Ахиезера к механизму Ландау-Румера означает, что на частотах более 1 ГГц добротность алмаза не падает с ростом частоты, а оказывается примерно постоянной. Данный эффект делает алмаз потенциально значимым материалом акустоэлектроники на СВЧ, так как подобный эффект может достигаться в других известных кристаллах лишь на значительно более высоких частотах, а в исследованном диапазоне 1 ... 20 ГГц приводит, в соответствии с механизмом Ахиезера, к обратно пропорциональной зависимости добротности от частоты.

#### Основные положения, выносимые на защиту

1. Учет модулей упругости 3-го и 4-го порядков приводит к уточнению феноменологической теории температурной зависимости модулей упругости и улучшает согласие теоретических оценок по кубическим кристаллам с экспериментальными данными.

2. Изменения скоростей ОАВ синтетического монокристалла алмаза Па типа в пределах от 0 до 450 МПа имеют линейный характер, коэффициенты управления скоростями ОАВ лежат в диапазоне от  $-2,4 \cdot 10^{-12}$  до  $-22,7 \cdot 10^{-12}$  Па<sup>-1</sup>. Величины коэффициентов тензора упругих постоянных 3-го порядка равны  $C_{111} = -7660 \pm 650$ ,  $C_{112} = -1550 \pm 350$ ,  $C_{123} = -3470 \pm 700$ ,  $C_{144} = -3130 \pm 700$ ,  $C_{155} = -2630 \pm 500$ ,  $C_{456} = -700 \pm 300$  (ГПа).
3. Особенности частотной зависимости форм-фактора  $|m|^2$  и пиков его мнимой и действительной частей определяют частотные области эффективной работы тонкоплёночного пьезоэлектрического преобразователя в составном акустическом резонаторе.
4. Синтетический монокристалл алмаза Па типа имеет высокую добротность в широкой СВЧ области (на 1 ГГц  $Q = 33000$  и  $\alpha(f) \approx 0,8$  дБ/см; на 9,5 ГГц  $Q = 10800$  и  $\alpha(f) \approx 9$  дБ/см).
5. В синтетическом монокристалле алмаза Па типа смена режимов затухания от механизма Ахиезера к механизму Ландау-Румера происходит в окрестности частоты 1 ГГц (при комнатной температуре), при этом  $Q \times f_{\text{Ахиезер}} \approx 1,8 \cdot 10^{13}$  Гц,  $Q \times f_{\text{Л-Р}} \approx 1,8 \cdot 10^4 \times f$  Гц. Частный параметр Грюнайзена и время термической релаксации фононов имеют значения  $\gamma_{100}^L \approx 0,85$  и  $\tau_t \approx 1,6 \cdot 10^{-10}$  с соответственно.

#### Личный вклад соискателя

Соискатель выполнил теоретические расчеты температурных коэффициентов УП2П тетрагональных, гексагональных и тригональных кристаллов, развил теорию расчета температурных коэффициентов УП2П для кубических кристаллов, включив в рассмотрение учет упругих постоянных 4-го порядка. Определил коэффициенты управления для кубических кристаллов под действием одноосного механического напряжения. Соискатель принимал участие в подготовке образцов, производил экспериментальные измерения скоростей звука кристаллов и их зависимости от одноосного давления, на основе экспериментальных данных выполнял расчёты модулей УП3П алмаза. Принимал активное участие в экспериментальном и теоретическом исследовании составного акустического резонатора: выполнил моделирование АЧХ САР, анализировал полученные данные по частотным зависимостям коэффициентов отражения  $S_{11}$ , исследовал воздействие температуры. Принимал активное участие в анализе полученных результатов.

### Достоверность результатов

Достоверность полученных результатов обусловлена использованием высококачественных монокристаллов алмаза Па типа, выращенных НРНТ методом ФГБНУ ТИСНУМ. Для исследования акустических свойств кристаллов и структур использовались высокоточные методы, такие как метод длинного импульса или импульсный эхо-метод. Ошибка экспериментальных данных оценивалась методом наименьших квадратов. При получении модулей УПЗП использовали систему линейных переопределённых уравнений, поскольку выбранные для исследований направления распространения и типы мод, а также варианты приложения одноосных давлений допускали наличие проверочных уравнений. Достоверность полученных выводов следует из согласия экспериментальных результатов по большому набору образцов САР с различной геометрией подложек и топологией электродов с теоретическими расчетами и предположениями.

### Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих научных конференциях и семинарах:

1. IEEE Int. Joint Confer. of the Frequency Control and the European Frequency and Time Forum, San-Francisco, USA, 2-5 May, 2011;
2. 54-я научной конф. МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе», Долгопрудный, Россия, 10–30 ноября, 2011;
3. Конф. «Сессия научного совета РАН по акустике и XXV сессия российского акустического общества», Таганрог, Россия, 17-20 сентября, 2012;
4. 8-я Межд. Конф. «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология», Троицк, Россия, 25-28 сентября, 2012;
5. The 2012 IEEE Int. Ultrasonics Symp., Dresden, Germany, 7-10 October, 2013;
6. The 2013 Joint Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control, European Frequency and Time Forum and Piezoelectric Force Microscopy workshop Symp., Prague, Czech Republic, 21-25 July, 2013;
7. Всеросс. научно-техническая конф. и выставка, посвященная итогам реализации Федеральной Целевой Программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007 – 2013 годы», Москва, Россия, 24-25 сентября 2013;
8. Школа-семинар молодых учёных Центрального региона по теме: «Участие молодых учёных в фундаментальных, поисковых и прикладных исследованиях по созданию

- новых углеродных и наноуглеродных материалов», Апрелевка, Россия, 2-3 октября 2013;
9. Межд. Симп. "Физика кристаллов 2013", Москва, Россия, 28 октября - 2 ноября 2013;
  10. Int. Conf. on Diamond and Carbon Materials, Madrid, Spain, 8-11, September, 2014;
  11. IEEE Int. Frequency Control Symp. and European Frequency and Time Forum, Denver, USA, 12-16 April, 2015.

#### Публикации

Всего опубликовано 10 научных статей в научной периодике, 9 из них – по теме диссертации, из которых 6 входят в список журналов, рекомендованных ВАК Минобрнауки России; 3 научные статьи опубликованы в зарубежных изданиях, представленных в поисковой платформе Web of Science; представлены 12 докладов на международных и всероссийских симпозиумах и конференциях, 6 из которых опубликовано в трудах соответствующих симпозиумов.

#### Структура и объем работы

Диссертация состоит из Введения, 4-х глав, Заключения, Списка литературы из 170 наименований. Основная часть работы изложена на 160 страницах, содержит 69 рисунков и 24 таблицы.

В первой главе представлен обзор литературы, рассмотрены современные материалы, кристаллы и слоистые пьезоэлектрические структуры, используемые в акустоэлектронике и пьезотехнике. Показано, что не для всех широко используемых на данный момент кристаллов известны все необходимые наборы материальных констант. Рассмотрено распространение упругих волн конечной амплитуды в кристаллах и слоистых структурах. Введены термодинамические потенциалы, рассмотрены линейные и нелинейные свойства. Введен обобщенный закон Гука, связывающий тензоры напряжения и деформации, учтены нелинейные члены. Получено уравнение движения частиц упругой среды, введены тензор  $\tau$  уравнение Кристоффеля. Показано, что при внешнем воздействии тензор Кристоффеля модифицируется в тензор Грина-Кристоффеля. Также рассмотрен поток энергии упругих волн и типы основных акустических волн в слоистых структурах. Исследована зависимость упругих постоянных 2-го порядка кристаллов от давления. В линейном приближении по внешнему давлению получены выражения для тензора Грина-Кристоффеля. Введены коэффициенты управления. Исследованы режимы затухания Ахиезера и Ландау-Румера, показано, что при смене режимов меняется частотная зависимость параметра качества и акустического затухания. Вводится ангармоничный параметр Грюнайзена, от величины которого квадратично зависит коэффициент

акустического затухания и параметр качества составного акустического резонатора. Показано, что частотную зависимость мощности акустического излучения удобно исследовать, введя форм-фактор  $m$ . Описывается написанная Бурковым С.И. программа NBAR ver. 2.3 для моделирования частотной зависимости форм-фактора, его действительной и мнимой частей. Рассмотрены основные типы акустических колебаний и резонаторов, показано, что резонаторы с алмазной подложкой являются перспективными устройствами для СВЧ техники.

Вторая глава посвящена феноменологической теории зависимости модулей упругости кристаллов от изменения температуры. Получены выражения температурных зависимостей упругих постоянных с учетом упругих постоянных 3-го порядка для тригональных, тетрагональных и гексагональных кристаллов. Для кубических кристаллов произведен учет нелинейных членов в температурной зависимости вплоть до упругих постоянных 4-го порядка. Получено хорошее соответствие теоретических и экспериментальных данных.

В третьей главе исследуется распространение объемных акустических волн в синтетическом монокристалле алмаза Па типа, включая воздействие одноосного давления. Проанализировано распространение акустических волн в кристаллах симметрии  $m\bar{3}m$ , определены собственные значения различных ОАВ. Приведены данные по качеству исследуемых образцов синтетическом монокристалле алмаза Па типа, выращенных методом НРНТ в ФГБНУ ТИСЧУМ. На экспериментальных установках RITEK RAM-500, Tektronix DPO71254B и Avtech AVRK-2-B методом длинного импульса и импульсным эхо-методом определены скорости ОАВ в синтетическом монокристалле алмаза Па типа, вычислены значения упругих постоянных 2-го порядка. Определенные упругие постоянные 2-го порядка находятся в хорошем соответствии с данными других авторов для алмазов естественного происхождения. Исследовано влияния давления на скорости звука в кубических кристаллах, получены уравнения для раздельного определения упругих постоянных 3-го порядка монокристалла алмаза. Получены аналитические выражения для коэффициентов управления кристаллов симметрии  $m\bar{3}m$ , выбрана система из 6-ти уравнений для вычисления УПЗП. Проведено экспериментальное исследование зависимостей скоростей ОАВ в алмазе от величины одноосного давления. Показано, что все зависимости имели линейный характер в пределах использованного в эксперименте (0 ... 400 МПа) изменения одноосного давления. Из полученных линейных зависимостей определены коэффициенты управления скоростями звука давлением для различных акустических мод и вычислены модули УПЗП алмаза.

В четвертой главе исследуется составной акустический резонатор с подложкой из

синтетического монокристалла Па типа. Исследуя наблюдаемые Кикучи линии произведена оценка нарушенного слоя алмаза как величина, не превышающая 30 нм. Исследовано качество напыляемых пленок, описаны исследуемые образцы САР. Произведено моделирование слоистых пьезоэлектрических структур «Me1/AlN/Me2/(100) алмаз». Выбор молибдена в качестве Me2 обусловлен наилучшим акустическим согласованием с подложкой, а применение алюминия для верхнего электрода (Me1) обосновано малой плотностью и хорошей проводимостью данного материала. Показано, что рабочие области частот можно определять с помощью частотных зависимостей фактора  $m$ , значительно влияющего на полосу пропускания резонатора и на его резонансные характеристики. Описана экспериментальная установка в составе векторного анализатора цепей Agilent E5071C и рабочей станции M-150. Измерения частотных характеристик проводились в частотном интервале 300 МГц – 20 ГГц. Резонансы наблюдаются при строго определенных резонансных частотах – на толщине образца укладывалось целое число полуволн. Экспериментально определены зависимости добротности от частоты для составных акустических резонаторов с подложкой из синтетического монокристалла алмаза Па типа. Исследована температурная зависимость обертонов, экспериментально определен ТКЧ. Получены рекордно высокие значения параметра качества, например  $Q \times f = 1,5 \cdot 10^{14}$  Гц (на 6,5 ГГц). Исследованы паразитные пики, возникающие около объемного резонанса. Показано, что данные пики связаны с возбуждением различных мод волны Лэмба, что связано с конечными поперечными размерами структуры. Исследованы причины затухания ОАВ в составных акустических резонаторах. Из измерений добротности получено значение затухания объемных акустических волн в кристалле в направлении (100), рассчитан частный параметр Грюнайзена и время термической релаксации для продольных акустических фононов в направлении (100). Сделана оценка минимального предела, обусловленного фонон-фононным затуханием в кристаллах. Показано наличие смены режима затухания от механизма Ахиезера к механизму Ландау-Румера в окрестности 1 ГГц при комнатной температуре.

В Заключение излагаются основные выводы работы.

В приложении А приведена симметрия тензоров материальных свойств кубических кристаллов симметрии  $m3m$ . В приложении Б выписаны аналитические выражения для различных мод в кубических кристаллах симметрии  $m3m$ .

Основные результаты работы диссертации приведены в списке публикаций ниже.

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК при Министерстве образования и  
науки Российской Федерации

1. Золотова, О. П. Упругие волны в пьезоэлектрических слоистых структурах / О. П. Золотова, С. И. Бурков, Б. П. Сорокин Б.П., **А. В. Теличко** // Журн. СФУ. Сер. Мат. и физ. – 2012. – Т. 5, № 2 – С. 164-186.
2. Гордеев, Г. И. Упругие свойства монокристалла синтетического алмаза / Г. И. Гордеев, Г. М. Квашнин, М. С. Кузнецов, Б. П. Сорокин, **А. В. Теличко** // Изв. ВУЗ'ов, серия Хим. хим. техн. – 2013. – Т. 56, № 7. – С. 50-52.
3. Сорокин, Б. П. Экспериментальное исследование линейных и нелинейных упругих свойств синтетического монокристалла алмаза / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, М. С. Кузнецов, **А. В. Теличко**, С. И. Бурков // Журн. СФУ. Сер. Мат. и физ. – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 120-126.
4. Бормашов, В. С. Технология изготовления СВЧ пьезоэлектрических преобразователей на основе пленки AlN, нанесенной на подложку из синтетически монокристалла алмаза / В. С. Бормашов, А. П. Волков, А. В. Голованов, Г. И. Гордеев, Г. М. Квашнин, Б. П. Сорокин, **А. В. Теличко** // Изв. ВУЗ'ов, серия Хим. хим. техн. – 2014. – Т. 57, № 5. – С. 17-21.
5. Сорокин, Б. П. Исследования многочастотных СВЧ акустических резонаторов на основе слоистой пьезоэлектрической структуры «Me1/AlN/Me2/(100) алмаз» / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, **А. В. Теличко**, Г. И. Гордеев, С. И. Бурков, В. Д. Бланк // Акуст. журн. – 2015. – Т. 61, № 3. – С. 464-476.
6. Сорокин, Б.П. Исследования СВЧ акустического затухания в многочастотном резонаторе на объемных акустических волнах на основе синтетического монокристалла алмаза / Б. П. Сорокин, **А. В. Теличко**, Г. М. Квашнин, В. С. Бормашов, В. Д. Бланк // Акуст. журн. – 2015. – Т. 61, № 5. – С. 1-13.

Статьи в других журналах

1. Sorokin, B. P. Temperature coefficients of elastic constants of trigonal, hexagonal, and tetragonal crystals / B. P. Sorokin B.P., **A. V. Telichko** // IEEE Trans. on Ultrason, Ferroel. and Freq. Contr. – 2012. – V. 59, N 2. – P. 311-314.
2. Sorokin, B. P. AlN/single crystalline diamond piezoelectric structure as a High overtone Bulk Acoustic Resonator / B. P. Sorokin, G. M. Kvashnin, A. P. Volkov, V. S. Bormashov, V. V. Aksenonkov, M. S. Kuznetsov, G. I. Gordeev, **A. V. Telichko** // Appl. Phys. Lett. – 2013. – V. 102, N 11. – P. 113507.
3. **Telichko, A.V.** Extended temperature dependence of elastic constants in cubic crystals / **A. V. Telichko**, B. P. Sorokin // Ultrasonics – 2015. – V. 64. – P. 1-5.

Доклады и материалы конференций

1. Sorokin, B. P. Temperature coefficients of elastic constants of trigonal, hexagonal and tetragonal crystals / B. P. Sorokin, **A. V. Telichko** // Proc. of The IEEE Int. Joint Confer. of the Frequency Control and the European Frequency and Time Forum, San-Francisco, USA, 2-5 May 2011 / San-Francisco, 2011. P. 1-4.
2. **Теличко, А. В.** Определение упругих постоянных третьего порядка монокристалла алмаза на основе исследования распространения акустических волн малой амплитуды в условиях конечного механического нагружения / А. В. **Теличко**, Б. П. Сорокин // Труды 54-й научной конф. МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе», Долгопрудный, Россия, 10–30 ноября 2011 / Долгопрудный 2011.
3. Сорокин, Б. П. Упругие свойства монокристалла синтетического алмаза / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, **А. В. Теличко**, М. С. Кузнецов, Г. И. Гордеев // Сб. трудов Конф. «Сессия научного совета РАН по акустике и XXV сессия российского акустического общества», Таганрог, Россия, 17-20 сентября 2012 / Таганрог, 2012. С. 306-310.
4. Гордеев, Г. И. Исследования распространения упругих волн в монокристалле синтетического алмаза / Г. И. Гордеев, Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, **А. В. Теличко**, М. С. Кузнецов // Сб. трудов 8-й Межд. конф. «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология», Троицк, Россия, 25-28 сентября 2012 / Троицк, 2012.
5. Sorokin, B. P. Influence of the temperature and uniaxial pressure on the elastic properties of synthetic diamond single crystal / B. P. Sorokin, G. M. Kvashnin, M. S. Kuznetsov, **A. V. Telichko**, S. I. Burkov // Proc. of The 2012 IEEE Int. Ultrasonics Symp., Dresden, Germany, 7-10 October 2012 / Dresden, 2012. P. 763-766.
6. Sorokin, B. P. Microwave acoustic properties of diamond single crystal as a substrate for High-overtone Bulk Acoustic Resonator / B. P. Sorokin, G. M. Kvashnin, A. P. Volkov, V. S. Bormashov, V. V. Aksenonkov, M. S. Kuznetsov, **A. V. Telichko**, G. I. Gordeev // Proc. of The 2013 Joint Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control, European Frequency and Time Forum and Piezoelectric Force Microscopy workshop Symp., Prague, Czech Republic, 21-25 July 2013 / Prague, 2013. P. 1684-1687.
7. Бланк, В. Д. Разработка методов создания устройств акустоэлектроники и сенсорной техники на основе синтетических монокристаллов алмазов / В. Д. Бланк, Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, А. П. Волков, В. С. Бормашов, С. А. Терентьев, М. С. Кузнецов, **А. В. Теличко**, Г. И. Гордеев // Всеросс. научно-техническая конф. и

выставка, посвященная итогам реализации Федеральной Целевой Программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007 – 2013 годы», Москва, Россия, 24-25 сентября 2013 / Москва 2013.

8. **Теличко, А. В.** Исследование физико-химических и акустических свойств пьезоэлектрических слоистых структур  $\text{Me}_1/\text{AlN}/\text{Me}_2/(100)$  алмаз / **А. В. Теличко**, Г. И. Гордеев, Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, В. С. Бормашов, А. П. Волков // Школа-семинар молодых учёных Центрального региона по теме: «Участие молодых учёных в фундаментальных, поисковых и прикладных исследованиях по созданию новых углеродных и наноуглеродных материалов», Андреевка, Россия, 2-3 октября 2013 / Андреевка 2013.
9. Сорокин, Б.П. Исследования СВЧ акустических свойств пьезоэлектрических слоистых структур  $\text{AlN}/\text{монокристаллический алмаз}$  / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, В. С. Бормашов, А. П. Волков, **А. В. Теличко**, Г. И. Гордеев, С. А. Терентьев, С. И. Бурков, О. П. Золотова // Труды Межд. симп. "Физика кристаллов 2013", Москва, Россия, 28 октября - 2 ноября 2013 / Москва 2013.
10. Sorokin, B. P. The  $\text{IIa}$  synthetic diamond as a substrate for microwave High overtone Bulk Acoustic Resonator / B. P. Sorokin, V. D. Blank, G. M. Kvashnin, A. P. Volkov, V. S. Bormashov, M. S. Kuznetsov, **A. V. Telichko**, G. I. Gordeev // Abstr. Int. Conf. on Diamond and Carbon Materials, Madrid, Spain, 8-11 September 2015/ Madrid, 2015. - P2-041.
11. **Telichko, A.V.** UHF Acoustic Attenuation and Quality Parameter Limits in the Diamond Based HBAR / **A. V. Telichko**, B. P. Sorokin // Proc. of The IEEE Int. Frequency Control Symp. and European Frequency and Time Forum, Denver, USA, 12-16 April 2015 / Denver, 2015. – P. 94-99.
12. Kvashnin, G. M. Resonant transformation of acoustic waves observed for the diamond based HBAR / G. M. Kvashnin, **A. V. Telichko**, B.P. Sorokin // Proc. of The IEEE Int. Frequency Control Symp. and European Frequency and Time Forum, Denver, USA, 12-16 April 2015 / Denver, 2015. – P. 396-401.

**ГЛАВА 1. РАСПРОСТРАНЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В КРИСТАЛЛАХ И  
СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ В УСЛОВИЯХ КОНЕЧНЫХ ВНЕШНИХ  
ВОЗДЕЙСТВИЙ. АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ ИСПОЛЪЗУЕМЫХ В  
АКУСТОЭЛЕКТРОНИКЕ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР  
(ОБЗОР)**

1.1. Термодинамические потенциалы

Описание макроскопических физических свойств кристаллов базируется на первом законе термодинамики:

$$dU = TdS + dW, \quad (1.1)$$

где  $U$  – внутренняя энергия на единицу объема кристалла (плотность внутренней энергии),  $T$  – абсолютная температура,  $S$  – энтропия. Тогда полная работа, совершаемая над единицей объема кристалла, равна:

$$dW = dW_{эл} + dW_{мех}. \quad (1.2)$$

Плотность работы при электрической поляризации кристалла равна

$$dW_{эл} = E_n dD_n, \quad (1.3)$$

где  $E_n$  и  $D_n$  – компоненты векторов электрического поля и электрической индукции. Вклад в работу по упругому деформированию кристалла имеет вид:

$$dW_{мех} = \sigma_{ij} d\eta_{ij}, \quad (1.4)$$

где  $\sigma_{ij}$  – тензор механических напряжений, а  $\eta_{ij}$  – тензор деформаций. По дважды повторяющимся координатным индексам подразумевается суммирование.

В общем случае внутренняя энергия диэлектрического кристалла является функцией десяти переменных  $U = U(\sigma_{ij}, D_n, S)$ , а соотношения [16]

$$\sigma_{ij} = \left( \frac{\partial U}{\partial \eta_{ij}} \right)_{D,S}; \quad E_n = \left( \frac{\partial U}{\partial D_n} \right)_{\eta,S}; \quad T = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_{D,\eta} \quad (1.5)$$

определяют пары сопряженных термодинамических переменных:  $\sigma_{ij} \Leftrightarrow \eta_{ij}$ ,  $E_n \Leftrightarrow D_n$ ,  $T \Leftrightarrow S$ . Поскольку  $\sigma_{ij}$ ,  $E_n$ ,  $D_n$  относятся к недеформированному состоянию, то  $dW_{эл}$  и  $dW_{мех}$  определены с точностью до членов, связанных с неортогональным преобразованием системы координат деформированной среды. При малых деформациях этими поправками пренебрегают, и для описания основных физических свойств кристаллов достаточную точность дают уравнения состояния (1.5).

Система уравнения Максвелла для диэлектриков имеет вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{B} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \vec{B} &= 0, \\ \operatorname{div} \vec{D} &= 0. \end{aligned} \tag{1.6}$$

Здесь  $\vec{B}$  – вектор магнитной индукции,  $\vec{E}$  – вектор среднего макроскопического электрического поля. Поляризация  $\vec{P}$  связана с вектором электрической индукции:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}. \tag{1.7}$$

Необходимо заметить, что, согласно [17, 18], в случае конечной (сильной) статической деформации среды дифференциал работы, произведенной механическим напряжением, оказывается не равным свертке произведения компонент тензора механических напряжений  $\sigma_{ij}$  на компоненты тензора деформаций  $\eta_{ij}$ . Действительно, деформации определены относительно начального недеформированного состояния, а механические напряжения вычисляются на единицу площади деформированного тела. Сложный характер зависимости деформаций от напряжений в этом случае задается через градиенты статической деформации, определяющие вращение элемента объема, и, в общем случае, неортогональное преобразование исходной системы координат. Конечные деформации меняют и физические свойства среды. Поэтому необходимо корректно учитывать эффекты – следствия конечной статической деформации кристалла:

1. Возникшая конечная деформация образца приводит к искажению элементарной ячейки – изменению ее размеров и поворотов базисных векторов, на макроскопическом уровне – к изменению геометрических размеров образца, в том числе пути распространения акустической волны. Обычно такие эффекты называют *геометрической нелинейностью*.

2. Следствием изменения равновесных межатомных связей в результате конечной деформации является также то, что связь между деформациями и напряжениями отклоняется от линейной зависимости, в результате чего необходимо учитывать нелинейность упругих свойств, которая на микроскопическом уровне определяется ангармонизмом решетки. Такую *физическую нелинейность* обычно принимают во внимание, используя модифицированные уравнения состояния и вводя эффективные упругие постоянные среды, зависящие от деформации или других воздействий.

Чтобы обойти затруднения, вызванные усложнением связей между деформациями и механическими напряжениями, для идеального упругого тела вводят

термодинамические напряжения  $\tau_{ij}$  так, чтобы сумма  $\tau_{ij}d\eta_{ij}$ , отнесенная к единице исходного объема, была равна дифференциалу работы, производимой недиссипативной частью напряжения при растяжении тела. Иначе говоря, величины  $\tau_{ij}$  являются термодинамически сопряженными деформациям  $\eta_{ij}$ . Связь между тензорами термодинамических и механических напряжений имеет вид [19]:

$$\tau_{LM} = JX_{L,i}X_{M,j}\sigma_{ij}, \quad (1.8)$$

где

$$J = \lim_{\Delta V_0 \rightarrow 0} \left( \frac{\Delta V}{\Delta V_0} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial X_1} & \frac{\partial x_2}{\partial X_1} & \frac{\partial x_3}{\partial X_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial X_2} & \frac{\partial x_2}{\partial X_2} & \frac{\partial x_3}{\partial X_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial X_3} & \frac{\partial x_2}{\partial X_3} & \frac{\partial x_3}{\partial X_3} \end{vmatrix} = \frac{\rho_0}{\rho} \quad (1.9)$$

– якобиан перехода из недеформированной конфигурации  $X_L$  в деформированную  $x_i$ ;  $\rho$  и  $\rho_0$  – плотность твердого тела в деформированном и недеформированном состояниях соответственно. Величины вида

$$X_{L,i} \equiv \frac{\partial X_L}{\partial x_i} \quad (1.10)$$

называются *градиентами деформации*. Запятая в нижнем индексе обозначает пространственную производную. Тензор деформации определен так:

$$\eta_{LM} = \frac{1}{2} (x_{j,L}x_{j,M} - \delta_{LM}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_L}{\partial X_M} + \frac{\partial U_M}{\partial X_L} + \frac{\partial U_K}{\partial X_L} \frac{\partial U_K}{\partial X_M} \right), \quad (1.11)$$

где вектор смещения  $U_P$ , связывающий исходное и текущее положения материальных точек, вводится согласно соотношению

$$x_j = \delta_{ij} (X_P + U_P). \quad (1.12)$$

В соотношении (1.12), как и далее, тензор Кронекера введен для последовательности формы записи соотношений, в которой строчные буквы и индексы использованы для обозначения переменных в текущей системе координат, а прописные буквы и индексы – для обозначения переменных в исходной системе координат соответственно.

В нелинейной теории для учета взаимодействия материала с электромагнитным полем вводится материальное представление векторов электрического поля, электрической индукции и поляризации, которые в дальнейшем будут обозначаться

буквами вида:  $E_L$ ,  $D_L$ ,  $P_L$ . Тогда уравнения состояния конечно-деформированной упругой сплошной среды, записанные для внутренней энергии, примут вид [16]:

$$\tau_{AB} = \left( \frac{\partial U}{\partial \eta_{AB}} \right)_{D,S} ; \quad E_L = \left( \frac{\partial U}{\partial D_L} \right)_{\eta,S} ; \quad T = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_{D,\eta} . \quad (1.13)$$

Уравнения состояния (1.11) обычно используют для анализа колебаний высокочастотных толщинных и толщинно-сдвиговых пьезорезонаторов, когда реализуются адиабатические условия и условия механического зажатия, и распространение волны происходит в продольно-пьезоактивном направлении.

Аналогичные уравнения состояния могут быть получены и для электрической энтальпии  $H_1 = H_1(\tau_{AB}, D_L, S)$ . Данный термодинамический потенциал обычно используют при описании распространения высокочастотных акустических волн малой амплитуды в диэлектрических кристаллах в адиабатическом приближении, выполнении условий механического зажатия и в направлениях без продольной пьезоактивности. Приращение электрической энтальпии записывается в виде

$$dH_1 = \tau_{AB} d\eta_{AB} - D_L dE_L + T dS , \quad (1.14)$$

а уравнения состояния примут вид:

$$\tau_{AB} = \left( \frac{\partial H_1}{\partial \eta_{AB}} \right)_{E,S} ; \quad D_L = - \left( \frac{\partial H_1}{\partial E_L} \right)_{\eta,S} ; \quad T = \left( \frac{\partial H_1}{\partial S} \right)_{E,\eta} . \quad (1.15)$$

Использование электрической энтальпии  $H_1$  и внутренней энергии  $U$  удобно для адиабатических процессов, например, описания распространения высокочастотных упругих волн в кристаллах. Уравнения состояния получают путём разложения того или иного термодинамического потенциала в ряд Тейлора по степеням независимых термодинамических переменных. В линейном приближении достаточно оставить только слагаемые с первыми степенями, однако при описании нелинейных (ангармонических) эффектов, возникающих при распространении волн в условиях конечных воздействий либо волн конечной амплитуды, линейное приближение становится недостаточным. Например, уравнения состояния для термодинамического потенциала  $U$  [16], полученные при разложении вплоть до второй степени деформации  $\eta^2$ , имеют вид:

$$\begin{aligned} \tau_{AB} = & \left( C_{ABKL}^{D,S} + \frac{1}{2} C_{ABKLQR}^{D,S} \eta_{QR} + \frac{1}{6} C_{ABKLQRMN}^{D,S} \eta_{QR} \eta_{MN} - \frac{1}{2} h_{NABKL}^S D_N \right) \eta_{KL} - \\ & - \left( h_{NAB}^S + \frac{1}{2} h_{NABKL}^S \eta_{KL} + \frac{1}{2} G_{NMAB}^S D_M \right) D_N , \\ E_N = & - \left( h_{NAB}^S + \frac{1}{2} h_{NABKL}^S \eta_{KL} + \frac{1}{2} G_{NMAB}^S D_M \right) \eta_{AB} + \\ & + \left( \beta_{NM}^{\eta,S} - \frac{1}{2} G_{NMAB}^S \eta_{AB} + \frac{1}{2} \beta_{NMP}^{\eta,S} D_P \right) D_M , \end{aligned} \quad (1.16)$$

а для потенциала  $H_1$ :

$$\begin{aligned}
\tau_{AB} = & \left( C_{ABKL}^{E,S} + \frac{1}{2} C_{ABKLQR}^{E,S} \eta_{QR} + \frac{1}{6} C_{ABKLQRMN}^{E,S} \eta_{QR} \eta_{MN} - \frac{1}{2} e_{NABKL}^S E_N \right) \eta_{KL} - \\
& - \left( e_{NAB}^S + \frac{1}{2} e_{NABKL}^S \eta_{KL} + \frac{1}{2} H_{NMAB}^S E_M \right) E_N, \\
D_N = & - \left( e_{NAB}^S + \frac{1}{2} e_{NABKL}^S \eta_{KL} + \frac{1}{2} H_{NMAB}^S D_M \right) \eta_{AB} + \\
& + \left( \varepsilon_{NM}^{\eta,S} + \frac{1}{2} H_{NMAB}^S \eta_{AB} + \frac{1}{2} \varepsilon_{NMP}^{\eta,S} E_P \right) E_M.
\end{aligned} \tag{1.17}$$

Здесь присутствуют линейные члены, такие как вклад пьезоэлектрического эффекта  $h_{NAB}^S D_N$  и упругий вклад  $C_{ABKL}^{E,S} \eta_{KL}$ . Однако во многих случаях необходим учет нелинейных эффектов: упругой нелинейности  $\frac{1}{2} C_{ABKLQR}^{E,S} \eta_{QR} \eta_{KL}$ , нелинейности пьезоэлектрического эффекта  $\frac{1}{2} e_{NABKL}^S \eta_{KL} E_N$  и электрострикции  $\frac{1}{2} H_{NMAB}^S E_M E_N$ . Таким образом, вводятся модули  $C_{ABCD}$  – упругие постоянные 2-го порядка (УП2П), имеющие смысл тензора 4-го ранга с внутренней симметрий  $[[V^2]^2]$  (обозначения Яна [20]);  $C_{ABCDEF}$  – упругие постоянные 3-го порядка (УП3П)– тензор 6-го ранга (симметрия  $[[V^2]^3]$ );  $h_{NAB}$  и  $e_{NAB}$  – тензоры 3-го ранга пьезоэлектрических постоянных (симметрия  $V[V^2]$ );  $h_{NABKL}$  и  $e_{NABKL}$  – тензоры 5-го ранга нелинейных пьезоэлектрических постоянных (симметрия  $V[[V^2]^2]$ );  $G_{NMAB}$  и  $H_{NMAB}$  – тензоры 4-го ранга электрострикции (симметрия  $[V^2]^2$ );  $\beta_{NM}$  и  $\varepsilon_{NM}$  – тензоры 2-го ранга диэлектрической проницаемости (симметрия  $[V^2]$ );  $\beta_{NMP}$  и  $\varepsilon_{NMP}$  – тензоры 3-го ранга нелинейной диэлектрической проницаемости (симметрия  $V^3$ ). Верхние индексы в материальных тензорах обозначают условия измерений той или иной величины при постоянстве электрического поля, или индукции, или деформаций (механически зажатый кристалл), или адиабатические условия опыта (постоянство энтропии). Уравнения состояния для всех термодинамических потенциалов приведены в Приложении А.

## 1.2 Распространение объемных акустических волн

### 1.2.1 Обобщенный закон Гука

При одновременном воздействии сильными статическими и слабыми динамическими полями удобно пользоваться следующими конфигурациями анизотропной сплошной среды [19, 21]:

1) исходная или естественная. Плотность кристалла в данной конфигурации  $\rho_0$ . Кристалл не деформирован. Положение фиксированной материальной точки описывается с помощью тройки чисел  $X_1, X_2, X_3$  – материальных координат;

2) промежуточная. Плотность кристалла –  $\rho_1$ . Происходит статическая конечная деформация среды. Положение частицы описывается при помощи координат  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$ ;

3) текущая или настоящая. Плотность кристалла –  $\rho_1$ . Имеется суперпозиция статической конечной и малой динамической (связанной с волной) деформации среды. Положение частицы описывается при помощи координат  $x_1, x_2, x_3$  (рис. 1.1).

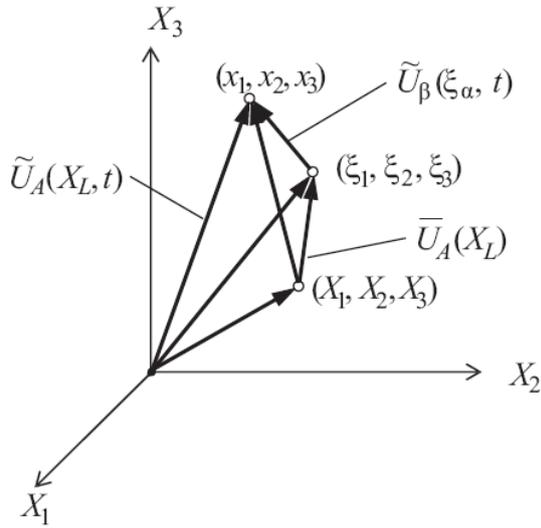


Рис. 1.1. Взаимосвязь начальной, промежуточной и текущей конфигураций материальной точки твердого тела, подвергнутого конечной статической и малой динамической деформации

Взаимосвязь *текущей* и *промежуточной* конфигураций записывается в виде:

$$\xi_\alpha = \xi_\alpha(X_L), \quad X_K = X_K(\xi_\beta). \quad (1.18)$$

Если статическое воздействие постоянно в течение всего эксперимента, то динамическое возмущение можно рассматривать как наложенное на статическое и действующее независимо от него (принцип суперпозиции). Тогда изменение положения материальной точки можно описать уравнениями, связывающими *промежуточную* и *текущую* конфигурации:

$$x_i = x_i(\xi_\alpha, t), \quad \xi_\beta = \xi_\beta(x_i, t). \quad (1.19)$$

Динамическое и статическое возмущения независимы, и задачу можно разделить на динамическую и статическую части. Уравнения движения могут быть записаны в любой из конфигураций, однако удобнее всего представить их в исходной. В этом случае формально плотность и размеры образца не изменяются, но их изменения будут самосогласованно учтены в конечных соотношениях.

Переходы из одной конфигурации в другую удобно задавать при помощи векторов смещения  $U$ :

$$x_i = \delta_{i\beta} [\xi_\beta + \tilde{U}_\beta(\xi_\alpha, t)], \quad (1.20)$$

$$\xi_\alpha = \delta_{\alpha F} [X_F + \bar{U}_F(X_L)]. \quad (1.21)$$

Векторы  $\tilde{U}_\beta(\xi_\alpha, t)$  и  $\bar{U}_F(X_L)$  определяют динамическую и статическую деформации среды соответственно. Можно записать и вектор смещения, связывающий исходную и текущую конфигурации материальной точки (рис. 1.1):

$$\tilde{U}_A(X_L, t) = \bar{U}_A(X_L) + \delta_{A\beta} \tilde{U}_\beta(\xi_\alpha, t). \quad (1.22)$$

Преобразование вектора смещения из деформированной в недеформированную конфигурацию имеет вид:

$$\tilde{U}_\beta(\xi, t) = \xi_{\beta,A}(X) \tilde{U}_A(X, t), \quad (1.23)$$

где  $\xi_{\beta,A}(X) = \partial \xi_\beta / \partial X_A$  – градиенты деформации из исходной в промежуточную конфигурации. Подставляя (1.23) в (1.22) и затем – в (1.20), с учетом (1.21) получим уравнение перемещения точки, записанное в координатах начального состояния:

$$x_i(X_F, t) = \delta_{iF}(X_F + \bar{U}_F) + \delta_{i\beta} \xi_{\beta,A} \tilde{U}_A(X_F, t), \quad (1.24)$$

где  $\tilde{U}_A$  и  $\bar{U}_F$  – векторы динамической и статической частей смещения соответственно.

Будем рассматривать однородные статические деформации, для которых выполняется условие

$$\xi_{\beta,A} = const \quad (1.25)$$

во всем объеме образца. Тогда, пользуясь определением тензора деформаций

$$\eta_{LM} = \frac{1}{2}(x_{j,L}x_{j,M} - \delta_{LM}), \quad (1.26)$$

и подставляя (1.24) в (1.26), представим тензор деформаций в виде суммы статической и динамической частей

$$\eta_{LM} = \bar{\eta}_{LM} + \tilde{\eta}_{LM}, \quad (1.27)$$

где

$$\bar{\eta}_{LM} = \frac{1}{2}(\bar{U}_{L,M} + \bar{U}_{M,L} + \bar{U}_{K,L}\bar{U}_{K,M}), \quad (1.28)$$

$$\tilde{\eta}_{LM} = \frac{1}{2}(\tilde{U}_{L,M} + \tilde{U}_{M,L}) + \bar{\eta}_{LG}\tilde{U}_{G,M} + \bar{\eta}_{MG}\tilde{U}_{G,L}. \quad (1.29)$$

С помощью членов вида  $\bar{\eta}_{LG}\tilde{U}_{G,M}$  в выражении для динамической части тензора деформаций (1.29) учитываются изменения конфигурации анизотропной среды, вызванные ее статической деформацией – растяжение и поворот элементарных линий, параллельных ребрам образца. Таким образом, все чисто геометрические (размерные) эффекты учитываются в (1.29) самосогласованно.

Как показывает опыт, для обратимых процессов зависимость плотности внутренней энергии  $U = U(\eta_{AB}, S)$  от независимых термодинамических переменных достаточно хорошо описывается разложением в ряд Тейлора относительно равновесного состояния системы ( $\eta_{AB} = 0$ ). В общем случае коэффициенты этого разложения представляют собой физические (материальные) параметры исследуемого кристалла в тензорном виде. Адекватное представление физических свойств кристаллов, в том числе нелинейных, обеспечивается последовательным оставлением членов соответствующего порядка малости в данном ряду и, соответственно, в уравнениях состояния.

Выполним, например разложение в ряд Тейлора плотности внутренней энергии для адиабатических процессов ( $S = const$ ,  $dS = 0$ ) относительно равновесного состояния  $U = U(0, S_0)$  с точностью до членов 4-й степени:

$$U(\eta_{AB}, S) - U(\eta_{AB}, S_0) = \frac{1}{2} C_{ABCD} \eta_{AB} \eta_{CD} + \frac{1}{6} C_{ABCDPQ} \eta_{AB} \eta_{CD} \eta_{PQ} + \dots$$

$$+ \frac{1}{24} C_{ABCDPQKL} \eta_{AB} \eta_{CD} \eta_{PQ} \eta_{KL} + \dots \quad (1.30)$$

Учитывая определение

$$\tau_{AB} = \left( \frac{\partial U}{\partial \eta_{AB}} \right)_S, \quad (1.31)$$

получим уравнение состояния:

$$\tau_{AB} = C_{ABCD} \eta_{CD} + \frac{1}{2} C_{ABCDPQ} \eta_{CD} \eta_{PQ} + \frac{1}{6} C_{ABCDPQKL} \eta_{CD} \eta_{PQ} \eta_{KL}. \quad (1.32)$$

Здесь дополнительно введены нелинейные модули упругости  $C_{ABCDPQKL}$  – упругие постоянные 4-го порядка (УП4П) – тензор 8-го ранга (симметрия  $[[[V^2]]^4]$ ).

Уравнение (1.32) является *обобщенным законом Гука*, где включены члены, которые описывают упругое “линейное” поведение (первое слагаемое), а также нелинейные члены, ответственные за отклонение от линейной зависимости  $\tau_{AB} = \tau_{AB}(\eta_{CD})$  (второе и третье слагаемые).

Перепишем уравнение (1.32) в виде

$$\tau_{AB} = \left( C_{ABCD} + \frac{1}{2} C_{ABCDPQ} \eta_{PQ} + \frac{1}{6} C_{ABCDPQKL} \eta_{PQ} \eta_{KL} \right) \eta_{CD} = C_{ABCD}^{\text{эфф}}(\eta) \eta_{CD}, \quad (1.33)$$

где  $C_{ABCD}^{\text{эфф}}(\eta)$  – эффективные упругие постоянные (ЭУП). Из уравнения (1.33) следует зависимость ЭУП от деформации. Эта зависимость лежит в основе метода измерений упругих постоянных третьего порядка  $C_{ABCDPQ}$  исходя из зависимостей скоростей акустических волн от давления и в пренебрежении 2-м нелинейным членом. Учет величин  $C_{ABCDPQ}$  и  $C_{ABCDPQKL}$ , как будет показано ниже (глава 2), позволяет более точно описать температурную зависимость модулей упругости.

Используя принцип суперпозиции (1.27), модифицируем уравнение состояния (1.33), выделив в них статическую и динамическую части:

$$\tau_{AB} = \bar{\tau}_{AB} + \tilde{\tau}_{AB} = C_{ABCD} (\bar{\eta}_{CD} + \tilde{\eta}_{CD}) + \frac{1}{2} C_{ABCDPQ} (\bar{\eta}_{CD} + \tilde{\eta}_{CD}) \times$$

$$\times (\bar{\eta}_{PQ} + \tilde{\eta}_{PQ}) \approx C_{ABCD} \bar{\eta}_{CD} + \frac{1}{2} C_{ABCDPQ} \bar{\eta}_{CD} \bar{\eta}_{PQ} + C_{ABCD} \tilde{\eta}_{CD} +$$

$$+ \frac{1}{2} C_{ABCDPQ} \bar{\eta}_{CD} \tilde{\eta}_{PQ} + \frac{1}{2} C_{ABCDPQ} \tilde{\eta}_{CD} \bar{\eta}_{PQ}. \quad (1.34)$$

При записи (1.34) считались пренебрежимо малыми величины вида  $\tilde{\eta}_{CD}\tilde{\eta}_{PQ}$ , являющиеся произведениями малых динамических переменных.

### 1.2.2. Уравнение движения частиц упругой среды

В пространственном представлении уравнение движения частиц упругой диэлектрической среды с учетом действия пондеромоторных сил, как показано авторами [22], имеет вид:

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = r_{ij,j}, \quad (1.35)$$

где  $\rho$  – плотность кристалла в текущем состоянии,  $v_i$  – скорость движения упругой среды. Общий тензор напряжений  $r_{ij}$  имеет вид

$$r_{ij} = \sigma_{ij} + T_{ij}, \quad (1.36)$$

где

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{J} x_{i,L} x_{j,M} \tau_{LM}^* \quad (1.37)$$

– симметричный тензор механических напряжений, а

$$T_{ij} = \varepsilon_0 E_i E_j - \frac{1}{2} E_k E_k \delta_{ij} \quad (1.38)$$

– симметричный электростатический тензор Максвелла. Тензор термодинамических напряжений в (1.37) имеет вид:

$$\tau_{LM}^* = J X_{L,i} X_{M,j} (T_{ij} - E_i P_j). \quad (1.39)$$

В материальном представлении аналогом тензора  $r_{ij}$  является общий тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа  $K_{Rj}$ , и связь между ними задана соотношением [19]

$$r_{ij} n_i ds = K_{Rj} N_R dS, \quad (1.40)$$

где  $n_i$  – единичный вектор, направленный нормально к элементарной площадке  $ds$  в пространственном представлении,  $N_R$  – единичный вектор, направленный нормально к элементарной площадке  $dS$  в материальном представлении. Учитывая соотношение [16]

$$n_i ds = J X_{L,i} N_L dS, \quad (1.41)$$

тензор  $K_{Rj}$  из выражения (1.40) можем переписать в следующем виде

$$K_{Rj} = P_{Rj} + M_{Rj} = J X_{R,i} r_{ij}, \quad (1.42)$$

где величины

$$P_{Rj} = J X_{Rj} \sigma_{ij} = x_{j,L} \tau_{RL}^*, \quad (1.43)$$

$$M_{Rj} = J X_{R,i} T_{ij} \quad (1.44)$$

– механический и максвелловский тензоры напряжений Пиолы-Кирхгофа соответственно.

Выполняя дифференцирование соотношения (1.42), получим:

$$\frac{\partial(JX_{R,j})}{\partial X_R} + JX_{R,j} \frac{\partial r_{ij}}{\partial X_R} = J \frac{\partial X_R}{\partial x_j} \frac{\partial r_{ij}}{\partial X_R} = Jr_{ij,j}. \quad (1.45)$$

Первый член в левой части (3.11) исчезает в силу тождества Пиолы [16]:

$$(JX_{R,j})_{,R} = 0. \quad (1.46)$$

Используя результат (1.45) и определение (1.9), преобразуем уравнение (1.35) к уравнению движения в материальном представлении:

$$J\rho\ddot{x}_i = \rho_0\ddot{x}_i = K_{Ri,R}. \quad (1.47)$$

Используя перемещение материальной частицы в форме

$$x_j(t) = \delta_{ij} [X_P + U_P(t)], \quad (1.48)$$

перепишем (1.47) в виде:

$$\rho_0\delta_{iP}\ddot{U}_P = K_{Ri,R}. \quad (1.49)$$

Пренебрегая максвелловскими электростатическими напряжениями, упростим тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа  $K_{Rj}$  (1.42), который теперь будет совпадать с (1.43) – механическим тензором напряжений Пиолы-Кирхгофа.

Представим входящие в (1.49) термодинамические переменные в виде суперпозиции статической и динамической частей:

$$\begin{aligned} U_P &= \bar{U}_P + \tilde{U}_P, \\ P_{Lj} &= \bar{P}_{Lj} + \tilde{P}_{Lj}, \\ \tau_{LM} &= \bar{\tau}_{LM} + \tilde{\tau}_{LM}. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Принцип суперпозиции справедлив в предположении малости динамических упругих смещений (и других связанных с ними величин). Подстановка уравнения перемещения материальной точки (1.24) в левую часть (1.49) дает:

$$\begin{aligned} \rho_0\ddot{x}_j(X_F, t) &= \rho_0 \frac{d^2}{dt^2} [\delta_{jF} (X_F + \bar{U}_F)] + \rho_0\delta_{j\beta}\xi_{\beta,P}\ddot{U}_P(X, t) = \\ &= \rho_0\delta_{j\beta}\xi_{\beta,P}\ddot{U}_P(X, t). \end{aligned} \quad (1.51)$$

При записи (1.51) учитывалось, что градиенты деформации из исходной в промежуточную конфигурации, начальные координаты и статические смещения от времени не зависят. Подстановка в определение (1.43) второго и третьего соотношений (1.50) с учетом (1.24) дает:

$$P_{Lj} = \bar{P}_{Lj} + \tilde{P}_{Lj} = \delta_{j\beta}\xi_{\beta,M}\bar{\tau}_{LM} + \delta_{j\beta}\xi_{\beta,M}\tilde{\tau}_{LM} + \delta_{j\beta}\xi_{\beta,F}\tilde{U}_{F,M}\bar{\tau}_{LM}. \quad (1.52)$$

В (1.52) предполагалось, что выполняется условие однородности деформаций, вследствие чего равны нулю вторые производные вида  $\xi_{\beta,FL} = 0$ . Тогда статическая и динамическая части будут иметь вид:

$$\bar{P}_{Lj,L} = 0, \quad (1.53)$$

$$\check{P}_{Lj,L} = \rho_0 \delta_{j\beta} \xi_{\beta,P} \check{U}_P, \quad (1.54)$$

где

$$\bar{P}_{Lj} = \delta_{j\beta} \xi_{\beta,M} \bar{\tau}_{LM}, \quad (1.55)$$

$$\check{P}_{Lj} = \delta_{j\beta} \xi_{\beta,M} \check{\tau}_{LM} + \delta_{j\beta} \xi_{\beta,F} \check{U}_{F,M} \bar{\tau}_{LM}. \quad (1.56)$$

Упростим уравнение движения (1.54), подставив в него (1.56) и представляя результат в виде системы уравнений

$$\begin{aligned} \xi_{1,1} \Omega_1 + \xi_{1,2} \Omega_2 + \xi_{1,3} \Omega_3 &= 0, \\ \xi_{2,1} \Omega_1 + \xi_{2,2} \Omega_2 + \xi_{2,3} \Omega_3 &= 0, \\ \xi_{3,1} \Omega_1 + \xi_{3,2} \Omega_2 + \xi_{3,3} \Omega_3 &= 0, \end{aligned} \quad (1.57)$$

относительно неизвестных  $\Omega_i$ :

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= \rho_0 \check{U}_1 - \check{\tau}_{L1,L} - \check{U}_{1,ML} \bar{\tau}_{LM}, \\ \Omega_2 &= \rho_0 \check{U}_2 - \check{\tau}_{L2,L} - \check{U}_{2,ML} \bar{\tau}_{LM}, \\ \Omega_3 &= \rho_0 \check{U}_3 - \check{\tau}_{L2,L} - \check{U}_{3,ML} \bar{\tau}_{LM}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Система уравнений (1.57) является однородной и будет иметь нетривиальное решение, если  $\det |\xi_{\beta,L}| = 0$ . Однако, данный детерминант представляет собой также и якобиан перехода из исходной в промежуточную конфигурацию и поэтому не равен нулю:

$$\det |\xi_{\beta,L}| = \bar{J} = \frac{\rho_0}{\rho_1} \neq 0. \quad (1.59)$$

Следовательно, система уравнений (1.57) должна иметь только тривиальное решение:

$$\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega_3 = 0. \quad (1.60)$$

Подставляя (1.60) в (1.58), получим окончательный вид уравнений движения для описания распространения объемных акустических волн (ОАВ) малой амплитуды в статически деформированном кристалле, записанных в координатах исходного состояния:

$$\rho_0 \check{U}_M = \check{\tau}_{LM,L} + \check{U}_{M,AB} \bar{\tau}_{AB}. \quad (1.61)$$

Преимущество уравнений движения в такой форме записи состоит в том, что нет необходимости специально вычислять изменение плотности и линейных размеров (в том

числе и длину пути распространения акустической волны) образца кристалла в деформированном состоянии.

### 1.2.3 Тензор Кристоффеля

Уравнения “линейной” кристаллоакустики, когда распространение упругих волн малой амплитуды происходит в невозмущенном внешними воздействиями кристалле, можно получить, упрощая уравнение движения (1.61). Для этого примем во внимание, что тензор термодинамических напряжений  $\tau_{LM}$  следует заменить обычным тензором механических напряжений  $\sigma_{ij}$ , а тензор деформаций  $\eta_{LM}$  – тензором малых деформаций [16]:

$$e_{kl} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_k}{\partial x_l} + \frac{\partial U_l}{\partial x_k} \right). \quad (1.62)$$

Упрощаются и уравнения состояния, которые для термодинамических условий адиабатического распространения упругих волн в механически зажатой среде могут быть записаны в виде закона Гука для анизотропной среды:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl}, \quad (1.63)$$

Уравнение движения примет вид:

$$\rho_0 \ddot{U}_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}. \quad (1.64)$$

С учетом (1.62) и (1.63) получим

$$\rho_0 \ddot{U}_i = C_{ijkl} \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_j \partial x_l}. \quad (1.65)$$

Решения уравнений (1.65) ищем в виде плоских однородных волн упругих смещений:

$$U_i = U_i^0 \exp \left[ i \omega \left( t - \frac{N_j x_j}{v} \right) \right], \quad (1.66)$$

где  $N_j$  – единичный вектор волновой нормали,  $v$  – модуль фазовой скорости объемной акустической волны,  $\omega$  – ее циклическая частота. Выражение (1.66) справедливо в случае, когда закон дисперсии для фононов  $\omega = \omega(k)$  имеет линейный вид  $\omega = v \cdot k$ , что выполняется в длинноволновом (континуальном) приближении  $k \rightarrow 0$  ( $\lambda \rightarrow \infty$ , где  $\lambda$  – длина волны).

Поэтому подстановка (1.66) в (1.65) дает

$$\rho_0 v^2 U_i = C_{ijkl} N_j N_k U_l. \quad (1.67)$$

Вводя тензор Кристоффеля

$$\Gamma_{ij} = C_{ijkl} N_k N_l, \quad (1.68)$$

получим уравнения Кристоффеля:

$$(\Gamma_{ij} - \rho_0 v^2 \delta_{ij}) U_j = 0. \quad (1.69)$$

С математической точки зрения, соотношения (1.69) представляют собой систему из трех однородных уравнений относительно неизвестных  $U_i$  и являются задачей на собственные значения  $\lambda_{(p)} = \rho_0 v_{(p)}^2$  ( $p = 1, 2, 3$ ) и собственные векторы  $U_i^{(i)}$  тензора Кристоффеля  $\Gamma_{ij}$ . Эта система из трех однородных уравнений имеет нетривиальное решение, если выполняется условие

$$\det|\Gamma_{ij} - \lambda \delta_{ij}| = 0. \quad (1.70)$$

Решая характеристическое алгебраическое уравнение (1.70) третьей степени относительно  $\lambda_{(p)}$ , получают явный вид всех трех собственных значений в их взаимосвязи с упругими свойствами кристалла в данном кристаллофизическом направлении. Затем последовательной подстановкой каждого из собственных значений в систему уравнений (1.69) вычисляют направления собственных векторов  $U_i^{(i)}$  относительно направления волновой нормали. Тем самым удается определить тип упругой волны. В общем случае в данном направлении в кристалле распространяются три независимые упругие волны, отличающиеся скоростями и направлениями *поляризации* (упругого смещения)  $U_i^{(i)}$ . Важно отметить, что всегда выполняется условие ортогональности собственных векторов. Для удобства вычисления используют единичные векторы направления волновой нормали и упругих смещений:

$$N_1^2 + N_2^2 + N_3^2 = 1, \quad (1.71)$$

$$U_1^2 + U_2^2 + U_3^2 = 1. \quad (1.72)$$

Конкретный вид тензора Кристоффеля определяется направлением распространения и симметрией тензора упругих свойств, различной для кристаллов с разной точечной симметрией. Чистой (в узком смысле) продольной модой будем называть акустическую волну, для которой выполняется условие  $N \parallel U$  (рис. 1.2а). В этом случае сдвиговые волны также будут чистыми модами, подчиняющимися условию  $N \perp U$ . На рис. 1.2б приведен случай распространения ОАВ, в котором наблюдается одна чистая (в узком смысле) сдвиговая волна, квазисдвиговая и квазипродольная волны. На рис. 1.2в изображен общий случай распространения ОАВ, когда для всех трех волн векторы  $U$  не параллельны или не ортогональны вектору  $N$  (квазипродольная и квазисдвиговые волны, соответственно).

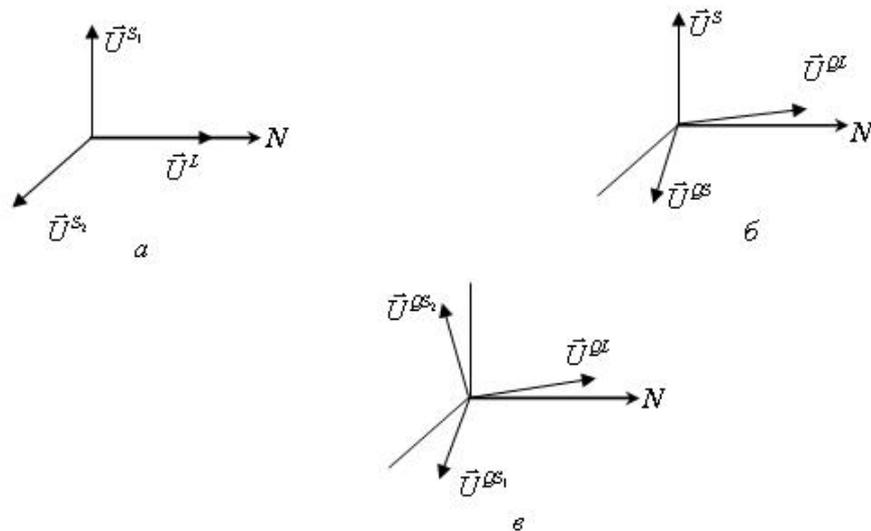


Рис. 1.2. Возможные случаи взаимного расположения поляризации сдвиговых и продольной волн относительно направления распространения  $N$ : а – продольная и две сдвиговые волны; б – квазипродольная, квазисдвиговая и чистая сдвиговая волны; в – квазипродольная и квазисдвиговые волны.

#### 1.2.4 Поток энергии упругих волн

Распространение упругой волны сопровождается переносом энергии. Особенностью, отличающей кристаллы от изотропной упругой среды, является то обстоятельство, что, за исключением некоторых особых направлений, называемых направлениями *чистых мод* (в широком смысле), поток энергии ОАВ отклоняется от направления волновой нормали на тот или иной угол, разный для разных мод и направлений распространения. Как правило, этот эффект с практической точки зрения затрудняет применение упругих волн в акустоэлектронных устройствах, и его следует учитывать или избегать путем использования направлений чистых мод.

Следуя [23, 24], рассмотрим перенос энергии упругих волн в кристаллах. Перенос энергии ОАВ может быть выражен через поток вектора Умова-Пойнтинга, равный количеству энергии, переносимой волной за единицу времени через единицу площади. Работа, совершаемая внешними силами в процессе деформации, преобразуется в твердом теле в потенциальную энергию упругой деформации. Как только внешние силы перестают действовать, энергия упругой деформации преобразуется в работу упругих сил, за счет чего тело принимает первоначальную форму. Работа внешних сил при деформации тела, затрачиваемая на приращение смещения  $dU_i$ , складывается из работы объемных и поверхностных сил:

$$\delta W = \int_V \rho g_i dU_i dV + \int_s p_i dU_i ds, \quad (1.73)$$

где  $\rho g_i$  – гравитационная сила, действующая на единицу массы,  $\rho$  – плотность вещества и  $p_i = \sigma_{ik}n_k$  – сила, действующая на единицу поверхности. Здесь тензор напряжений  $\sigma_{ik}$  представляет собой  $i$ -ю компоненту силы, действующей на единицу поверхности, перпендикулярной оси  $x_k$ .

Предположим, что в каждый момент устанавливается равновесное состояние, соответствующее величине приложенных сил. Тогда изменение состояния является термодинамически обратимым процессом и, следовательно, выполняются условия равновесия

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = 0. \quad (1.74)$$

Получим:

$$\delta W = \int_V \rho g_i dU_i dV + \int_s \sigma_{ik} dU_i n_k ds. \quad (1.75)$$

Второе слагаемое преобразуется к интегралу по объему:

$$\delta W = \int_V \rho g_i dU_i dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_k} (\sigma_{ik} dU_i) dV. \quad (1.76)$$

Взяв производную под знаком интеграла и перегруппировав слагаемые, в правой части равенства выделим под интегралом величину  $(\partial \sigma_{ik} / \partial x_k + \rho g_i)$ :

$$\delta W = \int_V \left( \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i \right) dU_i dV + \int_V \sigma_{ik} d \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right) dV. \quad (1.77)$$

Кинетическая энергия движения вещества входит в выражение (1.77) для работы, совершаемой внешними силами над твердым телом объема  $V_0$ :

$$\delta W = \int_{V_0} \left( \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i \right) dU_i dV + \int_{V_0} \sigma_{ik} d \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right) dV. \quad (1.78)$$

Действительно, сила, действующая на единицу объема,  $(\partial \sigma_{ik} / \partial x_k + \rho g_i)$ , не равна нулю

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = \rho \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2}. \quad (1.79)$$

Преобразуя второй член в (1.76), получаем

$$\delta W = \int_{V_0} \rho \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} dU_i dV + \int_{V_0} \sigma_{ik} dS_{ik} dV. \quad (1.80)$$

Поскольку  $dU_i$  представляет собой смещение за время  $dt$  ( $dU_i = (\partial U_i / \partial t) dt$ ), то первый член записывается в виде:

$$\int_{V_0} \rho \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} \frac{\partial U_i}{\partial t} dt dV = \int_{V_0} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial t} \right)^2 \right] dt dV = \int_{V_0} \frac{\partial E_c}{\partial t} dt dV, \quad (1.81)$$

где для плотности кинетической энергии введено обозначение

$$E_c = \frac{1}{2} \rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial t} \right)^2. \quad (1.82)$$

Работа сил, действующих на объем  $V_0$ , оказывается равной

$$\delta W = \int_{V_0} dE_c dV + \int_{V_0} d\Phi dV = \int_{V_0} d(E_c + \Phi) dV, \quad (1.83)$$

где  $d\Phi = \sigma_{ik} d\eta_{ik}$  – изменение потенциальной энергии единицы объема, т.е. внутренней энергии  $dU$  при постоянной энтропии (в адиабатических условиях) или свободной энергии  $dF$  при изотермических условиях. Работа внешних сил  $\delta W$  увеличивает полную упругую энергию  $E_0 = \int_{V_0} (E_c + \Phi) dV$  на величину  $E_0 = \delta W$ .

Энергия  $E$ , содержащаяся в объеме  $V$  тела, меняется с течением времени. Ее увеличение  $dE$  равно работе поверхностных сил  $p_i(n_i)$ , действующих на каждую точку поверхности раздела  $s$  со стороны окружающей среды:

$$dE = \int_s p_i dU_i ds, \quad (1.84)$$

или, после подстановки нормальной компоненты силы  $p_i = \sigma_{ik} n_k$  получим:

$$dE = \int_s \sigma_{ik} n_k dU_i ds. \quad (1.85)$$

Изменение энергии, содержащейся в объеме  $V$ , за единицу времени равно:

$$\frac{dE}{dt} = \int_s \sigma_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial t} n_k ds, \quad (1.86)$$

и (1.86) принимает вид

$$\frac{dE}{dt} + \int_s P_k n_k ds = 0. \quad (1.87)$$

Здесь введен вектор  $\mathbf{P}$  с компонентами

$$P_k = -\sigma_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial t}. \quad (1.88)$$

Из уравнения (1.87) видно, что изменение энергии, содержащейся в объеме  $V$ , обусловлено потоком вектора  $\mathbf{P}$  через поверхность  $s$ , ограничивающую объем  $V$ . Вектор  $\mathbf{P}$  называется *вектором Умова-Пойнтинга*, его направление является направлением распространения энергии, а его длина равна количеству энергии, переносимому через единицу поверхности, перпендикулярной к направлению распространения энергии, за единицу времени (плотность потока мощности). Обозначим через  $v^e$  скорость переноса энергии. Тогда  $P = E v^e$ . Вектор скорости переноса энергии (лучевая скорость), параллельный  $\mathbf{P}$ , выражается в виде

$$\vec{v}^e = \frac{\vec{P}}{E}. \quad (1.89)$$

В случае плоской упругой волны смещение  $U_i$  удовлетворяет соотношению

$$U_i = U_i^0 \exp \left[ i\omega \left( t - \frac{N_k x_k}{v} \right) \right]. \quad (1.90)$$

Подставляя

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} = -i\omega U_i \quad (1.91)$$

в (1.82), получаем для плотности кинетической энергии

$$E_c = \frac{1}{2} \rho U_i^2 \omega^2. \quad (1.92)$$

Плотность потенциальной энергии имеет вид:

$$\Phi = \frac{1}{2} C_{ijkl} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \frac{\partial U_l}{\partial x_k}. \quad (1.93)$$

После подстановки вида

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_j} = i\omega n_j \frac{U_i}{v}, \quad (1.94)$$

плотность потенциальной энергии принимает вид:

$$\Phi = \frac{1}{2} \omega^2 C_{ijkl} N_j N_k \frac{U_i^2}{v^2}. \quad (1.95)$$

Наконец, уравнение Кристоффеля после умножения на  $U_i^0$  дает

$$C_{ijkl} N_j N_k U_i^0 U_l^0 = \rho v^2 U_i^2. \quad (1.96)$$

Потенциальная энергия тогда выражается в виде:

$$\Phi = \frac{1}{2} \rho (U_i^0)^2 \omega^2. \quad (1.97)$$

Из сравнения (1.92) с (1.97) видно, что потенциальная и кинетическая энергии плоской волны равны при расчете на период изменения во времени. Это утверждение носит название *теоремы вириала*. Плотность полной энергии равна

$$E = \rho \omega^2 U_i^2. \quad (1.98)$$

Значение вектора Умова-Пойнтинга

$$P_i = -\sigma_{ij} \frac{\partial U_j}{\partial t} = -C_{ijkl} \frac{\partial U_l}{\partial x_k} \frac{\partial U_j}{\partial t} \quad (1.99)$$

с учетом соотношений (1.92) и (1.94) можно записать в виде

$$P_i = C_{ijkl} \frac{N_k}{v^2} U_j U_l. \quad (1.100)$$

Введем симметричный тензор 2-го ранга

$$P_{jk} = C_{ijkl} U_i U_l. \quad (1.101)$$

который называется *вторым тензором Кристоффеля*. Скорость переноса энергии получаем, разделив значение  $P_i$  на плотность полной энергии  $E$ :

$$v_i^e = C_{ijkl} \frac{U_j U_l N_k}{\rho v} = P_{ik} \frac{N_k}{\rho v}. \quad (1.102)$$

Вектор  $v^e$  дает направление и скорость переноса энергии, т.е. направление акустического луча. Если этот луч перпендикулярен плоскому фронту волны, т.е. параллелен вектору  $N$ , то говорят о распространении “чистой” моды в широком смысле.

### 1.3 Типы акустических волн в слоистых пьезоэлектрических структурах

Следуя [16], рассмотрим основные типы волн в слоистых структурах. Так, на границе раздела кристалл-вакуум распространяется поверхностная волна Рэлея. Смещение частиц происходит по эллипсу, лежащему в сагиттальной плоскости. Приближенно скорость ПАВ в изотропной среде можно оценить по формуле Викторова [25]:

$$\frac{v_R}{v_S} \approx \frac{0,718 - (v_S/v_L)^2}{0,75 - (v_S/v_L)^2}, \quad (1.103)$$

где  $v_R$  – скорость рэлеевской волны.

В определенных направлениях пьезоэлектрического кристалла, наряду с волной Рэлея, может существовать волна Блюстейна-Гуляева, поляризованная ортогонально сагиттальной плоскости и сопровождающаяся осциллирующим электрическим полем. Глубина проникновения волны Блюстейна-Гуляева оказывается намного больше длины волны, особенно для неметаллизированной свободной поверхности кристалла. Волны Блюстейна-Гуляева могут распространяться в плоскостях, параллельных осям симметрии четвертого порядка, причем в направлениях, перпендикулярных таким осям, т.е. в кристаллах всех пьезоэлектрических классов, кроме 1,  $m$ , 3,  $3m$ .

Волна Блюстейна-Гуляева относится к упругим волнам так называемого *SH*-типа (Shear Horizontal), т. е. горизонтально поляризованных волн, удовлетворяющих условию свободной поверхности, которые в общем случае соответствуют объемной сдвиговой волне и поверхностными становятся только при особых граничных условиях.

Нанесение на полубесконечный кристалл тонкого слоя другого кристаллического материала, сравнимого по толщине с длиной волны и жестко связанного с подложкой, приводит к трансформации *SH*-волны в волну Лява [26]. *Волной Лява* называют поверхностные волны с горизонтальной поперечной поляризацией, распространяющиеся в слое, нанесенном на полубесконечный кристалл (рис. 1.3). Этот слой играет роль

волновода, но частота отсечки, свойственная “классическому” волноводу, отсутствует. Значение фазовой скорости Лява находится в интервале между фазовыми скоростями объемных сдвиговых волн в слое и в подложке, что является обязательным условием существования волны. Волны Лява являются дисперсионными. Применение таких волн позволило создать новый класс дисперсионных линий задержки с шириной пропускания от единиц до сотен МГц [27-29]. На рис. 1.4 схематично изображены амплитуды векторов смещения первых трех мод волны Лява. С изменением частоты характер смещений частиц также изменяется: при увеличении частоты растет доля энергии, переносимой в слое и, напротив, на низких частотах почти вся энергия волны распространяется в подложке.

Наряду с волной Лява в слоистой системе также распространяется поверхностные дисперсионные волны рэлеевского типа различных порядков, поляризованные в сагиттальной плоскости.

К числу основных типов относятся также нормальные моды в кристаллических пластинах, толщина которых сравнима с длиной волны. Такие акустические волны являются дисперсионными и подразделяются на три группы: симметричные ( $S_n$ ) и антисимметричные ( $A_n$ ) волны Лэмба, и волны с поперечно-горизонтальной поляризацией ( $SH_n$ ) (рис. 1.5) [25]. Распространение упругой волны вдоль оси  $x_3$  в пьезоэлектрической пластине толщины  $h$  ( $0 \leq x_3 \leq h$ ) описывается уравнением Грина-Кристоффеля, но с учетом граничных условий:

- 1) равенства нулю нормальных компонент тензора напряжений на границах раздела  $\sigma_{3j} = 0$  при  $x_3 = h$  и  $x_3 = 0$ ;
- 2) непрерывности нормальной компоненты вектора электрической индукции слоя  $D_3 = D_3^{\text{вак}}$  при  $x_3 = h$  и  $x_3 = 0$ ;
- 3) непрерывности волны потенциала на границе “слой-вакуум”  $\Phi = \Phi^{\text{вак}}$  при  $x_3 = h$  и  $x_3 = 0$ .

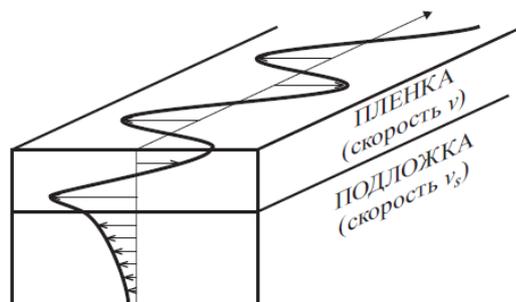


Рис. 1.3. Структура упругой волны на границе двух твердых тел – волны Лява

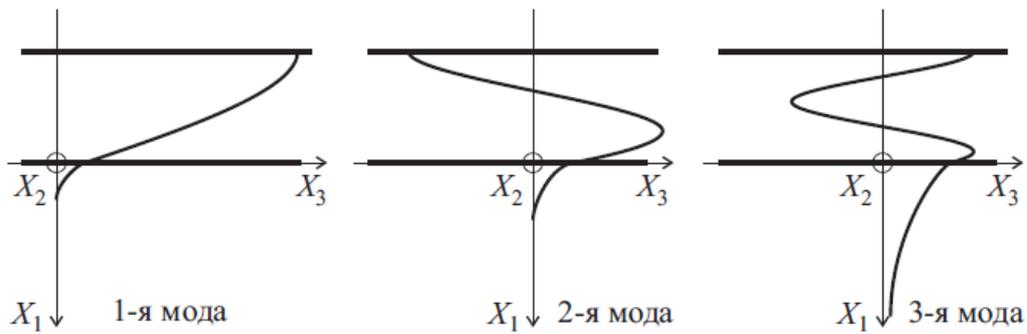


Рис. 1.4. Смещение частиц для первых трех мод волны Лява одинаковой частоты в слое плавленого кварца на кремнии

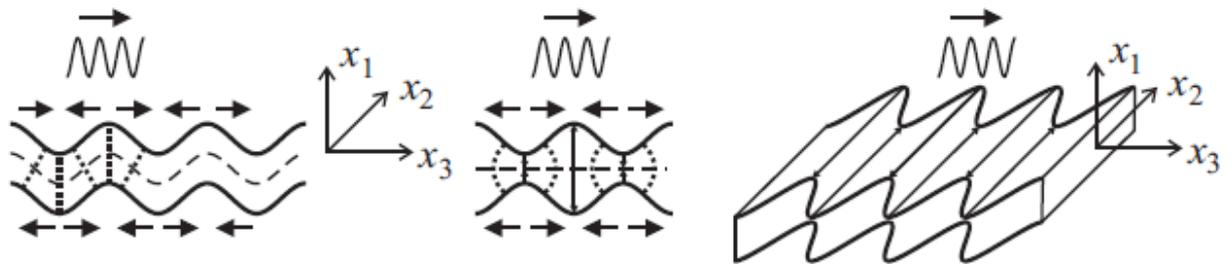


Рис. 1.5. Упругие волны в пластинах: а – симметричные ( $S$ ); б – антисимметричные ( $A$ ) волны Лэмба; в – поперечно–горизонтальные волны ( $SH$ )

При малых толщинах пластины ( $f \cdot h \rightarrow 0$ ) возможно распространение только мод нулевого порядка ( $S_0, A_0, SH_0$ ). Волны порядков выше нулевого появляются только при некоторых “критических” значениях  $f \cdot h$ . При больших толщинах пластины ( $f \cdot h \gg 1$ ) колебания высших мод, кроме  $S_0$  и  $A_0$ , становятся локализованными в толщине пластины, и амплитуды этих смещений на поверхности стремятся к нулю. Нулевые моды Лэмба, напротив, испытывают своеобразный “скин-эффект”, и их скорость стремится к скорости волны Рэлея [25].

Условия «критических» толщин  $d$  подложки, соответствующих «рождению» мод Лэмба, приведены в [25]:

$$\left. \begin{aligned} d &= \frac{\lambda_L}{2}, \frac{3\lambda_L}{2}, \frac{5\lambda_L}{2}, \dots \\ d &= \lambda_T, 2\lambda_T, 3\lambda_T, \dots \end{aligned} \right\} \text{для симметричных волн;}$$

$$\left. \begin{aligned} d &= \lambda_L, 2\lambda_L, 3\lambda_L, \dots \\ d &= \frac{\lambda_T}{2}, \frac{3\lambda_T}{2}, \frac{5\lambda_T}{2}, \dots \end{aligned} \right\} \text{для антисимметричных волн.}$$
(1.104)

Здесь  $\lambda_T$  и  $\lambda_L$  – длины волн объёмной сдвиговой и продольной волн соответственно. При критических частотах волновые числа стремятся к нулю, а фазовые скорости к бесконечности.

#### 1.4 Зависимость акустических свойств кристаллов от давления.

##### Коэффициенты управления

Будем считать, что кристалл подвержен действию однородного одноосного давления, в результате чего в нем возникают механические напряжения вида:

$$\bar{\tau}_{KL} = -PM_K M_L, \quad (1.105)$$

где  $P$  – величина давления (знак “минус” берется в случае сжатия),  $\mathbf{M}$  – единичный вектор направления силы давления. Учитывая, что алмаз не обладает пьезоэффектом, тензор Грина-Кристоффеля можно представить в виде [16]:

$$\Gamma_{BC}(\bar{\tau}) = \left[ \bar{C}_{FC} \left( C_{ABFD}^S + C_{ABFDPO}^S \bar{\eta}_{PQ} \right) + \bar{\tau}_{AD} \delta_{BC} \right] N_A N_D, \quad (1.106)$$

где введен тензор конечных статических деформаций Грина:

$$\bar{C}_{FC} = \delta_{FC} + 2\bar{\eta}_{FC}. \quad (1.107)$$

Учитывая, что для широкого круга кристаллов при не слишком высоких давлениях и вдали от фазовых переходов скорости упругих волн линейно зависят от давления, то и зависимость эффективных упругих постоянных от давления тоже будет линейной. Действительно, предполагая, что изменения скоростей ОАВ в этом случае малы, можно записать:

$$\begin{aligned} \Delta C^* &= \rho_0 \Delta \left[ v^2(\bar{\tau}) - v^2(0) \right] = \rho_0 \left[ v(\bar{\tau}) - v(0) \right] \left[ v(\bar{\tau}) + v(0) \right] \approx \\ &\approx 2\rho_0 v^2(0) \Delta v \sim \Delta v. \end{aligned} \quad (1.108)$$

Последовательно оставляя в (1.106) только члены, линейные по статическим напряжениям, получим:

$$\Gamma_{BC}(\bar{\tau}) = \left[ C_{ABCD}^S + \left( \delta_{KA} \delta_{LD} \delta_{BC} + 2C_{ABFD}^S S_{FCKL}^T + C_{ABCDPO}^{ST} S_{PQKL}^T \right) \bar{\tau}_{KL} \right] N_A N_D. \quad (1.109)$$

При записи (1.108) были использованы “статические” уравнения состояния (закон Гука) в форме:

$$\bar{\eta}_{PQ} = S_{PQKL}^T \bar{\tau}_{KL}, \quad (1.110)$$

где  $S_{PQKL}^T$  – упругие податливости, которые должны быть измерены при статическом нагружении образца. Обычно эти величины измеряются на низких частотах при использовании резонансных колебаний ориентированных образцов кристаллов, что соответствует изотермическим ( $T$ ) граничным условиям. Это же обстоятельство отражено и в изменении верхнего индекса в обозначениях модулей УПЗП, что соответствует адиабатически-изотермическим условиям опыта. Однако оценки показывают, что различия между адиабатическими коэффициентами УПЗП (которые измеряются, например, из экспериментов по генерации акустических гармоник мощной упругой

волны) и данными константами значительно ниже реальной точности их экспериментального определения.

В предположении о линейной зависимости  $v_i = f(\bar{\tau})$  удобно представить экспериментальные результаты и расчетные соотношения в виде так называемых *коэффициентов управления*:

$$\alpha_{v_i} = \frac{1}{v_i(0)} \left( \frac{\Delta v_i}{\Delta \bar{\tau}} \right)_{\Delta \bar{\tau} \rightarrow 0}, \quad (1.111)$$

которые представляют собой тангенсы углов наклонов относительных изменений скоростей звука от давления.

Рассмотрим высокосимметричные кубические кристаллы. Для них матрицы модулей УП2П, упругих податливостей и УП3П приведены в приложении Б. Проанализируем случай  $N \parallel [100]$ ,  $M \parallel [010]$  (давление перпендикулярно распространения волны). Учитывая (1.109) и симметрию тензоров, имеем:

$$\Gamma_{ij} = \begin{pmatrix} \Gamma_{11} & 0 & 0 \\ & \Gamma_{22} & 0 \\ & & \Gamma_{33} \end{pmatrix}, \quad (1.112)$$

где

$$\begin{aligned} \Gamma_{11} &= C_{11} + P[1 + 2C_{11}S_{12} + C_{111}S_{12} + C_{112}(S_{11} + S_{12})], \\ \Gamma_{22} &= C_{44} + P[1 + 2C_{44}S_{11} + C_{144}S_{12} + C_{155}(S_{11} + S_{12})], \\ \Gamma_{33} &= C_{44} + P[1 + 2C_{44}S_{12} + C_{144}S_{12} + 2C_{155}S_{12}]. \end{aligned} \quad (1.113)$$

Обозначая  $A = \frac{1}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$  и учитывая соотношения между упругими податливостями и модулями упругости

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}, \\ S_{12} &= -\frac{C_{12}}{(C_{11} - C_{12})}, \\ S_{44} &= \frac{1}{C_{44}}, \end{aligned} \quad (1.114)$$

а также принимая во внимание (1.111), получим коэффициенты управления для объемных акустических волн:

$$\alpha_{v_i} = \frac{A}{2\lambda_1^0} [C_{11}C_{112} - C_{12}(2C_{11} + C_{111})], \quad (1.115)$$

$$\alpha_{v_2} = \frac{A}{2\lambda_2^0} [C_{11}(2C_{44} + C_{155}) + C_{12}(2C_{44} - C_{144})],$$

$$\alpha_{v_3} = \frac{A}{2\lambda_3^0} [C_{11}C_{144} - C_{12}(2C_{44} - C_{144} + 2C_{155})],$$

где собственные значения равны:

$$\lambda_1^0 = C_{11}, \quad N \parallel [100], U \parallel [100], \text{ продольная волна;}$$

$$\lambda_2^0 = C_{44}, \quad N \parallel [100], U \parallel [010], \text{ сдвиговая волна;} \quad (1.116)$$

$$\lambda_3^0 = C_{44}, \quad N \parallel [100], U \parallel [001], \text{ сдвиговая волна.}$$

Выбирая различные комбинации векторов  $N$  и  $M$ , аналогично находим коэффициенты управления, необходимые для отдельного вычисления модулей УПЗП. Зная теоретическую зависимость коэффициентов управления от упругих постоянных, можно выразить независимые модули УПЗП через коэффициенты управления. Таким образом, можно рассчитать коэффициенты УПЗП для, например, алмаза (точечная группа симметрии  $m\bar{3}m$ ). Все полученные уравнения для коэффициентов управления в кристаллах симметрии  $m\bar{3}m$  приводятся в приложении В.

### 1.5 Параметр Грюнайзена

Силловые постоянные реальных кристаллов зависят от межатомных расстояний и в общем случае от других параметров решетки (например, от углов между связями) [30]. Упругие постоянные также зависят от изменения температуры – так, при нагреве среднее положение атомов в силу несимметричности потенциала взаимодействия увеличивается. Значения упругих постоянных обычно уменьшаются, что связано с ослаблением химических связей при увеличении межатомного расстояния. Этот вопрос рассмотрен в, например, в [31]. Исторически первой теорией, учитывающей ангармонизм колебаний решетки, была основанная на теории Дебая теория Грюнайзена. Ограничимся упрощенным рассмотрением, приведенным Грюнайзеном [32]. Если кристалл испытывает расширение (относительное увеличение объема)  $\Delta = \Delta V/V$ , то в результате происходит уменьшение частот фононов  $\omega^i$  с волновыми векторами  $k_l$  в соответствии с соотношением Грюнайзена:

$$\omega^i(k_l) = \omega^{i0}(k_l) [1 - \gamma^i(k_l)\Delta]. \quad (1.117)$$

Здесь  $\omega^{i0}$  – частота  $i$ -ой моды кристалла в отсутствие деформации, а  $\gamma^i(k_l)$  – коэффициент ангармоничности для каждой  $i$ -ой моды (частный параметр Грюнайзена). Усредняя частный параметр Грюнайзена, можно получить общий параметр Грюнайзена (далее – ПГ) как:

$$\gamma = \frac{\sum_i C_i \gamma_i}{\sum_i C_i}, \quad (1.118)$$

где  $C_i$  – вклад  $i$ -й моды в теплоемкость единицы объема. В своем первоначальном представлении Грюнайзен принял, что все значения  $\gamma_j^i$  равны среднему значению  $\gamma$ .

Принимая это упрощение, можно получить для коэффициента линейного расширения:

$$\alpha = \frac{d\Delta}{dT} = \gamma \frac{C_V}{B}, \quad (1.119)$$

где  $C_V$  – теплоемкость единицы объема (Дж/м<sup>3</sup>·град), а  $B = 1/3(C_{11} + C_{12})$  – объемный модуль упругости. Значения  $\gamma$  для большинства твердых тел лежат в пределах от 1 до 2.

Как видно из (1.117), частный параметр Грюнайзена зависит от типа волны и частоты.

Параметр Грюнайзена, который может быть получен из температурных измерений, для кубических кристаллов или твёрдой изотропной среды, можно вычислить из соотношения (закон Грюнайзена):

$$\gamma = \frac{\alpha(C_{11} + 2C_{12})}{C_V} = \frac{3\alpha B}{C_V}. \quad (1.120)$$

Однако существует и другие способы определения высокотемпературного параметра Грюнайзена. В работе [33] на основе теории упругости, молекулярной акустики и термодинамики, выполняя усреднение по частотам фононов, получили следующее уравнение для параметра Грюнайзена:

$$\gamma = \frac{3}{2} \left( \frac{B_A}{\rho v_{ск}^2} \right), \quad (1.121)$$

где  $B_A$  – адиабатический модуль объемного сжатия,  $v_{ск}^2$  – среднеквадратичная скорость, определяемая по формуле

$$v_{ск}^2 = \frac{v_L^2 + 2v_S^2}{3}. \quad (1.122)$$

Параметр Грюнайзена может выражаться через, например, коэффициент Пуассона  $\mu$  [34]:

$$\gamma = \frac{3}{2} \left( \frac{1 + \mu}{2 - 3\mu} \right). \quad (1.123)$$

В работе [35] изучена взаимная корреляция между формулами (1.1) и (1.3), для ряда кристаллических твердых тел получено хорошее соответствие между результатами. Такое разнообразие выражений для определения параметра Грюнайзена, наряду с трудностями экспериментального определения тензора  $\gamma_{jk}^{(i)}$  для конкретной акустической моды, делает расчет затухания менее точным. Как показано в [36], в различных работах по алмазу коэффициент  $\mu$  принимает значения от 0,07 до 0,2, что в результате сказывается на

значении параметра Грюнайзена, определенного по формуле (1.3):  $\gamma = 0,9 \dots 1,3$ . Мы считаем такой разброс значений коэффициента Пуассона в алмазе не соответствующим действительности, тогда как, используя известную формулу, можно получить  $\mu = -S_{12}/S_{11} = 0,16$ . Таким образом, можно оценить ПГ для алмаза по формуле (1.3):  $\gamma = 1,16$ .

Используя экспериментальные данные [37] и исходя из выражения (9), нами было получено значение  $\gamma = 0,74$ . В [38] приводится значение  $\gamma = 1,54$ , полученное из первопринципных расчётов, в то время как в [39] из спектроскопических данных было получено  $\gamma = 0,8$ . Кроме того, в [39] были получены частные параметры Грюнайзена для продольных акустических мод: в направлении [100]  $\gamma_{100}^L = 1,3$  и в направлении [111]  $\gamma_{111}^L = 1,1$ .

#### 1.6 Расчет мощности упругих волн, излучаемых тонкоплёночным пьезоэлектрическим преобразователем. Форм-фактор

В современных конструкциях акустических резонаторов, линий задержки, в фильтрах и т.п. широко применяют тонкоплёночные пьезоэлектрические преобразователи (ТПП). Как видно из рис. 1.6 ([24]), такой преобразователь состоит из плёнки пьезоэлектрического материала, на которую нанесены два металлических электрода. Электрическое поле сигнала, приложенное к электродам, вызывает колебания пьезоэлектрика с амплитудой, составляющей малую долю длины упругой волны. Пусть ТПП располагается на торце звукопровода. Звуковой пучок, сечение которого определяется внешним электродом, проходит через внутренний электрод и затем в звукопровод. Ориентация пьезоэлектрика выбирается таким образом, чтобы преимущественно возбуждалась желаемая упругая мода. Например, в случае окиси цинка или нитрида алюминия для возбуждения продольных волн ось 6-го порядка должна быть параллельна направлению электрического поля. Преобразователь устанавливается таким образом, чтобы в звукопроводе распространялась чистая мода, и чтобы поток энергии был направлен вдоль оси звукопровода.

Анализ работы ТПП может быть проведен двумя способами. Первый состоит в непосредственном расчете мощности упругих волн с использованием уравнений распространения волн в каждой среде с учетом соответствующих граничных условий. Второй способ основан на том, что преобразователь и звукопровод представляют с помощью эквивалентных электрических схем, а затем к ним применяют законы Кирхгофа.

Рассмотрим практически важный случай, когда в среде возбуждается и распространяется единственная (продольная или сдвиговая) волна. Это условие накладывает известные ограничения на упругие и пьезоэлектрические постоянные.

Условия применимости одномерной модели. На рис. 1.7 указано расположение осей координат  $x'_1, x'_2, x'_3$  (обозначения  $x_1, x_2, x_3$  используются для кристаллографических осей). Толщина  $d_2$  пьезоэлектрика, в котором происходит возбуждение упругих волн, мала по сравнению с другими размерами. Можно считать, что электрическое поле параллельно  $x'_3$ , а плоскости  $x'_3 = const$  являются плоскостями равной фазы. Направление распространения, параллельное  $x'_3$ , сохраняется на каждой из границ:  $n'_1 = n'_2 = 0, n'_3 = 1$ .

Продольная волна может распространяться вдоль оси  $x_3$ , если последняя является главной осью тензора Кристоффеля, т.е.  $\Gamma'_{13} = \Gamma'_{23} = 0$ . При условии  $n'_1 = n'_2 = 0, n'_3 = 1$ , следует [17], что:

$$C'_{34} = C'_{35} = 0. \quad (1.124)$$

Для заданной геометрии, согласно [40], имеем:

$$e'_{34} = e'_{35} = 0. \quad (1.125)$$

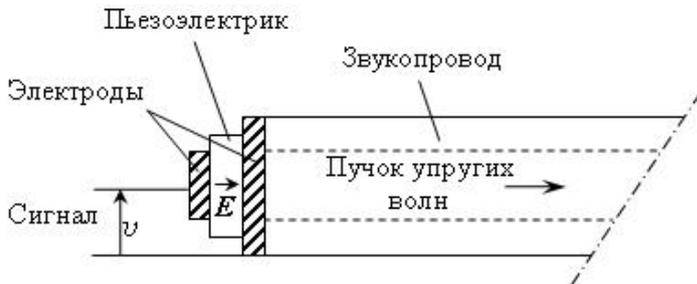


Рис. 1.6. Структура ТПП для объемных акустических волн

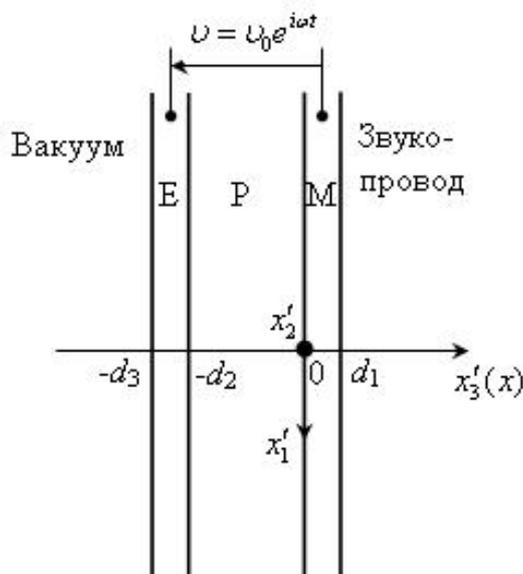


Рис. 1.7. Схематичное изображение ТПП на звукопроводе

Отличие от нуля пьезомодуля  $e'_{33}$  позволяет возбуждать продольную волну с помощью электрического поля, параллельного  $x'_3$ . Аналогичным способом можно получить следующие условия возбуждения и распространения сдвиговой волны, поляризованной вдоль  $x'_1$ :

$$C'_{45} = C'_{35} = 0, \quad e'_{33} = e'_{34} = 0, \quad e'_{35} \neq 0. \quad (1.126)$$

Систему уравнений, описывающих поведение бесконечной пьезоэлектрической пластины

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}^E \eta_{kl} - e_{kij} E_k, \quad (1.127)$$

$$D_k = e_{kij} \eta_{ij} + \varepsilon_{kl}^n E_l,$$

можно представить в виде:

$$\sigma = C^E \frac{\partial U}{\partial x} - eE, \quad (1.128)$$

где  $x = x'_3$ ,  $E = E'_3$ , а другие обозначения зависят от того, продольные или сдвиговые волны рассматриваются. Для продольных волн нужно брать:

$$\sigma = \sigma'_{33}, \quad U = U'_3, \quad C^E = C'_{33}, \quad e = e'_{33}, \quad (1.129)$$

Смещение и напряжение в каждой из частей ТПП даются выражениями:

$$U_S = a_S e^{-ik_S x} + b_S e^{ik_S x}, \quad (1.130)$$

$$\sigma_S = -ik_S C_S^E (a_S e^{-ik_S x} - b_S e^{ik_S x}) - eE \delta_{SP}, \quad (1.131)$$

где в качестве  $S$  нужно подставлять  $M$  для электрода-подложки,  $P$  – для пьезоэлектрика,  $E$  – для внешнего электрода (рис. 1.7). Символ Кронекера  $\delta$  показывает, что член  $eE$  существует только в пьезоэлектрике. В уравнениях (1.130) и (1.131) опущен множитель  $e^{i\omega t}$ , поскольку все соотношения линейны. В звукопроводе волна является бегущей, т.е.

$$U = a e^{-ikx}, \quad (1.132)$$

$$\sigma = -ikCa e^{-ikx}, \quad (1.133)$$

где  $C$  – собственное значение распространяющейся в звукопроводе ОАВ. Семь неизвестных  $a$ ,  $a_M$ ,  $b_M$ ,  $a_P$ ,  $b_P$ ,  $a_E$ ,  $b_E$  определяются из семи уравнений с граничными условиями, учитывающими непрерывность смещений и напряжений на границе между подложкой и образцом:

$$U_M(d_1) = U(d_1), \quad (1.134a)$$

$$\sigma_M(d_1) = \sigma(d_1), \quad (1.134b)$$

между пьезоэлектриком и подложкой:

$$U_P(0) = U_M(0), \quad (1.135a)$$

$$\sigma_P(0) = \sigma_M(0), \quad (1.1356)$$

и между внешним электродом и пьезоэлектриком:

$$U_E(-d_2) = U_P(-d_2), \quad (1.136a)$$

$$\sigma_E(-d_2) = \sigma_P(-d_2). \quad (1.1366)$$

На свободной поверхности внешнего электрода выполняется соотношение

$$\sigma_E(-d_2) = 0. \quad (1.137)$$

Решение этой системы дает значения амплитуд  $a$ ,  $a_S$  и  $b_S$  в виде функций от электрического поля на границах 0 и  $-d_2$  пьезоэлектрика. Практически измеряемой величиной является разность потенциалов  $v = v_0 e^{i\omega t}$ , приложенная к электродам, причем

$$v_0 = \int_0^{-d_2} -E dx. \quad (1.138)$$

С другой стороны, в силу одномерности задачи, уравнение Пуассона для диэлектрика  $\partial D'_i / \partial x'_i = 0$  сводится в рассматриваемом случае к  $\partial D'_3 / \partial x'_3 = 0$ . Составляющая вектора электрической индукции  $D'_3 = D$  является величиной постоянной и выражается формулой (1.127):

$$D = \varepsilon^n E + e \frac{\partial U_P}{\partial x}, \quad \varepsilon^n = \varepsilon'_{33}. \quad (1.139)$$

Интегрирование от 0 до  $-d_2$  дает

$$-D d_2 = -\varepsilon^n v_0 + e [U_P(-d_2) - U_P(0)]. \quad (1.140)$$

Исключая  $E$  из соотношений (1.128) и (1.139), получаем явное выражение модуля упругости пьезоэлектрика при постоянном  $D$ :  $C^D = C^E + e^2 / \varepsilon^n$ , откуда

$$\sigma_P = C_P^E \frac{\partial U_P}{\partial x} - \frac{e}{\varepsilon^n} D. \quad (1.141)$$

Подставляя в (1.140) выражение для смещения из (1.130), получаем

$$D = \frac{\varepsilon^n v_0}{d_2} - \frac{e}{d_2} [a_P (e^{ik_P d_2} - 1) + b_P (e^{-ik_P d_2} - 1)], \quad (1.142)$$

отсюда для напряжения  $\sigma_P$  находим

$$\sigma_P = -ik_P C_P^D \left\{ a_P \left[ e^{-ik_P x} + \frac{ie^2}{\varepsilon^n C_P^D k_P d_2} (e^{ik_P d_2} - 1) - b_P [\text{к.с.}] \right] \right\} - e \frac{v_0}{d_2}, \quad (1.143)$$

где [к.с.] обозначает комплексно сопряженную величину.

Множитель  $e^2/(\varepsilon^{\text{II}}C_p^D k_p d_2)$  содержит квадрат коэффициента электромеханической связи  $K^2 = e^2/(\varepsilon^{\text{II}}C_p^E + e^2) = e^2/\varepsilon^{\text{II}}C_p^D$ . Толщина пьезоэлектрической пластинки  $d_2$  примерно равна половине длины волны, и выполняется  $k_p d_2 \approx \pi$ , поэтому отношение

$$\frac{e^2}{\varepsilon^{\text{II}}C_p^E k_p d_2} = \frac{K^2}{k_p d_2} \approx \frac{K^2}{\pi} \quad (1.144)$$

мало по сравнению с 1 для типичного пьезоэлектрика ( $K < 0,3$ , т. е.  $K^2 < 0,1$ ), и напряжение  $\sigma_p$  выражается в виде функции от разности потенциалов  $v_0$ :

$$\sigma_p = -ik_p C_p^D (a_p e^{-ik_p x} - b_p e^{ik_p x}) - e \frac{v_0}{d_2}. \quad (1.145)$$

Выражая амплитуду через  $v_0$ , можно вычислить полезную акустическую мощность:

$$P = \frac{1}{2} Z \omega^2 |a|^2 A, \quad (1.146)$$

где  $Z = \rho v$  – акустический импеданс в расчете на единицу поверхности звукопровода,  $A$  – площадь сечения пучка. В общем случае решение может быть получено только численным путем с использованием вычислительной техники (и особенно при наличии дополнительных слоев в структуре преобразователя), поскольку алгебраические выражения быстро усложняются по мере роста числа параметров, а интерпретация результатов становится затруднительной.

Рассмотрим пьезоэлектрическую структуру, которая соответствует высокочастотному преобразователю, состоящему из тонкого слоя пьезоэлектрика, нанесенного на подложку. В этом случае необходимо учитывать влияние тонкого нижнего (внутреннего) электрода. Для заданной пары материалов пьезоэлектрик – звукопровод мы проанализируем влияние материала и толщины электрода и подложки на частотную характеристику преобразователя.

### 1.6.1 Система пьезоэлектрик – звукопровод

Используя обозначения рисунка 1.7, запишем граничные условия:

$$\begin{aligned} U_p(0) - U(0) &= 0, \\ \sigma_p(0) - \sigma(0) &= 0, \\ \sigma_p(-d) &= 0. \end{aligned} \quad (1.147)$$

Отсюда, используя выражение для  $\sigma_p$  из (1.145) и вводя обозначение  $\varphi = k_p d$ , получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned}
a_p + b_p - a &= 0, \\
k_p C_p a_p - k_p C_p b_p - kCa &= i \frac{ev_0}{d}, \\
k_p C_p a_p e^{i\varphi} - k_p C_p b_p e^{-i\varphi} &= i \frac{ev_0}{d},
\end{aligned} \tag{1.148}$$

где  $C_p$  – модуль упругости пьезоэлектрика при постоянной индукции  $D$ . Вводя акустические импедансы двух рассматриваемых сред  $Z_p = k_p C_p / \omega$  и  $Z = kC / \omega$ , преобразуем эту систему к виду:

$$\begin{aligned}
a_p + b_p &= a, \\
\frac{Z_p}{Z} (a_p - b_p) &= a + i \frac{ev_0}{\omega d Z}, \\
\frac{Z_p}{Z} (a_p - b_p) \cos \varphi + i \frac{Z_p}{Z} (a_p + b_p) \sin \varphi &= i \frac{ev_0}{\omega d Z}.
\end{aligned} \tag{1.149}$$

Уравнение

$$\left( a + i \frac{ev_0}{\omega d Z} \right) \cos \varphi + i \frac{Z_p}{Z} a \sin \varphi = i \frac{ev_0}{\omega d Z} \tag{1.150}$$

позволяет найти неизвестную амплитуду  $a$ :

$$a = i \frac{ev_0}{\omega d Z} \frac{1 - \cos \varphi}{\cos \varphi + i \frac{Z_p}{Z} \sin \varphi} = 2i \frac{ev_0}{\omega d Z m_0}, \tag{1.151}$$

где

$$m_0 = \left( \cos \varphi + i \frac{Z_p}{Z} \sin \varphi \right) / \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \tag{1.152}$$

Согласно формуле (1.146), мощность упругих волн

$$P = \frac{2e^2 v_0^2}{\varepsilon^n d Z |m_0|^2} \frac{\varepsilon^n A}{d} \tag{1.153}$$

пропорциональна квадрату коэффициента электромеханической связи  $K^2 = e^2 / \varepsilon^n C_p$  и емкости  $C_0 = \varepsilon^n A / d$  жестко закрепленного преобразователя, т. е.

$$P = \frac{2K^2 C_0 C_p}{d Z M_0} v_0^2, \tag{1.154}$$

где форм-фактор  $M_0$  определяется выражением:

$$M_0 = |m_0|^2 = \frac{\cos^2 \varphi + \left( \frac{Z_p}{Z} \right)^2 \sin^2 \varphi}{\sin^2 \frac{\varphi}{2}}. \tag{1.155}$$

Введем резонансную частоту пьезопреобразователя, для которой толщина преобразователя  $d$  равна половине длины волны,  $f_p = v_p/2d$ . Поскольку  $C_p = Z_p v_p$ , средняя мощность упругих волн может быть выражена так:

$$P = 4K^2 C_0 f_p \frac{Z_p}{Z M_0} v_0^2. \quad (1.156)$$

В последнем выражении от частоты зависит лишь форм-фактор  $M_0$  (в силу частотной зависимости угла  $\varphi$ :  $\varphi = k_p d = \pi f/f_p$ ). Как следует из (1.155),

$$M_0 \left( \frac{f}{f_p} \right) = \frac{\left( \cos \pi \frac{f}{f_p} \right)^2 + \left( \frac{Z_p}{Z} \sin \pi \frac{f}{f_p} \right)^2}{\left( \sin \frac{\pi}{2} \frac{f}{f_p} \right)^4}. \quad (1.157)$$

При постоянной амплитуде электрического напряжения  $v_0$  форм-фактор определяет частотную характеристику преобразователя. Сопротивление излучения  $R_A$ , которое определяется соотношением  $P = \frac{v_0^2}{2R_A}$ , оказывается пропорциональным  $M_0$ :

$$R_A = \frac{1}{8K^2 C_0 f_p} \frac{Z}{Z_p} M_0. \quad (1.158)$$

Зависимость частотных характеристик преобразователя от соотношения акустических импедансов  $Z_p/Z$  характеризует изменение величины

$$10 \lg \left( M_0 \frac{Z}{Z_p} \right) = 10 \lg (8K^2 C_0 f_p R_A) \quad (1.159)$$

как функции приведенной частоты для различных значений  $Z_p/Z$ . Ход этих зависимостей объясняется следующим образом. Если импеданс звукопровода (подложки) мал по сравнению с импедансом пьезоэлектрика, то поверхности преобразователя можно считать практически свободными, и преобразователь резонирует на половине длины волны (например, для  $Z_p/Z = 2$ ). Поэтому при  $f = f_p$  сопротивление излучения имеет минимум, который соответствует максимуму мощности возбуждаемых упругих волн. Если же, наоборот,  $Z$  велико по сравнению с  $Z_p$  (например,  $Z_p/Z = 0,5$  или  $0,25$ ), преобразователь, у которого одна поверхность свободна, а другая оказывается достаточно закрепленной, резонирует на частотах, соответствующих  $\lambda_p/4$  и  $3\lambda_p/4$ . Сопротивление излучения оказывается минимальным вблизи значений  $f = 0,5f_p$  и  $f = 1,5f_p$ . Значение  $Z_p/Z = 1/\sqrt{2}$  является критическим. При меньших значениях отношения  $Z_p/Z$  кривые форм-фактора имеют уже два минимума. Вблизи критического значения  $Z_p/Z$  форма частотной

характеристики преобразователя приближается к прямоугольной с достаточно широкой плоской частью по обе стороны от резонансной частоты  $f_p$ .

### 1.6.2 Система пьезоэлектрик – электроды – звукопровод

Граничные условия для этой системы даются уравнениями (1.134а), (1.134б) и (1.135а), (1.135б) и соотношением  $\sigma_P(-d_2) = 0$ . Используя выражение (1.145) для  $\sigma_P$  и вводя обозначения  $\varphi_M = k_M d_1$  и  $\varphi_P = k_P d_2$ , запишем полученные граничные условия в следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned}
 a_M e^{-i\varphi_M} + b_M e^{i\varphi_M} - a e^{-ikd_1} &= 0, \\
 k_M C_M a_M e^{-i\varphi_M} - k_M C_M b_M e^{i\varphi_M} - k C a e^{-ikd_1} &= 0, \\
 a_P + b_P - a_M - b_M &= 0, \\
 k_P C_P a_P - k_P C_P b_P - k_M C_M a_M + k_M C_M b_M &= i \frac{e v_0}{d_2}, \\
 k_P C_P a_P e^{i\varphi_P} - k_P C_P b_P e^{-i\varphi_P} &= i \frac{e v_0}{d_2}.
 \end{aligned} \tag{1.160}$$

Эту систему можно записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & e^{-i\varphi_M} & e^{i\varphi_M} & -1 \\ 0 & 0 & e^{-i\varphi_M} & e^{i\varphi_M} & -\frac{Z}{Z_M} \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & -\frac{Z}{Z_P} & -\frac{Z}{Z_P} & 0 \\ e^{i\varphi_P} & -e^{-i\varphi_P} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_P \\ b_P \\ a_M \\ b_M \\ a e^{-ikd_1} \end{pmatrix} = \frac{i e v_0}{\omega Z_P d_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{1.161}$$

где введены импедансы трех сред:

$$Z_P = k_P C_P / \omega, \quad Z_M = k_M C_M / \omega, \quad Z = k C / \omega. \tag{1.162}$$

Неизвестная величина  $a e^{-ikd_1}$  находится с помощью правила Крамера:

$$a e^{-ikd_1} = \frac{i e v_0}{\omega Z_P d_2} \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{2 i e v_0}{\omega Z_P d_2 m}, \tag{1.163}$$

где

$$m = 2 \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{\cos \varphi_P \cos \varphi_M - \frac{Z_P}{Z_M} \sin \varphi_P \sin \varphi_M + i \left( \frac{Z_M}{Z} \cos \varphi_P \sin \varphi_M + \frac{Z_P}{Z} \sin \varphi_P \cos \varphi_M \right)}{\sin^2 \frac{\varphi_P}{4}}. \tag{1.164}$$

Если в формуле (1.156) заменить  $M_0$  на форм-фактор  $M = |m|^2$  и ввести резонансные частоты  $f_M$  и  $f_P$  электрода и пьезоэлектрической пленки соответственно, то для акустической мощности, передаваемой в звукопровод, получим следующее выражение:

$$P = 4 \frac{Z_P}{Z} \frac{K^2}{M} C_0 f_P v_0^2, \quad (1.165)$$

где  $f_M = v_M/2d_1$ ,  $f_P = v_P/2d_2$ . Сопротивление излучения

$$R_A = \frac{ZM}{8Z_P K^2 C_0 f_P} \quad (1.166)$$

пропорционально форм-фактору  $M$ , который зависит от частоты через углы  $\varphi_P = k_P d_2 = \pi f/f_P$ ,  $\varphi_M = \pi f/f_M$ . Из выражения (1.164) получаем:

$$M\left(\frac{f}{f_P}, \frac{f}{f_M}\right) = \frac{\left(\cos \frac{\pi f}{f_P} \cos \frac{\pi f}{f_M} - \frac{Z_P}{Z_M} \sin \frac{\pi f}{f_P} \sin \frac{\pi f}{f_M}\right)}{\left(\sin \frac{\pi f}{2 f_P}\right)^4} + \frac{\left(\frac{Z_M}{Z} \cos \frac{\pi f}{f_P} \sin \frac{\pi f}{f_M} + \sin \frac{\pi f}{f_P} \cos \frac{\pi f}{f_M}\right)}{\left(\sin \frac{\pi f}{2 f_P}\right)^4} \quad (1.167)$$

Легко убедиться, что это выражение переходит в выражение для  $M_0$ , когда толщина электрода стремится к нулю ( $f_M \rightarrow \infty$ ), т.е.

$$M\left(\frac{f}{f_P}, 0\right) = M_0\left(\frac{f}{f_P}\right). \quad (1.168)$$

Из симметрии функции двух переменных  $M(f/f_P, f/f_M)$  следует, что в принципе достаточно знать ее в интервале изменения  $f/f_P$  и  $f/f_M$  от нуля до единицы.

### 1.6.3 Система электрод – пьезоэлектрик – электрод – звукопровод

Граничные условия для этой системы аналогично предыдущему случаю частично даются уравнениями (1.134а), (1.134б), (1.135а), (1.135б) и (1.160), соотношением  $\sigma_{M1}(d_3) = 0$ ,  $\sigma(d_4) = 0$ . Учитываем также, что верхний  $M1$  и нижний  $M2$  электроды могут быть выполнены из разных материалов. Используя выражение (1.145) для  $\sigma_P$  и вводя обозначения  $\varphi_{M1} = k_{M1}d_3$ ,  $\varphi_P = k_P d_2$  и  $\varphi_{M2} = k_{M2}d_1$ , приведем (1.134а), (1.134б), (1.135а), (1.135б) и (1.160) к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned}
& -a_{M1}e^{-i\varphi_{M1}} + b_{M1}e^{i\varphi_{M1}} = 0, \\
& a_{M1}e^{-i\varphi_{M1}} + b_{M1}e^{i\varphi_{M1}} - a_Pe^{-i\varphi_P} + b_Pe^{i\varphi_P} = 0, \\
& k_{M1}C_{M1}a_{M1}e^{-i\varphi_{M1}} - k_{M1}C_{M1}b_{M1}e^{i\varphi_{M1}} + k_P C_P a_P e^{-i\varphi_P} - k_P C_P b_P e^{i\varphi_P} = i \frac{ev_0}{d_2}, \\
& a_{M2}e^{-i\varphi_{M2}} + b_{M2}e^{i\varphi_{M2}} - ae^{-ikd_1} - be^{ikd_1} = 0, \\
& k_{M2}C_{M2}a_{M2}e^{-i\varphi_{M2}} - k_{M2}C_{M2}b_{M2}e^{i\varphi_{M2}} - kCa e^{-ikd_1} = 0, \\
& a_P + b_P - a_{M2} - b_{M2} = 0, \\
& k_P C_P a_P - k_P C_P b_P - k_{M2}C_{M2}a_{M2} + k_{M2}C_{M2}b_{M2} = i \frac{ev_0}{d_2}, \\
& -ae^{-ikd_4} + be^{ikd_4} = 0.
\end{aligned} \tag{1.169}$$

Эту систему можно записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix}
-e^{i\varphi_{M1}} & e^{i\varphi_{M1}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-\frac{Z_{M1}}{Z_P} e^{i\varphi_{M1}} & \frac{Z_{M1}}{Z_P} e^{i\varphi_{M1}} & iP & iP^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\
e^{i\varphi_{M1}} & e^{-i\varphi_{M1}} & -e^{i\varphi_P} & -e^{-i\varphi_P} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & -1 & \frac{Z_{M2}}{Z_P} & -\frac{Z_{M2}}{Z_P} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -e^{-i\varphi_P} & e^{i\varphi_P} & \frac{Z}{Z_{M2}} e^{i\varphi} & \frac{Z}{Z_{M2}} e^{-i\varphi} \\
0 & 0 & 0 & 0 & -e^{i\varphi_{M2}} & -e^{-i\varphi_{M2}} & e^{-i\varphi} & e^{i\varphi} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e^{-i\varphi} & e^{i\varphi}
\end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{M1} \\ b_{M1} \\ a_P \\ b_P \\ a_{M2} \\ b_{M2} \\ ae^{-ikd_1} \\ ae^{-ikd_1} \end{pmatrix} = \frac{iev_0}{\omega Z_P d_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{1.170}$$

Неизвестная величина  $ae^{-ikd_1} + be^{-ikd_1}$  находится с помощью правила Крамера. Решение системы (1.170) можно выполнить методом Крамера, однако, к сожалению, нельзя получить компактное аналитическое выражение, аналогичное (1.164). Поэтому для численного анализа частотных зависимостей параметров форм-фактора  $|m|^2$ ,  $\text{Re}(m)$  и  $\text{Im}(m)$  в слоистых пьезоэлектрических структурах доцентом Сибирского федерального университета, к.ф.-м.н. С.И. Бурковым была разработана программа «НВАР ver. 2.3» [41], при работе с которой необходимы данные по физическим свойствам (плотность  $\rho$ , модули

упругости, пьезоэлектрические и диэлектрические константы) и скоростям продольных акустических волн  $v_L$  материалов электродов, пьезоэлектрика и подложки. В случаях анизотропных материалов использовали константы для данного кристаллографического направления. В качестве подложки здесь и в дальнейшем будем подразумевать пластинку алмаза с кристаллографической ориентацией главных поверхностей (100):  $\rho = 3516 \text{ кг/м}^3$ ,  $v_L = 17542 \text{ м/с}$  [42], в качестве пьезоэлектрической пленки использовали нитрид алюминия AlN:  $\rho = 3300 \text{ кг/м}^3$ ,  $v_L = 11428 \text{ м/с}$  [43, 44]. Характерные значения плотностей и скоростей ОАВ в металлических пленках приведены в табл. 1.1.

Отметим, что известные из литературы численные значения параметров металлических плёнок заметно различаются в зависимости как от состояния (моно- или поликристаллические плёнки), так и от толщины плёнки, а также отличаются от их значений в объёмных материалах. Это обстоятельство служит источником неопределённости в расчётах и некоторого рассогласования с экспериментальными данными.

На рис. 1.8 изображен пример зависимости форм-фактора от частоты для пьезоэлектрической слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз» с толщинами слоёв 0,107/0,88/0,13/1025 мкм, соответствующими реальному образцу.

Таблица 1.1. Плотности и скорости ОАВ, принятые в расчете, для металлов, использованных в качестве электродов составного акустического резонатора

Металл	Плотность, $\text{кг/м}^3$	Скорость ОАВ, м/с	Акустическое сопротивление, $10^7 \text{ кг/м}^2\text{с}$	Источник
Al	2689	6300	1,7	[45]
W	19350	5230	10,1	[46, 47]
Cu	8960	4360	3,9	[48, 49]
Ag	10500	3600	3,8	[50, 51]
Mo	9800	6400	6,3	[47]
Pt	21450	2823	6,1	[43]
Cr	7190	6000	4,3	[51]

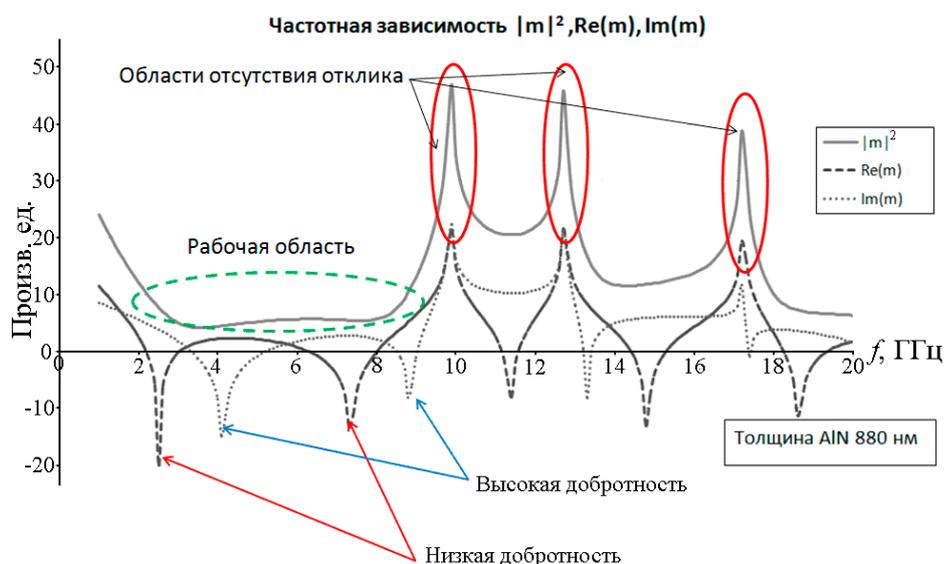


Рис. 1.8. Расчётная частотная зависимость форм-фактора для слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз»

Следует отметить, что в рассматриваемой слоистой структуре имеются особенности в поведении частотных характеристик ряда параметров, обусловленные акустической нагрузкой на ТПП со стороны подложки и металлических электродов. В конечном счёте, это приводит и к влиянию на свойства САР в целом. Так, АЧХ ТПП существенно изменяется по сравнению со свободным пьезоэлектрическим резонатором: если пьезорезонатор возбуждается на частотах в областях  $(\lambda/2)$  ( $\lambda$  – длина волны;  $n = 1, 3, \dots$ ), то ТПП будет резонировать в областях частот, близких, но не равных величинам  $(\lambda/4)n$ . Отметим, что такое резонансное поведение можно установить, исследуя частотные зависимости реальной части форм-фактора  $Re(m)$  (см. рис. 1.8, например, в области частот 2; 6,5 ГГц). Однако указанные резонансные явления в ТПП приводят к изменению частоты обертонов составного акустического резонатора. Проанализировать эффективность ТПП в заданной полосе частот можно, исследуя частотную зависимость величины  $|m|^2$ . К особенностям САР следует отнести возможность достижения широкой полосы возбуждения обертонов, для чего необходимы области, где выполняется  $|m|^2 \sim const$ . Максимум излучаемой ТПП акустической мощности наблюдается при минимальных значениях квадрата форм-фактора и наоборот. Сочетание условий  $|m|^2 \sim const$  и минимумов мнимой части форм-фактора  $Im(m)$  даёт наилучшие условия для реализации максимальной добротности  $Q$  многочастотного составного акустического резонатора.

#### 1.6.4 Описание программы NBAR ver. 2.3

На основе расчётов, сделанных в п. 1.6, С.И. Бурковым была разработана программа для определения эффективной полосы пропускания составного акустического

резонатора структуры «Me1/пьезоэлектрик/ Me2/звукопровод» [41]. С помощью данной программы можно исследовать частотные зависимости форм-фактора  $m$ , его действительной и мнимой части, определять частоты резонансов, исследовать частотные особенности импедансов и проч. Интерфейс используемой программы NBAR ver. 2.3 приведен на рис. 1.9. Для начала работы необходимо выбрать исследуемый материал. Для этого по специально заданному шаблону заранее создается .txt файл исследуемого материала, куда вносятся данные по модулям упругих постоянных, тензору диэлектрической проницаемости и т.д. Сначала рассмотрим раздел «Звукопровод». Нажав вкладку под номером “2”, и выбрав такой .txt файл, загружаем данные звукопровода. Далее цифрой “3” обозначен ползунок (поле) для установления толщины звукопровода. Также присутствует возможность поворачивать структуру путем ввода углов Эйлера. Здесь же задается диапазон исследуемых частот, указывается шаг.

В отделе «Электроды» заполняется информация по толщинам, плотностям, скоростям ОАВ внутреннего и внешнего электродов. Возможен учет площади электрода. По умолчанию введены данные для электродов из Al с толщиной 100 нм.

Данные по пьезоэлектрическому материалу вводятся в разделе «Пьезоэлектрик». Можно как загрузить специальный .txt файл, так и вручную заполнить значения эффективной пьезоэлектрической постоянной, плотности и т.д. Расчет запускается нажатием на иконку, подсвеченную “1”. Результаты моделирования представлены ниже на графике, а также сохраняются в виде таблицы в специальный .xls файл.

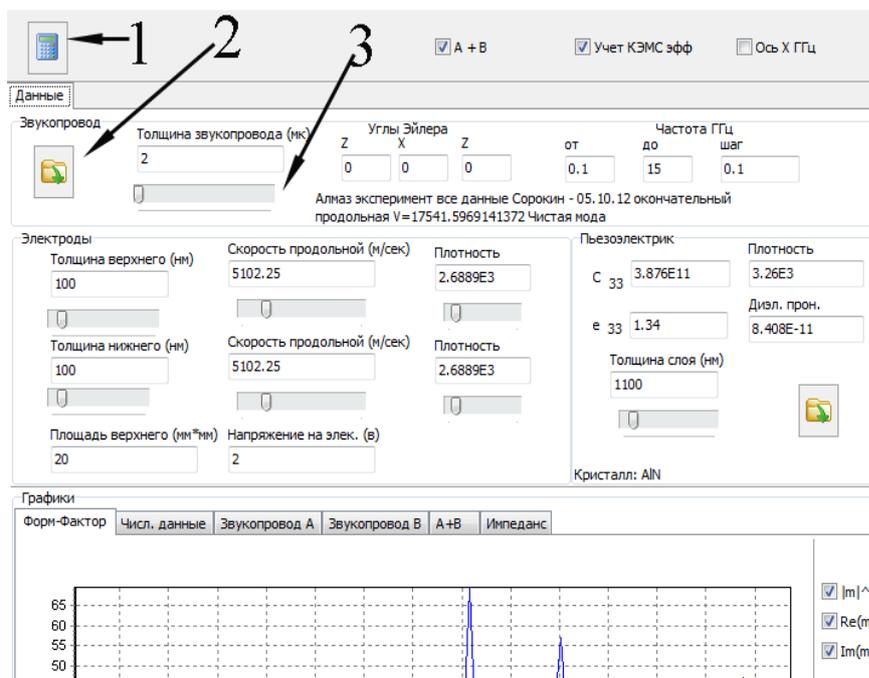


Рис. 1.9. Интерфейс рабочей программы NBAR ver. 2.3.

### 1.7 Механизмы фонон-фононного затухания Ахиезера и Ландау-Румера

Затухание в акустоэлектронном устройстве принципиально не может быть меньше фонон-фононного затухания, случая, когда полезная акустическая волна рассеивается на тепловых фононах. Основы данной теории были рассмотрены Ахиезером в работе [52]. Был рассмотрен случай, когда длина волны значительно больше длины свободного пробега дебаевских фононов. В этом случае поглощение звука может быть определено путем рассмотрения изменения в распределении дебаевских фононов, вызванных наличием звукового поля. При наличии звуковой волны функция распределения изменяется и перестает быть планковской. Зная ее характер, можно определить изменения энтропии фононного газа, которое определяет количество тепла, поглощенного телом, т.е. уменьшение звуковой энергии. В работе [52] было показано, что затухание акустических волн пропорционально  $f^2$ . Так же в коэффициенте затухания присутствует квадратичная зависимость от параметра Грюнайзена  $\gamma$ .

Развитие теории фонон-фононного затухания было опубликовано в работах [53, 54], где отдельно изучалось затухание продольных и сдвиговых волн. Работы [55, 56], где вместо высокотемпературного параметра Грюнайзена использовались параметры Грюнайзена отдельных мод, были подвергнуты критике в [57], и нами учитываться не будут. В данной работе будем использовать значения для затухания и добротности, полученные из теории затухания Ахиезера в [58] (здесь и далее в качестве характеристики затухания используется величина  $\alpha(f)$ , дБ/см):

$$\alpha(f) = \frac{8,68\pi C_v T \gamma^2 \tau_t}{\rho v^3 [1 + (2\pi f \tau_t)^2]} f^2, \quad (1.171)$$

$$Q \times f = \frac{\rho v^2 [1 + (2\pi f \tau_t)^2]}{C_v T \gamma^2 \tau_t}. \quad (1.172)$$

Здесь  $\tau_t$  – время термической релаксации в кристалле,  $Q$  – добротность. Формулы справедливы для т.н. механизма Ахиезера, когда  $\omega \tau_t < 1$ . Из (1.172) следует выражение  $Q \times f \approx \text{const}$  для частот ниже десятков (иногда сотен) гигагерц.

Механизм затухания Ландау-Румера ( $\omega \tau_t > 1$ ) был впервые исследован в работе [59], где были учтены трехфононные взаимодействия. Дальнейшее изучение данного механизма затухания было проведено в работах [58, 60-63], где более детально изучались правила отбора для фононов. На данный момент отсутствуют надежные данные по прогнозу минимума акустического затухания в кристаллах алмаза, а так же надлежащее сравнение с экспериментальными данными.

Как было показано в [58], для механизма Ландау-Румера справедливо:

$$\alpha(f) = \frac{8,68\pi^5\gamma^2(kT)^4}{30\rho v^6 h^3} f, \quad (1.173)$$

$$Q \times f = \frac{30\rho v^6 h^3}{\pi^4\gamma^2(kT)^4} f. \quad (1.174)$$

Здесь  $k$  и  $h$  – постоянные Больцмана и Планка соответственно. Заметим, что в механизме Ландау-Румера значение параметра качества  $Q \times f$  уже линейно возрастает с ростом от частоты. В обоих выражениях для затухания и параметра качества  $Q \times f$  присутствует параметр Грюнайзена, точное значение которого необходимо для получения достоверных результатов по параметру качества алмаза.

Соотношения (1.171) и (1.172) или (1.173) и (1.174) не отражают того факта, что фонон-фононное затухание в кристаллах является анизотропной величиной, и пригодны для оценки некоторого эффективного затухания в изотропной среде, соответствующей модели Дебая. Используя (1.171) и (1.172) или (1.173) и (1.174) с заменой ПГ на частный параметр Грюнайзена для данной моды, можно сделать оценку вклада фонон-фононного затухания и величины параметра качества в монокристалле алмаза в том или ином кристаллографическом направлении.

### 1.8 Типы акустических колебаний, используемые в резонаторах

В пьезотехнике активно используются пьезоэлектрические резонаторы (ПР) на объемных акустических волнах. Размеры и форма пьезоэлементов могут быть весьма разнообразными (бруски, пластины, кольца и т.д.), что определяется частотным диапазоном, выбором рабочей моды и некоторыми специальными требованиями [16]. Пьезоэлектрическим резонатором будем называть устройство, состоящее из определенным образом выполненного пьезоэлектрического кристалла и приспособления, предназначенного для закрепления и соединения его с внешней электрической цепью. По возможности возбуждения на различных частотах различают низкочастотные (до 1 МГц) и высокочастотные (свыше 1 МГц) резонаторы. Принципиальным является то обстоятельство, что весь диапазон частот не может быть перекрыт при помощи ПР какого-то одного типа. Первоначально в кварцевых резонаторах эксплуатировались такие свойства, как пьезоэффект и малые механические потери, обеспечивающие относительно высокую добротность по сравнению с обычными LC-контурными. Однако, как было показано выше, в кварце были обнаружены термостабильные срезы, и кристалл стал еще более широко использоваться как для резонаторов на ОАВ, так и для устройств на поверхностных акустических волнах (ПАВ). Однако для термостабильных срезов в кварце коэффициенты электромеханической связи (КЭМС) для применяемых в устройствах волн

оказываются гораздо ниже возможных значений, что сужает область применения кристалла исключительно до узкополосных термостабильных устройств.

Так, можно выделить несколько основных типов ПР на основе кварца. Частоты изгибных резонаторов могут меняться в довольно широких пределах. С использованием колебаний такого типа изготавливают самые низкочастотные ПР (от единиц кГц до ~ 100 кГц). Обычно в таких резонаторах применяются два типа колебаний: изгиб по ширине пластинки и изгиб по толщине биморфного (изготовленного соединением двух тонких пластинок) пьезоэлемента. Первый тип колебаний возбуждается с помощью двух пар электродов.

Резонаторы с колебаниями сдвига по контуру могут применяться на резонансных частотах от 200 до 1000 кГц. Приближенная формула для расчета резонансной частоты была получена в работе [64].

Толщинные резонаторы наиболее широко применяются в устройствах пьезотехники на частотах от 1 до 400 МГц. Первые резонаторы изготавливались из пластинок X-среза кварца с продольными колебаниями. Однако температурный коэффициент частоты (ТКЧ) для таких резонаторов оказался слишком большим, в настоящее время такой срез применяют, в основном, в качестве материала для акустических преобразователей высокочастотных продольных акустических волн в исследованиях физических свойств твердых тел, жидкостей и газов, а также для ультразвуковой дефектоскопии. Пластины Y-среза кварца дают чистое сдвиговое колебание (с поляризацией вдоль оси X) и могут быть использованы в качестве акустических преобразователей высокочастотных поперечных акустических волн. Так же, как и для X-среза, ТКЧ слишком велик для применения этого среза в устройствах пьезотехники.

Особый интерес для пьезотехники представляет АТ-срез, температурно-частотная характеристика (ТЧХ) которого имеет кубическую зависимость (производная по температуре равна нулю) в окрестности 27 °С. Благодаря этому данная ориентация кварца применяется в толщинно-сдвиговых резонаторах как широкого, так и специального назначения, в частности, в прецизионных резонаторах для вторичных стандартов частоты. Однако для устранения паразитной связи с изгибными колебаниями необходимо применять специальные меры (фаски на гранях пластины) или создавать условия для работы резонатора в режиме захвата энергии.

Также существуют и широко используются резонаторы, совершающие колебания сжатия-растяжения по длине в поперечном электрическом поле. ПР с кварцевыми кристаллическими элементами специальной ориентации достаточно широко

используются в фильтрах и генераторах, как правило, на частотах в интервале от 50 кГц до 300 кГц. Ограничения связаны с практической невозможностью сделать резонатор слишком больших размеров (на низких частотах) или слишком коротким при необходимости соблюдения значительного превосходства резонансной длины над шириной стержня. ТЧХ таких резонаторов описываются параболическим уравнением. Для GT-среза (от 100 до 550 кГц) при определенном соотношении ширины пластины к длине ТКЧ подчиняется кубическому закону и почти равен нулю в широком диапазоне температур от 0 до 90° С [64]. Благодаря этому данный срез целесообразно использовать в стандартах частоты.

Резонаторы с крутильными колебаниями не получили широкого практического применения вследствие более сложной конструкции. ТКЧ имеют форму, близкую к параболе. В ранних исследованиях такие резонаторы применялись для измерения упругих свойств твердых тел.

Такие сильные пьезоэлектрики, как ниобат и танталат лития, не имеют термостабильных срезов, однако обладают высокими значениями КЭМС и малыми потерями на распространение ОАВ. Благодаря этим качествам их можно успешно применять в полосовых фильтрах промежуточной частоты, для которых требования к температурной стабильности не столь критичны по сравнению с ПР. Данные материалы также успешно применяют при создании акустических преобразователей высокочастотных продольных и поперечных акустических волн для дефектоскопии, акустической микроскопии и в научных исследованиях. В известной мере, «конкурентами» кварца выступают более сильные пьезоэлектрики берлинит, лангасит и лангатат, имеющие термостабильные срезы. В работе [65] исследованы пьезорезонаторы из лангасита, ланганита и лангатата Y-срезов. Все измеренные резонаторы показывают параболическую температурно-частотную характеристику.

В основе работы устройств акустоэлектроники лежит применение поверхностных акустических волн различных типов (и родственных им волн) вплоть до гиперзвукового диапазона (от  $10^6$  до  $10^{10}$  Гц), возбуждаемых в пьезоэлектрических материалах и пленках, имеющих малые акустические потери, малые временную и температурную нестабильности. С 80-х гг. XX в. в акустоэлектронике начинают активно применять эффективные пьезоэлектрические пленочные материалы AlN, ZnO и другие, с помощью которых удается использовать не пьезоэлектрические подложки. В результате в таких комбинированных устройствах удалось повысить частотный диапазон и уменьшить их размеры. Последнее особенно важно с точки зрения интеграции устройств акустоэлектроники с полупроводниковыми приборами. Важнейшим свойством упругих

волн, обеспечивающим их конкурентное преимущество в сравнении с электромагнитными волнами, является низкая скорость распространения, что имеет первостепенное значение, например, в линиях задержки (ЛЗ).

Объективными преимуществами поверхностных волн в сравнении с объемными являются лучшая доступность к управляющим воздействиям с поверхности кристалла, простое устройство планарных преобразователей для генерации и детектирования, влияние массовых нагрузок на скорость ПАВ и т. д. С другой стороны, такие преимущества в определенных условиях превращаются в недостатки, поскольку распространение ПАВ, в особенности на СВЧ, чувствительно к загрязнениям поверхности. ПАВ-устройства востребованы в резонаторах, фильтрах, мультиплексорах, антенных переключателях для техники связи, адаптивных фильтрах, акустических и акустоэлектронных конвольверах и корреляторах для радио- и гидролокации, широкополосной передачи сигналов и пакетной радиосвязи; в фиксированных, перестраиваемых и многомодовых генераторах и синтезаторах сигналов; в фильтрах Найквиста для цифровой связи и во многих других областях [66].

Впервые понятие о поверхностных акустических волнах ввел лорд Рэлей в 1885 г. [67] в связи с проблемами землетрясений. Широкое применение поверхностных волн в электронике стало возможным благодаря разработке встречно-штыревых преобразователей (ВШП, рисунок 1.10), [68], которые вследствие пьезоэлектрического эффекта позволяют осуществлять прямую и обратную трансформацию электромагнитной волны в поверхностную упругую волну, распространяющуюся на поверхности кристалла.

Сегодня интерес исследователей к разработке новых принципов и конструкций датчиков велик как никогда, что связано с широким и повсеместным внедрением микрокомпьютерного управления разнообразными системами и процессами. Часто одна и та же измеряемая величина может определяться с помощью датчиков, функционирующих, возможно, на разных принципах. Большинство измеряемых сенсором величин прямо или косвенно могут быть определены с помощью статических пьезоэлектрических, пьезорезонансных или акустоэлектронных сенсоров. ПАВ-сенсоры уже применяются в автомобильной электронике (датчики вращающего момента двигателя, давления в шинах), в медицинских приборах (химические датчики), в приборах и устройствах промышленности и широкого назначения (датчики пара, влажности, температуры, массовые датчики). Акустические сенсоры конкурентоспособны, обладают высокой прочностью, очень чувствительны и конструктивно надежны. Некоторые не требуют питания, но могут дистанционно опрашиваться и выдавать требуемую информацию.

Уменьшение резонансной частоты вследствие массовой нагрузки задается

массовой нагрузкой на поверхности колеблющейся пластины. Для малых значений приведенной массы из соотношения можно получить относительное изменение резонансной частоты при напылении. Пьезорезонатор как чувствительный элемент датчика толщины это, прежде всего, массо-чувствительное устройство.

Если для прецизионных кварцевых резонаторов обычно выбирают атермальные срезы, то, используя специально сориентированные кристаллические элементы, можно, напротив, добиться линейной зависимости резонансной частоты от температуры окружающей среды. На основе такой зависимости были разработаны температурные сенсоры, с помощью которых, после соответствующей калибровки, измеряют температуру с высокой точностью вплоть до единиц микрокельвинов [69]. Для этих целей удобен LC-срез (Linear Coefficient) кварца, в котором обращаются в нуль или близки к нулю ТКЧ второго и третьего порядков. Лучшим сочетанием параметров обладает NLSC срез, в котором имеются хорошая линейность ТЧХ и малая зависимость резонансной частоты от механических напряжений, вызванных переходными тепловыми процессами [7, 70]. На основе этого подхода были также предприняты разработки ИК-пьезорезонансных сенсоров [71].

### 1.9 Основные типы акустических резонаторов

Прогресс в развитии ПР на ОАВ происходил не только на путях поиска новых кристаллических срезов или выбора тех или иных колебательных мод, но и за счет обновления технологий изготовления. В 90-х годах XX века с помощью различных технологических приемов были реализованы ПР мембранного типа (с обратной мезаструктурой, рис. 1.11), которые позволили резко, до 250 МГц, поднять основную резонансную частоту [72]. Данная область частот перекрывалась ранее ПАВ резонаторами. Однако технические параметры объемных резонаторов с обратной мезаструктурой оказались достаточно высокими, а их мелкосерийное производство не требует применения достаточно дорогой фотолитографии – технологии, рентабельной на больших сериях устройств.

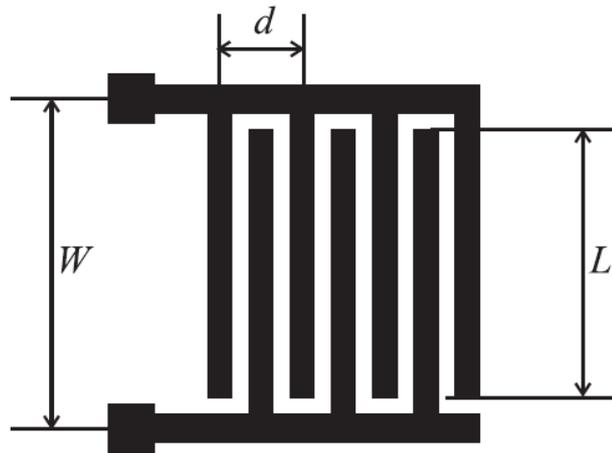


Рис. 1.10. Типичный пример ВШП.  $W$  – апертура преобразователя,  $d$  – период,  $L$  – ширина акустического пучка

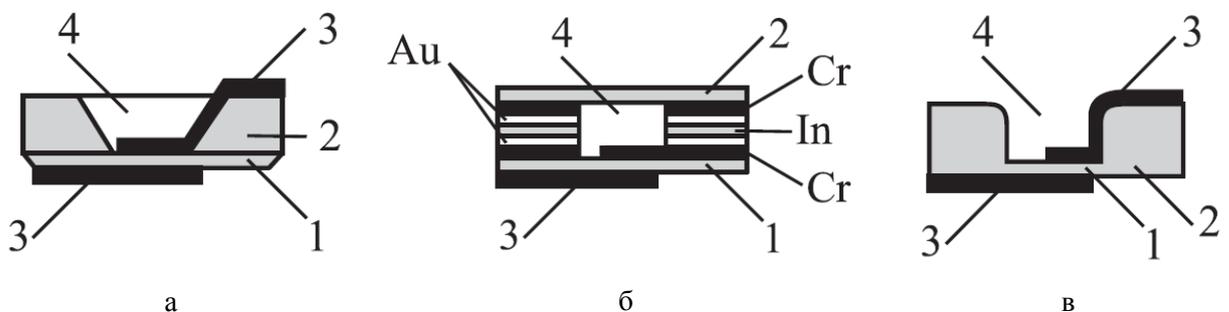


Рис. 1.11. Пьезорезонатор с обратной мезаструктурой: а и б – составной, в – монолитной конструкции. 1 – резонансная пластина; 2 – подложка; 3 – электроды; 4 – сквозное отверстие или углубление с плоским дном. Упругие колебания происходят в области перекрытия электродов

Вероятно, рекордными характеристиками, достигнутыми в последнее время, обладает резонатор с обратной мезаструктурой, выполненный на кварце АТ-среза, с толщиной мембраны 0,6 мкм и частотой основного резонанса 2,074 ГГц (рис. 1.14 [73]). Добротность такого резонатора составила  $Q \approx 1050$ . Развитие технологии создания качественных пьезоэлектрических пленок позволило создать миниатюрные композитные ПР на ОАВ [74] с частотой 8 ГГц. Разнообразие типов пьезорезонаторов, наиболее часто применяемых к настоящему времени, определяется, прежде всего, заданным частотным диапазоном и техническими особенностями приборов и устройств.

Новый уровень стабильности и добротности может быть достигнут, если использовать возбуждение толщинных и толщинно-сдвиговых резонаторов поперечным к направлению распространения волны электрическим полем. В этом случае возбуждающие электроды размещают на одной плоскости резонатора [75] (рис. 1.15). Потенциально такие резонаторы отличаются уменьшенным старением, более высокой добротностью и увеличенной стабильностью частоты, потому что области ПР с самыми сильными

колебательными смещениями свободны от электродов.

Кроме того, можно устранить возбуждение нежелательных мод для пластины данной ориентации, изменяя азимутальный угол приложения электрического поля, либо возбудить такие моды, которые невозможны для обычного толщинно-сдвигового резонатора. Особенно важно отсутствие электродов как нагружающей массы для современных высокочастотных мембранных или композиционных резонаторов, где толщина активного колеблющегося слоя становится сравнимой с толщиной электродов. Принципиальное решение для этого случая рассмотрено в работе [76] (рис. 1.16).

На данный момент относительно неплохо изучены резонаторы, использующие тонкие пленки: композитные тонкопленочные резонаторы (Thin Film Bulk Acoustic Resonator, FBAR) и многослойные резонаторы (Solidly Mounted Resonators, SMR). Схематично устройство тонкопленочного резонатора показано на рис. 1.12 [77]. Пьезоэлектрическая пленка возбуждается на частоте, соответствующей полуволновому резонансу, а толщина подложки должна составлять нечетное число таких полуволн. Тем не менее, применяя высокодобротную подложку – сапфир, и пьезоэлектрическую пленку AlN, авторы [78] получили высокую нагруженную добротность  $Q \sim 20000$  на частоте 2 ГГц и ТКЧ  $\sim -30 \cdot 10^{-6}$  град.<sup>-1</sup> В работе [6] сообщается о достижении добротности  $Q \sim 67000$  на частоте 1,6 ГГц.

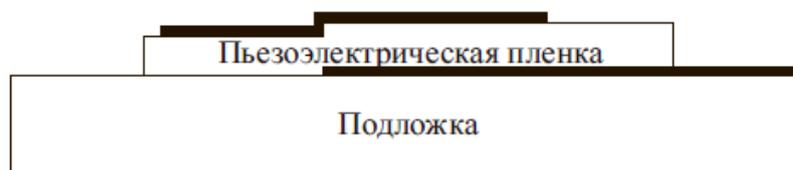


Рис. 1.12. Композитный тонкопленочный резонатор, сформированный нанесением пьезоэлектрической пленки на подложку

Многослойный резонатор имеет более прочную по сравнению с мембранным конструкцию (рис. 1.13). Высококачественные резонансные характеристики достигаются тем, что резонирующая пьезоэлектрическая пленка изолирована от подложки акустическим зеркалом – отражателем Брэгга, состоящим из чередующихся слоев с различными акустическими импедансами с толщинами, равными четверти длины волны. Число используемых слоев зависит от требуемой величины коэффициента отражения и ширины полосы, зависящих от соотношения механических импедансов последовательных слоев. Если подложка имеет относительно высокий импеданс, тогда первый слой должен иметь низкий импеданс, следующий – высокий импеданс и т. д. Резонатор аналогичной конструкции, имеющий отражатель Брэгга с семью четвертьволновыми слоями и резонансную пленку AlN толщиной 240 нм, возбуждался на основной частоте 9,2 ГГц с

добротностью  $Q \sim 280$ . КЭМС имел значения  $K = 0,20 - 0,23$  [79]. Хотя многослойные резонаторы имеют значительно более прочную конструкцию и надежность, их технология значительно сложнее, поскольку требует контроля толщины и неровности слоев. Необходимо также отметить, что неизбежна утечка акустической энергии и через отражатель Брэгга.

В последнее время активно изучаются составные акустические резонаторы (САР) на высших обертонах (High overtone Bulk Acoustic resonator (НВАР)) [80, 81]. Данные устройства представляют собой структуру, состоящую из четырех элементов. На подложку из кристаллического материала наносится слой нижней металлизации пьезоэлектрическая пленка (AlN, ZnO, и т.д.), слой верхней металлизации (рис. 1.17). При подаче напряжения на электроды возбуждается акустическая волна, распространяющаяся в подложке из кристалла. При определенных частотах на длине образца укладывается целое число акустических полуволен – наблюдается акустический резонанс. Такие структуры могут использоваться в качестве датчиков внешних воздействий, резонаторов, фильтров частот и пр. Главным преимуществом данных резонаторов является возможность работы на высоких частотах, вплоть до десятков ГГц. Для достижения наилучших результатов в качестве материала звукопровода для структур САР следует использовать высокодобротные подложки из кристаллов с низким затуханием и максимально высокими скоростями звука, такими как, например, алмаз или сапфир.

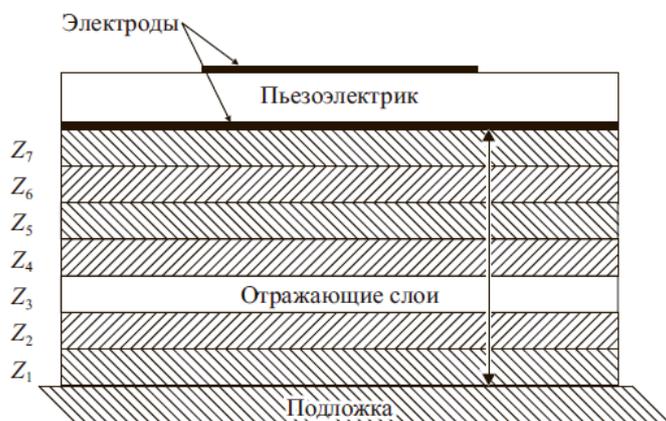


Рис. 1.13. Многослойный резонатор

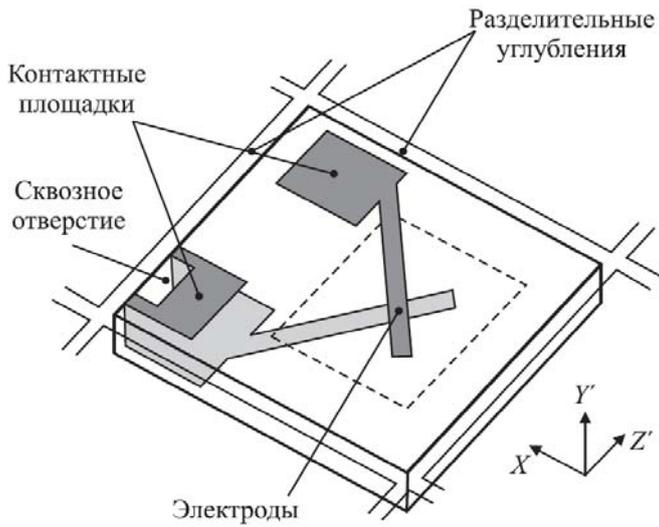


Рис. 1.14. Структура 2 ГГц резонатора с обратной мезаструктурой, выполненного на кварце АТ-среза

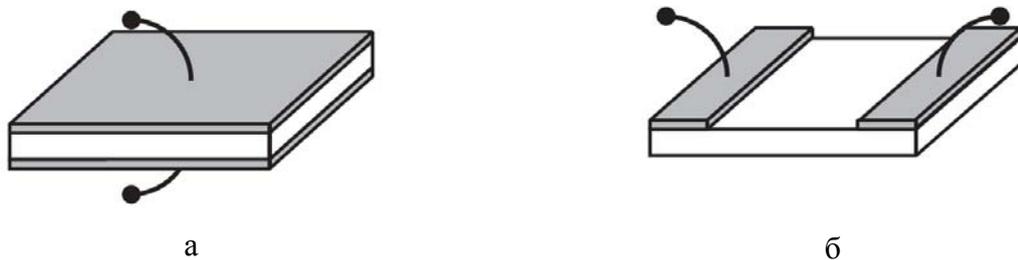


Рис. 1.15. Толщинные резонаторы, возбуждаемые электрическим полем вдоль толщины (а) и поперечным полем (б)



Рис. 1.16. Пленочный ПР мембранного типа с поперечным возбуждением

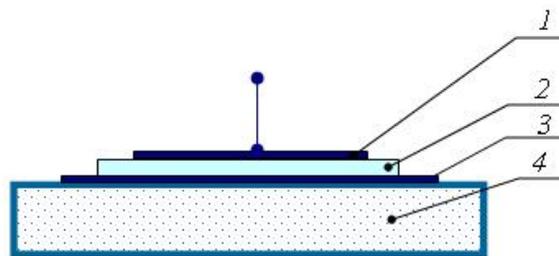


Рис. 1.17. Общий вид резонатора на объёмных акустических волнах: 1 – внешний электрод; 2 – пьезоэлектрическая плёнка; 3 – внутренний электрод; 4 – подложка

Произведение добротности  $Q$  на частоту резонанса оказывается постоянной величиной:  $Q \times f \approx \text{const}$  [58] и при повышении частоты добротность резонансной схемы уменьшается по закону  $f \sim Q^{-1}$ . Акустические свойства такой структуры в основном характеризуются, главным образом, свойствами звукопровода. Таким образом, в качестве

подложек целесообразно использовать звукопроводы из высокодобротного материала с низким коэффициентом затухания. Широко известны составные акустические резонаторы на основе сапфира [1], ниобата лития [2-4]. Значения  $Q \times f = 4,8 \cdot 10^{13}$  для подложки из сапфира, благодаря высоким скоростям ОАВ в кристалле и низкому затуханию, значительно превышают аналогичные значения для кварца ( $1,2 \cdot 10^{13}$ ) и кремния ( $2,8 \cdot 10^{12}$ ) [1], однако уступают соответствующим значениям для подложки из ниобата лития с  $Q \times f = 8,1 \cdot 10^{13}$  [4]. В последнее время алмаз, имеющий рекордные прочность, скорости звука, высокую теплопроводность, радиационную стойкость и пр., все чаще используют в качестве звукопровода для таких резонаторов. В работе [5] в качестве подложки для акустической структуры использовался синтетический алмаз, выращенный методом CVD (Chemical Vapor Deposition – химическое парофазное осаждение). Такой процесс используется для создания тонких пленок, что не всегда подходит для резонансных акустических структур. Представляется, что синтетические монокристаллы алмаза, выращенные методом НРНТ (High-Pressure High-Temperature – высокое давление, высокая температура), более пригодны для создания резонансных структур.

Авторами [2] изучались резонансные свойства структуры на подложке из НЛ для двух различных экспериментальных образцов. Были получены высокие значения  $Q \times f$ , которые оказались в диапазоне от  $3,8 \cdot 10^{13}$  до  $7,9 \cdot 10^{13}$ . Также изучался температурный сдвиг резонансных частот, оказавшийся до 90 ppm/град. Авторами статьи [6] были получены крайне высокие значения  $Q \times f \sim 1,1 \cdot 10^{14}$  на подложке из сапфира и  $8,4 \cdot 10^{13}$  для устройства с подложкой из ниобата лития. Сапфировые звукопроводы имели толщины 380 мкм и 635 мкм, были выполнены в виде кольцевой формы с диаметрами 51 и 76 мм соответственно. Использовались Z-срезы кристаллов с напыленным пьезоэлектрическим слоем из AlN толщиной 0,3 мкм.

Однако не совсем корректно считать, что для всех диапазонов частот строго выполняется зависимость  $Q \times f = \text{const}$ . Так, например, в работе [13] показывается экспериментально и приводится модель для расчета так называемого “захвата энергии”. Под эффектом захвата энергии подразумевается концентрация звуковой мощности в пространстве под электродами. Под нарушением захвата энергии подразумевается уменьшение добротности резонатора при определенных частотах, связанное с уносом части акустической энергии паразитными волнами [13].

### **Выводы к главе 1:**

- Изучена теория распространения объемных акустических волн. Показано, что собственные значения тензора Кристоффеля соответствуют эффективным упругим постоянным акустической волны в данном направлении.
- Исследована зависимость упругих постоянных от давления. Получены коэффициенты управления для кубических кристаллов симметрии  $m3m$ .
- Введен параметр Грюнайзена. Показано, что, на данный момент, возникают значительные трудности в точном определении как параметра Грюнайзена, так и частного ПГ отдельной моды в алмазе.
- Для описания резонансного поведения составного акустического резонатора на основе пьезоэлектрической слоистой структуры «Me1/пьезоэлектрик/Me2/подложка» исследован форм-фактор  $m$ .
- Исследованы механизмы затухания Ахиезера и Ландау-Румера.

## ГЛАВА 2. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Нормальным температурным поведением упругих постоянных в кристаллах считается линейное уменьшение модулей упругости с ростом температуры при не слишком низких температурах и ниже температур плавления, и слабая зависимость (или ее отсутствие) при низких температурах. Однако в некоторых кристаллах при определенных температурах наблюдаются существенные отклонения от линейной зависимости. Имеются также кристаллы, в которых наблюдается аномальное температурное поведение каких-либо модулей упругости. Например, в кристалле кварца ( $\text{SiO}_2$ ) один из упругих модулей ( $C_{66}$ ) при повышении температуры увеличивается [82, 83], и благодаря этому эффекту можно изготовить термостабильные срезы как для объёмных, так и для поверхностных акустических волн, что в сочетании с пьезоэлектрическим эффектом делает этот кристалл особо ценным материалом акустоэлектроники. Отметим также, что аномальное поведение модулей упругости может наблюдаться при фазовых переходах (ФП) различной природы (в данной работе такие эффекты не рассматривались). Можно подчеркнуть важность теоретических подходов для определения температурных коэффициентов модулей упругости как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения.

### 2.1 Зависимость упругих постоянных второго порядка кристаллов от температуры

Рассмотрим существующие теории температурных зависимостей модулей упругости. Например в [84] теория температурных зависимостей  $C_{AB}(T)$  строится на основе модели Дебая с учетом ангармонизма колебаний атомов в реальных решетках, причем для корректного описания  $C_{AB}(T)$  в широкой области температур в рассмотрение включают температурную зависимость числа фононов. Получаемые таким образом соотношения оказываются слишком громоздкими для анализа, и обычно рассматривают поведение  $C_{AB}(T)$  лишь в низко- и высокотемпературном пределах. Получено качественное описание температурной зависимостей, точное согласие с экспериментальными результатами не наблюдается. В работе [84] приводятся результаты сравнения расчетных и экспериментальных данных для  $\text{KCl}$ ,  $\text{KBr}$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{CsCl}$ .

Авторы [85], используя квазигармоничное континуальное приближение, исследовали температурные зависимости упругих свойств кубических кристаллов и представили выражения для различных температурных областей (низко- и высокотемпературной). Предполагалась отсутствие зависимости частот колебаний от длины волны. Учитывались упругие постоянные высоких порядков, однако надлежащий

учет ТКЛР отсутствовал. Как утверждается авторами, данная теория должна быть наиболее точной для низкотемпературной области.

В работе [86] (модель Шриваставы) учитывается дополнительный вклад в фонон-решеточное взаимодействие (так называемое фононное давление). Это было сделано с целью объяснения аномальных температурных зависимостей упругой постоянной  $C_{12}$  для структур типа NaCl. В таком случае эффективные упругие постоянные запишутся в виде:

$$\begin{aligned} C_{11}^* &= C_{11} - P_{phonon}, \\ C_{12}^* &= C_{12} + P_{phonon}, \\ C_{44}^* &= C_{44} - P_{phonon}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Температурные коэффициенты в модели Шриваставы имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{11}^*}{dT} &= \frac{dC_{11}}{dT} - \frac{dP_{phonon}}{dT}, \\ \frac{dC_{12}^*}{dT} &= \frac{dC_{12}}{dT} + \frac{dP_{phonon}}{dT}, \\ \frac{dC_{44}^*}{dT} &= \frac{dC_{44}}{dT} - \frac{dP_{phonon}}{dT}, \\ \frac{dP_{phonon}}{dT} &= (C_{11} + 2C_{12})\alpha_{11}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

В работе [87] наглядно показано, что учет такого фононного давления для кристаллов со структурой типа NaCl имеет смысл.

Ниже будет рассмотрен вариант упрощенной феноменологической теории, базирующейся на представлении о конечных деформациях, которые возникают в твердом теле при тепловом расширении, и включающей в себя представление об упругом ангармонизме.

Пусть кристалл подвергается воздействию изменения температуры. Для механически свободного образца ( $\bar{\tau}_{KL} = 0$ ) возникающие вследствие теплового расширения статические деформации могут быть описаны с помощью соотношения:

$$\bar{\eta}_{PQ} = \alpha_{PQ} \Delta T, \quad (2.3)$$

где  $\alpha_{PQ}$  – тензор линейного теплового расширения. Соответствующее уравнение состояния будет иметь вид [16, 88]:

$$\tilde{\tau}_{AB} = C_{ABKL}^* (\bar{\eta}) \tilde{\eta}_{KL} = [C_{ABKL}^S + C_{ABKLPQ}^S \tilde{\eta}_{PQ}] \tilde{\eta}_{KL} = [C_{ABKL}^S + C_{ABKLPQ}^S \alpha_{PQ} \Delta T] \tilde{\eta}_{KL}. \quad (2.4)$$

Известно, что в общем виде тензор Грина-Кристоффеля как функция механического напряжения имеет вид [16]:

$$\Gamma_{BC} = (\bar{C}_{FC} C_{ABFD}^* + \bar{\tau}_{AD} \delta_{BC}) N_A N_D. \quad (2.5)$$

С учетом (2.4) для механически свободного кристалла выражение (2.5) преобразуется так:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{BC}(\bar{\tau}) &= (\bar{C}_{FC} C_{ABFD}^* + \bar{\tau}_{AD} \delta_{BC}) N_A N_D = \\
&= [\bar{C}_{FC} (C_{ABFD}^S + C_{ABFDPO}^S \bar{\eta}_{PQ}) + \bar{\tau}_{AD} \delta_{BC}] N_A N_D = \\
&= \bar{C}_{FC} (C_{ABFD}^S + C_{ABFDPO}^S \alpha_{PQ} \Delta T) N_A N_D.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Тензор конечных статических деформаций Грина в этом случае имеет вид

$$\bar{C}_{FC} = \delta_{FC} + 2\bar{\eta}_{FC} = \delta_{FC} + 2\alpha_{FC} \Delta T. \tag{2.7}$$

Подставляя (2.7) в (2.6) и считая, что  $\Delta C_{FC}(T) \sim \Delta T$ , можно получить упрощенное выражение для тензора Грина-Кристоффеля, оставляя только члены, не зависящие от воздействия и пропорциональные первой степени температуры:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{BC}(\bar{\tau}) &= \bar{C}_{FC} (C_{ABFD}^S + C_{ABFDPO}^S \alpha_{PQ} \Delta T) N_A N_D = \\
&= (\delta_{FC} + 2\alpha_{FC} \Delta T) (C_{ABFD}^S + C_{ABFDPO}^S \alpha_{PQ} \Delta T) N_A N_D \approx \\
&\approx (C_{ABCD}^S + 2C_{ABFD}^S \alpha_{FC} \Delta T + C_{ABCDPO}^S \alpha_{PQ} \Delta T) N_A N_D = \\
&= [C_{ABCD}^S + (2C_{ABPD}^S \delta_{CQ} + C_{ABCDPO}^S) \alpha_{PQ} \Delta T] N_A N_D.
\end{aligned} \tag{2.8}$$

С помощью (2.8) можно описывать распространение объемных акустических волн в условиях однородной статической деформации, вызванной изменением температуры.

Рассмотрим, распространение акустических волн в кубических кристаллах. Симметрия, а также ненулевые коэффициенты тензоров модулей УП2П и УП3П приведены в приложении Б. Используя изотропию *температурного коэффициента линейного расширения* (ТКЛР) для кубических кристаллов

$$\alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{33}, \tag{2.9}$$

рассмотрим волну, распространяющуюся вдоль направления  $N \parallel [100]$ . Из (2.8) имеем:

$$\Gamma_{ij} = \begin{pmatrix} \Gamma_{11} & 0 & 0 \\ & \Gamma_{22} & 0 \\ & & \Gamma_{22} \end{pmatrix}, \tag{2.10}$$

где

$$\begin{aligned}
\Gamma_{11} &= C_{11} + (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112}) \alpha_{11} \Delta T, \\
\Gamma_{22} &= C_{44} + (2C_{44} + C_{144} + 2C_{155}) \alpha_{11} \Delta T.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Из (2.11) легко получить зависимость модулей УП2П от температуры ( $TC_{FC}$ ):

$$\begin{aligned}
\frac{dC_{11}}{dT} &= (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112}) \alpha_{11}, \\
\frac{dC_{44}}{dT} &= (2C_{44} + C_{144} + 2C_{155}) \alpha_{11},
\end{aligned} \tag{2.12}$$

где первому уравнению соответствует продольная ( $L$ ) волна с поляризацией  $U \parallel [100]$ , второму – поперечная ( $S$ ) волна с поляризацией  $U \perp [100]$ . Из соотношений (2.12) понятна

связь температурных коэффициентов модулей упругости с ангармоническими константами – модулями УПЗП и ТКЛР. Чтобы получить величину  $TC_{12}$ , следует аналогичным образом рассмотреть направление распространения [110]. В результате имеем:

$$\frac{dC_{12}}{dT} = (2C_{12} + C_{123} + 2C_{112})\alpha_{11}. \quad (2.13)$$

## 2.2 Температурные зависимости упругих постоянных 2-го порядка тригональных, гексагональных и тетрагональных кристаллов

Важной задачей является исследование температурных зависимостей упругих постоянных кристаллов с более низкой симметрией. Так, действуя аналогичным образом с п. 2.1, были получены температурные зависимости модулей УП2П для тригональных кристаллов (симметрии  $32$ ,  $3m$ ,  $\bar{3}m$ ), для которых ТКЛР уже не является изотропным:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{11}}{dT} &= (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112})\alpha_{11} + C_{113}\alpha_{33}, \\ \frac{dC_{33}}{dT} &= 2C_{113}\alpha_{11} + (2C_{33} + C_{333})\alpha_{33}, \\ \frac{dC_{44}}{dT} &= (2C_{44} + C_{144} + C_{155})\alpha_{11} + C_{344}\alpha_{33}, \\ \frac{dC_{66}}{dT} &= \frac{1}{2}[(4C_{66} + C_{222} - C_{112})\alpha_{11} + (C_{113} - C_{123})\alpha_{33}], \\ \frac{dC_{13}}{dT} &= \frac{1}{2}[(C_{113} + C_{123})\alpha_{11} + (2C_{13} + C_{133})\alpha_{33}], \\ \frac{dC_{14}}{dT} &= (2C_{14} + C_{114} + C_{124})\alpha_{11} + C_{134}\alpha_{33}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Для гексагональных кристаллов ( $622$ ,  $6mm$ ,  $\bar{6}2m$ ,  $6/mmm$ ) были получены следующие температурные зависимости модулей УП2П:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{11}}{dT} &= (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112})\alpha_{11} + C_{113}\alpha_{33}, \\ \frac{dC_{33}}{dT} &= 2C_{113}\alpha_{11} + (2C_{33} + C_{333})\alpha_{33}, \\ \frac{dC_{44}}{dT} &= (2C_{44} + C_{144} + C_{155})\alpha_{11} + C_{344}\alpha_{33}, \\ \frac{dC_{66}}{dT} &= \frac{1}{2}[(4C_{66} + C_{222} - C_{112})\alpha_{11} + (C_{113} - C_{123})\alpha_{33}], \\ \frac{dC_{13}}{dT} &= \frac{1}{2}[(C_{113} + C_{123})\alpha_{11} + (2C_{13} + C_{133})\alpha_{33}]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Для тригональных и гексагональных кристаллах выполняется связь  $C_{66} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$ .

Для кристаллов тетрагональной симметрии ( $422$ ,  $4mm$ ,  $\bar{4}2m$ ) соотношения имеют вид:

$$\begin{aligned}
 \frac{dC_{11}}{dT} &= (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112})\alpha_{11} + C_{113}\alpha_{33}, \\
 \frac{dC_{33}}{dT} &= 2C_{113}\alpha_{11} + (2C_{33} + C_{333})\alpha_{33}, \\
 \frac{dC_{44}}{dT} &= (2C_{44} + C_{144} + C_{155})\alpha_{11} + C_{344}\alpha_{33}, \\
 \frac{dC_{66}}{dT} &= 2(C_{66} + C_{133})\alpha_{11} + C_{366}\alpha_{33}, \\
 \frac{dC_{12}}{dT} &= (C_{12} + C_{112})\alpha_{11} + \frac{1}{2}C_{123}\alpha_{33}, \\
 \frac{dC_{13}}{dT} &= \frac{1}{2}[(C_{113} + C_{123})\alpha_{11} + (2C_{13} + C_{133})\alpha_{33}].
 \end{aligned}
 \tag{2.16}$$

Используя полученные выражения (2.14) – (2.16), данные по известным модулям УП2П, УПЗП и ТКЛР для кристаллов соответствующих симметрий, в таблицах 2.1 – 2.4 приведено сравнение полученных нами температурных зависимостей упругих постоянных с реальными экспериментальными данными.

Таблица 2.1. Сравнение расчетных и экспериментальных температурных зависимостей тригональных кристаллов  $\text{LiNbO}_3$  и  $\text{SiO}_2$

$dC_{FC}/dT$ , $10^6$ Па/К	$\text{LiNbO}_3$			$\text{SiO}_2$		
	Расчет, [89-91,]	Расчет, [90-92]	Эксп. [93]	Расчет, [82, 94, 95]	Эксп. [83]	Эксп. [96]
$dC_{11}/dT$	-39,0	10,7	-34,6	-4,9	-4,2	-3,8
$dC_{33}/dT$	-21,1	-0,3	-36,8	-13,0	-16,9	-20,8
$dC_{44}/dT$	-18,2	-12,0	-12,2	-4,0	-9,9	-10,1
$dC_{66}/dT$	-12,8	-4,9	-10,3	2,1	7,0	7,5
$dC_{14}/dT$	5,1	-5,2	-1,7	-2,7	-1,8	-1,9

Таблица 2.2. Сравнение расчетных и экспериментальных температурных зависимостей тригональных кристаллов  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$  и  $\text{Al}_2\text{O}_3$

$dC_{FC}/dT$ , $10^6$ Па/К	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$			$\text{Al}_2\text{O}_3$		
	Расчет [97, 98]	Эксп. [99]	Эксп. [100]	Расчет [101-103]	Эксп. [104]	Эксп. [101]
$dC_{11}/dT$	-39,0	10,7	-34,6	-4,9	-4,2	-3,8
$dC_{33}/dT$	-21,1	-0,3	-36,8	-13,0	-16,9	-20,8
$dC_{44}/dT$	-18,2	-12,0	-12,2	-4,0	-9,9	-10,1
$dC_{66}/dT$	-12,8	-4,9	-10,3	2,1	7,0	7,5
$dC_{14}/dT$	5,1	-5,2	-1,7	-2,7	-1,8	-1,9

Таблица 2.3. Сравнение расчетных и экспериментальных температурных зависимостей гексагональных кристаллов Zn, Mg и Er

$dC_{FC}/dT$ , $10^6$ Па/К	Zn		Mg		Er	
	Расчет [105-107]	Эксп. [108]	Расчет [106, 109, 110]	Эксп. [110]	Расчет [111-113]	Эксп. [114]
$dC_{11}/dT$	-41,8	-79,2	-15,4	-18,0	-6,3	-20,2
$dC_{33}/dT$	-47,1	-18,5	-18,2	-19,9	-13,4	-11,0
$dC_{44}/dT$	-23,7	-32,1	-5,8	-8,4	-2,3	-7,7
$dC_{66}/dT$	-15,7	-	-7,0	-2,0	-2,9	-4,9
$dC_{14}/dT$	-11,1	-8,0	-1,0	-0,9	-1,6	1,6

Таблица 2.4. Сравнение расчетных и экспериментальных температурных зависимостей тетрагональных кристаллов  $\text{TeO}_2$  и  $\text{KN}_2\text{PO}_4$ .

$dC_{FC}/dT$ , $10^6$ Па/К	$\text{TeO}_2$			$\text{KN}_2\text{PO}_4$		
	Расчет [115-117]	Расчет [117]	Эксп. [118]	Расчет [119-121]	Расчет [107]	Эксп. [122]
$dC_{11}/dT$	-13,9	-15,1	-20,2	-29,5	-47,0	-52,5
$dC_{33}/dT$	-19,7	-29,5	-31,5	-30,9	-33,3	-36,7
$dC_{44}/dT$	0,6	-2,0	-3,5	-1,6	-7,7	-3,8
$dC_{66}/dT$	-11,8	-29,3	-22,0	-1,3	-3,3	-3,7
$dC_{12}/dT$	-11,3	-16,9	-21,2	-13,0	-9,4	-
$dC_{13}/dT$	-2,9	-1,5	4,9	-4,2	-5,0	-

Как следует из табл. 2.1 – 2.4, рассчитанные значения температурных зависимостей, в основном, хорошо согласуются с экспериментальными данными. Как было сказано ранее, отрицательное значение  $TC_{ij}$  считается нормальной температурной зависимостью упругой постоянной. При расчете для монокристалла кварца было получено anomальное поведение  $TC_{66}$ , что согласуется с экспериментом. Наилучшее согласие с экспериментом наблюдается у диагональных констант  $C_{11} \dots C_{66}$ . Необходимо заметить, что расчетные значения  $TC_{ij}$  для некоторых кристаллов (кварц, ниобат лития и пр.) показали хорошее согласование с экспериментом по знаку и величине, в то время как наихудшее совпадение отмечено для кристаллов Zn и Er.

Основная причина несовпадения расчетных и экспериментальных результатов кроется в неточности измерения модулей УП2П и УП3П, а также коэффициентов линейного расширения. Зачастую такие измерения проводятся разными группами и разными методами, используя экспериментальные образцы, полученные различными

способами. Так, влияние дефектов в кристаллической структуре кристалла должно выразиться в ошибках определения модулей УПЗП. Аналогично, эксперименты по определению величин  $TC_{ij}$  также обладают своими характерными ошибками и погрешностями.

Рассмотрим более подробно anomальное поведение коэффициента  $TC_{66}$  в тригональных кристаллах. Для удобства перепишем (2.14) в несколько ином виде, используя соотношения связи между модулями УПЗП:

$$\frac{dC_{66}}{dT} = 4C_{66}\alpha_{11} + C_{166}\alpha_{11} + C_{266}\alpha_{11} + C_{366}\alpha_{33}. \quad (2.17)$$

Такой вид записи возможен благодаря внутренней симметрии тензора УПЗП. Подставляя численные значения ТКЛР, УП2П и УПЗП в (2.17), заметим, что первое слагаемое (ответственное за геометрическую нелинейность) всегда положительно, в то время как остальные слагаемые могут иметь как положительный, так и отрицательный знаки. Так как знак ТКЛР исключительно положительный, а величины УПЗП по абсолютному значению, как правило, превышают модули УП2П, знак правой части определяется знаками модулей УПЗП. Анализируя значения УПЗП монокристалла кварца, можно заметить необычное соотношение:  $|C_{112}| > |C_{111}|$ . Запишем значения модулей УПЗП, использованных в (2.17):  $C_{166} = -3,775 \cdot 10^{10}$ ,  $C_{266} = +3,525 \cdot 10^{10}$  и  $C_{366} = +14,75 \cdot 10^{10}$  (в Паскалях). Таким образом, сумма первого, третьего и четвертого слагаемых в (2.17) превышает по модулю вклад 2-го слагаемого с отрицательным знаком, что и дает в итоге положительную величину  $TC_{66}$ .

### 2.3 Развитие температурной зависимости упругих постоянных 2-го порядка кубических кристаллов. Учет нелинейных упругих постоянных вплоть до 4-го порядка

Как следует из (2.11), за линейный вклад в температурную зависимость собственных значений и упругих постоянных ответственны нелинейные модули упругости УПЗП. В целях уточнения температурной зависимости упругих свойств кристаллов рассмотрим влияние упругих постоянных более высокого порядка, а именно упругих постоянных 4-го порядка (УП4П). Ограничимся лишь рассмотрением высокосимметричных кубических кристаллов. Для некоторых из них известны как модули УПЗП, так и УП4П. Симметрия тензоров и независимые коэффициенты УП4П приведены в приложении Б. Для учета квадратичной поправки по температуре возникающие вследствие теплового расширения статические деформации для кубических кристаллов запишем в виде

$$\bar{\eta}_{PQ} = \alpha_{PQ}^{\text{эфф}} \Delta T = (\alpha_{PQ} + \beta_{PQ} \Delta T) \Delta T, \quad (2.18)$$

где, в отличие от (2.3), учтена температурная зависимость ТКЛР. Тогда, учитывая вклад модулей УП4П, уравнение состояния (2.4) примет вид

$$\tilde{\tau}_{AB} = C_{ABKL}^* (\bar{\eta}) \tilde{\eta}_{KL} = \left[ C_{ABKL}^S + C_{ABKLPQ}^S \bar{\eta}_{PQ} + \frac{1}{2} C_{ABKLPQMN}^S \bar{\eta}_{PQ} \bar{\eta}_{MN} \right] \tilde{\eta}_{KL}. \quad (2.19)$$

Таким образом, учитывая (2.5), (2.7), (2.18) и (2.19), выражения для тензора Грина-Кристоффеля:

$$\begin{aligned} \Gamma_{BC}(\bar{\tau}) = & \left\{ C_{ABCD}^S + (C_{ABPD}^S \delta_{CQ} + C_{ABCDPQ}^S) \alpha_{PQ} \Delta T + \right. \\ & \left. + \left[ (2C_{ABPD}^S \delta_{CQ} + C_{ABCDPQ}^S) \beta_{PQ} + (2C_{ABMPD}^S \delta_{CN} + C_{ABCDPQMN}^S) \alpha_{PQ} \alpha_{MN} \right] \Delta T^2 \right\} N_A N_D. \end{aligned} \quad (2.20)$$

В таком случае тензор Грина-Кристоффеля для распространения ОАВ в кубических кристаллах в направлении  $N \parallel [100]$  примет аналогичный (2.10) вид, однако сами значения матричных компонент изменятся:

$$\Gamma_{BC}(\Delta T) = \begin{pmatrix} \Gamma_{11}(\Delta T) & 0 & 0 \\ & \Gamma_{22}(\Delta T) & 0 \\ & & \Gamma_{22}(\Delta T) \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

где

$$\begin{aligned} \Gamma_{11} = & C_{11} + (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112}) \alpha_{11} \Delta T + \\ & + \left[ 2\beta_{11} C_{11} + 2\alpha_{11}^2 (C_{111} + 2C_{112}) + \beta_{11} (C_{111} + 2C_{112}) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \alpha_{11}^2 (C_{1111} + 4C_{1112} + 2C_{1122} + 2C_{1123}) \right] (\Delta T)^2, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{22} = & C_{44} + (2C_{44} + C_{144} + 2C_{155}) \alpha_{11} \Delta T + \\ & + \left[ 2\beta_{11} C_{44} + 2\alpha_{11}^2 (C_{144} + 2C_{155}) + \beta_{11} (C_{144} + 2C_{155}) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \alpha_{11}^2 (C_{1144} + 4C_{1155} + 2C_{1255} + 2C_{1266}) \right] (\Delta T)^2. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Симметрия модулей УП4П приведена в [123]. Собственные значения тензора (2.21) равны  $\lambda_1 = \rho_0 v_L^2 = \Gamma_{11}(\Delta T)$  для чистой продольной волны, и  $\lambda_2 = \lambda_3 = \rho_0 v_S^2 = \Gamma_{22}(\Delta T)$  для чистой сдвиговой. Поляризация сдвиговых волн перпендикулярна вектору  $N$ . Выражения (2.22) и (2.23) могут быть использованы для получения температурных коэффициентов 1-го и 2-го порядков упругих постоянных  $C_{11}$  и  $C_{44}$ . Для получения значений температурных коэффициентов для модуля  $C_{12}$  необходимо дополнительно рассмотреть волну, распространяющуюся вдоль направления [110].

Для вычисления, например температурных коэффициентов 1-го и 2-го порядков  $TC_{11}$  и  $T^2C_{11}$  запишем представление собственных значений так:

$$\lambda(\Delta T) = C_{11} + TC_{11} \cdot \Delta T + T^2C_{11} \cdot (\Delta T)^2 = C_{11} + \Delta C_{11}. \quad (2.24)$$

Здесь  $TC_{11} = dC_{11}/dT$  и  $T^2C_{11} = d^2C_{11}/dT^2$ . Рассматривая ОАВ, распространяющиеся вдоль направлений [100] и [110], и, действуя аналогично п. 2.2, получим следующие температурные зависимости упругих постоянных в кубическом кристалле:

$$\begin{aligned}
 TC_{11} &= (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112})\alpha_{11}, \\
 T^2C_{11} &= (2C_{11} + C_{111} + 2C_{112})\beta_{11} + (2C_{111} + 4C_{112} + 1/2C_{1111} + 2C_{1112} + C_{1122} + C_{1123})\alpha_{11}^2, \\
 TC_{44} &= (2C_{44} + C_{144} + 2C_{155})\alpha_{11}, \\
 T^2C_{44} &= (C_{44} + C_{144} + 2C_{155})\beta_{11} + (2C_{144} + 4C_{155} + 1/2C_{1144} + C_{1155} + 2C_{1255} + C_{1266})\alpha_{11}^2, \\
 TC_{12} &= (2C_{12} + C_{123} + 2C_{112})\alpha_{11}, \\
 T^2C_{12} &= (2C_{12} + C_{123} + 2C_{112})\beta_{11} + (C_{111} + 4C_{112} + C_{123} + C_{1112} + C_{1122} + 5/2C_{1123})\alpha_{11}^2.
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

Эти коэффициенты были рассчитаны для ряда кубических кристаллов и проведено сравнение с экспериментальными данными. Выбор исследуемых кристаллов был ограничен рядом кубических кристаллов, по которым имеются экспериментальные данные по модулям УП2П, УП3П и УП4П, а также данные по ТКЛР и экспериментальные температурные зависимости модулей УП2П.

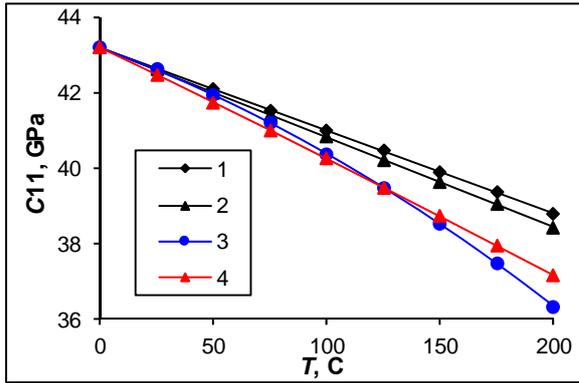
Для наглядности сравним результаты по температурным зависимостям упругих постоянных  $C_{11}$  и  $C_{44}$  кристаллов КСl и Ag. Для расчёта использовали данные по модулям УП2П – УП4П и ТКЛР, известные из литературы и приведенные в табл. 2.6. Значения  $\alpha_{11}$  и  $\beta_{11}$  были определены из аппроксимации экспериментальных данных по температурным зависимостям ТКЛР. Для большинства кристаллов ТКЛР можно достаточно точно аппроксимировать многочленом с линейным по температуре слагаемым в интервале температур от  $-180\dots-140$  °С и до  $\sim 400\dots1000$  °С в зависимости от материала. Полученные результаты отображены на рис. 2.1. Из рисунка хорошо видно, что среди всех теоретических моделей расчет температурных зависимостей с учетом модулей УП4П (1.111) лучше всех согласуется с экспериментальными данными. Расчеты приводились для отклонений температуры от комнатной температуры.

Сравнение рассчитанных и экспериментальных значений  $TC_{FC}$  и  $T^2C_{FC}$ , включая модель Шриваставы с учетом фононного давления, отображено в табл. 2.6. Лучшее согласие между рассчитанными значениями и результатами эксперимента наблюдается для кристаллов КСl и AgBr. Знаки  $TC_{11}$  и  $TC_{44}$  оказываются отрицательными для всех исследуемых кристаллов. Знаки  $T^2C_{11}$  и  $T^2C_{44}$  также отрицательны для всех кристаллов, за исключением экспериментальных результатов по КСl. Знак рассчитанного коэффициента  $TC_{12}$  не совпадает с экспериментальными результатами для кристаллов NaCl, KCl, KBr и NaBr. Учитывая фононное давление [86], все знаки коэффициента  $TC_{12}$  принимают верные значения.

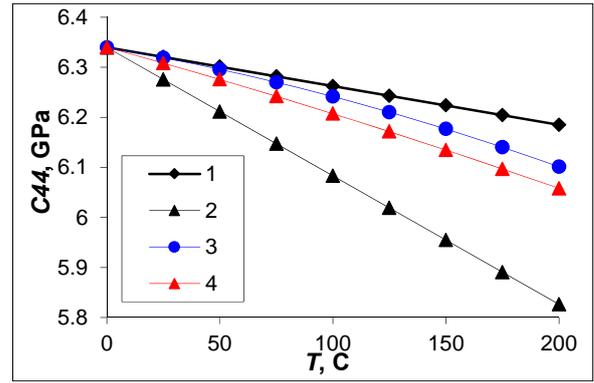
Наилучшее соответствие рассчитанного коэффициента  $TC_{11}$  с экспериментальными данными было получено для кристалла NaCl (ошибка порядка 1 %), NaBr (3 %) и Ag (~11 %). Значения коэффициентов  $TC_{44}$  этих кристаллов также хорошо соответствуют эксперименту. Однако вычисления с использованием модели Шриваставы дают неверные значения коэффициентов  $TC_{11}$  и  $TC_{44}$ . Применение модели с учетом фононного давления к благородным металлам (в данном случае Au и Ag) влечет за собой значительные ошибки в определении температурных коэффициентов 1-го порядка. Используя в расчете значения УП2П – УП4П в выражениях (2.25), достаточно хорошее соответствие эксперименту было получено для коэффициентов  $TC_{FC}$ . Также наблюдается неплохое соответствие по величине коэффициента  $T^2C_{FC}$ .

Таблица 2.5. Используемые в расчете значения ТКЛР (град.<sup>-1</sup>) и упругих постоянных (ГПа) кристаллов KCl и Ag.

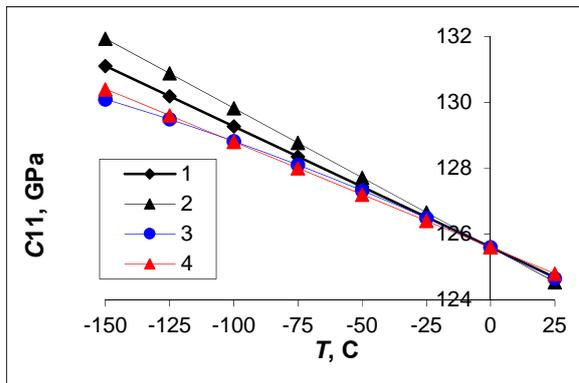
Величина	KCl	Ag	Источник
$\alpha_{11}$	$3,3 \cdot 10^{-5}$	$1,39 \cdot 10^{-5}$	[124, 125]
$\beta_{11}$	$1,0 \cdot 10^{-7}$	$1,86 \cdot 10^{-8}$	
$C_{11}$	41	161	[126, 127]
$C_{12}$	7	119	
$C_{44}$	6	58	
$C_{111}$	-701	-1012	
$C_{112}$	-22	-975	
$C_{123}$	13	162	
$C_{144}$	13	80	
$C_{155}$	-25	-759	
$C_{1111}$	11410	13694	
$C_{1112}$	170	7115	
$C_{1122}$	201	6652	
$C_{1123}$	-30	-387	
$C_{1144}$	-36	-154	
$C_{1155}$	47	5295	
$C_{1255}$	-39	3	
$C_{1266}$	268	6718	



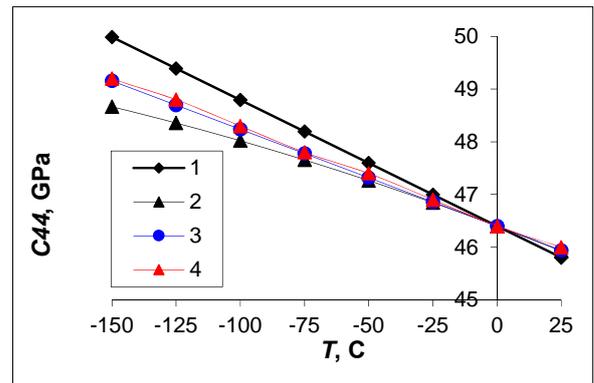
а



б



в



г

Рис. 2.1. Расчетные и экспериментальные зависимости упругих постоянных  $C_{11}$  и  $C_{44}$  кристаллов KCl (а, б) и Ag (в, г). Кривые 1 отображают линейную температурную зависимость в модели Шриваставы (учет фононного давления); 2 – расчетную зависимость в линейном приближении; 3 – нелинейную температурную зависимость с учетом модулей УП4П (1.111); 4 – экспериментальные значения по температурным зависимостям упругих постоянных монокристаллов KCl [128] и Ag [129]

Таблица 2.6. Температурные коэффициенты  $TC_{FC}$  ( $10^6$  Па·К<sup>-1</sup>) и  $T^2C_{FC}$  ( $10^3$  Па·К<sup>-2</sup>) некоторых кубических кристаллов при комнатной температуре

	Источник	$TC_{11}$	$T^2C_{11}$	$TC_{12}$	$T^2C_{12}$	$TC_{44}$	$T^2C_{44}$
NaCl	Расчет	-35,2	-23,8	-2,8	22,4	-2,4	1,8
	Учет $P_{phonon}$	-38,0	-	0,6	-	-5,7	-
	Эксп. [128]	-35,5	-7,5	1,9	-0,1	-3,2	-1,9
KCl	Расчет	-21,9	-61,5	-0,8	56,6	-0,6	-2,1
	Учет $P_{phonon}$	-23,7	-	1,2	-	-2,6	-
	Эксп. [128]	-28,0	-17,6	3,6	-0,8	-1,2	-1,0
KBr	Расчет	-34,5	-13,5	-1,0	10,1	-0,8	-0,4
	Учет $P_{phonon}$	-26,5	-	1,2	-	-3,0	-
	Эксп. [128]	-25,7	-16,2	4,1	-9,6	-1,0	-1,2
NaBr	Расчет	-29,6	-10,4	-3,1	13,5	-1,3	3,2
	Учет $P_{phonon}$	-32,3	-	1,4	-	-5,8	-
	Эксп. [130]	-30,5	-0,7	1,30	6,0	-3,4	-6,0
KF	Расчет	-81,0	-93,4	-2,8	88,3	-4,8	13,4
	Учет $P_{phonon}$	-88,3	-	2,4	-	-10,0	-
	Эксп. [131]	-35,5	21,5	-2,4	-2,7	2,6	2,6
AgCl	Расчет	-31,7	-34,8	-1,2	11,2	-8,2	-1,7
	Учет $P_{phonon}$	-34,7	-	-5,3	-	-4,1	-
	Эксп. [132]	-63,8	-22,8	-17,7	9,8	-2,7	-0,1
Au	Расчет	-56,0	-17,9	-33,0	-5,2	-24,9	-5,2
	Учет $P_{phonon}$	-63,5	-	-25,6	-	-32,4	-
	Эксп. [129]	-40,0	-15,1	-29,9	-11,4	-11,8	3,7
Ag	Расчет	-36,7	-45,5	-21,5	-10,2	-18,4	-21,8
	Учет $P_{phonon}$	-19,3	-	-5,0	-	-8,2	-
	Эксп. [129]	-32,9	-9,0	-18,2	-8,4	-18,7	-1,3

Данные по упругим постоянным и ТКЛР были взяты для монокристалла NaCl из [126] и [133] соответственно; для KCl – из [126] и [124]; для KBr – из [126] и [134]; для NaBr – из [126] и [135]; для KF – из [126] и [136]; для AgCl – из [126] и [137]; для Au – из [127] и [138]; для Ag – из [127] и [125].

Анализируя выражение (1.111), заметим, что температурные коэффициенты 1-го порядка  $TC_{FC}$  зависят от ТКЛР, УП2П и УП3П. Однако температурные коэффициенты 2-го порядка  $T^2C_{FC}$  уже выражаются через комбинацию УП3П и УП4П, а также ТКЛР, записанного в виде (2.18). Рассмотрим раздельное влияние коэффициентов на результирующую температурную зависимость упругих постоянных. Для этого зафиксируем изменение температуры, и рассмотрим, для примера, изменение  $C_{11}$ . Для

этого запишем вклады в изменение  $C_{11}$  (2.24) как сумму отдельных компонент в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\Delta C_{11} &= \Delta C_{11}^{(1)} + \Delta C_{11}^{(2)} + \Delta C_{11}^{(3)} + \Delta C_{11}^{(4)} + \Delta C_{11}^{(5)} + \Delta C_{11}^{(6)}, \\
\Delta C_{11}^{(1)} &= 2C_{11}\alpha_{11}\Delta T, \\
\Delta C_{11}^{(2)} &= (C_{111} + 2C_{112})\alpha_{11}\Delta T, \\
\Delta C_{11}^{(3)} &= 2C_{11}\beta_{11}(\Delta T)^2, \\
\Delta C_{11}^{(4)} &= (C_{111} + 2C_{112})\beta_{11}(\Delta T)^2, \\
\Delta C_{11}^{(5)} &= (2C_{111} + 4C_{112})\alpha_{11}^2(\Delta T)^2, \\
\Delta C_{11}^{(6)} &= (1/2 C_{1111} + 2C_{1112} + C_{1122} + C_{1123})\alpha_{11}^2(\Delta T)^2.
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Для учета относительного вклада отдельных компонент в (2.26) рассмотрим безразмерную величину  $\Delta C_{FC}^{(n)} = 100 \cdot \Delta C_{FC}^{(n)} / \sum_{k=1}^n |\Delta C_{FC}^{(k)}|$ , принимая изменение температуры  $\Delta T = 50$  К. Численный анализ температурных зависимостей исследуемых кристаллов приведен в табл. 2.7.

Анализируя табл. 2.7, заметим, что наибольший вклад в температурные зависимости вносит коэффициент  $\Delta C_{FC}^{(2)}$ , линейный по температуре и включающий в себя модули УПЗП и коэффициент  $\alpha_{11}$  (физическая нелинейность). Следующий по значимости вклад дает коэффициент  $\Delta C_{FC}^{(1)}$ , включающий в себя модули УП2П и  $\alpha_{11}$  (геометрическая нелинейность).

Наименьший вклад в температурную зависимость упругих постоянных дают члены  $\Delta C_{FC}^{(3)}$  и  $\Delta C_{FC}^{(5)}$ . Таким образом, при вычислении температурной зависимости модулей УП2П этими слагаемыми зачастую можно пренебречь. Вклад  $\Delta C_{FC}^{(6)}$ , который включает в себя модули УП4П и  $\beta_{11}$ , хоть и оказывается достаточно малым, но достаточно сильно влияет на отклонение от линейного закона температурной зависимости.

Учет более высоких степеней нелинейных упругих постоянных, произведенный выше, наряду с учетом температурной зависимости ТКЛР, ведет за собой уточнение реального поведения температурных зависимостей упругих постоянных кристаллов. Особенно важным оказывается учет этих эффектов при отклонении зависимости от линейного характера. Однако на данный момент все же существует значительное отклонение расчетных величин от экспериментальных для ряда кристаллов. Вероятно, данные расхождения связаны с погрешностями экспериментального определения модулей

УПЗП и, особенно, УП4П. Например, значения УП4П определяют, используя метод генерации второй гармоники ([126]), который в реальности подходит лишь для оценки суммарного вклада некоторых комбинаций постоянных УП4П, а не для их отдельного определения.

Так, погрешности, связанные с модулями УП4П, влияют лишь на ошибку коэффициента  $T^2C_{ij}$ . Экспериментальное исследование температурных зависимостей упругих постоянных может быть использовано в качестве косвенной проверки значений УП4П. Экспериментальное определение температурной зависимости ТКЛР также оказывается весьма сложной задачей. Таким образом, определение нелинейного коэффициента  $\beta_{FC}$  содержит в себе значительные погрешности.

Таблица 2.7. Относительный вклад различных слагаемых в температурную зависимость модулей УП2П кубических кристаллов при  $\Delta T = 50$  К

Кристалл	$\Delta C_{FC}$	$\Delta C_{FC}^{(1)}, \%$	$\Delta C_{FC}^{(2)}, \%$	$\Delta C_{FC}^{(3)}, \%$	$\Delta C_{FC}^{(4)}, \%$	$\Delta C_{FC}^{(5)}, \%$	$\Delta C_{FC}^{(6)}, \%$
NaCl	$\Delta C_{11}$	8,4	85,0	0,4	4,2	0,3	1,7
	$\Delta C_{44}$	19,4	72,7	1,0	3,6	0,3	3,0
	$\Delta C_{12}$	20,8	70,0	1,0	3,5	1,7	3,0
KCl	$\Delta C_{11}$	8,4	77,3	1,3	11,7	0,3	1,1
	$\Delta C_{44}$	22,2	63,9	3,4	9,7	0,2	0,6
	$\Delta C_{12}$	25,9	58,1	3,9	8,8	2,4	0,9
KBr	$\Delta C_{11}$	9,3	84,6	0,4	3,7	0,4	1,7
	$\Delta C_{44}$	21,8	72,8	0,9	3,1	0,3	1,0
	$\Delta C_{12}$	25,1	66,2	1,1	2,9	3,3	1,5
NaBr	$\Delta C_{11}$	9,0	84,9	0,4	3,3	0,4	2,2
	$\Delta C_{44}$	16,5	76,0	0,6	2,9	0,3	3,7
	$\Delta C_{12}$	26,6	62,6	1,0	2,4	2,2	5,1
KF	$\Delta C_{11}$	8,9	81,1	0,7	6,4	0,6	2,3
	$\Delta C_{44}$	24,8	60,4	1,9	4,7	0,5	7,7
	$\Delta C_{12}$	20,7	64,2	1,6	5,0	3,4	5,0
AgCl	$\Delta C_{11}$	6,7	86,7	0,4	5,1	0,2	0,9
	$\Delta C_{44}$	14,7	79,2	0,9	4,7	0,2	0,4
	$\Delta C_{12}$	13,1	80,5	0,8	4,8	0,4	0,4
Au	$\Delta C_{11}$	7,9	89,4	0,2	1,8	0,1	0,6
	$\Delta C_{44}$	3,7	93,7	0,1	1,8	0,1	0,5
	$\Delta C_{12}$	10,8	86,7	0,2	1,7	0,2	0,4
Ag	$\Delta C_{11}$	9,1	83,9	0,6	5,6	0,1	0,7
	$\Delta C_{44}$	7,0	86,2	0,5	5,8	0,1	0,5
	$\Delta C_{12}$	11,0	82,3	0,7	5,5	0,2	0,4

Выводы к главе 2:

- Рассмотрены теории и исследована температурная зависимость модулей УП2П кристаллов.
- Получены аналитические выражения для температурных зависимостей модулей УП2П тригональных, тетрагональных и гексагональных кристаллов. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными.
- Для кубических кристаллов получены аналитические выражения температурных зависимостей модулей УП2П с учетом нелинейных упругих постоянных вплоть до УП4П. Для доступных сравнению кристаллов отмечено улучшенное соответствие экспериментальных и расчётных зависимостей.

Основные результаты, полученные в данной главе, опубликованы в следующих статьях и трудах симпозиума:

1. Sorokin, B. P. Temperature coefficients of elastic constants of trigonal, hexagonal and tetragonal crystals / B. P. Sorokin, A. V. Telichko // Proc. of The IEEE Int. Joint Confer. of the Frequency Control and the European Frequency and Time Forum, San-Francisco, USA, 2-5 May 2011 / San-Francisco, 2011. P. 1-4.
2. Sorokin, B. P. Temperature coefficients of elastic constants of trigonal, hexagonal, and tetragonal crystals / B. P. Sorokin B.P., A. V. Telichko // IEEE Trans. on Ultrason, Ferroel. and Freq. Contr. – 2012. – V. 59, N 2. – P. 311-314.
3. Telichko, A.V. Extended temperature dependence of elastic constants in cubic crystals / A. V. Telichko, B. P. Sorokin // Ultrasonics – 2015. – V. 64. – P. 1-5.

### ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ СИНТЕТИЧЕСКОГО МОНОКРИСТАЛЛА АЛМАЗА ПА ТИПА

В качестве основного объекта исследований был выбран синтетический монокристалл алмаза, который обладает многими свойствами, потенциально привлекательными для приложений в акустоэлектронных устройствах. Необходимо было исследовать распространение ОАВ в образцах синтетических монокристаллов алмазов, синтезированных в ФГБНУ ТИСНУМ, с целью сравнения с результатами по модулям упругости, полученным на кристаллах естественного происхождения. Кроме того, известные из литературы модули УПЗП алмаза были либо вычислены теоретически, либо экспериментально определены с помощью метода взрывного нагружения, не имеющего достаточной точности. В работе [139] измерены производные модулей упругости по давлению и температуре в монокристаллах естественного происхождения, однако модули УПЗП не вычислялись. Для экспериментального определения модулей УПЗП синтетического монокристалла алмаза Па типа нами был использован метод измерений изменений скоростей звука под статическим одноосным давлением, являющийся неявным стандартным для таких измерений.

Кристалл алмаза обладает кубической симметрией с точечной группой  $m\bar{3}m$  и пространственной группой  $Fd\bar{3}m$ . Направления типа  $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$ ,  $[\bar{1}00]$  и т.п., являются эквивалентными и записываются как  $\langle 100 \rangle$ . Так же в кубическом кристалле эквиваленты направления  $\langle 110 \rangle$  и т.д. Кристалл алмаза не является пьезоэлектриком, поскольку имеет центр симметрии. В направлении  $[111]$ , являющимся акустической осью, распространяется продольная волна с максимально известной скоростью звука в твердых телах (порядка 18600 м/с). Направления типа  $\langle 100 \rangle$  также являются акустическими осями. При вычислении упругих постоянных 3-го порядка можно использовать любые акустические волны, но предпочтение отдавалось направлениям чистых мод.

#### 3.1 Исследование распространения объемных акустических волн в синтетическом монокристалле алмаза

##### 3.1.1 Экспериментальные установки

Для экспериментальных образцов малых размеров с высокой скоростью звука оказалось целесообразно использовать метод длинного импульса (импульсно-фазовый метод) [140]. Блок-схема установки для измерения скоростей ОАВ в кристаллах небольших размеров (не более двух мм) приведена на рис. 3.1. Напряжение стабильного генератора непрерывных колебаний 1 поступает на электронный ключ 2, стробируемый П-образными импульсами модулятора 4. Мощный прямоугольный радиочастотный

импульс возбуждает кварцевый преобразователь 6. Ультразвуковой импульс проходит через буферный стержень из плавленного кварца 8 и, после наложения падающего и отражённого акустических импульсов образце 7, электрический сигнал, усиленный приемником 3, наблюдается на экране осциллографа 5, развертка которого синхронизована импульсом с модулятора 4. Число полувольт  $n$ , укладывающихся в образце длиной  $l$  на частоте  $f$ , и скорость звука  $v_{\text{ОАВ}}$  связаны соотношением:

$$v_{\text{ОАВ}} = \frac{2lf}{n + \theta / 2\pi}, \quad (3.1)$$

где  $\theta$  – фазовый угол волны, отраженной от границы раздела образец/промежуточный слой/звукопровод. Фазовые скорости ОАВ измерялась импульсно-фазовым методом [141-143, 61] на установке Ritec Advanced System RAM-5000 (рис. 3.2) в частотном диапазоне 10-200 МГц\*.

В эксперименте использовались кварцевые пьезопреобразователи X- и Y- срезов с основными частотами 12 МГц для продольных и 18 МГц для сдвиговых волн. Измерения проводили на гармониках преобразователей вплоть до 200 МГц. Для создания акустического контакта между образцом и буфером из плавленного кварца использовали эпоксидную смолу. В процессе измерения определялись частоты  $f_n$ , при которых отраженные волны оказывались точно в фазе. Поскольку достаточно точно толщину слоя акустической смазки определить сложно, применяли методику минимизации ее влияния. С этой целью была исследована частотная зависимость скорости звука в алмазе, связанная с изменением фазового угла.

Как было показано в работах [140-142], угол  $\theta$  с ростом частоты уменьшается, а число полувольт  $n$  увеличивается.

Скорости ОАВ в кристаллах, линейные размеры которых превышают два мм, могут быть определены импульсным эхо-методом. В образец перпендикулярно его плоскопараллельным граням посредством пьезопреобразователя вводится короткий видеоимпульс, пьезопреобразователь при этом возбуждается благодаря присутствию в спектре видеоимпульса гармоники, близкой к резонансной частоте. Наблюдая многократные отражения акустического импульса от параллельных граней образца на осциллографе и зная длину распространения волны, можно вычислить скорость ОАВ. Таким образом, скорость ОАВ, измеренная импульсным эхо-методом с одним пьезопреобразователем (однозондовый метод), определяется по простой формуле

---

\* Конкретная реализация методики длинного импульса выполнена к.ф.-м.н., с.н.с. ФГБНУ ТИСНУМ Квашниным Г.М.

$$v_{\text{OAB}} = \frac{2l}{\tau}, \quad (3.2)$$

где  $\tau$  – время двойного прохождения акустической волны. Блок-схема экспериментальной установки по измерению скоростей звука ОАВ импульсным эхо-методом представлена на рис. 3.3. В качестве импульсного генератора использовался Avtech AVRK-2-B (амплитуда видеопульсов до 400 В, длительность – от 5 нс), осциллографа – Tektronix DPO 71254В.

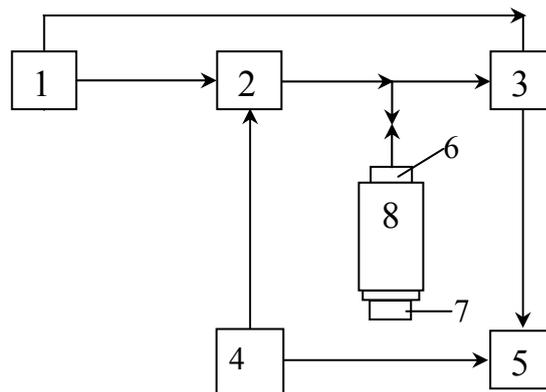


Рис. 3.1. Блок-схема ультразвуковой установки (импульсно-фазовый метод): 1 – ВЧ генератор; 2 – электронный ключ; 3 – приемник; 4 – модулятор; 5 – осциллограф; 6 – кварцевый пьезопреобразователь; 7 – образец; 8 – буфер

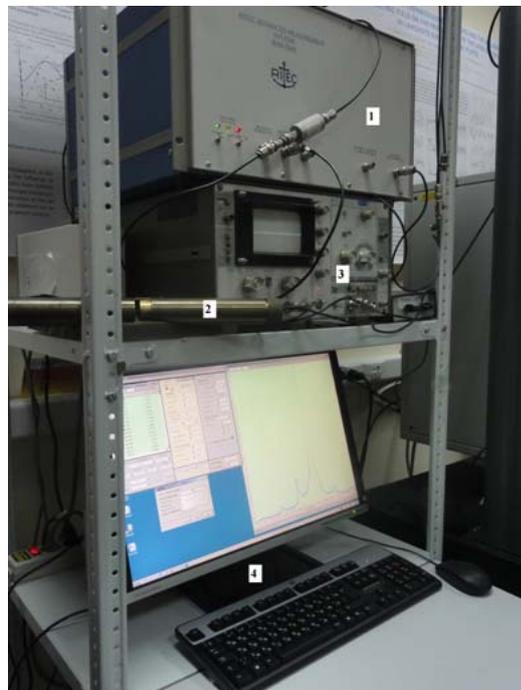


Рис. 3.2. Ультразвуковая установка для исследований скоростей звука в твёрдых телах на частотах 10-200 МГц: 1 – Ritec Advanced System RAM-5000; 2 – ультразвуковая линия; 3 – осциллограф C1-75; 4 – дисплей управляющего компьютера

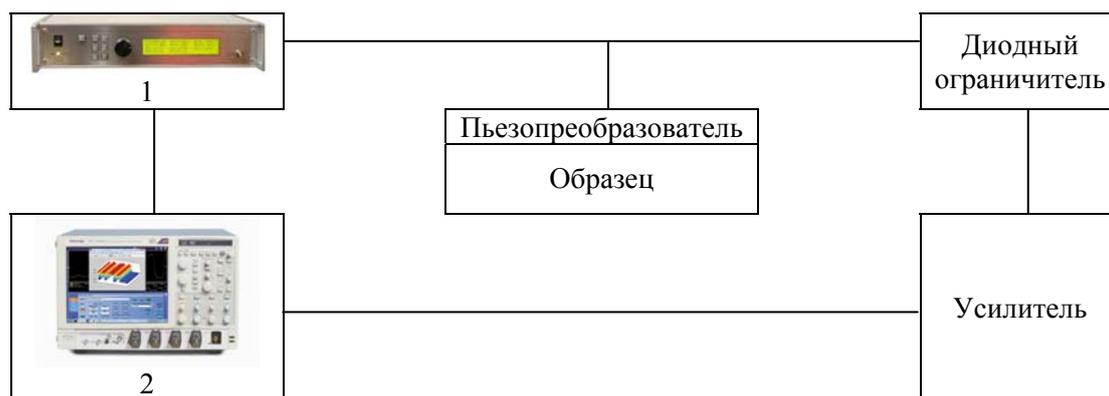


Рис. 3.3. Блок-схема ультразвуковой установки для исследований скоростей ОАВ импульсным эхо-методом. 1 – импульсный генератор; 2 – осциллограф

### 3.1.2 Исследуемые образцы

Экспериментально исследовались образцы диэлектрического синтетического монокристалла алмаза Па типа, выращенные на затравке методом температурного градиента в условиях высоких температур и давлений (в англоязычной литературе High Pressure High Temperature – HPHT) в ФГБНУ ТИСНУМ (Москва, Троицк). В процессе синтеза давление составляло 5,3 ГПа, температура – 1350° С, длительность синтеза – 160 часов. Основные параметры качества образцов приведены в табл. 3.1. Выращенные кристаллы имели характерный габитус в виде комбинации основных простых форм – кубооктаэдр (рис. 3.4.), и затем обрабатывались на специальных полировальных станках до прямоугольной формы с заданной ориентацией. В данной работе использовались образцы с гранями  $\{100\}$  либо  $[110]$ ,  $[1\bar{1}0]$  и  $[001]$ . Первичная шлифовка образцов происходила на алмазном полировальнике со скоростью 200-3000 оборотов в минуту. Дальнейшая доводка граней производилась вручную на аналогичном полировальнике с целью наиболее точно получить плоскости заданной ориентации. Контроль ориентации производился методом рентгеновской дифракции на дифрактометре ДР “Промконтроль” (рис. 3.5). Итоговая кристаллографическая разориентация составляла не более 10’.

Таблица 3.1. Свойства исследуемых монокристаллов алмаза

Линейные размеры	до 4 мм
Концентрация азота	до 2 ppm
Теплопроводность	до 2200 Вт/м·К
Диапазон оптической прозрачности	от 225 нм до 25 мкм
Удельное электрическое сопротивление	более $10^{12}$ Ом·м
Твердость	не менее 105 ГПа



Рис. 3.4. Синтетический монокристалл Ia типа

С целью создания качественных образцов производился контроль неплоскопараллельности противоположных граней. Для этого на точном микрометре Mitotoyo (рис. 3.6) с погрешностью 0,5 мкм производился контроль толщины путём измерения размеров образца не менее чем в девяти точках (1 – в центре, 4 – по углам, 4 – по серединам сторон) с обеих сторон. Таким образом, после серии итерации шлифовка/контроль толщины были получены образцы с неплоскопараллельностью менее 1 мкм/см.

Шероховатость исследуемых образцов измерялась методами АСМ на различной исследуемой базе. Измерения производились на приборе Ntegra Prima. Измерения проводились м.н.с. ФГБНУ ТИСНУМ Кравчуком К.С. Характерные АСМ сканы исследуемой алмазной поверхности на базе  $10 \times 10 \text{ мкм}^2$  приведены на рис. 3.7. Значения шероховатости исследуемых образцов  $Ra$  для всех исследуемых образцов не превышало 5 нм.

Исследуемые образцы синтетического монокристалла алмаза Ia типа приведены на рис. 3.8.

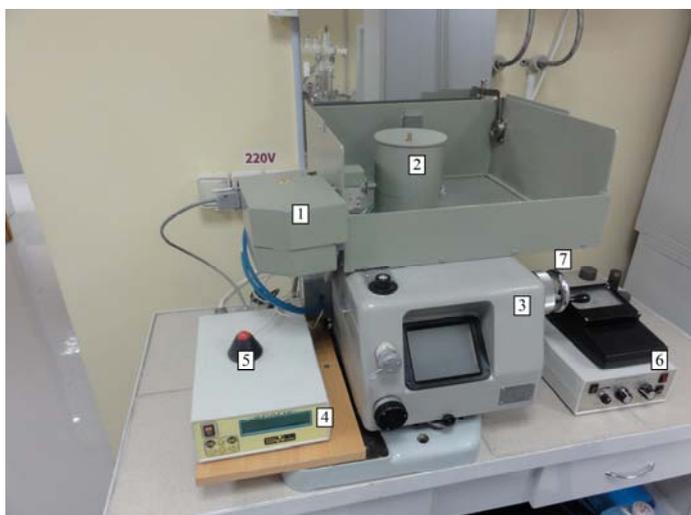


Рис. 3.5. Общий вид рентгеновского дифрактометра ДР «Промконтроль»: 1 – блок рентгеновского излучения; 2 – держатель образца с защитным устройством; 3 – гониометр ГУР-7; 4 – блок управления работой высоковольтного источника; 5 – сигнализация о включении высокого напряжения; 6 – блок индикации рентгеновского излучения «Интенсиметр»; 7 – привод установки углов Брэгга

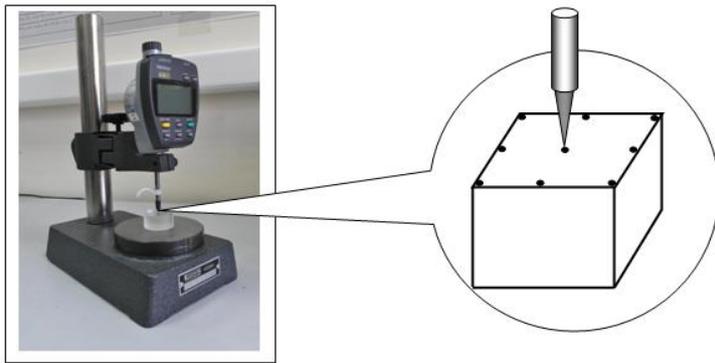
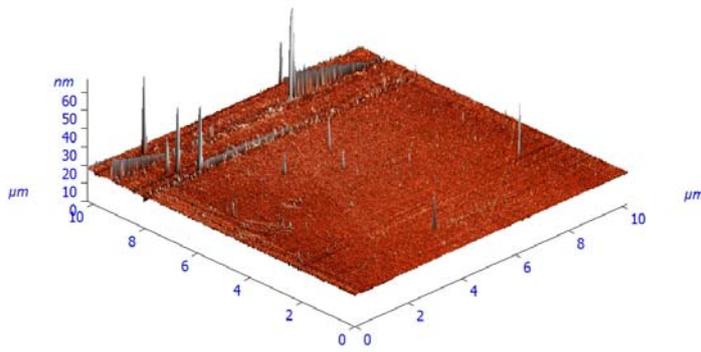
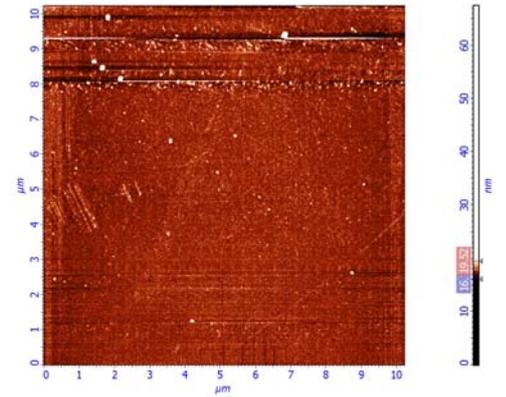


Рис. 3.6. Контроль плоскопараллельности и измерение толщины образцов с помощью цифрового микрометра Mitotoyo

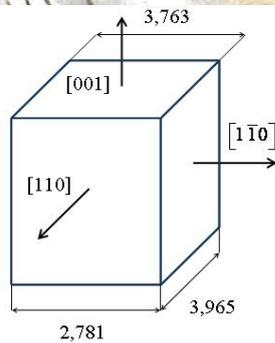
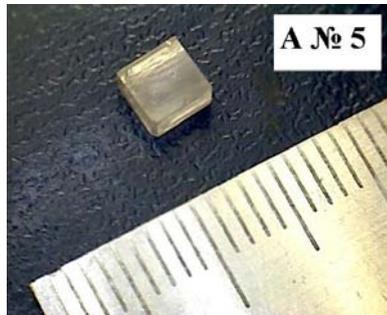


а

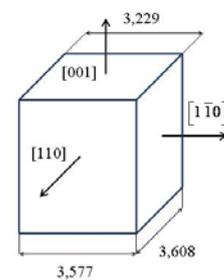
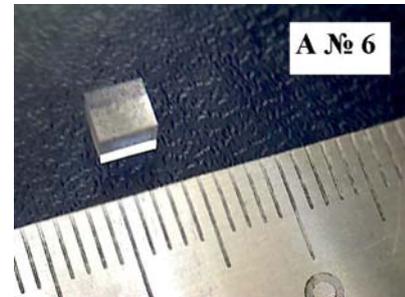


б

Рис. 3.7. АСМ сканы исследуемой поверхности (100) алмаза



а



б

Рис. 3.8. Внешний вид, кристаллографическая ориентация и геометрические размеры (в мм) экспериментальных образцов из синтетических монокристаллов алмазов: а – А №5; б – А №6

### 3.1.3 Экспериментальные результаты измерений скоростей звука в алмазе. Расчёт упругих постоянных. Анализ ошибок

В наших экспериментах в методе длинного импульса на частоте  $\sim 200$  МГц значение  $n$  превышало 60 для продольных и 90 для сдвиговых волн. В итоге поправка  $\theta/360$  к  $n$  в знаменателе формулы (3.1) становится несущественной, а скорость звука асимптотически приближается к скорости звука в бесконечной среде. Измерения на высоких частотах позволяют также минимизировать дисперсионные ошибки, обусловленные дифракционными эффектами, а также пренебречь отражением волн от боковых стенок образца как волновода. Например, на рис. 3.9 приведена частотная зависимость скорости сдвиговой волны  $v_S$  в направлении [100] (акустическая ось), и фазовая скорость стремится к значению 12828 м/с.

Зная плотность алмаза (рентгеновская плотность  $\rho = 3,516$  г/см<sup>3</sup> [142]) скорости ОАВ и используя уравнения, приведенные в табл. 3.2, были вычислены модули УП2П монокристалла алмаза (табл. 3.3). Из табл. 3.3 видно, что наши данные хорошо согласуются с результатами, полученными другими авторам. Если учесть, что, например, в работе [144] плотность алмаза принималась равной 3,512 г/см<sup>3</sup>, то расхождение данных становится еще менее значимым. В работах [144, 145] модули УП2П определялись акустическим методом. В работе [146] использовался оптический метод рассеяния Бриллюэна.

В табл. 3.4 представлены результаты расчета других параметров упругости алмаза. В монокристаллах модуль Юнга зависит от выбранного направления растяжения и может быть рассчитан исходя из модулей упругости. Объемный модуль упругости характеризует всестороннее сжатие, параметр анизотропии – анизотропию упругих свойств кристалла, и, в частности, для упруго-изотропного материала равен единице.

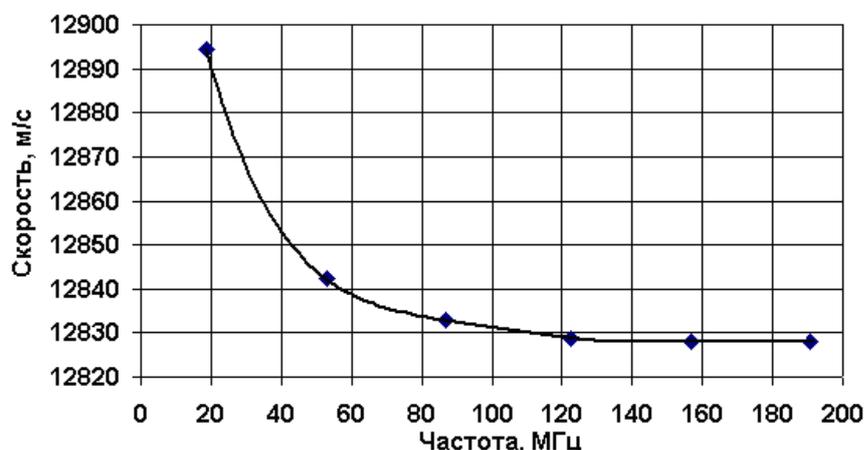


Рис. 3.9. Частотная зависимость скорости сдвиговой волны  $v_S$  в алмазе А №5 в направлении [100]

Таблица 3.2. Экспериментальные значения скоростей ОАВ в синтетическом монокристалле алмаза

$N$	$U$	Тип волны	$\rho v^2$	$v$ , м/с
[100]	[100]	L	$C_{11}$	$17542 \pm 4$
	$\perp[100]$	S	$C_{44}$	$12828 \pm 3$
[110]	[001]	$S_1$	$C_{44}$	$12829 \pm 3$
	$[1\bar{1}0]$	$S_2$	$\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$	$11659 \pm 2$
	[110]	L	$\frac{1}{2}(C_{11}+C_{44}+2C_{12})$	$18333 \pm 4$

Таблица 3.3. Сравнение полученных модулей УП2П (ГПа) синтетического монокристалла алмаза с данными других работ ( $T_{\text{комн.}}$ )

УП2П	[144]	[145]	[146]	Наши данные
$C_{11}$	1079	1084	1078,16	$1081,9 \pm 1,0$
$C_{44}$	124	127	126,63	$125,2 \pm 0,8$
$C_{12}$	578	576,6	577,56	$579,6 \pm 0,2$

Таблица 3.4. Модули Юнга  $E$  (ГПа) в различных кристаллографических направлениях, сдвига  $G$  (ГПа), объемный модуль упругости  $B$  (ГПа) и параметр анизотропии  $A$  алмаза при комнатной температуре

$E_{100}$	$\frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{(C_{11} + C_{12})}$	$1055,0 \pm 1,0$
$E_{110}$	$\frac{4C_{44}(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{2C_{11}C_{44} + (C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$	$1167,3 \pm 1,0$
$E_{111}$	$\frac{3C_{44}(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + 2C_{12} + C_{44}}$	$1210,2 \pm 1,0$
$G$ , в плоскости (100)	$C_{44}$	$578,6 \pm 0,2$
$B$	$\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$	$444,1 \pm 0,6$
$A$	$\frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$	1,21

Для повышения точности измерений использовали также импульсный эхо-метод, который даёт хорошие результаты для образцов алмаза с линейными размерами  $\sim 4$  мм. Определенные импульсным эхо-методом скорости для направления [100] составляли  $v_S = 12818$  м/с,  $v_L = 17542$  м/с, что оказалось равным аналогичным значениям скоростей ОАВ, определенным методом длинного импульса. Для остальных волн также наблюдалось соответствие результатов, полученных обоими методами.

Применяемые в данной работе экспериментальные методы определения скоростей ОАВ отличаются высокой степенью точности, так что инструментальная погрешность

определения скорости составляет  $\sim 0,1$  м/с. Основной вклад в итоговую погрешность скоростей ОАВ вносят ошибки, связанные с качеством изготовления образцов. Так, неплоскопараллельность, равная 1 мкм для образца толщиной 4 мм, вносит вклад в погрешность 0,025%, что для скорости 17000 м/с составляет около 4 м/с. Вкладом шероховатости подложки в итоговую погрешность при значениях  $R_a < 20$  нм можно пренебречь. Улучшение полученных результатов в плане погрешности может быть произведено усреднением полученных результатов на серии различных исследуемых образцов.

Результирующие значения скоростей ОАВ в обоих исследуемых образцах А №5 и А №6 совпадали с точностью до погрешности.

### 3.2. Исследование зависимостей скоростей объемных акустических волн от давления в синтетическом монокристалле алмаза

#### 3.2.1 Экспериментальная установка по приложению одноосного напряжения.

##### Алгоритм определения упругих постоянных 3-го порядка

Для определения модулей УПЗП кристаллов необходимо определять зависимость фазовых скоростей ОАВ от внешнего воздействия, в том числе давления [147, 148]. Одноосное давление прилагалось с помощью электромеханической испытательной машины INSTRON 5965. Максимальная нагрузка могла достигать 5,0 кН, погрешность определения силы составляла  $\sim 2\%$ . Установка состоит из двух штоков, нижний жестко закреплен, а перемещение верхнего контролируется заданием соответствующей программы эксперимента. Основное управление производилось с помощью специальной программы “Bluehill”, установленной на компьютер. Для получения давления в программу вводилась форма верхней грани образца “прямоугольник”, задавались линейные размеры. Таким образом, за давление принималась эффективная величина силы, деленной на площадь образца. С помощью данной программы производится контроль перемещения верхнего штока. Так, например, для обеспечения сохранности образца использовался режим постоянного перемещения верхнего штока. С помощью данной программы задавалась последовательность давление-измерение (рис. 3.10). Так, на изображенном рисунке измерения начинаются с уже механически зажато до давления 20 МПа образца. Сначала происходит приложение одноосного давления со скоростью 0,0001 мм/с до значения 40 МПа, за которым следуют 5 минут в режиме “захват” – штоки покоятся, изменение давления не происходит. В режиме “захват” происходит измерение скорости звука при 40 МПа. Далее аналогично производится поднятие давления до 80 МПа, устанавливается пятиминутный интервал удержания постоянного давления для измерения скорости; затем поднимали давление до 100 МПа и т.п. После последнего измерения на

100 МПа происходит сброс давления, далее шток можно поднять вверх и извлечь исследуемый образец. В экспериментах по давлению скорости перемещения штоков варьировались от 0,01 мм/с до 0,0001 мм/с, максимальное прилагаемое давление составляло ~500 МПа.

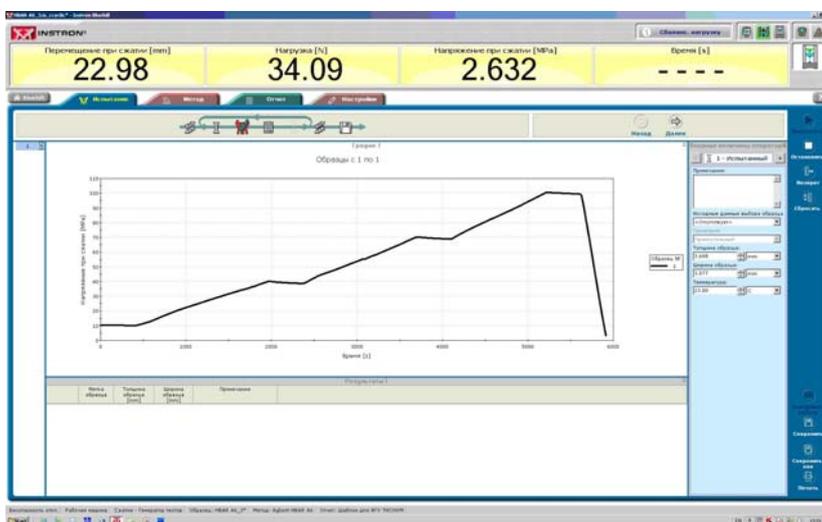


Рис. 3.10. Пример кривой нагружения электромеханической испытательной машиной INSTRON до 100 МПа



Рис. 3.11. Приставка для крепления образцов алмаза в опытах по приложению одноосного давления

В качестве пьезопреобразователей использовались пластинки кварца, причем для эффективного крепления алмаз/преобразователь использовалась специальная конструкция (рис. 3.11).

У кристаллов симметрии  $m\bar{3}m$  всего имеется 6 независимых коэффициентов УПЗП, которые определяются из измерений скоростей звука под давлением. Модули УПЗП кристалла алмаза мы определяли из соотношений для следующих волн:

- $N \parallel [001], U \parallel [001], P \parallel [110]$
- $N \parallel [001], U \parallel [110], P \parallel [110]$
- $N \parallel [110], U \parallel [1\bar{1}0], P \parallel [001]$
- $N \parallel [110], U \parallel [110], P \parallel [001]$
- $N \parallel [110], U \parallel [110], P \parallel [1\bar{1}0]$

- $N \parallel [110], U \parallel [1\bar{1}0], P \parallel [1\bar{1}0]$

Модули УПЗП вычисляются из решения системы уравнений относительно шести неизвестных с правой частью из экспериментально измеренных коэффициентов управления вида (1.111) при условии известности модулей УП2П. Использовались следующие соотношения из приложения Б: 10, 12, 18, 17, 15, 16 (порядок аналогичен вышеприведенным соотношениям). Для удобства выражения коэффициентов управления для использованных в эксперименте волн и направлений приложения давления приведены в таблице 3.5.

Таблица 3.5. Коэффициенты управления для синтетического монокристалла алмаза Па типа

№	$N$	$U$	$M$	$\lambda_i^0$	$\alpha_{vi}$
10	[100]	[100]	[01 $\bar{1}$ ]	$C_{11}$	$\frac{A}{2\lambda_{10}^0} [C_{11}(-2C_{12} + C_{112}) - C_{12}C_{111}]$
12		[01 $\bar{1}$ ]		$C_{44}$	$\frac{1}{4\lambda_{12}^0} \left\{ 2 + A[C_{11}(2C_{44} + C_{144} + C_{155}) - 2C_{12}C_{155}] + 2\frac{C_{456}}{C_{44}} \right\}$
18	[110]	[1 $\bar{1}0$ ]	[001]	$\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$	$\frac{A}{4\lambda_{18}^0} [(C_{11} + C_{12})(C_{112} - C_{123}) - C_{12}(2C_{11} - 2C_{12} + C_{111} - C_{112})]$
17		[110]		$\frac{1}{2}(C_{11}+C_{12}+2C_{44})$	$\frac{A}{4\lambda_{17}^0} [(C_{11} + C_{12})(C_{112} + C_{123} + 2C_{144}) - C_{12}(2C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} + C_{111} + 3C_{112} + 4C_{155})]$
15	[110]	[110]	[1 $\bar{1}0$ ]	$\frac{1}{2}(C_{11}+C_{12}+2C_{44})$	$\frac{A}{8\lambda_{15}^0} \left[ 2 \left( 2C_{11}A - \frac{1}{AC_{44}} \right) \lambda_{15}^0 + C_{11}C_{111} + (3C_{11} - 2C_{12})C_{112} + 4 \left( C_{11} - \frac{1}{AC_{44}} \right) C_{155} - 4C_{12}C_{144} - 2C_{12}C_{123} \right]$
16		[1 $\bar{1}0$ ]		$\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$	$\frac{A}{8\lambda_{16}^0} \left[ \left( 2C_{11} + \frac{1}{AC_{44}} \right) 2\lambda_{16}^0 + C_{11}C_{111} - (C_{11} + 2C_{12})C_{112} + \frac{2}{AC_{44}} C_{123} \right]$

Примечание 1: Единичные векторы:  $N$  – направления распространения,  $U$  – поляризации,  $M$  – направления оси давления.

Примечание 2:  $A = \frac{1}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$

### 3.2.2 Экспериментальные результаты. Анализ ошибок

В синтетическом монокристалле алмаза были определены изменения фазовых скоростей ОАВ, возникающие при одноосном давлении, для различных акустических мод, направлений распространения и давления. Как правило, величина одноосного давления в каждом из экспериментов достигала 30 МПа, и в отдельных случаях – ~100 МПа. На рис. 3.12 изображены зависимости  $\Delta v/v$  от давления для различных акустических мод

синтетического монокристалла алмаза Па типа. Как видно из рис. 3.12, во всех экспериментах наблюдается линейная зависимость изменения скоростей ОАВ от величины давления, что позволило определить коэффициенты управления как тангенсы углов наклона кривых. При расчёте одноосное напряжение сжатия принимали отрицательным. Во всех случаях при повышении давления наблюдалось увеличение скоростей звука ( $\Delta v > 0$ ). Для повышения точности эксперимента для одной и той же волны проводилась серия экспериментов и полученные таким образом коэффициенты управления усреднялись. Коэффициенты управления приведены в табл. 3.6.

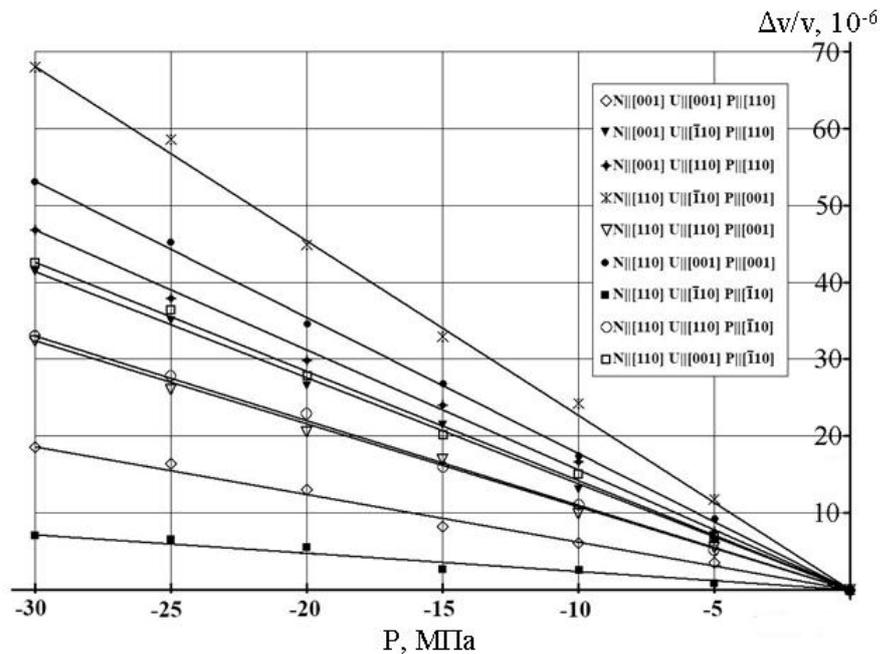


Рис. 3.12. Зависимость относительных изменений скоростей ОАВ  $\Delta v/v$  от давления для различных акустических мод и направлений давления в синтетическом монокристалле алмаза

Таблица 3.6. Значения коэффициентов управления для синтетического монокристалла алмаза Па типа

№ согласно табл. 3.5	<i>N</i>	<i>U</i>	<i>M</i>	$\alpha_v, 10^{-13} \text{ Па}^{-1}$
10	[001]	[001]	[110]	$-6,2 \pm 0,5$
12		[110]		$-13,8 \pm 0,9$
		$[\bar{1} \bar{1} 0]$		$-15,6 \pm 1,2$
18	[110]	$[\bar{1} \bar{1} 0]$	[001]	$-22,7 \pm 1,7$
17		[110]		$-10,8 \pm 0,9$
		[001]		$-17,7 \pm 1,2$
16		$[\bar{1} \bar{1} 0]$	$[\bar{1} \bar{1} 0]$	$-2,4 \pm 0,4$
15		[110]		$-10,9 \pm 0,9$
		[001]		$-14,2 \pm 1,1$

Для того чтобы минимизировать эффекты неровности, шероховатости и непараллельности образца, между образцом и штоками подкладывались пленки из алюминиевой фольги. Пленки, поджимаясь штоком, обеспечивали сглаживание неровностей образца. Так же для сведения к минимуму влияния таких пленок перед экспериментами производилось предварительное нагружение образца в зависимости от конкретного эксперимента до 10-450 МПа. После этого давление сбрасывалось до значений порядка 5-50 МПа – кристалл оставался зажатым, пленки прижаты к образцу. Предполагается, что данное предварительное нагружение также способствует выравниванию образца: при установке возможны минимальные наклоны образца, крены в любую из сторон, поэтому предварительное нагружение позволяет избавиться от такого рода проблем.

### 3.3 Определение упругих постоянных 3-го порядка синтетического монокристалла алмаза

Определим упругие постоянные 3-го порядка по методике, описанной в п. 3.2.1. Экспериментальные результаты по измерению скоростей звука в зависимости от внешнего одноосного давления, выраженные через коэффициенты управления, приведены в табл. 3.6, а необходимые выражения для вычисления модулей УПЗП соотношения – в табл. 3.5. Из решения линейной неоднородной системы уравнений были вычислены значения модулей УПЗП синтетического монокристалла алмаза, представленные в табл. 3.7 в сравнении с известными данными.

Полученные нами результаты по модулям УП2П и УПЗП использовались для расчёта анизотропии параметров распространения ОАВ в алмазе, в том числе, в условиях действия одноосного давления. На рис. 3.13 приведена анизотропия фазовых скоростей ОАВ в кристалле алмаза вдоль направления [110], на рис. 3.14 – анизотропия угла поляризации, на рис. 3.15 – анизотропия угла отклонения потока энергии ОАВ. На рис. 3.16 изображена анизотропия скоростей распространения ОАВ и коэффициентов управления для волн, распространяющихся в плоскости (001).

Таблица 3.7. Модули УПЗП (в ГПа) синтетического монокристалла алмаза.

	[149]	[150]	[151]	[152]	[22]	Наши данные
$C_{111}$	-6300±300	-7367	-6260	-6475	-7603±600	-7660±650
$C_{112}$	-800±100	-2136	-2260	-1947	-1909±554	-1550±350
$C_{123}$	0±400	1040	112	982	835±1447	3470±700
$C_{144}$	0±300	186	-674	115	1438±853	-3130±700
$C_{155}$	-2600±100	-3292	-2860	-2998	-3938±375	-2630±500
$C_{456}$	-1300±100	76	-823	-135	-2316±743	-700±300

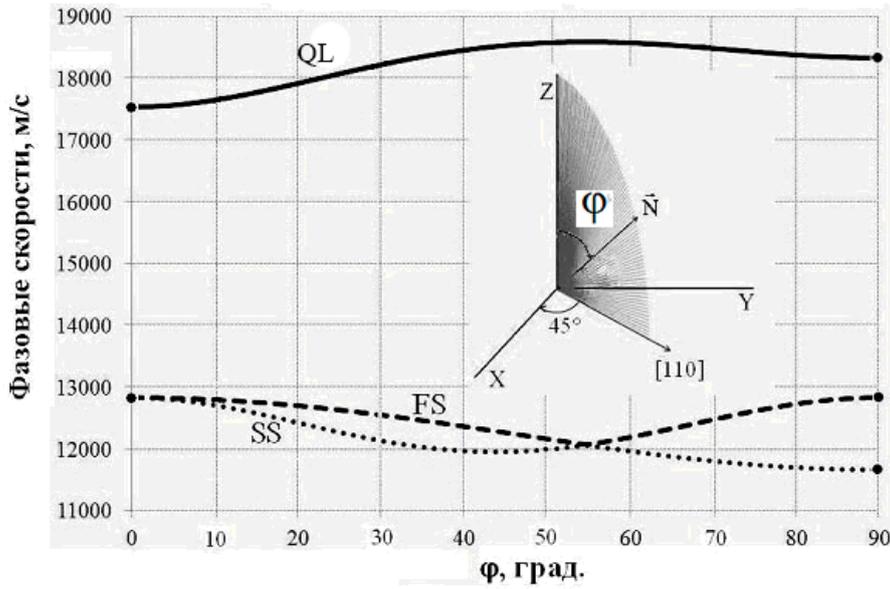


Рис. 3.13. Анизотропия фазовых скоростей распространения ОАВ в плоскости (110) монокристалла алмаза. Символом QL обозначена квазипродольная волна, символом FS – быстрая квазисдвиговая волна, символом SS – медленная квазисдвиговая волна.

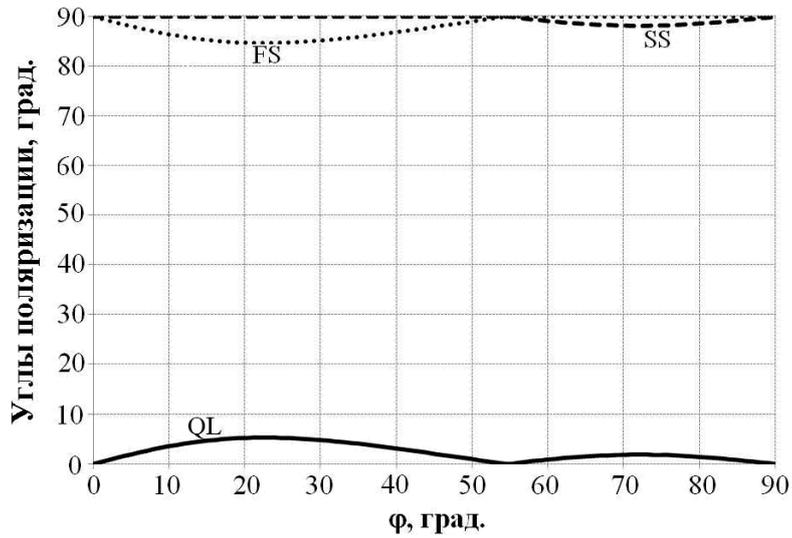


Рис. 3.14. Анизотропия угла поляризации распространения ОАВ в плоскости (110) монокристалла алмаза

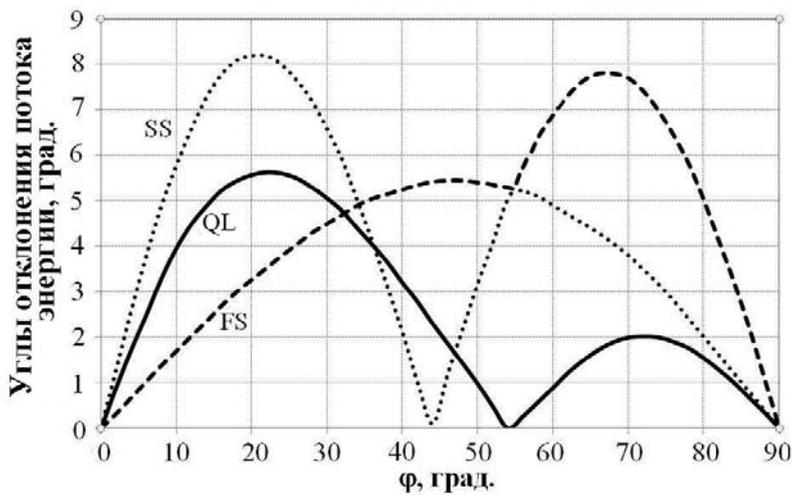


Рис. 3.15. Анизотропия угла отклонения потока энергии ОАВ в плоскости (110) монокристалла алмаза

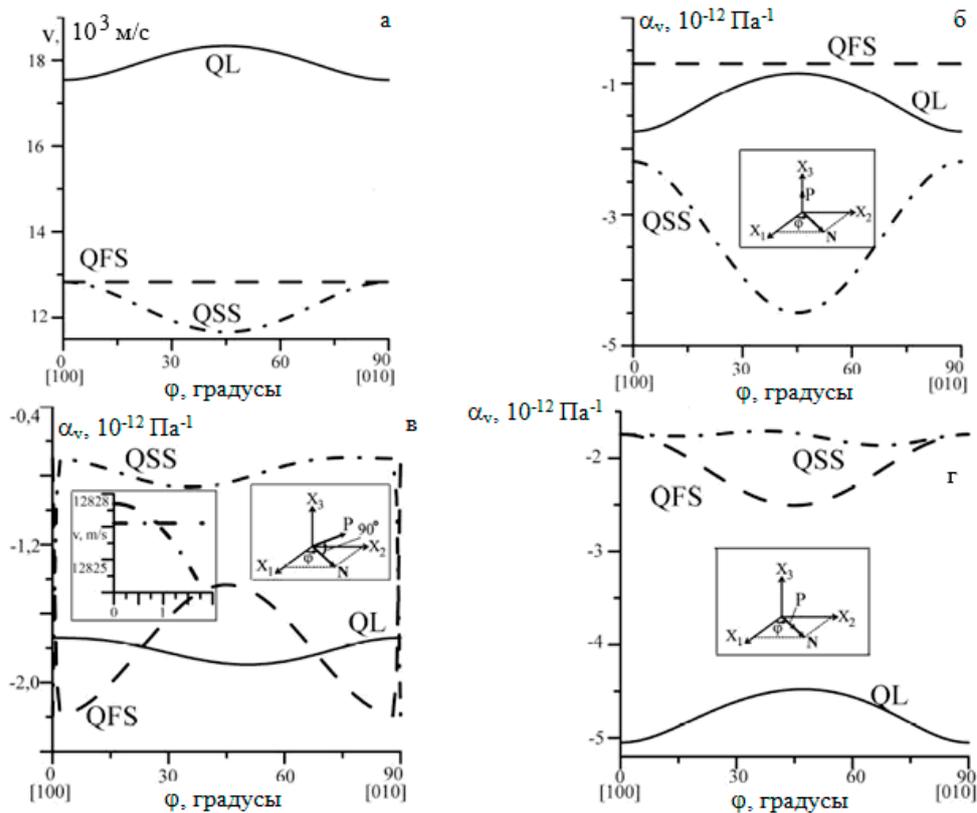


Рис. 3.16. Анизотропия скоростей ОАВ (а) и коэффициентов управления при воздействии давления вдоль [001] (б); давление перпендикулярно направлению распространения (в); давление параллельно направлению распространения (г) для волн, распространяющихся в плоскости (001)

Максимальная скорость звука продольной волны в алмазе наблюдается в направлении [111] и составляет  $\sim 18800$  м/с (рис. 3.13). На рис. 3.16, а видны акустические оси [100] и [001] (скорости сдвиговых волн совпадают). При приложении давления происходит снятие вырождения (рис. 3.16, в) и акустические оси «исчезают». Однако, как было показано в работе [16], каждая из исходных акустических осей истинного касательного типа с индексом Пуанкаре  $n = 1$  на самом деле расщепляется на две акустические оси конического типа с индексом Пуанкаре  $n = 1/2$ , и угол расщепления зависит от величины давления. Наибольший коэффициент управления наблюдается для сдвиговой волны при  $N \parallel M$  (рис. 3.16, з).

### Выводы к главе 3:

- Проведен анализ распространения ОАВ в кристаллах симметрии  $m3m$ , предложена система уравнений для определения независимых модулей УПЗП.
- Проведены эксперименты по исследованию зависимостей скоростей ОАВ синтетического монокристалла алмаза Па типа от одноосного давления, получены линейные экспериментальные зависимости.
- Впервые получены данные по модулям УПЗП синтетического монокристалла алмаза Па типа:  $C_{111} = -7660 \pm 650$ ,  $C_{112} = -1550 \pm 350$ ,  $C_{123} = -3470 \pm 700$ ,  $C_{144} = -3130 \pm 700$ ,  $C_{155} = -2630 \pm 500$ ,  $C_{456} = -700 \pm 300$  (в ГПа).

Основные результаты, полученные в данной главе, опубликованы в следующих статьях и материалах конференций:

1. Сорокин, Б. П. Упругие свойства монокристалла синтетического алмаза / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, А. В. Теличко, М. С. Кузнецов, Г. И. Гордеев // Сб. трудов Конф. «Сессия научного совета РАН по акустике и XXV сессия российского акустического общества», Таганрог, Россия, 17-20 сентября 2012 / Таганрог, 2012. С. 306-310.
2. Sorokin, B. P. Influence of the temperature and uniaxial pressure on the elastic properties of synthetic diamond single crystal / B. P. Sorokin, G. M. Kvashnin, M. S. Kuznetsov, A. V. Telichko, S. I. Burkov // Proc. of The 2012 IEEE Int. Ultrasonics Symp., Dresden, Germany, 7-10 October 2012 / Dresden, 2012. P. 763-766.
3. Гордеев, Г. И. Упругие свойства монокристалла синтетического алмаза / Г. И. Гордеев, Г. М. Квашнин, М. С. Кузнецов, Б. П. Сорокин, А. В. Теличко // Изв. ВУЗ'ов, серия Хим. хим. техн. – 2013. – Т. 56, № 7. – С. 50-52.
4. Сорокин, Б. П. Экспериментальное исследование линейных и нелинейных упругих свойств синтетического монокристалла алмаза / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, М. С. Кузнецов, А. В. Теличко, С. И. Бурков // Журн. СФУ. Сер. Мат. и физ. – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 120-126.

## ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ АЛМАЗА

Поскольку алмаз не является пьезоэлектриком, для его применения в акустоэлектронных устройствах необходим внешний источник возбуждения акустических волн. В качестве пьезоэлектрика был выбран нитрид алюминия AlN, обладающий высоким значением коэффициента электромеханической связи и, по сравнению с оксидом цинка, его акустическое согласование с алмазной подложкой несколько лучше. Кроме того, AlN – хороший диэлектрик, устойчивый к многим повреждающим факторам окружающей среды. Однако получаемая в результате слоистая пьезоэлектрическая структура заведомо сложнее по технологии по сравнению с обычными пьезорезонаторами и требует специального внимания на всех этапах изготовления. Поэтому ниже будут подробно рассмотрены некоторые вопросы технологии и контроля качества слоистых пьезоэлектрических структур типа «Me1/AlN/Me2/(100)алмаз», выполнено математическое моделирование с целью оптимизации конструкции составных акустических резонаторов на основе синтетического алмаза, а также исследованы СВЧ акустоэлектронные свойства таких САР.

### 4.1 Исследование качества слоистых пьезоэлектрических структур.

#### 4.1.1 Определение глубины нарушенного слоя

В качестве подложек использовались полированные алмазные пластины ( $R_a \leq 15$  нм) из (100) ориентированных синтетических монокристаллов Па типа с низким содержанием азота и других примесей (табл. 3.1).

Авторами [153] в применении к лейкосапфиру  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  было показано, что исследование толщины нарушения кристаллической структуры в поверхностном слое, возникающем после абразивной обработки, возможно посредством наблюдения Кикучи-линий (КЛ) при дифракции отражённых быстрых электронов. Так, визуализация КЛ с улучшением качества дифракционной картины на монокристалле лейкосапфира производилась путём последовательного снятия нарушенного слоя вплоть до применения финишного трибохимического полирования. Для лучших образцов было выполнено индексирование КЛ и определена глубина нарушенного слоя на уровне 40 нм, достигнутая только после трибохимического полирования.

Исследование качества поверхности алмазных пластин методом наблюдения КЛ после полировки было проведено с.н.с. ФГБНУ ТИСНУМ Бормашовым В.С. при помощи метода дифракции обратно рассеянных быстрых электронов (Electron Back-Scattering Diffraction, EBSD) в растровом электронном микроскопе. Данный метод позволяет исследовать структурное совершенство тонких приповерхностных слоев

материала толщиной менее 1 мкм с высоким пространственным разрешением. Исследования проводились с помощью РЭМ FEI Quanta 200 с приставкой EDAX для наблюдения картин дифракции. Схема проведения измерений в режиме EBSD показана на рис. 4.1. Для обработки картин дифракции, в частности, индцирования Кикучи-линий, использовалось штатное программное обеспечение OIMEDAX (рис. 4.2).

Согласно геометрии задачи, направление на центр люминофорного экрана составляет угол относительно нормали к поверхности примерно  $65^\circ$ . Поэтому при исследовании пластин алмаза ориентации (001) наиболее близким к центру экрана отражением должно быть направление [111], т.к. угол между плоскостями (100) и (111) в алмазе составляет примерно  $55^\circ$  (рис. 4.1). Однако точное положение картины на экране определяется расположением области анализа относительно нормали, проходящей через центр экрана.

Для оценки характерной глубины области анализа алмазной пластины в режиме EBSD был выполнен расчет профилей выхода обратно рассеянных электронов и общей глубины проникновения при вариации энергии первичного пучка электронов. В расчете учитывалась реальная геометрия проведения измерений (угол падения  $70^\circ$ ). Как следует из табл. 4.1, изменяя энергию первичного пучка, можно в широком диапазоне варьировать глубину области анализа и, тем самым, анализировать структурное качество алмазной пластины на разном удалении от поверхности.

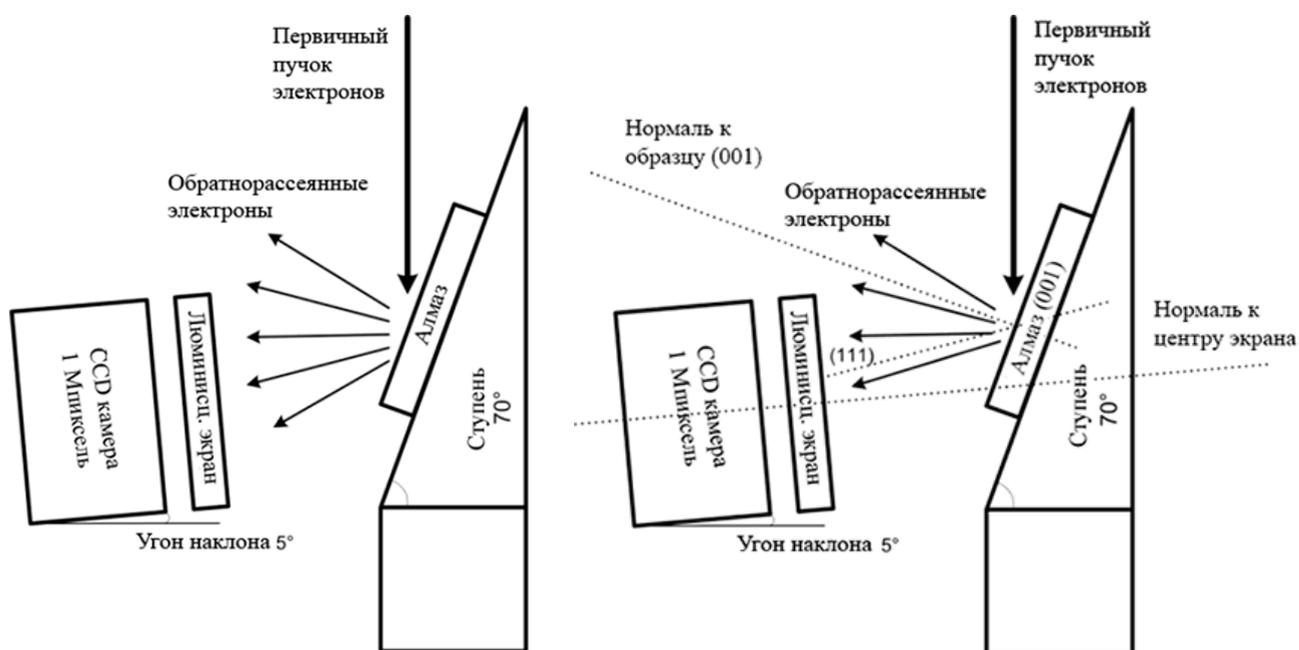


Рис. 4.1. Схема проведения измерений в режиме дифракции обратно рассеянных электронов EBSD

Таблица 4.1. Результаты расчета глубины выхода обратно рассеянных и вторичных электронов при вариации энергии первичного пучка

Энергия пучка	Глубина проникновения электронов	Максимальная глубина выхода обратно рассеянных электронов	Глубина области анализа EBSD (97% всех собранных электронов)
3 кэВ	100 нм	30 нм	25 нм
5 кэВ	220 нм	70 нм	50 нм
10 кэВ	650 нм	200 нм	150 нм
20 кэВ	2.6 мкм	700 нм	550 нм
30 кэВ	5 мкм	1.5 мкм	1.3 мкм

Измерения картин дифракции с исследуемой алмазной пластины проводилось при ускоряющих напряжениях 3, 5, 10 и 30 кэВ. Была исследована серия образцов монокристаллов синтетического алмаза с ориентировкой (001) с различной степенью качества обработки поверхности: от стандартной полировки в «мягком» направлении на круге с со связанным алмазным абразивом 10/7 с усилием 300 г вплоть до улучшенной финишной обработки с операциями: 1) полировка по «мягкому» направлению на алмазном порошке 2/1 с усилием 300 г в течение 5 минут; 2) полировка по «мягкому» направлению на порошке 2/1, 100 г, 5 минут; 3) доводка путём поворота образца к «твердому» направлению и полирование на порошке 2/1, 100 г, 290 минут. Анализ выполнялся в нескольких (не менее 3-х) точках образца для проверки однородности его свойств. Выбирались области на поверхности без видимых в режиме вторичных электронов дефектов (загрязнений, трещин, выкрашиваний, царапин и т.п.).

В качестве примера картины дифракции для образца с улучшенной финишной обработкой, полученные при ускоряющем напряжении 30 и 3 кэВ, приведены на рис. 3а и 3б. Очевидно, что отчётливые КЛ наблюдаются как для максимального, так и минимального значений ускоряющего напряжения.

Интенсивность картин дифракции в режиме с энергией электронов 3 кэВ снижается очень сильно, т.к. используемый люминофор имеет максимум свечения при энергии электронов порядка 10 кэВ. Отметим, что аналогичные четкие линии Кикучи-линии, соответствующие решетке алмаза, наблюдались на всех подготовленных образцах, в том числе, со стандартной обработкой.

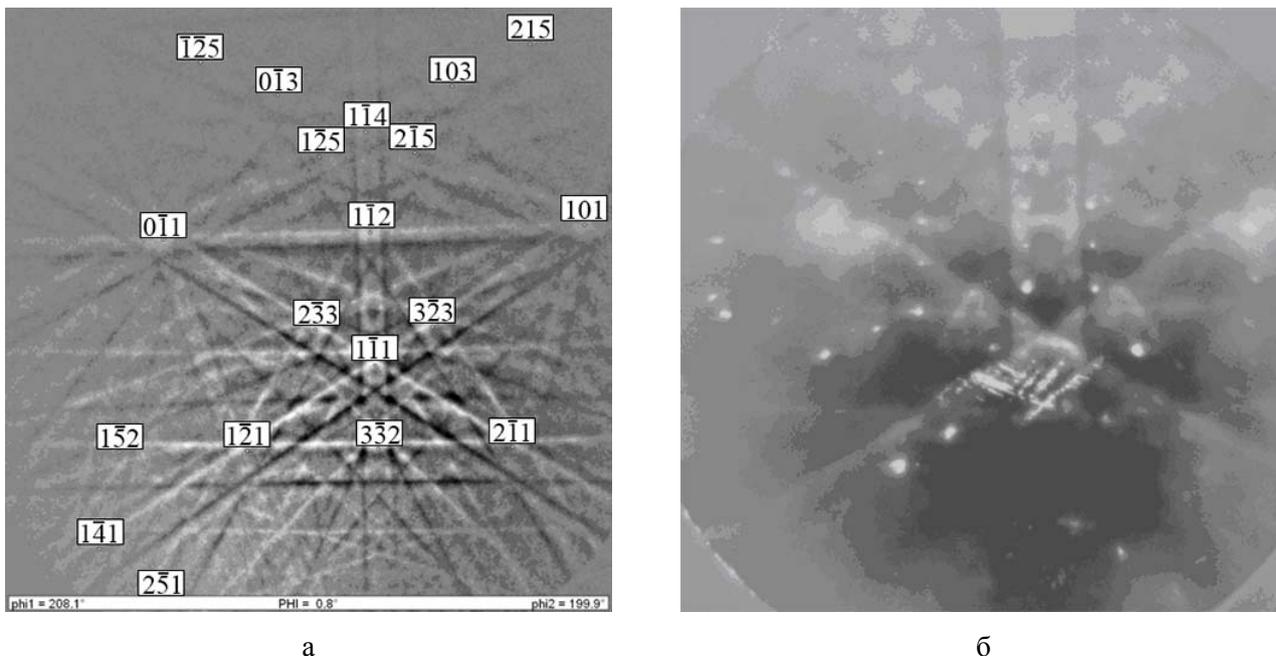


Рис. 4.2. Картины дифракции электронов при различном ускоряющем напряжении: а) ускоряющее напряжение 30 кэВ; б) ускоряющее напряжение 3 кэВ

Таким образом, используя данные по картинам дифракции и результаты табл. 4.1, можно утверждать, что даже после типовой абразивной обработки поверхности алмаза глубина структурно нарушенного слоя не превышает 20–30 нм [154]. Данное обстоятельство существенно отличает алмазные подложки от всех других, включая лейкосапфир.

#### 4.1.2 Исследование качества напыляемых пленок

Перед напылением металлических и пьезоэлектрических тонких пленок производилась предварительная отмывка алмазных подложек в ультразвуковой ванне с последовательным использованием поверхностно-активных веществ, ацетоне и изопропиловом спирте. Чистые алмазные пластины помещались в специальные колодцы, в которых могли устанавливаться маски для создания необходимых конфигураций наносимых слоев. В случае необходимости нанесения слоев металла сложной формы и/или микронных размеров применялся метод фотолитографии, как стандартной, так и взрывной. Фотолитография производилась на установке лазерной литографии Heidelberg  $\mu$ PG 101. Основная работа по напылению пленок производилась сотрудниками ФГБНУ ТИСНУМ Волковым А.П., Бормашовым В.С. и Головановым А.В. Вместе с пластинами алмаза на столике напылительной установки размещались кремниевые или стеклянные пластины в качестве образцов-спутников для контроля параметров напыляемых пленок. Процессы напыления плёнок осуществлялись методом магнетронного распыления мишеней из сверхчистых металлов с помощью установки AJA ORION 8. Базовый вакуум рабочего объема лучше  $5 \times 10^{-7}$  торр обеспечивался

вакуумным крионасосом. Слои металлизации наносились при температуре порядка  $300^{\circ}\text{C}$  при давлении аргона  $(5\div 10)\times 10^{-3}$  торр. Длительность напыления металлических электродов составляла от 10 до 30 мин. Слои из нитрида алюминия на пластины из монокристалла алмаза наносились реактивным распылением с добавлением в рабочую камеру азота, для формирования необходимых конфигураций пленок AlN использовались металлические защитные маски. Длительность напыления слоёв нитрида алюминия различной толщины составляла 10 – 120 часов. Контроль толщины напыляемых плёнок *in-situ* производился с помощью метода пьезоэлектрического резонатора, калиброванного по получаемым результатам.

Контроль качества, толщины и морфологии плёнок AlN производился на образцах-спутниках из кремния и стекла методами рентгеновской дифрактометрии, растровой электронной микроскопии и атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Для контроля качества атомной структуры образец-спутник из стекла помещался на гониометрическую приставку порошкового дифрактометра для исследования структуры поликристаллических образцов TETA ARL X'TRA. Применение в качестве стеклянного образца-спутника удобно по причине отсутствия рефлексов. Производилась съёмка рентгеновской дифрактограммы на излучении медного анода  $\lambda_{\text{Cu}\alpha_1} = 1,54056 \text{ \AA}$  на предмет обнаружения рефлекса (002) нитрида алюминия, соответствующего необходимой ориентации гексагональных осей кристаллитов плёнки AlN перпендикулярно плоскости подложки. Пример рентгеновской дифрактограммы образца-спутника AlN/Mo/(100) Si показан на рис. 4.3.

Показателем качества плёнки AlN является наличие рефлексов, указывающих на определённую ориентацию кристаллитов AlN в синтезированной плёнке. Такими рефлексами для гексагональной структуры AlN являются линии (002) и (004). Если имеются дополнительные рефлексы, говорят о наличии проекции кристаллитов AlN на базовую плоскость. Количественно преимущественную ориентацию кристаллитов оценивают, измеряя полную ширину дифракционной линии (002) на половине высоты (ПШПВ). Из рис. 4.3 следует, что, помимо линии (002), присутствуют рефлексы (100) и (110), что указывает на нежелательную проекцию ориентации кристаллитов AlN параллельно плоскости подложки. Полная ширина линии (002) на половине высоты для образца-спутника AlN/Mo/(100) Si оказалась равной  $\text{ПШПВ} = 0,213^{\circ}$ . Для всех остальных исследуемых образцов ПШПВ также не превышала  $0,2^{\circ}$ . Съёмка дифрактограмм производилась сотрудником ФГБНУ ТИСНУМ Аксененковым В.В.

Для контроля толщины и морфологии плёнки AlN исследовали поперечный скол и главную поверхность образца-спутника с помощью сканирующего электронного

микроскопа JSM-7600F. Типичная микрофотография верхней поверхности образца-спутника с преимущественной ориентацией (002) кристаллитов нитрида алюминия показана на рис. 4.4. На рис. 4.5 показан поперечный скол образца-спутника AlN/Pt/Si, на котором были получены РЭМ-спектры волно-дисперсионного микроанализа с целью определения локального химического состава. Результаты показаны в таблице 4.1. Спектры 3 – 5, снятые в пределах плёнки AlN, показывают примерное соответствие стехиометрическому соотношению для AlN, хотя некоторые отклонения в пределах толщины плёнки имеются. РЭМ исследования проводились сотрудником ФГБНУ ТИСНУМ Ивановым Л.А.

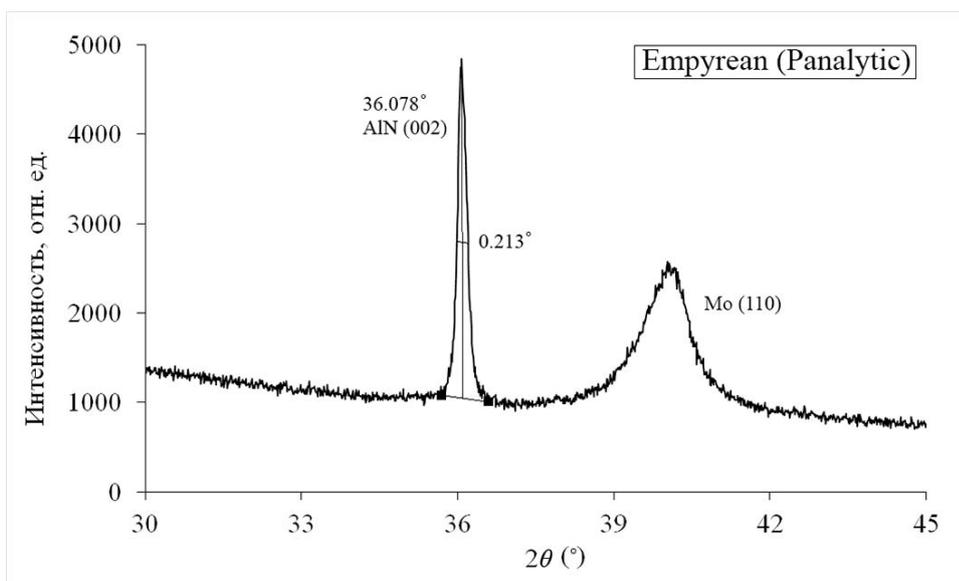


Рис. 4.3. Рентгеновская дифрактограмма образца-спутника AlN/Mo/(100) Si

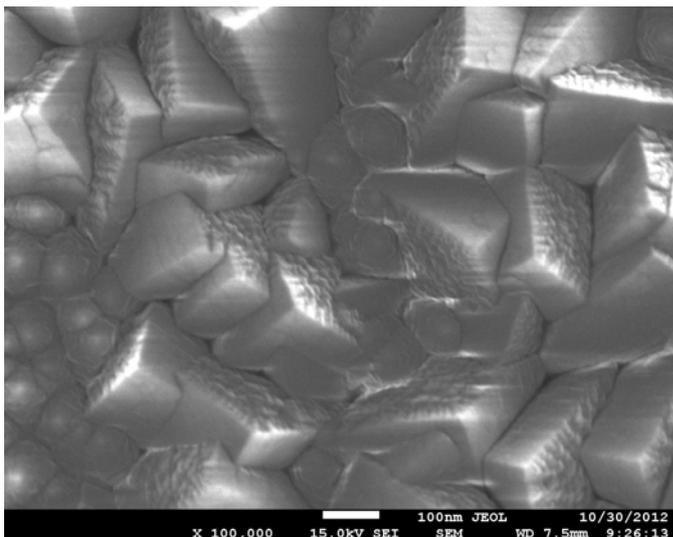


Рис. 4.4 РЭМ-микрофотография верхней поверхности образца-спутника AlN/Mo/(100) Si. Увеличение 100000<sup>x</sup>

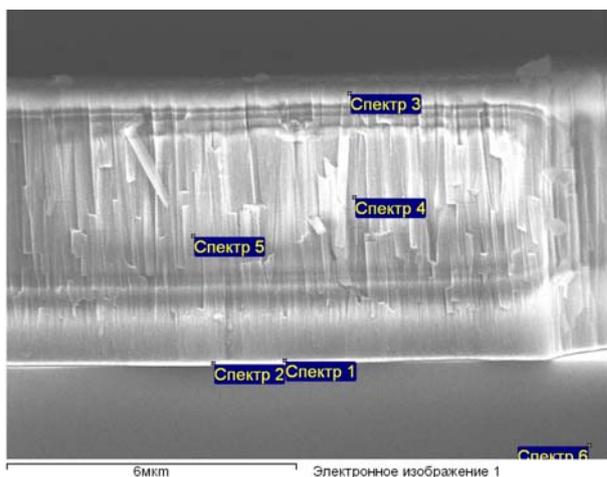


Рис. 4.5. Результаты электронно-микроскопических исследований химического состава поперечного скола экспериментального образца-спутника AlN/(100) Si

Таблица 4.1. Химический состав образца-спутника AlN/(100) Si (весовые проценты).

Спектр	N	O	Al	Si	Pt	Al/N
Спектр 1	15,47	2,32	54,59	4,07	23,55	1,83
Спектр 2	17,92	2,59	59,70	3,34	16,45	1,73
Спектр 3	40,33	7,05	52,40	0,21	-	0,7
Спектр 4	18,91	1,05	78,97	1,07	-	2,2
Спектр 5	15,14	1,48	81,27	2,10	-	2,9
Спектр 6	6,11	0,76	4,50	86,91	1,72	-

Примечания:

- 1) Нумерация спектров соответствует рис. 4.5
- 2) Идеальное стехиометрическое соотношение для AlN равно  $Al/N = 1,86$

С целью исследования морфологии и шероховатости поверхности плёнок нитрида алюминия и определения их толщин был также применен метод атомно-силовой микроскопии. Последнее особенно важно при многослойном напылении для контроля воспроизводимости технологического процесса. Экспериментальные АСМ-изображения поверхности получены на АСМ Ntegra Prima. Измерения проводились сотрудником ФГБНУ ТИСНУМ Кравчуком К.С. Параметры шероховатости плёнки AlN для образца-спутника AlN/(100) Si представлены в табл. 4.2. Плёнка AlN имеет плотную поликристаллическую структуру с выраженной морфологией кристаллитов, соответствующей гексагональной симметрии, что подтверждается и результатами РЭМ исследования. Получено, что средний перепад высот от вершины к минимуму на поверхности плёнки AlN составил величину 195,03 нм. Во всех исследуемых образцах величина  $R_a$  для слоя AlN не превышала 25,9 нм.

Формирование верхнего электрода сложной геометрической структуры (круги разных диаметров, многоугольники и т.п.) производилось методом фотолитографии на

установке Heidelberg  $\mu$ PG 101. Была отработана методика формирования электродов с минимальным размером элемента до 5 мкм (рис. 4.6). Использовалась как стандартная, так и взрывная литография с применением позитивного фоторезиста AZ 1505 и фоторезиста для обратной литографии AZ 5214E соответственно. Весь процесс подготовки установки и нанесения верхнего электрода составлял  $\sim$  40-60 минут.

Таблица 4.2. Параметры шероховатости поверхности образца-спутника AlN/Pt/(100) Si, измеренные методом АСМ

База	$R_a$ , нм	$R_{ms}$ , нм	$R_z$ , нм
10×10 мкм <sup>2</sup>	18,1	22,6	98,0

Примечания:

- 1)  $R_a$  – среднее арифметическое отклонение всех точек профиля шероховатости от средней линии на длине оценки по ISO 4287/1-1997
- 2)  $R_{ms}$  – среднеквадратичная шероховатость по ISO 4287/1-1997
- 3)  $R_z = 1/5(Z_{max1} + Z_{max2} + Z_{max3} + Z_{max4} + Z_{max5} - Z_{min1} - Z_{min2} - Z_{min3} - Z_{min4} - Z_{min5})$  - шероховатость поверхности по выбранным пяти максимальным высотам и впадинам

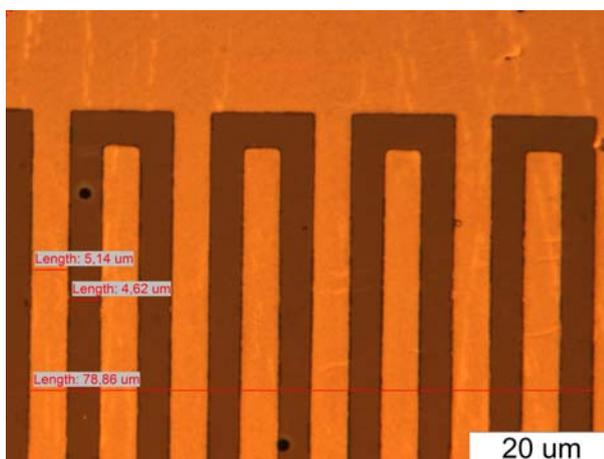


Рис. 4.6. Электроды сложной формы, сформированные на поверхности нитрида алюминия взрывной литографией. Изображение получено с оптического микроскопа Olympus-P

#### 4.2 Экспериментальные образцы составных акустических резонаторов

Для достижения хорошего акустического согласования в слоистой среде необходимо использовать материалы с акустическим сопротивлением  $Z = \rho v_L$  как можно ближе к значению для алмаза  $Z_{алмаз} = 6,2 \cdot 10^7$  кг/м<sup>2</sup>с. Из всех металлов, представленных в табл. 1.1, наиболее подходящим для алмаза является акустическое сопротивление Мо. Как было сказано выше, в качестве подложек для всех экспериментальных образцов составного акустического резонатора использовались полированные алмазные пластины ( $R_a \leq 15$  нм) из (100) ориентированных синтетических монокристаллов Па типа. Структуры

исследованных экспериментальных образцов составных акустических резонаторов приведены в табл. 4.3.

Таблица 4.3. Структура исследуемых образцов составных акустических резонаторов

Образец	Структура	Толщина, мкм			
		Верх. эл-д	AlN	Внутр. эл-д	Подложка
А №9	Al/AlN/Mo/ (100) алмаз	0,2	3,2	0,2	1037
А №12.1	Al/AlN/Al/Cr/ (100) алмаз	0,2	1,1	0,2/0,03	460
А №11.3	Al/AlN/Mo/Pt/ (100) алмаз	0,2	1,04	0,15/ 0,1	300
А №14	Al/AlN/Mo/ (100) алмаз	0,2	1,04	0,15	303
А №24	Al/AlN/Mo/ (100) алмаз	0,107	0,88	0,130	1107
А №25	Al/AlN/Mo/ (100) алмаз	0,107	0,88	0,13	1075
А №28	Al/AlN/Mo/ (100) алмаз	0,164	0,624	0,169	510
А №29	Al/AlN/Mo/ (100) алмаз	0,164	0,624	0,169	392

#### 4.3 Математическое моделирование с целью оптимизации конструкции составных акустических резонаторов на основе синтетического монокристалла алмаза

На компьютерной программе NBAR ver. 2.3 [41] по моделированию распространения акустических волн в слоистой структуре типа «Me1/пьезоэлектрик/Me2/подложка» были изучены особенности распространения упругих волн в зависимости от характеристик данной слоистой структуры. В программе имеется возможность выбора металла для внешнего/внутреннего электрода, вариации толщин электродов, пьезоэлектрика и звукопровода. В качестве звукопровода использовались алмазные подложки разных толщин, в качестве пьезоэлектрика выбирался слой AlN различных толщин.

Наиболее информативными параметрами оказались величины  $Re(m)$ ,  $|m|^2$  и импеданс звукопровода. В соответствии с формулой (1.164)  $Re(m)$  отвечает за взаимодействие плёнок электродов и пьезоэлектрика. Величина  $|m|^2$  согласно (1.167) связана и с плёнками, и с импедансом звукопровода.

Одной из задач было исследование особенностей частотной зависимости параметров CAP с целью объяснения минимумов на частотных зависимостях добротности  $Q$ , обнаруженных, например, в районе частот 0,75 и 2,3 ГГц для образца А №9 (рис. 4.7).

Также было необходимо изучить влияние химического состава электродов на распространение ОАВ в слоистой структуре.

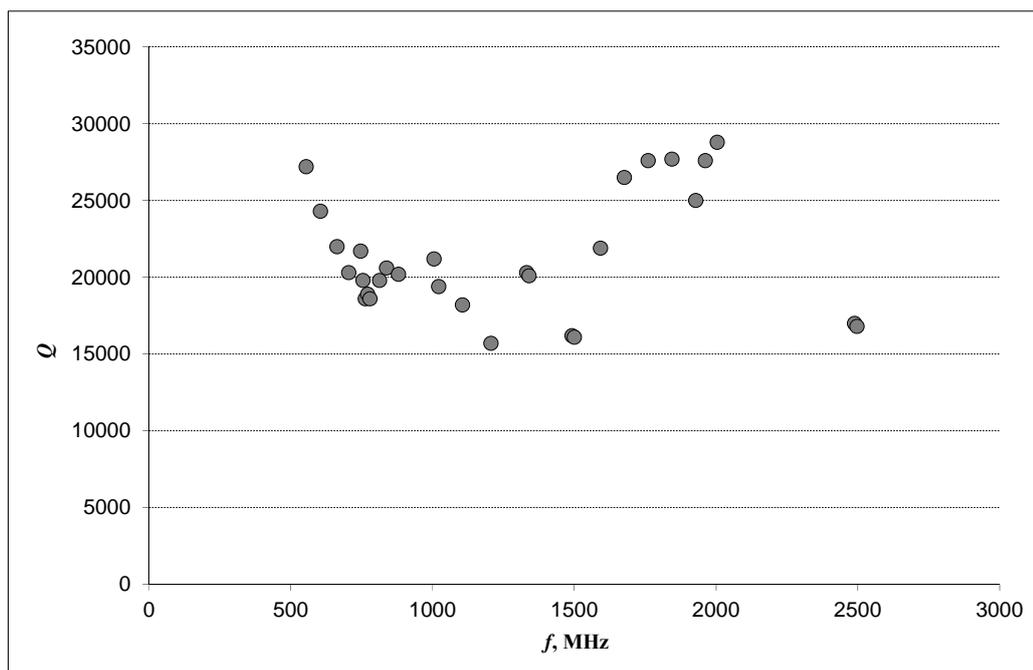


Рис. 4.7. Экспериментальная зависимость  $Q$  от частоты в образце САР А №9

В первую очередь были изучены структуры типа «Al/AlN/Mo/(100) алмаз» и «Al/AlN/Al/Cr/(100) алмаз», которые соответствовали экспериментальным образцам А №9 и А №12.1. На рис. 4.8 представлена частотная зависимость  $10\lg Re(m)$  для составного акустического резонатора с варьированными параметрами толщин внешнего Al электрода, пьезоэлектрического слоя AlN, внутреннего Mo электрода и звукопровода из (100) алмаза. Величина  $m$  определена в соответствии с формулой (1.164). Оказалось, что наиболее точно расчётная частотная зависимость соответствует эксперименту для образца А №9 при значениях толщин Al-электрода 180 ( $200 \pm 50$ ) нм, слоя AlN – 3200 ( $3100 \pm 100$ ) нм, Mo-электрода – 200 ( $150 \pm 50$ ) нм. В скобках указаны толщины плёнок, измеренные методом РЭМ. Для данного резонатора имеется близкая к плоской АЧХ в пределах от 0,7 до 2,3 ГГц, благодаря чему эффективность преобразователя в этой полосе практически не меняется. На рис. 4.9 представлена частотная зависимость величины  $10\lg(|m|^2)$  для САР с теми же параметрами. Величина  $|m|^2$  определена в соответствии с формулой (1.164). С её помощью можно легко определить амплитудно-частотную характеристику эффективности пьезоэлектрического преобразователя, в частности, его полосу пропускания. Так, для данного САР имеется близкая к плоской АЧХ в пределах от 0,7 до 2,3 ГГц, благодаря чему эффективность преобразователя в этой полосе практически не меняется.

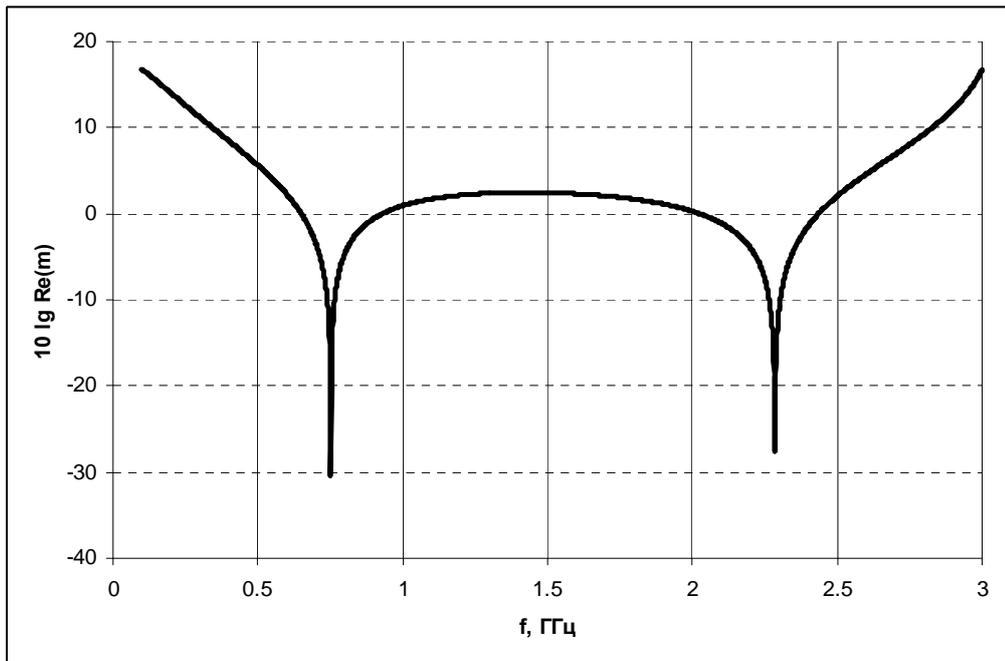


Рис. 4.8. Расчётная частотная зависимость  $10 \lg \operatorname{Re}(m)$  для CAP типа «Al/AlN/Mo/(100) алмаз» с толщинами: внешний Al-электрод – 180 нм, слой AlN – 3200 нм, внутренний Mo-электрод – 200 нм, подложка из (100) алмаза – 1043 мкм

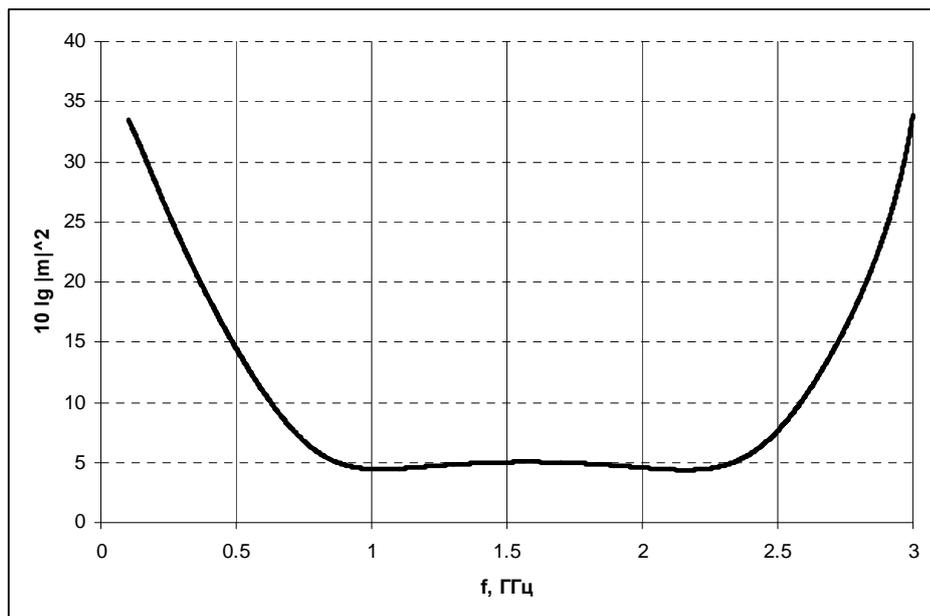


Рис. 4.9. Расчётная частотная зависимость  $10 \lg |m|^2$  для CAP типа Al/AlN/Mo/(100) алмаз с толщинами: внешний Al-электрод – 180 нм, слой AlN – 3200 нм, внутренний Mo-электрод – 200 нм, подложка из (100) алмаза – 1043 мкм

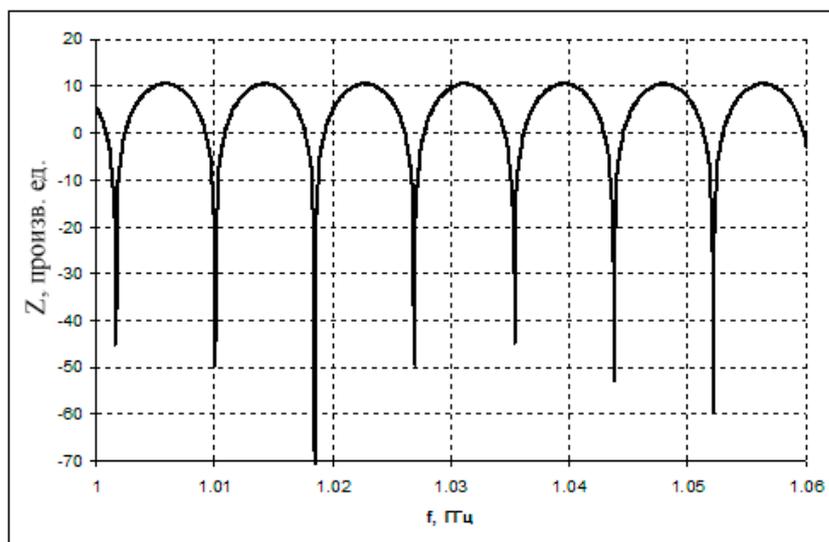
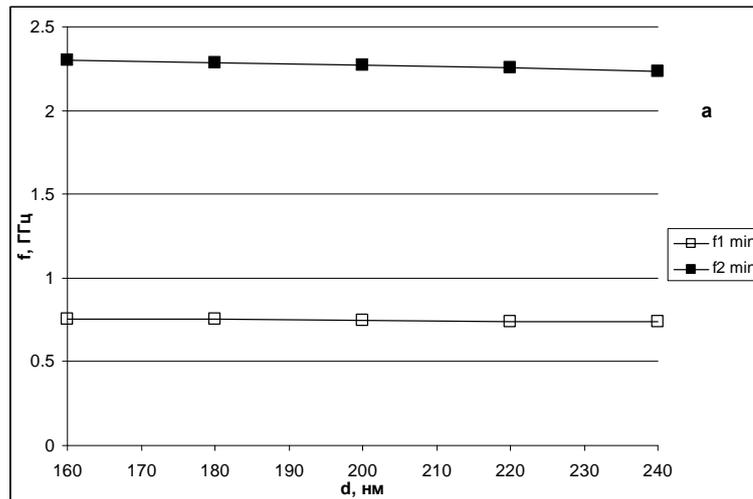


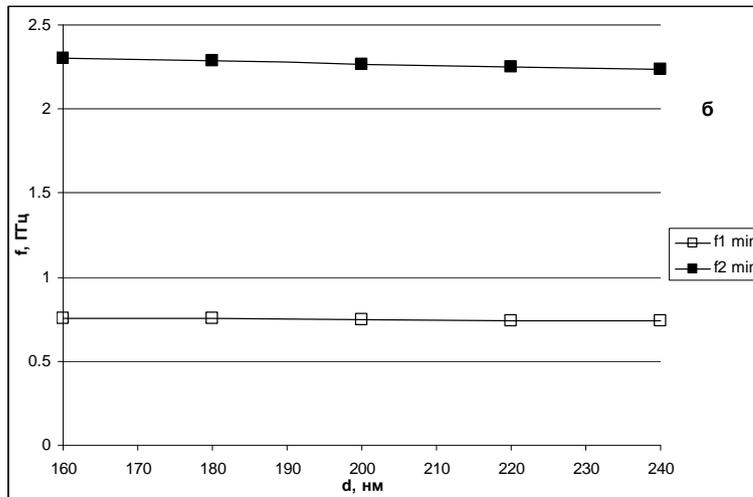
Рис. 4.10. Расчётная частотная зависимость импеданса  $Z$  звукопровода слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз». Толщины внешнего Al-электрода – 180 нм, слоя AlN – 3200 нм, внутреннего Mo-электрода – 200 нм, подложки из (100) алмаза – 1043 мкм

По данным рис. 4.10, исходя из частотной зависимости величины  $Z$  в звукопроводе с заданной толщиной 1043 мкм, можно рассчитать разность частот  $\Delta f$  между обертонами, близкую к резонансной частоте первого обертона. Для звукопровода данной толщины, выполненного из (100) алмаза, расчётное значение составило  $\Delta f = 8,049$  МГц. Получено хорошее соответствие расчётных и экспериментальных данных, благодаря чему программу NBAR ver. 2.3 можно успешно использовать для выполнения задач оптимизации CAP.

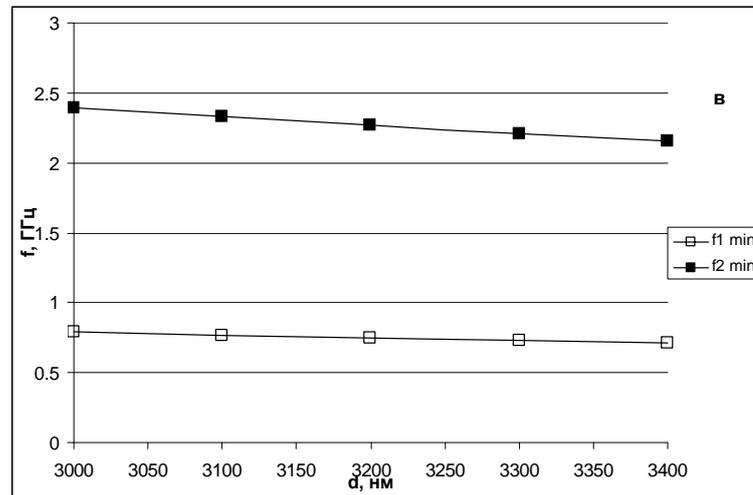
Специальное внимание уделялось положением локальных максимумов и минимумов на частотных зависимостях форм-фактора. Было отмечено, что положение таких минимумов зависит от толщины и материала электродов. На рис. 4.11 показана расчётная зависимость частот  $f_1$  и  $f_2$  минимумов форм-фактора в зависимости от толщин обоих электродов и слоя AlN в структуре «Al/AlN/Mo/(100) алмаз». При увеличении толщины электродов или слоя AlN пики смещаются в сторону уменьшения частоты. Пик  $f_2$  более чувствителен к изменению толщины слоев. Изменение толщины внутреннего электрода приводит к незначительным изменениям частотных положений пиков, в то время как изменение толщины слоя AlN влечет за собой наибольшее влияние на сдвиг частот  $f_1$  и  $f_2$ .



а



б



в

Рис. 4.11. Расчётная зависимость частот минимумов величины  $10\lg\text{Re}(m)$  в для слоистой структуры Al/AlN/Mo/(100) алмаз при вариации толщин слоёв: а – варьируется толщина внешнего электрода от 160 до 240 нм; б – аналогично для внутреннего электрода от 160 до 240 нм; в – аналогично для плёнки AlN от 3000 до 3400 нм. Начальные толщины внешнего и внутреннего электродов принимались равными 200 нм, толщина слоя AlN – 3200 нм

#### 4.4 Экспериментальное исследование составных акустических резонаторов на алмазной подложке

##### 4.4.1 Экспериментальная установка для СВЧ акустических измерений

СВЧ исследования составных акустических резонаторов производились с помощью экспериментальной установки, показанной на рис. 4.12. В ее состав входит векторный анализатор цепей E5071C (300 кГц – 20 ГГц) и зондовая станция M-150 (рис. 4.12). Исследования проводили в режиме «на отражение», подключая тестовое устройство с помощью зонда ACP40-A-SG-500 (расстояние между наконечниками 500 мкм).<sup>1</sup>

Перед проведением исследовательских испытаний производится калибровка СВЧ тракта исследовательской установки в трёх состояниях “Open”, “Short” и “Load” в диапазоне исследуемых частот. Так, например, для исследуемого образца в диапазоне частот 1 – 10 ГГц рабочая область разбивалась на три поддиапазона: 1–4 ГГц, 4–7 ГГц, 7–10 ГГц. На каждом из них производилась калибровка с помощью калибровочной пластины ISS 106-683A Cascade Microtech Inc. (рис. 4.13) в соответствии с руководством пользователя векторного анализатора цепей.

Частотные зависимости коэффициента отражения  $S_{11}$  и импеданса  $Z_{11}$  были исследованы в интервале частот 0,5 – 10 ГГц. Анализировались АЧХ и ФЧХ, диаграмма Смита. В силу особенностей измерений резонансных свойств составных акустических резонаторов на отражение наблюдались резонансные пики, соответствующие только параллельному резонансу (антирезонансу). Поэтому в качестве экспериментальных параметров измеряли частоты параллельных резонансов  $f_{p,n}$  для  $n$ -х обертонов, а также частотные промежутки между обертонами:

$$\Delta f = f_{p,n+1} - f_{p,n} \approx v_L / 2h_4 \quad (4.1)$$

и их добротности:

$$Q_{n(-3\text{ dB})} = \frac{f_{p,n}}{\delta f}. \quad (4.2)$$

Полоса пропускания  $\delta f$  измерялась на уровне -3 дБ. Отметим также, что выполняется соотношение  $\Delta f = f_1$  (частота возбуждения первого (основного) обертона). Второй метод определения добротности базировался на соотношении:

$$Q_{n,\tau_d} = \frac{1}{2} \omega_n \left| \frac{d\varphi_n}{d\omega_n} \right| = \pi \tau_d f_{p,n}, \quad (4.3)$$

---

<sup>1</sup> Данный метод исследования экспериментальных образцов пьезоэлектрических слоистых структур разработан с.н.с. ФГБНУ ТИСНУМ Квашниным Г.М.

где  $\omega_n = 2\pi f_n$ ,  $\varphi_n$  – угол сдвига фаз,  $\tau_d$  – время групповой задержки. Численное значение добротности  $Q$  незначительно зависело от метода определения, наибольшие различия составляли не более 10% в единичных экспериментальных данных. Таким образом, далее будем говорить о добротности, измеренной в соответствии с определением (4.2).

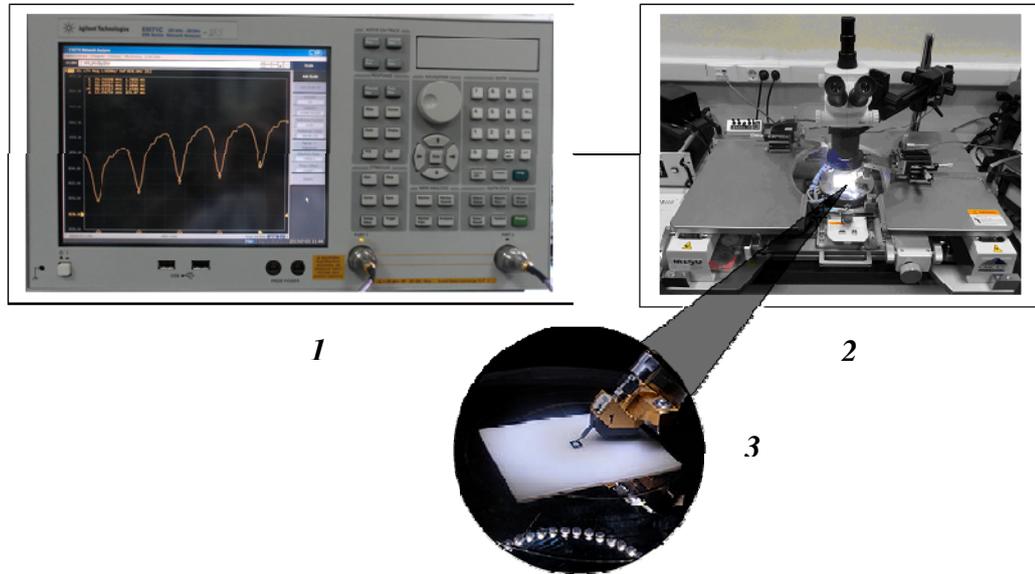


Рис. 4.12. Экспериментальная установка для СВЧ исследований САР: 1 – векторный анализатор цепей E5071C; 2 – зондовая станция M-150; 3 – тестируемое устройство.

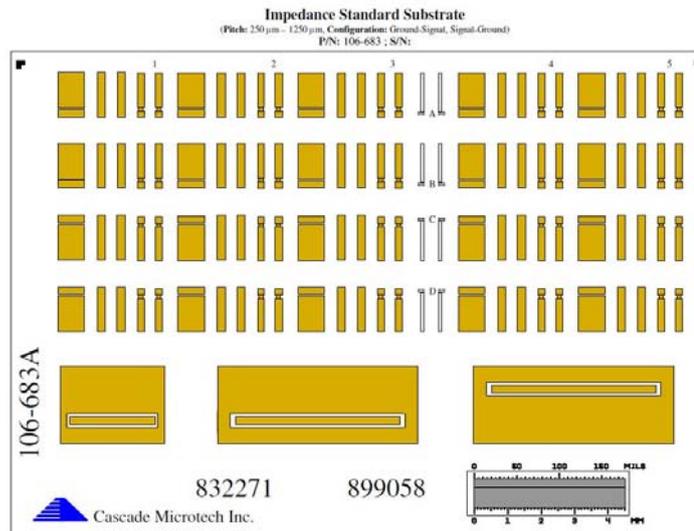


Рис. 4.13. Калибровочная пластина ISS 106-683A Cascade Microtech Inc.

Для экспериментального исследования влияния температуры использовалась установка Quantum Design (рисунок 4.14). Экспериментальный образец САР устанавливается в измерительную ячейку для температурных исследований.

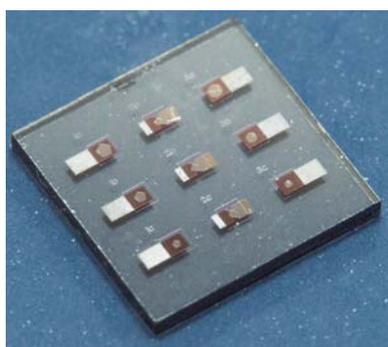
Температурные испытания и исследования зависимостей величин  $\Delta f = f(T)$ ,  $Q = f(T)$  проводились в заданном интервале температур с шагом  $\Delta T = 10^\circ$ , для чего в избранных температурных точках производится стабилизация температуры экспериментального образца с точностью  $\pm 0,1^\circ$  в течение 5 мин.



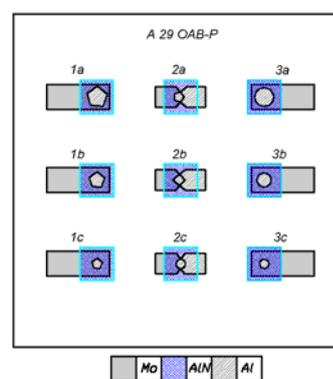
Рис. 4.14. Экспериментальная установка Quantum Design EverCool 2.

#### 4.4.2 Результаты экспериментального исследования СВЧ добротностей составных акустических резонаторов. Влияние температуры

Пример экспериментального образца показан на рис. 4.15а, где на алмазной подложке размещены 9 индивидуальных резонаторов различной конфигурации. Детально исследована слоистая структура «Al/AlN/Mo/(100) алмаз» с толщинами слоёв 0,164/0,624/0,169/392 мкм соответственно (рабочее название «А 29 ОАВ-Р», или просто А №29). Маркировка резонаторов показана на рис. 4.15б.



а



б

Рис. 4.15. а – резонаторы с различной конфигурацией внешнего электрода (структура «Al/AlN/Mo/(100) алмаз» А №29); б – маркировка резонаторов с различными конфигурациями и площадями внешнего электрода, равными: 1а и 3а – 39973 мкм<sup>2</sup>; 1б и 3б – 22484 мкм<sup>2</sup>; 2а, 2б, 1с, 2с и 3с – 10000 мкм<sup>2</sup>.

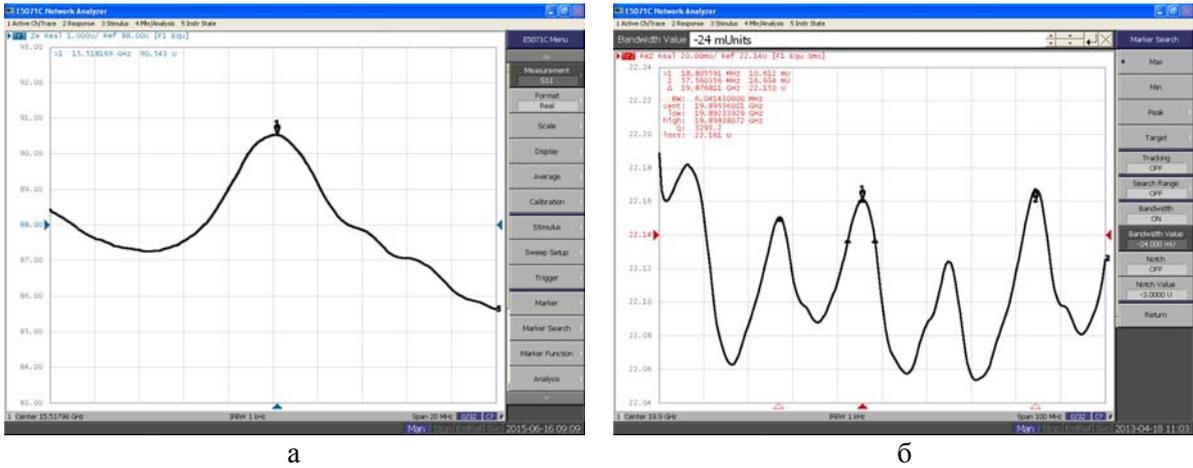


Рис. 4.16. Частотная зависимость параметра  $S_{11}$  в исследуемом САР А №11.3: а – серия эквидистантных резонансов вблизи частоты 15,5 ГГц,  $Q \sim 2500$ ; б – вблизи частоты 19,9 ГГц,  $Q \sim 3300$ .

На образцах САР А №11.3 были обнаружены объемные резонансы на рекордных значениях частоты. Наблюдались обертоны вплоть до частот 20 ГГц (рис. 4.16), что является важным практическим результатом.

Некоторые характерные значения добротностей и параметров качества исследованных образцов САР приведены в табл. 4.4.

На рис. 4.17 показаны экспериментальные результаты СВЧ измерений для образца САР А № 29 (1b) в окрестности  $f_p \approx 4,5$  ГГц. Символами  $Z_{11}$  и  $Z_e$  будем обозначать модули полного и «чистого» импедансов тестового устройства. Показанный на рис. 4.17а модуль величины  $S_{11}$  (мода LinMag) был обработан с целью получения модуля полного импеданса  $Z_{11}$  (рис. 4.17б). Далее величина «чистого» импеданса  $|Z_e|$  (рис. 4.17в) была вычислена из разности  $|Z_e| = |Z_{11}| - |Z'_{11}|$ , где  $|Z'_{11}|$  измеряли вне акустического резонанса. Полученная в итоге зависимость  $|Z_e|$  от частоты использовалась для определения добротности  $Q_{-3\text{дБ}}$  составного акустического резонатора. Вся последовательность обработки данных осуществлялась с помощью векторного анализатора E5170C. Наконец, на рис. 4.17г показано изменение фазы сигнала. Её нулевое значение соответствовало частоте параллельного резонанса.

Для резонаторов 1a, 1b и 1c образца А №29 полученные из эксперимента частотные зависимости промежутков между обертонами  $\Delta f$ , добротности  $Q$  и параметра качества  $Q \times f$  в интервале 0,5 – 9,5 ГГц представлены на рис. 4.18.

Таблица 4.4. Экспериментальные значения добротности и параметра качества исследованных составных акустических резонаторов

Образец	Частота, ГГц	$Q$	$Q \times f, 10^{13}$ Гц
А №9	0,64	25450	1,6
	1,6	28650	4,6
	2,0	35700	7,1
А №12.1	0,534	37900	2,0
	4,2	17200	7,2
	7,08	8700	6,2
А №11.3	0,4	57000	2,3
	2,0	2550	0,5
	3,0	2950	0,9
	18,9	4000	7,6
	19,9	3300	6,6
А №14	0,3	5700	0,2
	1,0	1350	0,1
	2,0	3400	0,7
	5,0	4400	2,2
А №24	4,0	17000	6,9
	4,4	17300	7,6
	7,9	13700	10,8
А №25	10,4	7350	7,7
	10,7	8200	8,8
А №28	0,58	34300	2,0
	1,0	19800	2,0
	3,0	18150	5,4
	3,5	24400	8,5
	4,5	21650	9,7
	5,0	21850	10,9
	6,5	24750	15,4
А №29	1,0	33000	3,3
	5,0	16000	8,5
	9,5	10800	9,8

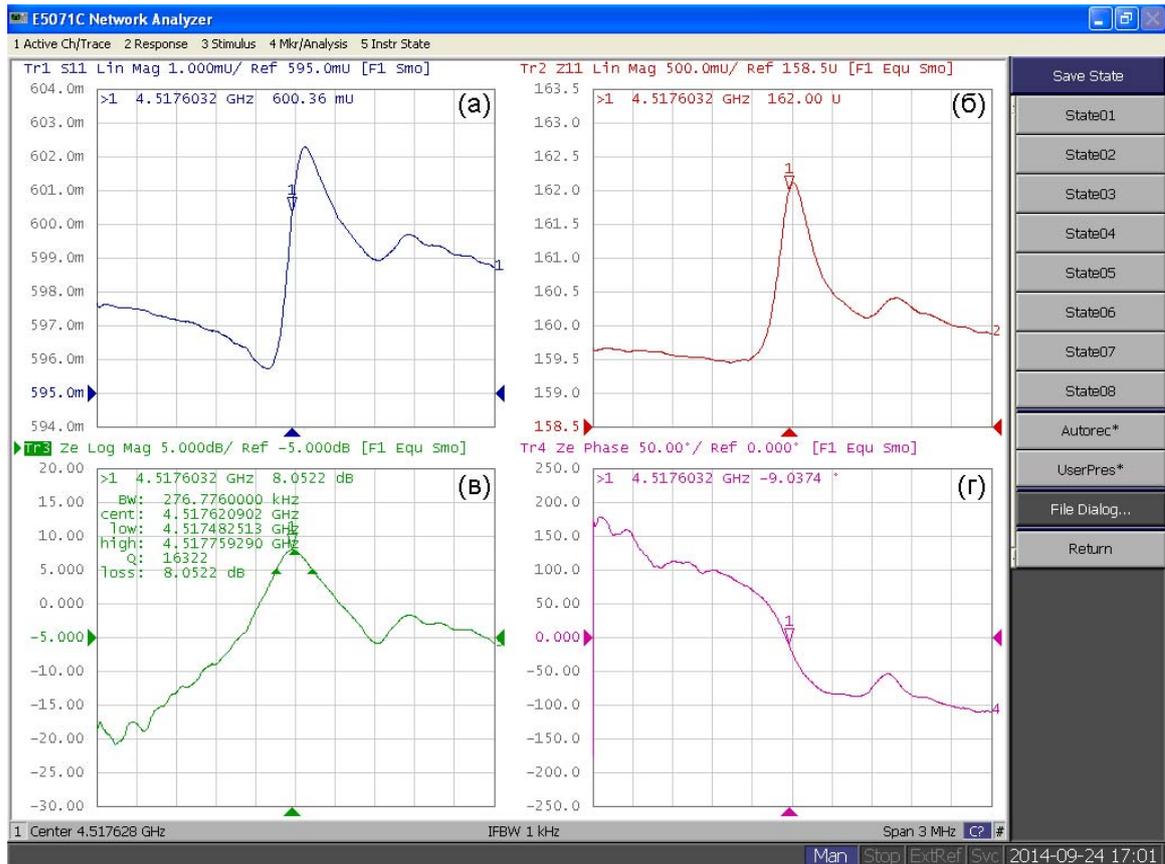


Рис. 4.17. Экспериментальные результаты СВЧ измерений АЧХ для экспериментального образца А №29 (1b) в окрестности  $f_p \approx 4.5$  ГГц: а – коэффициент отражения  $S_{11}$  (мода LinMag); б – модуль полного  $Z_{11}$  импеданса тестового устройства; в – модуль «чистого» импеданса  $Z_e$ ; г – изменение фазы сигнала в окрестности  $f_p$

Используя соотношение (4.1) и оценивая скорость продольной акустической волны  $v_L$  в алмазе в направлении [100], с помощью максимальных значений  $\Delta f$  (рис. 4.18а) можно получить значение  $v_L = 17522 \text{ м}\cdot\text{с}^{-1}$ , близкое к данным акустических измерений ( $17542 \text{ м}\cdot\text{с}^{-1}$  [42]). Различие можно объяснить наличием акустической нагрузки алмазной подложки ТПП.

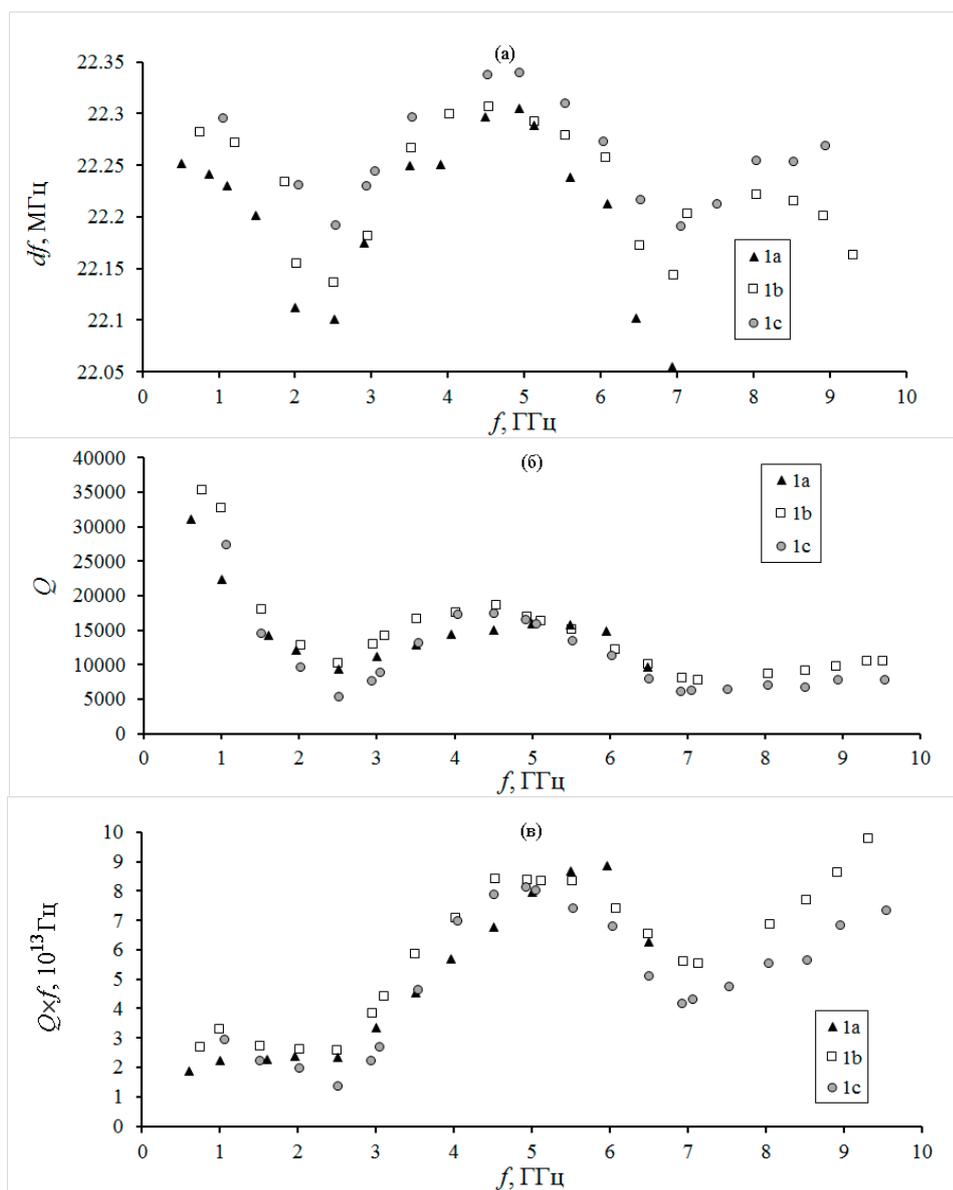


Рис. 4.18. Частотные зависимости промежутков между обертонами  $\Delta f$  (а), добротности  $Q$  (б) и параметра качества  $Q \times f$  (в) для экспериментального образца А №29 (1а, 1б, 1с)

Рис. 4.18б показывает, что нагруженная добротность резонаторов немонотонно уменьшается с ростом частоты, при этом наблюдаются локальные минимумы и максимумы. Так, на частотах 0,76, 4,5 и 9,5 ГГц добротность резонатора 1b достигает значений 35200, 18500 и 10500, соответственно. Данные по серии 2a – 2c приведены на рис. 4.19, по серии 3a–3c – на рис. 4.20. Следует отметить, что серия резонаторов 1a – 1c, отличающаяся формой электродов в виде неправильных пентагонов, показала наилучшие результаты по добротности в сравнении с серией 3a – 3c, имеющих круглые электроды с соответственными серии 1a – 1c площадями. Сравнительно более высокие значения добротности получены на резонаторе 1b.

Поскольку с ростом частоты наблюдается немонотонное возрастание параметра качества, данное обстоятельство может быть перспективным с точки зрения реализации САР и на более высокие частоты. Следует отметить, что такое поведение параметра качества было отмечено и на других исследованных САР. Максимальное значение параметра качества для САР на основе синтетического алмаза, полученное в данном эксперименте, составляет  $Q \times f \approx 10^{14}$  Гц при 9,5 ГГц, что либо превосходит, либо соответствует достигнутым в мировой практике результатам на других материалах подложки.

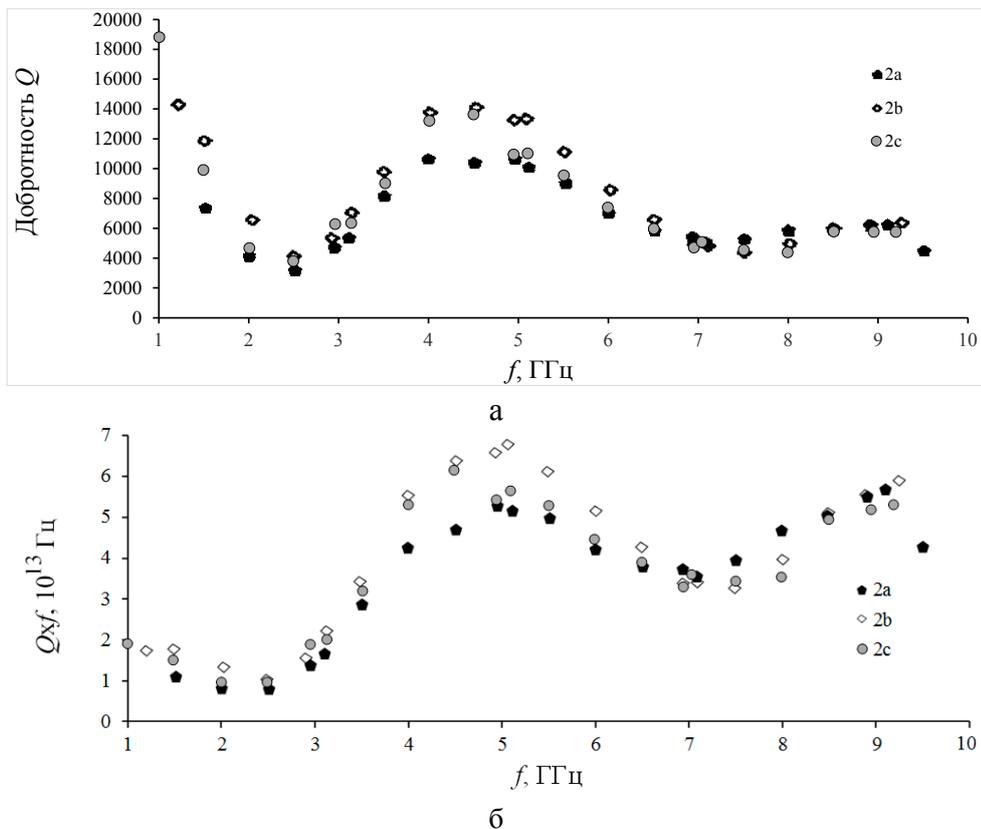
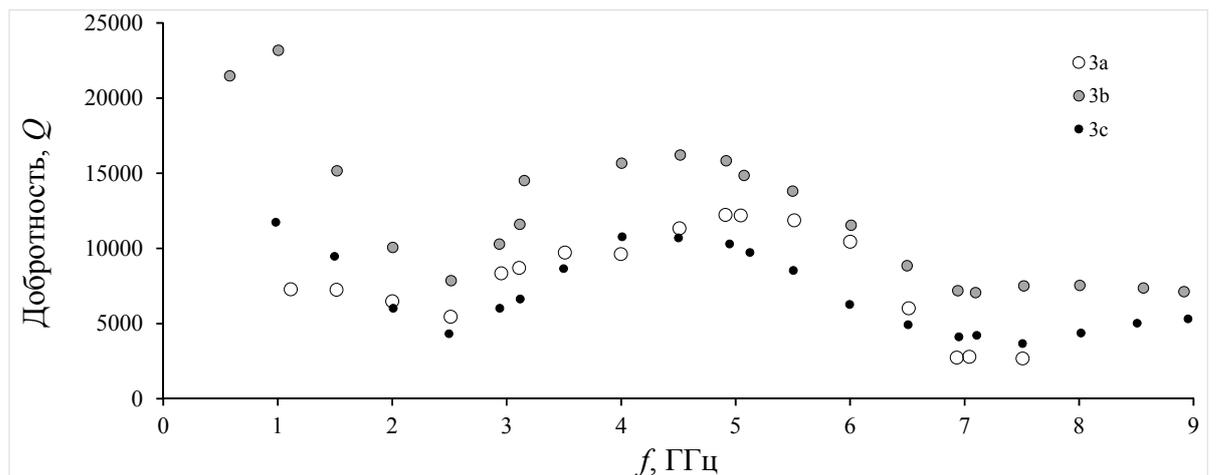
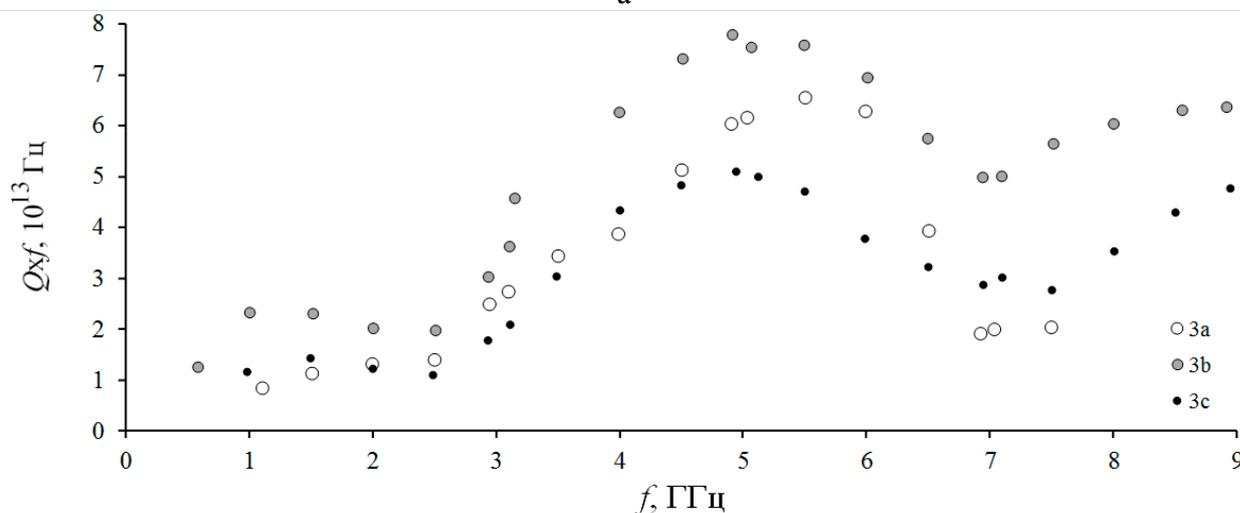


Рис. 4.19. Частотные зависимости добротности  $Q$  (а) и параметра качества  $Q \times f$  (б) для резонаторов 2a, 2b и 2c экспериментального образца А №29



а



б

Рис. 4.20. Частотные зависимости добротности  $Q$  (а) и параметра качества  $Q \times f$  (б) для резонаторов 3а, 3б и 3с экспериментального образца А №29

Измерения температурной зависимости добротности  $Q$  обертонов САР и температурной зависимости разности частот  $\Delta f$  между обертонами производились с помощью экспериментальной установки, состоящей из векторного анализатора цепей E5071C Agilent Technologies и исследовательской установки Quantum Design EverCool 2. На рис. 4.21–4.23 представлены результаты зависимости приведённой частоты  $\frac{\Delta f}{f} = \frac{f(T) - f(T = 20^\circ\text{C})}{f(T = 20^\circ\text{C})}$  от температуры в пределах  $-150^\circ \dots +100^\circ \text{C}$  для экспериментальных образцов А №9, А №12.1 и А №14.

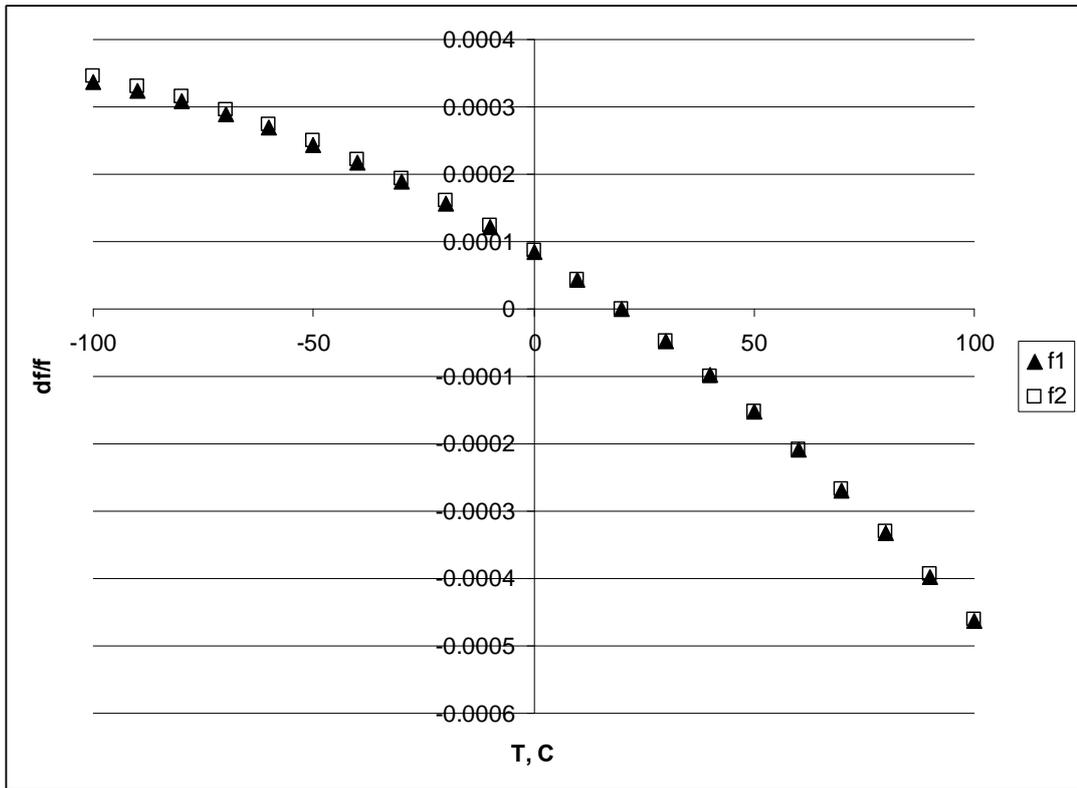


Рис. 4.21. Зависимость приведённой частоты  $\Delta f/f$  от температуры для экспериментального образца А №9. Частоты  $f_1 = 596$  и  $f_2 = 612,8$  МГц соответствуют 35-му и 36-му обертонам

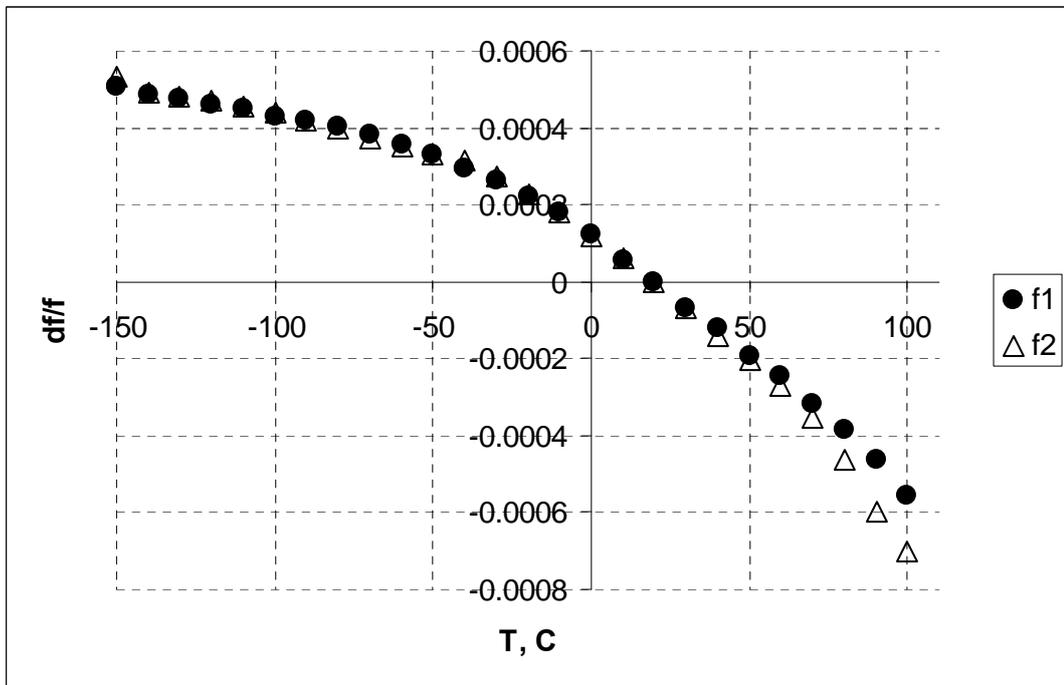


Рис. 4.22. Зависимость приведённой частоты  $\Delta f/f$  от температуры для экспериментального образца А №12.1. Частоты  $f_1 = 1101$  и  $f_2 = 1063$  МГц соответствуют 29-му и 28-му обертонам

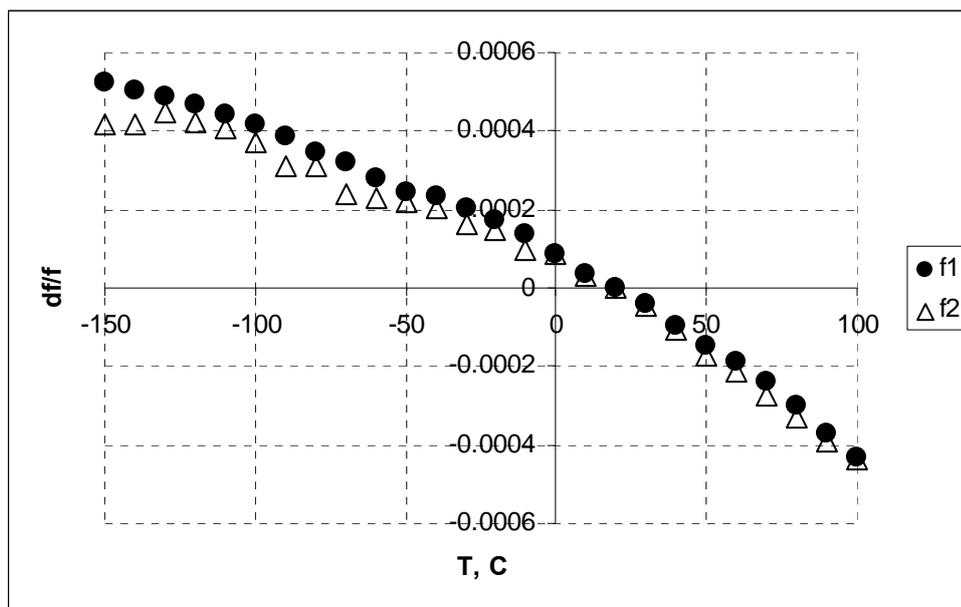


Рис. 4.23. Зависимость приведённой частоты  $\Delta f/f$  от температуры для экспериментального образца А №14. Частоты  $f_1 = 722,3$  и  $f_2 = 751,3$  МГц соответствуют 25-му и 26-му обертонам

Все экспериментальные образцы САР показали монотонную и воспроизводимую температурную зависимость  $\Delta f/f = f(T)$  в исследованном температурном диапазоне, соответствующую нормальному ходу температурной зависимости упругих постоянных 2-го порядка алмаза при температурах много ниже температуры Дебая. Используя формулу для расчёта температурного коэффициента частоты 1-го порядка:

$$\text{ТКЧ} = \frac{1}{40} \frac{f(40^\circ\text{C}) - f(0^\circ\text{C})}{f(20^\circ\text{C})}, \quad (4.4)$$

рассчитали ТКЧ исследованных экспериментальных образцов САР в окрестности комнатной температуры. Результаты приводятся в табл. 4.5. Соотношение (4.4) справедливо для случая, когда температурная зависимость  $\Delta f/f = f(T)$  имеет линейный характер.

На рис. 4.24 показана типичная близкая к линейной температурная зависимость добротности  $Q$  экспериментального образца А № 9.

Таблица 4.5. Температурные коэффициенты частоты 1-го порядка САР

Экспериментальный образец	Частота обертона, МГц	ТКЧ, $10^{-6} \text{ Па}^{-1}$
А № 9	596,028	-4,53
	612,718	-4,63
А № 12.1	1101,328	-6,14
	1063,420	-6,54
А № 14	722,325	-4,50
	751,273	-4,84

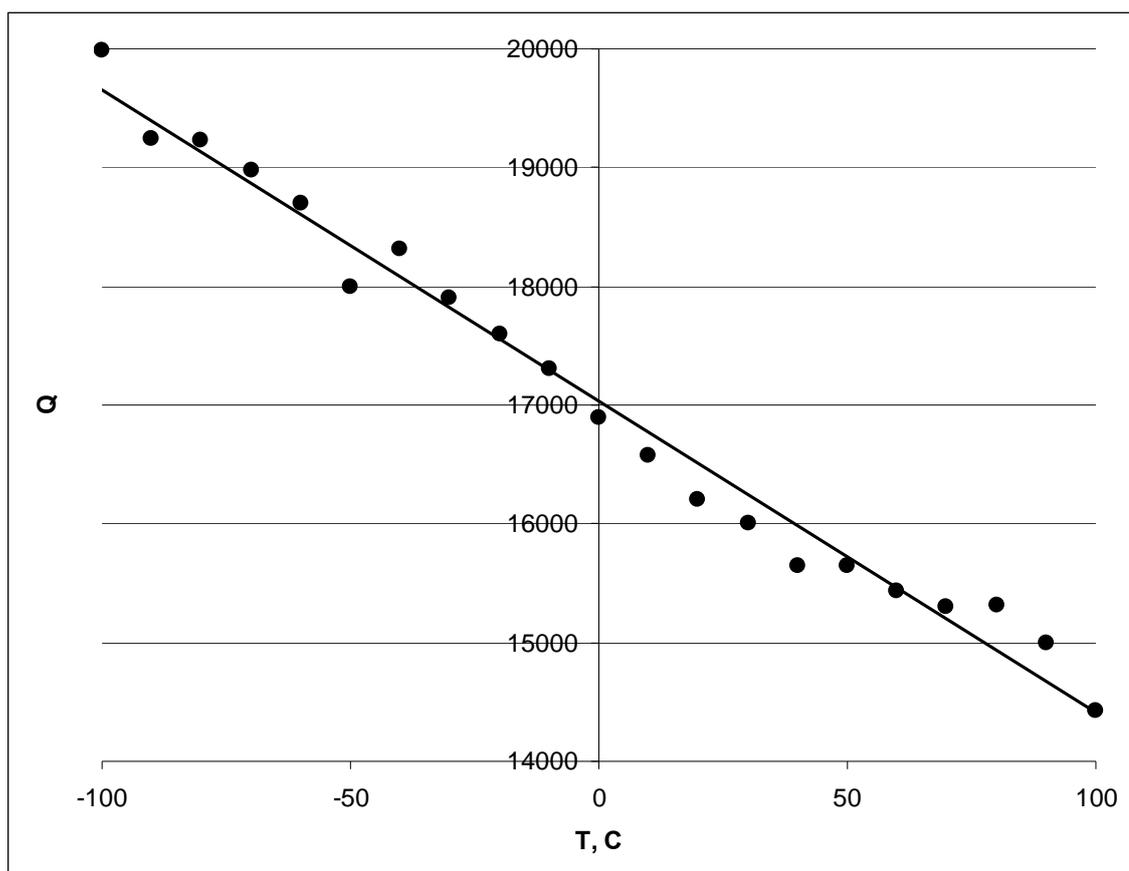


Рис. 4.24. Зависимость добротности  $Q$  экспериментального образца САР А №9 от температуры на частоте  $f_1 = 596$  МГц (71-й оберто́н)

#### 4.5 Сравнение результатов моделирования составного акустического резонатора с экспериментальными данными

Как следует из рис. 4.18, отмеченные выше особенности в частотных зависимостях  $\Delta f$  и  $Q$  (экспериментальный образец А №29), в частности, их минимальные значения, возникают в частотных областях 2 – 3 и 7 – 8 ГГц, что соответствует поведению кривой  $Re(m)$  (рис. 4.25г). Напротив, оптимальная область частот 4 – 6 ГГц, где достигается максимальная добротность САР, близка к положению минимума кривой  $Im(m)$ . Поскольку в расчете не учитывались значения акустического затухания в слоях, расчетные кривые имеют узкие минимумы, не соответствующие наблюдаемым в эксперименте, но являются сравнительно точными индикаторами, которые помогают заранее предсказать вид АЧХ реальных резонаторов.

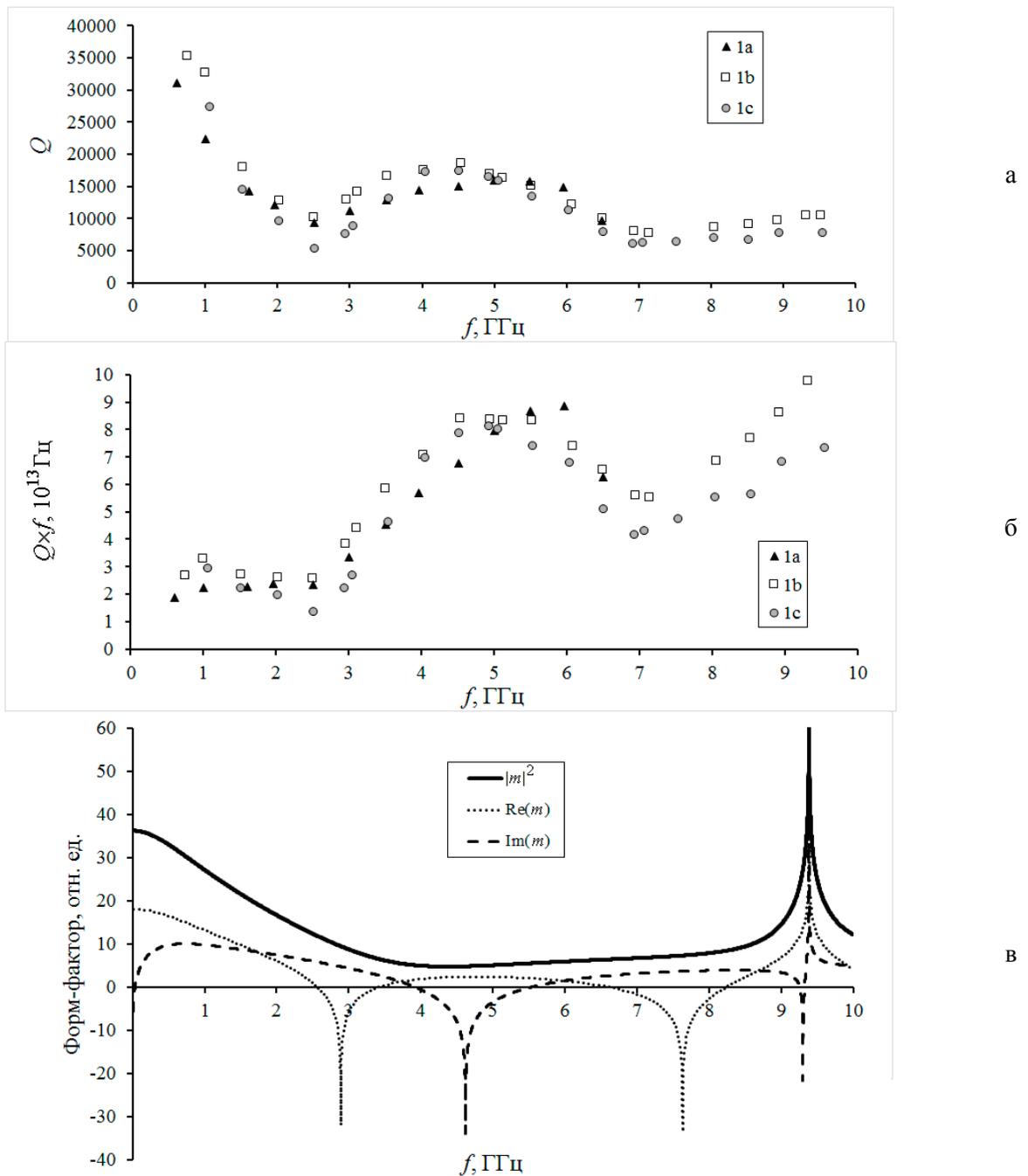


Рис. 4.25. Частотные зависимости добротности  $Q$  (а), параметра качества  $Q \times f$  (б) и форм-фактора (в) для резонаторов 1a, 1b и 1c экспериментального образца А №29

Расчет форм-фактора  $m$ , с помощью которого можно объяснить и предсказать поведение резонансные свойства пьезоэлектрической слоистой структуры [155], приведен на рис. 4.25в. Для моделирования использовали разработанную для этого программу «НВАР ver. 2.3» [41]. Было установлено, что характерные минимумы действительной части форм-фактора  $\text{Re}(m)$  связаны с частотными областями, где добротность составного акустического резонатора уменьшается вследствие собственных резонансов в тонкоплёночном преобразователе, в то время как минимумы мнимой части  $\text{Im}(m)$  соответствуют оптимальным частотным областям возбуждения обертонов в алмазной

подложке. Сравнивая поведение различных расчётных кривых форм-фактора с экспериментом, можно указать на удовлетворительное совпадение теоретических и экспериментальных данных для образца А №29.

#### 4.6 Исследование паразитных пиков АЧХ составного акустического резонатора

Важной проблемой акустоэлектроники является борьба с побочными резонансами (spurious resonances), уменьшающими эффективную добротность. Так, работы [156, 157] посвящены изучению таких побочных пиков. Как видно из рис. 4.17, в окрестности объемного резонанса для САР с подложкой из синтетического алмаза также наблюдается серия побочных резонансных пиков. Данные побочные пики наблюдаются практически на всех частотах и разных конфигурациях электродов (рис. 4.26). Как видно из рис. 4.26б, при увеличении частоты ближайший побочный пик находится вблизи объемного резонанса, что может повлиять на добротность структуры. Таким образом, задача определения причины возникновения таких пиков и их подавление является актуальной проблемой.

С целью определения и последующего подавления таких резонансных пиков было проведено 2D моделирование распространения акустических волн в пьезоэлектрической системе «Al/AlN/Mo/(100) алмаз». Моделирование проводилось в программе MatLab при помощи конечно-разностной схемы собственной разработки. Была проанализирована структура с толщиной и шириной алмазной подложки 392 мкм и 1 мм соответственно, шириной внутреннего электрода из Мо 400 мкм, шириной пьезоэлектрического слоя AlN 400 мкм, что номинально соответствует САР А №29. Ширина верхнего электрода из Al варьировалась. Одним из критериев надежности результатов моделирование может быть не только совпадение частот объемного обертона и побочного резонанса, но и количественное значение расчетной добротности, которое должно максимально соответствовать экспериментальному.

Экспериментально определенная добротность обертона на частоте 1 ГГц (рис. 4.26а) составляла ~23000. Результат моделирования аналогичной структуры на частоте 1 ГГц показал значения добротности ~22000, что достаточно хорошо совпадает с экспериментом.

Результаты моделирования на частоте 4.5 ГГц приведены на рис. 4.27. Как наглядно представлено на рисунке, положение побочного резонанса меняется в зависимости от ширины внешнего электрода: чем шире электрод, тем ближе побочный пик к объемному резонансу. В пределе идеального резонатора, когда ширина его слоев и подложки стремится к бесконечности, побочный пик сливается с объемным резонансом (можно говорить о его исчезновении). Однако остается вопрос о природе этого пика. Для

решения данной проблемы были проанализированы поля упругих смещений по толщине резонатора. Для данной частоты 4,5 ГГц результаты моделирования смещения приведены на рис. 4.28.

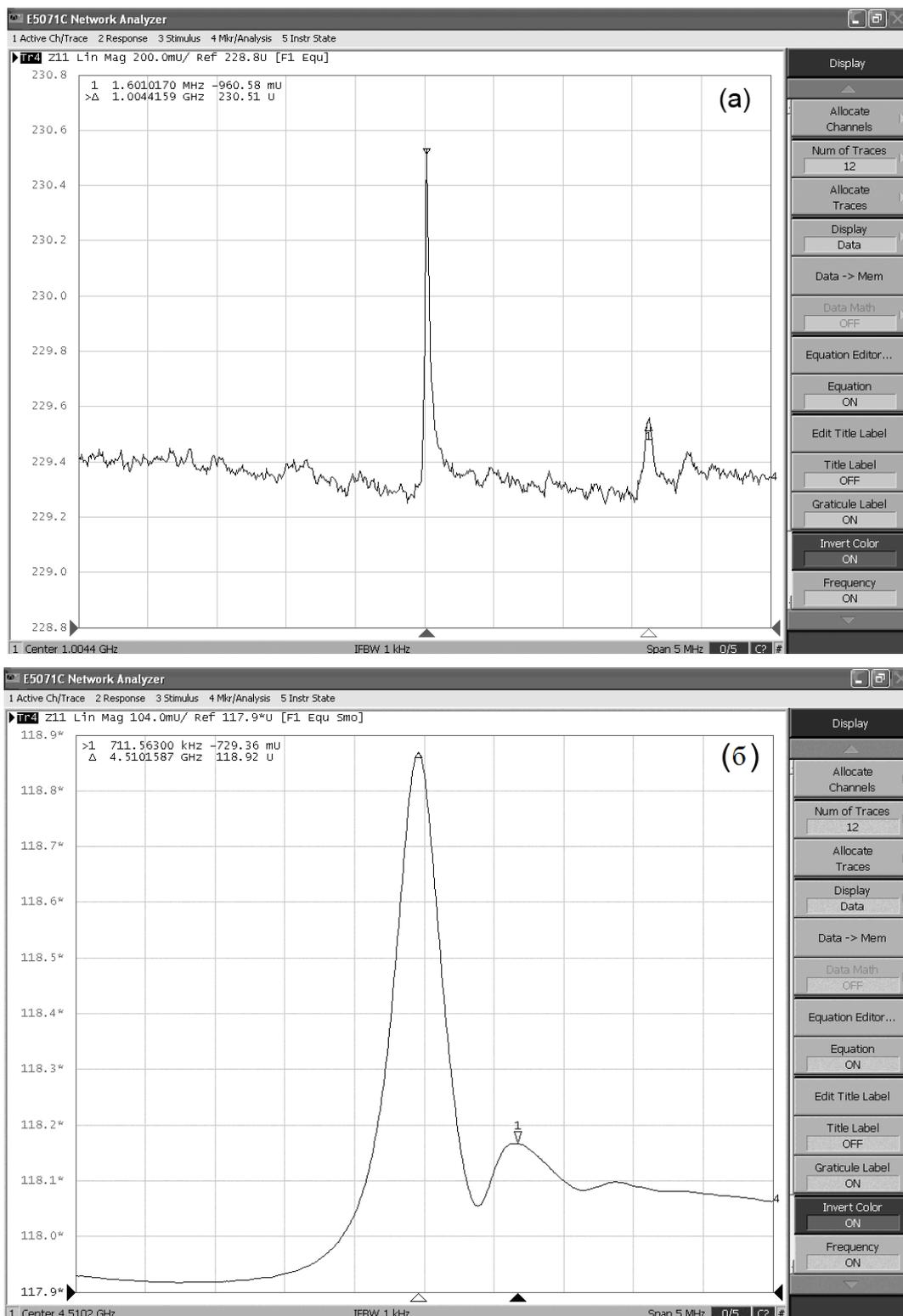


Рис. 4.26. Экспериментальные результаты АЧХ коэффициента  $Z_{11}$  составного акустического резонатора А №29: а – на частоте 1 ГГц ( $Q \approx 23000$ ); б – на частоте 4,5 ГГц

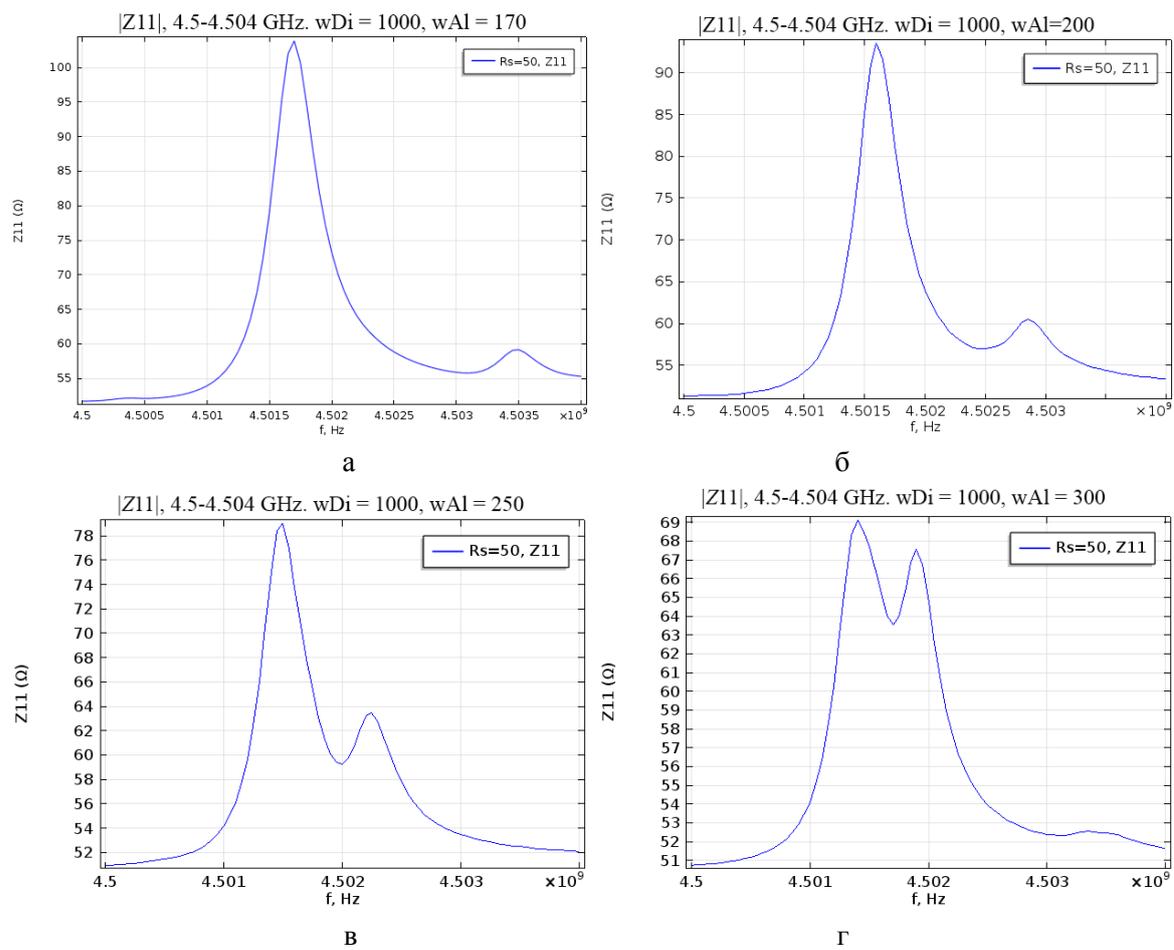


Рис. 4.27. Моделирование АЧХ  $|Z_{11}|$  пьезоэлектрической слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз»: а – ширина Al 170 мкм; б – 200 мкм; в – 250 мкм; г – 300 мкм

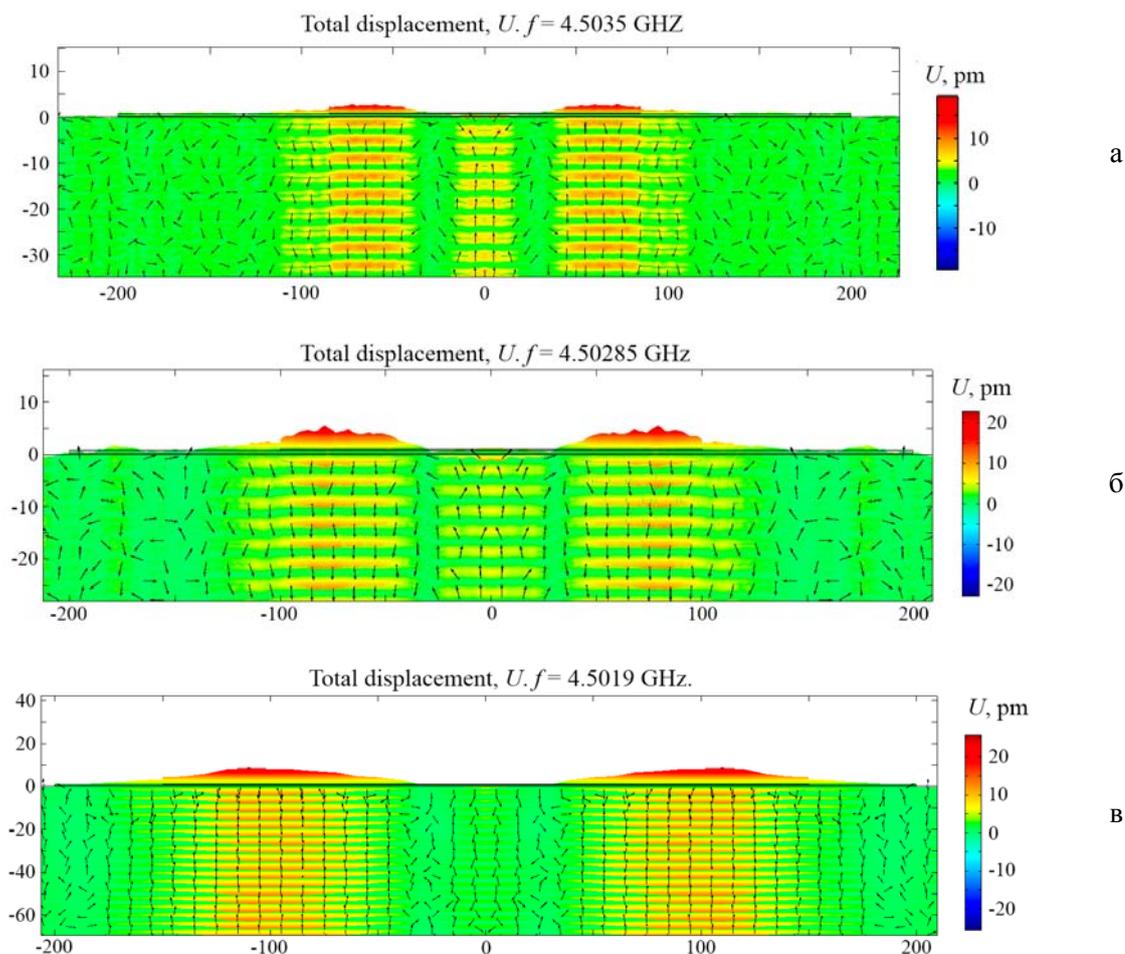


Рис. 4.28. Поля смещения при моделировании пьезоэлектрической слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз»: а – ширина Al 170 мкм; б – 200 мкм; в – 250 мкм. Для наглядности смещения верхних пленок увеличены

Из рис. 4.28 также следует уменьшение частоты при уширении верхнего электрода. Хорошо видны поля смещения, концентрирующиеся под верхним электродом. Поскольку, в силу конечности поперечных размеров электродов и плёнки AlN ТПП, в латеральном направлении вправо и влево распространяются волны Лэмбовского типа, возможно их отражение от границ электродов, плёнки AlN или алмазной подложки. Так, на рис. 4.27а наглядно виден процесс синфазного сложения Лэмбовских волн, отражённых от краев верхнего электрода, поскольку на этих границах имеется скачок акустического сопротивления. В данном случае на ширине 170 мкм Al-электрода укладывается 3 полуволны моды Лэмба. В результате возникает побочный резонансный пик, соответствующий симметричной волне Лэмба. Можно сказать, что в данном случае реализуется случай резонатора Лэмба.

Покажем, что паразитные пики соответствуют каким-либо модам волны Лэмба. Для удобства будем рассматривать низкие частоты вблизи первого обертона. Для такой

исследуемой структуры расчетные результаты основного резонанса и антирезонанса приведены на рис. 4.29. С целью определить тип акустической волны, ответственной за возникновение побочного резонанса, было произведено аналогичное моделирование на частотах, незначительно превышающих резонансные.

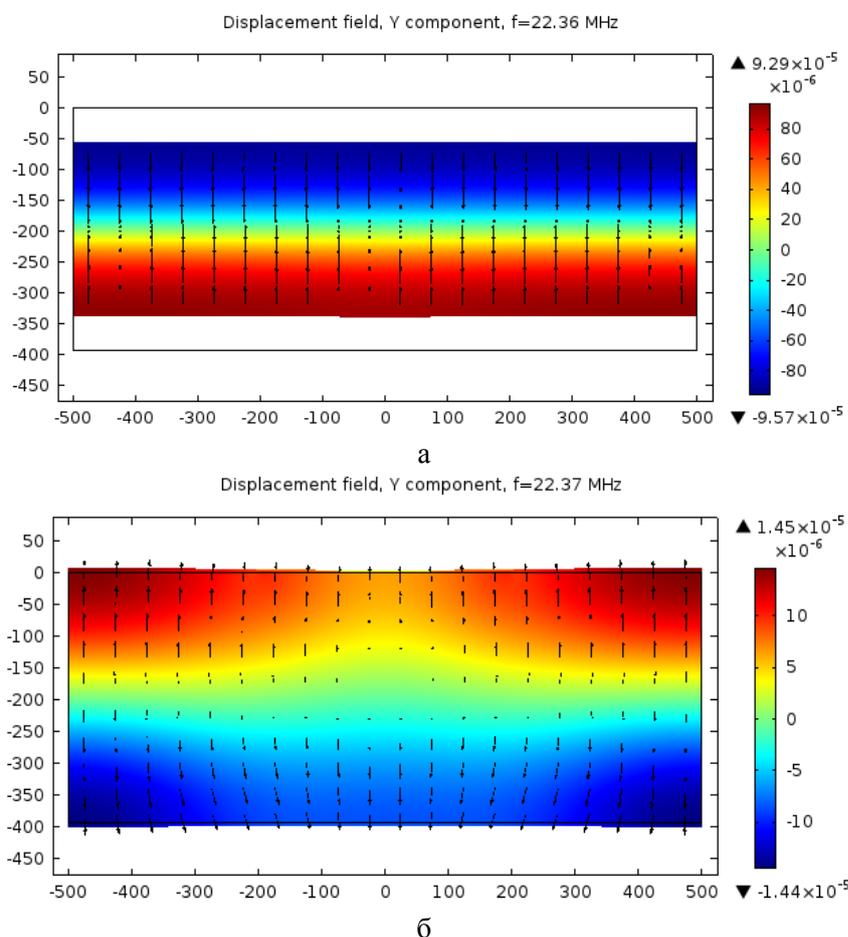
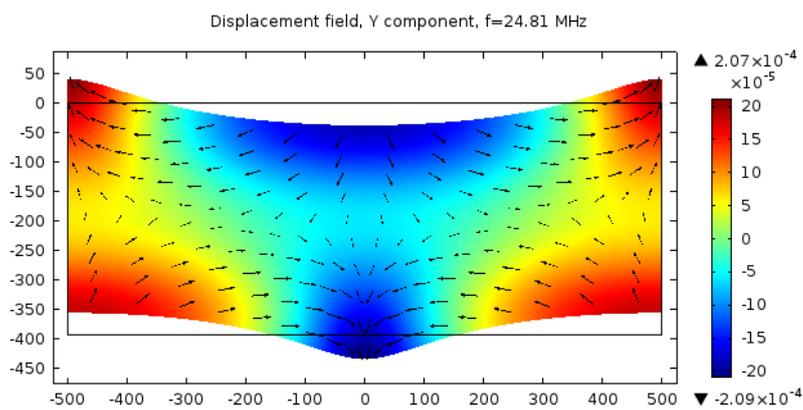


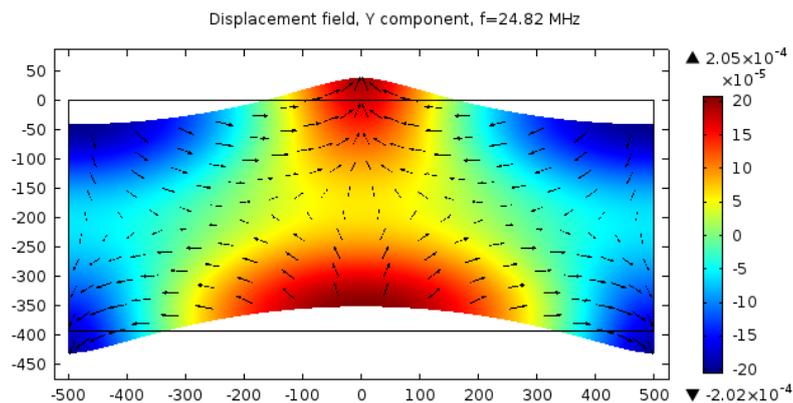
Рис. 4.29. Поля смещения при моделировании пьезоэлектрической слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз»: а – на резонансной частоте 22,36 МГц; б – на частоте антирезонанса

Первые две особенности были обнаружены на частотах 24,8 и 25,2 МГц. Для качественного описания ограничимся исследованием резонансов на 24,8 и на 25,2 МГц (рис. 4.30), хотя также присутствуют резонансы на больших частотах, незначительно превышающих резонансную. Из представленных на рис. 4.30 полей смещения легко заметить, что на частоте 24,8 МГц реализуется антисимметричная мода  $A_0$  (рис. 4.30а, б), при увеличении частоты возникает симметричная мода  $S_0$  (рис. 4.30в, г), на толщине структуры укладывается половина длины волны.

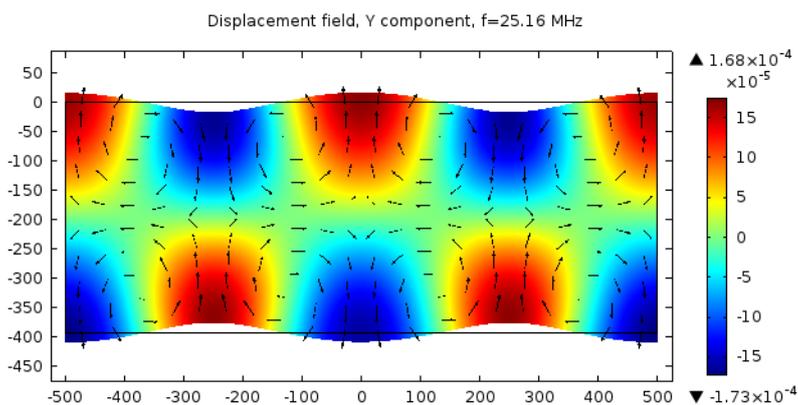
Наглядное представление смещений, приведенное на рис. 4.30, указывает на связь побочных резонансов именно с волнами Лэмба.



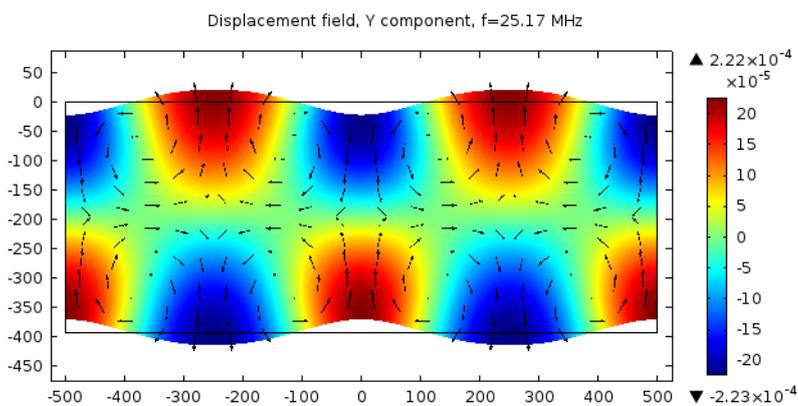
а



б



в



г

Рис. 4.30. Поля смещения при моделировании слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз»: а и б – резонанс и антирезонанс на частоте  $\sim 24,8$  МГц антисимметричной моды  $A_0$ ; б и в – резонанс и антирезонанс на частоте  $\sim 25$  МГц для симметричной моды  $S_0$

## 4.7 Затухание акустических волн в синтетическом монокристалле алмаза

### 4.7.1 Источники затухания СВЧ акустических волн в составных акустических резонаторах

Мерой диссипации энергии в резонаторе обычно является добротность, которую определяют как отношение энергии, запасенной в колебательной системе, к энергии потерь за период колебания:

$$Q = 2\pi \frac{W_{\text{full}}}{\Delta W}, \quad (4.4)$$

где  $W_{\text{full}}$  – энергия, запасенная в системе,  $\Delta W$  – потери энергии за период колебаний. Общие потери энергии в составном акустическом резонаторе можно представить так:

$$\Delta W_{\text{tot}} = \Delta W_{\text{ph-ph}} + \Delta W_{\text{piezo}} + \Delta W_R + \Delta W_{\text{met}} + \Delta W_{\text{dmg}} + \dots \quad (4.5)$$

Здесь  $\Delta W_{\text{ph-ph}}$  обусловлено фонон-фононным затуханием в подложке;  $\Delta W_{\text{piezo}}$  – затуханием в пьезоэлектрической пленке и на её поверхности;  $\Delta W_R$  – рассеянием энергии на шероховатостях поверхности алмаза;  $\Delta W_{\text{met}}$  связано с акустическими и электрическими потерями в слоях металлических электродов и  $\Delta W_{\text{dmg}}$  – с рассеянием упругих волн в нарушенном слое подложки. Значимость этих вкладов будет различна в применении к различным материалам, методам обработки поверхностей и нанесения тонких плёнок.

При шлифовании кристалла абразивами на его поверхности появляются нарушения определенной глубины, а также происходит деформация кристаллической решетки, проникающая вглубь кристалла. Анализ структуры поверхностного слоя кристалла после шлифовки и полировки позволяет сделать вывод о том, что после процесса механической обработки необходимо удалять нарушенный слой. Для исследования затухания в приповерхностном нарушенном слое необходимо учитывать, что такая поверхность кристалла состоит из поликристаллического вещества. Так, в кварце при размерах кристаллитов порядка 200 Å глубина нарушений в поверхностном слое составляет порядка 980 Å [158]. Также в [158] было показано, что поглощение упругих волн в поверхностном слое кристалла можно записать в виде:

$$\alpha(f) \sim \frac{2\pi^2 T \alpha^2 \rho v a^2 f^2}{\kappa}, \quad (4.6)$$

где  $a$  – размер кристаллита,  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности. Причинами поглощения упругих волн в поверхностном слое кристалла являются потери вследствие нарушения теплопроводности в поликристаллическом веществе. Так, на рис. 4.31 представлена зависимость добротности  $Q$  от размера дефектов в поверхностном слое кварца.

В [159] показана возможность учета акустического затухания на поверхности кристалла, связанного с шероховатостью образца. Используя данный подход, сделаем

оценки акустических потерь на шероховатость в слоистой структуре «Me1/AlN/Me2/алмаз»:

$$\alpha(f)_R \approx 2\pi Nv \cdot 8,68 \left( k_{AlN}^2 Rms_{AlN}^2 + k_{Алмаз}^2 Rms_{Алмаз}^2 \right) \quad (4.7)$$

где  $k_{AlN}$  и  $k_{Алмаз}$  – волновые векторы продольной волны в нитриде алюминия и алмазе;  $Rms_{AlN}$  и  $Rms_{Алмаз}$  – среднеквадратичные высоты пиков шероховатости поверхностей AlN и алмаза;  $N$  – число отражений акустической волны в образце за 1 сек. Отметим, что в формулах (1.171), (4.6) и (4.7) коэффициент затухания  $\alpha$  является квадратичным по частоте.

Рассчитанный согласно (4.7) вклад в акустическое затухание, вызванный шероховатостью алмазной подложки и нитрида алюминия, представлен на рис. 4.32. Качество алмазной поверхности значительно влияет на потери: улучшение шероховатости в 2 раза уменьшает затухание на порядок. Сделаем оценки вкладов шероховатости алмазной подложки и плёнки нитрида алюминия в общие СВЧ потери в САР. Используя измеренное методом АСМ значение шероховатости алмазной подложки  $Rms_{diam} \approx 10 - 15$  нм (на базе  $100 \times 100$  мкм<sup>2</sup>), в соответствии с (4.7) получаем  $\alpha(f)_{R(diam)} \approx 0.0035$  дБ/(ГГц<sup>2</sup>×см), что оказывается значительно ниже вклада фонон-фононного затухания  $\alpha(f)_{ph-ph}$ . Шероховатость плёнки AlN была также измерена методом АСМ (на базе  $100 \times 100$  мкм<sup>2</sup>):  $Rms_{AlN} \approx 30$  нм. Исходя из (4.7), получим, что затухание  $\alpha(f)_{R(AlN)} \approx 0.164$  дБ/(ГГц<sup>2</sup>×см) и возрастает квадратично с частотой.

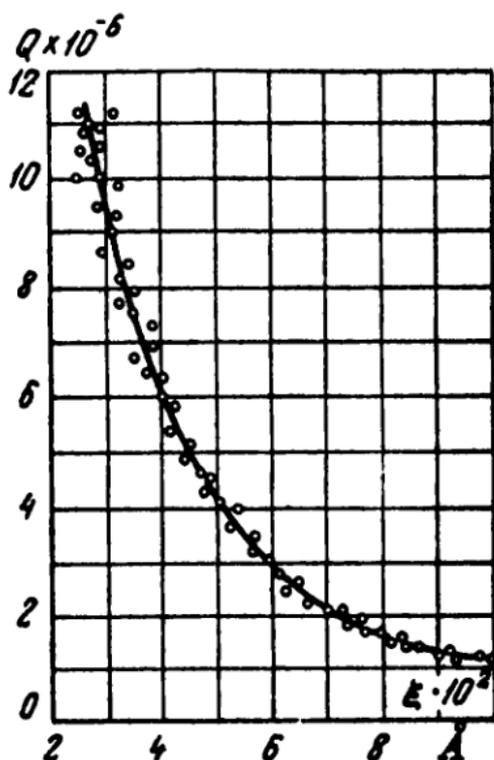


Рис. 4.31. Зависимость добротности кварцевого резонатора от размера дефектов поверхностного слоя [158]

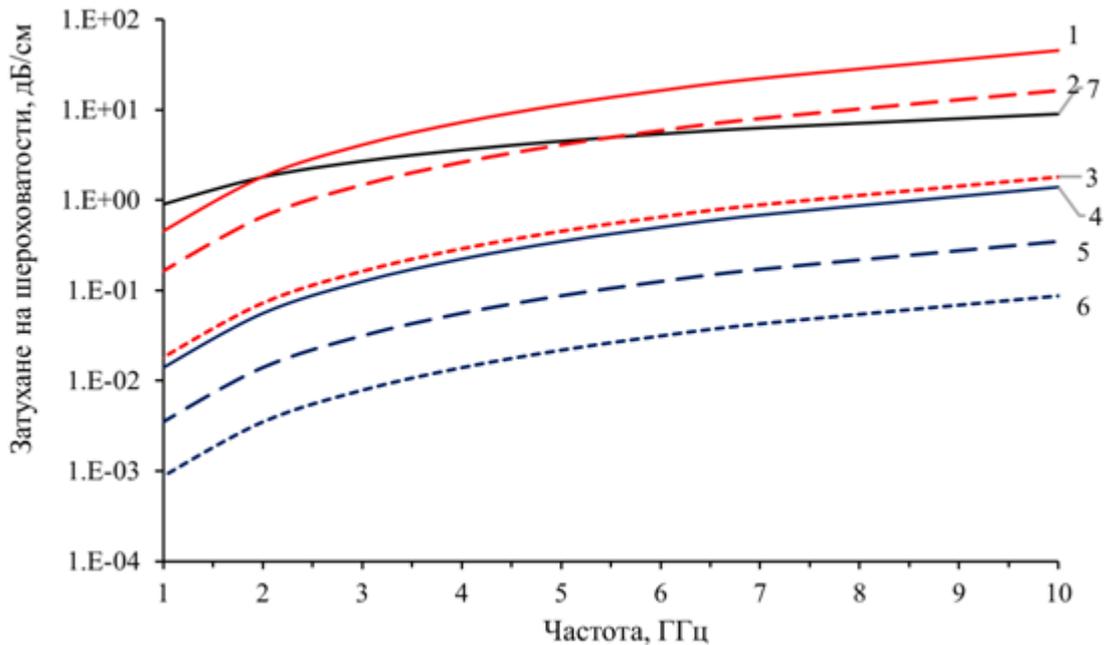


Рис. 4.32. Рассчитанная частотная зависимость затухания для различных величин шероховатости  $Rms$  поверхностей алмаза и пленки AlN: 1 – затухание на поверхности слоя AlN при  $Rms = 50$  нм; 2 – то же для AlN при  $Rms = 30$  нм; 3 – то же для AlN при  $Rms = 10$  нм; 4 – затухание на поверхности алмаза при  $Rms = 20$  нм; 5 – то же для алмаза при  $Rms = 10$  нм; 6 – то же для алмаза при  $Rms = 5$  нм; 7 – фонон-фононное затухание в режиме Ландау-Румера, вычисленное из (1.173)

#### 4.7.2 Параметр качества. Смена механизмов затухания в алмазе

Как следует из многих экспериментов по частотным зависимостям добротности и параметра качества  $Q \times f$  САР, в области высоких частот ( $> 1$  ГГц) такие зависимости не отвечают представлениям теории Ахиезера. Как правило, имеет место увеличение  $Q \times f$  с ростом частоты (рис. 4.33).

На рис. 4.33 показаны частотные зависимости параметра качества  $Q \times f$  для трёх типов САР, отличающихся толщинами пьезоэлектрических плёнок и алмазных подложек. При построении кривых использованы значения  $Q \times f$ , отвечающие максимумам на экспериментально полученных частотных зависимостях (минимумам мнимой части фактора  $\text{Im}(m)$ ). Здесь же представлены «очищенные» кривые, которые получены вычитанием вклада шероховатости нитрида алюминия в соответствии с формулой (4.7).

Как следует из рис. 4.33, вычитание вклада, связанного с шероховатостью нитрида алюминия, особенно заметно в высокочастотной области. «Очищенные» кривые 1 – 3 отвечают линейным частотным зависимостям. С целью оценки относительного и абсолютного вклада в общее затухание, связанного с пьезоэлектрическим преобразователем и металлическими пленками в сравнении с алмазной подложкой, были использованы известные из литературы данные по погонному затуханию в использованных материалах и тонких пленках, приведённому к 1 ГГц. Сводные

результаты в применении к конфигурации и толщинам слоёв исследованного САР приведены в табл. 4.6. Как следует из табл. 4.6, вкладом акустического затухания в тонких плёнках можно пренебречь по сравнению с затуханием в относительно толстой подложке.

Используя соотношение (1.173) и данные рис. 4.33, были рассчитаны частотные зависимости фонон-фононного затухания в алмазе (рис. 4.34). Как и для параметра качества, следует отметить линейную частотную зависимость, отвечающую механизму Ландау-Румера. На рис. 4.35 показаны «очищенные» частотные зависимости параметра качества  $Q \times f$  для шести резонаторов, включая область частот ниже 1 ГГц, в сравнении с расчётными кривыми для алмаза. Учитывая особенности данного типа составных акустических резонаторов, получить сравнительно надёжные данные в области частот ниже 0,5 ГГц оказалось проблематичным.

В табл. 4.7 приводятся рассчитанные данные по СВЧ акустическому затуханию алмаза в сравнении с монокристаллами, имеющими наименьшие акустические потери.

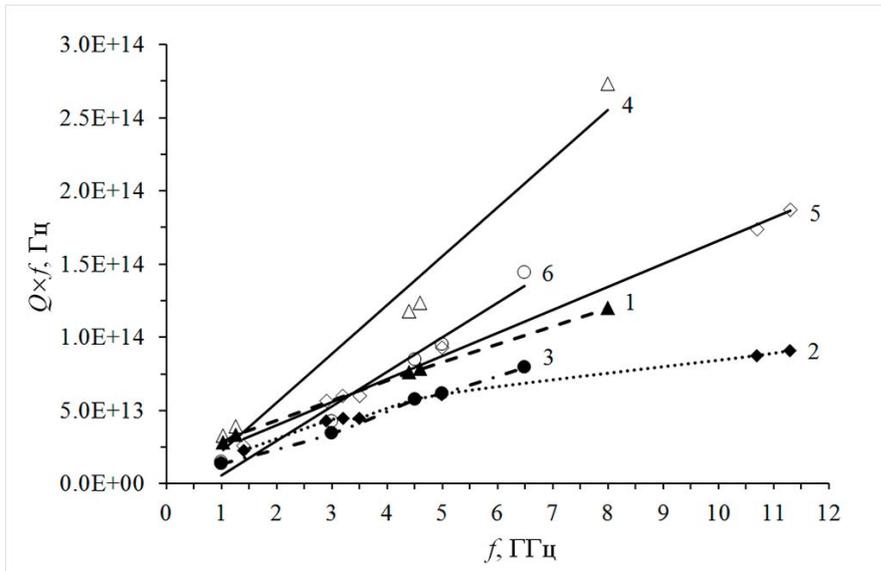


Рис. 4.33. Частотные зависимости  $Q \times f$  для САР на основе слоистой структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз»: 1 – А №24; 2 – А №25; 3 – А №28; 4 – вычет вклада шероховатости нитрида алюминия для А №24; 5 – то же для А №25; 6 – то же для А №28

Таблица 4.6. Относительные и абсолютные значения затухания продольной акустической волны в слоях составного акустического резонатора

Слой	Al [160]	AlN [161]	Mo [162]	Алмаз [163]
$\alpha(f)$ , дБ/(ГГц <sup>2</sup> ×см)	175	36	16	0,47
$\alpha(f) \times d$ , 10 <sup>-3</sup> дБ/ГГц <sup>2</sup>	2,9	2,2	0,3	18,4

Примечание: в расчете  $\alpha(f) \times d$  использовались следующие толщины слоев  $d$ : Al – 164 нм, AlN – 624 нм, Mo – 169 нм, алмаз – 392 мкм

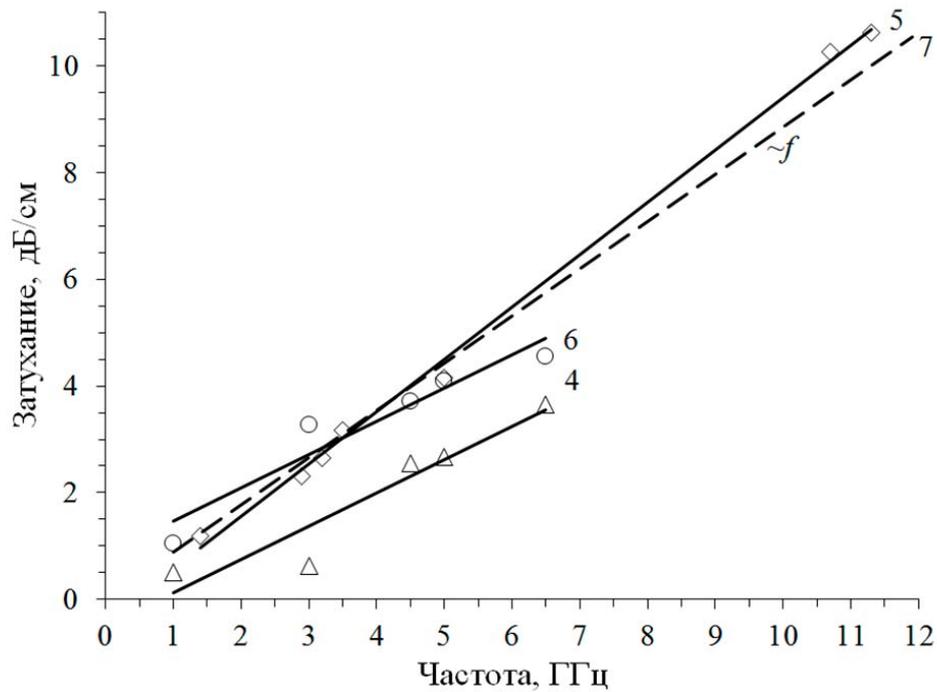


Рис. 4.34. Частотные зависимости фонон-фононного затухания в алмазе. Обозначения кривых соответствуют данным по САР, показанным на рис. 4.33. Кривая «7» соответствует расчетной линейной частотной зависимости

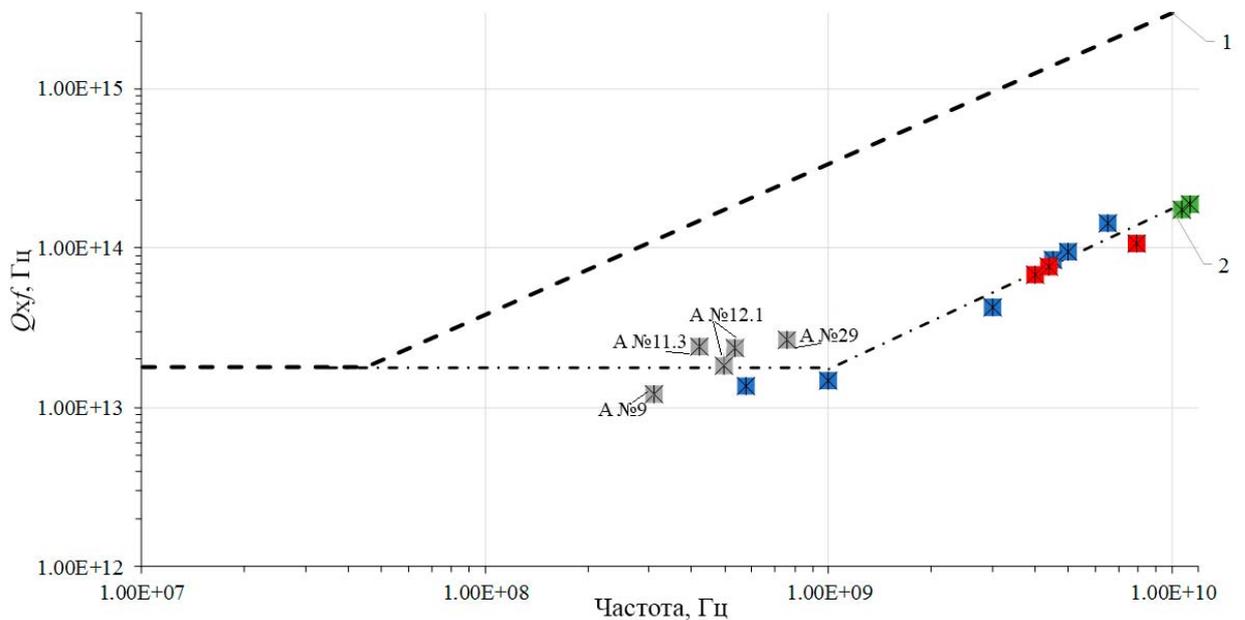


Рис. 4.35. Экспериментальные и расчётные частотные зависимости параметра качества  $Qxf$  для составных акустических резонаторов на основе алмаза: 1 – репродукция расчётной кривой частотной зависимости параметра качества для алмаза из [58]; 2 – экспериментальные данные, полученные из измерений серии резонаторов. Синим цветом обозначены значения САР А №28, красным САР А №24; зеленым САР А №25

Таблица 4.7. СВЧ акустическое затухание (дБ/см) в монокристаллах при комнатной температуре

$f$ , ГГц	Алмаз	ИАГ	Сапфир	LiNbO <sub>3</sub>	
Источник	Наши данные	[164]	[165]	[166]	Эксп. [167]
1	0,89	0,2 – 0,3	0,2	0,3*	0,4
2	1,8	~1,0*	0,8*	1,0*	1,5
4,5	4	~5,2*	4,1*	5,1*	8,0
8	7,1	~16,0*	12,8*	15,8*	-

\* Рассчитано в приближении Ахиезера

#### 4.7.3 Определение параметра Грюнайзена и времени термической релаксации в алмазе

Из рис. 4.35 следует, что изменение наклона кривой частотной зависимости акустического затухания наблюдается в окрестности 1 ГГц, что соответствует реализации механизма Ахиезера в алмазе ниже данной частоты. Как было показано в [58], время термической релаксации тепловых фононов при взаимодействии с продольной акустической модой может быть оценено по формуле:

$$\tau_t \approx \frac{6\kappa}{C_V v_D^2}, \quad (4.175)$$

где для алмаза  $\kappa \approx 2000$  Вт/(м·К) [168] – коэффициент теплопроводности и  $C_V \approx 1,8 \cdot 10^6$  Дж/(м<sup>3</sup>·К) [169] – удельная теплоемкость единицы объема при комнатной температуре. Используя значение дебаевской скорости  $v_D \approx 13322$  м/с, получим  $\tau_t \approx 3,8 \cdot 10^{-11}$  с и частоту, на которой должен происходить переход от механизма Ахиезера к механизму Ландау-Румера ( $\omega\tau_t > 1$ ):  $f_t = 4,2$  ГГц. Однако, как показано в работе [170], значение  $\tau_t$ , вычисленное с помощью (4.175), неадекватно характеризует релаксацию тепловых фононов. Из анализа рис. 4.35 ясно, что прогнозируемая в работе [58] частота перехода от режима Ахиезера к режиму Ландау-Румера в алмазе является существенно заниженной (~45 МГц); как результат, завышено время термической релаксации (~3,5·10<sup>-9</sup> с), которое, по нашим данным, составляет величину  $\tau_t = 1,6 \cdot 10^{-10}$  с. Используя данные рис. 4.35, соотношение (1.172) и параметр качества  $Q \times f = 1,8 \cdot 10^{13}$  Гц, для продольной волны в направлении [100] алмаза в пределе Ахиезера был получен частный параметр Грюнайзена  $\gamma_{100}^L = 0,85$ . Полученные экспериментально значения параметра качества и затухания в синтетическом монокристалле алмаза Па типа для различных механизмов затухания приведены в табл. 4.8.

Таблица 4.8. Значения параметра качества и затухания для механизмов фонон-фононного затухания ОАВ

Механизм затухания	Параметр качества $Q \times f$ , Гц	Затухание $\alpha(f)$
Ахиезера	$1,8 \cdot 10^{13}$	0.9 дБ/(ГГц <sup>2</sup> ×см)
Ландау-Румера	$1,8 \cdot 10^4 \times f$	0.9 дБ/(ГГц×см)

Таким образом, можно заключить, что алмаз не только имеет рекордные значения параметра качества  $Q \times f$ , но и, благодаря переходу от механизма Ахиезера к механизму Ландау-Румера уже при  $\sim 1$  ГГц, имеет потенциал в улучшении данного параметра в области более высоких частот.

#### Выводы к главе 4:

- Проведено моделирование пьезоэлектрической слоистой структуры «Me1/AlN/Me2/(100) алмаз».
- Проведены экспериментальные исследования структур «Me1/AlN/Me2/(100) алмаз».
- Получены рекордные значения параметра качества для составного акустического резонатора с подложкой из синтетического монокристалла алмаза:  $Q \times f \approx 10^{14}$  Гц на 9,5 ГГц.
- Получена корреляция между расчетными и экспериментальными данными полосы пропускания резонатора: минимумы мнимой части форм-фактора соответствуют зонам с высокой добротностью, минимумы действительной части – зонам с низкой добротностью.
- Обнаружены серии побочных резонансов, возникающие в окрестности объемного обертона. Показано, что наличие таких побочных резонансов обусловлено возбуждением волн Лэмба. Исследована возможность подавления побочных пиков, влияние ширины электродов.
- Обнаружена смена механизмов затухания от механизма Ахиезера к механизму Ландау-Румера в синтетическом монокристалле алмаза Па типа при комнатной температуре на частоте  $\sim 1$  ГГц.
- Получены значения параметра Грюнайзена и времени термической фонон-фононной релаксации для синтетического монокристалла алмаза Па типа:  $\gamma_{100}^L = 0,85$  и  $\tau_t = 1,6 \cdot 10^{-10}$  с.

Основные результаты, полученные в данной главе, опубликованы в следующих статьях, трудах симпозиумов и материалах конференций:

7. Золотова, О. П. Упругие волны в пьезоэлектрических слоистых структурах / О. П. Золотова, С. И. Бурков, Б. П. Сорокин Б.П., А. В. Теличко // Журн. СФУ. Сер. Мат. и физ. – 2012. – Т. 5, № 2 – С. 164-186.
8. Sorokin, B. P. AlN/single crystalline diamond piezoelectric structure as a High overtone Bulk Acoustic Resonator / B. P. Sorokin, G. M. Kvashnin, A. P. Volkov, V. S. Bormashov, V. V. Aksenonkov, M. S. Kuznetsov, G. I. Gordeev, A. V. Telichko // Appl. Phys. Lett. – 2013. – V. 102, N 11. – P. 113507.
9. Сорокин, Б.П. Исследования СВЧ акустических свойств пьезоэлектрических слоистых структур AlN/монокристаллический алмаз / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, В. С. Бормашов, А. П. Волков, А. В. Теличко, Г. И. Гордеев, С. А. Терентьев, С. И. Бурков, О. П. Золотова // Труды Межд. симп. "Физика кристаллов 2013", Москва, Россия, 28 октября - 2 ноября 2013 / Москва 2013.
10. Бланк, В. Д. Разработка методов создания устройств акустоэлектроники и сенсорной техники на основе синтетических монокристаллов алмазов / В. Д. Бланк, Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, А. П. Волков, В. С. Бормашов, С. А. Терентьев, М. С. Кузнецов, А. В. Теличко, Г. И. Гордеев // Всеросс. научно-техническая конф. и выставка, посвященная итогам реализации Федеральной Целевой Программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007 – 2013 годы», Москва, Россия, 24-25 сентября 2013 / Москва 2013.
11. Sorokin, B. P. Microwave acoustic properties of diamond single crystal as a substrate for High-overtone Bulk Acoustic Resonator / B. P. Sorokin, G. M. Kvashnin, A. P. Volkov, V. S. Bormashov, V. V. Aksenonkov, M. S. Kuznetsov, A. V. Telichko, G. I. Gordeev // Proc. of The 2013 Joint Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control, European Frequency and Time Forum and Piezoelectric Force Microscopy workshop Symp., Prague, Czech Republic, 21-25 July 2013 / Prague, 2013. P. 1684-1687.
12. Теличко, А. В. Исследование физико-химических и акустических свойств пьезоэлектрических слоистых структур  $Me_1/AlN/Me_2/(100)$  алмаз / А. В. Теличко, Г. И. Гордеев, Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, В. С. Бормашов, А. П. Волков // Школа-семинар молодых учёных Центрального региона по теме: «Участие молодых учёных в фундаментальных, поисковых и прикладных исследованиях по созданию новых углеродных и наноуглеродных материалов», Андреевка, Россия, 2-3 октября 2013 / Андреевка 2013.

13. Бормашов, В. С. Технология изготовления СВЧ пьезоэлектрических преобразователей на основе пленки AlN, нанесенной на подложку из синтетически монокристалла алмаза / В. С. Бормашов, А. П. Волков, А. В. Голованов, Г. И. Гордеев, Г. М. Квашнин, Б. П. Сорокин, А. В. Теличко // Изв. ВУЗ'ов, серия Хим. хим. техн. – 2014. – Т. 57, № 5. – С. 17-21.
14. Сорокин, Б. П. Исследования многочастотных СВЧ акустических резонаторов на основе слоистой пьезоэлектрической структуры «Me1/AlN/Me2/(100) алмаз» / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, А. В. Теличко, Г. И. Гордеев, С. И. Бурков, В. Д. Бланк // Акуст. журн. – 2015. – Т. 61, № 3. – С. 464-476.
15. Сорокин, Б.П. Исследования СВЧ акустического затухания в многочастотном резонаторе на объемных акустических волнах на основе синтетического монокристалла алмаза / Б. П. Сорокин, А. В. Теличко, Г. М. Квашнин, В. С. Бормашов, В. Д. Бланк // Акуст. журн. – 2015. – Т. 61, № 5. – С. 1-13.
16. Sorokin, B. P. The IIa synthetic diamond as a substrate for microwave High overtone Bulk Acoustic Resonator / B. P. Sorokin, V. D. Blank, G. M. Kvashnin, A. P. Volkov, V. S. Bormashov, M. S. Kuznetsov, A. V. Telichko, G. I. Gordeev. // Abstr. Int. Conf. on Diamond and Carbon Materials, Madrid, Spain, 8-11 September 2015/ Madrid, 2015. - P2-041.
17. Telichko, A.V., Sorokin B.P. UHF Acoustic attenuation and quality parameter limits in the diamond based HBAR / A. V. Telichko, B. P. Sorokin // Proc. of The IEEE Int. Frequency Control Symp. and European Frequency and Time Forum, Denver, USA, 12-16 April 2015 / Denver, 2015. – P. 94-99.
18. Kvashnin, G. M. Telichko, A.V., Sorokin B.P. Resonant transformation of acoustic waves observed for the diamond based HBAR / G. M. Kvashnin, A. V. Telichko, B.P. Sorokin // Proc. of The IEEE Int. Frequency Control Symp. and European Frequency and Time Forum, Denver, USA, 12-16 April 2015 / Denver, 2015. – P. 396-401.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Предложена теория температурных зависимостей модулей УП2П с учетом вкладов модулей упругости 3-го и 4-го порядка кубических кристаллов. Показано качественное и количественное согласование с экспериментальными данными в области комнатных температур для ряда кристаллов.
- Исследована зависимость скоростей ОАВ синтетического монокристалла алмаза Па типа от одноосного сжатия. Экспериментально определены значения модулей упругих постоянных 3-го порядка.
- Экспериментально исследован составной акустический резонатор на основе слоистой пьезоэлектрической структуры «Al/AlN/Mo/(100) алмаз» в области частот 800 МГц – 10 ГГц.
- Дальнейшая оптимизация конструкции и технологии изготовления позволит продвинуться и в область более высоких частот, поскольку с ростом частоты наблюдается немонотонное возрастание параметра качества.
- Показано, что немонотонный характер частотных зависимостей параметров резонатора связан с особенностями возбуждения нагруженного тонкопленочного преобразователя в окрестности частот  $(\lambda/4)n$ .
- Наилучшие результаты с точки зрения добротности и параметра качества резонатор демонстрирует в окрестности минимума мнимой части форм-фактора  $\text{Im}(m)$ . Результаты расчета находятся в близком согласии с экспериментально наблюдаемыми зависимостями.
- Исследованы особенности возбуждения паразитных пиков, связанных с волнами Лэмба в слоистой структуре.
- Подробно проанализированы механизмы потерь акустической энергии в слоистой пьезоэлектрической структуре «Al/AlN/Mo/(100) алмаз». Использована оценка глубины нарушенного приповерхностного слоя (~20 – 30 нм) в алмазе после финишной абразивной обработки, обоснованная методом дифракции обратно рассеянных быстрых электронов и наблюдением Кикучи-линий.
- Показано, что потери акустической энергии на неровностях поверхности алмазной подложки при шероховатости ~30 нм, так же, как акустические потери в тонких плёнках, на порядок меньше акустического затухания в объёме и принципиального значения не имеют.
- Неровности внешней поверхности пьезоэлектрической плёнки AlN могут дать вклад, сравнимый с объёмным затуханием в подложке. Также важно, что такой

вклад возрастает с ростом частоты  $\sim f^2$ . Поэтому, используя экспериментальные данные АСМ, учитывали вклад данного механизма в совокупный эффект.

- Показано, что частота перехода от механизма Ахиезера к механизму Ландау-Румера в алмазе составляет  $\sim 1$  ГГц.
- Получено, что для алмаза время термической фонон-фононной релаксации составляет  $\tau_t = 1,6 \cdot 10^{-10}$  с и частный параметр Грюнайзена для продольной акустической волны в направлении [100] равен 0,85.
- Расчёт акустического затухания показал, что, хотя на частоте  $\sim 1$  ГГц акустические потери в алмазе несколько выше, но при увеличении частоты до 8–10 ГГц становятся заметно ниже, чем в известных материалах с низким уровнем затухания.
- Полученное нами максимальное экспериментальное значение  $Q \times f \approx 10 \cdot 10^{13}$  Гц на частоте 9,5 ГГц соответствует лучшим достигнутым в мировой практике результатам и позволяет охарактеризовать синтетический алмаз как перспективный материал для СВЧ акустоэлектронных устройств.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Zhang, H. High-tone bulk acoustic resonators on sapphire, crystal quartz, fused silica, and silicon substrates/ H. Zhang, W. Pang, H. Yu, E. S. Kim // J. Appl. Phys. – 2006. – V. 99. – P. 124911.
- [2] Pijolat, M. L et al. Large  $Q \times f$  product for HBAR using smart cut™ transfer of LiNbO<sub>3</sub> thin layers onto LiNbO<sub>3</sub> substrate // Proc. of IEEE Int. Ultrason. Symp., 2-5 November, 2008, Beijing, China. /Beijing, 2008, – P. 201-204.
- [3] Pijolat M. et al. High quality factor lithium niobate electrostrictive HBAR resonators // Proc. of Joint IEEE Int. Freq. Contr. & Europ. Time Forum., 1-5 May, 2011, San Francisco, USA. / San-Francisco, 2011. – P. 1-3.
- [4] Gachon D. et al. P1H1 LiNbO<sub>3</sub>-LiNbO<sub>3</sub> High overtone Bulk Acoustic Resonator exhibiting high  $Q \times f$  product // Proc. of IEEE Int. Ultrason. Symp., 28-31 October, 2007, New York, USA. / New-York, 2007. – P. 1417-1420.
- [5] Le Brizoual, L. et al. AlN/ZnO/diamond waveguiding layer acoustic wave structure: Theoretical and Experimental Results // IEEE Trans. Ultrason. Ferroel. Freq. Contr. – 2010. – V. 57, N 8. – P. 1818-1824.
- [6] Lakin, K. M. High- $Q$  microwave acoustic resonators and filters/ K. M. Lakin, G. R. Kline, K. T. McCarron // IEEE Trans. Microw. Theor. Technique – 1993. – V. 41, N 12. – P. 2139-2146.
- [7] Nakazawa, M. A study of quartz temperature sensors characterized by ultralinear frequency-temperature responses / M. Nakazawa, T. Takemae, A. Miyahara, K. A. Matsuyama // IEEE Trans. Son. Ultrason. – 1985. – V. 32, N. 6. – P. 828-834.
- [8] Driscoll, M. M. Extremely low phase noise UHF oscillators utilizing high-overtone, bulk-acoustic resonators / M. M. Driscoll, R. A. Jelen, N. Matthews // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. – 1992. – V. 39, N 6. – P. 774-779.
- [9] Zhou, C. Extracting the electromechanical coupling constant of piezoelectric thin film by the high-tone bulk acoustic resonator technique/ C. Zhou, W. Pang, Q. Li, H. Yu, X. Hu, H. Zhang // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. – 2012. – V. 59, N 5. – P. 958-962.
- [10] Mansfeld, G.D. Unique properties of HBAR characteristics / G.D. Mansfeld, S. G. Alekseev, N. I. Polzikova // Proc. of IEEE Int. Ultrason. Symp., 2-5 November, 2008, Beijing, China /Beijing, 2008. – P. 439-442.
- [11] Алексеев, С. Г. Особенности затухания и захват энергии колебаний в составных акустических СВЧ резонаторах на основе монокристаллов ИАГ/ С. Г. Алексеев, Г. Д. Мансфельд, Н. И. Ползикова, И. М. Котелянский // Акуст. журн. – 2007. – Т. 53, № 4. – С. 533-539.

- [12] Pao, S.Y. et al. Analysis and experiment of HBAR frequency spectra and applications to characterize the piezoelectric thin film and to HBAR design // Proc. IEEE Int. Freq. Contr. Symp., 29-31 May, 2002, New Orleans, USA. / New Orleans, 2002. – P. 27-35.
- [13] Alekseev, S. G. Trapping of acoustic energy in composite resonators based on cubic crystals / S.G. Alekseev, G. D. Mansfeld, N. I. Polzikova // J. Commun. Techn. Electron. – 2006. – V. 51, N 8. – P. 925-031.
- [14] Baumgartel, L. Experimental Optimization of electrodes for high  $Q$ , high frequency HBAR / L. Baumgartel, E. S. Kim // Proc. IEEE Int. Ultrason. Symp., 19-23 September, 2009, Rome, Italy. / Rome, 2009. – P. 2107-2110.
- [15] Загороднов, А. П., Вопросы построения маломощного высокочастотного опорного генератора / А. П. Загороднов, А. Н. Якунин // Научное приборостроение – 2012. – Т. 22, №1. – С. 19-24.
- [16] Александров, К. С. // Эффективные пьезоэлектрические кристаллы для акустоэлектроники, пьезотехники и сенсоров. В 2 т. Т. 1. / К. С. Александров, Б. П. Сорокин, С. И. Бурков]. –Новосиб.: Изд-во СО РАН, 2007. – 501 с.
- [17] Flugge, S. Handbuch der Physik // The classical field theories / C. Truesdell [et al.]. - Berlin-Gottingen-Heidelberg: Springer, 1960. – V. III/1. – P. 226-293.
- [18] Truesdell, C. Handbuch der Physik // Waves in solids / R. N. Thurston. – Berlin-Heidelberg-New York: Springer, 1974. – V. VIa/4. – P. 109-308.
- [19] Baumhauer, J. C. Nonlinear electroelastic equations for small amplitude fields superposed on a bias / J. C. Baumhauer, H. F. Tiersten // J. Acoust. Soc. Amer. – 1972. – V. 54, N 4. – P. 1017-1034.
- [20] Сиротин, Ю.И. Основы кристаллофизики / Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. – М.: Наука. Глав. Ред. Физ.-Мат. Лит., 1979. – 640 с.
- [21] Tiersten, H. F. Nonlinear electroelastic equations cubic in the small field variables // J. Acoust. Soc. Amer. – 1975. – V. 57, N 3. – P. 660-666.
- [22] Lang, J. M., Jr. Experimental determination of third-order elastic constants of diamond / J. M. Lang, Jr., Y. M. Gupta // Phys. Rev. Lett. – 2011. – V. 106. – P. 125502.
- [23] Федоров, Ф. И. Теория упругих волн в кристаллах / Ф. И. Федоров. – М.: Наука, 1965. – 388 с.
- [24] Дьелесан Э. Упругие волны в твердых телах. Применение для обработки сигналов / Э. Дьелесан, Д. Руайе; пер. с франц. под общ. ред. В. В. Леманова. – М: Наука. Глав. Ред. Физ.-Мат. Лит., 1982. – 424 с.
- [25] Викторов, И. А. Физические основы применения ультразвуковых волн Рэлея и Лэмба в технике / И. А. Викторов – М.: Наука, 1966. – 169 с.

- [26] Love, A. E. H. Some problems of geodynamics. – London: Cambridge University Press, 1911. – 218 P.
- [27] Бреховских, Л. М. Акустика слоистых сред / Л. М. Бреховских, О. А. Годин. – М.: Наука, 1989. – 416 с.
- [28] Булгаков, А. А. Распространение волн Лява в слоисто-периодической активной среде / А. А. Булгаков, В. И. Сафоновский // Акуст. журн. – 1983. – Т. 29, № 4. – С. 446-450.
- [29] Perng-Fei, D.G. Interfacial and Love type waves in materials with monoclinic elastic symmetry // J. Acoust. Soc. Am. – 1970. – V. 47, N 3. – P. 777-780.
- [30] Physical Acoustics. Principles and Methods. In 10 V. V. ИВ. Lattice Dynamics. / Ed. by W. P. Mason. – Academic Press: NY and London. 1965. – 310 P.
- [31] Leibfried, G. Theory of anharmonic effects in crystals / G. Leibfried, H. Ludwig // Solid State Phys. – 1961. – V. 12. – P. 275-444.
- [32] Gruneisen, E. Handbuch der Physik. Bd. 10 / Hrg. H. Geiger [et al.]. – 1 Aufl. – Berlin, 1926. –S. 1.
- [33] Леонтьев, К. Л. Связи упругостных и тепловых свойств веществ // Акуст. журн. – 1981. – Т. 27, № 4. – С. 554-561.
- [34] Беломестных, В. Н. Взаимосвязь ангармонизма и поперечной деформации квазиизотропных поликристаллических тел / В. Н. Беломестных, Е. П. Теслева // ЖТФ – 2008. – Т. 74, № 8. – С. 140-142.
- [35] Сандитов, Д. С. О параметре Грюнайзена кристаллов и стекол / Д. С. Сандитов, В. В. Мантатов, М. В. Дармаев, Б. Д. Сандитов // Журн. техн. физ. – 2009. – Т. 29, № 3. – С. 59-62.
- [36] Klein, C. A. Anisotropy of Young's moduli and Poisson's ratio in diamond // Mat. Res. Bull. – 1992. – V. 27. – P. 1407-1414.
- [37] Sorokin, B.P. et al. Microwave acoustic properties of diamond single crystal as a substrate for High overtone Bulk Acoustic Resonator // Proc. of Joint Ultrason. Ferroel. Freq. Contr., Europ. Freq. Time Forum, and Piezoresp. Force Micro. Symp., 21-25 July, 2013, Prague, Czech Republic / Prague, 2013. – P. 1864-1867.
- [38] Fu, Z. J. First-principle calculations for elastic and thermodynamic properties of diamond / Z. J. Fu, G. F. Ji, X. R. Chen, Q. Q. Gou // Commun. Theor. Phys. – 2009. – V. 51. – P. 1129-1134.
- [39] Parsons, B. J. Spectroscopic mode Gruneisen parameters for diamond // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1977. – V. 352. – P. 397-417.

[40] Tiersten, H. F. On the interaction of the electromagnetic field with heat conducting deformable insulators / H. F. Tiersten, G. H. Tsai // *J. Math. Phys.* – 1972. – V. 13, N 3. – P. 361-378.

[41] Бурков, С.И. Расчёт характеристик составного акустического резонатора СВЧ диапазона на объёмных акустических волнах (HBAR) / С. И. Бурков, Б. П. Сорокин // Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2013616768 (Реестр программ для ЭВМ от 18.07.2013 г.).

[42] Sorokin, B.P. AlN/single crystalline diamond piezoelectric structure as a high overtone bulk acoustic resonator / B. P. Sorokin, G. M. Kvashnin, A. P. Volkov, V. S. Bormashov, V. V. Aksenonkov, M. S. Kuznetsov, G. I. Gordeev, A. V. Telichko // *Appl. Phys. Lett.* – 2013. – V. 102. – P. 113507.

[43] Chen, Q. Characterization of mechanical and piezoelectric properties of the AlN thin film in a composite resonator structure / Q. Chen, Q. M. Wang // *IEEE Int. Freq. Contr. Symp.*, 4-7 June, 2006, Miami, USA / Miami, 2006. – P. 104-110.

[44] Dubois, M. A. Properties of aluminum nitride thin film for piezoelectric transducers and microwave filter applications / M. A. Dubois, P. Muralt // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – V. 74, N 20. – P. 3032-3034.

[45] Lee, Y. C. Acoustic microscopy measurement of elastic constants and mass density / Y. C. Lee, J. O. Kim, J. D. Achenbach // *IEEE Trans. Ultrason. Ferroel. Freq. Contr.* – 1995. – V. 42, N 2. – P. 253-264.

[46] Davey, W.P. The lattice parameter and density of pure tungsten // *Phys. Rev.* – 1925. – V. 26. – P. 736-738.

[47] Mansfeld, G. D. Acoustic HBAR spectroscopy of metal (W, Ti, Mo, Al) thin films / G. D. Mansfeld, S. G. Alekseev, I. M. Kotelyansky // *Proc. IEEE Int. Ultrason. Symp.*, 7-10 October, 2001, Atlanta, USA / Atlanta, 2001. – P. 415-418.

[48] Kielczynski, P. Determination of the elastic properties of thin layers and graded materials using generalized Love waves / P. Kielczynski, M. Szalewski // *IEICE Techn. Report.* – 2010. – V. 109, N 388. – P. 117-122.

[49] Diebold, A.C. *Handbook of silicon semiconductor metrology.* – CRC Press, 2001. – 896 P.

[50] Smith, D. R. Low-temperature properties of silver / D. R. Smith, F. R. Fickett // *J. Res. Nat. Inst. Stand. Techn.* – 1995. – V. 100, N 2. – P. 119-171.

[51] Samuelsson, M. et al. On the film density using high power impulse magnetron sputtering // *Surf. Coat. Techn.* – 2010. – V. 205, N 2. – P. 591-596.

- [52] Ахиезер, А. О поглощении звука в твердых телах // ЖЭТФ. – 1938. – Т. 8, № 12. – С. 1318-1329.
- [53] Woodruff, T. O. Absorption of sound in insulators / T. O. Woodruff, H. Ehrenreich // Phys. Rev. – 1961. – V. 123, N 5. – P. 1553-1559.
- [54] Bömmel, H. E. Excitation and attenuation of hypersonic waves in quartz / H. E. Bömmel, K. Dransfeld // Phys. Rev. – 1960. – V. 117, N 5. – P. 1245-1252.
- [55] Mason, W. P. Ultrasonic-wave propagation in pure silicon and germanium / W. P. Mason, T. B. Bateman // J. Acoust. Soc. Am. – 1964. – V. 36, N 4. – P. 644-652.
- [56] Mason, W. P. Relation between third-order elastic moduli and the thermal attenuation of ultrasonic waves in nonconducting and metallic crystals / W. P. Mason, T. B. Bateman // J. Acoust. Soc. Am. – 1966. – V. 40, N 4. – P. 852-862.
- [57] Barrett, H. H. Critique of current theories of Akhieser damping in solids / H. H. Barrett, M. G. Holland // Phys. Rev. B. – 1970. – V. 1, N 6. – P. 2538-2544.
- [58] Tabrizian, R. Effect of phonon interactions on limiting the  $Q \times f$  product of micromechanical resonators / R. Tabrizian, M. Rais-Zadeh, F. Ayazi // Transducers, 21-25 June, 2009, Denver, USA / Denver, 2009. – P. 2131-2134.
- [59] Ландау, Л. Д. О поглощении звука в твердых телах / Л. Д. Ландау, Ю. Б. Румер // Phys. Zs. Sowet. – 1937. – Т. 11, № 18. – P. 227-233.
- [60] Simons, S. On the interaction of long wavelength phonons with thermal phonons // Proc. Phys. Soc. – 1964. – V. 83. – P. 749-754.
- [61] Труэлл, Р. Ультразвуковые методы в физике твердого тела / Р. Труэлл, Ч. Эльбаум, Б. Чик; под общ. ред. И. Г. Михайлова, В. В. Леманова. – М.: Мир, 1972. – 308 с.
- [62] Maris, H. J. Interaction of sound waves with thermal phonons in dielectric crystals // Phys. Acoustics. V. 8 / Ed by W. P. Mason – N.Y.; L.: Acad. Press. 1971. – Ch. 6. – P. 279-345.
- [63] Гуревич, В.Л. Кинетика фононных систем / В. Л. Гуревич. – М.: Наука. 1980. – 400 С.
- [64] Мэзон У. Применение пьезоэлектрических резонаторов и механических резонаторов в фильтрах и генераторах // Физическая акустика. Т. 1А / Под ред. У. Мэзона. – М.: Мир, 1966. – 592 С.
- [65] Smythe, R. C. Langasite, langanite, and langatate bulk-wave Y-cut resonators / R. C. Smythe, R. C. Helmbold, G. E. Hague, K. A. Snow // IEEE Trans. Ultrason. Ferroel. Freq. Contr. – 2000. – V. 47, N 2. – P. 355-360.
- [66] Кэмпбелл, К. К. Применение устройств на поверхностных и приповерхностных акустических волнах // ТИИЭР. – 1989. – Т. 77, № 10. – С. 5-41

[67] Lord Rayleigh. On waves propagating along the plane surface of an elastic solid // Proc. London Math. Soc. – 1885. – V. 7, N 11. – P. 4-11.

[68] White, R. M. Direct piezoelectric coupling to surface elastic waves / R. M. White, F. W. Voltmer // Appl. Phys. Lett. – 1965. – V. 17, N 12. – P. 314-316.

[69] Smith, W. L. Quartz crystal thermometer for measuring temperature deviations in the  $10^{-3}$  to  $10^{-6}$  °C range / W. L. Smith, W. J. Spencer // Rev. Sci. Instrum. – 1963. – V. 34. – P. 268-270.

[70] Nakazawa, M. An ultralinear stress-compensated temperature sensor / M. Nakazawa, A. Ballato, T. Lukaczek // IEEE Trans. Ultrason. Ferroel. Freq. Contr. – 1987. – V. 34, N 2. – P. 270-277.

[71] Stewart, J.T. Design of a quartz microresonator for infrared sensor applications / J. T. Stewart, Y. Kim // Proc. IEEE Int. Freq. Contr. Symp., 5-7 June, 1996, Honolulu, USA / Honolulu, 1996. – P. 595-601.

[72] Мостяев, В. А. Технология пьезо- и акустоэлектронных устройств / В. А. Мостяев, В. И. Дюжиков. – М.: Ягуар. 1993. – 279 с.

[73] Iwata, H. Measured resonance characteristics of a 2-GHz fundamental quartz resonator // IEEE Trans. Ultrason. Ferroel. Freq. Contr. – 2004. – V. 51, N 8. – P. 1026-1029.

[74] Nakazawa, M. Frequency-temperature characteristics of quartz crystal flexure bars and quartz crystal tuning forks / M. Nakazawa, Y. Nakamura, S. Miyashita // IEEE Trans. Son. Ultrason. – 1979. – V. 26, N 5. – P. 369-376.

[75] Khan, A. Piezoelectric coupling factor calculations for plates of langatate driven in simple thickness modes by lateral-field-excitation / A. Khan, A. Ballato // IEEE Trans. Ultrason. Ferroel. Freq. Contr. – 2002. – V. 49, N 7. – P. 922-928.

[76] Lau, W.W. Lateral-field-excitation acoustic resonators for monolithic oscillators and filters / W. W. Lau, Y. Song, E. S. Kim // Proc. IEEE Int. Freq. Contr. Symp., 5-7 June, 1996, Honolulu, USA / Honolulu, 1996. – P. 558-552.

[77] Lakin, K.M. Thin film resonator technology // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Contr. - 2005. - V. 52, N 5. - P. 707-716.

[78] Ferre-Pikul, E.S.  $1-f$  frequency noise of 2 GHz high- $Q$  over-moded sapphire resonators / E. S. Ferre-Pikul, M. C. Delgado Aramburo, F. L. Walls, K. M. Lakin // IEEE/EIA Int. Freq. Contr. Symp. and Exhibition. 7-9 June, 2000, Kansas-City, USA / Kansas-City, 2000. – P. 536-540.

[79] Loebel, H.P. Piezoelectric thin AlN films for bulk acoustic wave (BAW) resonators / H. P. Loebel, M. Klee, C. Metzmacher // Materials Chemistry and Physics. 2003. – V. 79, N 1. – P. 143-146.

[80] Caldwell, S.P. High-overtone, Bulk Acoustic resonator frequency stability improvements / S. P. Caldwell, M. M. Driscoll, S. D. Stansberry, D. S. Bailey, H. L. Salvo // Proc. of IEEE Int. Freq. Contr. Symp., 2-4 June, 1993, Salt Lake City, USA / Salt Lake City, 1993. – P. 744-748.

[81] Zhang, H. Electrode effects on frequency spectra and electromechanical coupling factors of HBAR / H. Zhang, Z. Wang, S. Y. Zhang // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Contr. - 2005. - V. 52, N 6. - P. 1020-1025.

[82] Смагин, А. Г. Пьезоэлектричество кварца и кварцевые резонаторы / А. Г. Смагин, М. И. Ярославский – М.: Энергия, 1970. – 488 с.

[83] Смагин, А. Г. Упругие постоянные монокристалла  $\alpha$ -кварца / А. Г. Смагин, Б. Г. Мильштейн // Кристаллогр. – 1974. – Т. 19. – С. 832-836.

[84] Leibfried, G. Zur Temperaturabhängigkeit der elastischen Konstanten von Alkalihalogenidkristallen / G. Leibfried, H. Hahn // Z. Phys. – 1958. – Bd. 150, H. 4. – S. 497-525.

[85] Garber, J. A. Theory of the temperature dependence of second-order elastic constants in cubic materials / J. A. Garber, A. V. Granato // Phys. Rev. B. – 1975. – V. 11, N 10. – P. 3990-3997.

[86] Shrivastava U. C. Theory of the anomalous temperature dependence of  $C_{12}$  in NaCl-like solids // Phys. Stat. Sol. B. – 1980. – V. 100, N 2. – P. 641-649.

[87] Shanker, S. Temperature dependence of elastic constants of alkali halide crystals / S. Shanker, R. K. Varshney // Phys. Stat. Solidi (b) – 1982. – V. 114, N 1. – P. K71-K74.

[88] Сорокин, Б. П. К температурной зависимости упругих постоянных второго порядка кубических кристаллов / Б. П. Сорокин, Д. А. Глушков, К. С. Александров // ФТТ. – 1999. – Т. 41, № 2. – С. 235-240.

[89] Cho, Y. Nonlinear, elastic, piezoelectric, electrostrictive, and dielectric constants of lithium niobate / Y. Cho, K. Yamanouchi // J. Appl. Phys. – 1987. – V. 61, N 3. – P. 875-887.

[90] Kim, Y. S. Thermal expansion of lithium tantalite and lithium niobate single crystals / Y. S. Kim, T. Smith // J. Appl. Phys. – 1969. – V. 40. – P. 4637-4641.

[91] Kushibiki, J. Accurate measurements of the acoustical physical constants of  $\text{LiNbO}_3$  and  $\text{LiTaO}_3$  single crystals / J. Kushibiki, I. Takanaga, M. Arakawa, T. Sannomiya // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. – 1999. – V. 46. – P. 1315-1323.

[92] Nakagawa, Y. Third-order elastic constants of lithium niobate / Y. Nakagawa, K. Yamanouchi, K. Shibayama // J. Appl. Phys. – 1973. - V. 44. - P. 3969-3974.

- [93] Smith, R. T. Temperature dependence of the elastic, piezoelectric, and dielectric constants of lithium tantalite and lithium niobate / R. T. Smith, F. S. Welsh // *J. Appl. Phys.* – 1971. – V. 42, N 6. – P. 2219-2231.
- [94] Bechmann, R. Higher-order temperature coefficients of the elastic stiffnesses and compliances of alpha-quartz / R. Bechmann, A. D. Ballato, T. J. Lukaszek // *Proc. IRE.* – 1962. – V. 50. – P. 1812-1822.
- [95] Stern, R. On the third-order elastic moduli of quartz / R. Stern, R. T. Smith // *J. Acoust. Soc. Am.* – 1968. – V. 44. – P. 640-641.
- [96] Шевелько, М. М. Прецизионные измерения упругих характеристик синтетического пьезокварца / М. М. Шевелько, Л. А. Яковлев // *Акуст. журн.* – 1977. – Т. 23, № 2. – С. 331-332.
- [97] Malocha, D. C. Measurements of LGS, LGN and LGT thermal coefficients of expansion and density / D. C. Malocha, H. Francois-Saint-Cyr, K. Richardson, R. Helmbold // *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control.* – 2002. – V. 49. – P. 350-355.
- [98] Sorokin, B. P. Influence of static electric field, mechanical pressure and temperature on the propagation of acoustic waves in  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$  piezoelectric single crystals / B. P. Sorokin, P. P. Turchin, S. I. Burkov, D. A. Glushkov, K. S. Aleksandrov // *Proc. IEEE Int. Freq. Contr. Symp.*, 5-7 June, 1996, Honolulu, USA / Honolulu, 1996. – P.161-169.
- [99] Сильвестрова, И. М. Температурные зависимости упругих свойств монокристалла  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$  / И. М. Сильвестрова, Ю. В. Писаревский, П. А. Сенющенко, А. И. Крупный. // *ФТТ* – 1986. – Т. 28. – С. 2875-2878.
- [100] Пыяев, А. В. Temperature dependence of electromechanical properties of LGS crystals / A. B. Pyyaev, B. S. Umarov, L. A. Shabanova, M. F. Dubovik // *Phys. Stat. Solidi A.* – 1986. – V. 98. – P. K109-K114.
- [101] Hankey, R. E. Third-order elastic constants of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  / R. E. Hankey, D. E. Schuele // *J. Acoust. Soc. Am.* – 1970. – V. 48. – P. 190-202.
- [102] Wachtman, J. B., Jr. Elastic constants of synthetic single crystal corundum at room temperature / J. B. Wachtman Jr., W. E. Tefft, D. G. Lam, Jr., R. P. Stinchfield // *J. Res. Nat. Bur. Stand.* – 1960. – V. 64A. – P. 213-228.
- [103] Оптические материалы инфракрасной техники / Е. М. Воронкова [и др.]. – М.: Наука, 1965. – 336С.
- [104] Tefft, W.E. Elastic constants of synthetic single crystal corundum // *J. Res. Nat. Bur. Stand.* – 1966. – V. 70A. – P. 277-280.
- [105] Swartz, K. D. Third-order elastic constants of zinc / K. D. Swartz, C. Elbaum // *Phys. Rev. B.* – 1970. – V. 1. – P. 1512-1517.

- [106] Новикова, С. И. Тепловое расширение твердых тел / С. И. Новикова. – М.: Наука, 1974. – 293 С.
- [107] Elastic, piezoelectric, pyroelectric, piezooptic, electrooptic constants, and nonlinear dielectric susceptibilities of crystals // Landolt-Börnstein International Tables. New Series, Group III / Hellwege, K. H. – NY: Springer-Verlag, 1979. – V. 11.
- [108] Alers, G. A. The elastic constants of zinc between 4.2° and 670° K / G. A. Alers, J. R. Neighbours // J. Phys. Chem. Sol. – 1958. – V. 7. – P. 58-64.
- [109] Naimon, E. R. Third-order elastic constants of magnesium. I. Experimental // Phys. Rev. B. – 1971. – V. 4. – P. 4291-4296.
- [110] Eros, S. Low-temperature elastic constants of magnesium alloys / S. Eros, C. S. Smith // Acta Metall. – 1961. – V. 9. – P. 14-22.
- [111] Petrenko, N. S. Thermal expansion of erbium at low temperatures / N. S. Petrenko, V. P. Popov, E. A. Pushkarev, V. A. Finkel // Phys. Stat. Sol. B. – 1975. – V. 68. – P. 145-148.
- [112] Palmer, S. B. The elastic constants of gadolinium, terbium and erbium / S. B. Palmer, E. W. Lee, M. N. Islam // Proc. Royal Soc. Lond. – 1974. – V. 338, N 1614. – P. 341-357.
- [113] Ramji Rao, R. Phonon dispersion relations and thermal expansion of erbium / R. Ramji Rao, C. S. Menon // J. Appl. Phys. – 1973. – V. 44. – P. 3892-3896.
- [114] Rosen, M. Single-crystal elastic constants and magnetoelasticity of erbium from 4.2° to 300° K / M. Rosen, D. Kalir, H. Klimker // Phys. Rev. B. – 1973. – V. 8. – P. 4399-4404.
- [115] Arlt, G. Paratellurite, a new piezoelectric material / G. Arlt, H. Schweppe // Sol. St. Commun. – 1968. – V. 6. – P. 783-784.
- [116] Антоненко, А. М. Упругие постоянные III порядка монокристалла парателлурита / А. М. Антоненко, М. Д. Волнянский, А. Ю. Кудзин // Крист. – 1079. – Т. 24, № 5. – С. 1074-1076.
- [117] Ohmachi, Y. Temperature dependence of elastic, dielectric, and piezoelectric constants in TeO<sub>2</sub> single crystal / Y. Ohmachi, N. Uchida // J. Appl. Phys. – 1970. – V. 41. – P. 2307-2311.
- [118] Schweppe, H. Elastic and piezoelectric properties of paratellurite (TeO<sub>2</sub>) // Ultrason. – 1970. – V. 8. – P. 84-87.
- [119] Коробов, А. И. Модули упругости третьего порядка в кристалле КДР / А. И. Коробов, В. М. Прохоров, О. Ю. Сердобольская, П. Хедуш // Крист. – 1978. – Т. 23, № 3. – С. 566-569.
- [120] Boyer, L. Des constants elastiques du KDP par diffusion Brillouin / L. Boyer, R. Vache Mesure // Phys. Stat. Sol. A. – 1971. – V. 6. – P. 105-108.

- [121] Haussuhl, S. Elastische und thermoelastische Eigenschaften von  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  und  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  // Z. Krist. – 1964. – V. 120. – P. 401-414.
- [122] Чижигов, С. И. Упругие свойства кристаллов KDP и DKDP при высоких температурах / С. И. Чижигов, Н. Г. Сорокин, И. Ю. Ледовская, Е. В. Макаревская // Крист. – 1973. – Т. 18. – С. 860-862.
- [123] Ghate, P.B. FourthOrder elastic coefficients //J. Appl. Phys. - 1964. - V. 35. - P. 337-339.
- [124] White, G. K. The Thermal expansion of alkali halides at low temperatures. II. Sodium, rubidium, and cesium halides / G. K. White, J. G. Collins // Proc. Roy. Soc. A. – 1973. – V. 333. – P. 237-259.
- [125] Thermal expansion of technical solids at low temperature / R. Corrucini, J. Gniewek. – Nat. Bur. Stand., 1961. – V. 29.
- [126] Gerlich, D. Determination of the fourth-order elastic moduli by acoustic harmonic generation in stressed crystals / D. Gerlich, M. A. Breazeale // J. Appl. Phys. – 1990. – V. 67. – P. 3287-3290.
- [127] Wang, H. Ab initio calculation of second-, third-, and fourth-order elastic constants for single crystals / H. Wang, M. Li // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79. – P. 224102.
- [128] Slagle, O. D. Temperature dependence of the elastic constants of the alkali halides. I. NaCl, KCl, and KBr / O. D. Slagle, H. A. McKinstry // J. Appl. Phys. – 1967. – V. 38, N 2. – P. 437-446.
- [129] Mohazzani, P. Temperature dependence of the elastic constants of copper, gold and silver // J. Phys. Chem. Solids. – 1985. – V. 46, N 1. – P. 147-150.
- [130] Lewis, J. T. Elastic constants of the alkali halides at 4.2°K / J. T. Lewis, Lehoczky A., and Briscoe C.V. // Phys. Rev. – 1967. – V. 161, N 3. – P. 877-887.
- [131] Marshall, B. J. Elastic constants of KF from 300 to 4.2 K / B. J. Marshall, R. E. Miller // J. Appl. Phys. – 1967. – V. 38, N 12. – P. 4749-4750.
- [132] Hidshaw, W. Elastic constants of silver chloride from 4.2 to 300 °K / W. Hidshaw, J. T. Lewis, C. V. Briscoe // Phys. Rev. – 1967. – V. 163, N 3. – P. 876-881.
- [133] Enck, F.D. Behavior of the thermal expansion of NaCl at elevated temperatures / F. D. Enck, J. G. Dommel // J. Appl. Phys. – 1965. – V. 36. – P. 839-844.
- [134] Rapp, J. E. Thermal expansion of alkali halides from 70 to 570 K / J. E. Rapp, H. D. Merchant // J. Appl. Phys. – 1973. – V. 44. – P. 3919-3923.
- [135] Deshpande, V.T. Thermal expansion of sodium fluoride and sodium bromide // Acta Cryst. – 1961. – V. 14. – P. 794.

- [136] Yates, B. Thermal expansion of alkali halides at low temperatures / B. Yates, C. H. Panter // Proc. Phys. Soc. – 1962. – V. 30, N 2. – P. 373-382.
- [137] Dutta, B.N. Lattice constants and thermal expansion of AgCl up to 878 °C by X-Ray method / B. N. Dutta, B. Dayal // Phys. Stat. Sol. – 1964. - V. 5. – P. 73-75.
- [138] Nix, F. C. The thermal expansion of pure metals: copper, gold, aluminum, nickel, and iron / F. C. Nix, D. MacNair // Phys. Rev. – 1941. – V. 60. – P. 597-605.
- [139] McSkimin, H. J. Elastic moduli of diamond as a function of pressure and temperature / H. J. McSkimin, P. Andreatch // J. Appl. Phys. – 1972. – V. 43, N 7. – P. 2944-2948.
- [140] McSkimin, H. J. Pulse superposition method for measuring ultrasonic wave velocities in solids // J. Acoust. Soc. Am. – 1961. - V. 33, N 1. – P. 12-16.
- [141] McSkimin, H. J. Ultrasonic measurement techniques applicable to small solid specimens // J. Acoust. Soc. Am. – 1950. – V. 22, N 4. – P. 413-418.
- [142] McSkimin, H. J. Elastic moduli of diamond / H. J. McSkimin, W. L. Bond // Phys. Rev. – 1957. – V. 105, N 1. – P. 116-121.
- [143] McSkimin, H. J. Use of high frequency ultrasound for determining the elastic moduli of small specimens // Proc. Nat. Electron. Conf., 1956, Chicago, USA / Chicago, 1956. – P. 25-43.
- [144] McSkimin, H. J. The elastic stiffness moduli of diamond / H. J. McSkimin, P. Andreatch, Jr., P. Glynn // J. Appl. Phys. – 1971. – V. 43, N 3. – P. 985-987.
- [145] Migliori, A. Diamond's elastic stiffnesses from 322 K to 10 K / A. Migliori, H. Ledbetter, R. G. Leisure, C. Pantea, J. B. Betts // J. Appl. Phys. – 2008. – V. 104. – P. 053512.
- [146] Zouboulis, E. S. Temperature dependence of the elastic moduli of diamond: A Brillouin-scattering study / E. S. Zouboulis, M. Grimsditch, A. K. Ramdas, S. Rodriguez // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 57, N 5. – P. 2889-2896.
- [147] Thurston, R. N. Third-order elastic coefficients of quartz / R. N. Thurston, H. J. McSkimin, P. Andreatch // J. Appl. Phys. – 1966. – V. 37, N 1. – P. 267-275.
- [148] Brugger, K. Determination of third-order elastic coefficients in crystals // J. Appl. Phys. – 1965. - V. 36, № 3(1). – P. 768-773.
- [149] Nielsen, O. H. Optical phonons and elasticity of diamond at megabar stresses // Phys. Rev. B. – 1986. – V. 34. – P. 5808-5819.
- [150] Anastassakis, E. Piezo-Raman measurements and anharmonic parameters in silicon and diamond / E. Anastassakis, A. Cantarero, M. Cardona // Phys. Rev. B. – 1990. – V. 41. – P. 7529-7535.

[151] Grimsditch, M. H. Effect of uniaxial stress on the zero-center optical phonon of diamond / M. H. Grimsditch, E. Anastassakis, M. Cardona // *Phys. Rev. B.* – 1978. – V. 18, N 2. – P. 901-904.

[152] Cousins, C. S. G. Elasticity of carbon allotropes. I. Optimization, and subsequent modification, of an anharmonic Keating model for cubic diamond // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 67. – P. 024107.

[153] Рогов, В.В. Исследование состояние поверхностей деталей из сапфира ( $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) после их финишной обработки / В. В. Рогов, В. Н. Ткач, Н. Д. Рублев, А. В. Троян, В. Н. Попельнюк // *Сверхтв. матер.* – 2008. – Т 2. – С. 67-74.

[154] Бормашов, В.С. Технология изготовления СВЧ пьезоэлектрических преобразователей на основе пленки AlN, нанесенной на подложку из синтетического монокристалла алмаза / В. С. Бормашов, А. П. Волков, А. В. Голованов, Г. И. Гордеев, Г. М. Квашнин, Б. П. Сорокин Б.П., А. В. Теличко // *Изв. ВУЗов. Хим. и хим. техн.* - 2014. - Т. 57, № 5. - С. 17-21.

[155] Сорокин, Б.П. Исследования многочастотных СВЧ акустических резонаторов на основе слоистой пьезоэлектрической структуры «Me1/AlN/Me2/(100) алмаз» / Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, А. В. Теличко, Г. И. Гордеев, С. И. Бурков, В. Д. Бланк // *Акуст. журн.* – 2015. – Т. 61, № 3. – С. 1-13.

[156] Kaitila, J. Spurious resonance free bulk acoustic wave resonators / J. Kaitila, M. Ylilammi, J. Ella, R. Aigner // *Proc. IEEE Int. Ultrason. Symp*, 5-8 October, 2003, Honolulu, USA / Honolulu, 2003 – P. 84-87.

[157] Branch, D. W. Elucidating the origin of spurious modes in a aluminium nitride microresonators using a 2-D finite element model / D. W. Branch, K. E. Wojciechowski, R. H. Olsson // *IEEE Trans. Ultrason. Ferr. Freq. Contr.* – 2014. – V. 61, N 5. – P. 729-738.

[158] Смагин, А.Г. Явление поглощения звука в поверхностном слое кристалла // *Вопр. радиоэл.* – 1964. – Т. 11. – С. 65-69.

[159] Mansfeld, G. Bulk acoustic wave attenuation in langasite / G. Mansfeld, S. Alekseev, I. Kotelyansky // *Proc. IEEE Int. Freq. Cont. Symp.*, 5-8 June, 2001, Seattle, USA / Seattle, 2001. – P. 268-271.

[160] Sveshnikov, B. On universal modeling of the bulk acoustic wave devices, in: *Modeling and measurement methods for acoustic waves and for acoustic microdevices* / M. G. Beghi. – InTech, 2013. – 621 P.

[161] Pandey, D. K. Temperature dependent ultrasonic properties of aluminium nitride / D. K. Pandey, R. R. Yadav // *Appl. Acoust.* – 2009. – V. 70. – P. 412-415.

[162] Гуляев, Ю.В. Резонаторы и фильтры сверхвысоких частот на объемных акустических волнах: современное состояние и тенденции развития / Ю. В. Гуляев, Г. Д. Мансфельд // Радиотехн. – 2003. – Т. 8. – С. 42-54.

[163] Сорокин, Б.П. Исследования СВЧ акустического затухания в многочастотном резонаторе на объемных акустических волнах на основе синтетического монокристалла алмаза / Б. П. Сорокин, А. В. Теличко, Г. М. Квашнин, В. С. Бормашов, В. Д. Бланк // Акуст. журн. – 2015. – Т. 61, № 5. – С. 1-13.

[164] Acoustic fields and waves in solids. In 2 V. / В. А. Auld. - N.Y.: John Wiley, 1973. II v.

[165] Fitzgerald, T. M. Ultrasonic attenuation in  $Al_2O_3$  at ultrahigh frequencies and low temperatures / T. M. Fitzgerald, B. D. Silverman // Phys. Lett. A. – 1967. – V. 25, N 3. – P. 245-247.

[166] Landolt-Börnstein. Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik. Neue Series: Bd. 3. Ferro- und antiferroelektrische Substanzen. – Berlin: Springer, 1990. – 833 S.

[167] Wen, G.P. Acoustic attenuation of a single domain lithium niobate crystal at microwave frequencies / G. P. Wen, R. F. Mayo // Appl. Phys. Lett. – 1966. – V. 9. – P. 135-136.

[168] Anthony, T. R. Thermal diffusivity of isotopically enriched  $^{12}C$  diamond / T. R. Anthony, W. F. Banholzer, J. F. Fleischer, Wei Lanhua, P. K. Kuo, R. L. Thomas, R. W. Pryor // Phys. Rev. B – 1990. – V. 41, N 2. – P. 1104-1111.

[169] Hakovirta, M. Heat capacity of hydrogenated diamond-like carbon films / M. Hakovirta, J. E. Vuorinen, M. Nastasi, R. B. Schwarz // Appl. Phys. Lett. – 2000. – V. 77, N 15. – P. 2340-2342.

[170] Илисавский, Ю. В. Решеточное поглощение высокочастотного звука в кремнии / Ю. В. Илисавский, В. М. Стернин // ФТТ. – 1985. – Т. 27, № 2. – С. 385-391.

## Приложения

### А. Симметрия тензорных коэффициентов кристаллов кубической симметрии

Кубические кристаллы, точечная группа  $m\bar{3}m$

УП2П – симметрия тензора  $[[V^2]^2]$  [20]:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix}.$$

Выписаны коэффициенты  $C_{\lambda\mu}$  в матричной форме записи, связанные с тензорными компонентами  $C_{ijkl}$  правилами пересчета:

$$C_{\lambda\mu} = C_{ijkl} (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6).$$

Матрица упругих податливостей, симметрия тензора  $[[V^2]^2]$  [20]:

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & S_{44} & 0 & 0 \\ & & & & S_{44} & 0 \\ & & & & & S_{44} \end{pmatrix}.$$

Выписаны коэффициенты  $S_{\lambda\mu}$ , связанные с тензорными компонентами  $S_{ijkl}$  правилами пересчета:

$$S_{\lambda\mu} = \begin{cases} S_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3); \\ 2S_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6); \\ 2S_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3); \\ 4S_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6). \end{cases}$$

Упругие постоянные 3-го порядка для кубических кристаллов имеют 6 независимых ненулевых компонент, симметрия тензора  $[[V^2]^3]$  [20]:

$$\begin{aligned} C_{111} &= C_{222} = C_{333}, \\ C_{112} &= C_{113} = C_{122} = C_{133} = C_{223} = C_{233}, \\ C_{123}, \\ C_{144} &= C_{255} = C_{366}, \\ C_{155} &= C_{166} = C_{244} = C_{266} = C_{344} = C_{355}, \\ C_{456}. \end{aligned}$$

Выписаны коэффициенты  $C_{\lambda\mu\nu}$ , связанные с компонентами  $C_{ijklmn}$  правилами пересчета:

$$C_{\lambda\mu\nu} = C_{ijklmn} (ij \leftrightarrow \lambda, kl \leftrightarrow \mu, mn \leftrightarrow \nu; \lambda, \mu, \nu = 1, \dots, 6).$$

Упругие постоянные 4-го порядка кубических кристаллов имеют симметрию  $[[V^2]^4]$ , [123]:

$$C_{1111} = C_{2222} = C_{3333},$$

$$C_{1112} = C_{1113} = C_{1222} = C_{1333} = C_{2223} = C_{2333},$$

$$C_{1122} = C_{2233} = C_{3311},$$

$$C_{1123} = C_{1223} = C_{1233},$$

$$C_{1144} = C_{2255} = C_{3366},$$

$$C_{1155} = C_{2266} = C_{3344} = C_{1166} = C_{2244} = C_{3355},$$

$$C_{1255} = C_{2366} = C_{1344} = C_{1366} = C_{2355} = C_{1244},$$

$$C_{1266} = C_{2344} = C_{1355},$$

$$C_{1456} = C_{2456} = C_{3456},$$

$$C_{4444} = C_{5555} = C_{6666},$$

$$C_{4455} = C_{5566} = C_{4466}.$$

Б. Коэффициенты управления ОАВ для кристаллов кубической симметрии под действием механического напряжения

№	$N$	$U$	$M$	$\lambda^0 = \rho v^2$	$\alpha_{v_i} = \frac{1}{v_i(0)} \left( \frac{\Delta v_i}{\Delta \bar{\tau}} \right)_{\Delta \bar{\tau} \rightarrow 0}$
1	[100]	L [100]	[100]	$C_{11}$	$\frac{1}{2\lambda_1^0} \{1 + A[C_{11}(2C_{11} + 2C_{12} + C_{111}) + C_{12}(C_{111} - 2C_{112})]\}$
2		S		$C_{44}$	$\frac{1}{2\lambda_2^0} \{1 + A[C_{11}C_{155} - C_{12}(2C_{44} + C_{144})]\}$
3		S		$C_{44}$	$\frac{1}{2\lambda_3^0} \{1 + A[C_{11}C_{155} - C_{12}(2C_{44} + C_{144})]\}$
4		L [100]	[010]	$C_{11}$	$\frac{A}{2\lambda_4^0} [C_{11}C_{112} - C_{12}(2C_{11} + C_{111})]$
5		S <sub>1</sub> [010]		$C_{44}$	$\frac{A}{2\lambda_5^0} [C_{11}(2C_{44} + C_{155}) + C_{12}(2C_{44} - C_{144})]$
6		S <sub>2</sub> [001]		$C_{44}$	$\frac{A}{2\lambda_6^0} [C_{11}C_{144} - C_{12}(2C_{44} - C_{144} + 2C_{155})]$
7		L [100]		$C_{11}$	$\frac{A}{2\lambda_7^0} [C_{11}C_{112} - C_{12}(2C_{11} + C_{111})]$
8		S <sub>1</sub> [010]	[001]	$C_{44}$	$\frac{A}{2\lambda_8^0} [C_{11}C_{144} - C_{12}(2C_{44} - C_{144} + 2C_{155})]$
9		S <sub>2</sub> [001]		$C_{44}$	$\frac{A}{2\lambda_9^0} [C_{11}(2C_{44} + C_{155}) + C_{12}(2C_{44} - C_{144})]$
10		L [100]		[01 $\bar{1}$ ]	$C_{11}$

12	[100]	$S_2$ [01 $\bar{1}$ ]	[01 $\bar{1}$ ]	$C_{44}$	$\frac{1}{4\lambda_{12}^0} \left\{ 2 + A[C_{11}(2C_{44} + C_{144} + C_{155}) - 2C_{12}C_{155}] + 2\frac{C_{456}}{C_{44}} \right\}$
13	[110]	S [001]	[110]	$C_{44}$	$\frac{A}{2\lambda_{13}^0} [C_{11}(C_{44} + C_{155}) - 2C_{12}(C_{44} + C_{155})]$
14		S [001]		$C_{44}$	$\frac{A}{2\lambda_{14}^0} [C_{11}(C_{44} + C_{155}) - 2C_{12}(C_{44} + C_{155})]$
15		L [110]	[1 $\bar{1}0$ ]	$\frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})$	$\frac{A}{8\lambda_{15}^0} \left[ 2 \left( 2C_{11}A - \frac{1}{AC_{44}} \right) \lambda_{15}^0 + C_{11}C_{111} + (3C_{11} - 2C_{11})C_{112} + 4 \left( C_{11} - \frac{1}{AC_{44}} \right) C_{155} - 4C_{12}C_{144} - 2C_{12}C_{123} \right]$
16		S [1 $\bar{1}0$ ]		$\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$	$\frac{A}{8\lambda_{16}^0} \left[ \left( 2C_{11} + \frac{1}{AC_{44}} \right) 2\lambda_{16}^0 + C_{11}C_{111} - (C_{11} + 2C_{11})C_{112} + \frac{2}{AC_{44}}C_{123} \right]$
17		L [110]	[001]	$\frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})$	$\frac{A}{4\lambda_{17}^0} [(C_{11} + C_{12})(C_{112} + C_{123} + 2C_{144}) - C_{12}(2C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} + C_{111} + 3C_{112} + 4C_{155})]$
18		S [1 $\bar{1}0$ ]		$\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$	$\frac{A}{4\lambda_{18}^0} [(C_{11} + C_{12})(C_{112} - C_{123}) - C_{12}(2C_{11} - 2C_{12} + C_{111} - C_{112})]$
19		S [001]		$C_{44}$	$\frac{A}{2\lambda_{19}^0} [C_{11}(2C_{44} + C_{155}) + C_{12}(2C_{44} - C_{144})]$
20	[111]	S	[111]	$\frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$	$\frac{1}{18\lambda_{20}^0} \left[ 8 + \frac{1}{C_{11} + C_{12}} (6\lambda^0 + C_{111} - C_{123} + C_{144} + 2C_{155}) + \frac{1}{C_{44}} (-C_{11} + C_{12} - 2C_{144} + C_{155} - C_{456}) \right]$
21		S		$\frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$	$\frac{1}{18\lambda_{21}^0} \left[ 8 + \frac{1}{C_{11} + C_{12}} (6\lambda^0 + C_{111} - C_{123} + C_{144} + 2C_{155}) + \frac{1}{C_{44}} (-C_{11} + C_{12} - 2C_{144} + C_{155} - C_{456}) \right]$
22		L [111]		$\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$	$\frac{1}{18\lambda_{22}^0} \left[ 17 + \frac{1}{C_{11} + C_{12}} (6\lambda^0 + C_{111} + 6C_{112} + 6C_{123} + 4C_{144} + 8C_{155}) + \frac{1}{C_{44}} (2C_{11} + 4C_{12} + 4C_{144} + 8C_{155} + 8C_{456}) \right]$

$N$  - направление распространения,  $U$  - поляризация,  $M$  - направление давления  $A = \frac{1}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$