

# LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub> 晶体弹性与压电性能的研究

王 越<sup>1</sup>, 蒋毅坚<sup>2</sup>

(1. 北京工业大学 应用数理学院, 北京 100022; 2. 北京工业大学 激光工程学院, 北京 100022)

**摘 要:** 计算并绘制了 LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub> (简称 LBO) 晶体在 (100)、(010)、(001) 3 个主晶面内慢度分布曲线, 得到了声速的最大值及其方向. 探讨了 LBO 晶体纵向压电系数  $d_{33}$  及机电耦合系数  $k_{33}$  随空间方向变化的规律, 分别得到了 LBO 晶体压电系数  $d_{33}$  及机电耦合系数  $k_{33}$  的最大值及其方向, 并与 Li<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub> 进行了比较. 结果表明, LBO 晶体有作为声光器件和压电器件的潜力, 并对相关器件的设计、开发及利用等方面有一定的理论指导作用.

**关键词:** 三硼酸锂晶体; 慢度; 克里斯托夫方程; 压电系数; 机电耦合系数

**中图分类号:** TM 22

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0254-0037(2002)02-0216-04

LBO 晶体是我国福建物质结构研究所近期自行研制的一种新型非线性光学晶体材料, 常温下属正交晶系的 mm2 点群<sup>[1]</sup>. 它具有非常突出的优点, 如非线性光学系数大、损伤阈值高、相位匹配角大和透光范围宽等优点. 为了更好地对 LBO 晶体及硼酸盐系列材料进行深入的研究, 国内外许多学者对该材料的微观机理和宏观物性进行了研究. 在微观机理方面, 已经通过 X 射线衍射实验测得了 LBO 晶体空间结构<sup>[2]</sup>, 并对该晶体进行了红外反射谱实验以及常温、变温和高压下的喇曼散射实验<sup>[3-5]</sup>, 提出了该晶体的优良光学特性可能来自于其内部的 (B<sub>3</sub>O<sub>6</sub>)<sup>3-</sup> 环和 BO<sub>3</sub> 四面体结构; 另外, 还有人对其的电子结构进行了研究<sup>[6]</sup>. 在宏观物性方面, 该晶体的非线性光学系数<sup>[1]</sup>、弹性及压电系数<sup>[7]</sup>、折射率等<sup>[2]</sup>均已测得, 然而它的弹性及压电性能在空间上的分布规律尚未详细了解, 这对考虑制作该晶体材料的声光和压电器件方面有十分重要的意义. 本文在文献 [7] 的基础上, 对 LBO 晶体的弹性及压电性能在空间上的分布规律进行了详细的研究.

## 1 LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub> 的晶体结构

LBO 晶体属于正交晶系, 晶胞参数为  $a = 0.8146(2)$ ,  $b = 0.7380(2)$ ,  $c = 0.5147(2)$ , 空间群为 Pna2<sub>1</sub>. 图 1 为 LBO 晶体在 3 个主晶面上的投影. 该晶体的密度为 3 570 kg/m<sup>3</sup><sup>[2]</sup>. 文献 [7] 利用布里渊散射及超声共振的方法, 测量了 LBO 晶体的全部弹性及压电系数; 文献 [5] 利用喇曼散射计算出了 LBO 晶体的静态介电系数.

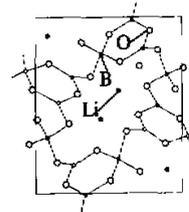


图1 LBO晶体空间结构在(001)平面上的投影

表1 LBO晶体的弹性劲度系数

									10 <sup>10</sup> N·m <sup>-2</sup>
$c_{11}^E$	$c_{12}^E$	$c_{13}^E$	$c_{22}^E$	$c_{23}^E$	$c_{33}^E$	$c_{44}^E$	$c_{55}^E$	$c_{66}^E$	
10.92	7.48	1.04	16.22	0.98	10.23	7.10	8.66	3.60	

表2 LBO晶体的弹性顺服系数

									10 <sup>-12</sup> m <sup>2</sup> ·N <sup>-1</sup>
$s_{11}^E$	$s_{12}^E$	$s_{13}^E$	$s_{22}^E$	$s_{23}^E$	$s_{33}^E$	$s_{44}^E$	$s_{55}^E$	$s_{66}^E$	
13.44	-6.15	-0.77	9.02	-0.23	9.79	14.08	11.54	27.78	

收稿日期: 2001-07-19.

作者简介: 王越(1966-), 男, 副教授, 在职博士生; 蒋毅坚(1962-), 男, 教授, 博士生导师.

表3 LBO晶体的压电系数及介电系数

$e_{15}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	$e_{24}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	$e_{31}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	$e_{32}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	$e_{33}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$
0.52	0.87	0.63	0.76	1.04
$d_{15}/(\text{pC}\cdot\text{N}^{-1})$	$d_{24}/(\text{pC}\cdot\text{N}^{-1})$	$d_{31}/(\text{pC}\cdot\text{N}^{-1})$	$d_{32}/(\text{pC}\cdot\text{N}^{-1})$	$d_{33}/(\text{pC}\cdot\text{N}^{-1})$
6.00	12.25	2.99	2.73	9.51
$\epsilon_{11}$	$\epsilon_{22}$	$\epsilon_{33}$		
4.56	5.05	4.41		

## 2 LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub> 晶体声传播特性的研究 [8,9]

### 2.1 理论依据

克里斯托夫方程可以写成下列形式:

$$[\mathbf{K}^2\Gamma_{ij} - \rho\omega^2\delta_{ij}][u_j] = 0 \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1)$$

其中:  $\mathbf{K}$  是波矢;  $\rho$  是晶体的密度;  $\omega$  是声波频率;  $u_j$  是质点位移.  $l = l_1i + l_2j + l_3k$  是波矢的单位矢, 系数为

$$\Gamma_{11} = c_{11}l_1^2 + c_{66}l_2^2 + c_{55}l_3^2 + 2c_{36}l_2l_3 + 2c_{15}l_3l_1 + 2c_{16}l_1l_2$$

$$\Gamma_{22} = c_{66}l_1^2 + c_{22}l_2^2 + c_{44}l_3^2 + 2c_{24}l_2l_3 + 2c_{46}l_3l_1 + 2c_{26}l_1l_2$$

$$\Gamma_{33} = c_{55}l_1^2 + c_{44}l_2^2 + c_{33}l_3^2 + 2c_{34}l_2l_3 + 2c_{35}l_3l_1 + 2c_{45}l_1l_2$$

$$\Gamma_{21} = c_{16}l_1^2 + c_{26}l_2^2 + c_{45}l_3^2 + (c_{66} + c_{25})l_2l_3 + (c_{14} + c_{56})l_3l_1 + (c_{12} + c_{66})l_1l_2$$

$$\Gamma_{31} = c_{15}l_1^2 + c_{46}l_2^2 + c_{35}l_3^2 + (c_{45} + c_{36})l_2l_3 + (c_{13} + c_{55})l_3l_1 + (c_{14} + c_{56})l_1l_2$$

$$\Gamma_{32} = c_{36}l_1^2 + c_{24}l_2^2 + c_{34}l_3^2 + (c_{44} + c_{23})l_2l_3 + (c_{36} + c_{45})l_3l_1 + (c_{25} + c_{46})l_1l_2$$

其中,  $c_{KL} = c_{KL}^E + \{ [(e_{jK}l_j)(l_i e_{iL})] / l_i e_{ij}^S l_j \} = c_{KL}^E \{ 1 + [(e_{jK}l_j)(l_i e_{iL}) / c_{KL}^E (l_i e_{ij}^S l_j)] \}$  ( $K, L = 1, 2, \dots, 6; i, j = 1, 2, 3$ ) 称为压电增劲弹性系数.

由线性代数可知, 方程组存在非零解的条件是它的特征行列式等于 0, 这样我们就可以得到该晶体慢度分布曲面. 通过慢度  $1/v = K/\omega$  曲面可以方便地得到波的能量传播方向及晶体的纯模方向.

### 2.2 结果与讨论

作者利用克里斯托夫方程绘制了在 (100)、(010) 和 (001) 3 个主晶面内 LBO 晶体的慢度曲线, 见图 2; 同时, 还计算了这 3 个主晶面内不同振动模式的声速的最大值  $v_{\max}$  及其方向 (见表 4). 经比较, LBO 晶体的声速普遍大于硼酸盐系列中另一著名声光晶体 Li<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub> 的声速 [10].

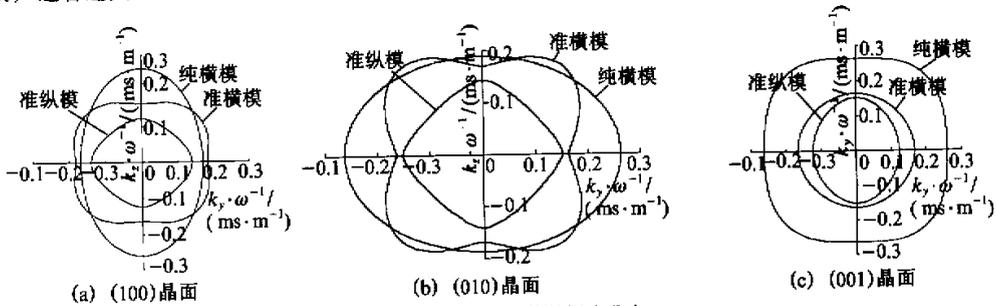


图2 LBO晶体的慢度分布

表4 在LBO晶体3个主晶面内  $v_{\max}$  及其方向

振动模式	(100)晶面		(010)晶面		(001)晶面	
	$v_{\max}/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	与y轴夹角/ $^\circ$	$v_{\max}/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	与x轴夹角/ $^\circ$	$v_{\max}/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	与x轴夹角/ $^\circ$
准纵模	8 911.5	42	8 451.1	38	8 103.6	90
准横模	6 142.2	0	6 164.5	90	3 817.7	0.90
纯横模	5 291.0	0	5 361.4	0	6 164.5	0

### 3 LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub> 晶体压电特性的研究<sup>[8,9]</sup>

#### 3.1 理论依据

##### 3.1.1 坐标系的选取

由于 LBO 晶体属于 mm2 点群, 有两种对称操作: 一个 2 度转轴和两个相垂直的镜面. 本文采用物理学坐标系, 取 z 轴平行于 2 度轴, x 轴平行于一个镜面, y 轴由右手螺旋法则确定, 构成直角坐标系. 3.1.2 坐标变换的方法

首先将坐标系 xyz 按右手法则绕 z 轴旋转 φ, 此时, 坐标系变换成为 x'y'z' (z' // z); 然后, 再将 x'y'z' 按右手法则绕 x' 轴旋转 θ; 最后, 坐标系变换成为 x''y''z'' (x'' // x'). 通过这种坐标变换的方法, 就可以得到 LBO 晶体有关物理量随空间变化的规律.

设  $A = [a_{ij}] (i, j = 1, 2, 3)$  是坐标变换矩阵, 根据矩阵坐标变换公式<sup>[4]</sup>可得到介电系数、压电系数和弹性顺服系数的矩阵变换公式分别为

$$\epsilon' = A\epsilon A^T; \quad d' = AdA^T; \quad s' = NsN^T \tag{2}$$

其中 N 为应变张量的变换矩阵.

$$N = \begin{bmatrix} a_{11}^2 & a_{12}^2 & a_{13}^2 & a_{12}a_{13} & a_{13}a_{11} & a_{11}a_{12} \\ a_{21}^2 & a_{22}^2 & a_{23}^2 & a_{22}a_{23} & a_{23}a_{21} & a_{21}a_{22} \\ a_{31}^2 & a_{32}^2 & a_{33}^2 & a_{12}a_{31} & a_{33}a_{31} & a_{31}a_{32} \\ 2a_{21}a_{31} & 2a_{12}a_{32} & 2a_{23}a_{33} & a_{22}a_{33} + a_{32}a_{23} & a_{23}a_{31} + a_{33}a_{21} & a_{21}a_{32} + a_{31}a_{22} \\ 2a_{31}a_{11} & 2a_{32}a_{12} & 2a_{33}a_{13} & a_{32}a_{13} + a_{12}a_{33} & a_{33}a_{11} + a_{13}a_{31} & a_{31}a_{12} + a_{11}a_{32} \\ 2a_{11}a_{21} & 2a_{12}a_{22} & 2a_{13}a_{23} & a_{12}a_{23} + a_{22}a_{13} & a_{13}a_{21} + a_{23}a_{11} & a_{11}a_{22} + a_{21}a_{12} \end{bmatrix} \tag{3}$$

其中  $a_{ij} (i, j = 1, 2, 3)$  为坐标变换矩阵元.

机电耦合系数矩阵变换公式为

$$k'_{ij} = d'_{ij} / \sqrt{\epsilon'_{ii} s'_{jj}} \tag{4}$$

依据式 (2) ~ (4), 就可以研究 LBO 晶体的弹性及压电性能了.

#### 3.2 结果与讨论

本文用计算机对 LBO 晶体的压电系数  $d_{33}$  以及机电耦合系数  $k_{33}$  的绝对值在空间上的分布进行了计算, 见图 3.4.

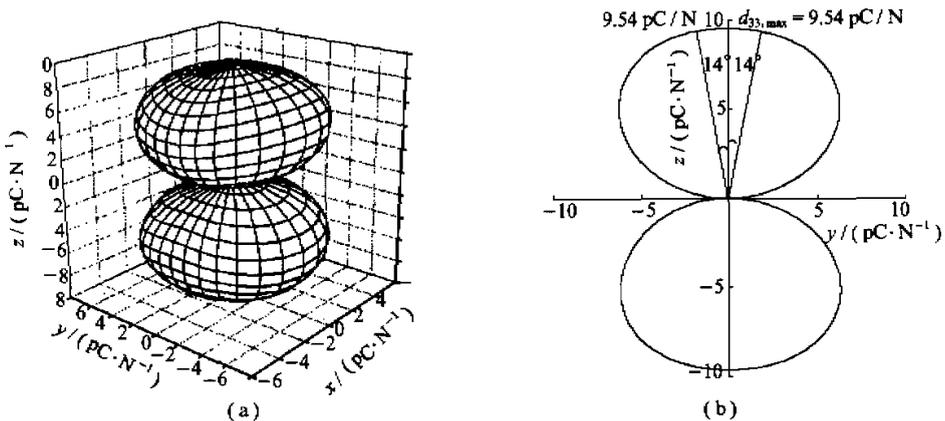


图3 纵向压电系数  $d_{33}$  在空间(a)及  $yox$  面上(b)的分布

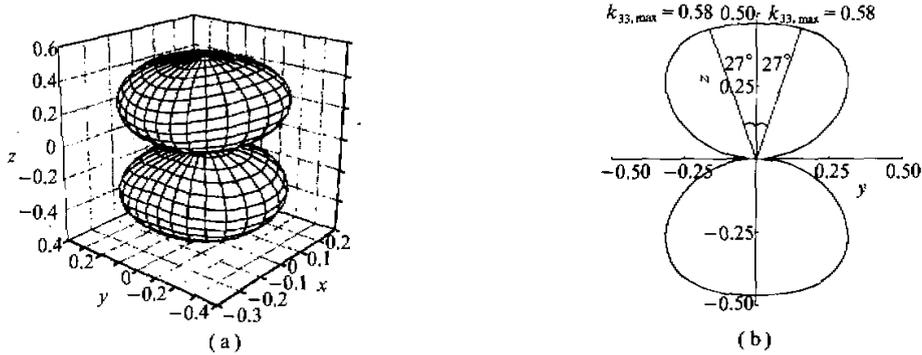


图6 纵向机电耦合系数 $k_{33}$ 在空间(a)及 $yoz$ 面上(b)的分布

由图3(a)和图4(a)可见,属于 $mm2$ 点群的LBO晶体具有镜面及2度轴的对称性.纵向压电系数 $d_{33}$ 和机电耦合系数 $k_{33}$ 在 $yoz$ 面上的投影的最大值分别为: $d_{33,\max} = 9.54 \text{ pC/N}$ ,向左偏离 $z$ 轴 $14^\circ$ ;  $k_{33,\max} = 0.58$ ,向左偏离 $z$ 轴 $27^\circ$ .相对平行于 $z$ 轴的 $d_{33} = 9.51 \text{ pC/N}$ 及 $k_{33} = 0.49$ 的变化较小.

#### 4 结束语

对LBO晶体在3个主晶面内声传播特性、弹性及压电性能随空间方向变化的规律进行了研究,并与 $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ 晶体进行了比较<sup>[10]</sup>.LBO晶体的声速普遍大于 $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ 的数值,而LBO晶体压电及机电耦合系数的数值与 $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ 的比较接近.结果表明LBO晶体也是一种具有潜力的声光和压电材料.

#### 参考文献:

- [1] CHEN C, WU Y, JIANG A, et al. New nonlinear-optical crystal:  $\text{LiB}_3\text{O}_5$ [J]. J Opt Soc Am, 1989, B6, 616-622.
- [2] 赵书清, 张红武, 黄朝恩, 等. 非线性光学新晶体三硼酸锂的生长、结构及性能[J]. 人工晶体学报, 1989, 18(1): 9-17.
- [3] HYANG J Y, SHEN Y R, CHEN C, et al. Infrared and Raman spectra of lithium triborate: vibrational assignments and a correlation with its nonlinear optical activity[J]. Appl Phys Lett, 1991, 58: 1579-1584.
- [4] XIONG G, LAN G, WANG H. Reflectance and raman spectra of lithium single crystal[J]. J Raman Spec, 1993, 24: 785-789.
- [5] JIANG Yi-jian, WANG Yue, ZENG Ling-zhi. Analysis of Raman spectra of  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  single crystals[J]. J Raman Spec, 1996, 27: 601-607.
- [6] XU Y N, CHING W Y. Electronic structure and properties of  $\text{LiB}_3\text{O}_5$ [J]. Phys Rev, 1990, B41: 5471-5474.
- [7] WANG Y, JIANG Y J, LIU Y L, et al. The elastic and piezoelectric properties of a lithium triborate single crystal[J]. Appl Phys Lett, 1996, 67(17): 462-464.
- [8] 陈纲, 廖理儿. 晶体物理学基础[J]. 北京: 科学出版社, 1992. 1-251.
- [9] AULD B A. Acoustic Fields and Waves in Solids[M]. New York: Wiley, 1973. 200-203.
- [10] 易明, 廖理儿. 用布里渊散射法测量  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  单晶弹性系数和压电系数[J]. 北京工业大学学报, 1992, 18(1): 23-29.

- [21] MA W. Travelling wave solutions to a seventh order generalized KdV equation[J]. Phys Lett, 1993, A180: 221-224.
- [22] ZHU Z. Solitary wave solutions to the  $2n+1$  order KdV-type equations[J]. Acta Phys Sin, 1996, 45:1777-1781.
- [23] DUFFY B R, PARKES E J. Travelling solitary waves solutions to a seventh-order generalized KdV equation[J]. Phys Lett, 1996, A214: 271-272.
- [24] KARPMAN V I. Radiating solitons of the fifth order KdV-type equations[J]. Phys Lett, 1996, A210: 77-84.

## 广义 KdV 方程的精确行波解

胡 建 兰

(北京工业大学 应用数理学院, 北京 100022)

**摘 要:** 采用两步假设法, 得到非线性物理模型中的 KdV 型方程的精确行波解。如广义奇数阶(五阶、七阶) KdV 方程和广义 KdV-Burgers 方程。

**关键词:** 行波解; 非线性物理模型; 两步假设法

**中图分类号:** O 175

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0254-0037(2002)02-0233-06

上接第219页

## Study on the Elastic and Piezoelectric Properties of LBO Crystal

WANG Yue<sup>1</sup>, JIANG Yi-jian<sup>2</sup>

(1. College of Applied Sciences, Beijing Polytechnic University, Beijing, 100022, China;

2. College of Laser Engineering, Beijing Polytechnic University, Beijing, 100022, China)

**Abstract:** The slowness distribution curves in (100), (010) and (001) for  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  have been plotted. The maximum of acoustic velocities and their directions have also been gained, and they are made comparison with that of  $\text{LiB}_5\text{O}_7$ . Crystal orientation dependence of piezoelectric modulus  $d_{33}$  and electromechanical coupling coefficient  $k_{33}$  have been calculated phenomenologically. The maximum values of piezoelectric modulus  $d_{33}$  and electromechanical coefficient  $k_{33}$  are obtained, and the orientations are also determined. It is found that the values of piezoelectric modulus and electromechanical coefficient for LBO are similar to those of  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  and the velocities of acoustic wave are larger than those of  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ . These results will give certain directions for the application of  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  to the devices of piezoelectricity and acoustic-optics.

**Key words:**  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  crystal; slowness; christoffel equation; piezoelectric modulus; electromechanical coupling coefficient