

## ZnO/Diamond/Si 结构中声表面波传播特性分析\*

周振凯 韦利明<sup>†</sup> 丰杰

(中国工程物理研究院总体工程研究所, 绵阳 621900)

(2012年11月10日收到; 2012年12月11日收到修改稿)

基于递归刚度矩阵方法, 建立了多层结构声表面波表面有效介电常数模型, 计算出了 ZnO/Si 结构声表面波的相速度频散特性, 与实验结果符合较好, 表明本文所建模型的准确性和有效性. 进一步计算得到了三层结构 (ZnO/Diamond/Si) 声表面波的相速度和机电耦合系数的频散规律, 获得此结构最优的高波速和高机电耦合系数组合及达到最优组合所需控制的变量, 为高频高性能声表面波器件设计和优化提供了有益参考.

**关键词:** 声表面波, 多层结构, 递归刚度矩阵, 表面有效介电常数

**PACS:** 46.40.-f, 46.40.Cd

**DOI:** 10.7498/aps.62.104601

## 1 引言

声表面波 (surface acoustic wave, SAW) 器件是一种信号处理的微机械电子系统, 被广泛应用于现代无线通信系统及传感器等领域<sup>[1]</sup>. 近年来, 一些无线通信的应用领域, 如个人通信服务 (手机、全球范围通信)、无线局域网、卫星通信、光纤通信等的迅速发展对 SAW 器件性能提出更高要求, 优良的 SAW 器件需同时具备高工作频率和高机电耦合系数等特性<sup>[2,3]</sup>. 有两种方法可提高 SAW 器件的工作频率: 1) 缩小叉指换能器 (inter digital transducer, IDT) 的指条宽度; 2) 增大器件的 SAW 传播速度. 第一种方法会降低 SAW 器件的可靠性和稳定性, 扩大工艺难度, 并受光刻极限的限制, 大规模应用不现实且作用效果有限, 因而获得高频的途径只能是通过增大 SAW 的波速来实现. 通过在高声速基底材料表面上沉积一层或多层压电薄膜所组成的多层 SAW 结构, 可同时提高 SAW 的波速及机电耦合系数, 且多层结构中的 SAW 易和光及半导体中的载流子相互作用, 利用该特性可以制成各种新型的压电与声光集成器件. 同时, 通过选用不同特性的材料组成多层结构以充分利用其各自

的优点, 可增强和拓展 SAW 器件功能、提高其运行稳定性及工作环境适应能力. 因而, 多层 SAW 结构是高频高性能 SAW 器件发展的必然趋势.

掌握 SAW 在多层结构中的传播规律是分析和设计多层 SAW 结构器件的基础. 然而, 多层 SAW 结构中各层材料特性的差异及界面条件的多元化使得 SAW 在多层结构中传播较为复杂, 不仅存在多种传播模式, 且相速随器件中心频率变化, 同时对每一层厚度、表面和界面金属化情况都十分敏感<sup>[4]</sup>. 因此, 研究多层结构 SAW 传播特性及其影响机理对分析和设计高频高性能的 SAW 器件具有重要的意义.

近几十年, 多层结构 SAW 传播特性的分析及计算引起了国内外广泛关注. 早期的计算方法主要是 Campbell 和 Jones 法<sup>[5-7]</sup>, 通过求解每层边界条件下的耦合波动方程声波解来获取 SAW 的波速, 适合分析三层以下的 SAW 结构, 但对多层和界面金属化较复杂的结构, 计算成本巨大. Adler<sup>[8]</sup> 1994 年提出应用矩阵法来计算多层结构中 SAW 传播特性, 与传统方法相比, Adler 矩阵法虽本质上没区别, 但计算量大为减小, 且易编程实现. 2002 年, Wu 等<sup>[9]</sup> 在 Adler 矩阵法的基础上推导出有效介电常数模型, 通过计算表面的有效介电常数来分析多

\* 中国工程物理研究院科学基金 (批准号: 2010A0302013) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: chongdazzk@163.com

层结构 SAW 传播特性. Wang 和 Rokhlin<sup>[10-12]</sup> 提出顺度/刚度矩阵 (compliance/stiffness matrix) 模型, 其方法称为递归刚度矩阵 (recursive stiffness matrix, RSM) 法, 该方法为矩阵法的改进形式, 能够获得比矩阵法更为稳定的有效介电常数.

金刚石 (diamond) 是所有物质中声波传播速度最快的材料, 是作为高频 SAW 器件基底最理想的材料, 但由于其没有压电性, 必须添加一层具有压电效应的薄膜, 而 ZnO 薄膜在所有压电薄膜中以其机电耦合系数高、稳定性好等优点而被广泛运用<sup>[13,14]</sup>, 因而 ZnO/Diamond/Si 多层声表面波结构一直以来都是研究和应用的热点. 本文借鉴 RSM 方法对 ZnO/Diamond/Si 结构中 SAW 的传播特性进行了系统分析, 获得了 ZnO/Diamond/Si 多层结构 SAW 的频散特性, 旨在为设计 ZnO/Diamond/Si 多层结构声表面波器件提供理论支持和必要的关键数据.

## 2 声表面波理论基础

### 2.1 耦合波动方程

声表面波器件中的 SAW 的波动方程是建立于压电弹性体动力学方程的基础之上, 当无外部作用 (即  $F = 0$ ) 时有:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (1)$$

式中  $\sigma_{ij}$  为应力,  $u$  为质点运动位移,  $\rho$  为质量密度.

应力引起的应变为

$$S_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right). \quad (2)$$

弹性表面波在压电介质传播过程会激发电磁波, 由于电磁波波速远大于作为机械波的声表面波波速, 因而可将由压电耦合激发的电场近似看作静电场来处理, 即“准静态近似”<sup>[15]</sup>. 在准静态近似下, 电场应为无旋场, 所以电场  $E$  可表示为电势  $\phi$  的梯度, 即

$$E_k = -\frac{\partial \phi}{\partial x_k}. \quad (3)$$

考虑到压电介质的绝缘性, 不存在自由电荷, 则电位移  $D$  满足:

$$\nabla \cdot D = 0. \quad (4)$$

波在压电介质传播过程中, 应力由两部分组成, 一部分是由弹性应变产生的应力, 另一部分是由电场通过逆压电效应引起应力; 同样, 电位移的产生, 是由应力通过正压电效应引起的压电电位移和由电场引起的电位移两者共同作用的结果, 则应力和电位移分别有如下关系式:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} S_{kl} - e_{kij} E_k, \quad (5)$$

$$D_i = e_{ikl} S_{kl} + \epsilon_{ik} E_k, \quad (6)$$

式中  $C_{ijkl}$  为弹性刚度系数,  $e_{ikl}$  为压电常数,  $\epsilon_{ik}$  介电常数.

联立 (1)—(6) 式可得到 SAW 在压电介质中所满足的耦合波动方程:

$$C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_l \partial x_j} + e_{kij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_k \partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (7)$$

$$e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_l \partial x_i} - \epsilon_{ik} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_k} = 0. \quad (8)$$

### 2.2 边界条件

IDT/ZnO/Diamond/Si 结构中的坐标系以及 IDT 结构位置如图 1 所示. 假设 SAW 沿着  $x$  方向传播, 有以下两点假设:

1) 由于 SAW 的能量主要集中于表面附近几个波长范围内而衬底  $z$  方向的尺寸远大于波长, 故可假设衬底  $z < 0$  方向长度无限延伸, 形成半无限基底结构;

2) 由于实际声表面波结构器件中插指电极 (IDT) 是利用半导体工艺, 通过在压电基底上沉积铝、金等优良金属导体薄膜后经过光刻制成, 质量非常小, 故可忽略其质量, 而且认为器件沿  $y$  轴方向足够长, 所有场量与  $y$  无关, 即满足一维近似假设. 基于上述两点假设, IDT/ZnO/Diamond/Si 结构有以下边界条件:

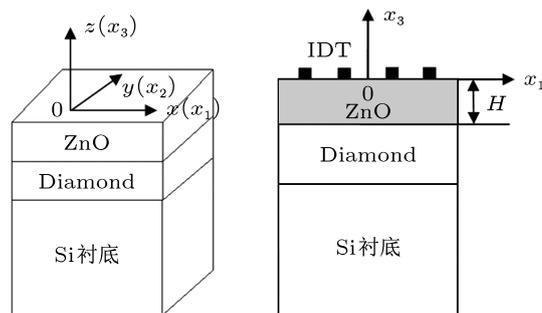


图 1 ZnO/Diamond/Si 结构坐标系示意图

1) 忽略电极质量情况下, 压电介质上表面 ( $x_3 = 0$ ) 的法向应力分量应为零, 所以  $x_3 = 0$  时有如下机械边界条件:

$$\sigma_{i3}|_{x_3=0} = 0, \quad (9)$$

法向电位移的不连续应等于表面的自由面电荷密度  $\gamma_0(x_1, t)$ , 即

$$D_3|_{x_3=0^+} - D_3|_{x_3=0^-} = \gamma_0(x_1, t); \quad (10)$$

2) ZnO 薄膜与 Diamond 界面处 ( $x_3 = -H$ ), 满足广义应力矢量连续的边界条件:

$$D_3|_{x_3=-H^+} = D_3|_{x_3=-H^-}, \quad (11)$$

$$\sigma_3|_{x_3=-H^+} = \sigma_3|_{x_3=-H^-}, \quad (12)$$

同理 Diamond 和 Si 衬底界面处也满足广义应力矢量连续的边界条件;

3) 除了机械和电学边界条件外, 由于 SAW 的能量主要集中于表面附近几个波长范围内, 所以其质点位移  $u_i$  和电势  $\phi$  还应满足辐射条件<sup>[16,17]</sup>

$$u_i|_{x_3=-\infty} = 0, \quad \phi|_{x_3=\pm\infty} = 0. \quad (13)$$

耦合波动方程是讨论压电介质中声表面波问题的理论基础, 任何结构 SAW 器件下压电介质中 SAW 的准确求解, 都是寻求在特定边界条件下满足耦合波动方程的声波解。

### 3 表面有效介电常数模型的建立

递归刚度矩阵法可准确获取声表面波器件稳定的表面有效介质常数<sup>[12]</sup>, 本文结合声表面波基本理论和递归刚度矩阵方法建立多层结构声表面波器件有效介电常数模型。

#### 3.1 状态变量与状态方程

选取质量位移矢量  $\mathbf{u} = [u_1, u_2, u_3]$  和法向应力矢量  $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_{13}, \sigma_{23}, \sigma_{33}]$  六个机械变量, 以及电势  $\phi$  和法向电位移  $D_3$  两个电学变量, 共八个变量作为状态矢量, 耦合波动方程 (6) 和 (7) 的其他变量皆可用这 8 个状态矢量线性表示<sup>[9,10]</sup>. 定义广义位移矢量为  $\mathbf{U} = [\mathbf{u}, \phi]^T$ , 广义应力矢量为  $\mathbf{T} = [\boldsymbol{\sigma}, D_3]^T$ , 并设系统的状态矢量为  $\boldsymbol{\xi} = [\mathbf{U}, \mathbf{T}]^T$ , 为讨论方便, 省略因子  $e^{j(\omega t - k_1 x_1)}$ , 所以系统最终解  $\boldsymbol{\xi}(x_3) e^{j(\omega t - k_1 x_1)}$ .

根据弹性动力学方程 (1), 麦克斯韦方程 (3), (4) 和压电效应方程 (5), (6) 可建立系统的状态方程为<sup>[10]</sup>

$$\frac{d\boldsymbol{\xi}(x_3)}{dx_3} = -j\mathbf{A}\boldsymbol{\xi}(x_3), \quad (14)$$

其中

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -k_1 X \Gamma_{31} & jX \\ j(\Gamma_{11} - \Gamma_{13} X \Gamma_{31}) k_1^2 - j\rho \omega^2 I' & -k_1 \Gamma_{13} X \end{bmatrix}$$

为  $8 \times 8$  的系统矩阵, 它只是压电介质材料常数的函数, 故称为基本声张量, 其中  $\omega$  为角频率,  $k_1 = \omega/V$  为波数,  $X = (\Gamma_{33})^{-1}$ ,

$$\Gamma_{ik} = \begin{bmatrix} c_{1ik} & c_{12k} & c_{13k} & e_{k1i} \\ c_{2ik} & c_{22k} & c_{23k} & e_{k2i} \\ c_{3ik} & c_{32k} & c_{33k} & e_{k3i} \\ e_{i1k} & e_{i2k} & e_{i3k} & -\epsilon_{ik}^S \end{bmatrix}.$$

#### 3.2 递归刚度矩阵

设多成介质板第  $i$  层介质的厚度为  $h_i$ , 该层底部的状态矢量为  $\boldsymbol{\xi}_i(x_3)$ , 则顶部的状态矢量  $\boldsymbol{\xi}_i(x_3 + h_i)$  应为

$$\boldsymbol{\xi}_i(x_3 + h_i) = e^{-j\mathbf{A}_i h_i} \boldsymbol{\xi}_i(x_3) = \boldsymbol{\varphi}_i(h_i) \boldsymbol{\xi}_i(x_3), \quad (15)$$

其中  $\boldsymbol{\varphi}_i(h) = e^{-j\mathbf{A}_i h}$  称为层传递矩阵, 基本声张量  $\mathbf{A}_i$  只与第  $i$  层介质的材料常数有关. 由于基本声张量  $\mathbf{A}$  为  $8 \times 8$  的矩阵, 有 8 个特征值和 8 个特征向量, 设特征值及特征向量组成的矩阵分别为  $\boldsymbol{\lambda}_n (n = 1, \dots, 8)$  和  $\mathbf{W}$ . 特征值虚部  $\text{Im}(\boldsymbol{\lambda}_n) > 0$  的 4 个特征值为  $\boldsymbol{\beta}_3^- = \text{diag}(k_3^{-1}, k_3^{-2}, k_3^{-3}, k_3^{-4})$ , 对应的特征向量矩阵为  $\mathbf{W}^- = [\mathbf{P}^-, \mathbf{D}^-]^T$ ,  $\text{Im}(\boldsymbol{\lambda}_n) < 0$  的 4 个特征值为  $\boldsymbol{\beta}_3^+ = \text{diag}(k_3^{+1}, k_3^{+2}, k_3^{+3}, k_3^{+4})$ , 对应的特征向量矩阵为  $\mathbf{W}^+ = [\mathbf{P}^+, \mathbf{D}^+]^T$ , 则基本声张量  $\mathbf{A}$  可表示为

$$\mathbf{A} = \mathbf{W} \boldsymbol{\beta}_3 \mathbf{W}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}^- & \mathbf{P}^+ \\ \mathbf{D}^- & \mathbf{D}^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_3^- & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\beta}_3^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{P}^- & \mathbf{P}^+ \\ \mathbf{D}^- & \mathbf{D}^+ \end{bmatrix}^{-1}, \quad (16)$$

则层传递矩阵  $\boldsymbol{\varphi}(h) = e^{-j\mathbf{A}h}$  为

$$\boldsymbol{\varphi}(h) = \mathbf{W} e^{-j\boldsymbol{\beta}_3 h} \mathbf{W}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}^- & \mathbf{P}^+ \\ \mathbf{D}^- & \mathbf{D}^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-j\boldsymbol{\beta}_3^- h} & 0 \\ 0 & e^{-j\boldsymbol{\beta}_3^+ h} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{P}^- & \mathbf{P}^+ \\ \mathbf{D}^- & \mathbf{D}^+ \end{bmatrix}^{-1}, \quad (17)$$

式中  $e^{-j\beta_3^\pm h} = \text{diag}(e^{-jk_3^{\pm 1}h}, e^{-jk_3^{\pm 2}h}, e^{-jk_3^{\pm 3}h}, e^{-jk_3^{\pm 4}h})$ .

设  $H^\pm = \text{diag}(e^{\pm jk_3^{\pm 1}h}, e^{\pm jk_3^{\pm 2}h}, e^{\pm jk_3^{\pm 3}h}, e^{\pm jk_3^{\pm 4}h})$ ,

则层传递矩阵可写成:

$$\begin{aligned} \varphi(h) &= \mathbf{W} e^{-j\beta_3 h} \mathbf{W}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} P^- H^- & P^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ D^- & D^+ H^+ \end{bmatrix}^{-1} \end{aligned} \quad (18)$$

则由  $\xi(x_3+h) = \varphi(h)\xi(x_3)$  展开可得:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{U}(x_3+h) \\ \mathbf{T}(x_3+h) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} P^- H^- & P^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ D^- & D^+ H^+ \end{bmatrix}^{-1} \\ &\quad \times \begin{bmatrix} \mathbf{U}(x_3) \\ \mathbf{T}(x_3) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (19)$$

$$\mathbf{K}^M = \begin{bmatrix} K_{11}^m + K_{12}^m (K_S^{M-1} - K_{22}^m)^{-1} K_{21}^m & -K_{12}^m (K_{11}^{M-1} - K_{22}^m)^{-1} K_{12}^{M-1} \\ K_{21}^{M-1} (K_{11}^{M-1} - K_{22}^m)^{-1} K_{21}^m & K_{22}^{M-1} - K_{21}^{M-1} (K_{11}^{M-1} - K_{22}^m)^{-1} K_{12}^{M-1} \end{bmatrix}, \quad (22)$$

其中  $\mathbf{K}^M$  为  $m$  层介质板的总刚度矩阵,  $\mathbf{K}_{ij}^{M-1}$  为第  $m-1$  层以下共  $m-1$  层的总刚度矩阵,  $\mathbf{K}_{ij}^m$  为第  $m$  层的刚度矩阵, 可见得到每层的层刚度矩阵  $\mathbf{K}^m$  后, 总刚度矩阵  $\mathbf{K}^M$  可利用递归式 (21) 式迭代求得.

### 3.3 表面有效介电常数

将总刚度矩阵分成四部分

$$\mathbf{K}^M = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_S^m & \mathbf{K}_S^{\text{mc}} \\ \mathbf{K}_S^{\text{em}} & \mathbf{K}_S^e \end{bmatrix}, \quad (23)$$

其中  $\mathbf{K}_S^m$  为机械项,  $3 \times 3$  的矩阵;  $\mathbf{K}_S^{\text{mc}}$  为机电耦合项,  $3 \times 3$  的矩阵;  $\mathbf{K}_S^{\text{em}}$  电机耦合项为  $1 \times 3$  的矩阵,  $\mathbf{K}_S^e$  电学项标量, 为  $1 \times 1$  的矩阵.

描述界面电性能的表面有效介电常数  $\epsilon_{\text{eff}}$  为 [18,19]

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{eff}}(k_1, \omega) \\ = \epsilon_0 - \frac{\mathbf{K}_S^e - \mathbf{K}_S^{\text{em}} (\mathbf{K}_S^m)^{-1} \mathbf{K}_S^{\text{mc}}}{|k_1|}, \end{aligned} \quad (24)$$

$\epsilon_0$  为真空介电常数,  $k_1$  为波数. 表面有效介电常数  $\epsilon_{\text{eff}}$  的极点和零点分别代表了界面短路和开路条件下的传播模式, 其零点和极点分别对应 SAW 自由表面相速  $V_0$  和金属表面相速  $V_m$ .

则机电耦合系数  $K^2$  有以下表达式:

$$K^2 = \frac{2(V_0 - V_m)}{V_0}. \quad (25)$$

(18) 式变换可得:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{T}(x_3+h) \\ \mathbf{T}(x_3) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} D^- H^- & D^+ \\ D^- & D^+ H^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- H^- & P^+ \\ P^- & P^+ H^+ \end{bmatrix}^{-1} \\ &\quad \times \begin{bmatrix} \mathbf{U}(x_3+h) \\ \mathbf{U}(x_3) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (20)$$

即层刚度矩阵  $\mathbf{K}^m$  为

$$\mathbf{K}^m = \begin{bmatrix} D^- H^- & D^+ \\ D^- & D^+ H^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- H^- & P^+ \\ P^- & P^+ H^+ \end{bmatrix}^{-1}. \quad (21)$$

得到每层的刚度矩阵  $\mathbf{K}^m$  后, 可得多层介质板的总刚度矩阵  $\mathbf{K}^M$  为

## 4 多层结构声表面波传播特性的计算和分析

### 4.1 模型验证

文献 [18] 报道了 IDT/ZnO/Si 结构器件中 SAW 相速随  $kh(k = 2\pi/\lambda, h$  为 ZnO 薄膜厚度) 变化的实验结果. 采用该文献给出的 ZnO 和 Si 的材料参数 (如表 1 所示), 利用所建模型计算 IDT/ZnO/Si 结构器件中 SAW 相速频散特性, 并与实验结果对比, 以验证本文所建模型和编制程序的正确性.

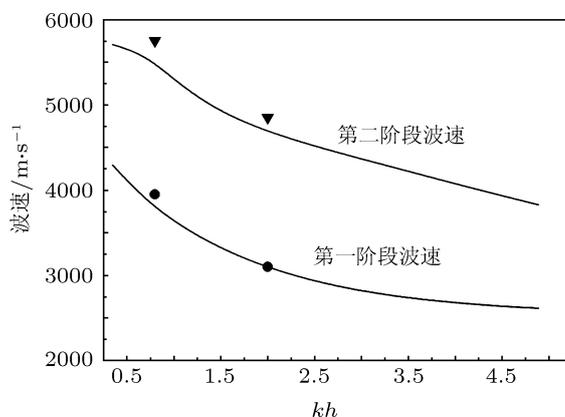


图2 IDT/ZnO/Si 结构中 SAW 相速随  $kh$  变化曲线 (实线为计算结果, 实心点为实验结果)

图 2 为 IDT/ZnO/Si 结构 SAW 相速随  $kh$  变化的曲线, 实线为计算结果, 实心点为试验结果 [18].

由图 2 可看出, IDT/ZnO/Si 结构中 SAW 的相速随  $kh$  增大而减小, 即当波长  $\lambda$  一定时, SAW 相速随压电薄膜厚度  $h$  减小而增加, 这是因为 SAW 在 ZnO 材料中的传播速度低于在 Si 材料中传播速度. 由图可发现, 无论第一阶波速还是第二阶波速, 计算的结果与实验测试的结果都非常符合, 表明本文所建模型是准确、有效的.

表 1 ZnO, Si 和 Diamond 材料参数

	ZnO <sup>[18]</sup>	Si <sup>[18]</sup>	Diamond <sup>[19]</sup>
弹性模量/GPa	$C_{11} = 157$	$C_{11} = 166$	$C_{11} = 1145$
	$C_{13} = 83$	$C_{13} = 63.9$	$C_{12} = 89.3$
	$C_{33} = 208$	$C_{33} = 166$	$C_{13} = 89.3$
	$C_{55} = 38$	$C_{44} = 79.6$	$C_{33} = 1145$
	$C_{66} = 34$		$C_{44} = 525.5$
压电常数/C·m <sup>-2</sup>	$e_{31} = -0.51$	—	—
	$e_{33} = 1.22$	—	—
	$e_{15} = -0.45$	—	—
相对介电常数	$\epsilon_{11} = 8.55$	$\epsilon_{11} = 11.8$	$\epsilon_{11} = 6.44$
	$\epsilon_{33} = 10.2$	$\epsilon_{33} = 11.8$	$\epsilon_{33} = 6.44$
密度/10 <sup>3</sup> kg·m <sup>-3</sup>	$\rho = 5.67$	$\rho = 2.33$	$\rho = 3.515$

### 4.2 ZnO/Diamond/Si 结构频散特性计算与分析

压电薄膜层和高声速基底材料层厚度对多层结构 SAW 性能皆具有明显的影响, 但在 SAW 器件实际生产应用过程中, 为了获得最快传播速度, 基底材料层往往设计足够厚, 此时 SAW 传播速度主要取决于压电薄膜的厚度 [6], 因此多层结构 SAW 传播特性的分析计算也主要是考察压电薄膜层厚度对 SAW 传播特性的影响. 鉴于此, 本文假设 Diamond 层足够厚 (6 倍波长), Si 层的厚度为 8 倍波长, 由于 SAW 的能量主要集中于表面附近几个波长范围内, 因此模型符合半无限空间结构假设. Diamond, ZnO 和 Si 的材料参数依然采用表 1 中参数.

图 3 展示的是 IDT/ZnO/Diamond/Si 结构 SAW 相速度随  $kh$  变化的计算结果. 由图可知, 所有阶次的 SAW 相速随  $kh$  增大而减小, 当 ZnO 薄膜的厚度  $h = 0.1\lambda$  时,  $kh$  为 0.69, 三个模式的波速可分别到达 6806, 8871, 12703 m/s, 可满足高频声表面器件的要求.

图 4 为 IDT/ZnO/Diamond/Si 和 IDT/ZnO/Si 两种结构 SAW 相速频散曲线的对比. 从图 4 可明显

看出, 以 Diamond 作为压电薄膜基底的结构中的 SAW 传播速度远高于以 Si 为基底的结构, 尤其是在  $kh$  比较小的阶段, 速度差异更加明显. 当压电薄膜的厚度  $h = 0.1\lambda$  时, IDT/ZnO/Si 结构的三阶波速分别为 3881, 5630 m/s 远小于 IDT/ZnO/Diamond/Si 结构的 6806, 8871 m/s, 即以 Diamond 材料取代 Si 作为 SAW 器件的基底材料, 第一、二阶的波速可分别提高 86% 和 57%, 效果显著, 表明作为压电薄膜的基底, Diamond 性能优于 Si, 与 Diamond 作为高频 SAW 器件基底最理想材料的结论一致.

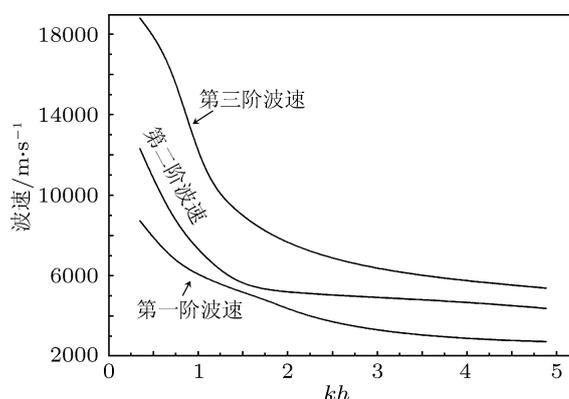


图 3 IDT/ZnO/Diamond/Si 结构 SAW 相速度随  $kh$  变化曲线

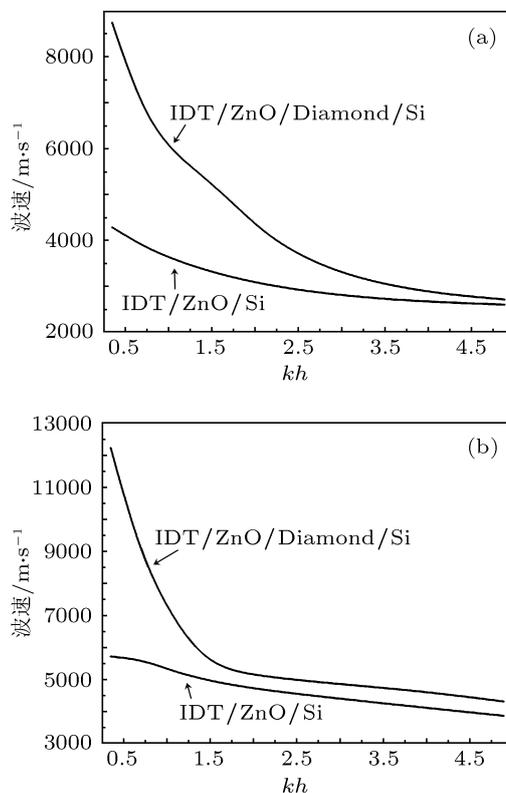


图 4 两种结构 SAW 波速频散曲线比较 (a) 第一阶波速; (b) 第二阶波速

图5为IDT/ZnO/Diamond/Si结构SAW机电耦合系数 $K^2$ 随 $kh$ 变化的计算结果.从图可看出,基波(第一阶波)和第二阶波的机电耦合系数较小,最大机电耦合系数分别为0.68%和0.82%,而第一阶波的机电耦合系数最大可达2.9%,但此时波速仅为4700 m/s.值得注意的是,与波速随 $kh$ 变化规律不同,IDT/ZnO/Diamond/Si结构中的机电耦合系数随 $kh$ 变化并不是单纯递增和递减的关系.在 $kh$ 较小区域,波速较大,是SAW器件设计的最佳控制区域,但在此区域SAW波速和机电耦合系数往往存在“交易”的关系,即波速高则机电耦合系数低,波速低则机电耦合系数高,而优良的高频声表面波器件需同时具备SAW传播速度快和机电耦合系数高的特点,因此在设计高频高性能SAW器件时,必须同时兼顾波速和机电耦合系数.

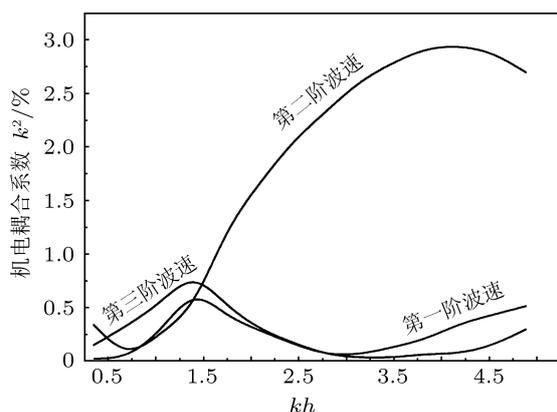


图5 IDT/ZnO/Diamond/Si结构SAW机电耦合系数随 $kh$ 变化曲线

根据IDT/ZnO/Diamond/Si结构频散特性的计算结果,列出了各阶传播模式的最佳高波速和高机电耦合系数的组合,如表2所示.

对于机电耦合系数要求较高而对波速要求不太高的声表面波器件设计,可选 $kh$ 为1.74,第一阶的传播模式,机电耦合系数可高达1.24%,波速为

5304 m/s;相反,对波速要求较高而对机电耦合系数要求稍低的SAW器件设计,应选 $kh$ 为0.35时的第一阶的传播模式,波速高达12320 m/s,机电耦合系数为0.34%.然而,在实际生产应用中,更多的是要求SAW器件同时具备高波速和高机电耦合系数的特点,应选 $kh$ 为1.40时的第二阶传播模式,波速可高达9540 m/s,机电耦合系数为0.84%,这也是IDT/ZnO/Diamond/Si结构最优的波速和机电耦合系数最佳的组合.

表2 IDT/ZnO/Diamond/Si结构的高波速和高机电耦合系数组合

$kh$	波速/m·s <sup>-1</sup>	机电耦合系数 $K^2$	传播模式的阶数
1.40	5525	0.68%	1
0.35	12320	0.34%	2
1.74	5304	1.24%	2
1.40	9540	0.84%	3
1.05	11021	0.54%	3

## 5 结论

利用递归刚度矩阵方法推导了多层结构声表面波有效介电常数模型,计算出了ZnO/Si结构SAW相速度频散特性,与文献报道的实验结果符合很好,表明本文所建模型的准确性和有效性.进一步,利用本文模型对三层结构ZnO/Diamond/Si声表面波传播特性进行分析,获得了其相速度和机电耦合系数随ZnO薄膜层厚度的变化规律,计算结果表明当 $kh$ 为1.40时,ZnO/Diamond/Si结构具有最优的波速和机电耦合系数的组合,SAW的波速可高达9540 m/s,同时机电耦合系数可为0.84%.

感谢中国工程物理研究院莫军研究员和胡文军研究员的讨论.

- [1] Campell K C 1998 *SAW for Mobile and Wireless Communication* (San Diego: Academic) p5
- [2] Mortet V, Elmazria O, Nesladek M, Assour M B, Vanhoyland G, Haen D J, D Olieslaeger M, Alnot P 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1720
- [3] Siemens M, Li Q, Murnane M, Kapteyn H, Yang R G, Anderson E, Nelson K 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 093103-1
- [4] Hashimoto K 2000 *Surface Wave Devices in Telecommunications: Modeling and Simulation* (New York: Springer) p110
- [5] Nakahata H, Higaki K, Hachigo A, Shikata S, Fujimori N, Takahashi Y, Kajiwara T, Yamamoto Y 1994 *Jpn. J. Appl. Phys.* **44** 324
- [6] Nakahata H, Hachigo A, Higaki K, Fujii, Shikata S, Fujimori N 1995 *IEEE Trans. Ultras. Ferroelectr. Frequency Control* **42** 362
- [7] Campbell J J, Jones W R 1968 *IEEE Trans. Son. Ultrason.* **15** 209
- [8] Adler E L 1994 *IEEE Trans. Ultras. Ferroelectr. Frequency Control* **41** 699
- [9] Wu T T, Chen Y Y 2002 *IEEE Trans. Ultras. Ferroelectr. Frequency Control* **49** 142
- [10] Wang L, Rokhlin S I 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 4050
- [11] Wang L, Rokhlin S I 2004 *J. Mech. Phys. Solids* **52** 2473
- [12] Wang L, Rokhlin S I 2004 *IEEE Trans. Ultras. Ferroelectr. Frequency*

- Control* **51** 453
- [13] Yang G, Santos Paulo V 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3515 (in Chinese)  
[杨光, Santos Paulo V 2007 物理学报 **56** 3515]
- [14] Sun C W, Liu Z W, Qin F W, Zhang Q Y, Liu K, Wu S F 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1390 (in Chinese) [孙成伟, 刘志文, 秦福文, 张庆瑜, 刘琨, 吴世法 2006 物理学报 **55** 1390]
- [15] Milsom R F, Reilly N H C, Redwood M 1977 *IEEE Trans. Son. Ultrason.* **24** 147
- [16] Clorennec D, Royer D 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 4608
- [17] Smith P 2001 *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Frequency Control* **48** 171
- [18] Le Brizoual L, Elmazria O, Sarry F, El Hakiki M, Talbi A, Alnot P 2006 *Ultrasonics* **45** 100
- [19] El Hakiki M, Elmazria O, Assouar M B, Mortet V, Le Brizoual L, Vanecek M, Alnot P 2005 *Diamond and Related Mater.* **14** 1175

## Simulation of characteristics of ZnO/diamond/Si structure surface acoustic wave\*

Zhou Zhen-Kai Wei Li-Ming<sup>†</sup> Feng Jie

1) (Institute of Systems Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 10 November 2012; revised manuscript received 11 December 2012)

### Abstract

Based on the recursive stiffness matrix method, the effective surface permittivity model of multilayered surface acoustic wave structure is established. By this model, the frequency dispersive characteristic of phase velocity for the ZnO/Si layered structure is calculated. The calculation results are in agreement with the experimental results, which verifies the effectiveness and accuracy of the model. Furthermore, the model is also established for the determination of the phase velocity and electromechanical coupling coefficients of ZnO/Diamond/Si structure. The best combination of high velocity and high coupling coefficient of the structure is obtained, which provides a good reference for the design of a high-performance and high-capability surface acoustic wave device.

**Keywords:** surface acoustic wave, multilayered structure, recursive stiffness matrix method, effective surface permittivity

**PACS:** 46.40.-f, 46.40.Cd

**DOI:** 10.7498/aps.62.104601

\* Project supported by the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics, China (Grant No. 2010A0302013).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: chongdazk@163.com