

ZnO 薄膜/金刚石在不同激励条件下声表面波特性的计算与分析*

钱莉荣¹⁾ 杨保和^{1)2)†}

1) (天津大学精密仪器与光电子工程学院, 天津 300072)

2) (天津理工大学电子信息工程学院, 天津市薄膜电子与通信器件重点实验室, 天津 300384)

(2013 年 1 月 8 日收到; 2013 年 2 月 22 日收到修改稿)

本文首先以刚度矩阵法为基础, 给出了 ZnO 薄膜/金刚石在四种不同激励条件下的有效介电常数计算公式. 然后以此为工具, 分别计算了多晶 ZnO(002) 薄膜/多晶金刚石和单晶 ZnO(002) 薄膜/多晶金刚石的声表面波特性, 并根据计算结果及设计制作声表面波器件的要求, 对 ZnO 膜厚的选择进行了详细地分析. 最后讨论了 ZnO/金刚石/Si 复合晶片可以忽略 Si 衬底对声表面特性影响时对金刚石膜厚的要求.

关键词: 声表面波, 压电多层结构, 有效介电常数, 刚度矩阵法

PACS: 77.65.Dq, 43.38.Rh, 68.35.Iv, 68.65.Ac

DOI: 10.7498/aps.62.117701

1 引言

随着高速、宽带、无线移动通信系统的迅速发展和应用普及, 对高频、宽带、大功率、低损耗声表面波器件的需求也越来越大. 金刚石具有目前已知材料中最高的声速和最大的热导率, 非常适合做高频、大功率声表面波器件的基片^[1-3], 但其没有压电性, 所以需要在其表面添加压电薄膜才能激励声表面波, 这便构成了压电薄膜/金刚石复合基片. 在常见的压电薄膜中, 具有高度 c 轴择优取向的多晶 ZnO 是目前应用最为广泛的一种薄膜材料^[4-6], 它不仅具有较高的机电耦合系数, 而且制备工艺简单、成熟. 另外, 最近的研究表明^[7], 通过在 ZnO 薄膜中掺杂少量的 Cu, Co, V, Cr, Fe, Mn 等过渡金属, 可以显著地提高其压电特性, 这对于低损、宽带声表面波器件的应用具有十分重要的意义^[8-10].

与传统单晶基片(如石英、铌酸锂、钽酸锂等)不同, ZnO 薄膜/金刚石这种复合基片中的声表面

波具有频散特性, 所以由其制作的器件性能也会随 ZnO 膜厚和声表面波波长(或频率)的变化而不同^[11-13]. 而且这种复合基片的声表面波可以有四种激励方式^[14,15], 即又指电极 (IDT)/ZnO/金刚石 (I-F 结构)、IDT/ZnO/短路金属/金刚石 (I-M 结构)、ZnO/IDT/金刚石 (F-I 结构) 和短路金属/ZnO/IDT/金刚石 (M-I 结构), 在不同的激励条件下, 其声表面波特性也会不同. 因此, 准确地计算 ZnO 薄膜/金刚石在四种激励条件的声表面波特性是应用这种复合基片设计制作高性能声表面波器件的基础.

在 ZnO 薄膜/金刚石声表面波特性的计算方法中, Campbell 的分波法^[14,16] 和 Adler 的传递矩阵法^[15,17] 是最为常见的两种方法. 与传统的分波法相比, 传递矩阵法具有数值计算复杂度与介质层数无关、易于编程等优点^[17], 所以近些年来在多层介质声波特性的计算中应用得更为广泛. 但当介质层厚度与声波波长之比较大时, 传递矩阵法会出现数值计算不稳定性问题^[18-21]. 为了解决该问题, 表面阻抗矩阵^[18]、散射矩阵^[19]、反射矩阵^[20] 和刚度

* 国家高技术研究发展计划 (批准号: 2013AA030801)、国家自然科学基金 (批准号: 50972105)、天津市科技支撑计划重点项目 (批准号: 10ZCKFGX01200) 和天津市科技计划重点项目 (批准号: 10SYSYJC27700) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: bhyang@tjut.edu.cn

矩阵^[21]等方法在传递矩阵法的基础上被相继提了出来,利用这些方法能够计算任意层数、任意层厚压电多层介质的有效介电常数或格林函数^[19-22],而有效介电常数或格林函数又是研究基片声表面波特性和其器件建模的重要手段和工具^[12,22-27].

目前大多数文献仅给出了 I-F 结构下 ZnO 薄膜/金刚石的有效介电常数或格林函数的计算方法^[12,20,21,25],其他三种激励方式的却鲜见介绍^[28],而且在计算过程中都采用的是 ZnO 和金刚石的单晶材料常数^[14,28],但在实际基片材料中^[3],金刚石为多晶薄膜,在其上也无法外延出单晶 ZnO,所以研究 *c* 轴择优取向多晶 ZnO 薄膜/多晶金刚石复合基片的声表面波特性和其器件建模具有现实意义,对此国内外未见有报道.

本文首先以刚度矩阵法为基础,通过定义表面刚度矩阵,推导出 ZnO 薄膜/金刚石在四种不同激励条件下的有效介电常数计算公式.然后以有效介电常数为工具,计算单晶 ZnO 薄膜/多晶金刚石和多晶 ZnO 薄膜/多晶金刚石在四种不同激励条件下声表面波的相速度和机电耦合系数频散特性,并通过与相关文献中实验数据的比较,讨论激励条件的差异和 ZnO 薄膜材料参数的不同对声表面波特性的影响.最后根据设计和制作多层结构声表面波器件的要求,对 ZnO/金刚石基片中 ZnO 膜厚和金刚石膜厚如何选择的问题进行探讨和分析.

2 理论推导

在各向异性压电介质中传播的声表面波,必须同时满足动力学方程和麦克斯韦方程.在准静态近似下,当介质中自由电荷近似为零时,利用爱因斯坦附标求和惯例,可以将声表面波场的控制方程简洁地表示为如下张量形式:

$$\rho \ddot{u}_i = T_{ij,j}, \quad (1)$$

$$D_{i,i} = 0, \quad (2)$$

式中 ρ 为压电介质的质量密度, u_i ($i = 1, 2, 3$) 为质点位移分量, T_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) 为应力张量, D_i ($i = 1, 2, 3$) 为电位移分量,上标双点号“..”表示对时间变量 t 的二阶导数,下标“ i ”表示对坐标变量 x_i 的偏导数.由于压电效应,应力 T_{ij} 和电位移 D_i 与质点位移 u_i 和电势 ϕ 间存在如下本构关系^[27]:

$$T_{ij} = c_{ijkl}^E S_{k,l} - e_{kij} E_k = c_{ijkl}^E u_{k,l} + e_{kij} \phi_{,k}, \quad (3)$$

$$D_i = e_{ijk} S_{j,k} + \epsilon_{ij}^S E_j = e_{ijk} u_{j,k} - \epsilon_{ij}^S \phi_{,j}, \quad (4)$$

式中应变张量 $S_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2$, 电场分量 $E_i = -\phi_{,i}$, c_{ijkl}^E 和 ϵ_{ij}^S 分别为压电介质在常电场下所测刚度常数张量和在常应变下所测介电常数张量,而 e_{ijk} 为其压电常数张量.

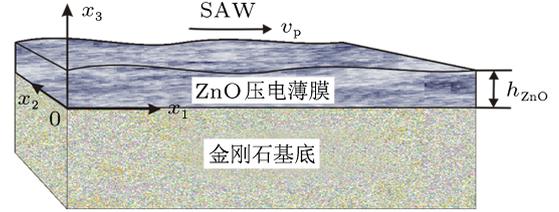


图1 ZnO 薄膜/金刚石多层声表面波介质坐标系

对于图 1 所示坐标系,为了求得方程(1)–(4)的解,假设沿 x_1 方向传播的平面谐波,其质点位移 u_i 和电势 ϕ 具有如下解的形式:

$$\begin{aligned} u_i &= a_i \exp[j(\omega t - k_1 x_1 - k_3 x_3)], \\ \phi &= a_4 \exp[j(\omega t - k_1 x_1 - k_3 x_3)], \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $\omega = 2\pi f$ 为角频率, k_1 和 k_3 分别为 x_1 和 x_3 方向波数, a_i 和 a_4 为振幅常数.将(3),(4)及(5)式代入到(1)和(2)式中,整理后可得到如下线性方程组^[24]:

$$[\alpha^2 \mathbf{A}_1 + \alpha(\mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_2^T) + \mathbf{A}_3] \mathbf{U}(x_3) = 0, \quad (6)$$

其中 $\mathbf{U}(x_3) = [\bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3, \bar{\phi}]^T$ 称为广义位移向量, $\bar{u}_i = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i e^{jk_1 x_1} dx_1$ 和 $\bar{\phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi e^{jk_1 x_1} dx_1$ 分别为质点位移 u_i 和电势 ϕ 由 x_1 坐标到 k_1 域的傅里叶变换, $\alpha = k_3/k_1$, 四阶系数方阵 \mathbf{A}_1 , \mathbf{A}_2 和 \mathbf{A}_3 分别为

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= \begin{bmatrix} c_{i3j3}^E & e_{3i3} \\ e_{3j3} & -\epsilon_{33}^S \end{bmatrix}, \\ \mathbf{A}_2 &= \begin{bmatrix} c_{i1j3}^E & e_{3i1} \\ e_{1j3} & -\epsilon_{13}^S \end{bmatrix}, \\ \mathbf{A}_2^T &= \begin{bmatrix} c_{i3j1}^E & e_{1i3} \\ e_{3j1} & -\epsilon_{31}^S \end{bmatrix}, \\ \mathbf{A}_3 &= \begin{bmatrix} c_{i1j1}^E - \rho V_p^2 \delta_{ij} & e_{1i1} \\ e_{1j1} & -\epsilon_{11}^S \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (7)$$

式中上标“T”表示矩阵的转置, $V_p = \omega/k_1$ 为声表面波的相速度, δ_{ij} 为克罗内尔符号 ($i, j = 1, 2, 3$), 即当 $i = j$ 时 $\delta_{ij} = 1$, 当 $i \neq j$ 时 $\delta_{ij} = 0$.

定义广义应力向量

$$\mathbf{T}(x_3) = j/k_1 [\bar{T}_{13}, \bar{T}_{23}, \bar{T}_{33}, \bar{D}_3]^T,$$

其中

$$\bar{T}_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} T_3 e^{jk_1 x_1} dx_1$$

和 $\bar{D}_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} D_3 e^{jk_1 x_1} dx_1$ 分别为法向应力分量 T_3 和法向电位移 D_3 的傅里叶变换, 由压电本构方程 (3) 和 (4) 可以得到广义应力向量 \mathbf{T} 与广义位移向量 \mathbf{U} 间的关系为

$$\mathbf{T}(x_3) = (\alpha \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2^T) \mathbf{U}(x_3). \quad (8)$$

联立 (6) 和 (8) 式可以得到 8 阶系统方程为 [24,27]

$$\alpha \begin{bmatrix} \mathbf{A}_2 & \mathbf{I} \\ \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}(x_3) \\ \mathbf{T}(x_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{A}_3 & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}_2^T & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}(x_3) \\ \mathbf{T}(x_3) \end{bmatrix}, \quad (9)$$

式中 \mathbf{I} 为 4 阶单位矩阵, $\mathbf{0}$ 为 4 阶零方阵. 方程 (9) 式的求解, 实际上是矩阵理论中典型的广义特征值问题, 其标准形式为 $\alpha \mathbf{B}x = \mathbf{A}x$. 假设对于给定的相速度 V_p , 计算得到 (9) 式的 8 个特征值为 $\alpha_1, \dots, \alpha_8$, 其对应的特征向量组成的 8 阶方阵为 \mathbf{W} , 则方程 (9) 的解可以写为 [12,17]

$$\boldsymbol{\xi}(x_3) = \mathbf{W} \text{diag}(e^{-jk_3^{(1)} x_3}, \dots, e^{-jk_3^{(8)} x_3}) \mathbf{C}, \quad (10)$$

其中 $\boldsymbol{\xi}(x_3) = [\mathbf{U}(x_3), \mathbf{T}(x_3)]^T$ 为状态向量, $k_3^{(i)} = \alpha_i k_1$ ($i = 1, \dots, 8$), $\mathbf{C} = [C_1, \dots, C_8]^T$ 为由边界条件决定的常数矩阵.

(10) 式表明压电层状介质中声波的解, 可以表示为 8 个声平面谐波的线性组合, 其中 4 个分波沿正 x_3 方向传播或衰减, 4 个分波沿负 x_3 方向传播或衰减. 由于 (10) 式解中混合着指数衰减项和指数增长项, 从而会为数值计算带来不稳定性 [12,18-21], 为了提高解的稳定性, 利用 Wang 和 Rokhlin 提出的刚度矩阵法 [21] 对 (10) 式进行分解重构.

2.1 刚度矩阵

首先根据声平面谐波传播方向将特征值 $k_3^{(i)} = \alpha_i k_1$ ($i = 1, \dots, 8$) 分为 $k_3^{(+j)}$ 和 $k_3^{(-j)}$ ($j = 1, \dots, 4$) 两组, 其中 $k_3^{(+j)}$ 为沿正 x_3 方向传播或衰减的分波 (即上传分波) 波数, $k_3^{(-j)}$ 为沿负 x_3 方向传播或衰减的分波 (即下传分波) 波数, 所以 $k_3^{(+j)}$ 和 $k_3^{(-j)}$ 应满足下列条件:

$$\Re[k_3^{(+j)}] > 0, \Re[k_3^{(-j)}] < 0, \text{当} \Im[k_3^{(i)}] = 0 \text{时,}$$

$$\Im[k_3^{(+j)}] < 0, \Im[k_3^{(-j)}] > 0, \text{当} \Im[k_3^{(i)}] \neq 0 \text{时,} \quad (11)$$

其中符号 \Re 和 \Im 分别表示取波数 k_3 的实部和虚部. 相应的特征向量 \mathbf{W} 也可以分为两组, 即

$$\mathbf{W} = [\mathbf{W}^+, \mathbf{W}^-] = \begin{bmatrix} \mathbf{P}^+ & \mathbf{P}^- \\ \mathbf{D}^+ & \mathbf{D}^- \end{bmatrix}, \quad (12)$$

其中 $\mathbf{W}^+ = [\mathbf{P}^+, \mathbf{D}^+]^T$ 为上传分波特征向量矩阵, $\mathbf{W}^- = [\mathbf{P}^-, \mathbf{D}^-]^T$ 为下传分波特征向量矩阵, 而 \mathbf{P}^\pm 和 \mathbf{D}^\pm 均为 4×4 子阵. 然后根据上述分解将 (10) 式重构为 [21]

$$\boldsymbol{\xi}(x_3) = \begin{bmatrix} \mathbf{P}^+ & \mathbf{P}^- \mathbf{H}^- \\ \mathbf{D}^+ & \mathbf{D}^- \mathbf{H}^- \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mathbf{P}^+ \mathbf{H}^+ & \mathbf{P}^- \\ \mathbf{D}^+ \mathbf{H}^+ & \mathbf{D}^- \end{bmatrix}^{-1} \boldsymbol{\xi}(0), \quad (13)$$

其中

$$\mathbf{H}^+ = \text{diag}(e^{jk_3^{(+1)} x_3}, \dots, e^{jk_3^{(+4)} x_3}),$$

$$\mathbf{H}^- = \text{diag}(e^{-jk_3^{(-1)} x_3}, \dots, e^{-jk_3^{(-4)} x_3}),$$

$\boldsymbol{\xi}(0)$ 为 $x_3 = 0$ 处的状态向量. 由 (13) 式可以得到广义应力向量 \mathbf{T} 与广义位移向量 \mathbf{U} 间的关系为 [21]

$$\begin{bmatrix} \mathbf{T}(x_3) \\ \mathbf{T}(0) \end{bmatrix} = \mathbf{K} \begin{bmatrix} \mathbf{U}(x_3) \\ \mathbf{U}(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{11} & \mathbf{K}_{12} \\ \mathbf{K}_{21} & \mathbf{K}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}(x_3) \\ \mathbf{U}(0) \end{bmatrix}, \quad (14)$$

其中

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^+ & \mathbf{D}^- \mathbf{H}^- \\ \mathbf{D}^+ \mathbf{H}^+ & \mathbf{D}^- \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mathbf{P}^+ & \mathbf{P}^- \mathbf{H}^- \\ \mathbf{P}^+ \mathbf{H}^+ & \mathbf{P}^- \end{bmatrix}^{-1}. \quad (15)$$

(15) 式称为压电层状介质的刚度矩阵, 由于其主对角线与指数项无关, 因而具有更稳定的数值计算特性 [21].

对于图 1 所示 ZnO 薄膜/金刚石多层介质, 假设 ZnO 薄膜的厚度为 h_{ZnO} , 则 ZnO 薄膜上表面的广义位移向量和广义应力向量为 $\mathbf{U}(h_{\text{ZnO}}^-)$ 和 $\mathbf{T}(h_{\text{ZnO}}^-)$, 下表面的广义位移向量和广义应力向量为 $\mathbf{U}(0^+)$ 和 $\mathbf{T}(0^+)$. 类似于表面阻抗矩阵 [12,18,28],

我们定义 ZnO 薄膜的上下表面刚度矩阵 \mathbf{K}_{s+} 和 \mathbf{K}_{s-} 为

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(h_{\text{ZnO}}^-) &= \mathbf{K}_{s+} \mathbf{U}(h_{\text{ZnO}}^-), \\ \mathbf{T}(0^+) &= \mathbf{K}_{s-} \mathbf{U}(0^+). \end{aligned} \quad (16)$$

由 (14) 式与 (16) 式联立可以得到 \mathbf{K}_{s+} 和 \mathbf{K}_{s-} 间的关系为

$$\mathbf{K}_{s+} = \mathbf{K}_{11} + \mathbf{K}_{12}(\mathbf{K}_{s-} - \mathbf{K}_{22})^{-1} \mathbf{K}_{21}, \quad (17)$$

$$\mathbf{K}_{s-} = \mathbf{K}_{22} + \mathbf{K}_{21}(\mathbf{K}_{s+} - \mathbf{K}_{11})^{-1} \mathbf{K}_{12}, \quad (18)$$

其中刚度矩阵 \mathbf{K} 由 (15) 式计算得到, 它只与 ZnO 薄膜的材料常数和膜厚 h_{ZnO} 有关. 对于半无限厚的金刚石基底, 由于只存在沿负 x_3 方向传播或衰减的分波, 所以其表面刚度矩阵 \mathbf{K}_{s0} 为

$$\mathbf{T}(0^-) = \mathbf{K}_{s0} \mathbf{U}(0^-), \quad \mathbf{K}_{s0} = \mathbf{D}^-(\mathbf{P}^-)^{-1}. \quad (19)$$

对于任意层数压电多层介质的计算, 可以通过递归调用 (17) 或 (18) 式得到其总表面刚度矩阵.

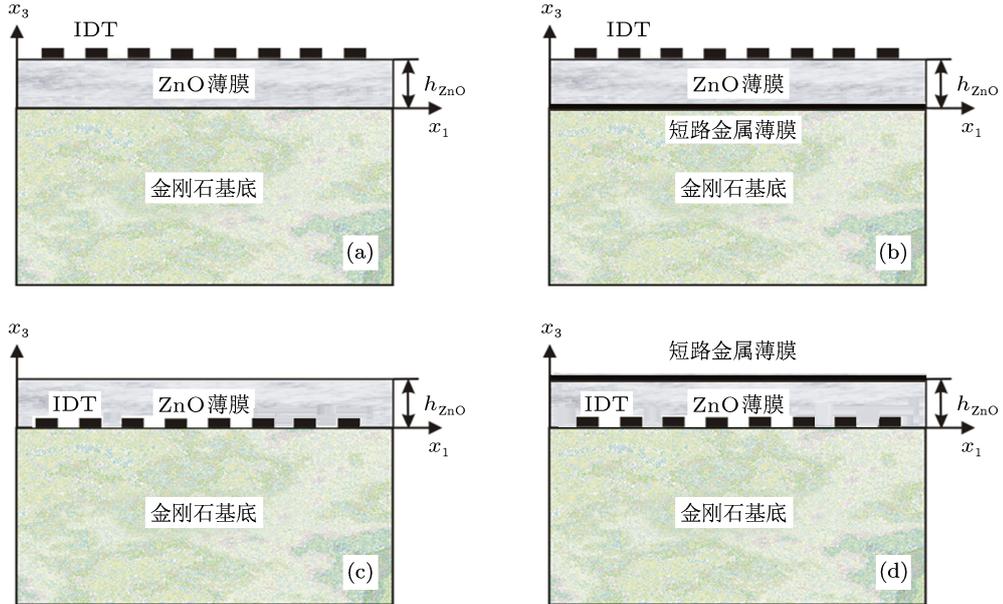


图 2 ZnO 薄膜/金刚石多层介质中四种声表面波激励方式 (a) I-F 结构; (b) I-M 结构; (c) F-I 结构; (d) M-I 结构

为了便于定义有效介电常数, 将 (16) 式和 (19) 式中的表面刚度矩阵 \mathbf{K}_s 展开为如下形式:

$$\frac{j}{k_1} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{T}}_3 \\ \bar{\mathbf{D}}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_s^m & \mathbf{K}_s^{\text{me}} \\ \mathbf{K}_s^{\text{em}} & K_s^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{\phi} \end{bmatrix}, \quad (21)$$

式中表面法向应力向量 $\bar{\mathbf{T}}_3 = [\bar{T}_{13}, \bar{T}_{23}, \bar{T}_{33}]^T$, 表面质点位移向量 $\bar{\mathbf{u}} = [\bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3]^T$, $\bar{\mathbf{D}}_3$ 和 $\bar{\phi}$ 分别为表面法向电位移和表面电势, 3 阶方阵 \mathbf{K}_s^m 为表面刚度矩

2.2 有效介电常数

对于 ZnO 薄膜/金刚石多层介质, 声表面波的激励可以有四种方式^[14,15], 如图 2 所示, 其中叉指换能器 (IDT) 用于实现声电转换, 而金属薄膜用于使压电薄膜表面短路, 一般而言叉指电极和短路金属薄膜很薄, 故其质量负载的影响可以忽略. 在不同的激励方式下, 介质的边界条件不同, 所以其声表面波特性的也有所差异. 表面有效介电常数 ϵ_s 是计算压电介质表面声表面波特性的有效方法, 它通常定义为^[23]

$$\epsilon_s(k_1, \omega) = \frac{\bar{Q}_s}{|k_1| \bar{\phi}_s} = \frac{\bar{D}_{3+} - \bar{D}_{3-}}{|k_1| \bar{\phi}_s}, \quad (20)$$

式中 k_1 为声表面波传播方向波数, \bar{Q}_s 和 $\bar{\phi}_s$ 分别为压电介质表面自由电荷和表面电势的傅里叶变换, 而 \bar{D}_{3+} 和 \bar{D}_{3-} 分别为压电介质表面上下两侧法向电位移的傅里叶变换.

阵 \mathbf{K}_s 的机械项, 3×1 向量 \mathbf{K}_s^{me} 和 1×3 向量 \mathbf{K}_s^{em} 为表面刚度矩阵 \mathbf{K}_s 的机电耦合项, 标量 K_s^e 为 \mathbf{K}_s 的电学项.

2.2.1 表面源结构: I-F 和 I-M

在图 2(a), (b) 结构中, IDT 位于 ZnO 薄膜表面, 故我们称其为表面源结构. 通常在 ZnO 薄膜与真空界面处满足法向应力为零机械边界条件, 所以在

ZnO 薄膜上表面处 $x_3 = h_{\text{ZnO}}^-$ 有

$$\frac{j}{k_1} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \bar{D}_3 \end{bmatrix}_{x_3=h_{\text{ZnO}}^-} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{s+}^m & \mathbf{K}_{s+}^{\text{me}} \\ \mathbf{K}_{s+}^{\text{em}} & K_{s+}^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{\phi} \end{bmatrix}_{x_3=h_{\text{ZnO}}^-}. \quad (22)$$

由此可以得到

$$\bar{D}_3|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^-} = jk_1 [\mathbf{K}_{s+}^{\text{em}} (\mathbf{K}_{s+}^m)^{-1} \mathbf{K}_{s+}^{\text{me}} - K_{s+}^e] \bar{\phi}|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^-}, \quad (23)$$

而在 ZnO 薄膜表面真空一侧的法向电位移 $\bar{D}_3|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^+}$ 为

$$\bar{D}_3|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^+} = \epsilon_0 |k_1| \bar{\phi}|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^-}. \quad (24)$$

这是因为真空中电势满足拉普拉斯方程, 且在 ZnO 薄膜表面满足连续性条件, 式中 ϵ_0 为真空介电常数. 根据定义式 (20), 可以得到 ZnO 薄膜/金刚石在表面源结构下有效介电常数 ϵ_s 的计算公式为

$$\epsilon_s = \frac{\bar{D}_3|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^+} - \bar{D}_3|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^-}}{|k_1| \bar{\phi}|_{x_3=h_{\text{ZnO}}^-}} = \epsilon_0 - j \text{sgn}(k_1) [\mathbf{K}_{s+}^{\text{em}} (\mathbf{K}_{s+}^m)^{-1} \mathbf{K}_{s+}^{\text{me}} - K_{s+}^e], \quad (25)$$

其中 $\text{sgn}(k_1) = k_1/|k_1|$, sgn 为符号函数, \mathbf{K}_{s+} 为 ZnO 薄膜的上表面刚度矩阵, 它在已知下表面刚度矩阵 \mathbf{K}_{s-} 时可以由 (17) 式计算得到.

实际上在图 2(a) I-F 结构中, 由于广义位移向量 \mathbf{U} 和广义应力向量 \mathbf{T} 在 ZnO 薄膜与金刚石基底界面处满足连续性条件: $\mathbf{U}(0^+) = \mathbf{U}(0^-)$, $\mathbf{T}(0^+) = \mathbf{T}(0^-)$, 所以有

$$\mathbf{K}_{s-} = \mathbf{K}_{s0}. \quad (26)$$

式中 \mathbf{K}_{s0} 为金刚石基底的表面刚度矩阵, 它由 (19) 式计算得到. 而在图 2(b) I-M 结构中, 由于短路金属薄膜的存在, 使得 ZnO 薄膜下表面的电势 $\bar{\phi}|_{x_3=0^+} = 0$, 而质点位移向量 $\bar{\mathbf{u}}$ 和法向应力向量 $\bar{\mathbf{T}}_3$ 在界面 $x_3 = 0$ 处连续, 所以其 ZnO 薄膜下表面刚度矩阵 \mathbf{K}_{s-} 为

$$\mathbf{K}_{s-} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{s0}^m & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \infty \end{bmatrix}, \quad (27)$$

式中 \mathbf{K}_{s0}^m 为金刚石基底表面刚度矩阵 \mathbf{K}_{s0} 的机械项, $K_{s-}^e = \infty$ 是由于在表面电势 $\bar{\phi}|_{x_3=0^+} = 0$ 时其法向电位移 $\bar{D}_3|_{x_3=0^+} \neq 0$ 所致.

2.2.2 界面源结构: F-I 和 M-I

在图 2(c), (d) 结构中, IDT 位于 ZnO 薄膜与金刚石基底间的界面处, 故我们称其为界面源结构. 在 $x_3 = 0$ 界面处, 质点位移向量 $\bar{\mathbf{u}}$, 表面电势 $\bar{\phi}$ 和法向应力向量 $\bar{\mathbf{T}}_3$ 连续, 所以有

$$\frac{j}{k_1} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \bar{Q}_s \end{bmatrix}_{x_3=0} = \Delta \mathbf{K}_s \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{\phi} \end{bmatrix}_{x_3=0} = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{K}_s^m & \Delta \mathbf{K}_s^{\text{me}} \\ \Delta \mathbf{K}_s^{\text{em}} & \Delta K_s^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{\phi} \end{bmatrix}_{x_3=0}, \quad (28)$$

式中

$$\Delta \mathbf{K}_s = (\mathbf{K}_{s-} - \mathbf{K}_{s0}),$$

$$\bar{Q}_s = \bar{D}_3|_{x_3=0^+} - \bar{D}_3|_{x_3=0^-}$$

为 $x_3 = 0$ 处自由电荷密度的傅里叶变换. 由 (28) 式可以得到:

$$\bar{Q}_s|_{x_3=0} = jk_1 [\Delta \mathbf{K}_s^{\text{em}} (\Delta \mathbf{K}_s^m)^{-1} \Delta \mathbf{K}_s^{\text{me}} - \Delta K_s^e] \bar{\phi}|_{x_3=0}. \quad (29)$$

将其代入到 (20) 式中, 就得到 ZnO 薄膜/金刚石在界面源结构下有效介电常数 ϵ_s 的计算公式为

$$\epsilon_s = \frac{\bar{Q}_s|_{x_3=0}}{|k_1| \bar{\phi}|_{x_3=0}} = j \text{sgn}(k_1) [\Delta \mathbf{K}_s^{\text{em}} (\Delta \mathbf{K}_s^m)^{-1} \Delta \mathbf{K}_s^{\text{me}} - \Delta K_s^e], \quad (30)$$

式中 $\Delta \mathbf{K}_s = (\mathbf{K}_{s-} - \mathbf{K}_{s0})$, 其中 ZnO 薄膜下表面的刚度矩阵 \mathbf{K}_{s-} , 可以在已知上表面刚度矩阵 \mathbf{K}_{s+} 时由 (18) 式计算得到.

实际上在图 2(c) F-I 结构中, 由于 ZnO 薄膜上表面的法向应力向量 $\bar{\mathbf{T}}_3$ 为零, 法向位移 \bar{D}_3 , 质点位移向量 $\bar{\mathbf{u}}$ 和表面电势 $\bar{\phi}$ 连续, 所以 ZnO 薄膜上表面的刚度矩阵 \mathbf{K}_{s+} 为

$$\mathbf{K}_{s+} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & j \text{sgn}(k_1) \epsilon_0 \end{bmatrix}, \quad (31)$$

式中 $\text{sgn}(k_1) = |k_1|/k_1$, ϵ_0 为真空介电常数. 而在图 2(d) M-I 结构中, 由于短路金属薄膜的存在, 使得 ZnO 薄膜上表面的表面电势 $\bar{\phi}$ 为零, 法向电位移 \bar{D}_3 不连续, 而其机械边界条件不变, 即法向应力向量 $\bar{\mathbf{T}}_3$ 为零和质点位移向量 $\bar{\mathbf{u}}$ 连续, 所以 ZnO 薄膜上表面刚度矩阵 \mathbf{K}_{s+} 为

$$\mathbf{K}_{s+} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \infty \end{bmatrix}, \quad (32)$$

式中 $K_{s+}^e = \infty$ 是由于在表面电势 $\bar{\phi}|_{x_3=h_{\text{ZnO}}} = 0$ 时其法向电位移 $\bar{D}_3|_{x_3=h_{\text{ZnO}}}$ 有限所致。

2.3 声表面波特性的计算

声表面波波速和机电耦合系数是设计声表面波器件必须要掌握的基本声学参数, 这两个参数都可以利用有效介电常数 ϵ_s 计算得到。

根据有效介电常数 ϵ_s 的定义 (20) 式可知, ϵ_s 是声表面波相速度 V_p 的函数, 对于自由表面波, 它必须满足表面自由电荷 \bar{Q}_s 为零的电学边界条件; 而对于金属化表面波, 它必须满足表面电势 $\bar{\phi}_s$ 为零的电学边界条件, 所以对应于 ϵ_s 零点和极点处的波速即分别为自由表面波波速 V_f 和金属化表面波波速 V_m . 而机电耦合系数 K^2 可通过下式计算得到 [29]:

$$K^2 = -2\epsilon_\infty \left(k_f \frac{\partial \epsilon_s(k_1)}{\partial k_1} \Big|_{k_1=k_f} \right)^{-1}, \quad (33)$$

式中 $k_f = \omega/V_f$ 为自由表面波数, $\epsilon_\infty = \lim_{k_1 \rightarrow \infty} \epsilon_s(k_1)$.

3 计算结果与讨论

根据上节推导的有效介电常数 ϵ_s 计算公式, 编制程序计算 c 轴择优取向 ZnO 薄膜/金刚石复合基片在四种激励条件下的声表面波特性的. 计算所用材料参数见表 1 所示, 其中金刚石采用的是多晶薄膜参数, 而 ZnO 薄膜使用的是单晶和多晶两种材料参数, 这是因为在实际基片材料中 [3], 金刚石通常是硅基多晶薄膜, 而 ZnO 薄膜的材料参数通常与制备方法和条件有关. 为便于描述和行文, 以后用 s-ZnO 表示单晶 ZnO(002) 薄膜, p-ZnO 表示多晶 ZnO(002) 薄膜, Dia 表示多晶金刚石膜。

图 3 是 s-ZnO/Dia 在 F-I 结构下 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 2$ 时的相对有效介电常数 $\epsilon_s/\epsilon_\infty$, 其中 $k_1 = 2\pi/\lambda$ 为声表面波传播方向波数. 在所考察的 3—9 km/s 相速度范围内, 图中有效介电常数 ϵ_s 的虚部始终为零, 这表明声波能量始终集中于介质表面附近, 没有泄漏到金刚石基底内部, 所以 ϵ_s 实部在相速度为 4405 m/s, 5819 m/s 和 8179 m/s 附近的三对零极点, 分别对应于三种声表面波模式的自由表面波速和金属化表面波速. 若以 $k_1 h_{\text{ZnO}}$ 作为自变量, 以 ϵ_s 的零点作为函数, 可以计算得到 ZnO/Dia 的自由表面波相速度频散曲线。

图 4 是 s-ZnO/Dia(粗实线) 和 p-ZnO/Dia(细虚线) 分别在 (a) I-F 和 (b) F-I 结构下前三种声表

面波模式的相速度, 图中散点为文献 [1] 中的实验数据, 从计算结果与实验数据的比较可以看到, 两者符合得较好, 而 p-ZnO/Dia 中的相速度要比 s-ZnO/Dia 中的低一些. 值得注意的是, 对于基模 (M0) 声表面波, 随着 ZnO 膜厚与波长之比 h_{ZnO}/λ 由 0 增大到 ∞ , 其波速由金刚石本身的瑞利波波速 (~ 10936 m/s) 减小到 ZnO 的瑞利波波速 (~ 2531 m/s), 所以 M0 实际上是传统意义上的 Rayleigh 波; 而高次模式则在金刚石的剪切体声波波速 (~ 12323 m/s) 处表现出截止特性, 其中一次模 (M1) 称为 Sezawa 波. 需要特别指出的是, 在 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.22$ (s-ZnO/Dia) 或 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.48$ (p-ZnO/Dia) 附近时, Rayleigh 波和 Sezawa 波的相速度非常接近, 而非文献 [1] 中所认为的相交 [15].

表 1 计算所用材料参数

材料常数	符号	金刚石 [30]		
		多晶	ZnO [31,32]	
			单晶	多晶
弹性常数 / (10 ¹¹ N/m ²)	c_{11}	11.531	2.09	1.57
	c_{12}	0.864	1.205	0.89
	c_{13}	0.864	1.046	0.83
	c_{33}	11.531	2.106	2.08
	c_{44}	5.333	0.423	0.38
	c_{66}	5.333	0.4425	0.34
压电常数 / (C/m ²)	e_{15}	—	0.48	0.45
	e_{31}	—	0.573	0.51
	e_{33}	—	1.321	1.22
相对介电常数	ϵ_{11}/ϵ_0	5.02	8.33	
	ϵ_{33}/ϵ_0	5.02	8.84	
质量密度 / (10 ³ kg/m ³)	ρ	3.512	5.665	5.72

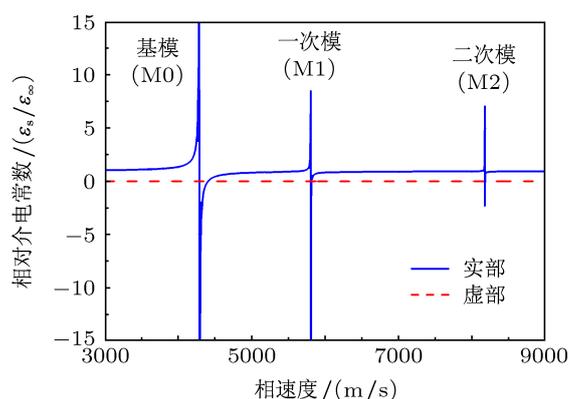


图 3 s-ZnO/Dia 在 F-I 结构下 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 2$ 时的相对有效介电常数 $\epsilon_s/\epsilon_\infty$.

图 5 是利用有效介电常数计算的 s-ZnO/Dia 和 p-ZnO/Dia 在四种不同激励条件下前三种声表面波模式的机电耦合系数 (K^2) 频散曲线, 与图 4 中对相速度的影响相比, 激励条件的不同对机电耦合系

数的影响要显著得多. 而且 K^2 对 ZnO 材料参数的变化也比较敏感, 虽然多晶 ZnO 与单晶 ZnO 的 K^2 总体变化趋势相似, 但其数值通常比单晶 ZnO 的要小一些, 特别是对于 Sezawa 波表现得更为明显. 而对于 Rayleigh 波, 在 F-I 和 M-I 结构下当 ZnO 膜厚

h_{ZnO}/λ 较小时, 其多晶 ZnO 的 K^2 却比单晶 ZnO 的要大. 通过与文献 [1] 实验数据的比较可以看到, 在图 5(a) 的 I-F 结构中, 实验数据与 s-ZnO/Dia 的计算结果符合得好一些; 而在图 5(c) 的 F-I 结构中, 实验结果却与 p-ZnO/Dia 的计算结果符合得更好.

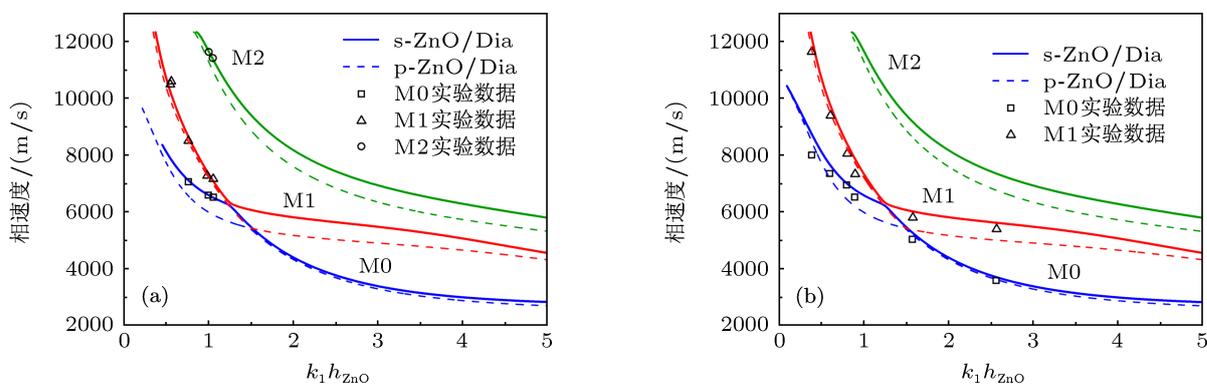


图 4 ZnO/Dia 在 (a) I-F 和 (b) F-I 结构下前三种声表面波模式的相速度 (s-ZnO: 单晶 ZnO; p-ZnO: 多晶 ZnO; Dia: 多晶金刚石)

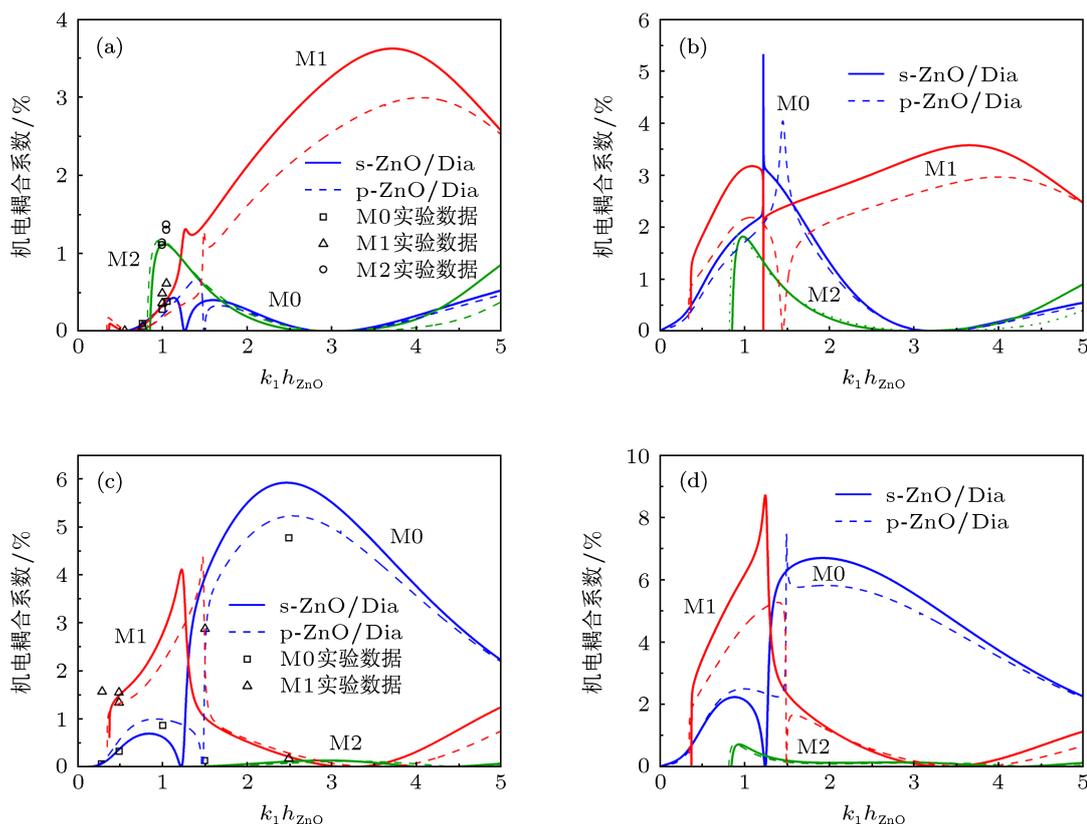


图 5 ZnO/Dia 在四种激励条件下前三种声表面波模式的机电耦合系数 (a) I-F 结构; (b) I-M 结构; (c) F-I 结构; (d) M-I 结构

从图 4 和图 5 的比较中我们还注意到, 在 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.22$ (s-ZnO/Dia) 或 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.48$ (p-ZnO/Dia) 附近, 即 Rayleigh 波和 Sezawa 波相速度十分接近的区域, 其对应的 K^2 也变化得异常快 (特别是在 I-M 结构下). 为了探究其中的原因,

我们以 I-M 结构下的 s-ZnO/Dia 为例, 考察了其 Rayleigh 波和 Sezawa 波在该区域附近位移场的变化情况, 如图 6 所示, 图中 $|u_1|$, $|u_2|$ 和 $|u_3|$ 分别为声表面波位移矢量纵向 (x_1 方向) 分量、水平剪切 (x_2 方向) 分量和垂直剪切 (x_3 方向) 分量

的相对幅度, 由于 $|u_2|$ 始终为零, 而 u_1 和 u_3 相位相差 $\pi/2$, 所以声表面波位移矢量在 $x_1 - x_3$ 平面内形成椭圆偏振. 注意到随着 $k_1 h_{\text{ZnO}}$ 由 1.21 增大到 1.24, 其 Rayleigh 波位移矢量由纵向分量占主导的椭圆偏振态变化为由垂直剪切分量占主

导的椭圆偏振态, 而 Sezawa 波位移矢量的变化情况则与之相反, 特别是在 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.2263$ 附近时, 两种模式位移矢量的偏振态出现互换, 这可能是导致两者相速度十分接近及 K^2 异常变化的原因.

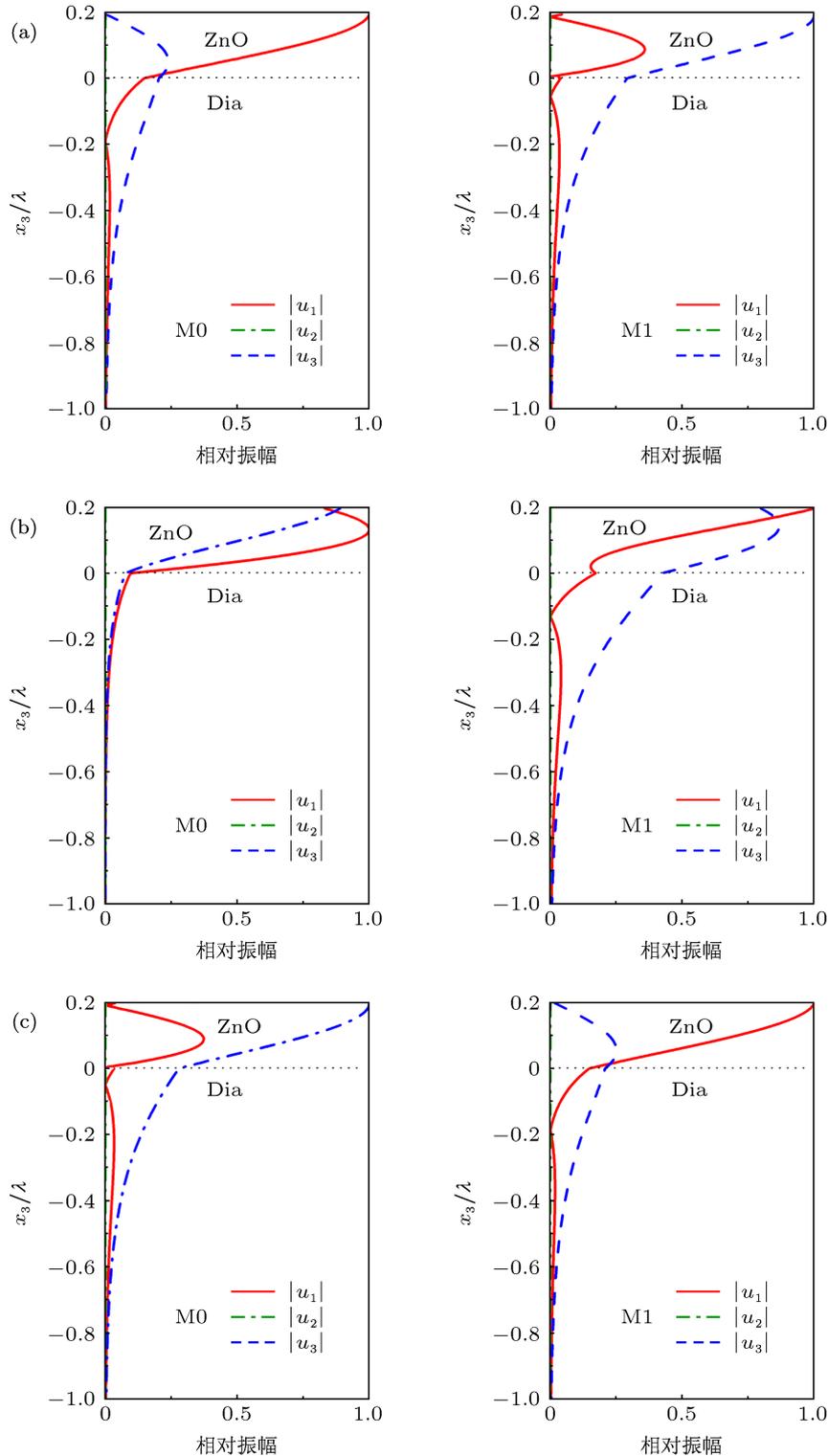


图 6 s-ZnO/Dia 在 I-M 结构下 Rayleigh 波 (M0) 与 Sezawa 波 (M1) 在不同 $k_1 h_{\text{ZnO}}$ 时位移场的变化 (a) $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.21$; (b) $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.2263$; (c) $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.24$

在应用 ZnO/Dia 基片设计声表面波器件时, ZnO 薄膜厚度 h_{ZnO} 的选择至关重要, 这不仅要考虑获得更大的机电耦合系数 K^2 和更高的声速 V_p , 还应尽量减小频散对器件特性的影响^[11,12], 从而降低器件制作过程中对工艺精度的要求, 对此我们需要从图 4 和图 5 中综合考虑上述因素.

首先看 Rayleigh 波 (M0), 从图 5 中注意到, 在 I-F, F-I 和 M-I 结构中, 机电耦合系数 K^2 存在两个峰值, 在前一个峰值处, 其对应于图 4 中的相速度较高, 而且频散也不大, 所以满足设计器件的要求. 而在 K^2 的后一峰值处, 虽然 K^2 可能很高 (如在 M-I 中为 6.7%), 但其对应的 V_p 却不大 (如 M-I 中为 4493 m/s), 这就失去了较传统单晶基片所具有的高声速优势. 在 I-M 结构中, 由于 K^2 在其峰值附近变化太快, 且对应的 V_p 频散很大, 所以在此很难制作出稳定可靠的器件. 但可以选择靠近 K^2 峰值的左侧进行设计, 因为此处 K^2 和 V_p 都较高, 而且 V_p 的频散也不大.

对于 Sezawa 波 (M1), 从图 4 中可以看到, 在 $k_1 h_{\text{ZnO}} < 1.0$ (或 $h_{\text{ZnO}} < 0.16\lambda$) 的高声速 (> 7000 m/s) 区域, 其对应于图 5 中 I-M, F-I 和 M-I 结构中的 K^2 也很大, 这虽然有利于高频器件的应用, 但 V_p 在此区域内的高频散特性, 也使器件制作工艺的难度增大. 在 $k_1 h_{\text{ZnO}} > 1.0$ (或 $h_{\text{ZnO}} > 0.16\lambda$) 的低声速区域, 虽然相速度不高, 但其频散也很小, 甚至优于 Rayleigh 波, 而且对应的 K^2 很高, 若在

K^2 峰值附近设计谐波器件, 也同样可以制作出高频器件^[33,34].

对于二次模 (M2), 从图 5 中可以明显看到, 其在 F-I 结构中的 K^2 很小 ($< 0.15\%$), 所以很难应用于实用器件. 而在 I-F, I-M 和 M-I 结构中, 其在 $k_1 h_{\text{ZnO}} = 1.0$ (或 $h_{\text{ZnO}} = 0.16\lambda$) 附近的 K^2 较高, 且对应于图 4 中的相速度大于 10000 m/s, V_p 的频散也适中, 若能控制好膜厚 h_{ZnO} 的精度, 有可能在此制作出较好的高频器件.

表 2 和表 3 总结了 s-ZnO/Dia 和 p-ZnO/Dia 在四种激励方式下前三种模式中较为适合制作器件的一些典型 ZnO 膜厚值 h_{ZnO} 、及其相应的相速度 V_p 、机电耦合系数 K^2 和 V_p 的频散大小, 其中 V_p 的频散值未见有文献给出过明确定义^[11,12], 本文则以 V_p 在中心频率 f 附近随膜厚 h_{ZnO} 的变化值 $d(V_p)/d(fh_{\text{ZnO}})$ 来表示, 其物理意义可以理解为: 当中心频率 $f = 1$ GHz 时, 实际制备的 ZnO 膜厚 h_{ZnO} 比理论设计值相差 1 nm 时 V_p 变化的大小. 由于 IDT 周期 λ 的单位通常为 μm , 所以当相速度 V_p 变化 1 m/s 时, 实际器件的中心频率将与理论设计值 f 相差约 $1/\lambda$ MHz. 实际上在 ZnO 薄膜/金刚石器件的制作过程中, ZnO 膜厚是最难掌控的参数, 一般都会与设计值存在一定的误差, 所以 V_p 的频散值对于多层结构器件的设计和制作具有重要的参考价值.

表 2 s-ZnO/Dia 在不同激励方式下前三种模式声表面波特性典型参数值

声波模式	激励方式	h_{ZnO}/λ	V_p /(m/s)	$K^2/\%$	$d(V_p)/d(fh_{\text{ZnO}})/[(\text{m/s})/(\text{GHz}\cdot\text{nm})]$
M0	I-F	0.18	6400	0.43	-1.71
	I-M	0.19	6304	2.2	-1.40
	F-I	0.14	6824	0.69	-2.76
	M-I	0.14	6816	2.23	-2.83
M1	I-F	0.58	5229	3.62	-0.74
	I-M	0.11	9045	2.45	-10.39
		0.58	5227	3.58	-0.77
	F-I	0.11	9133	1.84	-10.08
		0.20	6325	3.72	-4.18
M2	M-I	0.11	9132	4.59	-10.15
		0.20	6281	8.45	-5.13
	I-F	0.16	11644	1.12	-6.0
	I-M	0.16	11644	1.81	-6.0
	M-I	0.15	11929	0.72	-5.18

表3 p-ZnO/Dia 在不同激励方式下前三种模式声表面波特异性典型参数值

声波模式	激励方式	h_{ZnO}/λ	$V_p/(m/s)$	$K^2/\%$	$d(V_p)/d(fh_{ZnO})/[l(m/s)/(GHz\cdot nm)]$
M0	I-F	0.23	5465	0.67	-1.16
	I-M	0.22	5483	2.76	-1.40
	F-I	0.16	5986	0.99	-2.66
	M-I	0.16	5979	2.50	-2.74
M1	I-F	0.64	4649	2.99	-0.53
	I-M	0.12	8455	1.76	-9.68
		0.64	4647	2.96	-0.55
	F-I	0.10	9348	1.44	-9.25
		0.24	5428	1.98	-1.28
	M-I	0.10	9347	3.06	-9.23
M2		0.25	5353	1.66	-0.97
	I-F	0.16	11276	1.17	-8.7
	I-M	0.15	11695	1.86	-7.82
	M-I	0.14	12036	0.72	-6.03

最后要说明的是, 在常见的 Si 基金刚石膜晶片中, 金刚石膜厚 h_{Dia} 的选择也很重要. 对此有些文献认为 [1,14], 当 $k_1 h_{Dia} \geq 4$ (或 $h_{Dia}/\lambda \geq 0.64$) 时, ZnO/Dia/Si 中的声表面波能量将主要集中于 ZnO/Dia 层中而很难到达 Si 衬底. 为了验证这一结论, 我们计算了 F-I 结构下 s-ZnO/Dia/Si 中 Rayleigh 波在不同金刚石膜厚 h_{Dia} 时的传播损耗, 如图 7 所示, 当金刚石膜厚 h_{Dia} 有限且 $k_1 h_{ZnO} < 1.44$ 时, Rayleigh 波波速将超过硅衬底的慢剪切体波波速 (~ 5645 m/s), 所以其部分能量会通过与体声波的耦合而泄漏到 Si 衬底内部, 从而引起能量损耗, 实际上此时的声表面波已成为漏表面波. 对于漏表面波, 当其传播损耗小于 10^{-3} dB/ λ 时 [35], 其传播损耗对器件的影响就可以忽略. 若以此为标准对图 7 进行考察后会发现, 当 h_{ZnO}/λ 较小时, ZnO/Dia/Si 中的金刚石膜厚 h_{Dia} 至少应满足 $h_{Dia} \geq 2\lambda$ 才能忽略 Si 衬底的影响, 此时 ZnO/Dia/Si 中的声表面波特性与 ZnO/Dia 中的基本相同. 例如文献 [1] 中的实验数据虽然是在 ZnO/Dia/Si 基片上所测, 但由于其金刚石膜厚 $h_{Dia} = 20 \mu m$ [36], 测试器件的 IDT 周期 $\lambda = 6$ 或 $8 \mu m$ [1], 显然满足 $h_{Dia} > 2\lambda$, 所以其实实验数据与本文所计算的 ZnO/Dia 声表面波特异性结果符合得很好.

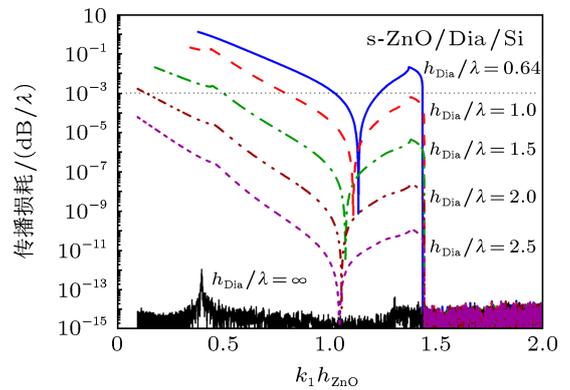


图7 s-ZnO/Dia/Si 在 F-I 结构下 Rayleigh 波在不同金刚石膜厚 h_{Dia} 时的传播损耗

4 结论

本文以刚度矩阵法为基础, 推导了 ZnO 薄膜/金刚石在 I-F, I-M, F-I 和 M-I 四种激励条件下的有效介电常数计算公式, 并以此为工具计算了多晶 ZnO(002) 薄膜/多晶金刚石和单晶 ZnO(002) 薄膜/多晶金刚石四种激励条件下声表面波模式的相速度和机电耦合系数频散曲线, 通过与相关文献中实验数据的比较, 验证了本文计算方法的有效性. 此外, 从计算结果的讨论和分析中发现: 1) 相比于声表面波的相速度, 其机电耦合系数对激励条件的不同和 ZnO 材料参数的差异都要敏感得多, 而且当

ZnO 膜厚较小时, 多晶 ZnO 中的 K^2 有可能比单晶 ZnO 中的大; 2) 在 Rayleigh 波和 Sezawa 波相速度十分接近的特殊区域, 其机电耦合系数也出现了快速变化的现象, 这可能与该区域附近两种模式位移偏振态的互换有关. 最后本文列出了 ZnO 薄膜/金刚石基片在四种激励方式下前三种声表面波模式

的一些典型声学参数, 如 ZnO 膜厚、相速度、机电耦合系数及相速度频散值等, 这些参数对于金刚石膜厚 $h_{\text{Dia}} \geq 2\lambda$ (λ 为叉指电极周期) 的 ZnO/金刚石/Si 晶片仍然适用, 所以对于高频金刚石声表面器件的设计和制作具有重要的参考价值.

- [1] Nakahata H, Higaki K, Fujii S, Hachigo A, Kitabayashi H, Tanabe K, Seki Y, Shikata S 1995 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **1** 361
- [2] Higaki K, Nakahata H, Kitabayashi H, Fujii S, Tanabe K, Seki Y, Shikata S 1997 *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* **44** 1395
- [3] Fujii S, Seki Y, Yoshida K, Nakahata H, Higaki K, Kitabayashi H, Shikata S 1997 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **1** 183
- [4] Guang Y, Santos P V 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3515 (in Chinese) [杨光, Santos P V 2007 物理学报 **56** 3515]
- [5] Pedrós J, Garcia-Gancedo L, Ford C, Barnes C, Griffiths J, Jones G, Flewitt A 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 103501
- [6] Fu Y, Garcia-Gancedo L, Pang H, Porro S, Gu Y, Luo J, Zu X, Placido F, Wilson J, Flewitt A 2012 *Biomicrofluidics* **6** 024105
- [7] Pan F, Luo J T, Yang Y C, Wang X B, Zeng F 2012 *Sci. China Tech. Sci.* **55** 421
- [8] Luo J, Zeng F, Pan F, Li H, Niu J, Jia R, Liu M 2010 *Appl. Surf. Sci.* **256** 3081
- [9] Luo J, Fan P, Pan F, Zeng F, Zhang D, Zheng Z, Liang G, Cai X 2012 *Phys. Status Solidi RRL* **6** 381
- [10] Luo J, Pan F, Fan P, Zeng F, Zhang D, Zheng Z, Liang G 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 172909
- [11] Hachigo A, Malocha D C 1998 *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect. Freq. Contr.* **45** 660
- [12] Wu T T, Chen Y Y 2002 *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect. Freq. Contr.* **49** 142
- [13] Wu T T, Chen Y Y, Chou T T 2002 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **1** 271
- [14] Nakahata H, Hachigo A, Higaki K, Fujii S, Shikata S, Fujimori N 1995 *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* **42** 362
- [15] Adler E L, Solie L 1995 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **1** 341
- [16] Campbell J J, Jones W R 1968 *IEEE Sonics and Ultrason.* **15** 209
- [17] Adler E L 1990 *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect. Freq. Contr.* **37** 485
- [18] Levent Degertekin F, Honein B, Khuri-Yakub B 1996 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **1** 559
- [19] Pastureaud T, Laude V, Ballandras S 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2544
- [20] Tan E L 2002 *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect. Freq. Contr.* **49** 929
- [21] Wang L, Rokhlin S L 2004 *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect. Freq. Contr.* **51** 453
- [22] Zhang V Y, Lefebvre J E, Bruneel C, Gryba T 2001 *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* **48** 1449
- [23] Milsom R F, Reilly N H C, Redwood M 1977 *IEEE Sonics and Ultrason.* **24** 147
- [24] Donghai Q, Wen L, Smith P M 1999 *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect. Freq. Contr.* **46** 1242
- [25] Smith P M 2001 *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect. Freq. Contr.* **48** 171
- [26] Peach R C 2006 *IEEE Ultrason. Symp.* Vancouver, BC, Oct. 2–6, 2006 p371
- [27] Chen Y Y, Hsu J C, Wu T T 2004 *J. Chin. Inst. Eng.* **27** 823
- [28] Hashimoto K 2000 *Surface acoustic wave devices in telecommunications: modelling and simulation* (Berlin: Springer) p165
- [29] Benetti M, Cannata D, Di Pictrantonio F, Verona E 2005 *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* **52** 1806
- [30] Carlotti G, Socino G, Petri A, Verona E 1987 *IEEE Ultrason. Symp.* Denver, Colorado, USA, Oct. 14–16, 1987 p295
- [31] Jaffe H, Berlincourt D A 1965 *Proc. IEEE* **53** 1372
- [32] Hachigo A, Nakahata H, Itakura K, Fujii S, Shikata S 1999 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **1** 325
- [33] Nakahata H, Hachigo A, Itakura K, Shikata S 2000 *IEEE Ultrason. Symp.* **1** 349
- [34] Morgan D 2007 *Surface acoustic wave filters* (2nd Edn.) (Oxford: Elsevier) p343
- [35] Shikata S, Nakahata H, Higaki K, Hachigo A, Fujimori N, Yamamoto Y, Sakairi N, Takahashi Y 1993 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **1** 277

Calculation and analysis of surface acoustic wave properties of ZnO film on diamond under different excitation conditions*

Qian Li-Rong¹⁾ Yang Bao-He^{1)2)†}

1) (School of Precision Instrument and Opto-electronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

2) (School of Electronic Information Engineering, Tianjin University of Technology, Tianjin Key Laboratory of Film Electronic and Communication Devices, Tianjin 300384, China)

(Received 8 January 2013; revised manuscript received 22 February 2013)

Abstract

In the last twenty years, the ZnO/diamond layered structure for surface acoustic wave (SAW) devices have been widely studied and have attracted great attention, due to its advantages of high acoustic velocity, high electromechanical coupling coefficient and high power durability. Distinguished from the conventional single-crystal substrate (such as quartz, lithium niobate), ZnO/diamond layered structure shows dispersive SAW properties, which can be excited by four ways: interdigital transducer (IDT)/ZnO/diamond, IDT/ZnO/shorting metal/diamond, ZnO/IDT/diamond, and shorting metal/ZnO/IDT/diamond. In this paper, the formulation based on the stiffness matrix method for calculating the effective permittivity of ZnO/diamond layered structure under four excitation conditions is given first. Then, by using this formulation, the SAW properties of the monocrystalline ZnO (002) film on polycrystalline diamond and the polycrystalline ZnO (002) film on polycrystalline diamond are calculated respectively. Based on the results of calculation, the ZnO film thicknesses qualified to design and fabricate SAW device are analyzed in detail. Finally, we discuss the function of diamond film thickness of ZnO/diamond/Si layered structure so as to avoid the influence of the silicon substrate on the SAW properties.

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

PACS: 77.65.Dq, 43.38.Rh, 68.35.Iv, 68.65.Ac

DOI: 10.7498/aps.62.117701

* Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2013AA030801), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50972105), the Key Technology Research and Development Program of Tianjin, China (Grant No. 10ZCK-FGX01200), and the Tianjin Key Program for Development of Science and Technology, China (Grant No. 10SYSYJC27700).

† Corresponding author. E-mail: bhyang@tjut.edu.cn