



УДК 534.22

А. Т. Галисултанов, А. В. Осетров

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ АКУСТИЧЕСКОЙ ВОЛНЫ В МНОГОСЛОЙНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ С МЕТАЛЛИЗАЦИЕЙ НА ИНТЕРФЕЙСЕ

Решена задача распространения поверхностной акустической волны вдоль границы многослойной пьезоэлектрической/диэлектрической структуры, состоящей из N слоев, расположенных на полубесконечной подложке с металлизацией на интерфейсе. Приведены примеры расчета такой структуры для слоя оксида кремния на кварце ST-Х среза. При толщине порядка 0.1λ коэффициент электромеханической связи практически постоянен и равен 0.033 %.

Скорость ПАВ, КЭМС, многослойные структуры, ST кварц, SiO₂

Актуальной задачей является разработка датчиков физических и химических величин на основе поверхностных акустических волн (ПАВ) [1]–[4]. Основными преимуществами таких датчиков являются беспроводной интерфейс, пассивность, работоспособность при жестких условиях эксплуатации. Для эффективного процесса разработки датчиков необходима возможность управления основными параметрами ПАВ (фазовой скоростью, коэффициентом электромеханической связи (КЭМС) и температурным коэффициентом задержки). Применение многослойных структур, состоящих из диэлектриков, пьезоэлектриков и металлов, решает эту проблему, а также позволяет повысить стойкость акустоэлектронных устройств к внешним воздействующим факторам.

Для решения задачи распространения ПАВ в анизотропных средах разработано несколько различных подходов, большинство из которых основано на матричном формализме [5]. Для определения свойств ПАВ в многослойных структурах используется метод переходных матриц (МПМ) [6], преимуществом которого является то, что сложность его не увеличивается при росте числа слоев. Этот метод широко распространен и применяется для решения широкого круга задач. В акустике его используют для моделирования процессов распространения звуковых колебаний через слоистую среду [7], [8], а в оптике – для изучения рассеяния электромагнитных волн на анизотропных метаматериалах [9].

Рассмотрим распространение ПАВ вдоль границы многослойной структуры, состоящей из N слоев, расположенных на полубесконечной подложке (рис. 1). Слои жестко связаны друг с другом, но могут содержать на своих интерфейсах металлические электроды, моделируемые как бесконечно тонкие металлические пленки. Наличие внутренних металлических электродов является особенностью рассматриваемой задачи. Систему координат выбираем так, чтобы ось x_1 совпадала с направлением распространения ПАВ, а ось x_3 была противоположна направлению затухания ПАВ. Материал подложки и каждого слоя в общем случае является анизотропным диэлектриком или пьезоэлектриком и описывается тензорами упругих $c_{ijkl}^{(p)}$, пьезоэлектрических $e_{ijl}^{(p)}$, диэлектрических $\varepsilon_{ij}^{(p)}$ констант, плотностью $\rho^{(p)}$, где $i, j, k, l = 1, 2, 3$ соответствуют координатным индексам, $p = 0, 1, \dots, N$ – индекс подложки ($p = 0$) или слоя $p > 0$, отсчитываемый от подложки. Каждый слой имеет толщину $h^{(p)}$, которая может варьироваться от слоя к слою. Заметим, что тензоры материальных констант $c_{ijkl}^{(p)}$, $e_{ijl}^{(p)}$, $\varepsilon_{ij}^{(p)}$ записываются далее в статье в системе координат рассматриваемой задачи (рис. 1), хотя в справочной литературе они представлены в системе координат, связанной с кристаллографическими осями; для выполнения перерасчета достаточно знать углы Эйлера $(\lambda^{(p)}, \theta^{(p)}, \mu^{(p)})$ [10], описывающие координатные преобразования для каждого материала.

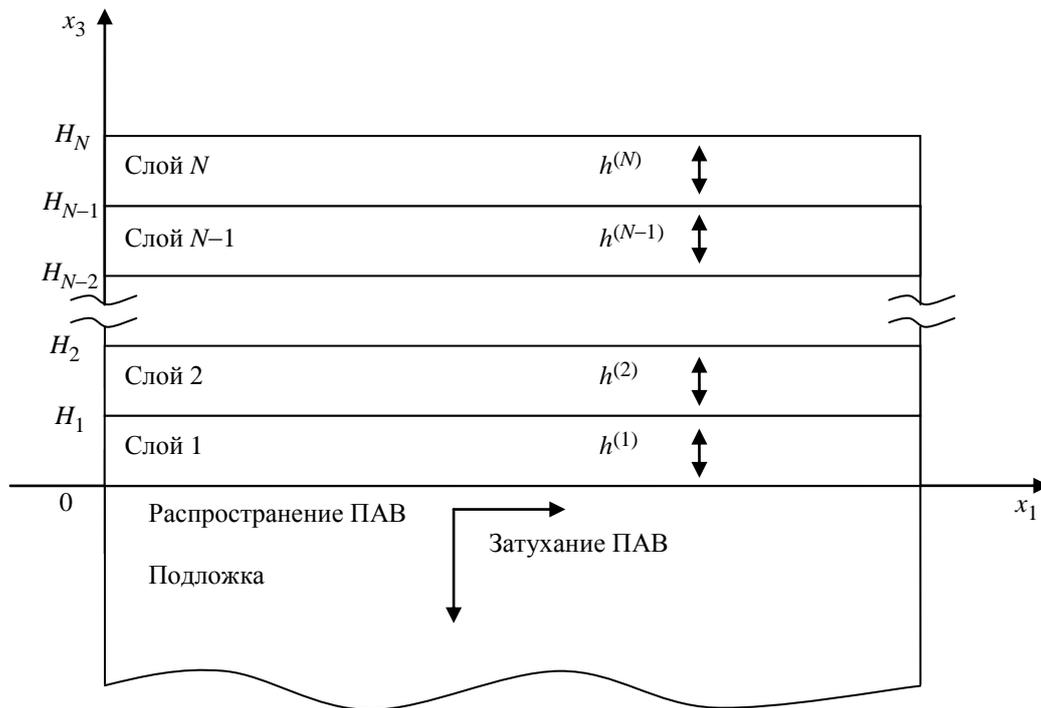


Рис. 1

ПАВ ищем в виде линейной комбинации парциальных решений, каждое из которых можно записать в следующем обобщенном виде с выделением функции, описывающей распределение поля ПАВ по глубине, и множителя, не зависящего ни от номера парциального решения, ни от физической величины и определяющего волну, распространяющуюся в направлении x_1 с угловой частотой ω и волновым числом k :

$$f(x_1, x_2, x_3) = f(x_3) \exp[j(\omega t - kx_1)], \quad (1)$$

где f – любая из физических величин, описывающих волну; предполагается, что зависимость параметров волны от координаты x_2 отсутствует ($df/dx_2 = 0$).

Для каждого слоя и подложки можно записать систему дифференциальных уравнений пьезоакустики [5] по отношению ко времени t и пространственным координатам x_i :

$$\begin{aligned} \rho^{(p)} \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} - c_{ijkl}^{(p)} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} - e_{kij}^{(p)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_k} &= 0; \\ e_{ikl}^{(p)} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} - \varepsilon_{ik}^{(p)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_k} &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Решаем задачу методом переходных матриц [6]. Исторически [6] вектор переменных, обеспечивающий автоматическое выполнение граничных условий между слоями, принято записывать в следующем виде:

$$\tau = [T_{13}, T_{23}, T_{33}, D_3, j\omega u_1, j\omega u_2, j\omega u_3, j\omega \varphi]^T, \quad (3)$$

добавляя множитель $j\omega$ перед механическими смещениями и электрическим потенциалом, что позволяет выделить частоту в конечном решении в виде отдельного множителя.

Теперь рассмотрим граничные условия для задачи, в которой жестко связанные друг с другом слои содержат на своих интерфейсах бесконечно тонкие металлические электроды. При наличии электродов между слоями с индексами p и $(p+1)$ механические граничные условия не изменяются по отношению к стандартному МПМ, электрические граничные условия трансформируются в следующее равенство нулю электрического потенциала:

$$\varphi^{(p)} = \varphi^{(p+1)} = 0. \quad (4)$$

Потенциал на данной границе обращается в ноль, поскольку металлический слой образует эквипотенциальную поверхность, а единственное значение потенциала, не зависящее от координаты x_1 при распространении волны вида (1), – ноль. Заметим, что выражение (4) включает сразу два граничных условия: равенство потенциала с двух сторон интерфейса и равенство этого потенциала именно нулю. Слой металлизации приводит к появлению свободных зарядов на интерфейсе и к разрыву нормальной компоненты вектора электрической индукции D_3 :

$$D_3^{(p+1)} - D_3^{(p)} = \sigma^{(p)}, \quad (5)$$

где $\sigma^{(p)}$ – поверхностная плотность заряда на границе раздела слоев.

Подстановка решений вида (1) в систему уравнений (2) приводит к системе из 8 дифференциальных уравнений первого порядка, которая определяет вектор переменных τ для каждого слоя:

$$\frac{d\tau}{dx_3} = \Gamma^{(p)} \tau, \quad (6)$$

где матрица $\Gamma^{(p)}$ с размерами 8×8 для слоя p имеет следующий вид [6]:

$$\Gamma^{(p)} = j\omega \begin{bmatrix} \Gamma_{13}^{(p)} \left(\Gamma_{33}^{(p)} \right)^{-1} / v_p & \left(\Gamma_{13}^{(p)} \left(\Gamma_{33}^{(p)} \right)^{-1} \Gamma_{31}^{(p)} - \Gamma_{11}^{(p)} \right) / v_p^2 + \rho_0 \\ \left(\Gamma_{33}^{(p)} \right)^{-1} & \left(\Gamma_{33}^{(p)} \right)^{-1} \Gamma_{13}^{(p)} / v_p \end{bmatrix}. \quad (7)$$

В выражении (7) $v_p = \omega/k_1$ – фазовая скорость ПАВ, а ρ_0 с размерами 4×4 – матрица, в которой три первых элемента на главной диагонали равны единице, а все остальные элементы равны нулю. Матрицы $\Gamma_{ij}^{(p)}$ с размерами 4×4 имеют следующий вид:

$$\Gamma_{ij}^{(p)} = \begin{bmatrix} c_{1i1j}^{(p)} & c_{1i2j}^{(p)} & c_{1i3j}^{(p)} & e_{jli}^{(p)} \\ c_{2i1j}^{(p)} & c_{2i2j}^{(p)} & c_{2i3j}^{(p)} & e_{j2i}^{(p)} \\ c_{3i1j}^{(p)} & c_{3i2j}^{(p)} & c_{3i3j}^{(p)} & e_{j3i}^{(p)} \\ e_{i1j}^{(p)} & e_{i2j}^{(p)} & e_{i3j}^{(p)} & -\varepsilon_{ij}^{(p)} \end{bmatrix}.$$

Решением уравнения (6) при отсутствии внутренних металлических электродов является обычная матричная экспонента. Если принять за $x_3 = 0$ границу подложки и первого слоя и обозначить $H_i = h^{(1)} + h^{(2)} + \dots + h^{(i)}$ суммарную толщину i слоев, для вектора τ можно записать следующее тождество:

$$\tau(H_p) = \exp(\Gamma^{(p)} h^{(p)}) \tau(H_{p-1}), \quad (8)$$

представляющее собой формулу перерасчета поля с нижней на верхнюю границу слоя. Уравнение (8) представляет собой классическое решение для метода переходных матриц, а матрица $\exp(\Gamma^{(p)} h^{(p)})$ называется переходной матрицей слоя p . Таким образом, зная поле на самом нижнем интерфейсе (на границе подложки и первого слоя, $x_3 = 0$), можно с использованием (8) рассчитать поле в любом вышележащем слое, при $x_3 > 0$. Остается определить поле в подложке, при $x_3 < 0$.

Обозначим через вектор α собственные значения, а через \mathbf{X}_α матрицу собственных векторов матрицы $\Gamma^{(0)}$. Вектор переменных τ в нижнем полупространстве можно записать в следующем виде:

$$\tau = \sum_{i=1}^8 w_i \tau_i = \sum_{i=1}^8 w_i \mathbf{X}_{\alpha_i} e^{\alpha_i x_3}. \quad (9)$$

Здесь τ_i называются парциальными решениями; w_i – весовые коэффициенты для каждого парциального решения, определяемые в последующем из граничных условий.

В такой постановке задачи неизвестными являются 8 весовых коэффициентов w_i для каждого известного парциального решения τ_i . В случае полубесконечной подложки половина парциальных решений должна быть исключена из дальнейшего рассмотрения на основании физической модели задачи. В результате формула (9) на границе подложки и 1-го слоя примет вид

$$\tau|_{x_3=0} = \sum_{i=1}^4 w_i \mathbf{X}_{\alpha_i}. \quad (10)$$

Вектор переменных (3) при переходе от слоя к слою будет непрерывным по всем переменным, кроме четвертой переменной D_3 , терпящей разрыв при наличии металлического слоя в соответствии с (5). Таким образом, при использовании МПМ можно автоматически удовлетворить на одно граничное условие меньше для каждого интерфейса с металлическим слоем или всего на n граничных условий меньше для всей слоистой системы (рис. 1), где n – число металлических слоев внутри многослойной структуры. Соответственно, число неизвестных весовых множителей w_i в решении (10) должно быть на n больше, чтобы в дальнейшем удовлетворить всем граничным условиям.

Обобщим решение (10) для подложки как

$$\tau|_{x_3=0} = \sum_{i=1}^{4+n} w_i \mathbf{X}_{\alpha_i}, \quad (11)$$

где векторы \mathbf{X}_{α_i} задаются нулевыми, т. е. $\mathbf{X}_{\alpha_i} = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]^T$, при $i > 4$. Уравнение (11) тождественно уравнению (10), но формально содержит на n больше парциальных решений, которые будут задействоваться при использовании МПМ для слоев с внутренними электродами. Процедура пересчета поля через слой при отсутствии слоев металлизации не изменяется, так как нулевые векторы \mathbf{X}_{α_i} ничего не добавляют к решению.

Учет межслойной металлизации можно ввести модификацией нулевых векторов $\mathbf{X}_{\alpha_i}^{(N)}$. При первом переходе вектора переменных через слой металлизации на границе раздела двух слоев с индексами p и $(p+1)$ вводится разрыв четвертой компоненты вектора переменных заменой нулевого вектора $\mathbf{X}_{\alpha_5}^{(p)}$ вектором следующего вида:

$$\mathbf{X}_{\alpha_5}^{(p)} = [0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]^T. \quad (12)$$

Таким образом, к вектору D_3 (четвертая компонента вектора переменных) добавляется величина, определяемая весовым множителем w_5 и физически соответствующая поверхностной плотности заряда. В дальнейшем процедура пересчета поля через слои диэлектрика при отсутствии слоев металлизации не изменяется. При переходе вектора переменных через слой металлизации, разрыв значения четвертой компоненты вектора переменных вводится аналогично выражению (12), но уже для следующего нулевого вектора.

Для механически свободной границы (граница с вакуумом) – равенство нулю сил. Электрическое граничное условие на внешней границе с вакуумом заключается в непрерывности нормальной компоненты вектора индукции электрического поля D_3 для открытой поверхности и условие непрерывности (равенству нулю) потенциала для короткозамкнутой поверхности.

Использование граничных условий на верхней поверхности последнего слоя и дополнительных граничных условий, число которых соответствует числу слоев металлизации n , а именно равенству нулю электрического потенциала на металлическом интерфейсе, согласно (4) формирует систему линейных алгебраических уравнений, составленную из компонент матрицы $\mathbf{X}_{\alpha_i}^{(b_m)}$, где b_m – номер слоя, на котором расположен m -й слой внутренней металлизации, и $\mathbf{X}_{\alpha_i}^{(N)}$:

$$\mathbf{Q} \cdot [w_1, w_2, \dots, w_{4+n}]^T = 0. \quad (13)$$

Для случая свободных от металлизации внутренних границ $n = 0$. Матрицу \mathbf{Q} называют матрицей граничных условий. Для существования нетривиального решения (13) необходимо, чтобы определитель матрицы граничных условий был равен нулю:

$$\det[\mathbf{Q}] = 0. \quad (14)$$

Алгоритм нахождения скоростей ПАВ строится на поиске нулевого значения определителя в (14) заданием различных значений фазовой скорости v_p , входящих в формулу (7) внутри некоторого диапазона. Значение v_p , обращающее определитель в ноль, является искомой фазовой скоростью поверхностной акустической волны. При наличии слоев фазовая скорость будет зависеть от частоты, т. е. будет наблюдаться дисперсия.

Предложенный алгоритм расчета был реализован в программе для расчета параметров ПАВ. С использованием данной программы проведен расчет скорости ПАВ для случая слоя оксида кремния на поверхности кварца ST-X среза. Использование слоя оксида кремния позволяет защищать топологию встречно-штыревого преобразователя (ВШП) от загрязнения и, соответственно, от ухудшения характеристик акустоэлектронного устройства.

На рис. 2 приведены четыре граничных условия для структур со свободными и металлизированными границами.

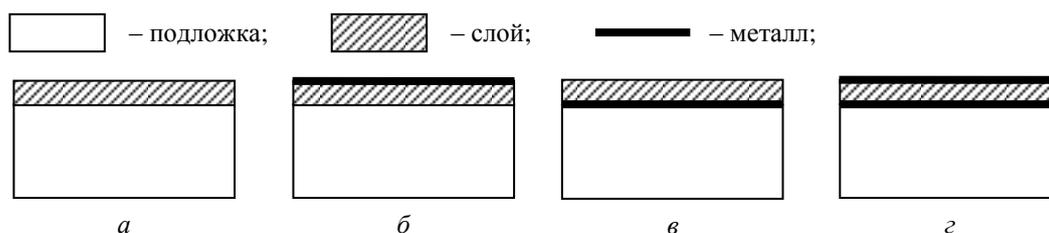


Рис. 2

Зависимость скорости ПАВ от толщины пленки оксида кремния на кварце ST-X среза для граничного условия типа *a* (рис. 2) приведена на рис. 3 (для остальных вариантов кривая скорости меняется незначительно).

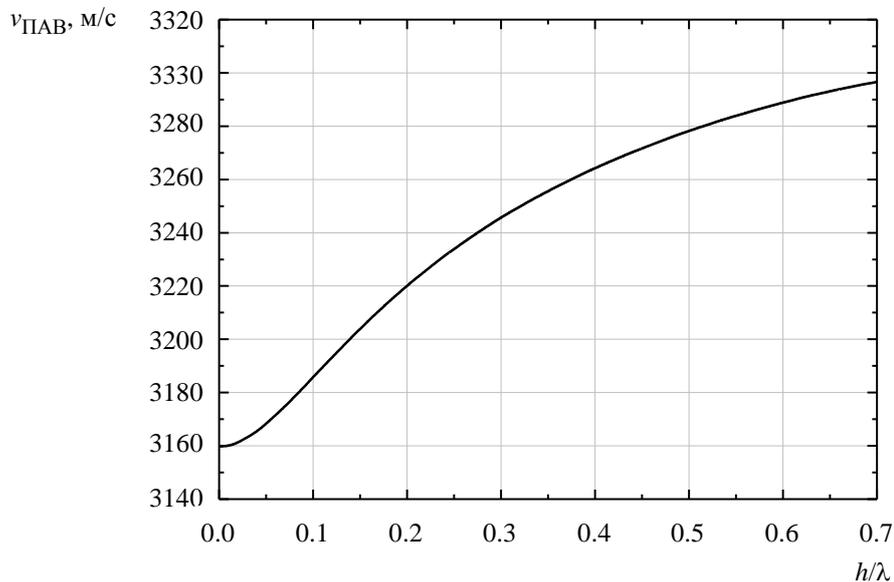


Рис. 3

Эффективность возбуждения ПАВ при использовании ВШП как способа возбуждения и приема ПАВ определяется степенью отличия скоростей ПАВ при наличии и отсутствии металлизации в месте расположения ВШП, при этом КЭМС оценивался по формуле $K^2 \approx 2\Delta v/v$. Электроды на рис. 4 показаны условно, под этим понимается наличие двух конфигураций, по которым рассчитывается КЭМС.

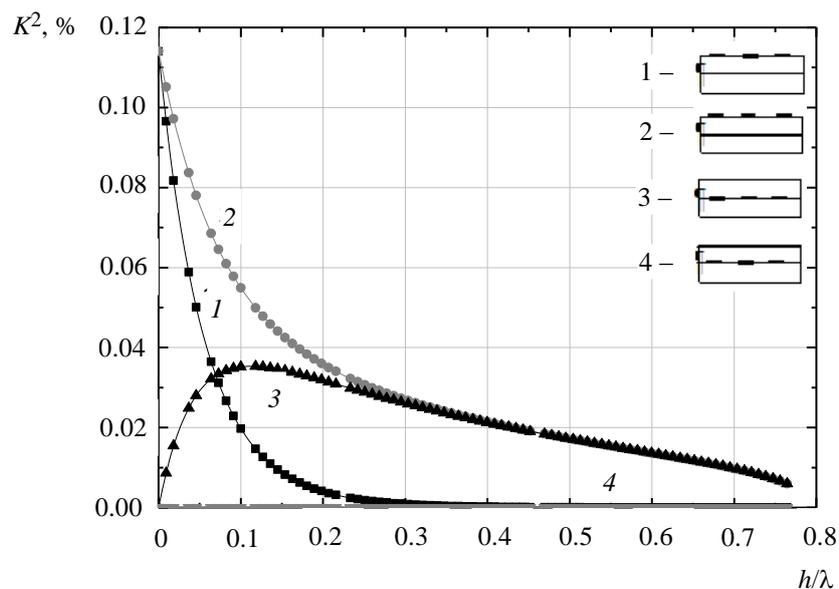


Рис. 4

Зависимость коэффициента электромеханической связи ПАВ от толщины пленки оксида кремния на кварце ST-X среза для различных конфигураций электродов приведена на рис. 4. Скорость ПАВ незначительно возрастает при увеличении толщины пленки оксида кремния, при этом значение КЭМС резко падает. Для случая 4 (рис. 4) возбуждения ПАВ не происходит вообще, поскольку слой пьезоэлектрика изолирован от ВПП экранирующим металлическим слоем. Интерес для практического использования представляет третий случай. Для него в достаточно широком диапазоне толщин КЭМС практически постоянен, хотя и мал (0.033 %).

Предложена модификация метода переходных матриц, позволяющая находить решения вида ПАВ для случая многослойных пьезоэлектрических структур на полубесконечной подложке с металлизированными границами. С помощью данного подхода численно исследована дисперсия фазовой скорости ПАВ в слоистой структуре SiO₂ на кварце ST-X среза для различных конфигураций электродов. Данная структура перспективна как для создания элементов частотной селекции (фильтров, резонаторов, линий задержек), так и для разработки на ее основе датчиков физических величин (давления, температуры, деформации и силы).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Новиков В. Новые направления создания перспективных изделий на ПАВ и ОАВ // Электроника: наука, технология, бизнес. 2008. Спецвып. С. 52–55.
2. Theory and application of passive SAW radio transponders as sensors / L. Reindl, G. Scholl, T. Ostertag et al. // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr. 1998. Vol. 45. P. 1281–1292.
3. Моделирование тонкопленочных структур при построении микроакселерометра на поверхностных акустических волнах / Д. П. Лукьянов, С. Ю. Шевченко, Е. П. Филиппова и др. // Изв. СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2012. Вып. 8. С. 84–92.
4. Акустоэлектронные датчики силы в системах безопасности гидроагрегатов ГЭС / А. Т. Галисултанов, С. В. Дзюбаненко, В. С. Игнатьев и др. // Нано- и микросистемная техника. 2012. № 8. С. 25–28.
5. Morgan D. Surface Acoustic Wave Filters. Elsevier, 2007. 448 p.
6. Adler E. L. Matrix methods applied to acoustic waves in multilayers // IEEE Trans. on Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr. 1990. Vol. 37, № 6. P. 485.
7. Курочкин В. Е., Шарфарец Б. П. Резонансы в системе пьезоэлектрический излучатель – многослойная ультразвуковая камера с потерями // Акустический журн. 2009. Т. 55, № 6. С. 853–860.
8. Rhazi D., Atalla N., A simple method to account for size effects in the transfer matrix method // J. Acoust. Soc. Am. 2010. № 127-2. P. 30–36.
9. Hao J., Zhou L. Electromagnetic wave scatterings by anisotropic metamaterials: Generalized 4×4 transfer-matrix method // Phys. Rev. 2008. B 77. P. 094201.
10. Royer D., Dieulesaint E. Elastic Waves in Solids I. Springer, 2000. 374 p.

A. T. Galisultanov, A. V. Osetrov

SURFACE ACOUSTIC WAVES PROPAGATION IN THE CASE OF MULTILAYER DIELECTRIC STRUCTURES WITH METALLIZED INTEFACE

We solved the problem of propagation of surface acoustic wave (SAW) along a multilayer piezoelectric/dielectric structure, which consist of N layers located on a semi-infinite substrate with metallic borders. Calculation for the silicon oxide layer on quartz ST-X cut is presented. With a thickness of about 0.1h/λ electromechanical coupling coefficient remain stable and equal to 0.033%.

SAW velocity, coupling, multilayer structure, ST quartz, SiO₂