$ZnO-SiO_2-Si$ 结构中压电薄膜 C 轴取向等参数对声表面波的影响

邓明晰

（后勤工程学院物理教研室　重庆　630042）

1995 年 12 月 8 日收到

摘要　当 ZnO-SiO_2-Si 结构中的 ZnO 薄膜 c 轴取向偏离基片法向时，将对声表面波传播速度、机电耦合系数等参量产生影响，本文对此问题进行了理论分析和数值计算；同时还讨论了本结构中影响声表面波束偏的一些参数.

关键词　ZnO 薄膜，*c* 轴取向，声表面波，束偏

The effects of the c-axis orientation of the ZnO film and other parameters in ZnO-SiO_2-Si layered structure on SAW

Deng Mingxi

(*Logistical Engineering University*, *Chongqing*, **630042**)

Abstract　The important parameters of SAW devices, the SAW velocity and the mechanico-electrical coupling coefficient, will be affected by the c-axis orientation of ZnO film in a ZnO-SiO_2-Si layered structure. In the present paper, the problem is studied theoretically. Moreover, beamsteering of SAW is also investigated for the layered structure.

Key words　ZnO film, C-axis orientation, Surface acoustic wave, Beamsteering

1　引言

随着声表面波器件应用的不断发展，对基片材料的性能指标提出了越来越高的要求，已有研究结果表明，单靠一种材料来实现基片的高性能指标显得比较困难[1]. 为此，有作者从另一途径出发，即寻求多种材料的适当组合，得到高机电耦合系数、高温度稳定性的材料结构，以满足各种实际需要.

目前常见的方法有两种，一种是在压电基片上蒸镀一层非压电薄膜，如在 YZ-$LiNbO_3$ 或 YZ-$LiTaO_3$ 基片上蒸一层 SiO_2 膜；另一种方法是在非压电基片上生长压电薄膜[2]，其结构包括：Al_2O_3-ZnO-Si、ZnO-Al_2O_3-Si 和 ZnO-SiO_2-Si 等，实际应用中的单片式声表面波存储相关卷积器大多采用 ZnO-SiO_2-Si 结构[3][4]. 对后一种方法，在理想情况下，要求压电薄膜的 c 轴取向与基片法线方向保持一致，而实际

生长过程中这两个方向不可避免地存在一定偏离，研究这种偏离对声表面波性质产生的影响在器件的设计过程中有其实际意义. 此外，由于衬底材料的各向异性，需考虑声表面波的束偏性质. 文献[7]讨论了 ZnO-SiO_2-Si 结构中 ZnO 和 SiO_2 取不同归一化厚度，且衬底 Si 取不同晶面时的表面波相速、机电耦合系数和温度系数. 本文在此基础上，进一步分析并计算了 ZnO 薄膜 c 轴取向对声表面波性质的影响，得到决定声表面波器件性能的两个重要参数—机电耦合系数和声表面波相速—随 c 轴偏离基片法向角度的变化关系；同时还讨论了当 ZnO 和 SiO_2 的归一化厚度取不同值时，在衬底 Si 常取的三个晶面(001)、(011)和(111)上，声表面波的束偏性质.

2 理论

采用 ZnO-SiO_2-Si 结构的声表面波器件中，叉指换能器位置有图 1 所示的 4 种方式，实际器件制作大多采用图 1(d)方式，原因在于在 SiO_2 表面蒸参考电极可给 ZnO 生长提供一个平面，以改善其 c 轴取向，提高机电耦合系数和减少直通信号[4]. 本文针对图 1(d)结构进行有关讨论，其他 3 种结构的分析有类似之处，只是边界条件有所不同. 对图 1(d)结构建立坐标见图 1.

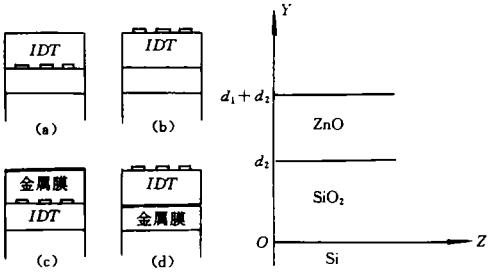

图 1 ZnO-SiO_2-Si 结构中叉指换能器的 4 种位置及坐标系

涉及压电体的耦合波方程为[6]：

$$\begin{cases} \rho \dfrac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} - C_{ijkl} u_{k,ij} = e_{ijk} \phi_{ik}, \\ \varepsilon_{ij} \phi_{ij} = e_{ijk} u_{k,ij} \end{cases} \tag{1}$$

其中 C、e 和 ε 分别为压电体的弹性常数、压电常数和介电常数. 基本方程中 $j=1$、2、3，对应于三个坐标轴(x，y，z)的取向. 解的形式一般设为：

$$\begin{cases} u_j \exp[j(\alpha k y + kz - \omega t)] & (2\,a) \\ \phi \exp[j(\alpha k y + kz - \omega t)] & (2\,b) \end{cases}$$

涉及非压电体的波动方程为：

$$\rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} - C_{ijkl} u_{k,il} = 0, \tag{3}$$

其解为式(2 a).

下面就图 1(d)结构不同区域中波动方程的解进行有关说明[7].

(1) 区域 1($y > d_1 + d_2$)

该区域为真空或气体介质，可假定叉指换能器不向此区域辐射声能量，仅存在一衰减电势(满足方程：$\nabla^2 \phi = 0$).

(2) 区域 2($d_2 < y \leqslant d_1 + d_2$)

该区域对应介质为压电体 ZnO，应满足方程(1)，将式(2)代入基本方程，一般地可解得 α 的 8 个根，将这 8 个根分为两组，一组对应声波沿 y 轴正向传播，另一组对应声波沿 y 轴负向传播，即声波在 ZnO 薄膜的两个界面来回反射并同时沿水平方向(z 轴方向)传播，一个根对应一个特征矢量，共有 8 个特征矢量，待定参数个数也为 8.

(3) 区域 3($0 < y \leqslant d_2$)

该区域对应各向同性介质 SiO_2，将式(2 a)代入方程(3)中，一般地可解得 α 的 6 个根，也可将这 6 个根分为两组，一组对应声波沿 y 轴正向传播，另一组对应声波沿 y 轴负向传播，此时声波在 SiO_2 薄膜的两个界面来回反射并同时沿水平方向(z 轴)传播，一个根对应一个特征矢量，共有 6 个特征矢量，待定参数个数为 6.

(4) 区域 4($y \leqslant 0$)

该区域对应介质为半导体 Si，也应满足方程(3)，只是此时仅应考虑沿下半平面($y<0$)传播的声波，α 取值为对应声波沿 y 轴负向传播的一组值，根据所设定的解的形式(2 a)，沿下半平面传播声波的 α 取值应遵循如下原则，α 为实数时取负值，α 为复数时其虚部取负值，此时应有 3 个特征矢量(对应两个横波和一个纵波)，3 个待定参数.

以上(3)，(4)的分析未引入电势，原因在于在界面 $y=d_2$ 处蒸有参考电极. 4 个区域共有待定参数 18 个和 3 个界面，每个界面处边界条件如下[6]：

$$y=0,\begin{cases} u_i^{(3)}-u_i^{(4)}=0 \\ \qquad\qquad\qquad i=x,y,z, \\ T_{yi}^{(3)}-T_{yi}^{(4)}=0, \end{cases} \tag{4}$$

$$y=d_2,\begin{cases} u_i^{(2)}-u_i^{(3)}=0 \\ T_{yi}^{(2)}-T_{yi}^{(3)}=0, i=x,y,z, \\ \phi^{(2)}=0 \end{cases} \tag{5}$$

$$y=d_1+d_2,\begin{cases} T_{yi}^{(2)}=0 \\ \phi^{(1)}-\phi^{(2)}=0, i=x,y,z, \\ D_y^{(1)}-D_y^{(2)}=\sigma \end{cases} \tag{6}$$

在上述各式中，上标(j)($j=1$、2、3 和 4)对应各个不同区域，边界条件方程共 18 个，恰好可唯一确定出各个区域的待定参数.

为计算方便起见，引入表面有效介电常数，其定义如下[5]：

$$\varepsilon_{eff}(k)=\frac{\sigma(k)}{|k|\phi(k)_{y=d_1+d_2}} \tag{7}$$

式中的 $\sigma(k)$、$\phi(k)$分别为表面电荷 σ、表面电势 ϕ 的傅氏变换，k 为波矢沿 z 轴向的分量，且有 $k=\omega s$，ω 为圆频率，s 为声传播速度沿 z 轴分量的倒速度(表面慢度).

有关 $\varepsilon_{eff}(k)$的计算方法在文献[5]中已有介绍，这里就不再赘述. 由于本文讨论对象所涉及的界面不只一个，声波的传播速度与层厚和 z 轴向波矢 k 之乘积(归一化厚度)有关，即声波具有色散性质. 当 s 等于 $s_j^{(i)}$ 时、$\varepsilon_{eff}(k)$取值为零，这里 $s_j^{(i)}$ 对应的速度 $V_j^{(i)}$ 是自由表面上的声传播速度；当 s 等于 $s_m^{(i)}$ 时，$\varepsilon_{eff}(k)$取值 ∞，这里 $s_m^{(i)}$ 对应的速度 $V_m^{(i)}$ 是金属化表面上的声传播速度. i 取 1 时，对应声波即是所谓的瑞利波，i 为 2 时，即是 Sezawa 波[8]. 当 ZnO 薄膜或 SiO_2 层的归一化厚度小于某一值时，仅有瑞利波存在；只有当归一化厚度大于一定值时，才有 Sezawa 波存在. 一个典型的 $\varepsilon_{eff}(k)$计算曲线如图 2 所示，其衬底为 Si(001)，声波传播方向沿 Si<100>.

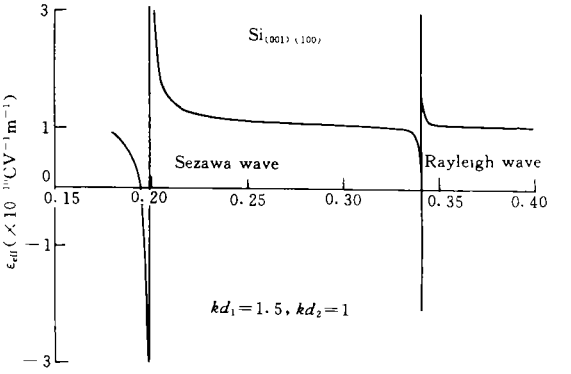

图 2　图 1(d)结构的一条典型表面有效介电常数曲线

一般地，对于各向异性的基片，声表面波的传播方向与声能流方向是不一致的，这种现象称为束偏，通常以声表面波能流方向与声表面波传播方向之间的夹角 Φ 来对其进行描述(见图 3). 当波束宽度有限时，束偏将对表面波器件产生较大影响. 对于本文讨论的 ZnO-SiO_2-Si 结构，当 ZnO 薄膜 c 轴方向与基片的法向一致时，在 xz 面内 ZnO 呈各向同性(见图 3)，此时整个结构的各向异性来源于衬底材料 Si，同时也与 ZnO、SiO_2 的归一化厚度有关.

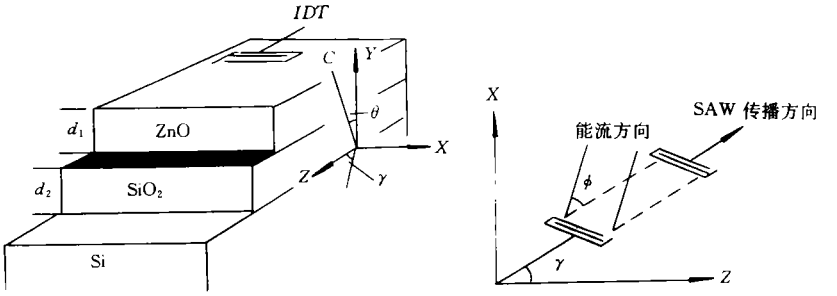

图 3　ZnO-SiO_2-Si 结构中 c 轴偏离基片法向及声表面波的束偏

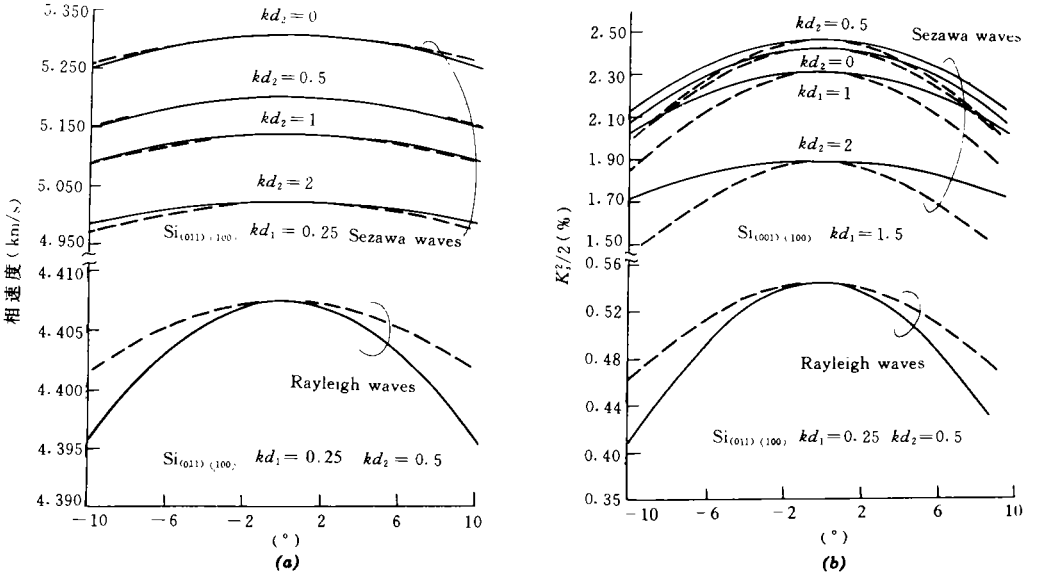

图 4　相速和机电耦合系数随 ZnO 薄膜 c 轴偏离基片法向角度的变化曲线

(a) 相速；(b) 机电耦合系数

若以 $V(\gamma)$ 表示声表面波在某一传播方向上的相速(γ 为声表面波传播方向，见图 3)，束偏角可由下式求得，

$$\tan\Phi = \frac{1}{V(\gamma)}\frac{dV(\gamma)}{d\gamma}, \qquad (8)$$

式(8)中的 $V(\gamma)$ 与 Si 的晶面取向、ZnO 和 SiO 的归一化厚度值都有关.

3　数值计算

从前面理论分析可知，要讨论 ZnO 薄膜 c 轴取向对声表面波性质产生的影响，以及要研究分层结构的束偏性质，首先应在分层结构参数确定的条件下(即 ZnO、SiO_2 的归一化厚度 kd_1、kd_2 和衬底 Si 的晶面取向等参数已知)，求解出自由化表面和金属化表面的声表面波传播速度与 c 轴取向(图 3 中 θ)及声表面波传播方向(图 3 中 γ)的关系曲线，即求得 $V_f^{(t)}(\theta)$、$V_m^{(t)}(\theta)$ 和 $V_f^{(t)}(\gamma)$、$V_m^{(t)}(\gamma)$，而这些物理量都可由计算 $\varepsilon_{eff}(k)$ 得到. 据此可知，计算 $\varepsilon_{eff}(k)$ 就是整个问题的关键. 文献[5]涉及到一个界面情形的 $\varepsilon_{eff}(k)$ 计算，本文讨论的分层结构有三个界面，式(4- 6)的待定参数与方程个数均为 18，代入式(7)可唯一求解 $\varepsilon_{eff}(k)$，只是与[5]相比，计算过程显得复杂一些，但方法与[5]完

全一样.

实际计算的有关材料参数取自文献[7]，为检验所编程序的正确性，曾对文献[7—8]提及的某些情形作了计算比较，发现是一致的，由此证明本文所编程序的正确性.

对于图 3 所示的分层结构，本文针对文献[7—8]中所给与机电耦合系数峰值对应的有关参数，讨论 ZnO 薄膜的 c 轴偏离基片法向时，相速、机电耦合系数 K_s^2 随 c 轴偏离基片法向角度 θ(见图 3)的变化关系. 在图 3 中，瑞利波和 Sezawa 波的相速、机电耦合系数随 c 轴偏离角 θ 的变化曲线分别如图 4 a、图 4 b 所示，图 4 中实线表示 c 轴在 yz 面内偏离基片法向±10°，虚线表示 c 轴在 xy 面内偏离基片法向±10°.

为讨论 ZnO-SiO_2-Si 结构的声表面波束偏性质，需要计算 $V(\gamma)$. 为计算简便起见，设 ZnO 薄膜 c 轴取向与 y 轴方向一致，衬底 Si 的晶面指数分别取(001)、(011)和(111)，ZnO、SiO_2 的归一化厚度 kd_1、kd_2 分别取值 0.1、0.3、0.5、1 和 2. 图 5 表示衬底 Si 的晶面指数为(001)、(011)和(111)时，据式(8)求出的瑞利波束偏角. 由于 $V(\gamma)$ 分别以 Si(001)的<100>和<010>、Si(011)的<100>和<$0\bar{1}1$>和 Si(111)的<$11\bar{2}$>和<$1\bar{1}0$>为对称轴，因此图 5 中声表面波传播方向的角度 γ 只取 90°.

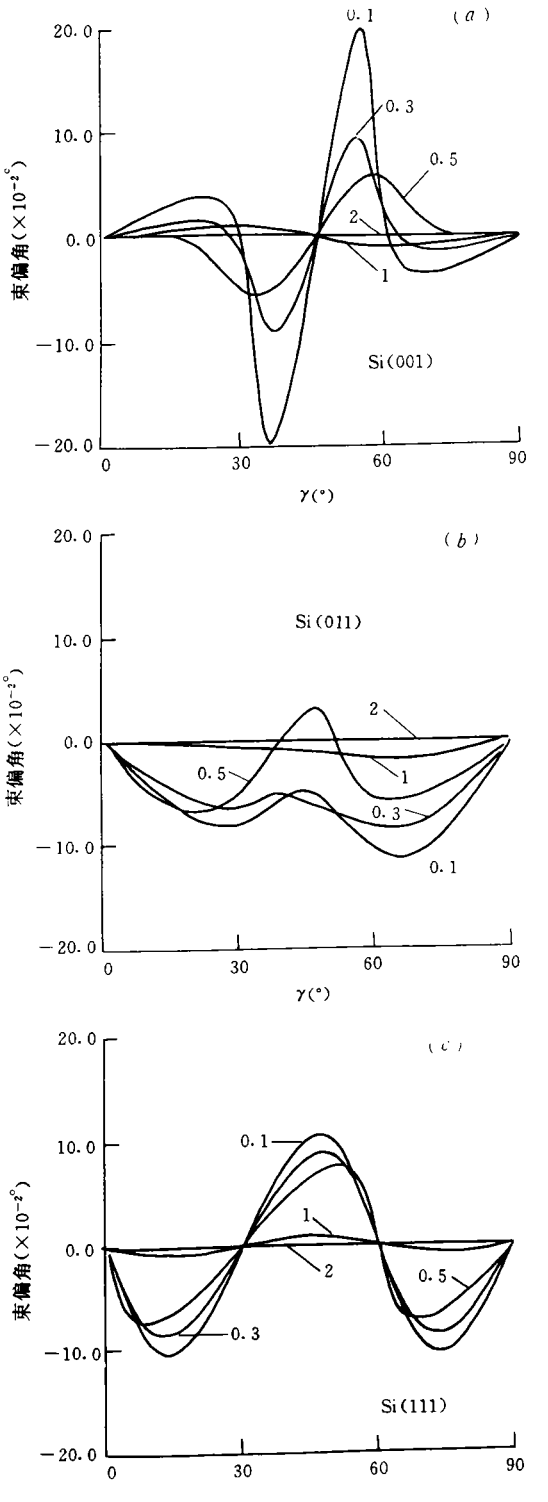

图 5　衬底 Si 的晶面指数不同，ZnO 和 SiO_2 归一化厚度不同时的束偏角

(a) Si(001)；(b) Si(011)；(c) Si(111).

4　分析与结论

从计算结果图 4 可见，只要 ZnO 薄膜的 c 轴取向偏离基片法向，对声表面波(瑞利波、Sezawa 波)传播相速、机电耦合系数等参量都会产生一定影响. 具体计算结构表明，当 ZnO 薄膜的 c 轴偏离基片法向±10°时，对于瑞利波，由图 4 可知其相速、机电耦合系数的变化不超过(0.25%、25%)；对于 Sezawa 波，kd_1=1.5，kd_2 取值为 0、0.5、1 和 2 时，其相速、机电耦合系数的变化分别不超过(1.05%，14.4%)、(1%，13.4%)、(0.9%，12.1%)和(0.9%，9.1%)，可以看出，当 SiO_2 层的归一

化厚度增大时，由 *ZnO* 薄膜 *c* 轴取向偏离基片法向所引起的相速和机电耦合系数的变化有减小趋势.

从计算结果图 5 看出，在 ZnO 薄膜 *c* 轴取向与基片法向一致时，分层结构 ZnO-SiO_2-Si 的各向异性源于衬底 Si，且与 ZnO 和 SiO_2 的归一化厚度有关. 总的说来，本文讨论的分层结构的束偏并不明显，由图 5 可知，当 ZnO 和 SiO_2 的归一化厚度增大时，束偏角逐渐减小，即层厚有抑制基片各向异性的作用；归一化厚度值取 2 时，几乎可以不考虑瑞利波的束偏性质.

在声表面波器件的设计过程中，根据不同实际需要，在衬底 Si 的晶面指数、声表面波传播方向、ZnO 薄膜和 SiO_2 层厚度都给定的条件下，对 ZnO 薄膜 *c* 轴偏离基片法向所导致的对有关参数的影响以及声表面波束偏性质有一了解，有其实际意义.

参 考 文 献

[1] Carr P H. *IEEE Ultrason. Symp.*, 1974, 286—289.

[2] Davis K L. *J. Appl. Phys.*, 1974, 45: 3255—3261.

[3] Khuri-Yakub B T and Kino G S. *Appl. Phys. Lett.*, 1974, 25: 188—193.

[4] 何世平. 存储相关卷积器理论及在通信中应用，南京：东南大学出版社，1991，58—61.

[5] Milsom R F, Relly N H C, Redwood M. *IEEE Trans.* SU., 1977, **24**(3): 147—166.

[6] Auld B A. Acoustic fields and waves in solids, Vol. **1**. Wiley, New York, 1973.

[7] Ono S, Wase K, Hayakawa S. *Wave Electronics*, 1977, 3: 35—49.

[8] Bowers J E, Khuir-Yakub B T, Kino G S. *Appl. Phys. Lett.*, 1980, **36**(10): 806—807.

气动扬声器技术让新年钟声响彻京城

1997 年元旦，中国科学院声学研究所受北京市政府的委托，在市科委、市委宣传部和市环保局等单位的配合下，完成了使用气动扬声器技术播放新年钟声的实验。实验首先在鼓楼进行，使用了三只两千声瓦和一只一万声瓦的共四只气动扬声器，播放了 12 声大钟寺永乐大钟的钟声录音信号。实验虽然受到了 7 级大风的不利气象条件影响，仍然在鼓楼周围，特别是东南方向约 3 公里以内地区，取得了 70 db 以上声级和良好的主观反映效果。

实验所使用的气动扬声器技术，原主要用于远程广播和高声强试验，曾为我国的国防和国防科学技术的发展作出很大贡献。用于北京市的新年庆祝活动，是在马大猷院士和市科委领导朱相远教授的倡导下进行的一项新的尝试。电动扬声器的电声能量转换效率很低(一般低于 1%)，很难满足远程大功率播音的需要；所以将高压气流的机械能直接调制转换为声能的气动扬声器，一直是声学所实现高声强条件的首选声源。经测试分析，所播放的钟声能量主要在 90—5000 Hz 之间的频率范围内，一般设计的气动扬声器系统，难以承受低频大振幅振动的冲击，所以这次使用的系统技术是经过重新设计改进的。

目前，中国科学院声学研究所第九研究室又设计加工了四只一万声瓦的气动扬声器，将于 1997 年春节在正阳门和西南二环路附近另外布置两个试点，与原来鼓楼的试点一起，播放 108 声的钟声信号。实验成功后，不仅北京市将会作为每年的新年活动的一部分，而且将正式列为 1997 年 7 月 1 日香港回归祖国庆祝活动的一项重要内容。

（中科院声学所　田　静）