

分类号_____

密级_____

UDC _____

编号_____

中国科学院研究生院

博士学位论文

多层结构声表面波传感器的有限元与边界元分析

付 琛

指导教师_____何世堂 研究员_____

_____李红浪 副研究员_____

_____中国科学院声学研究所_____

申请学位级别_____博士_____ 学科专业名称_____信号与信息处理_____

论文提交日期_____2011.4_____ 论文答辩日期_____2011.5.30_____

培养单位_____中国科学院声学研究所_____

学位授予单位_____中国科学院研究生院_____

答辩委员会主席_____

FEM/ BEM Anlysis for Multi-layered SAW Sensor

Chen Fu

Supervisors: Prof. Shitang He &

Associate Prof. Honglang Li

Institute of Acoustics

Chinese Academy of Sciences

May, 2011

*submitted in total fulfilment of the requirements for the degree of Ph.D in signal and
information processing*

中国科学院声学研究所 学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明：本论文的所有工作，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：

日期： 年 月 日

学位论文使用授权说明

本人完全了解中国科学院研究生院关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

- 按照中国科学院研究生院要求提交学位论文的印刷本和电子版本；
- 中国科学院研究生院与中国科学院声学研究所有权保留学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务；
- 中国科学院研究生院与中国科学院声学研究所可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；

（保密论文在解密后遵守此规定）

论文作者签名：

导师签名：

日期： 年 月 日

摘要

多层结构的声表面波器件因为能提供高声速模式, 大的机电耦合系数, 低的温度系数等优异特性, 在传感、频率控制领域中获得广泛的应用。同时, 由于一些新型声表面波模式的发现与应用, 在压电基片的表面出现了波导层, 敏感层, 保护层等的结构, 这就不可避免地对传统的声表面波器件的理论和模拟提出了挑战。因此, 本文基于多层结构声表面波传感器的理论, 通过无限长周期结构有限元/边界元方法和有限长结构的有限元方法两个方面进行了研究。

一方面, 通过递归刚度矩阵方法, 推导了包括金属层和液体层的多层结构的广义格林函数。利用广义格林函数对多层结构的声波传播特性进行了研究, 重点讨论了波导层对能量分布影响和多波导结构的温度补偿, 通过实验测试, 使双波导层 ST-90°X 石英的温度系数降低到了 10ppm 以内。

在广义格林函数的基础上, 针对多层结构栅阵的一个周期, 以一定厚度基片为界将半无限基片分成两个部分, 通过对无限基片部分进行边界元方法分析获得界面上广义位移和广义应力之间的阻抗矩阵; 对另一部分有限厚基片、电极和波导层进行有限元分析得到有限元方程, 将边界元的阻抗矩阵代入到有限元方程中, 从而得到了结构的有限元/边界元分析结果。在周期结构的有限元/边界元分析的基础上, 提取谐波导纳, 进一步提取多层结构的 COM 参数, 通过 COM 理论与 P 矩阵方法相结合, 仿真了一个 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{-YX LiTaO}_3$ 传感器结构, 与实验测试结果基本吻合。

另一方面, 通过有限元分析软件 ANSYS 进行延迟线型声表面波传感器仿真的研究。首先, 针对一种检测氢气的 Pd 膜/YZ- LiNbO_3 延迟线传感器, 建立了一种有效的二维模型, 并结合气体吸附机理分析其频率响应。另外, 对 $\text{ZnO}/\text{XY-LiNbO}_3$ Love 波传感器建立简单的三维有限元模型, 通过在正弦信号激励下, 对应相位响应变化的分析, 并得到了这种传感器的灵敏度约为 $45\text{m}^2/\text{kg}$ 。最后, 对具有周期性结构的声表面波 Love 传感器采用了周期边界条件和一维近似, 通过有限元方法分析了结构和材料参数对传感器的机电耦合系数和灵敏度的影响, 给出了波导层优化的设计参数。

关键词：声表面波，多层结构，周期有限元/边界元， ANSYS， COM 参数

Abstract

Chen Fu (Ultrasonics electronics)

Directed by Professor Shitang He

In recent years, Multi layered structure has received much application in SAW sensor field for it has many advantages: high velocity modes, great electromechanical coupling factor, excellent temperature compensability and so on. Meanwhile, as some novel SAW modes are discovered and applied, besides the substrate, SAW sensor devices usually comprise guiding layer, sensitivity layer and protective layer. Those challenge the traditional SAW simulation and design. Aimed at Multi layered SAW device simulation, two methods are researched in the thesis. One is FEM/BEM analysis of infinite periodic structures, the other is FEM analysis of finite structures.

On the one hand, a recursive stiffness matrix method is improved so that it can be used in metal or liquid layered structure. The general green's function is calculated based on the RSM and is used to analyze the acoustic wave propagation properties of multi layered structures. A SU-8/SiO₂/ST-90°X quartz device for temperature compensation is designed and its TCF is below 10ppm.

An effective approach based on FEM/BEM combined with COM model is developed to characterize the behavior of layered SAW devices. Firstly, for a period of infinite periodic grating, an impedance matrix related the displacement and stress tensor is proposed by BEM analysis for part of semi-infinite substrate and then it is incorporated into FEM analysis of the rest part of model. The COM parameters can be extracted by the Harmonic Admittance which is calculated by the FEM/BEM analysis. Combined with P-matrix, a two-port SiO₂/36°-YX LiTaO₃ SAW resonator sensor model is simulated and it agrees with experimental results.

On the other hand, delay line SAW sensors are analyzed by ANSYS. Firstly, a novel two-dimension FEM model is present for a hydrogen SAW sensor, which is composed of Pd film and YZ-LiNbO₃ substrate. Its frequency response is also

researched based on gas absorption theory. Then, a simplified three-dimension FEM model of ZnO/XY-LiNbO₃ Love wave structure is analyzed. By detecting phase response change Sensitivity is calculated which is about 45m²/kg. Lastly, under periodic boundary condition, one periodic model of love wave sensor is developed. With variation of guiding layer thickness, electromechanical coupling factor and mass sensitivity are calculated.

Keywords: SAW, multi-layered, periodic FEM/BEM, ANSYS, COM parameters

目 录

摘要.....	1
Abstract.....	3
第 1 章 引言.....	1
1.1 本文研究的意义.....	1
1.2 多层结构的声表面波理论研究现状.....	5
1.2.1 唯象模型.....	5
1.2.2 精确模型.....	7
1.3 本文研究内容.....	9
第 2 章 半无限压电基片中声波的传播.....	12
2.1. 压电晶体中的波动方程和求解.....	13
2.1.1. 压电晶体内耦合波动方程.....	13
2.1.2. 压电材料中的声波广义特征方程求解.....	16
2.2. 半无限压电基片的广义格林函数.....	18
2.2.1. 半无限基片的选根.....	18
2.2.2. 广义格林函数.....	19
2.3. 压电晶体材料特性参数.....	22
本章小结.....	30
第 3 章 多层结构中声波的传播.....	31
3.1. 层状结构中声波传播理论.....	32
3.1.1. 单层刚度矩阵.....	32
3.1.2. 多层刚度矩阵递归.....	35
3.1.3. 边界条件.....	40
3.2. 计算实例及与实验结果.....	42
3.2.1. 波导层效应.....	42
3.2.2. 具有温度补偿效应的多层结构.....	45
本章小结.....	48

第4章	多层结构SAW栅阵的周期FEM/BEM方法	49
4.1	周期结构FEM/BEM 理论.....	49
4.1.1	周期结构FEM/BEM模型.....	49
4.1.2	有限元分析理论.....	51
4.1.3	边界元分析理论.....	57
4.1.4	FEM/BEM结果与分析.....	60
4.2	基于谐波导纳提取多层结构COM参数	62
4.2.1	谐波导纳.....	62
4.2.2	COM参数提取	63
4.3	SiO ₂ /36° Y-X LiTaO ₃ 双端对谐振器的模拟与实验对比.....	66
	本章小结.....	73
第5章	基于ANSYS有限元方法分析声表面波传感器	75
5.1	声表面波传感器的ANSYS分析的步骤	75
5.2	有限长模型的ANSYS仿真	79
5.2.1	有限长SAW传感器的建模.....	79
5.2.2	二维Pd膜/YZ-LiNbO ₃ 结构的氢气传感器仿真	81
5.2.3	三维ZnO/XY-LiNbO ₃ 结构Love波传感器仿真.....	93
5.3	无限周期模型的ANSYS仿真及实验对比	98
5.1.1	Love波传感器ANSYS建模与分析 ^[97]	99
5.1.2	仿真结果与实验比较.....	104
	本章小结.....	107
第6章	总结和展望.....	109
	参考文献.....	112
	发表论文.....	119
	致谢.....	120

第1章 引言

1.1 本文研究的意义

1885 年, 瑞利(Lord Rayleigh)^[1]首先在半无限各向同性固体中发现声表面波 (surface acoustic wave, SAW) 的存在。这种瑞利波具有纵向与剪切分量并与介质耦合在基片表面传播 (通常声波能量集中于在基片表面下 1 个波长范围内), 且声波速度比电磁波速度低了大概 5 个数量级。White和Votmer^[2]利用沉积在石英晶体上的叉指换能器(Interdigital Transducer, IDT)有效地激励和检测SAW, 结合半导体器件的光刻技术可以大批量生产SAW器件。图 1.1为SAW器件基本结构以及典型瑞利型SAW。这种SAW器件自其诞生之日起, 就被用于信号处理技术, 包括滤波、延时、脉冲压缩、相关、卷积等功能, 广泛应用于雷达、航空航天、广播电视、通信等领域。此外, 声表面波沿基片表面传播特点使得SAW可以对其表面扰动的物理、化学或者其他机械参量相当敏感, 由此有可能制作各种具有高灵敏度的传感器。其基本原理是由于物理或者化学参量以各种不同机理应用于SAW器件表面, 形成对SAW传播的扰动引起其速度与幅度的变化, 从而导致器件输出信号 (相位、频率或者幅度) 的相应改变, 实现对待测对象的检测^[3]。

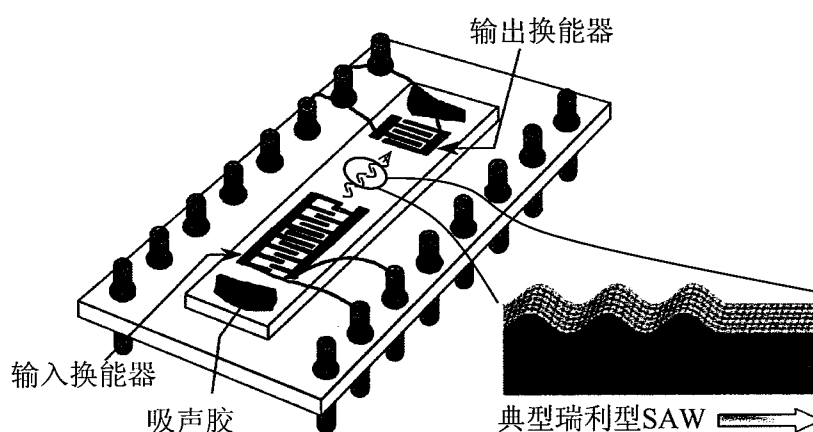


图 1.1 SAW 器件的基本结构与典型瑞利型 SAW

目前, 这种基于声表面波模式的传感器的典型应用为气体传感器与液体传感

器。自 1979 年 Wolhtjen 等人首次报道了声表面波(SAW)气体传感器的研究工作以来^[4], 经过数十年的研究, 已经开始在军用毒剂、环境检测及工业分析中得到很好的应用。SAW 气体传感器具有精度高、分辨率高、抗干扰能力强、重复性好、易实现微型化、集成化、智能化、稳定度高以及功耗小等特点。典型的声表面波气体传感器基本原理是以延迟线/谐振器型振荡器为传感元, 利用覆盖于 SAW 器件表面的敏感膜对待测气体的吸收或吸附, 基于各种传感机理引起声波传播特性发生改变, 从而导致振荡器振荡频率发生变化, 完成对待测气体量的测量。

在液相检测如生物传感器应用中, 一般瑞利型声表面波由于具有纵向位移分量, 在其与液体接触时, 造成能量直接辐射到液体中去, 造成了很大的耦合衰减, 器件损耗很大, 严重影响传感器工作性能。此时, 一种所谓 Love 波模式的传感器表现出了良好的液相环境检测特性, 这种声波模式由激发剪切型声表面波模式的压电基片及覆盖于其上的波导薄层构成, 通过波导效应将声波耦合至波导薄层表面。Love 波的剪切声位移振动模式使其在液相环境中不会有大的纵向耦合衰减。因此在液相生物传感器中获得了良好的应用, 其基本思想是由于敏感膜材料对待测物质的吸附所引起质量负载效应导致声波速度发生变化, 从而引起振荡频率的改变而完成对待测物的浓度或者质量检测。目前各种结构的 love 波模式已经开始应用于生物传感器之中: 从其基片材料来看, 激发 SSBW 波模式的 AT 石英、支持 SH-SAW 波模式的 YZ 切割以及 ST 石英等弱压电特性但具有良好温度稳定性材料, 这类材料能获得良好的温度稳定性, 但是器件损耗较高, 另外一类则是激发漏剪切波模式的 $36^\circ\text{YX LiTaO}_3$ 以及 $41^\circ\text{YX LiNbO}_3$ 等强压电性能但温度系数较高的材料, 能获得低器件损耗, 但是需要对传感器进行温度效应的补偿。从波导层材料来看, SiO_2 与聚合物膜材料 (PMMA 以及 Polyimides) 应用最为广泛; 另外, 近来有人结合两种膜材料作为波导层形成三层波导结构, 利用波导层的温度系数的极性相反的特点, 改善传感器的温度稳定性, 同时改善传感器的灵敏度, 但是仅限于实验讨论。Gizeli 等先后报道了基于油脂 (lipid) 与蛋白质 A (Protein A) 修饰的金表面针对免疫球蛋白 G (IgG) 的 love 波生物传感器试验^[5-6]。之后, Love 波结构被广泛用于免疫传感器^[7-8], 气体传感器^[9], 湿度

传感器^[10]，密度传感器^[11]的设计中。

在上述声表面波器件在信号处理以及传感器应用中，均面临一个共同的问题难题：器件损耗和温度稳定性矛盾的问题。通常基片材料机电耦合系数越大，器件损耗越小，系统电路的背景噪声越小；温度稳定性越高，温度带来的背景噪声越小。而实际常用的压电基片材料，机电耦合系数越大的材料温度稳定性越差，反之亦然。均面临一个共同的问题即温度稳定性。温度是影响声表面波器件工作稳定性的重要参数之一，在 SAW 器件的制作过程中，器件一旦封装完毕，其状态就确定了，但随着外界温度的变化，声表面波器件的许多参数，如叉指和基片的厚度，宽度以及压电基片本身弹性系数、压电系数以及介电常数等都将随之发生变化，从而导致声波波速发生较大漂移；同时温度的变化还会产生热应力，恶化器件的工作性能。这些问题，在声表面波器件的信号处理应用中，这种温度不稳定性将会导致器件频率的严重漂移；在传感器应用中，这种温度的不稳定性将严重的影响到传感器的检测下限以及稳定性等性能指标。因此，保证 SAW 器件具有良好的温度稳定性，成为改善工作性能的主要问题。许多专家学者对此进行了各种探索和研究，提出了多种解决温度稳定性的办法。例如寻找温度系数小的材料或者特定切向，双通道温度补偿，以及多层结构的温度补偿等。

相对比其它的方法，多层结构的温度补偿具有机电耦合系数大，电路简单等优点。其原理是，采用与基片材料温度系数极性相反的材料覆盖在基片表面，通过调节覆盖材料的膜厚，将温度引起基片材料的频率漂移抵消，实现整个结构的零温度系数。常见的材料温度极性见表 1.1。

表 1.1 常见的材料温度极性

材料名称	铌酸锂	钽酸锂	石英	ZnO	SiO ₂	PMMA	Glass
温度系数极性	负	负	正	负	正	负	正

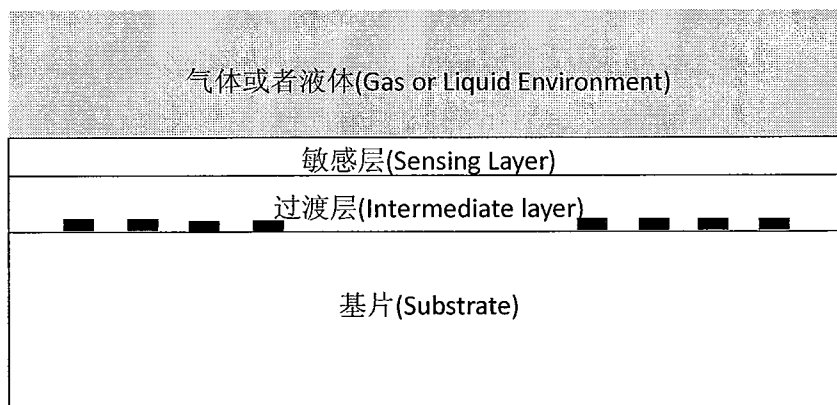


图 1.2 声表面波气体、液体传感器层状结构示意图

图 1.2 所示是一个气体或者液体传感器示意图，采用多层结构的传感器有如下优势：

- 通过增加低密度，低剪切波速的波导层，能够将水平剪切波的能量限制在表面，形成 Love 波模式，从而有效地提高灵敏度。特别是对于激励伪表面波(PSAW)或浅体声波(SSBW)模式的基片材料，例如 $36^\circ\text{YX-LiTaO}_3$ 和 $\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英。
- 过渡层能够对电极进行保护和电学屏蔽，从而增大敏感膜的区域，响应更加明显。
- 当敏感膜是电导材料或者是在导电液体环境进行检测时，激励端的电信号可以不经过声电耦合直接到达接收端，干扰、影响检测。所以通过增加一层绝缘的过渡层，能够确保到达接收端的信息是声学响应，使振荡器稳定工作。
- 通过对 IDT 电极镀上一层保护层，对于工作在液体环境中的传感器的长期稳定性有着重要的改善作用。
- 多层结构能实现温度补偿，制作低温度系数的器件。

因此，多层结构在高性能声表面波气体、液体传感器的设计中具有举足轻重的地位。多层结构的声表面波传感器进行建模和模拟来仿真器件的性能，对传感器的设计，包括对材料的选择，结构参数设计等提供有效的指导，一直以来都是 SAW 传感器领域的研究重点。

1.2 多层结构的声表面波理论研究现状

多年来鉴于声表面波器件的研究随着产品的更新换代,相关研究方法也有简单到复杂、从粗略到精确的发展过程。声表面波传感器作为最近的热点研究,仿真方法在传感器设计中有着的重要地位。传承以前的研究方法的同时,很多研究人员都在这个领域开展了大量的工作,提出了很多种的仿真方法分析理论。归纳起来,可以分为唯象模型和精确模型两大类。

1.2.1 唯象模型

1971 年, Tancrell 与 Holland 首先提出了一种可以快速分析和设计声表面波器件的 δ 函数模型(Delta Function Model)^[12], 该模型将 IDT 中每个叉指电极边缘视为一个独立声波源, 并用 δ 函数来表示, 同时假设每个叉指电极边缘的 δ 函数声辐射源彼此独立、互不影响, 且在垂直于 IDT 孔径的方向发射平面声波, 平面声波在 IDT 区域内传播时不存在衰减。

1973 年, Hartmann 等人在 δ 函数模型基础上考虑 IDT 的频率激发因子, 提出了脉冲响应模型(Impulse Model)^[13]。 δ 函数模型和脉冲响应模型在分析声表面波器件时做了很多简化, 可以比较简便快速得到器件的响应, 特别是在确定叉指换能器加权形状时有很大的作用。1974 年 Smith 等人提出两种共线场和交叉场等效电路模型(Equivalent Circuit Model)^[14-15], 能够获得器件的完整阻抗特性, 并在七八十年代得到了广泛的应用。其基本思想就是用简化场分布(横场和纵场)近似代替 SAW 器件的真实激励场分布。用声体波换能器来近似描述 SAW 器件的每一对叉指, 因而可以用声体波换能器的梅森(Mason)等效电路来描述 SAW 器件, 从而将一个求解场方程的复杂边值问题转化为一个电路问题。后来人们又将机械波反射、能量存储效应等二阶效应考虑进去, 提出了各种等效电路模型。

1998 年, Hachigo 和 Malocha 利用 δ 函数模型计算了 ZnO/Diamond/Si 多层结构声表面波器件的零点频率带宽(Null Frequency Bandwidth)^[16], 发现频散效应使器件的带宽变窄。此外, 为了实现多层结构 SAW 器件与外电路的匹配, 减少电路的失配损耗, 有必要将其用电路模型来等效, 因而他们在传统等效电路模型基

础上引进相速度频散因素,将修正后的模型成功应用于多层结构 SAW 器件的频率响应模拟中,并且他们在中心频率附近提出了将等效电路模型阻抗的频散与非频散部分进行分离,从而得到了一种新型的频散等效电路模型。

以上三种模型基本上能够满足早期 SAW 器件的设计要求,然而自 80 年代后期起,随着移动通信技术的快速发展,为了满足无线通信的需要,各种例如单相单向换能器(Single Phase Unidirectional Transducer,SPUDT) 等低损耗结构的声表面波器件开发出来^[17-18]。这些低损耗 SAW 器件的实现,正是利用了之前模型当作二阶效应而加以抑制的指间声波反射获得的,为了更准确地分析和设计这类器件,将指间声波反射效应考虑在内的耦合模型(Coupling-of-Modes, COM)便被应用于 SAW 器件的分析和设计中^[19-22]。

COM 理论本来是用于压电单晶 SAW 器件的模拟,但随着理论的进一步发展,只需经过一定的修正,就可用于多层结构声表面波滤波器的模拟。基于频散效应的考虑,Assouar 等人将多层结构中存在的速度频散和机电耦合系数频散引入到 COM 方程中^[23],提出了改进的 COM 模型。他们用这种方法模拟了 ZnO/Diamond/Si 多层结构 SAW 器件的频率响应,并且与 Nakahata 的试验结果进行了比较,发现考虑频散后的模型与试验结果更加符合。2007 年, E. Ntagwirumugara 等人报道了将机电耦合系数,速度,耦合系数,换能系数的频散都引入 COM 方程,分析了 ZnO/Si 两层结构的三阶梯形滤波器^[24]。但是,他们考虑的频散都是基于均匀层状结构的频散曲线,也就是说将电极视为在传播方向均匀连续排列,而不是周期性非连续排列。

由于 COM 方法应用于 SAW 领域非常方便,速度快,是目前模拟效率和精度结合得最好的一种方法。缺点是忽略了体声波效应等二级效应,对一些特殊器件 COM 方法精确度很差。另一方面模型所需要的一些物理参数很难得到。

无论是 δ 函数模型或脉冲响应模型,还是等效电路模型,抑或是 COM 模型,实质上都是 SAW 器件分析的唯象模型(Phenomenological Models),其模拟结果的准确性决定于模型中所使用参数的精确性,而这些参数必须要通过实验^[25]或者更为严格精确的数学模型获得^[26-27]。

1.2.2 精确模型

严格精确的理论分析是从压电声表面波的耦合波动方程和边界条件出发,利用数学物理方法或数值计算求出系统的精确解。

1977 年, Milsom 等人从耦合波动方程和边界条件出发, 推导出了压电半空间表面的一维线电荷激励响应, 即得到了一维格林函数, 然后通过数值计算求出表面电荷分布, 进而利用卷积定理和线性叠加定理求得了 IDT 激发和检测的各种声波模式的全部解, 而且在其一维格林函数理论中引入了表面有效介电常数 (Surface Effective Permittivity) 的概念^[28]。Milsom 等人的这项工作在声表面波研究发展史上具有里程碑意义, 为 SAW 器件的研究开辟了一个新的途径。

1985 年, 汪承灏和陈东培将 Milsom 等人的理论推广为任意表面源分布激发的广义格林函数理论, 给出表面广义力所激发的弹性波场的一般公式, 广义力包括力学部分和电学部分, 而广义格林函数则可写为对应表面波、体波和静电效应三部分之和。该理论构成了声表面波技术的主要理论框架, 被认为是分析声表面波激发和传播最严格的方法^[29-30], 但是他们这种方法未针对数值计算进行近似和化简, 只能计算几根指条。

在多层结构 SAW 器件严格精确的理论方面, 最直接的传统方法是利用耦合波动方程和边界条件来求解多层结构 SAW 的传播特性。对于均匀介质, 即不考虑电极在水平方向的不连续性, 1974 年, A. H. Fahmy 和 E. L. Adler 首先提出“用矩阵方法研究声表面波在多层结构中的传播特性”^[31-32], 并于 1989 年进一步完善了该理论^[33]。1994 年, E. L. Adler 用传递矩阵法(TM)研究了声表面波和伪表面波(Pseudo SAW)在 SiO_2 、 LiNbO_3 等常见压电晶体中的传播特性, 论证了该理论的简单有效性^[34]。TM 法对于高频和大厚度的多层结构声波传播特性的计算, 由于指数二分性(Exponential Dichotomy) 问题存在, 会出现计算的不稳定。人们利用矩阵分解, 对 TM 法进行了改进。2001 年, P. Smith 基于 TM 方法得到了多层结构 SAW 衬底的广义二阶格林函数^[35], 而 Victor Y Zhang 等人则在广义表面阻抗矩阵法(GSI)的基础上提出了表面有效介电常数法(ESP)^[36]。2002 年, Wu 等人利用表面阻抗矩阵法推导出了 IDT/ZnO/Diamond/Si 多层结构的有效介电常数^[37], 并以此获得了声表面波的频散特性, 并对 ZnO/Diamond/Si 多层结构中的频率响

应和机电耦合系数进行了分析。2004 年, Wang 等人提出顺度/刚度矩阵 (Compliance/Stiffness Matrix)模型, 并称其方法为递归刚度矩阵法(RSM), 利用该方法能够获得比 TM 法更为稳定的有效介电常数^[38]。以上这些方法主要是用来对结构中的声波模式的特性进行分析, 并不适合直接用来进行仿真声表面波器件的输入输出响应。

随着近年来计算机技术的迅速发展, 有限元方法, 有限元 / 边界元(FEM/BEM)法成为了精确分析 SAW 器件的重要数值计算方法^[39-43], 这两种方法能解决非均匀介质和不规则形状模型问题, 准确地分析器件的性能, 理论上任意材料上任意结构 IDT 组合的最终性能, 都可以用 FEM/BEM 方法比较精确地得到, 但是通常都会涉及大量计算, 耗费大量的计算时间,

有限元方法对声表面波滤波器和传感器的建模和分析, 可以分析多种物理效应, 有很多的学者开展了这方面的研究^[44-45]。多层结构有限元分析方面, Ippolito, El Gowini 等分别用商用有限元软件对两层结构的 SAW 传感器进行了分析^[46-47]。有限元法直接对 SAW 器件的设计, 计算成本高, 特别是多层结构时, 其计算速度更慢。事实上, SAW 器件的 IDT 具有周期性, 考虑到这一点可以大量简化有限元的划分。许多研究人员基于这种周期结构条件谐振器的有限元分析开展了大量的研究^[48-52]。

FEM/BEM 方法相比较 FEM 方法的优势是在于对于 SAW 器件中的近似半无限大的基片采用 BEM 分析, 将二维问题转化成一维问题, 大大的减少了计算量, 提高了计算效率。尤其对于有限长的 SAW 滤波器, FEM/BEM 方法获得了极大的成功。在周期栅阵模型的 FEM/BEM 方面, V.P.Plessky 等人应用 Blotekjar 等人对压电晶体上周期栅阵的处理方法, 以及对栅阵电流的定义, 提出周期格林函数的概念, 可以求解出周期栅格阵中电荷分布, 进而求出电流, 可以分析周期栅格阵的各种性质如色散曲线等^[53-54]。

1995 年, P. Ventura 等人应用广义格林函数的概念, 将周期格林函数推广为 4×4 的矩阵, 考虑电极的质量加载作用, 更准确的计算栅阵的特性^[40]。日本学者 Ken-ya Hashimoto 也基于 Blotekjar 的方法和广义格林函数概念, 推出自己的一套计算周期结构有限元/边界域(FEMSDA)方法。

国内南京大学水永安教授团队也开展了利用无限周期栅的周期格林函数方法提取 COM 模型参数的研究,并将其应用于器件的设计中。他们利用计算得到的电场分布直接得到了反射系数的相位^[55],精确度有一定提高。在国内他们也率先开展了非周期 FEM/BEM 方法的研究,可以计算包括纵向耦合模谐振滤波器在内的复杂器件^[56]。

多层结构的周期 FEM/BEM 理论方面, Ballandras 等人于 2004 年提出的结合周期有限元分析法和边界积分法的新模型^[57]。这种模型可以准确模拟任意多层结构的 SAW 特性,他们用此模型模拟了 ZnO/金刚石、AlN/蓝宝石、LiNbO₃/(100)Si 和 LiNbO₃/C 轴、金刚石/(100)Si 等 4 种结构的 SAW 频散特性。但是这种方法只适合分析 IDT 位于层状结构表面,没有分析 IDT 位于结构内部的情况。D. A. Powell 将周期间隔排列电极和波导层进行空间傅立叶展开,得到该层的格林函数,分析了用于液体检测 SiO₂/36°YX-LiTaO₃ 的 Love 波传感器^[58]。这种方法虽然适合分析 IDT 位于波导层内部的情况,但是只能分析 IDT 是矩形的简单结构,其通用性较差。

综上所述,直接利用有限元方法对传感器的分析,通常都用来分析复杂结构,以及多物理场效应。并且结合有限元商业软件,使这种方法获得了广泛的应用。由于受到计算机的计算效率的限制,往往都是用来分析指条数很少,模型尺寸进行简化模型。非周期、有限长的 FEM/BEM 方法在仿真单层滤波器结构的精确模拟方面有着明显的优势。而这种方法应用于多层结构鲜有文献报道,难点可能存在于以下方面: 1) 多层的格林函数是频散的,格林函数奇异点也更多,对格林函数的积分运算将变得更加困难。2) 在压电基片表面,多层结构除了电极的作用外,还有波导层对压电基片的应力,因此对基片表面激励源的分析将十分复杂。周期 FEM/BEM 方法由于具有相对简单,快速的特点在多层结构的模拟方面取得了一些应用,但是这种方法的通用性还有待改善。

1.3 本文研究内容

通过以上分析,相比较 SAW 滤波器的仿真方法,SAW 传感器的仿真方法还

有待完善。本文主要研究瞄准上述两个方面的难题：第一，解决针对多层周期结构的 FEM/BEM 方法计算其 COM 参数，使得现有的 SAW 滤波器快速模拟方法适用于 SAW 传感器。第二，ANSYS 软件对 SAW 传感器的模拟，弥补本文 FEM/BEM 方法对 IDT 周期性较差结构分析以及前后处理较差的不足之处。具体各章内容可以分为以下几个部分：

第二章，基于单层基片格林函数分析声特征参数。简单介绍了单层压电基片模型，从 Christoffel 方程出发，将根据边界条件求解 Christoffel 方程的问题转化成矩阵特征值与特征向量问题，并在此基础上推导出了格林函数。根据格林函数分析了各种类型晶体支持的声表面波模式。以 LGS 材料为例，计算了各种切向下声特征参数。

第三章，多层格林函数的推导。通过采用递归刚度矩阵法（RSM），将单层半无限基片的格林函数推广到多层结构模型，推导了包含液体层，金属层以及激发源位于层状结构内部的广义格林函数的稳定计算方法。计算了高频压电薄膜的频散曲线和机电耦合系数。分析了多层 Love 波结构的能量分布以及具有温度补偿效应的结构。

第四章，多层结构的 COM 参数提取和仿真。针对包括周期排列电极的多层无限长周期栅阵结构，通过对分界面以下的半无限结构应用边界元的方法得到分界面上的应力与位移的关系阻抗矩阵，并将其加入到分界面之上的有限元方程中，得到了一种通用性较高的周期结构的 FEM/BEM 方法。基于这种 FEM/BEM 方法计算结构的谐波导纳，并利用谐波导纳提取的耦合模参数。推导了双端对谐振器结构利用 P 矩阵的级联方法，通过耦合模理论和 P 矩阵相结合来得到器件的幅频响应。仿真了 $\text{SiO}_2/\text{Al}/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 结构的响应。

第五章，介绍了利用通用有限元分析软件 ANSYS 进行压电耦合分析的方法。在 ANSYS 仿真有限长结构方面分别分析了二维和三维的模型。其中对 Pd 膜/ YZ-LiNbO_3 的 H_2 检测用延迟线型传感器进行了二维模型建模和响应机理分析，有效地消减了边界反射对信号的干扰，得到了其对不同吸附气体量的幅度响应和振荡频率。对 $\text{ZnO}/\text{XY-LiNbO}_3$ 的 Love 波传感器模型进行了三维有限元分析，并计算了这种结构的灵敏度。在 ANSYS 仿真无限周期结构方面，建立了分析包括

电极 Love 波模型。以 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英和 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 两种结构为例，分析了在不同参数条件下，器件的机电耦合系数和灵敏度等性能。

第六章，对本文进行了总结，提出了还需要完善的问题，并且对下一步的研究工作提出了展望。

第2章 半无限压电基片中声波的传播

声波在半无限压电晶体内传播，目前已经有许多成熟的方法，其中运用最广泛的的就是根据 Christoffel 方程和自由或者金属化边界条件进行求解。另一种分析半无限基片的方法是广义格林函数的方法。本章直接从波动方程出发，将表面电荷与应力作为激励向量，表面位移和电势作为响应向量，通过矩阵特征值和特征向量的方法将它们联系起来，从而得到广义格林函数。一方面这里得到的广义格林函数可以反映压电晶体很多的材料特性。另一方面也为后面章节分析奠定基础。

在本文中，若无特殊说明，均有如下假设：

- 图 2.1 所示。 x_1 为声表面波的传播方向， x_3 是界面法向。 x_2 表示换能器孔径方向。
- 在下面的分析过程中，假设晶体材料在 x_1 方向上的尺寸均远大于声波波长，假设声波是沿 x_1 传播的平面声波，因此所有相关场量均与 x_2 无关，这就是所谓的一维近似假设；并且假设所有的场量都以 $\exp(j2\pi ft)$ 形式随时间变化，这里 f 是频率，在以后的讨论中省略场量随时间变化的因子；
- 压电晶体材料中的声波速度一般比电磁波速度低 5 个数量级，因此压电耦合可以看成是准静态的(quasi-static)，这就是所谓的准静态近似。

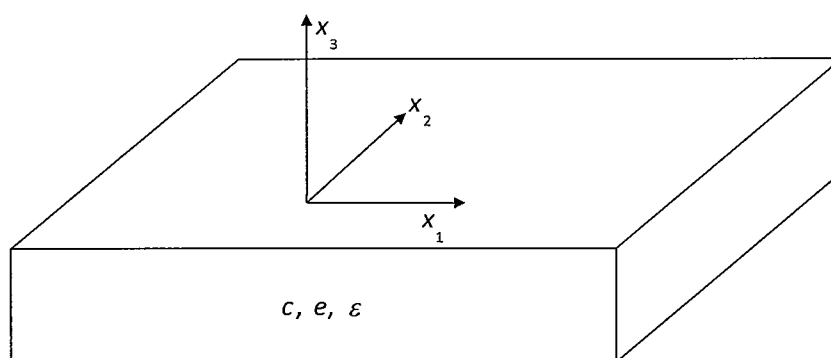


图 2.1 计算坐标系坐标取向示意图

2.1. 压电晶体中的波动方程和求解

2.1.1. 压电晶体内耦合波动方程

(a) 压电材料常数的Bond变换

对于任意一种理想压电弹性材料，我们都可以通过弹性常数、压电常数和介电常数三个矩阵进行描述，但是通常给出的这些材料参数都是在原始的晶体坐标中给出。对于各向异性的材料，因为在某些方向上的非对称性，不同的切向和旋转角的晶体材料就会有不同的性质。因此必须将晶体坐标系下(X,Y,Z)的材料常数变换到计算坐标系 (x_1, x_2, x_3) 中。

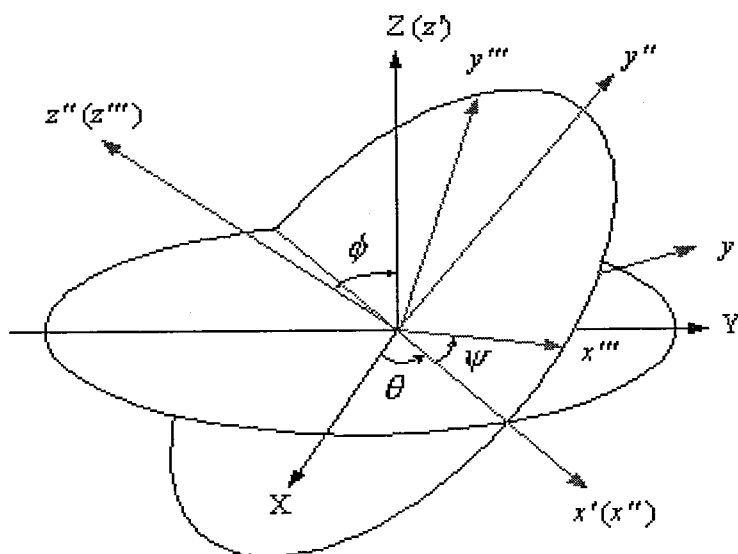


图 2.2 旋转坐标示意图

按照 IEEE 标准^[59]，用 Euler(θ, ϕ, ψ)角来表示从晶体坐标系到计算坐标系的变换。其定义如所示：从晶体坐标系 XYZ 出发，首先绕 Z 轴逆时针旋转 θ 到 X' Y' Z' 坐标系；然后绕 X' 轴逆时针旋转 ϕ 到 X'' Y'' Z'' 坐标系，这样就确定了晶体的切割方向；最后绕 Z'' 轴逆时针旋转 ψ 到 X''' Y''' Z''' 坐标系，此坐标系就是计算坐标系 (x_1, x_2, x_3) 。整个旋转坐标变换过程所对应的 Euler 变换矩阵 $[V]$ 为：

$$[V] = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & V_{22} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

其中

$$V_{11} = \cos \theta \cos \psi - \sin \theta \cos \phi \sin \psi$$

$$V_{12} = \sin \theta \cos \psi - \cos \theta \cos \phi \sin \psi$$

$$V_{13} = \sin \phi \sin \psi$$

$$V_{21} = -\cos \theta \sin \psi - \sin \theta \cos \phi \cos \psi$$

$$V_{22} = \cos \theta \cos \phi \cos \psi - \sin \theta \sin \psi$$

$$V_{23} = \sin \phi \cos \psi$$

$$V_{31} = \sin \theta \sin \phi \quad V_{32} = -\cos \theta \sin \phi \quad V_{33} = \cos \phi$$

在实际计算中常采用简化下标, 将晶体的四阶弹性张量 c_{ijkl} 写为 c_{IJ} , 三阶压电张量 e_{jik} 写为 e_{jI} , 其中

$$\begin{cases} i, j, k, l = 1, 2, 3 \\ I, J = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \end{cases} \quad (2.2)$$

用缩写下标能节省篇幅和便于代数运算, 所以直接用缩写下标完成坐标变换是一种相当重要的方法。为此, Bond 发展了一种有效的矩阵方法, 用它来实现晶体坐标系变换只需通过一次矩阵乘法。Bond 变换矩阵 $[M]$ 为

$$[M] = \begin{bmatrix} V_{11}^2 & V_{12}^2 & V_{13}^2 & 2V_{12}V_{13} & 2V_{13}V_{11} & 2V_{13}V_{12} \\ V_{21}^2 & V_{22}^2 & V_{23}^2 & 2V_{22}V_{23} & 2V_{23}V_{21} & 2V_{21}V_{22} \\ V_{31}^2 & V_{32}^2 & V_{33}^2 & 2V_{32}V_{33} & 2V_{33}V_{31} & 2V_{31}V_{32} \\ \hline V_{21}V_{31} & V_{22}V_{32} & V_{23}V_{33} & V_{22}V_{33} + V_{23}V_{32} & V_{21}V_{33} + V_{23}V_{31} & V_{22}V_{31} + V_{21}V_{32} \\ V_{31}V_{11} & V_{32}V_{12} & V_{33}V_{13} & V_{12}V_{33} + V_{13}V_{32} & V_{13}V_{31} + V_{11}V_{33} & V_{11}V_{32} + V_{12}V_{31} \\ V_{11}V_{21} & V_{12}V_{22} & V_{13}V_{23} & V_{12}V_{23} + V_{13}V_{22} & V_{13}V_{21} + V_{11}V_{23} & V_{11}V_{22} + V_{12}V_{21} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

采用缩写下标并利用 Bond 变换矩阵 $[M]$, 把晶体坐标系下材料常数 $\bar{c}_{IJ}$ 、 $\bar{e}_{IJ}$ 、 $\bar{\epsilon}_{ij}$

变换到计算坐标系下材料常数 c_{IJ} 、 e_{IJ} 、 ϵ_{ij} , 分别有如下的公式

$$[c] = [M][\bar{c}][M]^T \quad (2.4)$$

$$[e] = [V][\bar{e}][M]^T \quad (2.5)$$

$$[\varepsilon] = [V][\bar{\varepsilon}][V]^T \quad (2.6)$$

其中 $[M]^T$ 是Bond变换矩阵 $[M]$ 的转置, $[V]^T$ 是Euler变换矩阵 $[V]$ 的转置, $[C]$ 是晶体材料的劲度常数矩阵, $[e]$ 是压电应力常数矩阵, $[\varepsilon]$ 是介电常数矩阵。由此可见, 只要知道晶体坐标系下的材料常数和Euler角 (θ, ϕ, ψ) , 由变换公式(2.4)~(2.6)即可由晶体坐标系中的材料常数求出计算坐标系下的材料常数。在今后的讨论中, 都认为晶体材料常数都是在计算坐标系中的参数。

(b) 压电晶体内的耦合波动方程

在压电弹性体内, 质点运动满足牛顿运动方程:

$$\nabla \cdot T = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - F \quad (2.7)$$

上式中 T , u , ρ , F 分别表示应力场量、弹性位移量、材料密度和彻体力。

在准静态近似下, 压电晶体内部电场方程为:

$$\begin{cases} \nabla \cdot D = \rho_e \\ E = -\nabla \phi \end{cases} \quad (2.8)$$

其中 D , E , ρ_e , ϕ 分别是电位移, 电场强度、自由电荷密度和电势。

声波在压电晶体中传播, 由于存在压电效应, 所以伴随弹性波的传播, 会不断挤压晶体, 压电晶体发生形变, 在它表面就会诱导出现变化电荷, 导致变化的电场, 变化的电场就产生了电磁波。电磁波场量和弹性波场量通过压电本构方程相耦合:

$$\begin{cases} T = -e \cdot E + c : S \\ D = \varepsilon \cdot E + e : S \end{cases} \quad (2.9)$$

其中 S 是压电晶体的应变场量, 对于线性的小应变理想弹性材料, 定义为:

$$S_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (2.10)$$

这里符号简写采用了Einstein求和约定, 由(2.8)~(2.10)式可知:

$$T_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \quad (2.11)$$

由于压电晶体一般是绝缘体，内部不存在自由电荷，所以压电晶体电位移矢量的散度为 0：

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (2.12)$$

把(2.11)代入(2.7)，(2.9)代入(2.12)，并考虑到晶体内部不存在彻体力，即 $F=0$ ，可以得到压电晶体内的基本波动方程：

$$\begin{cases} c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} + e_{ijk} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k} - \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = 0 \\ e_{jkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} - \varepsilon_{jk} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k} = 0 \end{cases} \quad (2.13)$$

2.1.2. 压电材料中的声波广义特征方程求解

假设满足(2.13)平面声波解的形式为

$$\begin{cases} u_i = A_i e^{-j\omega(s_1 x_1 + s_3 x_3)} \\ \phi = A_4 e^{-j\omega(s_1 x_1 + s_3 x_3)} \end{cases} \quad (2.14)$$

s_1, s_3 分别表示 x_1, x_3 方向的慢度，它们的倒数表示速度。并且定义广义位移和应力向量，

$$\mathbf{U} = [u_1, u_2, u_3, \phi]^T \quad (2.15)$$

$$\mathbf{T} = [\frac{j}{k} T_{13}, \frac{j}{k} T_{23}, \frac{j}{k} T_{33}, \frac{j}{k} D_3]^T \quad (2.16)$$

$$\Psi = [\mathbf{U}^T, \mathbf{T}^T]^T \quad (2.17)$$

如果没有特殊说明，都采用 k 表示 x_1 方向的波数。将(2.14)代入(2.13)可以得到

$$\begin{bmatrix} \frac{A}{s^2} - B & 0 \\ -C^T & I \end{bmatrix} \cdot \Psi = \alpha \begin{bmatrix} C & I \\ D & 0 \end{bmatrix} \cdot \Psi \quad (2.18)$$

其中令 $\alpha = s_3/s_2$, A, B, C, D 都是只与材料参数有关的 4×4 的矩阵，上标^T表示转置，其中：

$$A = \begin{bmatrix} \rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

$$B = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{61} & c_{51} & e_{11} \\ c_{16} & c_{66} & c_{65} & e_{16} \\ c_{15} & c_{56} & c_{55} & e_{15} \\ e_{11} & e_{16} & e_{15} & -\varepsilon_{11} \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

$$C = \begin{bmatrix} c_{15} & c_{14} & c_{13} & e_{31} \\ c_{65} & c_{46} & c_{36} & e_{36} \\ c_{55} & c_{45} & c_{35} & e_{35} \\ e_{15} & e_{14} & e_{13} & -\varepsilon_{31} \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

$$D = \begin{bmatrix} c_{55} & c_{54} & c_{53} & e_{35} \\ c_{45} & c_{44} & c_{43} & e_{34} \\ c_{35} & c_{34} & c_{33} & e_{33} \\ e_{35} & e_{34} & e_{33} & -\varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

(2.18)前4行实际上就是Christoffel方程^[60]。(2.18)式中劲度系数的数量级 10^{11} 量级，而介电常数的数量级 10^{-11} 量级，在计算机进行数值计算的时候，大数和小数的运算会容易产生舍入误差，为了避免引起的数值计算误差，对矩阵元素和各个物理量用尺度因子进行了归一化，得到了一套新的单位，见表 2.1，本文的计算都是基于这套单位体系进行的。

表 2.1 各物理量单位归一化因子对照表

	c_{ij}	e_{ij}	ε_{ij}	u_i	φ	$j/k \cdot T_{ij}$	$j/k \cdot D_3$
国际单位	N/m ²	C/m ⁻²	F/m	m	V		
归一化因子	10^{-9}	1	10^9	10^9	1	1	10^9

从(2.18)可知，这是一个广义特征方程， ψ 是特征值 α 对应的特征向量。其中 α 有八个值，它们与文献^[27]中所讨论的Christoffel方程的八个根是一致的。分别对应无限半空间的八个基本模式。这八个基本模式分为四对，分别对应两个准切变波项、一个准纵波项和一个静电波项，特征值和特征向量共同构成压电晶体内存在的声波模式，它们经过组合来满足特定的边界条件。

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \\ \frac{j}{k}T_{13} \\ \frac{j}{k}T_{23} \\ \frac{j}{k}T_{33} \\ \frac{j}{k}D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^1 & L & u_1^8 \\ u_2^1 & L & u_2^8 \\ u_3^1 & L & u_3^8 \\ \phi^1 & L & \phi^8 \\ \frac{j}{k}T_{13}^1 & L & \frac{j}{k}T_{13}^8 \\ \frac{j}{k}T_{23}^1 & L & \frac{j}{k}T_{23}^8 \\ \frac{j}{k}T_{33}^1 & L & \frac{j}{k}T_{33}^8 \\ \frac{j}{k}D_3^1 & L & \frac{j}{k}D_3^8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 e^{jk\alpha_1 x_3} \\ C_2 e^{jk\alpha_2 x_3} \\ C_3 e^{jk\alpha_3 x_3} \\ C_4 e^{jk\alpha_4 x_3} \\ C_5 e^{jk\alpha_5 x_3} \\ C_6 e^{jk\alpha_6 x_3} \\ C_7 e^{jk\alpha_7 x_3} \\ C_8 e^{jk\alpha_8 x_3} \end{bmatrix} e^{jkx_1} \quad (2.23)$$

通过矩阵分析法, 便将描述压电介质中声波非常复杂的二阶偏微分方程简化为了十分简单的矩阵特征值方程, 适合编程计算。

2.2. 半无限压电基片的广义格林函数

2.2.1. 半无限基片的选根

在如图 2.1 所示的位于($x_3 < 0$)半无限空间的压电晶体内, (2.23)式 8 个特征值需要按照选根原则选取 4 个基本模式。我们可以通过(2.9)~(2.11)可以得到材料体内的电位移分量 $\mathbf{D}$ 以及应力张量 $\mathbf{T}$ 。下面就可以通过Umov-Poynting定理写出时间平均Poynting矢量的分量形式^[61-62],

$$P_i = \frac{j\omega}{4} (T_{ij}^* A_j - T_{ij} A_j^* + D_i^* A_4 - D_i A_4^*) e^{-2\omega(s_1^* x_1 + s_3^* x_3)} \quad (2.24)$$

其中令 $s = s' + js''$, ‘*’表示复共轭。显然(2.24)中指数部分前面的因子为实数。

因为介质中声表面波传播区域不会有源, 所以能量守恒法则形式为:

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = 0 \quad (2.25)$$

将(2.24)代入(2.25)可以得到:

$$s_1'' P_1 + s_3'' P_3 = 0 \quad (2.26)$$

对于瑞利波, $s_1'' = 0$, (2.26)式变为:

$$\alpha'' P_3 = 0 \quad (2.27)$$

- 如果 $\alpha''=0$ ，则由(2.24)可知，此时Poynting矢量的各个分量独立于坐标，变成均匀传播的平面波，因此我们需要选择实的 α 值，使得 $P_3 < 0$ ，从而表示能量向体内传播。联立(2.24)，即要满足：

$$\text{imag}(T_{i3}^* A_i + D_3^* A_4) > 0 \quad (2.28)$$

- 如果 $\alpha'' \neq 0$ ，则 $P_3 = 0$ ， $P_1 \neq 0$ ，并且Christoffel方程的系数都是实数，因此八个根中复数根都是共轭成对出现的。这时候，我们需要在每对共轭的根中选择 $s_3'' > 0$ ，才能保证能量随着 x_3 负方向衰减。这个选根条件可以写作：

$$\begin{cases} \alpha'' > 0 & |_{s_1 > 0} \\ \alpha'' < 0 & |_{s_2 < 0} \end{cases} \quad (2.29)$$

2.2.2. 广义格林函数

为了分析表面应力和电荷作为激励源对声波的激发作用，于是定义广义格林函数^[29-30]：

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -T_{13} \\ -T_{23} \\ -T_{33} \\ \sigma \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

矩阵[G]是一个4x4的矩阵，左上角的9个元素反映了力学量之间的相互作用，右下角的一个元素 G_{44} 表示由电荷激发电场的作用，其余的6个元素分别反映了力-电和电-力之间的相互耦合。为了计算的方便，我们定义一个与频率无关的广义的格林函数[H]：

$$[H] = |k|[G] \quad (2.31)$$

经过选根后，(2.23)式变成：

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \\ \frac{j}{k}T_{13} \\ \frac{j}{k}T_{23} \\ \frac{j}{k}T_{33} \\ \frac{j}{k}D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^1 & u_1^2 & u_1^3 & u_1^4 \\ u_2^1 & u_2^2 & u_2^3 & u_2^4 \\ u_3^1 & u_3^2 & u_3^3 & u_3^4 \\ \phi^1 & \phi^2 & \phi^3 & \phi^4 \\ \frac{j}{k}T_{13}^1 & \frac{j}{k}T_{13}^2 & \frac{j}{k}T_{13}^3 & \frac{j}{k}T_{13}^4 \\ \frac{j}{k}T_{23}^1 & \frac{j}{k}T_{23}^2 & \frac{j}{k}T_{23}^3 & \frac{j}{k}T_{23}^4 \\ \frac{j}{k}T_{33}^1 & \frac{j}{k}T_{33}^2 & \frac{j}{k}T_{33}^3 & \frac{j}{k}T_{33}^4 \\ \frac{j}{k}D_3^1 & \frac{j}{k}D_3^2 & \frac{j}{k}D_3^3 & \frac{j}{k}D_3^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 e^{jk\alpha_1 x_3} \\ C_2 e^{jk\alpha_2 x_3} \\ C_3 e^{jk\alpha_3 x_3} \\ C_4 e^{jk\alpha_4 x_3} \end{bmatrix} e^{jkx_1} \quad (2.32)$$

在如图 2.1 所示的 ($x_3 > 0$) 空间为真空的区域, 电势满足 Laplace 方程,

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (2.33)$$

采用分离变量法, 考虑到无穷远处的电势为零, 可以求得波数域电势解的形式为:

$$\phi = a_1 e^{-|k|x_3} e^{-jkx_1} \quad (2.34)$$

在 $x_3 = 0$ 处, 电势连续, 由(2.32)和(2.34), 即有:

$$a_1 = \sum_{n=1}^4 C_n \phi^n \quad (2.35)$$

x_3 方向的电位移

$$D_3 = \varepsilon_0 E_3 = -\varepsilon_0 \nabla \phi_{,3} \quad (2.36)$$

将(2.34)(2.35)代入(2.36)可得:

$$D_3 = \varepsilon_0 |k| \sum_{n=1}^4 C_n \phi^n e^{-|k|x_3} \quad (2.37)$$

$x_3 = 0$ 表面的电位移的不连续等于表面的自由电荷密度, 即

$$\sigma = D_3^+ - D_3^- = \sum_{n=1}^4 C_n (\varepsilon_0 |k| \phi^n - D_3^n) \quad (2.38)$$

根据(2.38)可以将(2.32)改写为:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \\ \frac{j}{k}T_{13} \\ \frac{j}{k}T_{23} \\ \frac{j}{k}T_{33} \\ \frac{j}{k}\sigma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^1 & u_1^2 & u_1^3 & u_1^4 \\ u_2^1 & u_2^2 & u_2^3 & u_2^4 \\ u_3^1 & u_3^2 & u_3^3 & u_3^4 \\ \phi^1 & \phi^2 & \phi^3 & \phi^4 \\ \frac{j}{k}T_{13}^1 & \frac{j}{k}T_{13}^2 & \frac{j}{k}T_{13}^3 & \frac{j}{k}T_{13}^4 \\ \frac{j}{k}T_{23}^1 & \frac{j}{k}T_{23}^2 & \frac{j}{k}T_{23}^3 & \frac{j}{k}T_{23}^4 \\ \frac{j}{k}T_{33}^1 & \frac{j}{k}T_{33}^2 & \frac{j}{k}T_{33}^3 & \frac{j}{k}T_{33}^4 \\ \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^1 - D_3^1) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^2 - D_3^2) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^3 - D_3^3) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^4 - D_3^4) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

将(2.39)后4行整理后代入前4行中去,可以得到:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^1 & u_1^2 & u_1^3 & u_1^4 \\ u_2^1 & u_2^2 & u_2^3 & u_2^4 \\ u_3^1 & u_3^2 & u_3^3 & u_3^4 \\ \phi^1 & \phi^2 & \phi^3 & \phi^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{j}{k}T_{13}^1 & \frac{j}{k}T_{13}^2 & \frac{j}{k}T_{13}^3 & \frac{j}{k}T_{13}^4 \\ \frac{j}{k}T_{23}^1 & \frac{j}{k}T_{23}^2 & \frac{j}{k}T_{23}^3 & \frac{j}{k}T_{23}^4 \\ \frac{j}{k}T_{33}^1 & \frac{j}{k}T_{33}^2 & \frac{j}{k}T_{33}^3 & \frac{j}{k}T_{33}^4 \\ \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^1 - D_3^1) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^2 - D_3^2) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^3 - D_3^3) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^4 - D_3^4) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{j}{k}T_{13} \\ \frac{j}{k}T_{23} \\ \frac{j}{k}T_{33} \\ \frac{j}{k}D_3 \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

根据(2.30)(2.31)即得到半无限单层基片的广义格林函数为:

$$[H] = j \frac{|k|}{k} \begin{bmatrix} u_1^1 & u_1^2 & u_1^3 & u_1^4 \\ u_2^1 & u_2^2 & u_2^3 & u_2^4 \\ u_3^1 & u_3^2 & u_3^3 & u_3^4 \\ \phi^1 & \phi^2 & \phi^3 & \phi^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{j}{k}T_{13}^1 & \frac{j}{k}T_{13}^2 & \frac{j}{k}T_{13}^3 & \frac{j}{k}T_{13}^4 \\ \frac{j}{k}T_{23}^1 & \frac{j}{k}T_{23}^2 & \frac{j}{k}T_{23}^3 & \frac{j}{k}T_{23}^4 \\ \frac{j}{k}T_{33}^1 & \frac{j}{k}T_{33}^2 & \frac{j}{k}T_{33}^3 & \frac{j}{k}T_{33}^4 \\ \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^1 - D_3^1) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^2 - D_3^2) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^3 - D_3^3) & \frac{j}{k}(\varepsilon_0|k|\phi^4 - D_3^4) \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

2.3. 压电晶体材料特性参数

➤ 晶体类型

某些晶体的特殊切向，存在明显的对称性，表现为(2.30)式中的格林函数的某些元素对于任意的s都为 0，即激励中的某个广义应力分量无法影响到所有的广义位移场量。例如

$$u_1 = -G_{11} \cdot T_{13} - G_{12} \cdot T_{23} - G_{13} \cdot T_{33} + G_{14} \cdot \sigma \quad (2.42)$$

当 $G_{12} = 0$ 时，不论施加什么样的 T_{23} 激励，都不会影响位移 u_1 ，也就是说这种情况下， T_{23} 和 u_1 是解耦的，人们根据不同的解耦方式，对晶体进行了分类^[63]，如表

2.1所示

表 2.2 晶体对称类型分类

晶体对称类型	格林函数中为 0 元素	波动模式
类型 1		一般表面波
类型 2	$G_{14}, G_{24}, G_{34}, G_{44}$ $G_{41}, G_{42}, G_{43}, G_{44}$	一般瑞利波(非压电晶体) 电磁波
类型 3	G_{12}, G_{32}, G_{42} G_{21}, G_{23}, G_{24}	压电瑞利波 机械 SH 波
类型 4	$G_{12}, G_{14}, G_{23}, G_{34}$ $G_{21}, G_{41}, G_{32}, G_{43}$	机械瑞利波 压电 SH 波 (BGS)
类型 5	$G_{12}, G_{32}, G_{42}, G_{13}$ $G_{21}, G_{23}, G_{24}, G_{31}$	纯机械波 机械 SH 波 电磁波

➤ 有效介电常数

在忽略表面力学载荷激励的情况下，为了描述界面电性能，许多有关叉指换能器和表面声波方面的分析都采用了表面有效介电常数(Surface effective

permittivity, SEP)的概念^[64]:

$$\varepsilon_s(s) = \frac{\bar{\sigma}(s)}{|k| \bar{\varphi}(s, x_3)|_{x_3=0}} \quad (2.43)$$

由(2.30)(2.31)可得:

$$\varepsilon_s(s) = \frac{1}{H_{44}} \quad (2.44)$$

通过采用矩阵法求得广义格林函数,得到的有效介电常数与文献^[27]中所采用的求解Christoffel方程的方法相比,程序运算要简单,更适合编程,而且对于表 2.2 中不同类型的晶体可以统一计算,不用针对不同类型分别编写代码。

表面有效介电常数只是材料常数的函数,对某种材料一定的切割、传播方向,就有一条相应的 $\varepsilon_s(s)$ 曲线。严格地说, $\varepsilon_s(s)$ 曲线包含了所有能够在晶体表面激励和传播,并且与电场相耦合的声波模式,因此 $\varepsilon_s(s)$ 曲线在声表面波分析中占有很重要的地位。下面我们以 3m 晶体硅酸镓钽 ($\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, LGS) 材料为例,分析有效介电常数曲线的主要性质。

图 2.3 为欧拉角 $[0\ 0\ 0]$ LGS 晶体表面有效介电常数与慢度的关系。从图 2.3 可以看出 $\varepsilon_s(s)$ 有若干个不连续点,分别对应着代表声波模式的截止慢度。当速度较低(慢度 s 较大)时, $\varepsilon_s(s)$ 的虚部为 0,表示在该区域内,无能量的损耗,声波模式为纯表面波模式,并且对应 α 的八个根都为复数。其中虚部为零和非零的分界点 S_{SS} 为对应的准慢切变波的截止慢度点。当速度增加超过 S_{SS} 时 ($S < S_{SS}$) 四对根中对应准慢切变波(垂直切变波)的一对根变为纯实根。当速度继续增加超过准快切变波(水平切变波)模式的截止慢度 S_{FS} 时 ($S < S_{FS}$) 四对根中对应准快切变波的一对也变为纯实根这样四对根中有两对变为纯实根。当速度超过准纵波模式的截止慢度 S_L 时,四对根中对应纵波的一对根也变为纯实根,四对根中有三对为纯实根。

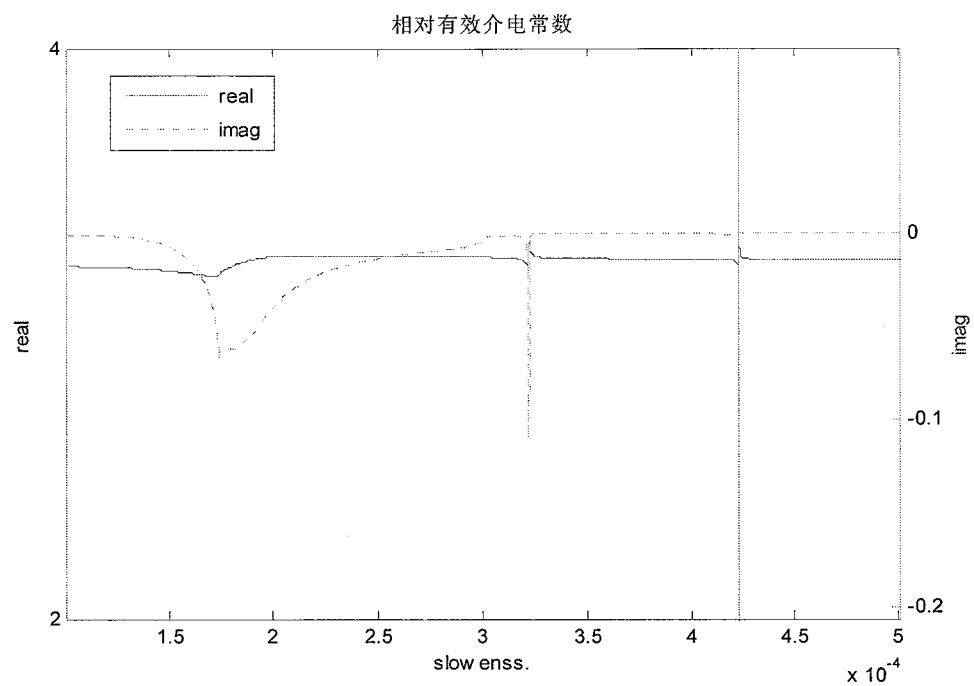


图 2.3 [0 0 0] LGS 晶体表面有效介电常数与慢度的关系

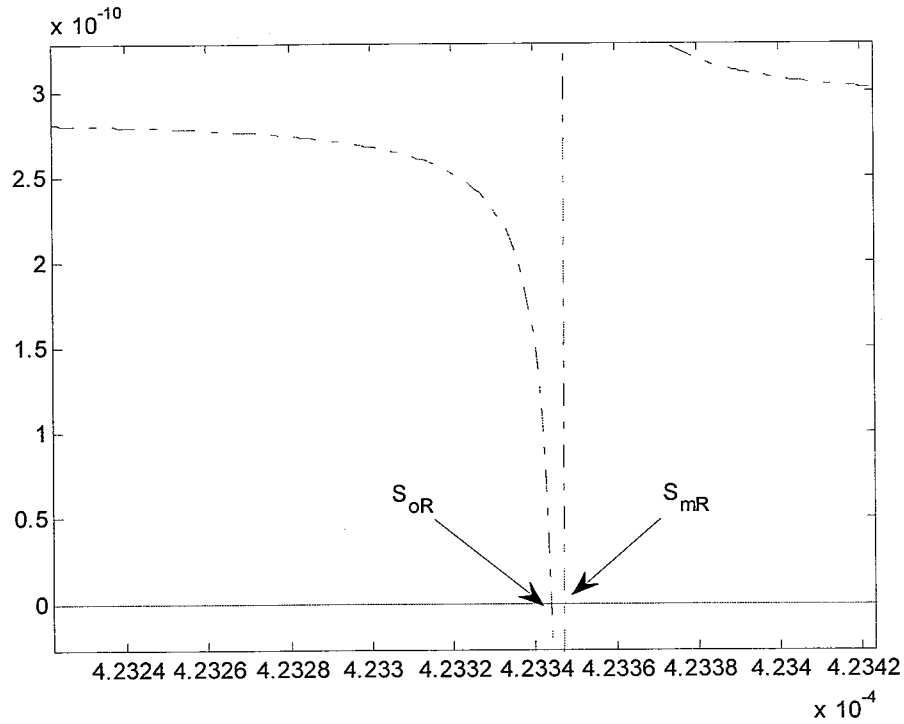
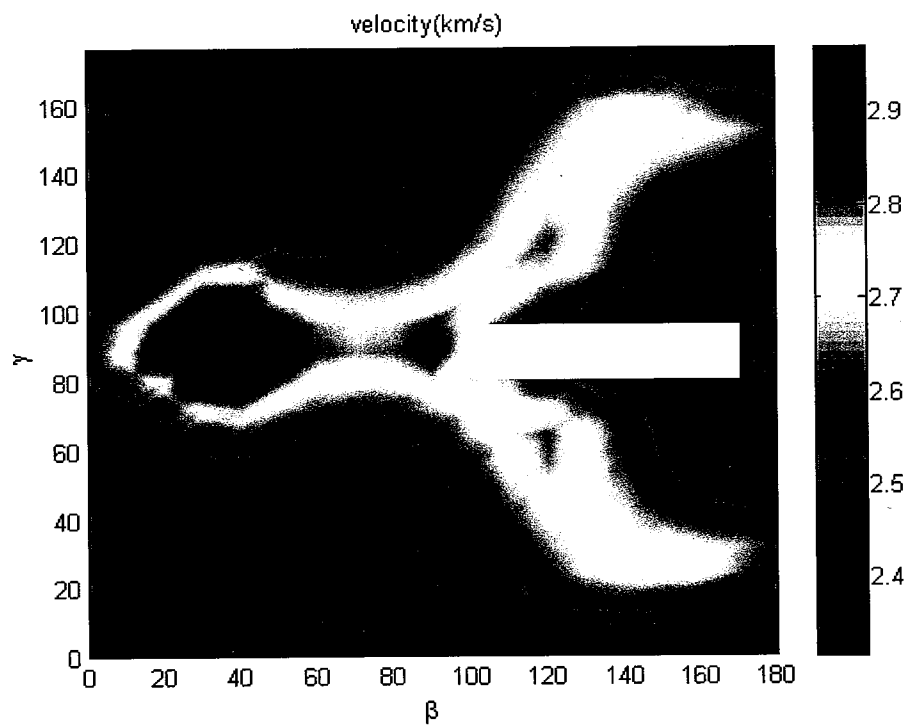
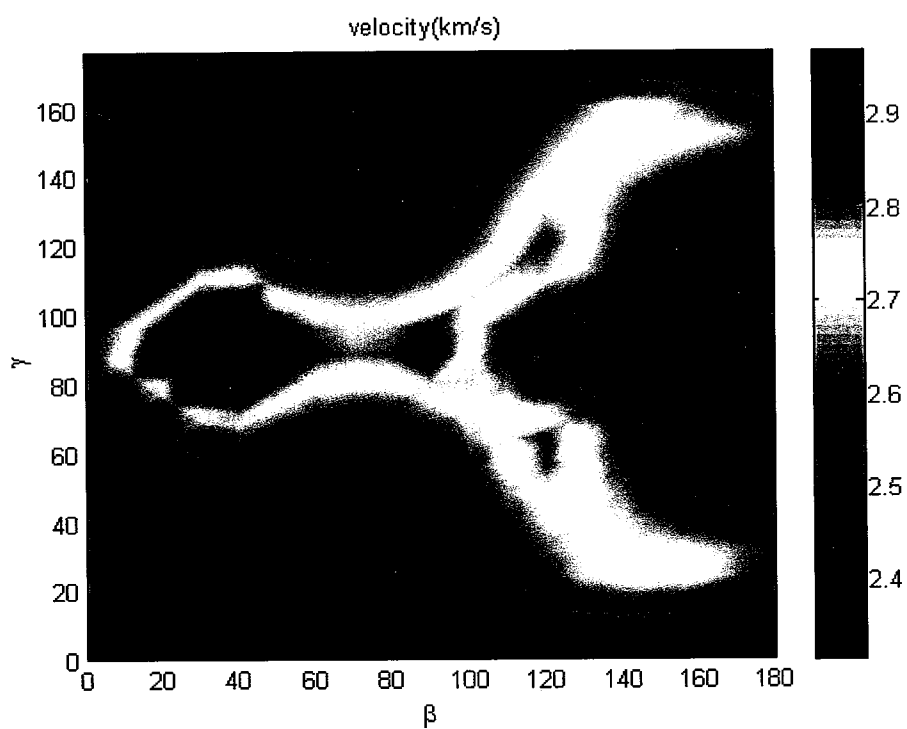


图 2.4 [0 0 0]LGS 晶体表面有效介电常数局部放大图

➤ 声表面波波速

根据(2.43)定义,当 $\epsilon_s(s)=0$ 时,对应电势有限而电荷为 0 自由化表面的情况,因此此时的 $S=S_f$,倒数是自由表面SAW的速度。当 $\epsilon_s(s)=\infty$ 时,对应电荷有限而电势为 0 金属化表面的情况,因此此时的 $S=S_m$,倒数是金属化表面SAW的速度。可以通过在 $S > S_{ss}$ 的区域内搜索零极点来获得压电材料的相应的瑞利波速度。

图 2.5和图 2.6分别表示欧拉角 $[0,\beta,\gamma]$ LGS自由表面和金属表面的相速度。需要指出的是,在图 2.5中存在一片空白的区域,这是因为在这个欧拉角区域内的晶体已经不存在自由表面情况下的瑞利波模式,如图 2.7所示此时有效介电常数对应的零点位于小于 S_{ss} 区域,从而转化为体波,这种体声波称为浅体声波(Surface Skimming Bulk Wave, SSBW)^[65-66]。这种浅体声波可以通过栅阵或者波导层将能量束缚在表面。从图 2.6可以看出,对于金属化表面瑞利波模式仍然是存在的。

图 2.5 $[0, \beta, \gamma]$ LGS 自由表面的 SAW 相速度图 2.6 $[0, \beta, \gamma]$ LGS 金属表面的 SAW 相速度

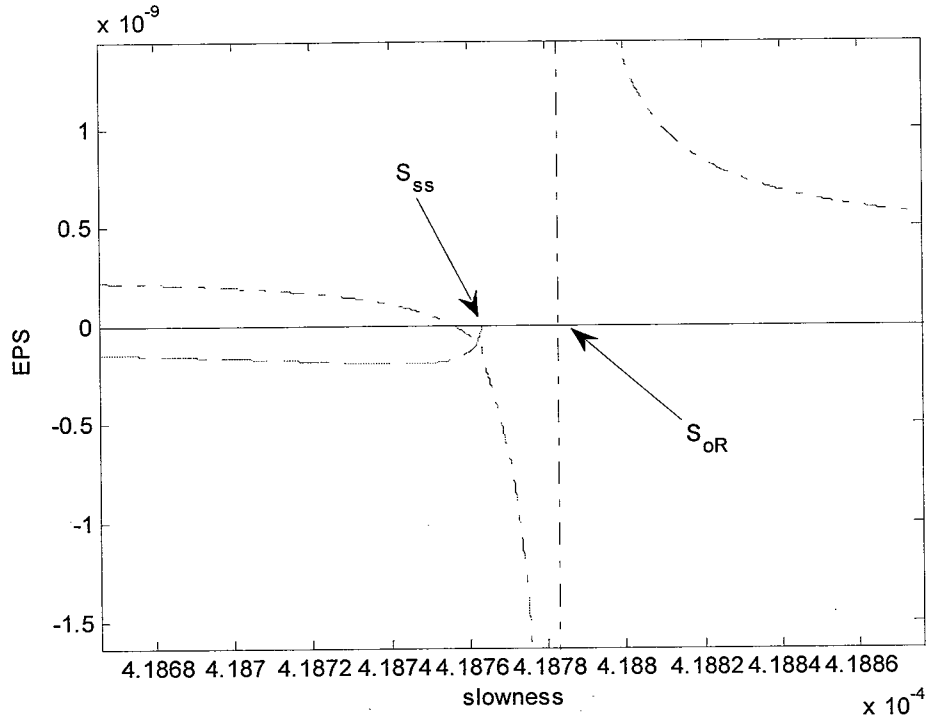


图 2.7 [0 150 88] LGS 晶体表面有效介电常数局部放大图

➤ 机电耦合系数

声表面波器件通过加载在叉指换能器上的电势激发声波，把接收到的声波能量转化为电能，机电耦合系数反映压电材料的机械能和电能之间相互耦合转化的能力。

晶体机电耦合系数由介质的表面边界条件决定，其中自由表面的耦合系数：

$$K_f^2 = -2\varepsilon_s(\infty) \left[s_f \frac{\partial \varepsilon_s(s, \omega)}{\partial s} \Big|_{s=s_f} \right]^{-1} \quad (2.45)$$

金属化表面的耦合系数

$$K_m^2 = -2\varepsilon_s(\infty)^{-1} \left[s_m \frac{\partial \varepsilon_s(s)^{-1}}{\partial s} \Big|_{s=s_m} \right]^{-1} \quad (2.46)$$

式中 $s_f = V_f^{-1}$ 和 $s_m = V_m^{-1}$ 分别是表面波在自由表面和金属化表面上的慢度。如果表面波比体声波速度低很多，那么 K_f^2 与 K_m^2 几乎相等，因此可以得出：

$$K^2 \approx \frac{V_f^2 - V_m^2}{V_v^2} \approx 2 \frac{V_f - V_m}{V_f} \quad (2.47)$$

图 2.8是根据(2.47)计算 $[0, \beta, \gamma]$ LGS 的机电耦合系数, 对于图 2.5中不存在自由表面瑞利波模式的区域, 采用(2.46)式计算。从图中可以看出在 $[0, 140 \sim 170, 20 \sim 40]$ 范围的晶体机电系数较大, 换能效率较高。并且通过图 2.5、图 2.6和图 2.8可以看到, LGS晶体在欧拉角 β 方向是关于 90 度对称的。

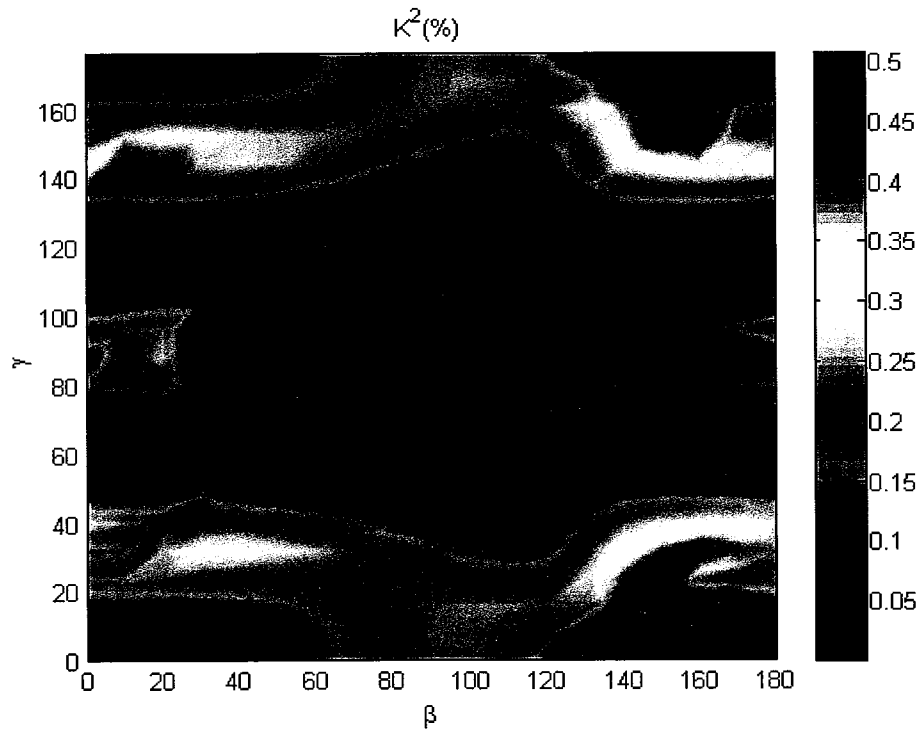


图 2.8 $[0, \beta, \gamma]$ LGS 机电耦合系数

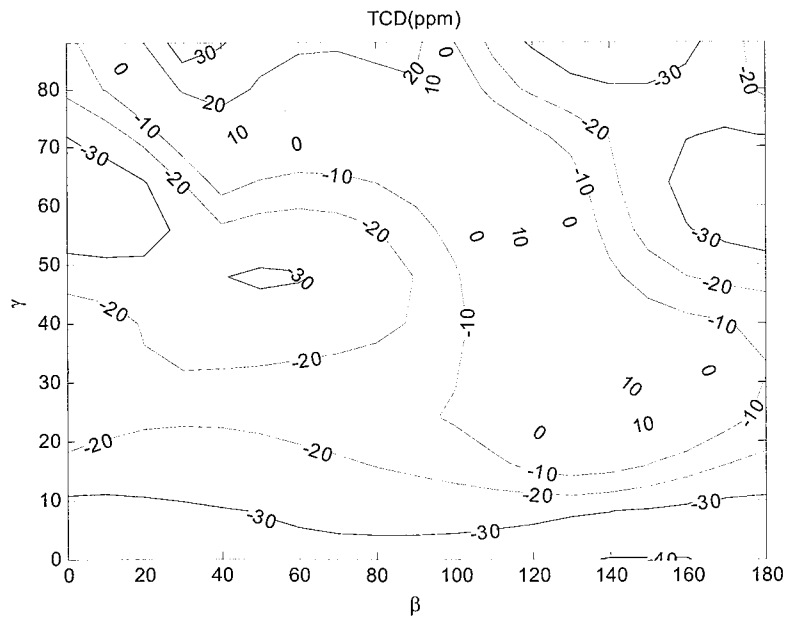


图 2.9 $[0, \beta, \gamma]$ LGS 延迟温度稳定系数 TCD (ppm)

➤ 基片材料的温度稳定性

声表面波器件工作频率在室温时随温度的变化情况十分重要, 为了避免工作温度变化时器件工作频率偏离系统频率, 通常要在设计时适当加宽声表面波器件的适用频率范围。温度对声表面波波速的影响称为速度温度系数(Temperature coefficient of velocity, TCV), 定义为

$$TCV = V^{-1} \frac{\partial V}{\partial T} \quad (2.48)$$

对谐振型声表面波器件, 谐振频率 f_r 的影响称为频率温度系数(Temperature coefficient of frequency, TCF)。对于声表面波延迟线, 常用温度对时间延迟 τ 的影响来表示 SAW 器件的温度稳定性, 称为延迟温度稳定系数(Temperature coefficient of delay, TCD)。为了在理论上计算 TCD 和 TCF, 我们定义:

$$\begin{aligned} TCF &= TCV_p - \alpha \\ TCD &= \alpha - TCV_g \end{aligned} \quad (2.49)$$

式(2.49)中 α 是在 SAW 的传播方向上基片的热膨胀系数, TCV_p 是相速度温度系数(Temperature coefficient of phase velocity), TCV_g (Temperature coefficient of group velocity) 是群速度的温度系数。对于单层的基片材料的相速度与群速度相等, $TCD \approx -TCF$ 。

声波传播特征参数随温度而变, 实质是由于材料参数随温度变化而引起的, 因此需要采用经过温度修正以后的材料常数来求解相应温度下的相速度。材料参数 $X(T)$ 修正按下式进行, 假设材料参数此处按泰勒展开

$$X(T) = X(T_0) \left[1 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2 + L \right] \quad (2.50)$$

其中 a_1 , a_2 分别表示材料常数的 1 阶和 2 阶温度系数。这样就可可在一定温度范围内对速度 v 进行计算, 进而求出温度系数。图 2.9 是 $[0, \beta, \gamma]$ LGS 在 20°C 的延迟温度稳定系数。

本章小结

本章从压电晶体中波动方程出发，放弃了传统的通过 Christoffel 方程和边界条件来求解的方法，而是将其转化成矩阵特征值与特征向量的问题，使得形式更加简洁和适合计算机编程。这种方法也是作为下一章的多层结构中的每一层刚度矩阵计算的基础。

针对半无限压电基片和真空边界的模型，利用瑞利波的选根原则，通过矩阵特征值法给出了广义格林函数的详细推导过程，得到了慢度域的广义格林函数，这是 SAW 传感器中基片材料选择的一个重要依据。通过对各种晶体广义格林函数中非 0 元素的情况对晶体类型和所支持的声表面波类型进行了分类。并且通过广义格林函数中 H_{44} 元素的倒数，即表面有效介电常数，以 LGS 材料为例，计算了声表面波速度、机电耦合系数、温度稳定性等特性。

第3章 多层结构中声波的传播

对于简单的各向同性的材料的层状结构，我们可以得到解析的解。另外如果表面覆盖一层很薄的各向同性薄膜，也可以通过 Tiesten 微扰理论的方法来估算声波传播速度等参数的改变^[67]，但是微扰理论只适用于相对膜厚小于 10% 的各向同性薄膜的情况。实际上，对于含有各向异性的压电材料的多层结构往往需要通过数值的方法来求解，其中传递矩阵方法是一种被广泛采用的一种方法，这种方法将不论多少层的结构都能通过矩阵传递的方法变成一种统一简单的形式。Adler 等人将这种方法推广到含有压电材料情况^[31, 68]，每一层介质顶部和底部的场量向量通过传递矩阵相联系起来。

$$\psi(x_3 + h, k_1) = \Phi(h, \omega, k_1) \psi(x_3, k_1) \quad (3.1)$$

其中传递矩阵 Φ 取决于层厚 h ，角频率 ω ，传播波数 k_1 ，以及该层的材料参数。Adler 等人使用传递矩阵方法推导了多层结构的有效介电常数^[31]。

Smith 等人^[35]推广了 Adler 的方法，得到了与频率有关的多层结构的二阶格林函数。这样使得格林函数的方法也适用于多层结构的情况。但是这种方法在高频以及层厚较厚的情况下，会出现数值发散问题，如图 3.2 所示。为了解决这个问题，散射矩阵方法和阻抗法被提了出来^[69-70]。Reinhardt 将散射矩阵方法推广到了理想导体层以及无粘滞液体情况^[71]。

Wang 等人在继承了 TM 方法的简洁有效的基础上，考虑到解决厚膜和高频情况下的数值计算稳定性问题，提出了递归刚度矩阵法(Recursive stiffness matrix, RSM)^[38]。

本章中将采用 Wang 提出的刚度矩阵的方法，并将该方法进行推广，推导类似第二章中的表示激励与响应之间关系的多层结构广义格林函数。并在第五章的中作为边界元方法理论基础，用来求解界面上广义应力和位移的关系。

3.1. 层状结构中声波传播理论

3.1.1. 单层刚度矩阵

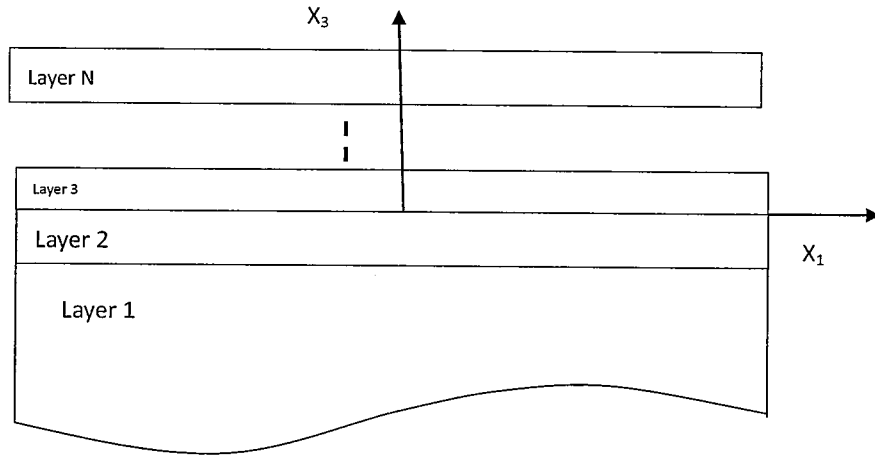


图 3.1 多层介质的坐标示意图

我们考虑如图 3.1 所示的多层介质问题，该介质是由 $N-1$ 层的不同介质与半无限衬底构成。坐标系如图所示。显然每一层中的声波都必须满足(2.18)式。进行变形后为：

$$R \cdot \Psi = \alpha \cdot \Psi \quad (3.2)$$

其中

$$R = \begin{bmatrix} C & I \\ D & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{A}{s^2} - B & 0 \\ -C^T & I \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

通过如下变形

$$jk_3 R \cdot \Psi = jk_3 \alpha \cdot \Psi \quad (3.4)$$

令

$$L = jk_3 R \quad (3.5)$$

则有：

$$L\Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial x_3} \quad (3.6)$$

求解这个一阶的偏微分方程可以得到:

$$\Psi(x_3 + h) = e^{Lh} \Psi(x_3) \quad (3.7)$$

令

$$M = e^{Lh} \quad (3.8)$$

称为层传递矩阵, 作用是将该层底部的状态矢量和顶部的状态矢量进行传递。

通过矩阵分解和泰勒展开理论得到:

$$\Psi(x_3 + h) = P^{-1} e^{\lambda h} P \cdot \Psi(x_3) \quad (3.9)$$

其中 P 和 λ 是 L 对应特征向量矩阵和特征值矩阵, 设 λ' 为 R 的特征值矩阵

$$e^{\lambda h} = e^{-ik\lambda' h} = e^{-ik_3 h} \quad (3.10)$$

如第二章所述, 通常 λ' 有 8 个解, 分别代表 8 个平面谐波模式, 4 个沿 x_3 正方向传播, 另外 4 个沿 x_3 负方向传播。设沿正方向传播的波, 对应 4 个特征值为 $\beta_3^+ = \text{diag}(k_3^{+1}, k_3^{+2}, k_3^{+3}, k_3^{+4})$, 对应的特征向量矩阵为 $W^+ = [P^+, D^+]^T$; 沿负方向传播的波, 对应 4 个特征值为 $\beta_3^- = \text{diag}(k_3^{-1}, k_3^{-2}, k_3^{-3}, k_3^{-4})$, 对应的特征向量矩阵为 $W^- = [P^-, D^-]^T$ 。这里, 我们将场量向量分为广义位移 P 和广义应力 D 两个部分。

因此层传递矩阵 M :

$$\begin{aligned} M &= \begin{bmatrix} P^- & P^+ \\ D^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{j\beta^- h} & \\ & e^{j\beta^+ h} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- & P^+ \\ D^- & D^+ \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} P^- & P^+ \\ D^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & \\ & e^{j\beta^+ h} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{j\beta^- h} & \\ & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- & P^+ \\ D^- & D^+ \end{bmatrix}^{-1} \end{aligned} \quad (3.11)$$

设 $H^\pm = \text{diag}[e^{\pm jk_z^{+1}h}, e^{\pm jk_z^{+2}h}, e^{\pm jk_z^{+3}h}, e^{\pm jk_z^{+4}h}]$, (3.11)可以变形为:

$$M = \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ D^- & D^+ H^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- H^- & P^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.12)$$

将(3.9)中 Ψ 中分解为 $[U, T]^T$, 并且根据(3.9), (3.12)可得:

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ D^- & D^+ H^+ \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} U(x_3 + h) \\ T(x_3 + h) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^- H^- & P^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} U(x_3) \\ T(x_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C1 \\ C2 \end{bmatrix} \\
& \Rightarrow \begin{bmatrix} U(x_3 + h) \\ T(x_3 + h) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ D^- & D^+ H^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C1 \\ C2 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \begin{bmatrix} U(x_3) \\ T(x_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^- H^- & P^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C1 \\ C2 \end{bmatrix} \\
& \Rightarrow \begin{bmatrix} U(x_3 + h) \\ U(x_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ P^- H^- & P^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C1 \\ C2 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \begin{bmatrix} T(x_3 + h) \\ T(x_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D^- & D^+ H^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C1 \\ C2 \end{bmatrix} \\
& \Rightarrow \begin{bmatrix} T(x_3 + h) \\ T(x_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D^- & D^+ H^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ P^- H^- & P^+ \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} U(x_3 + h) \\ U(x_3) \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

我们定义层刚度矩阵为：

$$K = \begin{bmatrix} D^- & D^+ H^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ P^- H^- & P^+ \end{bmatrix}^{-1} \tag{3.14}$$

层柔度矩阵为：

$$S = K^{-1} = \begin{bmatrix} P^- & P^+ H^+ \\ P^- H^- & P^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D^- & D^+ H^+ \\ D^- H^- & D^+ \end{bmatrix}^{-1} \tag{3.15}$$

通过(3.12)和(3.15)进行对比我们可以看出，由于(3.12)中存在一个求逆矩阵， H^+ ， H^- 都是呈指数增长或者减小，当层厚或者频率很大时，导致需要进行求逆矩阵前4列元素都将趋于0，这种矩阵在求逆时就存在奇异性问题，导致计算的不稳定。图 3.2与图 3.3计算的是ZnO/Diamond双层结构，当 $f \cdot h_{\text{ZnO}} = 1.8\text{E}4$ 时，广义格林函数 H_{44} 的计算结果。

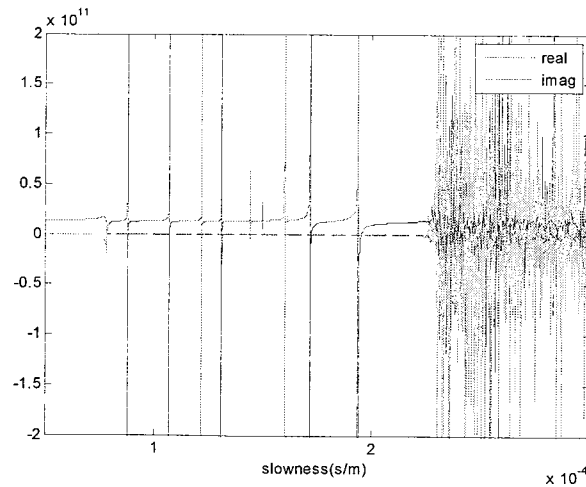


图 3.2 采用 Smith 矩阵法计算 ZnO/Diamond 双层结构 EPS（高频不稳定）

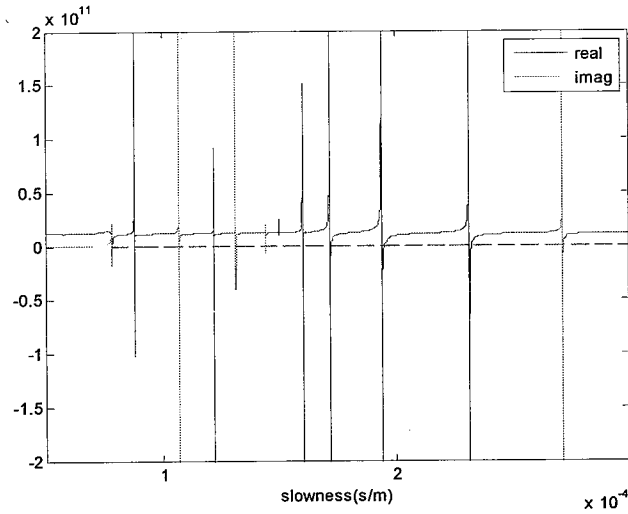


图 3.3 采用 RSM 方法计算 ZnO/Diamond 双层结构 EPS

3.1.2. 多层刚度矩阵递归

3.1.2.1. 刚度递归矩阵

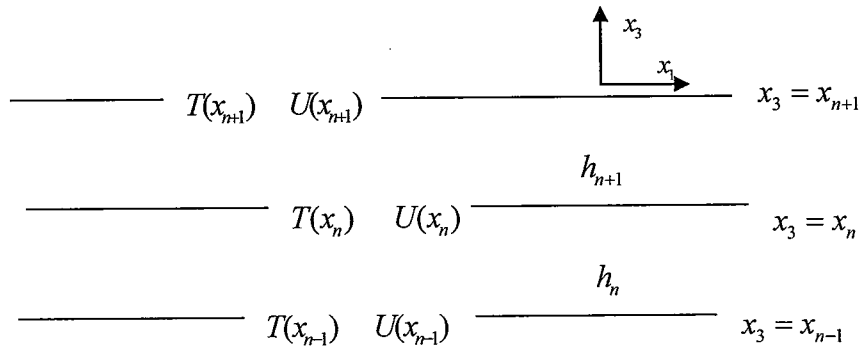


图 3.4 刚度矩阵递归示意图

我们假设图 3.1 中每一层都是理想连接，即满足广义应力和广义位移都连续。其中任意两层如图 3.4 所示，设第 $n+1$ 层的层厚为 h_{n+1} ，其上界面的广义位移和应力向量分别为 $T(x_{n+1})$, $U(x_{n+1})$ ，下界面广义位移和应力向量分别为 $T(x_n)$, $U(x_n)$ 。第 n 层的层厚为 h_n ，其上界面的广义位移和应力向量分别为 $T(x_n)$, $U(x_n)$ ，下界面广义位移和应力向量分别为 $T(x_{n-1})$, $U(x_{n-1})$ 。

对第 n 层，根据(3.13)

$$\begin{bmatrix} T(x_n) \\ T(x_{n-1}) \end{bmatrix} = [K^n] \begin{bmatrix} U(x_n) \\ U(x_{n-1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11}^n & K_{12}^n \\ K_{21}^n & K_{22}^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U(x_n) \\ U(x_{n-1}) \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

由(3.16)后可得到第n层上界面场量向量和下界面场量向量的关系:

$$\begin{bmatrix} T(x_n) \\ U(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11}^n (K_{21}^n)^{-1} & K_{12}^n - K_{11}^n (K_{21}^n)^{-1} K_{22}^n \\ (K_{21}^n)^{-1} & -(K_{21}^n)^{-1} K_{22}^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(x_{n-1}) \\ U(x_{n-1}) \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

同理, 对于第 n+1 层可以得到:

$$\begin{bmatrix} T(x_{n+1}) \\ U(x_{n+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11}^{n+1} (K_{21}^{n+1})^{-1} & K_{12}^{n+1} - K_{11}^{n+1} (K_{21}^{n+1})^{-1} K_{22}^{n+1} \\ (K_{21}^{n+1})^{-1} & -(K_{21}^{n+1})^{-1} K_{22}^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(x_n) \\ U(x_n) \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

将(3.17)代入到(3.18)可以得到

$$\begin{bmatrix} T(x_{n+1}) \\ T(x_{n-1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11}^{n+1} + K_{12}^{n+1} (K_{11}^n - K_{22}^{n+1})^{-1} K_{21}^{n+1} & -K_{12}^{n+1} (K_{11}^n - K_{22}^{n+1})^{-1} K_{11}^n \\ K_{21}^n (K_{11}^n - K_{22}^{n+1})^{-1} K_{21}^{n+1} & K_{22}^n - K_{21}^n (K_{11}^n - K_{22}^{n+1})^{-1} K_{12}^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U(x_{n+1}) \\ U(x_{n-1}) \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

从(3.19)式我们可以看出, 图 3.4 中两层结构的最上层界面和最下层界面通过一个新的类似单层刚度矩阵得到了两者之间的关系, 因此, 二层结构也就等效成一层结构。依次类推, 任意多层的结构, 我们都可以得到其顶层和底层之间广义位移和应力向量之间的联系。

3.1.2.2. 半无限基片的多层结构总刚度矩阵

首先, 我们给出半无限基片的表面刚度矩阵。

根据前面的讨论, 对于半无限的基片只存在向基片内部传播的声波, 不可能存在由无限远处向表面传播的声波, 因此需要根据选根原则, 从 8 个特征根中选择 4 个满足条件的根。此时(3.14)(3.15)式均由 8x8 的矩阵退化为 4x4 的矩阵。实际上柔度矩阵[S]即为前面单层基片(2.32)式中的广义格林函数。这种情况下, 我们将半无限基片表面的广义应力向量和广义位移向量的关系以及柔度/刚度矩阵表述成:

$$\begin{cases} S_s = P^-(D^-)^{-1} \\ K_s = D^-(P^-)^{-1} \end{cases} \quad \begin{cases} U = S_s T \\ T = K_s U \end{cases} \quad (3.20)$$

这里刚度、柔度矩阵均只有前 4x4 个元素, 即 K_{11} , S_{11} 不为 0, 其它均为 0。

对于多层结构的总表面刚度矩阵为 $[K^N]$, 可以通过以下两种方法求得。

1 自上而下。在半无限基片上的多层介质板共有 $N-1$ 层, 这 $N-1$ 层介质的总刚度矩阵 $[K^{N-1}]$ 采用(3.19)式进行计算得到。而半无限基片的表面刚度矩阵 $[K^S]$ 通过(3.20)计算得到, 两者相乘, 然后可得到总刚度矩阵 $[K^N]$ 为:

$$K^N = \begin{bmatrix} K_{11}^{N-1} + K_{12}^{N-1}(K_{11}^S - K_{22}^{N-1})^{-1}K_{21}^{N-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

2 自下而上。通过(3.21)式, 我们可以知道对于和半无限层进行递归, 产生的刚度矩阵只有 K_{11} 不为0, 因此我们只需要对 K_{11} 进行递归, 也就是每递归一次都产生一个新的半无限基片。递归的公式为:

$$K^n = K_{11}^{n-1} + K_{12}^{n-1}(K_{11}^S - K_{22}^{n-1})^{-1}K_{21}^{n-1} \quad (3.22)$$

广义应力和位移的关系为:

$$\begin{bmatrix} T_{13} \\ T_{23} \\ T_{33} \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} & K_{14} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} & K_{24} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} & K_{34} \\ K_{41} & K_{42} & K_{43} & K_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

显然, 对于柔度矩阵的递归计算也可采用同样的方法。只需将公式中的刚度矩阵符号替换为顺度矩阵 S :

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{13} \\ T_{23} \\ T_{33} \\ D \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

3.1.2.3. 金属层

对于非压电的材料, 只要介电常数矩阵不为0, 即使压电矩阵元素都是0, 都可以按照之前所阐述的方法计算。但是对于理想的金属材料, 介电常数将趋于无穷大, 因此显然无法按照非金属材料的方法进行计算。实际上, 因为金属层的存在, 将金属层上面多层结构和下面多层之间的电磁场进行了屏蔽, 相互之间没有影响, 刚度矩阵由维数由8退化为6, 从物理意义上说 金属层的传递矩阵只进行声学场量之间的传递。其刚度矩阵为:

$$\begin{bmatrix} T_{13}(x_{n+1}) \\ T_{23}(x_{n+1}) \\ T_{33}(x_{n+1}) \\ T_{13}(x_n) \\ T_{23}(x_n) \\ T_{33}(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (K_{11}^n)_{3 \times 3} & (K_{12}^n)_{3 \times 3} \\ (K_{21}^n)_{3 \times 3} & (K_{22}^n)_{3 \times 3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(x_{n+1}) \\ u_2(x_{n+1}) \\ u_3(x_{n+1}) \\ u_1(x_n) \\ u_2(x_n) \\ u_3(x_n) \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

导体电势处处都相等，即金属层上下界面的电势是相等的

$$\phi(x_{n+1}) = \phi(x_n) \quad (3.26)$$

在金属层与非金属层之间，电位移是不连续的，界面会出现自由电荷分布，自由电荷的密度等于界面处非金属层中的电位移的大小。

3.1.2.4. 液体层

a) 理想液体

首先，我们考虑理想导电液体，因为不存在切应力，理想液体中只存在纵波，其弹性系数矩阵[C]只有一个独立的常数：

$$C = \begin{bmatrix} c & c & c & 0 & 0 & 0 \\ c & c & c & 0 & 0 & 0 \\ c & c & c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

代入(2.18)式，经过化简，推导可以得到：

$$u_2 = 0 \quad \frac{j}{k} T_{13} = 0 \quad \frac{j}{k} T_{23} = 0 \quad (3.28)$$

这里我们可以理解为，理想液体视为一种广义的‘导体’，液体层上下两个界面的应力和位移 u_2 ， $\frac{j}{k} T_{13}$ ， $\frac{j}{k} T_{23}$ 都‘接地’了。并且特征方程变成为解析的形式，

$$\begin{aligned} \alpha &= \pm \sqrt{\frac{\rho}{cs^2} - 1} \\ \frac{j}{k} T_{33} &= \frac{\rho}{s^2} u_1 \\ u_3 &= \alpha u_1 \end{aligned} \quad (3.29)$$

对于每个慢度值，都有 2 个特征值 α ，第 i 个特征值 α 对应的特征向量为

$$\begin{bmatrix} u_1 & u_3 & \frac{j}{k} T_{33} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 1 & \alpha^i & \frac{\rho}{s^2} \end{bmatrix}^T \quad (3.30)$$

刚度矩阵变成

$$\begin{bmatrix} T_{33}(x_{n+1}) \\ T_{33}(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (K_{11}^n)_{1 \times 2} & (K_{12}^n)_{1 \times 2} \\ (K_{21}^n)_{1 \times 2} & (K_{22}^n)_{1 \times 2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(x_{n+1}) \\ u_3(x_{n+1}) \\ u_1(x_n) \\ u_3(x_n) \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

同理，对于非导电的液体，由于是电学量和声学量是解耦的，因此我们只需要在对应导电液体情况中加入一个介电常数项即可。

b) 粘性液体

首先，我们考虑导电牛顿粘性液体，液体中的声波不含耦合电磁场项，忽略体粘性，液体的粘滞系数为常数，纵波和剪切波都可以在其中传播。按照我们前面讨论的形式，粘性液体中的本构方程可以表示成如下的应力和应变关系^[72]：

$$T_{ij} = (K - j\omega \frac{2}{3}\eta) \sum_{k=1}^3 S_{kk} \delta_{ij} + 2j\omega\eta S_{ij} \quad (3.32)$$

其中K表示液体的体积模量， η 表示剪切粘滞系数。通过(3.32)式，我们可以看出粘性液体和各向同性固体的弹性系数矩阵具有相同的对称性，只是出现了一个因子 $j\omega\eta$ ，材料参数出现了虚部。因此可以将粘性液体等效视为各向同性固体，并且赋予等效的劲度系数：

$$\begin{aligned} c'_{11} &= K + \frac{4}{3}j\omega\eta \\ c'_{44} &= j\omega\eta \end{aligned} \quad (3.33)$$

对于非导电的粘性液体，由于是电学量和声学量是解耦的，因此我们只需要根据液体的介电常数，独立引入一个电磁波项即可。

3.1.2.5. 粘弹性层

聚合物层作为一种典型的粘弹性材料，广泛的应用与声表面波传感器中。本文中，本文只考虑各向同性的粘弹性材料。对于这种材料，我们将剪切弹性常

数改写成一个复数形式^[73]:

$$c'_{44} = \frac{j\omega\eta}{1 + j\omega\eta/c_{44}} \quad (3.34)$$

在低频的时候($j\omega\eta = c_{44}$),这时 $c'_{44} = j\omega\eta$, 材料表现为粘性。当在高频的时候($j\omega\eta = c_{44}$), 这时 $c'_{44} = c_{44}$, 材料表现为弹性。更广泛的, 对于弹性材料^[67], 可以采用弹性常数引入一个与频率有关的虚部^[74]:

$$c'_{ij} = c_{ij} + j\omega\eta_{ij} \quad (3.35)$$

这种复数的弹性常数能够导致声波部分能量被吸收。随着频率变大时, 这种效应会更加明显。但是通常来说, 这种材料的损耗参数难以获得。

3.1.3. 边界条件

3.1.3.1. 激励源位于层状结构与真空界面

我们定义在真空界面处的力学边界条件是应力连续, 电学边界条件是电势连续, 表面电荷密度等于法向电位移的不连续, 即:

$$T_{i3}(x_1)|_{x_3=0^-} = T_{i3}(x_1)|_{x_3=0^+} \quad (3.36)$$

$$\phi_3(x_1)|_{x_3=0^-} = \phi_3(x_1)|_{x_3=0^+} \quad (3.37)$$

$$D_3(x_1)|_{x_3=0^+} - D_3(x_1)|_{x_3=0^-} = \sigma(x) \quad (3.38)$$

为了获得形如(2.30)激励和响应的格林函数。需要将(3.23)(3.24)中电位移转化成电荷密度。

方法一, 根据刚度矩阵, 我们将刚度矩阵进行分块表示:

$$\begin{bmatrix} T \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_f & K_{fe} \\ K_{ef} & K_e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

由(2.38)(3.39)可以得到:

$$D_3 = \varepsilon_0 |k| \phi - \sigma = K_{ef} U + K_e \phi \quad (3.40)$$

因此得到电荷的表达式为:

$$\sigma = -K_{21}U + (\varepsilon_0 |k| - K_{22})\phi \quad (3.41)$$

得到真空边界的格林函数为:

$$G = \begin{bmatrix} K_f & K_{fe} \\ -K_{ef} & (\varepsilon_0 |k| - K_c) \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.42)$$

方法二, 根据柔度矩阵。同样, 将柔度矩阵进行分块表示:

$$\begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_f & S_{fe} \\ S_{ef} & S_e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T \\ D_3 \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

由(2.38)(3.43)可以得到:

$$\begin{cases} U = (S_f + \frac{\varepsilon_0 |k| S_{fe} S_{ef}}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e}) T - \frac{S_{fe}}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e} \sigma \\ \phi = \frac{S_{ef}}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e} T - \frac{S_e}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e} \sigma \end{cases} \quad (3.44)$$

因此可以得到真空边界的格林函数柔度矩阵表达式:

$$\begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_f + \frac{\varepsilon_0 |k| S_{fe} S_{ef}}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e} & -\frac{S_{fe}}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e} \\ \frac{S_{ef}}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e} & -\frac{S_e}{1 - \varepsilon_0 |k| S_e} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T \\ \sigma \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

3.1.3.2. 激励源位于层状结构内部(Imbedded source)

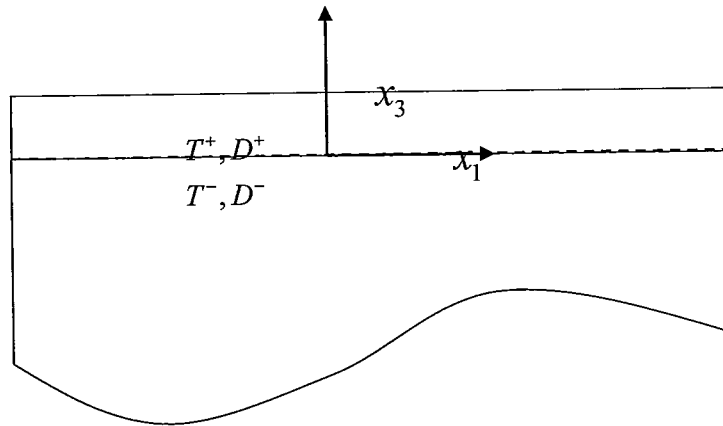


图 3.5 激励源位于结构内部示意图

如图 3.5 所示, 设激励源的位置位于 $x_3=0$ 平面上, 半无限基片的刚度矩阵方程为:

$$\begin{bmatrix} T^- \\ D_3^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_f & K_{fe} \\ K_{ef} & K_e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} = K_s \begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

在界面上的广义位移矢量是连续的, 广义应力矢量不连续:

$$\begin{bmatrix} \Delta T \\ \sigma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T^+ - T^- \\ D_3^+ - D_3^- \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

在 $x_3=h$ 平面上, 无激励源, 应力和电荷密度都为 0, 层中的广义应力和广义位移的关系为:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ T^+ \\ D_3^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11}^f & K_{11}^{fe} & K_{12}^f & K_{12}^{fe} \\ K_{11}^{ef} & K_{11}^e - \varepsilon_0 |k| & K_{12}^{ef} & K_{12}^e \\ K_{21}^f & K_{21}^{fe} & K_{22}^f & K_{22}^{fe} \\ K_{21}^{ef} & K_{21}^e & K_{22}^{ef} & K_{22}^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^h \\ \phi^h \\ U \\ \phi \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

因此, 可以推出:

$$\begin{bmatrix} T^+ \\ D_3^+ \end{bmatrix} = (K_{22} - K_{21} \begin{bmatrix} K_{11}^f & K_{11}^{fe} \\ K_{11}^{ef} & K_{11}^e - \varepsilon_0 |k| \end{bmatrix}^{-1} K_{12}) \begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

由(3.46)(3.47)(3.49)可以得到:

$$\begin{bmatrix} \Delta T \\ \sigma \end{bmatrix} = (K_{22} - K_{21} \begin{bmatrix} K_{11}^f & K_{11}^{fe} \\ K_{11}^{ef} & K_{11}^e - \varepsilon_0 |k| \end{bmatrix}^{-1} K_{12} - K_s) \begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} \quad (3.50)$$

3.2. 计算实例及与实验结果

3.2.1. 波导层效应

ST-90°X 石英由于温度系数比 LiNbO_3 和 LiTaO_3 小, 而机电耦合系数比 ST-X 石英大, 有很大的机械强度和稳定的机械性质以及较大的剪切波速度, 因而成为常用的基片材料; SiO_2 由于剪切波速度小, 性质稳定, 粘弹性小, 常用来做 ST-90°X 石英的波导层, 用于 Love 波器件设计中。

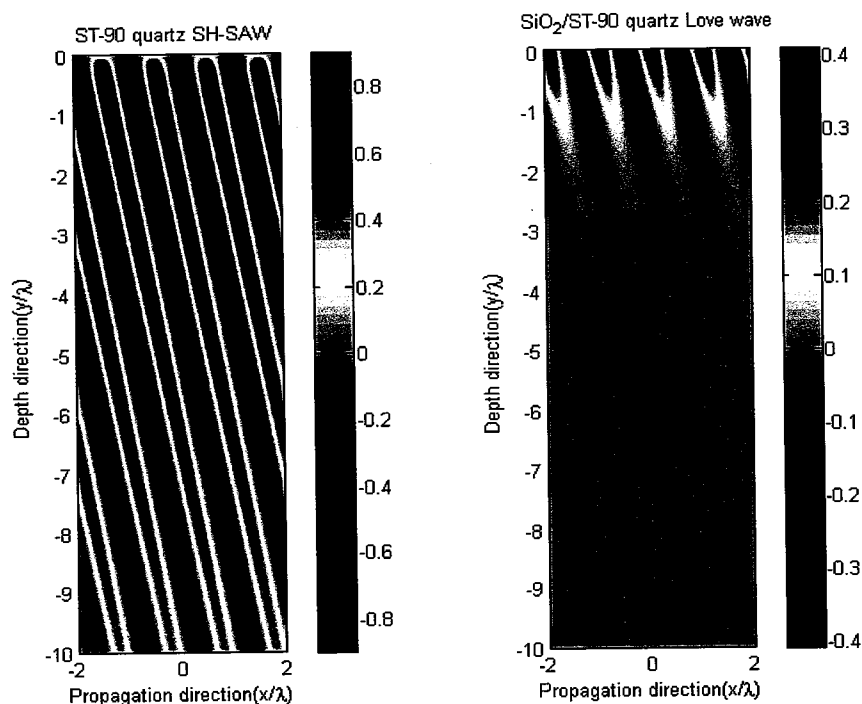


图 3.6 波导层对声波能量随深度变化的影响

为了分析Love波结构中，波导层对声波能量分布的影响，这里，首先分析了单层ST-90°X 石英中激发的表面波，由前面的分析可以知道，单层ST-90°X 石英在自由表面激发的是SSBW，在金属化表面是SH-SAW，能量分布如图 3.6左所示，可以看到，在这种情况下，表面波的能量随深度分布衰减缓慢，能量分布大约在深度 10 个波长内。图 3.6右是覆盖了一层 2.5%波长厚度的SiO₂的能量分布，这个时候SSBW转化成了Love波，声波能量几乎被限制在深度方向一个波长以内。

通常来说，波导层存在一个最优厚度，使得能量集中在叉指换能器所处平面上。如图 3.7中从左至右分别对应这波导层厚度为 0.02λ ， 0.06λ ， 0.10λ 三种情况的计算结果。 $y=0$ 面表示IDT所在平面。当膜厚太薄时，波导层对声波能量限制作用不明显，有大量的能量进入到基片中去。当膜厚太厚时，虽然声波能量都限制在波导层中，但是对于电极所在的平面分布的能量也很少了。到膜厚处于两者之间的情况下，声波能量集中分布在波导层和基片的界面上，因此叉指换能器具有高的换能效率。

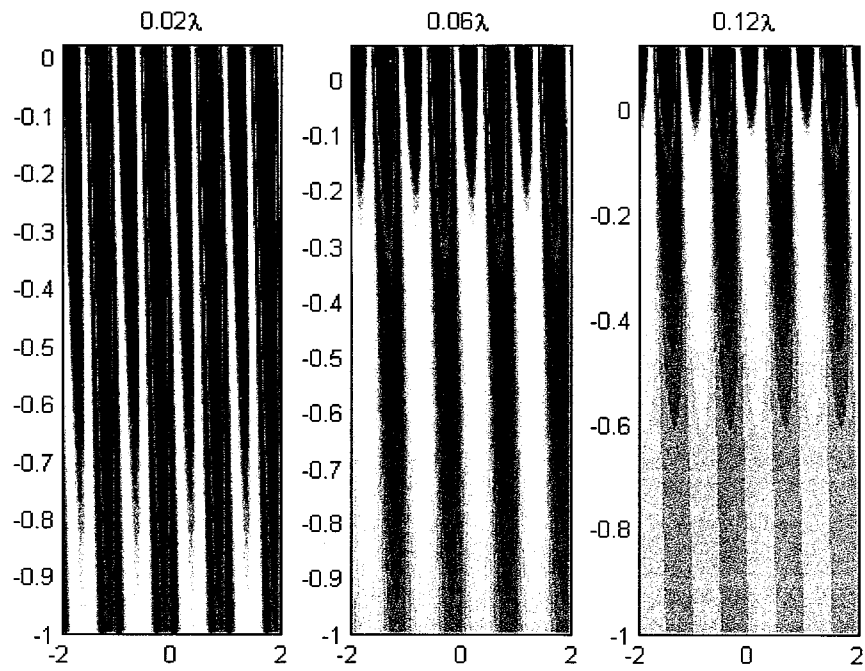
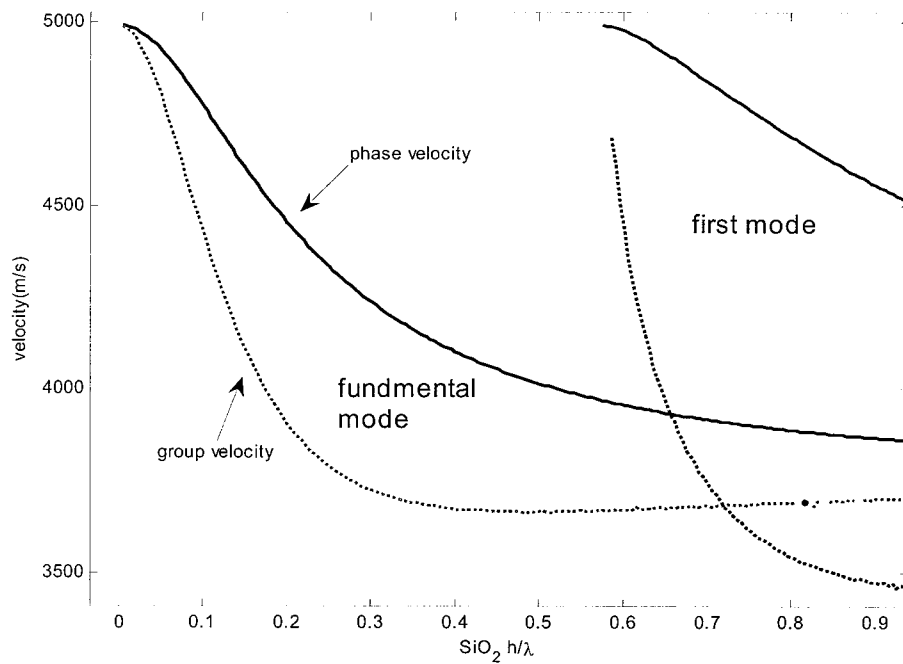


图 3.7 不同膜厚波导层 Love 波能量随深度分布

图 3.8 $\text{SiO}_2/\text{ST-90 X}$ 石英 结构 Love 波模式速度频散曲线图

多层结构会引起导致频散现象，速度不但只是材料参数的函数，而且也是频率的函数，并且在波导层超过一定厚度时，就产生高阶的模式，如图 3.8所示，而且此时结构相速度和群速度不再相等，它们之间的关系为：

$$V_g = V_p + (kd) \frac{dV_p}{d(kd)} \quad (3.51)$$

其中 d 表示波导层的膜厚, k 表示波数。

3.2.2. 具有温度补偿效应的多层结构

虽然我们能够通过调节 SiO_2 波导层厚度来获得较高的机电耦合系数和灵敏度。但是根据第一章的介绍, ST-90°X 石英和 SiO_2 都是正温度系数的材料, SiO_2 无法对 ST-90°X 石英达到温度补偿的效果。需要特别指出的是对于多层结构的 TCF 和 TCD 不再只是 (2.49) 中相反数的关系。这两者的关系变成^[75]

$$TCF = -\frac{V_g}{V_p} TCD \quad (3.52)$$

V_g 表示群速度, V_p 表示相速度。

由 (3.51)(3.52) 式所计算得到 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英结构的 TCF 关系如图 3.9 所示, 当 SiO_2 波导层厚度很薄时, TCF 此时接近 ST-90°X 石英基片的 TCF 约为 30ppm^[76], 而且在 10% SiO_2 膜厚内, TCF 变化很小, 当膜厚再逐渐增加时, TCF 随之增加, 显然无法通过调 SiO_2 波导层厚度来实现零温度系数。当对器件的稳定稳定性要求很高时, 必须要对这种结构进行改进。这里, 我们通过在在 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英表面在镀上一层温度系数为负的材料, 例如 SU-8 胶, 来实现温度补偿, 从而实现低温度系数的结构。如图 3.10, 两条曲线分别表示 SiO_2 厚度为 5% 和 0.7% 时, TCF 随 SU-8 的厚度变化的情况。当 SU-8 的厚度较薄的时候, SiO_2 对 TCF 起主要作用, 较厚 SiO_2 的 TCF 略高。当 SU-8 的厚度逐渐增大时, SU-8 负温度系数补偿作用使得结构的 TCF 逐渐变小, 并且由正 TCF 最后变成负 TCF。由图可以看出, 厚 SiO_2 的 TCF 变化速率更快, 这是因为厚 SiO_2 波导层使得声波能量分布更集中在表面, 所以 SU-8 的对声波产生的作用也就越明显。由图可以看出, 5% 和 0.7% 的 SiO_2 实现零温度系数对应 SU-8 的补偿厚度分别为 2.72% 和 2.84%。

根据理论计算的结果, 我们制作了一个三层 SU-8/ $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英延迟线振荡器, SU-8 相对膜厚为 2.8%、 SiO_2 相对膜厚为 0.7%, 通过测量器件在不同温度下的频率来得到器件的 TCF, 不同温度下的频率响应如图 3.11 所示。从拟合

的结果可以得到器件的TCF=6.48ppm，与理论计算结果 1ppm存在一定的误差。造成误差的原因主要是由于对薄膜的厚度测量不准确引起的，测试的结果与 2.65% SU-8 厚度的结果吻合，即 42nm的误差，另外SU-8 采用的是甩胶法镀膜，膜厚均匀性较差，考虑到这些因素的影响，这个误差是可以接受的。

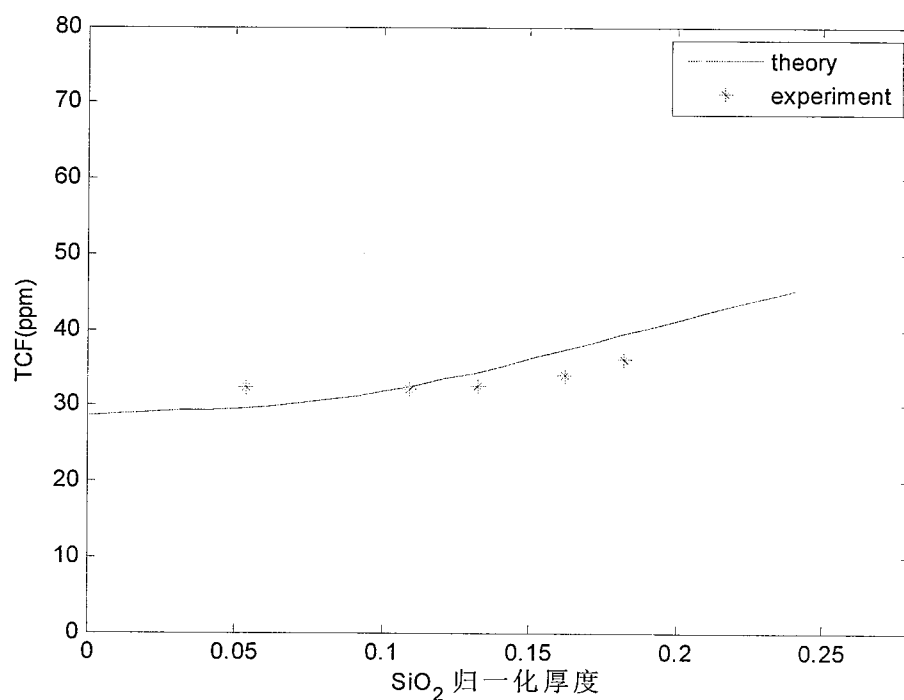
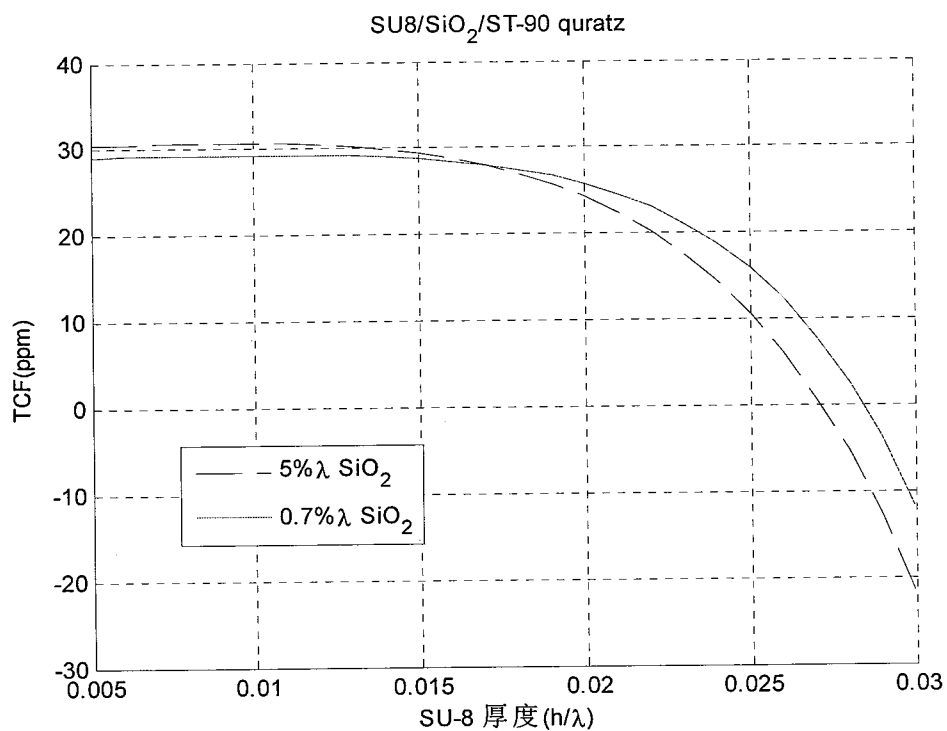
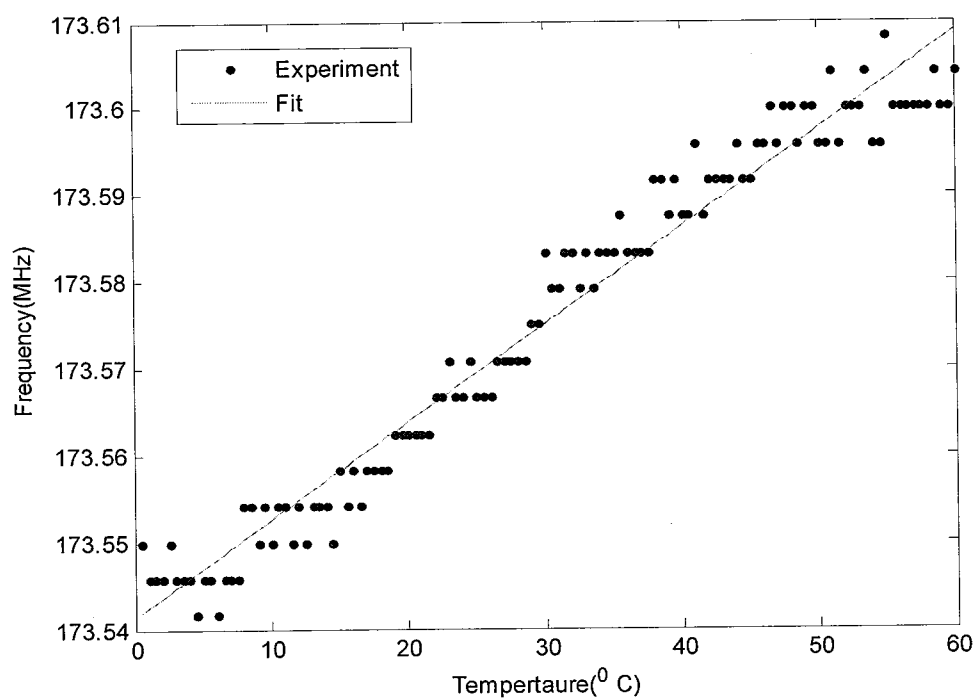


图 3.9 SiO₂/ST-90X 石英结构的 TCF

图 3.10 SU-8/SiO₂/ST-90X 石英结构的 TCF图 3.11 SU-8/SiO₂/ST-90°X 石英结构在不同温度下的频率响应

本章小结

本章采用 Wang 等人的递归刚度矩阵法对均匀多层结构进行分析,一方面,这种方法避免了随着层数的增加,需要列出所有层的 Christoffel 方程以及波动方程所满足的每一层边界条件,造成方程数目很多并且繁琐的情况。另一方面,经过巧妙的变形,有效地避免了数值计算中的不稳定问题。为了使得这种方法更广泛地运用在多层声表面波传感器中,本文将这种方法推广到包括金属层、液体层、粘弹性层的情况。

在本章后面部分,考虑了包括金属层和液体层情况,推导了递归刚度矩阵方法,给出了针对不同边界条件下的广义格林函数计算方法,这正是第四章的边界元分析的求解界面上广义位移与广义应力关系的基础。通过对广义格林函数的分析,得到了 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英结构中波导层对 Love 波的能量分布和频散特性的影响。最后计算了 $\text{SU-8}/\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英结构的 TCF 随波导层厚度变化情况,制作了获得温度系数为 6.48ppm 器件。

第4章 多层结构 SAW 栅阵的周期 FEM/BEM 方法

对于含有半无限厚基片的结构，由于边界元适合于解决无限域问题的特点，因此综合有限元和边界元方法仿真 SAW 器件一直以来都是研究的热点。

当 SAW 器件中存在大量的指条呈周期性排列时，可以近似看作无限周期栅格，并且可以对一个周期的模型进行研究。本章应用周期有限元/边界元方法来分析传感器结构。根据单层周期格林函数的概念，类比提出了层状结构的周期格林函数和谐波导纳。在此基础上，给出了基于周期结构模型分析结果，提取 COM 参数的方法。并将 COM 参数运用到 COM 理论和 P 矩阵结合方法中，就可以对 SAW 传感器进行仿真，为设计器件提供有效的指导。

通常单层基片结构的方法，是将电极和基片所在的平面为分界面，对电极采用 FEM，基片采用 BEM，这样的模型因为在基片上非电极区域没有激励，实际上只需要分析电极所在区域，这种方法对单层尤其是有限长结构分析时很有优势。但是如果在基片上除了电极还有其他层的话，这种方法不再有优势了，本文采用了另外一种不同的 FEM/BEM 模型。

本文的有限元/边界元具体实现方法是，在一定厚度处基片上划分一个分界面，通过边界元即广义格林函数来对分界面下基片建模，得到界面上应力和位移的关系的阻抗矩阵；另一方面通过有限元方法对分界面上的基片、电极以及覆盖在其上面的多层结构进行分析。最后通过分界面上连续性条件实现有限元和边界元的结合。

4.1 周期结构 FEM/BEM 理论

4.1.1 周期结构 FEM/BEM 模型

对于在周期边界条件下传播的声波，我们根据 Floquet 定理：在稳态振动下，

沿声波传播方向任一点横截面上场的分布和平移一个周期的横截面场分布之间只存在一个常数相位差。

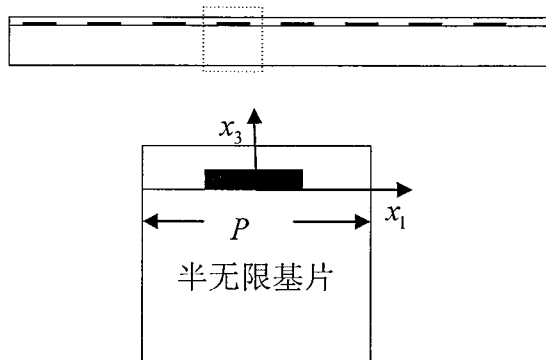


图 4.1 无限周期栅格阵示意图

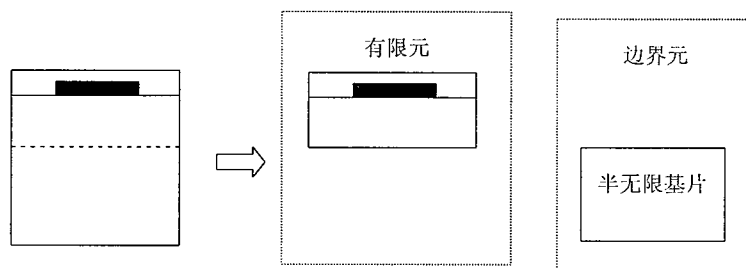


图 4.2 周期栅阵 FEM/BEM

如图 4.1 所示的模型，设栅格阵的周期是 p ，波的传播方向是 x_1 ，如图 4.2 所示，我们将图 4.1 半无限基片拆分成厚度为 H 和一个半无限的两个部分。通过边界元即广义格林函数来对分界面下基片建模，得到界面上应力和位移的阻抗关系矩阵；通过有限元方法对分界面上的基片、电极以及覆盖在其上面的多层结构进行分析，获得有限元方程。最后通过将边界元方法计算得到的表示广义位移和广义应力关系的阻抗矩阵代入有限元方程，实现有限元和边界元方法的结合。

在图 4.2 中的有限元计算部分，包括有限厚的基片，金属电极以及覆盖层等部分，实际中镀膜条件限制，覆盖层的膜厚在水平面内的厚度并不是理想均匀的，但是本文中采取了理想平整的假设。另外在制作金属电极时，腐蚀出来电极的截面也非矩形，而是梯形，本文为了简化模型，认为电极截面是理想的矩形。

4.1.2 有限元分析理论

4.1.2.1 有限元原理

有限元方法的原理是将连续的区域划分成有限个的小单元，相邻的单元通过节点来相连，每个小区域内的场量通过这单元节点的场量经过形函数插值表示，

$$\begin{cases} \mathbf{u} = [N^u]^T \mathbf{u}_{node} \\ v = [N^v]^T v_{node} \end{cases} \quad (3.53)$$

$\mathbf{u}$ 代表位移矢量， v 代表电势， $\mathbf{u}_{node}$ 代表节点位移， v_{node} 代表节点电势， $[N^u]$ 为位移形函数， $[N^v]$ 为电势形函数，分别为：

$$[N^u]^T = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & \dots & N_n & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & \dots & 0 & N_n & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & \dots & 0 & 0 & N_n \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

$$[N^v]^T = [N_1 \quad N_2 \quad \dots \quad N_n] \quad (3.55)$$

N_i 为单元第 i 个节点的插值函数， n 为单元节点数。应变矢量 $\mathbf{S}$ 和电场强度 $\mathbf{E}$ ，可以由位移和电势通过如下两个方程相应表示^[77]：

$$\mathbf{S} = [B_u] \mathbf{u}_{node} \quad (3.56)$$

$$\mathbf{E} = [B_v] v_{node} \quad (3.57)$$

其中，

$$[B_u] = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 & 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial x & \partial/\partial z & 0 \\ 0 & 0 & \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial y & \partial/\partial x \end{bmatrix}^T [N^u]^T \quad (3.58)$$

$$[B_v] = \{\partial/\partial x \quad \partial/\partial y \quad \partial/\partial z\}^T [N^v]^T \quad (3.59)$$

在这里，我们应用第二章的一维近似假设，所有场量对 y 方向导数都为 0。因此 (3.58) 和 (3.59) 分别变成：

$$[B_u] = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 & 0 & 0 & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & 0 & 0 & \partial/\partial x & \partial/\partial z & 0 \\ 0 & 0 & \partial/\partial z & 0 & 0 & \partial/\partial x \end{bmatrix}^T [N^u]^T \quad (3.60)$$

$$[B_v] = \left\{ \partial / \partial x \quad 0 \quad \partial / \partial z \right\}^T [N^v]^T \quad (3.61)$$

拉格朗日函数^[78]

$$L = T - (U_m - W_m) + (U_e - W_e) \quad (3.62)$$

体系的动能

$$T = \frac{1}{2} \iint_s \dot{\mathbf{u}}^T \rho \dot{\mathbf{u}} ds \quad (3.63)$$

上标‘.’表示求导， ρ 表示密度。

弹性应变能

$$U_m = \frac{1}{2} \iint_s \mathbf{T}^T \mathbf{S} ds \quad (3.64)$$

电场中的电能

$$U_e = \frac{1}{2} \iint_s \mathbf{E}^T \mathbf{D} ds \quad (3.65)$$

考虑到晶体内不存在体力，外界机械载荷所做的功为

$$W_m = \int_L \mathbf{F}^T [N^u]^T \mathbf{u}_{\text{node}} dl \quad (3.66)$$

考虑到晶体内部不存在自由电荷，外界电载荷所做的功为

$$W_e = \int_L [N^v]^T \mathbf{v}_{\text{node}} Q dl \quad (3.67)$$

对 L 求变分，得到

$$\begin{aligned} \delta L = & -\delta \mathbf{u}_{\text{node}}^T ([M] \ddot{\mathbf{u}}_{\text{node}} + [K] \mathbf{u}_{\text{node}} + [K^z] \mathbf{v}_{\text{node}} - \mathbf{F}^e) \\ & + \delta \mathbf{v}_{\text{node}}^T ([K^z]^T \mathbf{u}_{\text{node}} + [K^d] \mathbf{v}_{\text{node}} - \mathbf{Q}^e) \end{aligned} \quad (3.68)$$

其中质量矩阵

$$[M] = \iint_s [N^u] \rho [N^u]^T ds \quad (3.69)$$

刚度矩阵

$$[K] = \iint_s [B_u]^T [C] [B_u] ds \quad (3.70)$$

介电矩阵

$$[K^d] = - \iint_s [B_v]^T [\varepsilon] [B_v] ds \quad (3.71)$$

压电耦合矩阵

$$[K^z] = - \iint_s [B_u]^T [\varepsilon] [B_v] ds \quad (3.72)$$

将外结构载荷等效到节点上

$$\mathbf{F}^e = \int_L [N^u] \mathbf{F} dl \quad (3.73)$$

将外电载荷等效到节点上

$$\mathbf{Q}^e = \int_L [N^v] \mathbf{Q} dl \quad (3.74)$$

根据哈密顿原理

$$\delta A = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0 \quad (3.75)$$

因此由(3.68)可以得到:

$$\begin{cases} [M] \ddot{\mathbf{u}}_{\text{node}} + [K] \mathbf{u}_{\text{node}} + [K^z] \mathbf{v}_{\text{node}} - \mathbf{F}^e = 0 \\ [K^z]^T \mathbf{u}_{\text{node}} + [K^d] \mathbf{v}_{\text{node}} - \mathbf{Q}^e = 0 \end{cases} \quad (3.76)$$

改写为矩阵的形式

$$\begin{bmatrix} [M] & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \ddot{\mathbf{u}}_{\text{node}} \\ \ddot{\mathbf{v}}_{\text{node}} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} [K] & [K^z] \\ [K^z]^T & [K^d] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_{\text{node}} \\ \mathbf{v}_{\text{node}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}^e \\ \mathbf{Q}^e \end{Bmatrix} \quad (3.77)$$

对于稳态的简谐振动

$$\begin{bmatrix} [K] - \omega^2 [M] & [K^z] \\ [K^z]^T & [K^d] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_{\text{node}} \\ \mathbf{v}_{\text{node}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}^e \\ \mathbf{Q}^e \end{Bmatrix} \quad (3.78)$$

方程(3.77)(3.78)即为有限元法离散化方程。

4.1.2.2 单元刚度矩阵计算

根据模型近似中的假设, 本文的有限元分析中选用的是如图 4.3 八节点的矩形单元。分别设矩形的长和宽分别为 a , b , x' , y' 表示单元的局部坐标系。则单元节点的形函数为:

$$\begin{aligned}
N_1 &= 0.25(1-x)(1-z)(-x-z-1) & N_2 &= 0.5(1-x^2)(1-z) \\
N_3 &= 0.25(1+x)(1-z)(x-z-1) & N_4 &= 0.5(1+x)(1-z^2) \\
N_5 &= 0.25(1+x)(1+z)(x+z-1) & N_6 &= 0.5(1-x^2)(1+z) \\
N_7 &= 0.25(1-x)(1+z)(-x+z-1) & N_8 &= 0.5(1-x)(1-z^2)
\end{aligned} \tag{3.79}$$

这里 $x=x'/a$, $z=x'/b$ 。

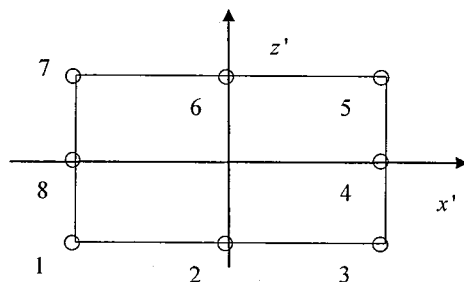


图 4.3 八节点矩阵单元

将(3.79)代入到(3.60)和(3.61), 并根据(3.69)~(3.72)就可计算单元刚度矩阵。在此过程中需要涉及到对面积的积分, 在(3.69)~(3.72)中可以看出, 被积分变量都是 x , y 的多项式, 最高次为 4 次, 因此本文采用二重 3 点高斯积分公式, 积分点和积分系数如表 4.1 所示。

表 4.1 高斯积分点和积分系数

高斯积分点	高斯积分系数
-0.7745967	0.5555556
0	0.8888889
+0.7745967	0.5555556

求得每一个单元刚度矩阵后, 按照有限元的方法将单元刚度组合成总刚度矩阵。

4.1.2.3 周期边界条件 (Periodic boundary condition, PBC)

如图 4.4 所示, 将模型底部的节点从所有节点中独立写出来, 因此总体刚度矩阵可以改写成如下形式:

$$\begin{bmatrix} K_{\Omega\Omega} - \omega^2 M_{\Omega\Omega} & K_{\Omega\Gamma_b} - \omega^2 M_{\Omega\Gamma_b} & K_{\Omega\Omega}^z & K_{\Omega\Gamma_b}^z \\ K_{\Omega\Gamma_b} - \omega^2 M_{\Omega\Gamma_b} & K_{\Gamma_b\Gamma_b} - \omega^2 M_{\Gamma_b\Gamma_b} & K_{\Gamma_b\Omega}^z & K_{\Gamma_b\Gamma_b}^z \\ (K_{\Omega\Omega}^z)^T & (K_{\Omega\Gamma_b}^z)^T & K_{\Omega\Omega}^d & K_{\Omega\Gamma_b}^d \\ (K_{\Gamma_b\Omega}^z)^T & (K_{\Gamma_b\Gamma_b}^z)^T & K_{\Gamma_b\Omega}^d & K_{\Gamma_b\Gamma_b}^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\Omega} \\ u_{\Gamma_b} \\ \phi_{\Omega} \\ \phi_{\Gamma_b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{\Omega} \\ F_{\Gamma_b} \\ Q_{\Omega} \\ Q_{\Gamma_b} \end{bmatrix} \quad (3.80)$$

内部不存在外加的外力, 即 $F_{\Omega}=0$, 除了电极底部上的节点外, 其它节点的电荷也都为 0。在底部界面, 可以通过边界元的方法 (将在下一节具体介绍) 得到节点的位移、电势与应力、电荷之间的关系。

$$\begin{bmatrix} F_{\Gamma_b} \\ Q_{\Gamma_b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z^m & Z^z \\ (Z^z)^T & Z^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\Gamma_b} \\ \phi_{\Gamma_b} \end{bmatrix} \quad (3.81)$$

将(3.81)代入到(3.80)中可以得到:

$$\begin{bmatrix} K_{\Omega\Omega} - \omega^2 M_{\Omega\Omega} & K_{\Omega\Gamma_b} - \omega^2 M_{\Omega\Gamma_b} & K_{\Omega\Omega}^z & K_{\Omega\Gamma_b}^z \\ K_{\Omega\Gamma_b} - \omega^2 M_{\Omega\Gamma_b} & K_{\Gamma_b\Gamma_b} - \omega^2 M_{\Gamma_b\Gamma_b} - Z^m & K_{\Gamma_b\Omega}^z & K_{\Gamma_b\Gamma_b}^z - Z^z \\ (K_{\Omega\Omega}^z)^T & (K_{\Omega\Gamma_b}^z)^T & K_{\Omega\Omega}^d & K_{\Omega\Gamma_b}^d \\ (K_{\Gamma_b\Omega}^z)^T & (K_{\Gamma_b\Gamma_b}^z)^T - (Z^z)^T & K_{\Gamma_b\Omega}^d & K_{\Gamma_b\Gamma_b}^d - Z^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\Omega} \\ u_{\Gamma_b} \\ \phi_{\Omega} \\ \phi_{\Gamma_b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{\Omega} \\ 0 \\ Q_{\Omega} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.82)$$

为了书写方便, 这里将(3.82)左边的整个整体刚度矩阵用 K 表示, u 表示 $[u, \phi]$ 所有节点位移, F 表示 $[F, Q]$ 等效外部载荷, 因此, 有限元方程(3.78)可以表示为:

$$K \cdot u = F \quad (3.83)$$

在左右两个边界上, 位移和电势, 应力和电荷需满足周期边界条件:

$$u|_{\tau_R} = u|_{\tau_L} e^{-\gamma p} \quad (3.84)$$

其中 $\gamma = \alpha + j\beta$, 表示复数的传播因子, α 变量表示传播衰减, β 变量表示声波的相位传播因子。令 $\zeta = e^{-\gamma p}$ 。

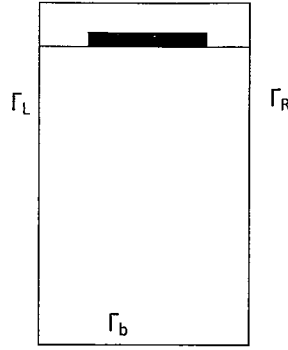


图 4.4 有限元边界条件示意图

将所有节点分为三部分，第一部分是图 4.4 左边边界节点，第二部分是图 4.4 右边边界，剩下的节点作为第三部分。因此(3.83)可以改写成如下形式：

$$\begin{bmatrix} K_{ii} & K_{il} & K_{ir} \\ K_{li} & K_{ll} & K_{lr} \\ K_{ri} & K_{rl} & K_{rr} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_l \\ u_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_i \\ F_l \\ F_r \end{bmatrix} \quad (3.85)$$

将周期边界条件(3.84)代入(3.85)可以得到

$$\begin{bmatrix} K_{ii} & K_{il} & K_{ir} \\ K_{li} & K_{ll} & K_{lr} \\ K_{ri} & K_{rl} & K_{rr} \end{bmatrix} T_1 \begin{bmatrix} u_i \\ u_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_i \\ I_l \\ -\zeta I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_i \\ F_l \end{bmatrix} \quad (3.86)$$

其中：

$$T_1 = \begin{bmatrix} I_i & 0 \\ 0 & I_l \\ 0 & \zeta I_l \end{bmatrix} \quad (3.87)$$

对(3.86)等式两边同时左乘矩阵(T_1)的转置，可以得到：

$$\begin{bmatrix} K_{ii} & K_{il} + \zeta K_{ir} \\ \zeta K_{li} + K_{ri} & \zeta^2 K_{lr} + \zeta(K_{ll} + K_{rr}) + K_{rl} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_l \end{bmatrix} = 0 \quad (3.88)$$

实际上，由于左右边界上施加了周期边界条件，对自由度进行了约束，因此 $K_{lr} = K_{rl} = 0$ ，因此(3.88)变形成了一个广义特征值的形式：

$$\begin{bmatrix} K_{ii} & K_{il} \\ K_{ri} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_l \end{bmatrix} = -\zeta \begin{bmatrix} 0 & K_{ir} \\ K_{li} & K_{ll} + K_{rr} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_l \end{bmatrix} \quad (3.89)$$

4.1.2.4 输入导纳

根据输入导纳的定义:

$$Y = \frac{j\omega Q}{V} \quad (3.90)$$

对于已经的给定传播常数 γ 和频率 ω , 通过求解方程(3.89)可以得到所有节点的位移和电势, 并代入(3.82)中就可以求得电极表面上所有节点的电荷值, 对整个电极表面进行积分, 就得到了(3.90)中的电荷 Q , 继而可以求得导纳 Y 。

4.1.3 边界元分析理论

4.1.3.1 周期格林函数

对于满足 Floquet 定理的各场量具有周期相移性质, 可以表示为:

$$u(x_1 + p) = u(x_1)e^{-j\beta p} \quad (3.91)$$

其中

$$u(x_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{-j(\beta + 2\pi \frac{n}{p})x_1} \quad (3.92)$$

A_n 为振幅, β 为传播常数。令 $\beta = 2\pi\gamma/p$, 则有:

$$\begin{aligned} u(x_1 + p) &= u(x_1)e^{-j2\pi\gamma} \\ u(x_1) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{-j\frac{2\pi}{p}(\gamma+n)x_1} \end{aligned} \quad (3.93)$$

其中 γ 是一个无量纲量, 用来表征栅格阵场量的周期性, 直接决定了指条之间的传播的相位差。对于周期栅格阵, 各周期的场量除有一相位差外完全相同因此分析其中一个周期的场分布就能得到整个栅格阵的场分布。同时, 我们对广义应力也应用周期相移性,

$$T(x_1)e^{j\frac{2\pi}{p}\gamma x_1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_\gamma(x_1 - np) \quad (3.94)$$

等式右边是一个周期函数, 对(3.94)式进行傅立叶级数展开可以得到:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} T_{\gamma}(x_1 - np) = \frac{1}{p} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n e^{-j\frac{2\pi}{p}nx_1} \quad (3.95)$$

$$F_n = \int_{-p/2}^{p/2} T_{\gamma}(x_1) e^{j\frac{2\pi}{p}nx_1} dx_1$$

将(3.95)代入(3.94)可得广义应力为:

$$T(x_1) = \frac{1}{p} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n e^{-j\frac{2\pi}{p}(n+\gamma)x_1} \quad (3.96)$$

(3.96)上式表明 $T(x_1)$ 为无限多个波数为 $k_{\gamma n} = 2\pi(n+\gamma)/p$, 慢度为 $s_{\gamma n} = (n+\gamma)/(pf)$, 振幅为 F_n 的空间谐波分量的叠加。这一结论从物理上说明了周期栅格阵的Floquet声波解是无限空间谐波的叠加, 基次谐波的慢度为 $s_{\gamma 0} = \gamma/(pf)$, n 次谐波的慢度为 $s_{\gamma n} = s_{\gamma 0} + n/(pf)$ 。

对(3.96)进行傅立叶变换得到广义在慢度域上的表示形式为:

$$\bar{T}(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} T(x_1) e^{j2\pi f s x_1} dx_1 = \frac{1}{pf} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n \delta(s - \frac{n+\gamma}{pf}) \quad (3.97)$$

根据第二章中格林函数的定义, 可以得到慢度域的广义应力和广义位移的关系:

$$\bar{u}(s) = \frac{1}{pf} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n \bar{G}(\frac{n+\gamma}{pf}) \delta(s - \frac{n+\gamma}{pf}) \quad (3.98)$$

对(3.98)式进行慢度域反傅立叶变换得到相应的空间域电势分布为:

$$u(x_1) = f \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{u}(s) e^{-j2\pi f s x_1} ds = \frac{1}{p} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n \bar{G}(\frac{n+\gamma}{pf}) e^{-j\frac{2\pi}{p}(n+\gamma)x_1} \quad (3.99)$$

当施加冲激函数的广义应力激励源的时候, $F_n=1$, 此时对应的广义位移就定义为周期格林函数 (Periodic Green's Function),

$$G_{\gamma}^p(x_1) = \frac{1}{p} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \bar{G}(\frac{n+\gamma}{pf}) e^{-j\frac{2\pi}{p}(n+\gamma)x_1} \quad (3.100)$$

它是周期移相激励下的系统响应, 此时的激励电荷为一系列以 p 为周期重复放置的 δ 源并且相邻源之间存在一相移因子 $\exp(-j2\pi\gamma)$, 显然周期格林函数也满足 γ 周期移相特性。

在与有限元的交界面上, 根据边界元的理论, 位移、电势与应力, 电荷的关系可以表示为

$$u(x_1) = \int_{\Gamma_b} G_\gamma^p(x-x_1)t(x)dx \quad (3.101)$$

根据前面的讨论, 界面上的应力与电荷分割为一个个的小单元, 每个单元内的应力、电荷都可以通过其所处单元边界上的节点通过插值函数表示,

$$t_e(x_1) = N_e(x_1)T_e \quad (3.102)$$

其中 T_e 表示单元的边界上节点的应力、表面电荷密度的向量。将(3.102)代入(3.101)可以得到:

$$u(x_1) = \sum_e^m \left[\int_{\Gamma_b} G_\gamma^p(x-x_1)N_e(x)dx \cdot T_e \right] \quad (3.103)$$

在边界上有 m 个单元, 总共则有 $2m+1$ 个节点, 将每个节点的横坐标 x_1 都代入(3.103)计算可以得到每个节点广义位移和广义应力的关系, 我们重新将 $2m+1$ 个节点的广义位移和广义应力的关系通过矩阵形式表示为:

$$U_{3 \times (2m+1), 1} = Y_{3 \times (2m+1), 3 \times (2m+1)} \cdot T_{3 \times (2m+1), 1} \quad (3.104)$$

两边同时左乘 Y 的逆矩阵得到广义节点力为

$$T = Y^{-1}U \quad (3.105)$$

考虑到边界上的等效节点力和电荷密度根据(3.73)(3.74)计算:

$$F = - \sum_e^m \int_{\Gamma_b} [N_e(x_1)]^T t_e(x_1) dx_1 = - \sum_e^m \left\{ \int_{\Gamma_b} [N_e(x_1)]^T [N_e(x_1)]^T dx_1 \cdot T_e \right\} \quad (3.106)$$

上式中负号表示, 边界上下两个部分之间作用力与反作用力的关系。联立(3.105)

(3.106)可以等效节点力和电荷密度与节点位移和电势的关系:

$$F = ZU \quad (3.107)$$

或者写成:

$$\begin{bmatrix} F \\ Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z^m & Z^z \\ (Z^z)^T & Z^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ \phi \end{bmatrix} \quad (3.108)$$

矩阵 Z 是阻抗矩阵, 它是频率 ω 和传播常数 γ 的函数。而(3.108)就是前面有限元方程中所需要插入的(3.81)式。

4.1.4 FEM/BEM结果与分析

单独边界元方法的方法无法考虑到电极引起的质量负载效应,尤其是电极采用重金属材料时候,质量负载效应会明显降低SAW的波速。图 4.5分析的是一个 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 双层结构,波长是 $40\mu\text{m}$, SiO_2 波导层厚度为 5%波长,电极采用Au,膜厚为 1.25%,金属化比为 0.5,从图 4.5中可以看出, Au电极的质量负载效应造成了电纳的中心频率向左发生了 0.5 MHz明显的偏移。

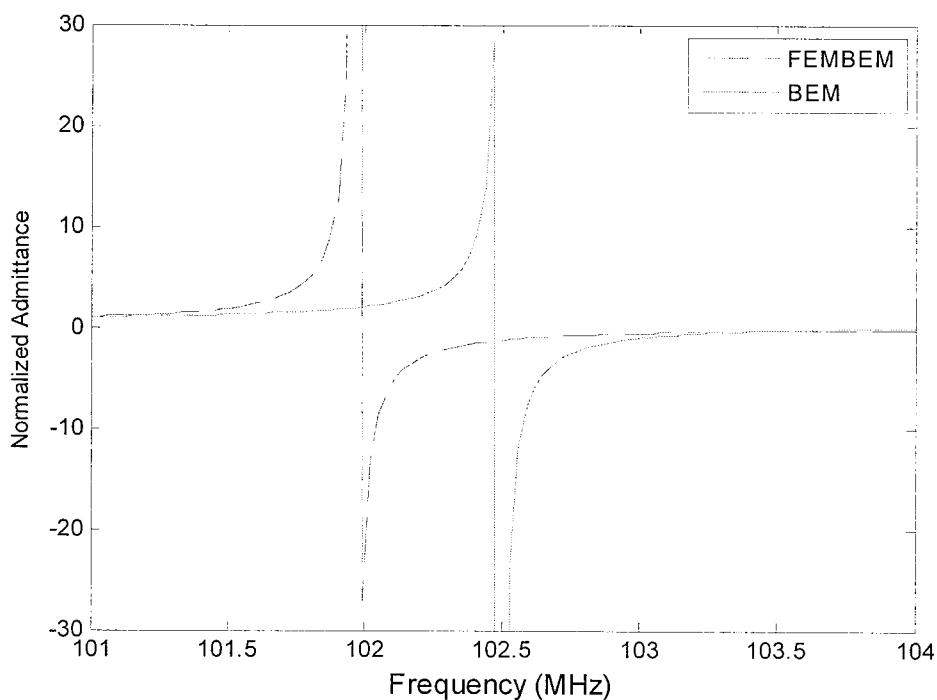


图 4.5 周期结构 FEMBEM 方法与 BEM 方法计算归一化导纳

为了分析应用边界元方法在有限元方程中加入(3.108)阻抗矩阵的作用,这里我们分析了一个周期为 $4\mu\text{m}$ 的基片材料YZ-LiNbO₃ 的周期模型,分别采用了三种方法:

- a) 基片厚度为 6λ 有限元方法
- b) 基片厚度为 12λ 有限元方法
- c) 有限元边界元方法

通过(3.90)计算结构导纳值,结果如图 4.6所示。我们可以看出在大约 900 MHz以下频率内,方法b和方法c结果吻合,而与方法a的差别很大。这是因为,在第一种方法中,由于基片厚度有限时,实际严格上来说,此时产生的并非表面

波模式，而是Lamb波模式，Lamb波模式都是成对出线，即对称模式与反对称模式^[79]。显然图 4.6中方法a曲线的前两个谐振峰是对应反对称模式和对称模式Lamb波。当厚度增加时，对称模式与反对称模式趋于重合，厚度趋于无穷大时，此时Lamb波就成了表面波了。

但是从图 4.6可以看出在大于 900 MHz频率的区间内，FEM比FEMBEM要多出另外的一些谐振峰。通过图 4.7可以看出高于 880 MHz时，FEMBEM的结果表明相位不再是 90 度，这表示导纳出现了实部，即电导。此时产生了能量的辐射，通过第二章的分析可以知道，体波向基片内部辐射能量，880 MHz就是第二章中提到的Sss，体波辐射截止点。但是对于有限元模型来说，有限厚基片不可能向无穷远处辐射能量，体波在有限厚模型内谐振，基片厚度方向越长，激励的体波模式越多，因此可以看到在 880 MHz之后频率区间，方法 2 的模式多于方法 1 的模式。

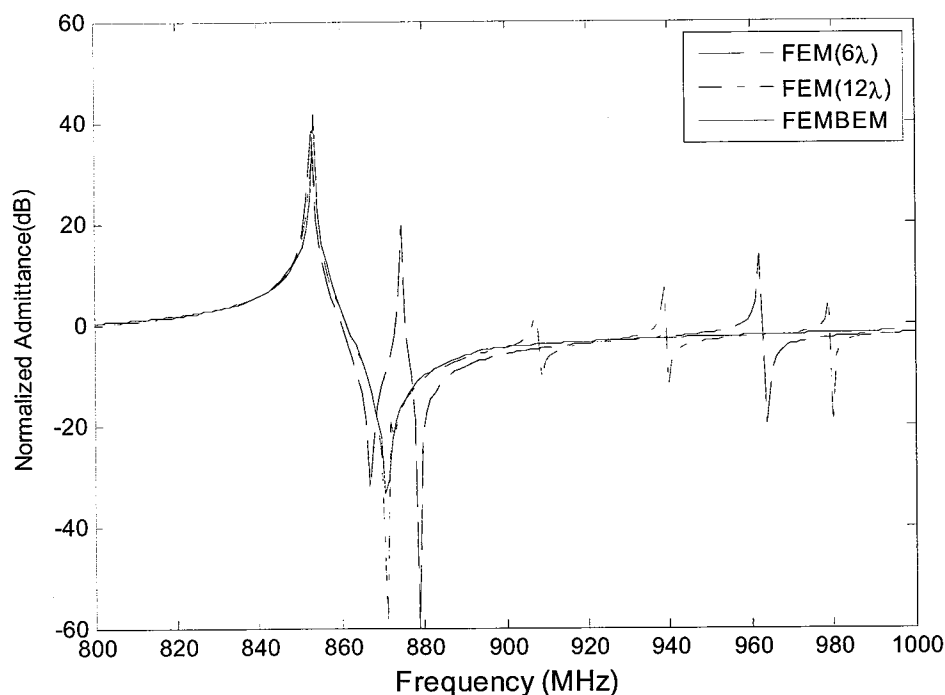


图 4.6 FEM 与 FEMBEM 方法计算周期结构的归一化导纳

表 4.2 FEM 与 FEM/BEM 方法比较

	模式	能量辐射
有限元模型	Lamb 波	不存在
有限元/边界元模型	SAW	存在

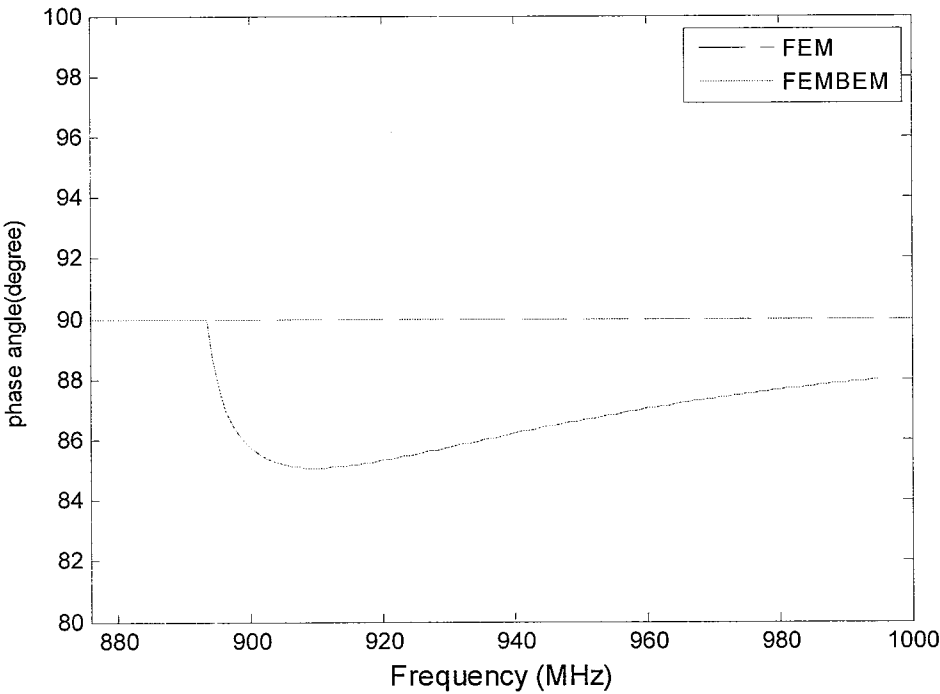


图 4.7 FEM 与 FEM/BEM 方法的计算周期结构的相位

通过 FEM/BEM 方法与 FEM 方法以及 BEM 方法的比较结果可以看出，将有限元方法和边界元方法结合起来，能够将电极这种周期性排列结构对器件的影响考虑其中，并且将无限厚的基片引起的能量辐射等效果都包含在内，为后面层状结构 COM 参数的提取奠定了基础。

4.2 基于谐波导纳提取多层结构COM参数

4.2.1 谐波导纳

Blotekjaer 等人^[80-81]提出了分析半无限基片上周期栅格阵排列结构的谐波导纳(Harmonic Admittance, HA)概念，之后Milsom^[28]，Zhang^[82]等人进一步发展了

该理论。图 4.8 是频率为 51MHz, $\text{SiO}_2/\text{Al}/36^\circ\text{YX LiTaO}_3$ 周期结构的谐波导纳, 其中 SiO_2 的相对厚度为 6.5%, 电极 Al 的相对膜厚为 0.5%, 金属化比 0.5。通过前面的讨论, 谐波导纳也是关于的 γ 周期为 1 的函数。从图 4.8 中可以看出, 与有效介电常数类似, 谐波导纳包含了体波、表面波所有模式的信息。并且谐波导纳在 $[0, 1]$ 区间关于 $\gamma=0.5$ 也是对称的。

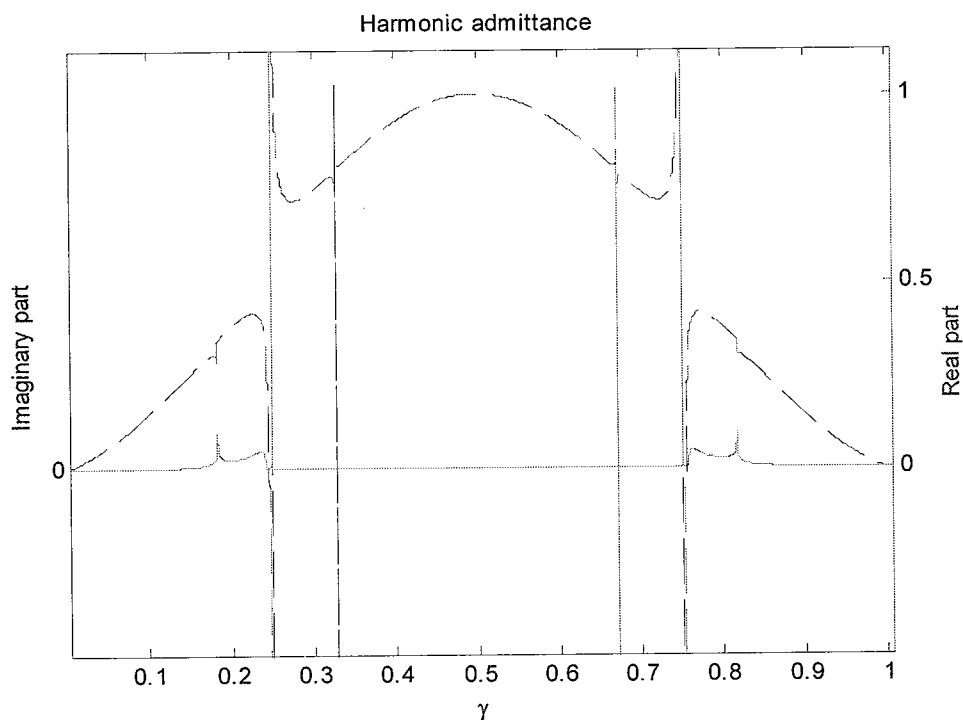


图 4.8 $\text{SiO}_2/\text{Al}/36^\circ\text{YX LiTaO}_3$ 周期结构的谐波导纳($f=51$ MHz)

在无限周期栅格阵结构中的, SAW 存在两种情况下的特征模式, 一种是电极开路, 通过每根电极的电流是 0, 谐波导纳对应一个零点。另一种是电极短路, 电极上的电压为 0, 谐波导纳对应一个极点。也就是说, 在谐波导纳曲线上的零极点包含了对应的特征模式的信息。

4.2.2 COM 参数提取

图 4.9 是叉指换能器的结构示意图, 设有两列声波在其中传播, 声波 $R(x)$ 沿 $+x$ 方向传播, 声波 $S(x)$ 沿 $-x$ 方向传播, COM 模型方程为^[83]:

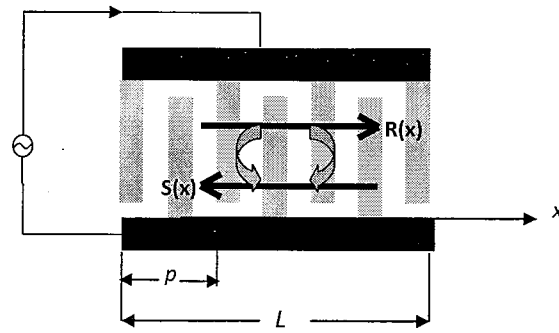


图 4.9 叉指换能器示意图

$$\begin{cases} \frac{dR}{dx} = -j\delta R - j\kappa^* S + j\alpha V e^{-j\beta x} \\ \frac{dS}{dx} = j\delta S + j\kappa R - j\alpha^* V e^{-j\beta x} \\ \frac{dI}{dx} = -2j\alpha^* R - 2j\alpha S + j\omega C V e^{-j\beta x} \end{cases} \quad (3.109)$$

表 4.3列出了所有的COM参数和它们的代表的意义。需要指出的是, (3.109)式中的COM方程是可以将体波辐射考虑进去的, 但在本文中忽略了这种效应。对于单相单向结构(single phase unidirectional IDT, SPUDT), 换能系数或反射系数是复数, 这种结构在谐波导纳上表现为两个谐振峰^[84]。在本文分析的双向结构中, 这两者均被视为实数。

表 4.3 COM 参数

参数符号	参数表示的意义
v	速度
$\kappa_p = \kappa \lambda_0$	反射系数
$\alpha_p = \alpha \lambda_0$	换能系数
$\alpha_n = \alpha_p / \sqrt{W / \lambda_0}$	归一化换能系数
$r_p = r \lambda_0$	损耗
$C_p = C \lambda_0$	电容
$C_n = C_p / W$	归一化电容

其中:

$$\delta = (\omega - \omega_0) / v - jr, \quad f_0 = v / \lambda_0 \quad (3.110)$$

COM 方程中的波数:

$$\Delta = \sqrt{\delta^2 - |\kappa|^2} \quad (3.111)$$

在 COM 参数提取中, 归一化电容通过频率趋于 0 时的电纳值来求得。换能系数和损耗则通过 Koskela 等人的方法来获得^[83]。

$$\Delta f = \frac{f_0 \gamma_p}{\pi} \quad (3.112)$$

$$Y_r = \frac{4\alpha_p^2}{\gamma_p} \quad (3.113)$$

其中 Y_r 表示谐振点的电导值, Δf 表示谐振电纳值一半对应的频带宽度。在一定频率范围内, 谐波导纳中的特征模式会出现截至的情况^[66], 对于短路栅带下边缘频率和上边缘频率分别为 f_{sL} , f_{sH} , 开路栅带下边缘频率和上边缘频率分别为 f_{oL} , f_{oH} 。

通过针对在 Bragg 中心频率附件的频率, 计算其谐波导纳, 提取特征模式对应的 γ , 我们就能得到波数与频率的色散曲线, 如图 4.10。

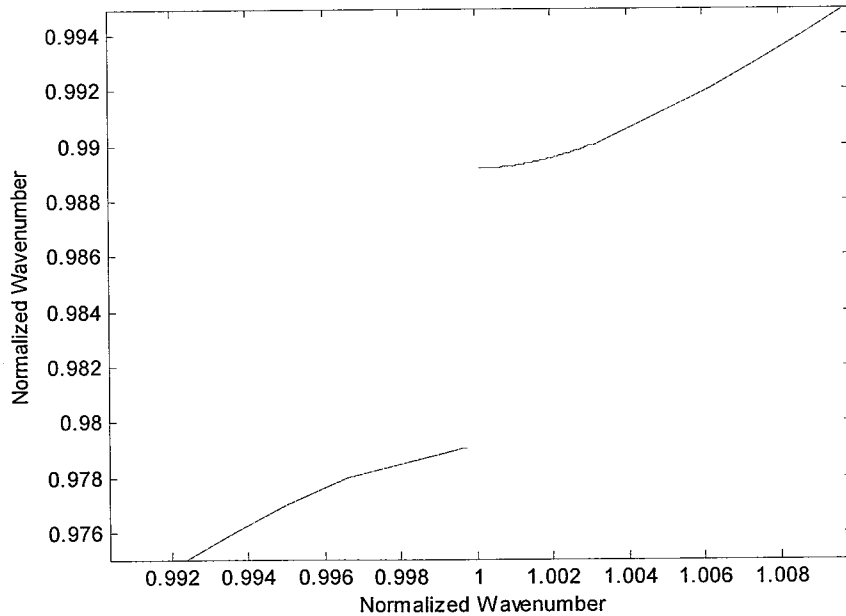


图 4.10 $\text{SiO}_2/36^\circ \text{Y-X LiTaO}_3$ 周期栅格阵的色散曲线

反射系数和 SAW 速度与截止频率有如下关系^[85]:

$$V_g = p(f_L + f_H) \quad (3.114)$$

$$\kappa_p = \pi \frac{f_e - f_b}{f_e + f_b} \quad (3.115)$$

至此我们就可以求出所有的COM参数。表 4.4 是对一个 SiO₂/Al/36°YX LiTaO₃ 周期结构模型提取的COM参数结果, 其中结构的周期为 40μm, SiO₂ 的相对厚度为 5%, 电极Al的相对膜厚为 0.5%, 金属化比 0.5。

表 4.4 SiO₂/Al/36°YX LiTaO₃ 周期结构 COM 参数

参数	值	单位
ν	4108	m/s
α_n	8.37	$10^{-4}\Omega^{-1/2}$
r_p	1.5	$1.5^{-3}\text{dB}/\lambda$
κ_p	5.6	%
C_n	4.9	pF/cm

4.3 SiO₂/36° Y-X LiTaO₃ 双端对谐振器的模拟与实验对比

4.3.1.1 SAW器件的P矩阵表示

SAW 器件的 P 矩阵表示从结构上看, 叉指换能器可以看作一个三端口网络: 一个电端和两个声端。通常用混合矩阵 (P 矩阵) 来描述它的网络特性, 在这个矩阵中, 两个声端的变量将以散射矩阵 (S 矩阵) 参数来描述, 而电端变量将以导纳矩阵 (Y 矩阵) 来描述。图 4.11 是这个三端网络的示意图, a₁ 和 a₂ 是两声端的入射声波, b₁ 和 b₂ 是出射声波, i 和 u 是电端的电流和电压最大值。

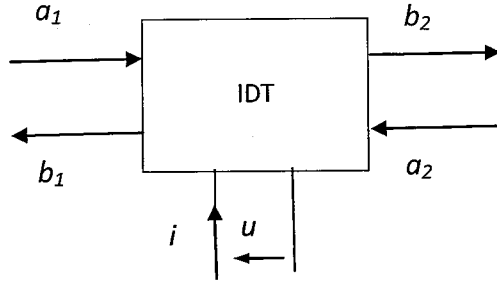


图 4.11 IDT 的三端网络等效示意图

各变量之间的关系由下式给出：

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ u \end{bmatrix} \quad (3.116)$$

其中：

$$P_{11} = \frac{j\kappa \sin(\Delta L)}{\Delta \cos(\Delta L) + j\delta \sin(\Delta L)} \quad (3.117)$$

$$P_{12} = \frac{(-1)^N \Delta}{\Delta \cos(\Delta L) + j\delta \sin(\Delta L)} \quad (3.118)$$

$$P_{13} = -\alpha L \frac{\sin(\Delta L/2)}{\Delta L/2} \frac{(\delta + \kappa) \sin(\Delta L/2) - j\alpha \Delta \cos(\Delta L/2)}{\Delta \cos(\Delta L) + j\delta \sin(\Delta L)} \quad (3.119)$$

$$P_{33} = -\frac{4\alpha^2(\delta + \kappa)}{\Delta^3} \frac{(\delta + \kappa)[1 - \cos(\Delta L)] - j\Delta \sin(\Delta L)}{\Delta \cos(\Delta L) + j\delta \sin(\Delta L)} - j \frac{4\alpha^2}{\delta - \kappa} L + j\omega CL \quad (3.120)$$

其中 IDT 的长度 L （必须为波长的整数 N 倍）。由于三端网路结构对称， P 矩阵的其它元素存在如下互易关系：

$$\begin{aligned} P_{21} &= P_{12} & P_{22} &= P_{11} \\ P_{23} &= (-1)^N P_{13} & P_{31} &= -2P_{13} & P_{32} &= -2P_{23} \end{aligned} \quad (3.121)$$

对于短路、开路栅 P 矩阵方法也是适用的，但是只需要用到 P_{11} , P_{12} , P_{21} , P_{22} 四个元素。对于自由表面和金属化表面的间隙， P 矩阵只有两个元素非 0，

$$P_{21} = P_{12} = e^{j\omega s_m f l} \quad (3.122)$$

其中， s_m , s_f 分别表示金属化表面和自由表面的特征慢度， l 表示间隙的长度。

总而言之，我们可以通过对不同部分的 P 矩阵进行级联，从而来模拟器件的响应特性。

理想叉指换能器的 COM 方程中没有考虑指条的欧姆损耗，但是在有些情况下，例如孔径很大或指条厚度很薄的情况下，换能器的指条阻抗不能忽略，考虑上述因素，进一步修改得到更具普遍意义的换能器的 COM 方程。

在考虑叉指换能器寄生阻抗的情况下，根据 P.V. Wright 所述，需把 COM 方程 COM 参数按照(3.123)进行修改以得到新的 COM 参数。

$$\begin{aligned}
 r &= \frac{2W}{3a} R_s \lambda_0 \\
 \alpha' &= \frac{\alpha}{1 + j\omega Cr} \\
 \delta' &= \delta - \frac{2jr|\alpha^2|}{1 + j\omega Cr} \\
 \kappa' &= \kappa + \frac{2jr\alpha^2}{1 + j\omega Cr} \\
 C' &= \frac{C}{1 + j\omega Cr}
 \end{aligned} \tag{3.123}$$

其中 W : 换能器孔径, a : 指条宽度; R_s 指条材料电阻率, 由于电极是薄膜结构, 它的电阻率要比体材料大, 对于 Al 电极, 有^[86]:

$$R_s = \frac{0.0368}{h_n} + \frac{0.000512}{h_n^2} \tag{3.132}$$

其中 h_n 是以微米为单位的电极厚度。

4.3.1.2 双端对谐振器的P矩阵级联

双端对谐振器的 P 矩阵单元如图 4.12 所示。中间放置两个相同的叉指换能器, 中间和两边一共三个金属反射栅阵。考虑到结构的对称性, 下面在讨论级联的时候, 从左至右, 将每个单元分别标号为 1, 2, 3, 4, 5。之间的间隙宽度分别为 L_1, L_2, L_3, L_4 。

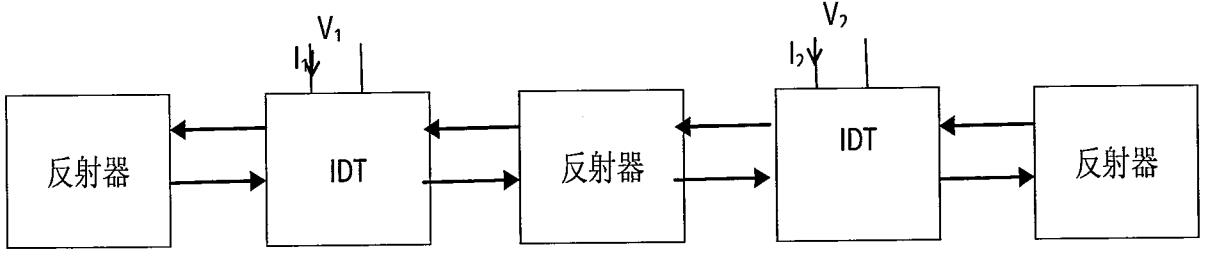


图 4.12 双端对谐振器的网络模型

1 反射器

图 4.12 中左边的反射栅阵，它的左边涂有吸声橡胶，从声端出射的声波完全吸收，没有反射，另外对于短路栅，输出端和入射端的关系是：

$$b_2^1 = P_{22}^1 a_2^1 \quad (3.124)$$

上标表示单元号，下标表示端口，下同。

2 间隙

$$\begin{cases} a_1^2 = e^{j\omega s_f L^1} b_2^1 \\ b_1^2 = e^{-j\omega s_f L^1} a_2^1 \end{cases} \quad (3.125)$$

通过变形可以得到：

$$\begin{bmatrix} a_1^2 \\ b_1^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & (P_{21}^2)^{-1} \\ P_{21}^2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2^2 \\ b_2^2 \end{bmatrix} \quad (3.126)$$

将左边的 IDT 和反射栅组合成一个图 4.13 两端口网络，根据(3.124)(3.125)可以得到 P 矩阵为：

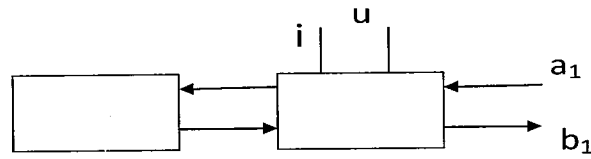


图 4.13 IDT 和反射栅等效两端口网络示意图

$$\begin{bmatrix} b' \\ i' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P'_{11} & P'_{12} \\ P'_{21} & P'_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a' \\ u' \end{bmatrix} \quad (3.127)$$

其中

$$\begin{cases} P'_{11} = P_{21}^2 e^{2j\omega s_f L1} P_{22}^1 (1 - P_{11}^2)^{-1} P_{12}^2 + P_{22}^2 & P'_{12} = P_{21}^2 e^{2j\omega s_f L1} P_{22}^1 (1 - P_{11}^2)^{-1} P_{13}^2 + P_{23}^2 \\ P'_{21} = P_{31}^2 e^{2j\omega s_f L1} P_{22}^1 (1 - P_{11}^2)^{-1} P_{12}^2 + P_{32}^2 & P'_{22} = P_{31}^2 e^{2j\omega s_f L1} P_{22}^1 (1 - P_{11}^2)^{-1} P_{12}^2 + P_{33}^2 \end{cases} \quad (3.128)$$

对(3.127)进行变形可以得到:

$$\begin{bmatrix} a' \\ b' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(P'_{21})^{-1} P_{22}^2 & (P'_{21})^{-1} \\ P'_{12} - P'_{11} (P'_{21})^{-1} P_{22}^2 & P'_{11} (P'_{21})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u' \\ i' \end{bmatrix} \quad (3.129)$$

将间隙 2 考虑进入这个两端口网络, 由(3.126)(3.129)则有:

$$\begin{bmatrix} a' \\ b' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11}^L & T_{12}^L \\ T_{21}^L & T_{22}^L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u' \\ i' \end{bmatrix} \quad (3.130)$$

其中:

$$T^L = \begin{bmatrix} 0 & (P_{21}^2)^{-1} \\ P_{21}^2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -(P'_{21})^{-1} P_{22}^2 & (P'_{21})^{-1} \\ P'_{12} - P'_{11} (P'_{21})^{-1} P_{22}^2 & P'_{11} (P'_{21})^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.131)$$

同理, 对于右边的 IDT、反射栅, 间隙 4 组也合成一个两端口网络:

$$\begin{bmatrix} a'' \\ b'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11}^R & T_{12}^R \\ T_{21}^R & T_{22}^R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u'' \\ i'' \end{bmatrix} \quad (3.132)$$

中间的反射栅的 P 矩阵为:

$$\begin{bmatrix} b_1^3 \\ b_2^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{11}^3 & P_{12}^3 \\ P_{21}^3 & P_{22}^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^3 \\ a_2^3 \end{bmatrix} \quad (3.133)$$

变形可以得到:

$$\begin{bmatrix} a' \\ b' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(P_{21}^3)^{-1} P_{22}^3 & (P_{21}^3)^{-1} \\ P_{12}^3 - P_{11}^3 (P_{21}^3)^{-1} P_{22}^3 & P_{11}^3 (P_{21}^3)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a'' \\ b'' \end{bmatrix} \quad (3.134)$$

由(3.132)(3.133)(3.134)可以得到:

$$\begin{bmatrix} u' \\ i' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u'' \\ i'' \end{bmatrix} \quad (3.135)$$

其中:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11}^L & T_{12}^L \\ T_{21}^L & T_{22}^L \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -(P_{21}^3)^{-1} P_{22}^3 & (P_{21}^3)^{-1} \\ P_{12}^3 - P_{11}^3 (P_{21}^3)^{-1} P_{22}^3 & P_{11}^3 (P_{21}^3)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11}^R & T_{12}^R \\ T_{21}^R & T_{22}^R \end{bmatrix} \quad (3.136)$$

并将(3.135)改写为:

$$\begin{bmatrix} i' \\ i'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{21} & Y_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u' \\ u'' \end{bmatrix} \quad (3.137)$$

其中:

$$\begin{cases} Y_{11} = \frac{C_{11}}{C_{21}} & Y_{12} = \frac{C_{12}C_{21} - C_{11}C_{22}}{C_{21}} \\ Y_{21} = \frac{1}{C_{21}} & Y_{22} = -\frac{C_{22}}{C_{21}} \end{cases} \quad (3.138)$$

(3.137)表示两电端口之间的关系, Y即为导纳矩阵。根据Y可以推导出整个双端对谐振器的理论频响:

$$S_{12} = \frac{-2Y_{12}\sqrt{G_{in}G_{out}}}{(G_{in} + Y_{11})(G_{out} + Y_{22}) - Y_{12}Y_{21}} \quad (3.139)$$

$$IL = -20\log_{10}|S_{12}| = 20\log_{10}\left|\frac{(G_{in} + Y_{11})(G_{out} + Y_{22}) - Y_{12}Y_{21}}{2Y_{12}\sqrt{G_{in}G_{out}}}\right| (dB)$$

4.3.1.3 仿真结果与实验对比

通过将求得的 COM 参数代入 P 矩阵中, 就可以进行器件的仿真。这里, 针对图 4.14 所示的双端对两层 $\text{SiO}_2/\text{Al}/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 双端对谐振器构进行了仿真, 结构的详细参数如

表 4.5所示。

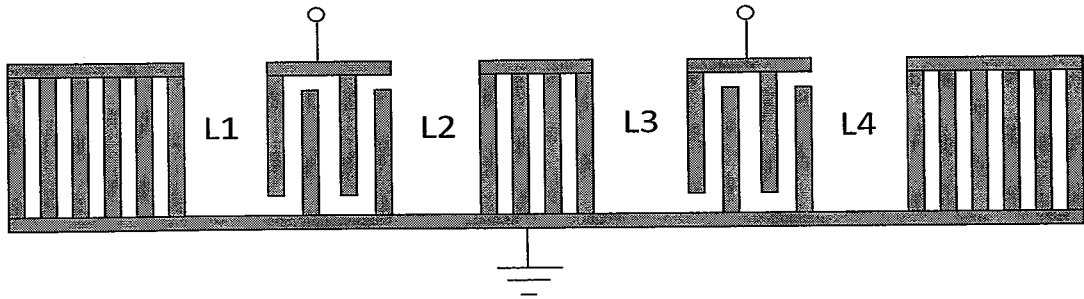


图 4.14 双端对谐振器结构示意图

表 4.5 双端对谐振器结构参数

波长	40μm
金属化比	0.5
孔径	300μm
IDT 数	16
两端反射栅	120
中间反射栅	20
反射栅周期	18μm
空隙 L1=L2=L4	0
空隙 L3	9.25μm
SiO ₂ 膜厚	1%
Al 膜厚	0.2%

仿真的结果如图 4.15所示，通过与实验测试的结果可以看出：从谐振峰的位置和曲线的变化趋势来看，仿真的结果与实验的结果比较吻合。谐振频率的差异可能是因为本文仿真中薄膜材料参数由于目前无法得到，才采用的都是体材料参数引起的。模拟和实验的结果的主要差别体现在幅度上，实验测得的结果的幅度在谐振峰附近要明显小于仿真的结果，这可能是因为本文计算中考虑的都是理想材料模型，COM模型中只包括了漏波的能量辐射和电极的欧姆损耗，而实际上，材料的热弹性效应，粘弹性效应都会造成能量的损耗，这种损耗实际上是可以通有限元方法考虑进去的，但本文还未进行这方面的研究；同时考虑到波导层膜厚较薄，还是会存在SSBW波。另外，实验结果和仿真结果在图 4.15频率大于208 MHz部分也有差别，这可能是因为体波辐射(本文的COM方程未考虑)引起。考虑到这些因素，本文的多层周期栅阵FEM/BEM方法的结果还是令人满意的。

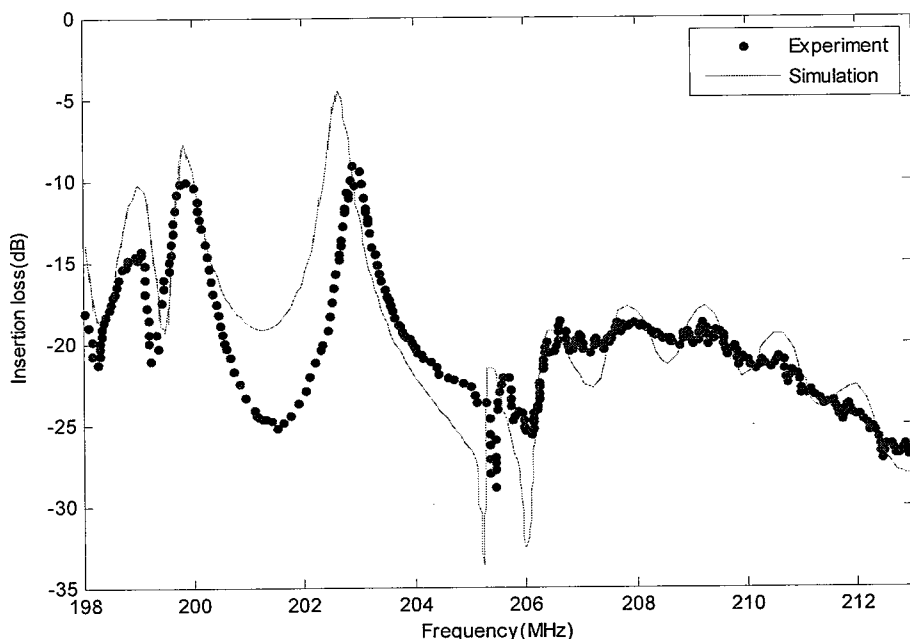


图 4.15 $\text{SiO}_2/36^\circ \text{Y-X LiTaO}_3$ 双端对谐振器的幅频响应

本章小结

本章主要内容是阐述了一种多层结构的周期有限元/边界元分析方法。利用周期结构的 Floquet 原理，对一个周期内的结构，将无限厚的基片分成两个部分，一个无限厚的基片采用边界元分析；有限厚基片和其它波导层采用有限元分析。

在边界元的分析中，利用周期格林函数可以得到有限元和边界元分界面上的广义应力和广义位移之间的关系，即阻抗矩阵。在有限元的分析中，将复传播因子的周期边界条件引入，巧妙地将有限元方程进行了修改，并将边界元得到的阻抗矩阵作为边界条件代入有限元方程中，最终实现有限元方程求解，通过求解得到电荷，进一步可以得到结构的导纳。通过比较，本文的有限元/边界元方法比单独的有限元或者边界元能取得更精确的结果。

为了分析覆盖波导层结构传感器的响应，利用周期有限元/边界元分析方法求出结构的谐波导纳，通过谐波导纳来实现提取 COM 参数。最后通过结合 P 矩阵

方法仿真器件的响应。最后根据上述方法，给出了一个双端对谐振器的 P 矩阵的级联方法，并给出了两层 $\text{SiO}_2/\text{Al}/36^\circ \text{Y-X LiTaO}_3$ 双端对谐振器结构进行了仿真实例。通过和实验测试的结果进行对比，仿真结果和实验结果比较吻合，另外对两者谐振峰损耗之间差异的原因进行了分析。

本章的创新点在于：

本文在对周期性结构 FEM/BEM 分析中，采用了一种从基片有限厚度处为界面的新模型。这种模型中，通过 BEM 方法得到界面上广义应力和广义位移关系的阻抗矩阵。在边界元的计算只存在了多项式和周期格林函数的积分，简化了边界元计算。另外对于确定的单元网格划分，这种边界元方法并且只与基片材料有关，如果做成接口和有限元方法结合将使这种方法非常有优势。

第5章 基于 ANSYS 有限元方法分析声表面波传感器

在第 4 章中利用周期结构的 COM 理论来仿真 SAW 传感器的响应,这种基于 COM 理论,所以适合应用在具有大量指条的呈周期性结构和谐振器结构中,当指条较少时,这种仿真方法效果较差。本文的 FEM/BEM 方法是二维的,无法模拟在 IDT 孔径方向上的 SAW 的衍射,另外如果要研究传感器器件表面的敏感区域等特性,直接的有限元仿真则是一种比较有效的方法。

有限元方法是分析物理场的强有力的工具,被广泛应用于各种场分析中。ANSYS 软件是融结构、流体、电场、磁场、声场分析于一体的大型通用有限元分析软件。由世界上最大的有限元分析软件公司之一的美国 ANSYS 开发,是目前应用最为广泛的商业有限元软件之一。软件主要包括三个部分:前处理模块,分析求解模块和后处理模块。

ANSYS 是公认的多物理场耦合分析最强大的有限元软件,它是最早引入压电单元的有限元软件,也是在 MEMS 领域应用最为广泛的有限元软件。

ANSYS 软件可以提供可供修改的 APDL (ANSYS parametric design language) 命令,即 ANSYS 参数化设计语言,是应用于 ANSYS 环境中的编程语言。运用 APDL 可以完全脱离菜单操作,提高分析速度,充分发挥了参数化建模的强大功能。

本章选用 ANSYS 软件,并通过 APDL 命令编写程序,来实现 SAW 传感器有限元分析。

5.1 声表面波传感器的ANSYS分析的步骤

5.1.1.1 单元的选择

SAW是一种压电器件,对它的分析属于结构-电场分析,属于耦合场分析。在 ANSYS 中,根据具体的要求,使用适合的单元。在本文中,按压电性将模

型材料分为压电材料和非压电材料。ANSYS中的压电耦合分析中常用单元类型如表 5.1表 5.2所示。其中keyopt(1)表示单元节点自由度类型，keyopt(3)则用来表示平面应力或者平面应变问题，根据本文第二章中所述的一维近似假设，本文中ANSYS平面问题都是属于平面应变问题。表中未给出keyopt值的，采用默认的值即可。需要特别指出的是，为了在压电材料与非压电材料在交界面上的节点一致性，必须要采用阶次相同的单元，例如表 5.1与表 5.2中同一列对应单元。

表 5.1 ANSYS 压电耦合分析中常用的压电单元

	Plane13	plane223	solid5	Solid98	solid226	Solid227
单元 类型	四边形一 次单元	四边形二 次单元	立方体一 次单元	四面体二 次单元	立方体二 次单元	四面体二 次单元
Keyopt(1)	7	1001	3	3	1001	1001
Keyopt(3)	0	2				

表 5.2 ANSYS 压电耦合分析中常用的非压电单元

	Plane42	plane82	solid45	Solid98	Solid95	Solid98
单元 类型	四边形一 次单元	四边形二 次单元	立方体一 次单元	四面体二 次单元	立方体二 次单元	四面体二 次单元
Keyopt(1)				2		2
Keyopt(3)	2	2				

5.1.1.2 压电分析材料参数输入

大多数已公布的压电材料的压电系数矩阵数据都是基于 IEEE 标准，而 ANSYS 里压电系数矩阵数据的排列顺序与 IEEE 标准的顺序不同。矩阵数据如果基于 IEEE 标准，按照 x、y、z、yz、xz、xy 的顺序排列，而 ANSYS 的输入数据是按照 x、y、z、xy、yz、xz 的顺序。所以劲度系数矩阵和压电系数矩阵输入时，必须通过改变某些行列的数据，转换为 ANSYS 数据格式。通过第二章所述，压电材料参数都是在晶体坐标中给出，实际坐标和晶体坐标和晶体坐

标存在坐标系的转换。为了进行 ANSYS 中压电材料的坐标的转化,可以通过两种方法。一种是利用 ANSYS 中的单元坐标,对压电材料单元进行坐标旋转,需要指出的是,ANSYS 中单位坐标旋转和 IEEE 并不一样,IEEE 中采用的顺序是 ZXZ,而 ANSYS 则是 ZXY。另一种办法是将采用第二章的 bond 转化后,再在 ANSYS 中直接输入。因为有第二章的基础,因此本文采用了后面一种方法。

SAW 传感器 IDT 的尺寸是 μm 级的,属于 MEMS 器件, ANSYS 中提供了 μMKSV 单位系统。表 5.3 列出了本文常用 μMKSV 单位。

表 5.3 常用 μMKSV 单位系统

参数名	单位制	参数名	单位制
长度	μm	时间	s
质量	kg	密度	$\text{kg}/(\mu\text{m})^3$
杨氏模量	MPa	电势	V
电荷	pC	压电应力矩阵	$\text{pC}/(\mu\text{m})^2$

➤ 劲度系数矩阵

各向异性材料的劲度系数矩阵[C], ANSYS 中采用 tb,anel 和 tb,data 命令输入对称矩阵右上角 21 个元素的值, IEEE 与 ANSYS 标准对应关系为:

$$\begin{array}{c}
 \text{IEEE} \\
 \begin{array}{c}
 x \\ y \\ z \\ yz \\ xz \\ xy
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\
 & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\
 & & c_{33} & c_{35} & c_{35} & c_{36} \\
 & & & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\
 & & & & c_{55} & c_{56} \\
 & & & & & c_{66}
 \end{bmatrix}
 \end{array}
 \rightarrow
 \begin{array}{c}
 \text{ANSYS} \\
 \begin{array}{c}
 x \\ y \\ z \\ xy \\ yz \\ xz
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{16} & c_{14} & c_{15} \\
 & c_{22} & c_{23} & c_{26} & c_{42} & c_{52} \\
 & & c_{33} & c_{63} & c_{43} & c_{53} \\
 & & & c_{66} & c_{46} & c_{56} \\
 & & & & c_{44} & c_{45} \\
 & & & & & c_{55}
 \end{bmatrix}
 \end{array}
 \quad (3.140)$$

柔度矩阵[S]也是采用类似的方法进行输入,只是需要将 tb,anel 的 tbopt(3)的值设置为 1。

➤ 压电矩阵

压电材料的压电应力矩阵[e],是一个 6×3 的矩阵,共有 18 个元素。ANSYS 中采用 tb,piez 和 tb,data 命令输入, IEEE 与 ANSYS 标准对应关系为:

$$\begin{array}{ccc}
 & IEEE & ANSYS \\
 \begin{array}{c} x \\ y \\ z \\ yz \\ xz \\ xy \end{array} \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{33} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \\ e_{41} & e_{42} & e_{43} \\ e_{51} & e_{52} & e_{53} \\ e_{61} & e_{62} & e_{63} \end{bmatrix} & \rightarrow & \begin{array}{c} x \\ y \\ z \\ xy \\ yz \\ xz \end{array} \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{33} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \\ e_{61} & e_{62} & e_{63} \\ e_{41} & e_{42} & e_{43} \\ e_{51} & e_{52} & e_{53} \end{bmatrix}
 \end{array} \quad (3.141)$$

在 ANSYS 中, 也可以通过输入压电应变矩阵来代替压电应力矩阵。两者之间存在着如下关系:

$$[d]^T = [S][e] \quad (3.142)$$

其中[S]是材料的柔度系数矩阵, 即劲度系数矩阵的逆矩阵。

➤ 介电常数矩阵

ANSYS 中对 3x3 对称介电矩阵 $[\epsilon]$, 通过 tb,piez 和 tb,data 命令输入右上角 6 个元素。介电常数矩阵可以采用恒应变和恒应力两种方式, 转化关系为:

$$[\epsilon^s] = [\epsilon^T] - [d][C][d]^T \quad (3.143)$$

当输入值大于或者等于 1 时, 表示的是相对介电常数。否则表示绝对介电常数。

另外, 材料的密度输入使用 mp, dens, 命令输入。

5.1.1.3 边界条件和求解方法

电压激励加载。与电极交界面接触的压电单元节点的电势都是相等的。因此在 ANSYS 分析中, 将同一个电极界面上的所有节点电势自由度耦合到一起, 选取耦合集中节点号最小的节点作为主节点, 将激励电压施加在该主节点上。在求解完成后, 可以通过 rforce 命令提取主节点的电荷来表示通过该电极的电荷。

本文中所采用到的 ANSYS 求解器有:

- 静态分析(Static analysis): 在静态分析中, 通过提取加载静态单位电压激励时, 提取响应的电荷, 可以获取 IDT 静态电容。
- 模态分析(modal analysis): 确定结构的固有频率和振型。
- 谐响应分析(harmonic analysis): 器件在持续随时间的周期变化电压激励下, 获得频率域的稳态的响应。

- 暂态分析(transient analysis): 有限时间内, 施加在输入 IDT 上随时间任意变化的电压时, 获得在时间域内的输出响应。

为了得到 SAW 传感器的工作频率、插入损耗和延迟时间等参数, 主要是选择谐波响应分析和瞬态响应分析。通常来说, 前者可以得到传感器的工作频率, 后者可以得到延迟时间以及声波传播等信息。

在本文中, 前三种求解方法运用于在周期无限长结构分析, 最后一种方法则运用于有限长结构分析。下面将就这两种结构分析进行详细的阐述。

5.2 有限长模型的ANSYS仿真

5.2.1 有限长SAW传感器的建模

5.2.1.1 延迟线传感器的结构和工作原理

延迟线传感器主要由延迟线, 敏感膜和振荡电路组成, 它们构成一个闭环振荡电路, 其中延迟线起频率选择和传感作用, 如图 5.22所示, A表示放大器, 将能量从接收换能器反馈至激励换能器, 补偿器件损耗的能量, 从而维持电路的振荡, 同时检测的频率信号通过频率计输出。器件的损耗越大, 所需放大器的放大倍数也就越大, 背景噪声影响也随之变大, 导致检测下限变高。

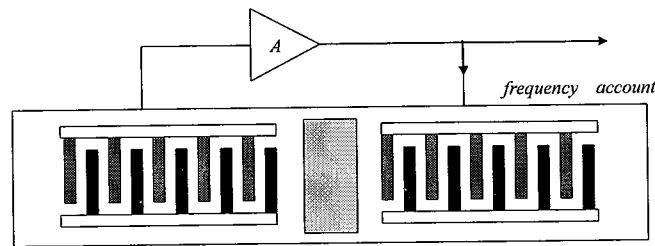


图 5.1 延迟线振荡器传感器示意图

维持振荡的条件包括两方面, 一是振幅平衡条件:

$$\beta K \geq 1 \quad (3.144)$$

这里 β 为反馈系数, K 为放大系数, 二是相位条件:

$$\phi_D + \phi_E = 2n\pi \quad (3.145)$$

其中 φ_D 为延迟线的相位延迟, φ_E 为放大器和换能器所引起的相位延迟。即满足的振荡条件是包括放大器在内的环路相位必须是 2π 的整数倍。因此只要放大器的增益足够高, 足以抵消延迟线的插入损耗, 并能满足相位条件, 这一系统就能产生振荡。

传感器的工作原理为: 当有微小的质量吸附到传感器表面敏感膜上时, 会致使声波的传播速度和幅度发生变化, 从而整个电路的振荡频率和插入损耗也随之发生变化。因此, 通过检测出传感器整个电路的振荡频率的变化量, 就可检测待测物的引起的微小质量负载或敏感膜的特性变化^[87]。

5.2.1.2 建模的近似和假设

实际 SAW 器件为了消除器件两端引起声波反射, 采取在器件的两端涂上吸声材料, 将到达两端的声波进行吸收, 避免对接收信号造成干扰。目前, ANSYS 还没有理想的仿真这种吸声边界条件的方法, 通常的办法是将 IDT 和模型边界之间的距离设置为很大, 使得边缘产生的反射波需要很长时间才能达到输出换能器, 从而只需要对时域信号进行加窗处理就可以将反射波的干扰去掉, 这样虽然能够处理声表面波在两端的吸收问题, 但是不可避免的增大模型, 增加了节点数, 使得计算效率很低。Peng 等人提出了一种半圆的边界来降低两端的反射, 取得了一定的效果^[88]。另一方面, 对于实际器件中近似半无限基片材料, 显然无法通过有限元方法完全建模分析, 考虑到我们本文研究的是声表面波, 随着深度的增加, 声波能量随之呈指数衰减, 因此考虑在深度方向选择一个合适深度有限基片近似半无限基片。深度不够的话, 底部反射会严重影响接收端的响应, 反之如果太厚的话则会造成节点过多, 影响计算效率。并对基片底部节点采用了施加自由度为 0 的边界条件。由于有限元方法在实际建模时, 在指条处必须采用精细的网格划分, 考虑到普通计算机的计算效率, 因此本文只进行了不超过 30 根指条的模型分析。

在有限长模型的完全有限元分析中, 由于指条厚度厚度相对尺寸非常小, 而且指条数目也比较多, 如果对每一根指条都直接建模的话, 会显著增加分析过程复杂性以及影响结果收敛。实际上指条厚度低于 1% 波长时, 质量负载效应可以

忽略。因此，我们只需要考虑指条的电学效应，通过耦合指条所在区域内节点的电势自由度来表示金属指条^[89]。

为了获得器件的系统响应性能，本文对有限长模型采用 ANSYS 中的暂态分析，对系统激励方式有两种。

第一种是冲激响应分析，首先，通过对输入 IDT 施加一个近似的脉冲激励信号：

$$V_m = \begin{cases} \frac{1}{T_s} & 0 < t \leq T_s \\ 0 & t > T_s \end{cases} \quad (3.146)$$

其中 T_s 为时间步长，根据奈奎斯特采样定理， T_s 决定采样的最高频率为 $1/(2 \cdot T_s)$ 。另外施加激励信号的总时间 T 决定采样的最低频率 $1/(2 \cdot T)$ ，因此我们可以通过合理设置时间步长和激励的总时间，并且通过 FFT 变换，得到我们所感兴趣频率范围内器件的频率响应。

第二种是 AC(alternating current)分析。对输入 IDT 施加一个正弦变化信号

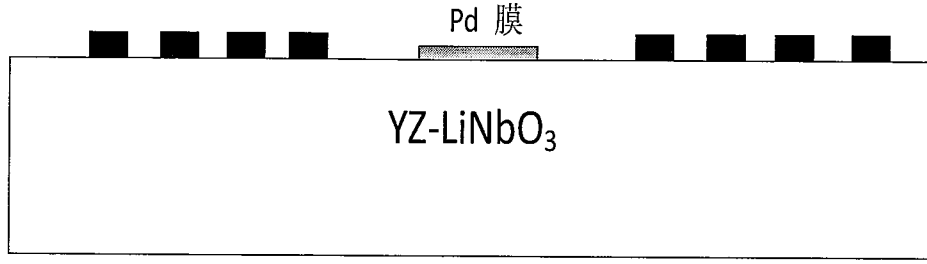
$$V_m = A \sin(2\pi ft) \quad t > 0 \quad (3.147)$$

其中 A 为激励电压的幅度， f 为激励信号的频率，通过这种激励方式，我们可以研究声波在多层介质中传播特征。

5.2.2 二维Pd膜/YZ-LiNbO₃ 结构的氢气传感器仿真

对于表 2.2 中类型 3 压电晶体，由于 SH 方向的位移和其它自由度已经解耦，也就是说 U_2 对其它自由度没有影响，因此我们可以不考虑 x_2 方向的位移，将 3D 问题转化成平面应变问题。

下面我们通过检测 H_2 的传感器模型，来阐述这种 2D 模型的 ANSYS 分析方法。

图 5.2 检测 H₂ 的 SAW 传感器示意图

5.2.2.1 检测机理

如图 5.2 所示检测 H₂ 的 SAW 传感器的模型中，Pd 膜对 H₂ 具有吸附作用，吸附待测气体后，Pd 膜的材料参数将发生变化，从而会导致在表面传播声波速度的改变，因此通过检测发射端和接收端之间声波的速度的变化，来对待测气体进行定量分析。

延迟线相位的响应为：

$$\phi = -\omega \cdot T_0 = -\omega \cdot \frac{L}{v} \quad (3.148)$$

其中， ω 是角频率， L 是两个换能器中心的距离， T_0 是表面波传播 L 距离所需要的时间。 v 表示表面波的相速度。当传感器在起振的情况下，满足(3.145)式的相位条件时， ϕ 是一个常数，因此 v 与频率 f 成正比

$$v = -\frac{L}{\phi} 2\pi f \quad (3.149)$$

对(3.148)等式两边求微分可得：

$$-\frac{L}{\phi} 2\pi \Delta f = \Delta v \quad (3.150)$$

变形可得：

$$\frac{\Delta f}{f} = -\frac{\Delta v}{v} \quad (3.151)$$

通过(3.151)可以知道，当吸附气体量较少，对速度只是产生一个微扰的前提下，

振荡器速度的相对变化与频率的相对变化是成正比的,因此我们可以采用检测频率变化得到速度变化,从而实现待测气体的检测。

这里假定吸附气体后, Pd 膜的厚度不发生改变,只是导致其密度会变小。吸附不同浓度 H_2 , 相应膜的密度的关系为^[90]:

$$\rho_c = \left(\frac{1 + \frac{m_H}{m_{Pd}} c}{1 + 0.19c^2} \right) \rho_0 \quad (3.152)$$

其中氢气的摩尔质量 $m_H=1.008\text{g/mol}$, Pd膜的摩尔质量 $m_{Pd}=106.42\text{g/mol}$, c 表示吸附氢气的原子数目百分比,称为原子分数,定义为 $c=n_{H_2}/n_{Pd}$ 。同时因为吸附了气体, Pd膜本身的杨氏模量也会发生变化,关系如表 5.4所示^[91]:

表 5.4 Pd 膜杨氏模量与吸附 H_2 比例对应关系

c	0	0.1	0.2	0.3	0.43	0.5
E(GPa)	128	124.5	121.36	118.5	115	113.73

Pd 膜的泊松比可以认为不随吸附 H_2 浓度而变化, 其值 $\nu=0.375$ ^[91]。

5.2.2.2 网格划分

这里我们首先定义网格密度为每个波长内单元个数。根据之前的分析可以知道, SAW主要是沿着基片表面传播, 为了分析SAW传播的特点, 表面网格密度密集, 而底部网格密度可以划分比较稀疏。我们是通过将激励电压施加在节点上来实现电压加载的, 因此电极处也必须要加密网格, 经过实验发现, 每个电极长度内, 需要保证至少有 4 个节点。另外, 在接收换能器和发射换能器之间的SAW传播路径上, 为了分析Pd膜吸收 H_2 后的影响, 因此在这个区域也必须采用密集的网格划分。综合以上因素, 最终ANSYS的网格生成如图 5.3所示。

为了检查两个 IDT 之间传播路径的网格密度的对计算结果收敛性影响, 我们通过第二章的均匀单层模型的计算方法可以知道, YZ- LiNbO_3 自由表面的速度是 3487m/s , 我们先考虑个换能器中间不存在 Pd 膜的情况, 因此表面波从发射换能器到达接收换能器的时间是 L/ν , L 是两个换能器之间的距离。 ν 是表面波的速度。我们通过在不同网格密度下 ANSYS 计算得到 SAW 传播时间与理论的时间

$T_{\text{theory}}=L/v$ 进行比较, 定义误差为:

$$E = \frac{T_{FEM} - T_{theory}}{T_{theory}} \times 100\% \quad (3.153)$$

并得到了误差和网格密度之间的关系如图 5.4所示, 当网格密度达到 6 以上时, 误差小于 0.1%。

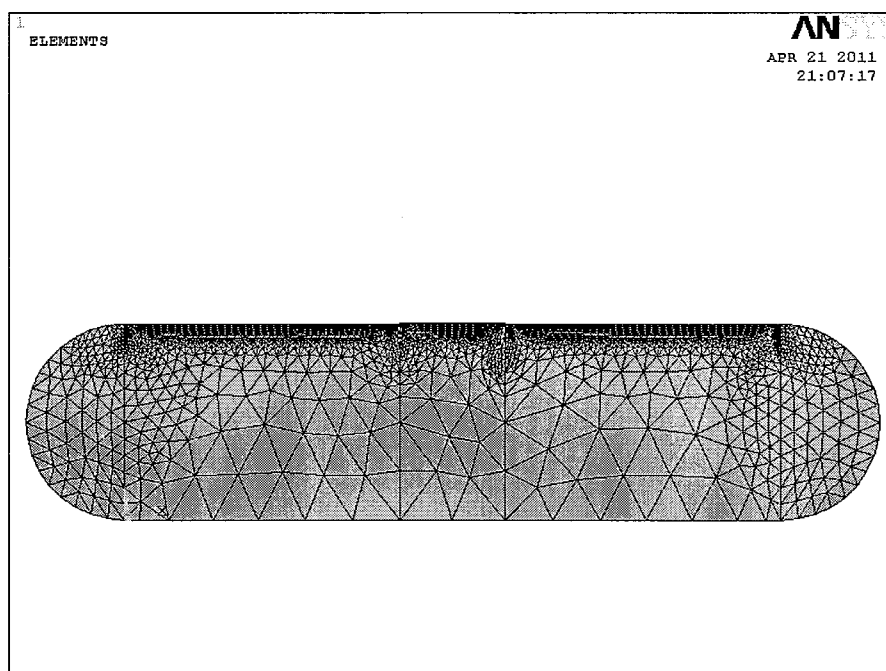


图 5.3 H_2 的 SAW 传感器网格划分图

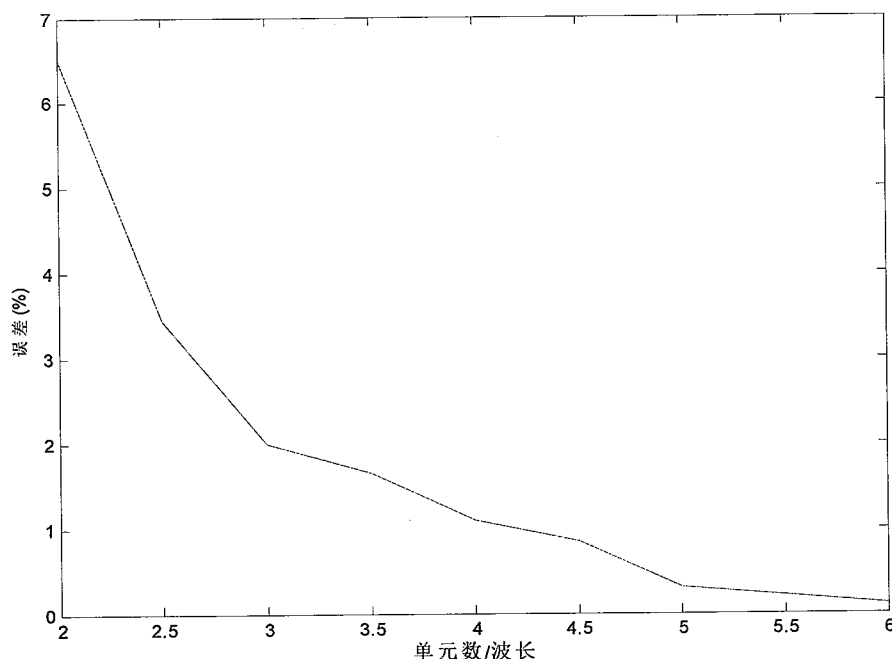


图 5.4 H_2 的 SAW 传感器网格密度收敛性分析结果

5.2.2.3 边界反射的影响

在图 5.3 中所示的两端加上了半圆形的吸收边界, 从物理意义上来看, 这种结构能够将较多的声波限制在两端的半圆形区域内, 能对边界反射干扰波起到改善作用。图 5.5~图 5.8 是分别表示设置半圆形边界前后的时域和频域计算结果, 图 5.5 椭圆圈内表示两端界面反射波的成分。通过对比, 我们可以看出在图 5.7 中的因为两端界面产生的反射波干扰起到了一定的改善。但是由于本文中的 ANSYS 分析中, 对基片底部的反射没有办法完全消除, 因此两个图中都可以看到由于基片底部造成的反射效果依然比较明显。这种底部反射可以通过在有限元方法中加入边界元的方法进行解决。由图 5.7 图 5.8 频域响应结果对比中看出, 由于两端界面的反射波会对通带内的信号造成严重的干扰, 造成很多假峰值。

另外, 虽然能够估计反射干扰波到达输入换能器的时间, 但我们并不能简单采用直接把椭圆内的信号去掉来消除干扰成分, 因为这样虽然两端界面的反射波是被吸收了, 但换能器之间多次反射是真实器件会检测到的信号, 这样简单的截取会造成这种真实信号的丢失。

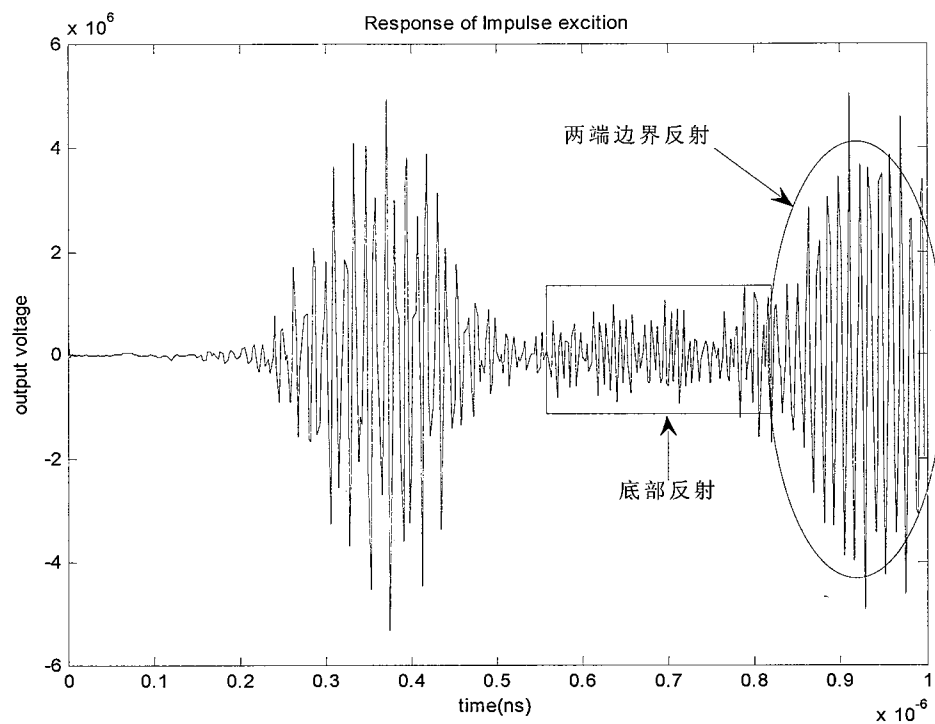


图 5.5 未设置半圆形边界的时域响应仿真结果

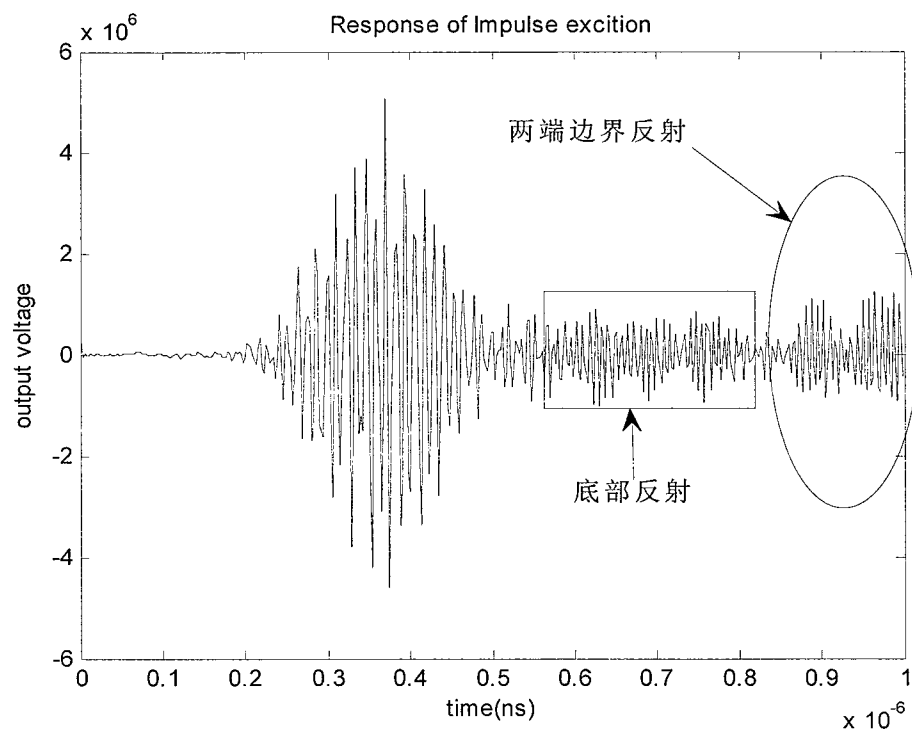


图 5.6 半圆形边界的时域响应仿真结果

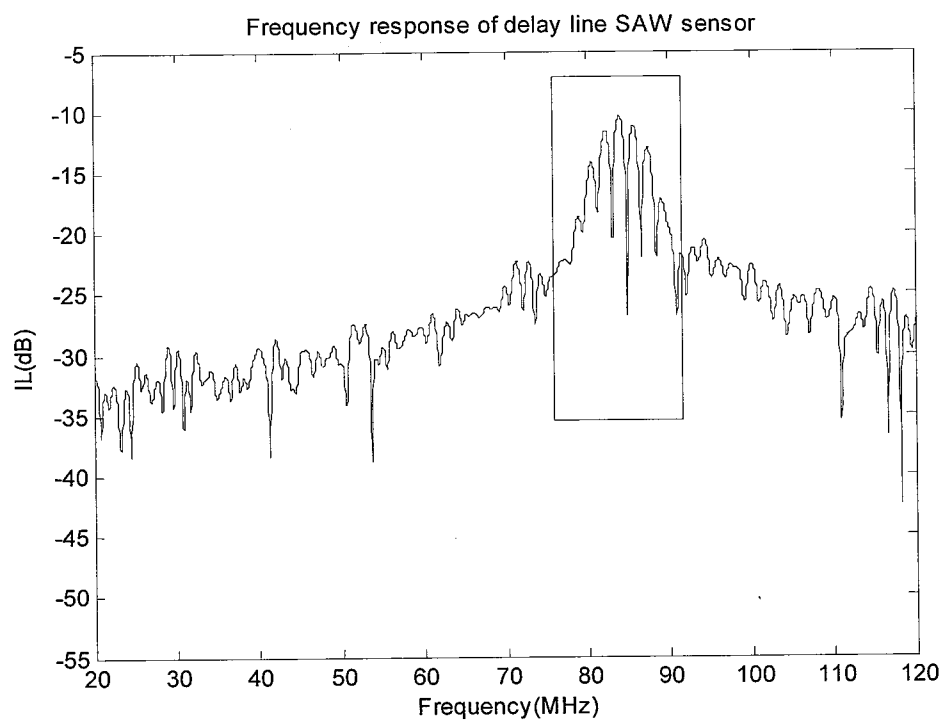


图 5.7 未采用半圆形边界后的频域响应仿真结果

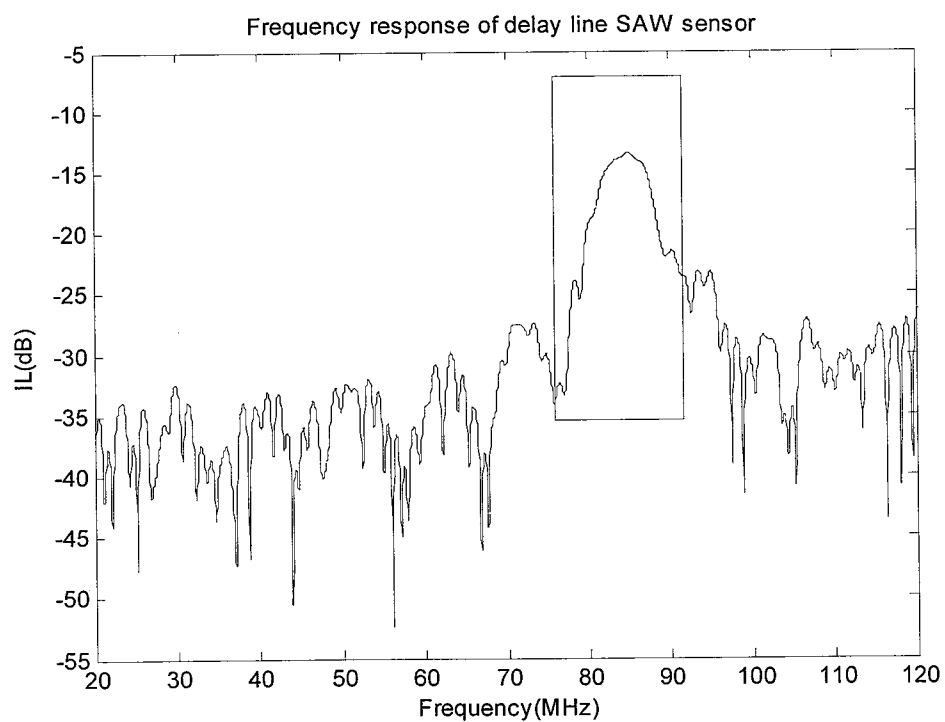


图 5.8 半圆形边界的频域响应仿真结果

表 5.5 H₂ 传感器模型仿真参数

参数	值	参数	值
基片尺寸	3200x600μm	Pd 膜尺寸	320x2μm
每个换能器叉指对数	24	换能器之间间隔	400μm
波长	35μm	金属化比	0.25

5.2.2.4 计算结果与讨论

H₂ 传感器模型仿真参数如表 5.5所示建立模型，通过对图 5.3有限元模型进行暂态分析，设置 2.5ns的时间步长，进行 500 载荷步的分析，通过ANSYS的 /post26 后处理器提取传感器结构的时间域响应。在此基础上，采用matlab的FFT 算法得到器件在频率域内的插入损耗（Insertion Loss, IL），如图 5.9所示，从图可以看出，传感器的中心频率在 85MHz左右。同时也可以得到其相位响应，如图 5.10所示。

我们根据在不同H₂ 吸附浓度下（用原子分数c表示），对Pd膜杨氏模量，厚度和密度进行设置，并进行计算，得到对应的频率响应。根据(3.145)式，对于一个放大器和环路的相位已经确定的情况下，这里我们不妨设为 30 度，SAW传感器因为吸附气体引起速度的改变，造成延迟线本身相位发生了轻微的改变，最终通过振荡频率表现出来。因此我们可以固定图 5.10中的纵坐标相位值，寻找中心频率区间内对应的频率值。

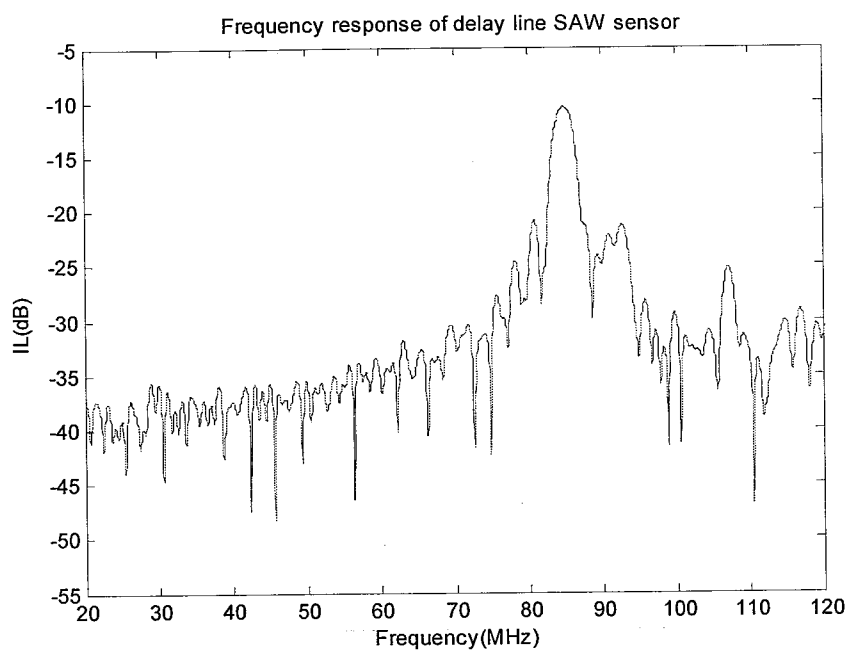


图 5.9 H_2 气体 SAW 传感器插入损耗图

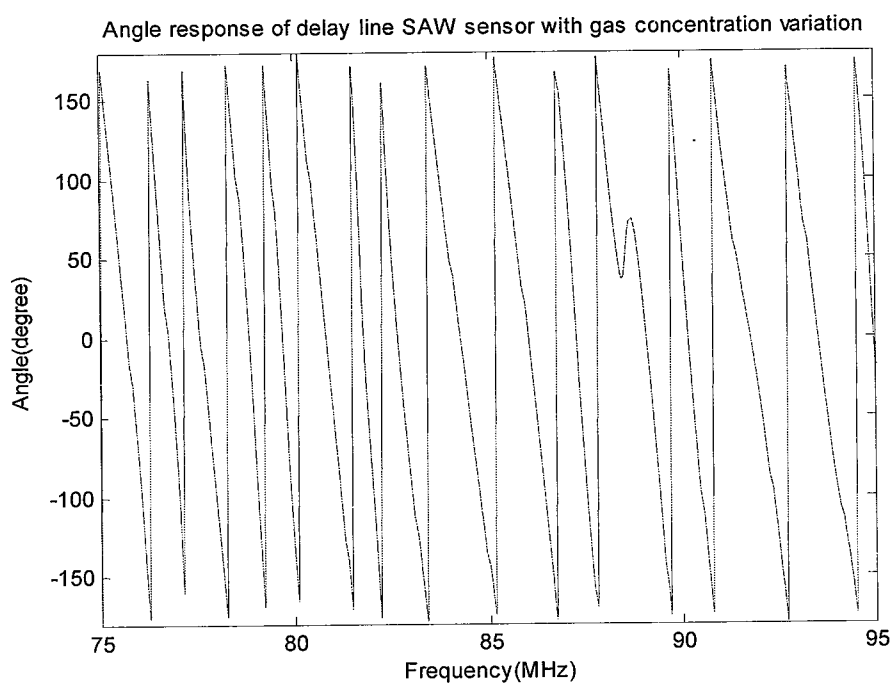


图 5.10 H_2 气体 SAW 传感器相位角

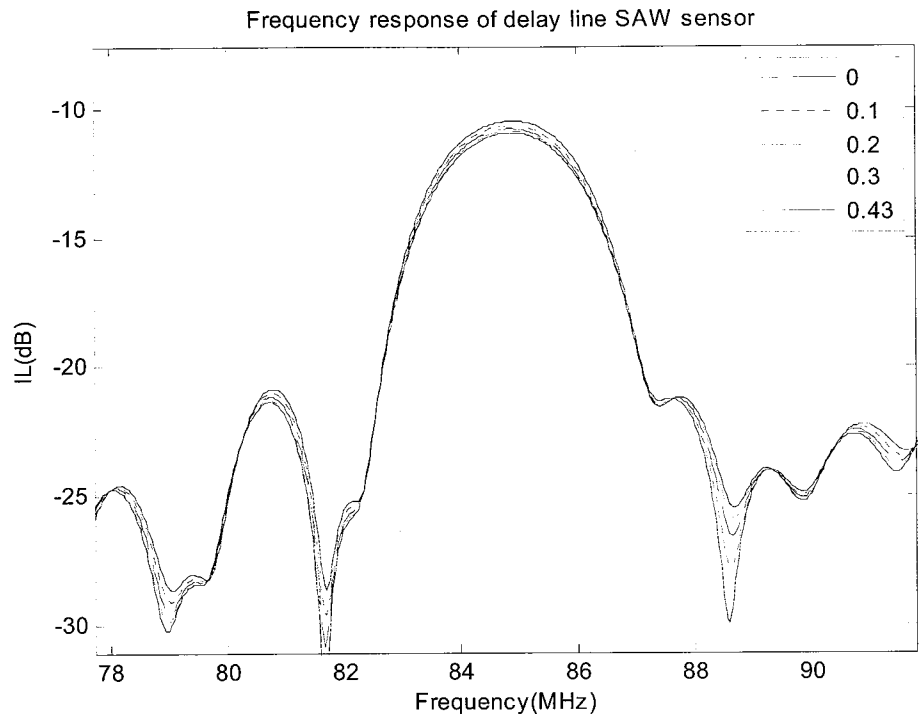


图 5.11 SAW 传感器在不同吸附气体量下中心频率附近的损耗

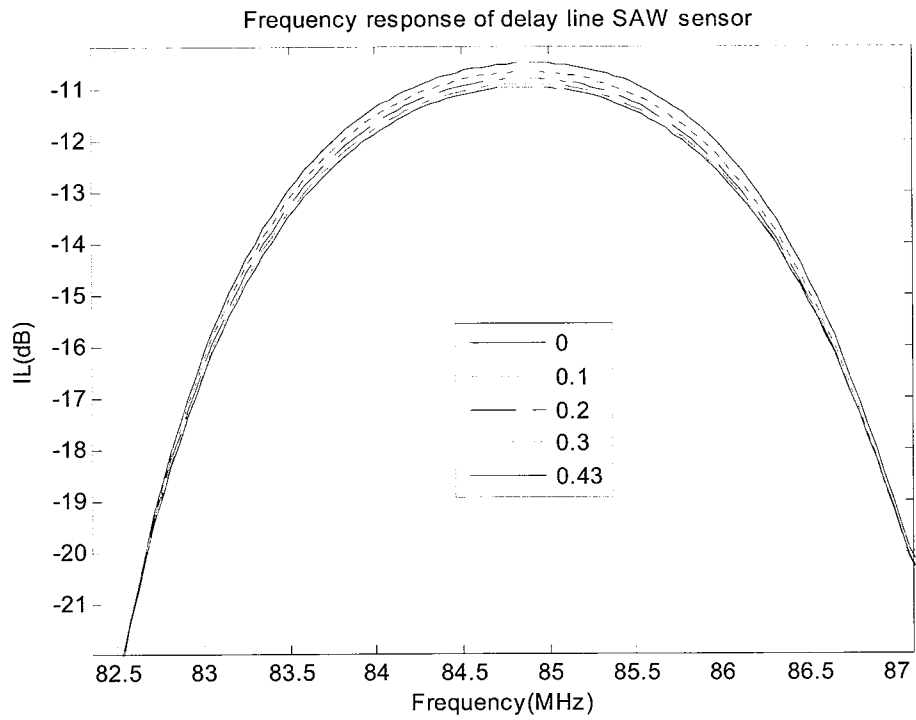


图 5.12 SAW 传感器在吸附不同气体量下中心频率附近的损耗（局部放大图）

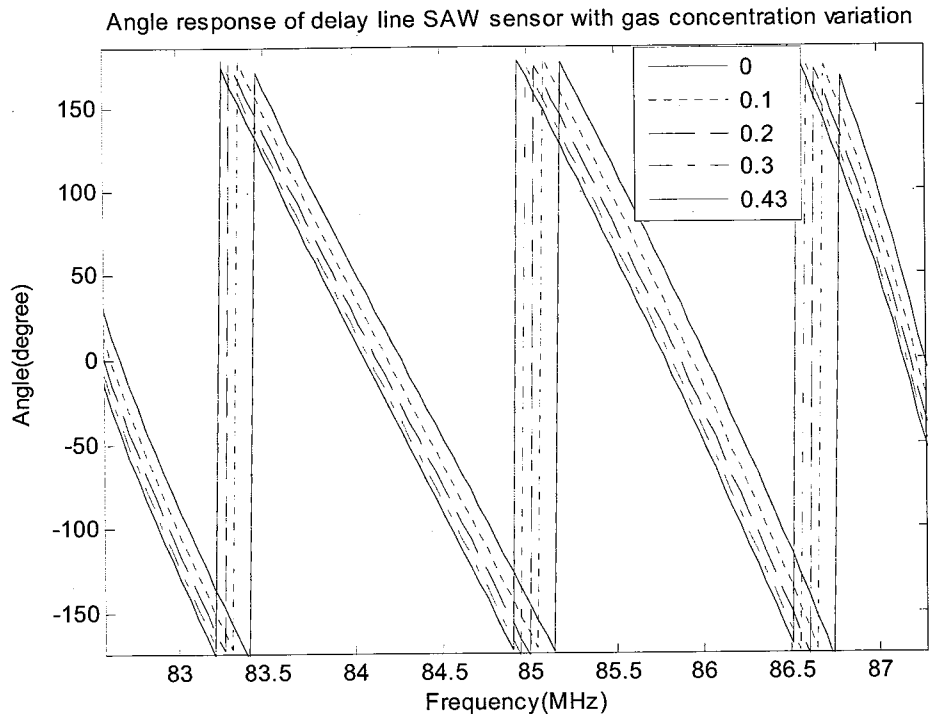


图 5.13 SAW 传感器在不同吸附气体量下中心频率附近的相位响应

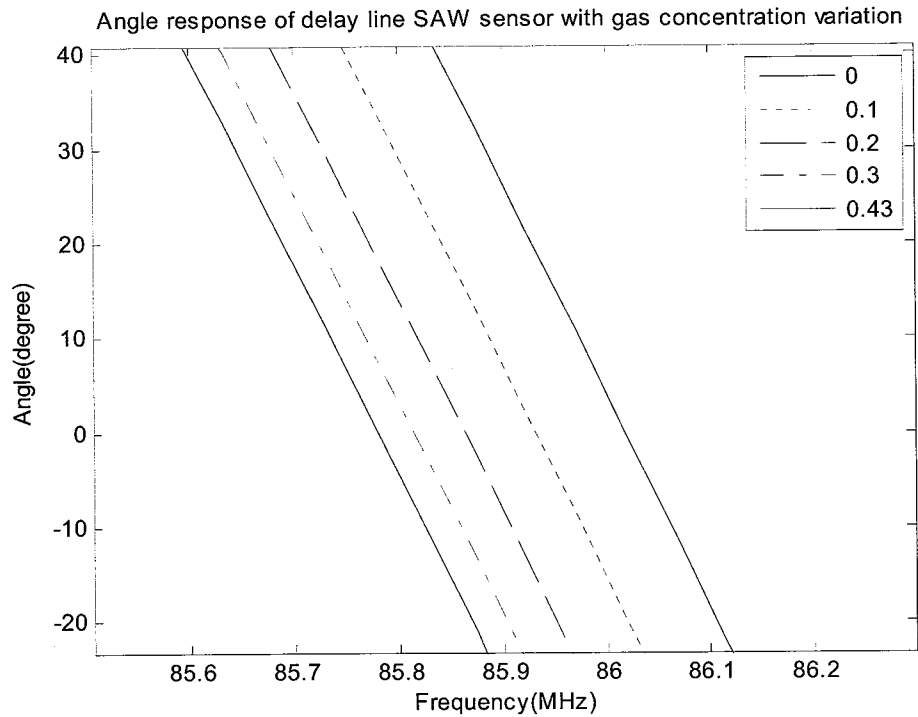


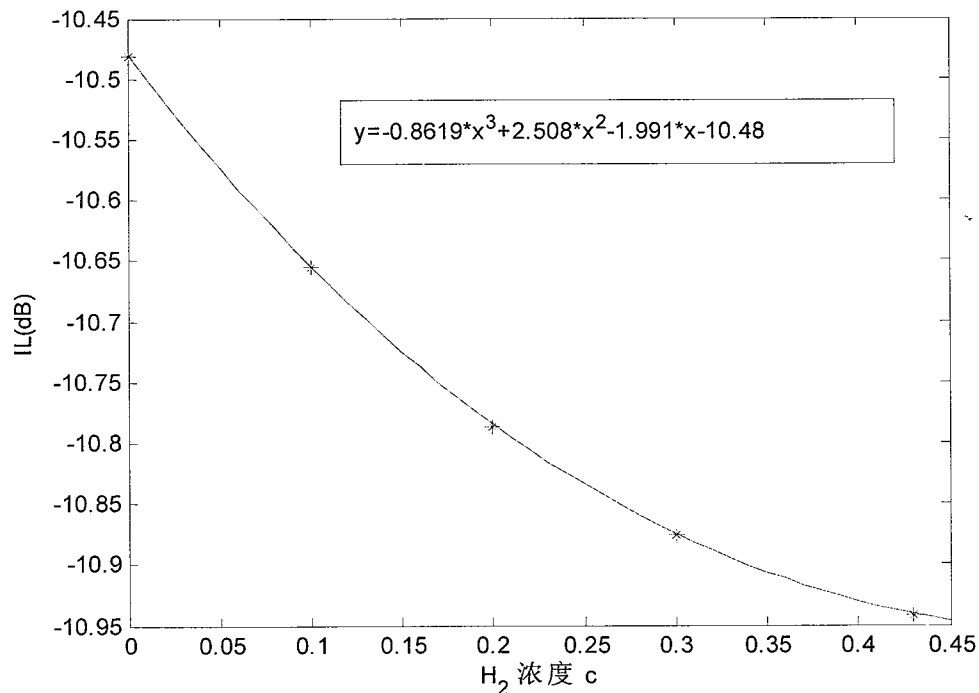
图 5.14 SAW 传感器在吸附不同气体量下中心频率附近的相位响应（局部放大图）

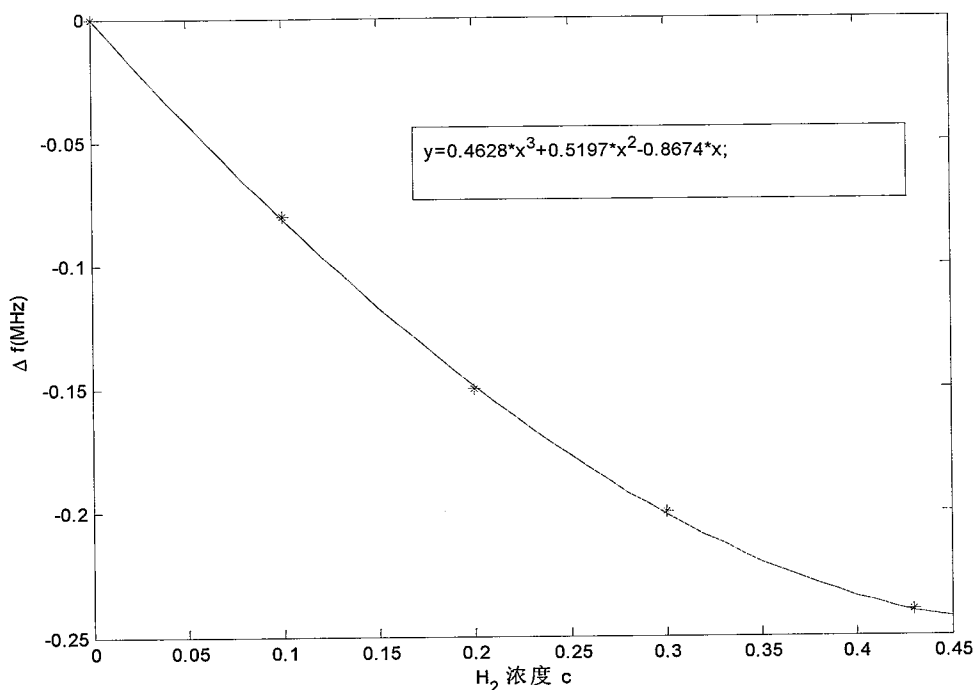
根据给定的条件，计算得到了一系列的仿真结果，如图 5.11~图 5.14所示，具体的结果数值结果列在表 5.5中。

表 5.6 不同 H₂ 原子分数浓度下, ANSYS 的仿真结果

c	0	0.1	0.2	0.3	0.43
E(GPa)	128	124.5	121.36	118.5	115
H(μm)	2	2.038	2.076	2.114	2.1634
P(kg/m^3)	12020	12008.57	11951.94	11851.5	11659.352
IL(dB)	-10.4814	-10.6557	-10.7868	-10.8758	-10.9424
f(MHz)	85.88	85.80	85.73	85.68	85.64

气体吸附响应通常是分为三个区间的, 当气体量很少, 刚开始吸附的时候, 响应迅速, 呈频率变化和气体浓度呈线性; 当吸附达到饱和时, 频率基本保持稳定; 之间是一个过渡带。因为这里计算不同浓度的气体吸附点数比较少, 无法充分气体吸附效应的过程, 只是采用了对计算的数据进行了三次多项式的拟合, 结果如图 5.15和图 5.16所示。

图 5.15 不同浓度 H₂ 下 SAW 传感器中心频率的损耗

图 5.16 不同浓度 H₂ 下 SAW 传感器振荡器输出频率

5.2.3 三维 ZnO/XY-LiNbO₃ 结构 Love 波传感器仿真

对于非类型 3 压电晶体，SH 方向的位移没有与其它自由度完全解耦，因此我们要考虑 x_2 方向的位移，只能够进行完全的三维模拟。XY-LiNbO₃ 是类型 4 晶体，机械波 SH 与电磁波耦合，而与 SV 和 L 波解耦。在这种材料中不存在自由表面的表面波，只存在 SSBW，通过覆盖一层薄的 ZnO 波导层，形成一种在由基片和声波导层构成的层状结构中传播的一种 Love 波。波导材料的体横波速度小于基片材料的体横波速度^[87]，Love 波质点振动既垂直于波传播方向又垂直于基片表面法线方向。

对于这种分析水平剪切波分量的情况，显然无法采用之前所用的二维分析方法，只能采用三维模拟。相对比二维的有限元方法，三维有限元方法主要存在如下区别：

- a) 划分网格更加复杂，节点数呈平方速度增加。
- b) 三维单元的计算时间明显长于二维单元

- c) 三维模型还要考虑避免 IDT 孔径方向上两端边界的反射波干扰
- d) 三维模型能够仿真 IDT 的孔径以及声波传播的衍射效应

5.2.3.1 响应机理:

当将 Love 波传感器置于检测环境中, 由于待测物质的影响, 引起敏感膜区域密度和粘性的改变, 在这里我们只考虑密度引起的变化。定义 ZnO/XY-LiNbO₃ 延迟线传感器的质量灵敏度为^[92]:

$$S_m = \frac{1}{kdh} \frac{d\varphi}{d\rho} \quad (4.15)$$

其中 k 表示波数($2\pi/\lambda$), d 表示两个换能器中心之间距离, ρ 表示敏感膜的密度, φ 表示接收到电信号的相位。

5.2.3.2 三维模型建立

考虑到三维模型的复杂性以及计算机的计算能力, 建模要比二维难度大很多。并且也无法通过二维模型那样建立传播方向较长或者是半圆形的边界条件来消除边界反射干扰。因此在这里采用了 AC 激励方式, 在不同的敏感膜密度条件下, 通过在输入 IDT 端加载一个正弦变化的电压, 当这个电压激励的表面波到达输出端后, 提取 IDT 上信号的相位, 通过 (4.15) 式来求得传感器的灵敏度。通过这种方法, 我们只需要第一次到达接收端换能器的信号即可, 之后的信号并不影响我们结果, 也就是说我们可以在时域内将时间 t 后的信号都去掉, 所以我们无需担心两端边界反射问题了, 但是由于体波速度要比表面波速度快, 所以我们必须要避免体波的干扰, 故需要把模型的底部反射在调整时间轴 t 后去, 这里采用把基片的厚度方向要加深一些。当然这种方法只能研究某特定频率激励的响应, 无法得到损耗等信息的缺点。根据以上原则, 这里三维 Love 波模型的参数如表 5.7 所示。

表 5.7 有限长 Love 波传感器模型参数

模型参数	参数值
------	-----

ZnO	1200x400x3μm
XY-LiNbO ₃	1200 x400x500μm
指条	10 x300μm
敏感膜	90 x 300 x0.4μm
IDT 间距	100μm
每个 IDT 指对数	2
周期	40μm

在 3D 模型有限元分析中发现，我们为了减少节点，通过灵敏度公式，可以采用了减小 IDT 间隔的方法，真实器件应用中，这个间距远比本文采用的长得多。但是一味的缩小这种模型的间距也会造成如图 5.17 所示直达波的干扰问题，因此建模时这个间距也要权衡考虑。

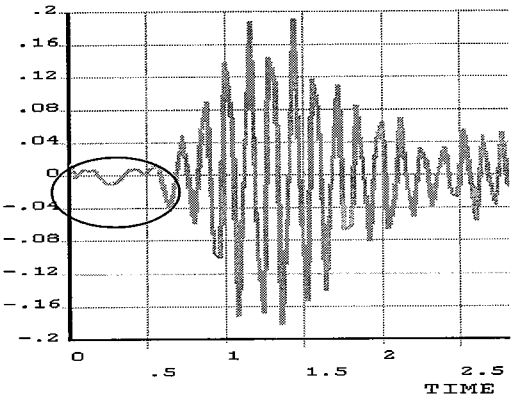


图 5.17 换能器间隔太小造成直达波干扰

这里，我们把敏感膜看作为一种忽略了粘性的刚性膜材料，设敏感膜的密度是 1000kg/m³，杨氏模量和泊松比分别为 10⁷ 和 0.4。ZnO 薄膜与 XY-LiNbO₃ 都是压电材料，采用 solid226 单元。敏感膜采用 solid45 单元。根据表 5.7 的模型参数，我们建立如图 5.19 所示的有限元模型。总共生成了 41,850 个单元。

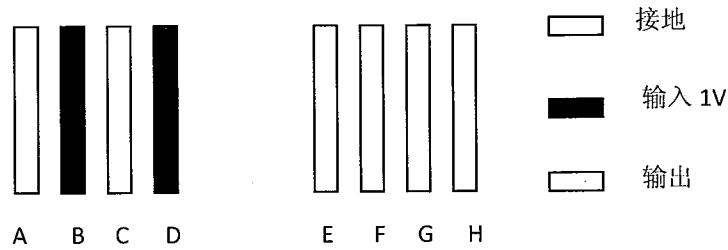


图 5.18 3D 有限长 Love 模型电极接线方式示意图

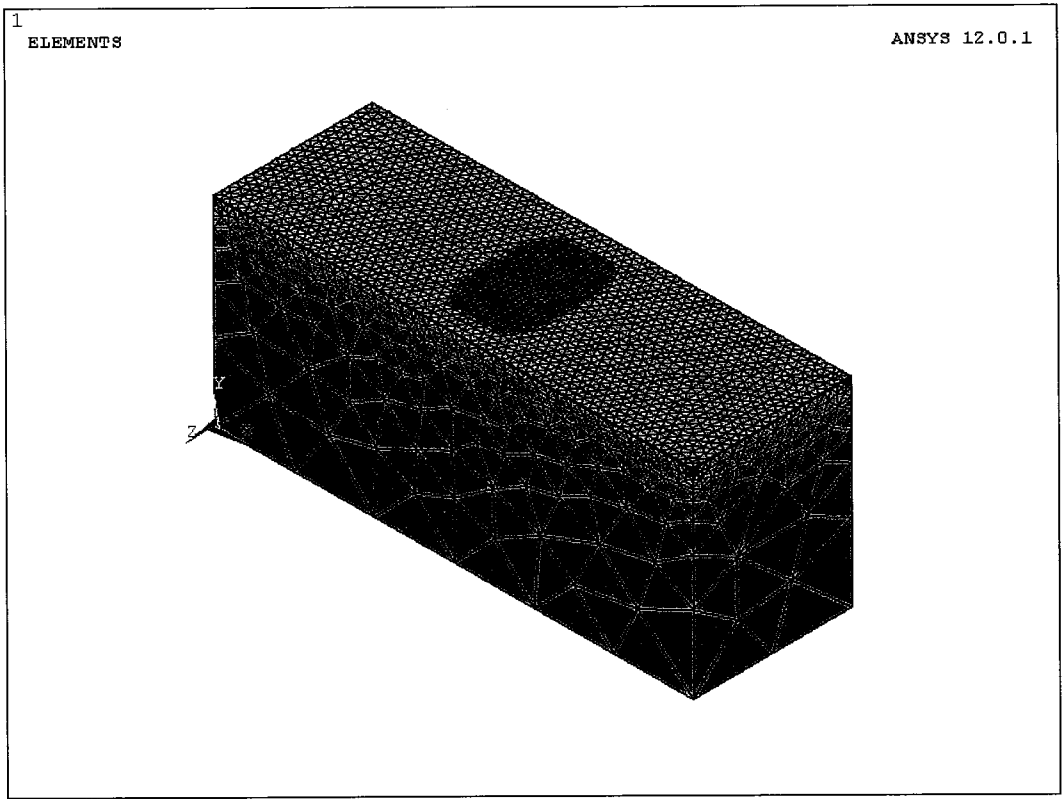


图 5.19 3D 有限长 Love 波有限元模型

在这里只考虑了对发射换能器和接收换能器各设置 2 对指条，指条的接线方式如图所示，将 A，C，E，G 指条都设置电势为 0，在 B，D 指条上加载 $f=100\text{MHz}$ 的正弦电压 $0.5\sin(2\pi ft)$ 情况下，通过提取 F，H 指条的电势来作为传感器的输出。

5.2.3.3 求解

采用暂态分析，以 0.5ns 为采样间隔，暂态分析的时间区间设置为 0~40ns。

这个时间区间设置既要考虑到系统输出达到稳定,又要考虑到界面反射波没有到达输出换能器。系统的输出响应如图 5.20所示。在这个图中即可以看到表面波最初到达输出换能器,最后稳定的过程。我们对于每一个敏感膜的密度变化,都计算一次如图 5.20所示的结果,然后比较它们的延时时间之差,并乘以角频率 $2\pi f$ 就得到了相位差,结果列在表 5.8和图 5.21中。

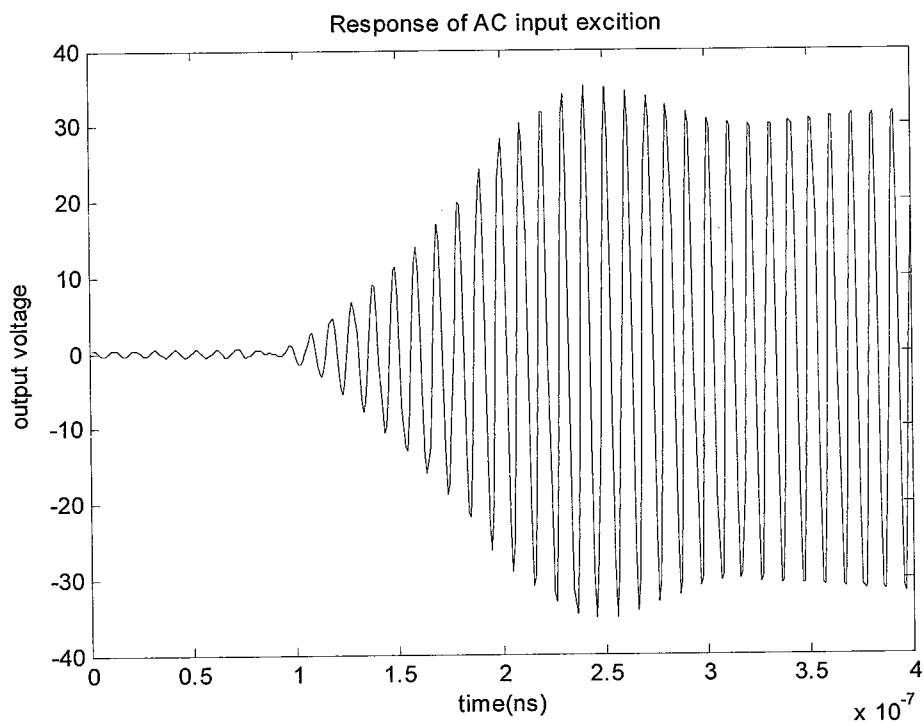


图 5.20 正弦激励下 Love 波传感器的响应

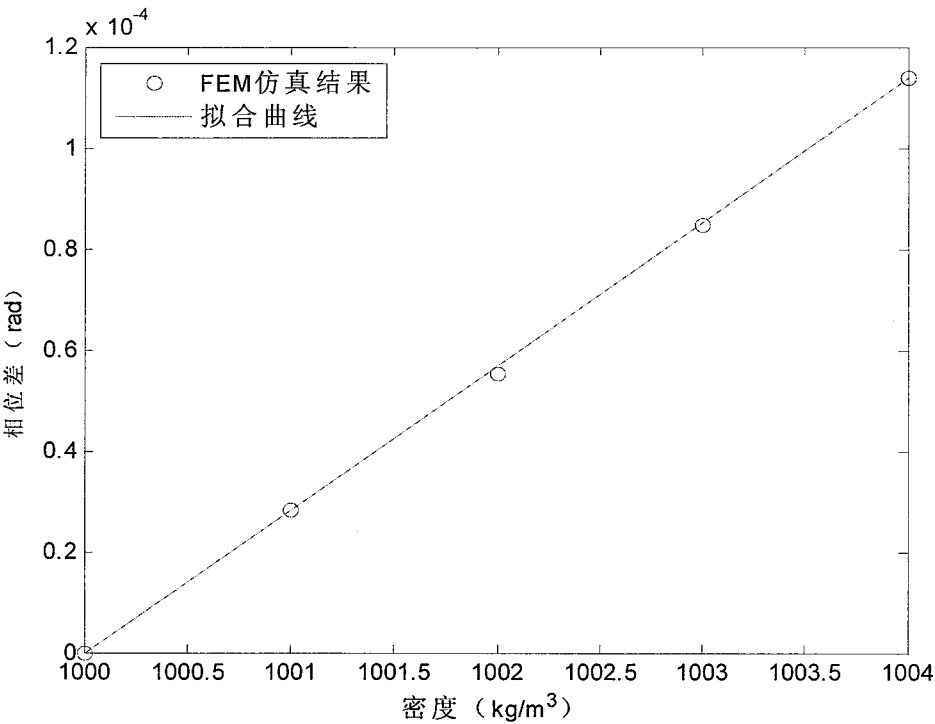


图 5.21 敏感膜密度变化引起延时时间和对应的相位差
表 5.8 敏感膜密度变化引起延时时间和对应的相位差

敏感膜密度(Kg/m³)	延时时间差(10 ⁻¹⁴)	相位差(10 ⁻⁵)
1000	0	0
1001	4.5	2.83
1002	8.8	5.53
1003	13.5	8.48
1004	18.1	11.37

根据图 5.21中拟合直线的斜率，代入(4.15)可以求得延迟线传感器的质量灵敏度为 45m²/kg。与文献^[93]报道的Love波传感器的范围(15~50 m²/kg)符合。

5.3 无限周期模型的ANSYS仿真及实验对比

通过前面对有限长器件分析可以看出，如果采用通用的 ANSYS 软件仿真完全的半无限基片，会造成节点急剧增加，由于受到计算机系统资源和运算速度的限制，建模无法复现真实器件的所有叉指电极，所以只能建立有限的若干对叉指电极，而且为了节约资源，加快计算时间，实际上网格划分都是采用比较粗糙的

划分方式。因此仿真效果受到了很大的制约。但是如果对于具有周期性特点 SAW 器件, 如果采用一些合理的近似, 可以采用通用 ANSYS 软件实现 SAW 器件某些性能和参数的快速、准确地分析。下面我们通过一种具有周期性结构 Love 波传感器结构为例, 来阐述多层周期性结构的 ANSYS 分析方法。

Kanner, Zhao^[51, 94-95]等人采用了周期边界条件对模型进行了近似, 有效地对瑞利波进行了分析。但是考虑到瑞利波的质点振动方向分别为波矢方向和基片表面法线方向, 这些周期边界条件有限元分析主要都是基于二维模型, 忽略了水平剪切方向的质点振动。因此这种模型显然无法对 Love 波进行分析, 必须要建立三维的周期模型。

5.1.1 Love波传感器ANSYS建模与分析^[96]

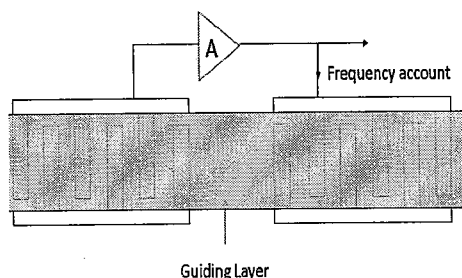


图 5.22 Love 波传感器结构示意图

在某些Love波传感器应用中, 为了增大敏感膜的面积, 通常考虑将在延迟线和换能器的所有区域都镀上波导层和敏感膜, 如图 5.22所示。实际上通常在声表面波器件的表面, 周期的排列着数以百计的电极。忽略边缘效应, Y.K.Yong 提出了周期结构边界条件^[97], 基于这种边界条件, 我们建立如图 5.24所示的包含电极的单元FEM模型。实际器件的压电基片在深度方向相比波长是很厚的, 为了节省计算时间, 提高计算效率, 需要对有限个波长厚度基片建模。为了分析模型基片厚度对计算结果的影响, 一方面我们建立一个不包括电极的SiO₂/ST-90°X石英双层结构和ST-90°X石英单层结构, 前者激发的是Love波模式, 后者激发的是SH-SAW波模式。并且分析两者在不同基片厚度情况下的速度。另一方面采用求解波动方程求得与之对应波导层厚度均匀的半无限双层Love波速度和单层SH-SAW波速度。因为没有金属电极, 所以理论上随着有限元模型基片厚度的增

加, 其速度值应趋近于半无限模型的结果。我们定义由于不同基片厚度引起的相对误差为:

$$E = \frac{V_h - V_0}{V_0} \quad (3.154)$$

其中 V_h 表示在基片厚度为 h 时FEM模型求解得到的速度, V_0 对应的均匀半无限波动方程求解得到的速度, 计算结果如图 5.23所示。从图 5.23可以看出, 随着厚度的增加, 相对误差明显减小, 尤其是对于Love波, 深度取 2 个波长时, 相对误差就已经低于 10^{-4} 数量级。

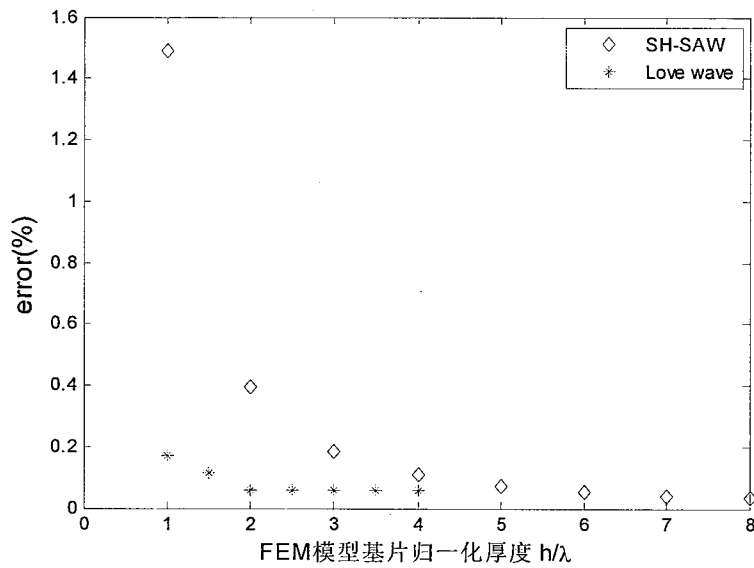


图 5.23 有限元模型基片厚度引起的相对误差

由于 SAW 传感器 IDT 在孔径方向的长度要远远大于波长, 并且在沿孔径方向, 场量几乎没有变化, 假设声波是沿 x_1 传播的平面声波, 因此所有相关场量均与 x_2 无关, 这就是所谓的一维近似假设。于特定压电材料, 例如 YZ-LiNbO₃, U_2 与 U_1 , U_3 , V 是解耦合的。 U_2 对分析瑞利波并没有影响, 或者不考虑 U_2 位移的情况可以转化为平面应变的问题。将 3 维问题转化为 2 维问题分析, 但是只有了 x_1 , x_3 方向位移了, 没有 x_2 方向位移。Xu^[44], Zhao^[94]等人应用这种条件瑞利波传感器的 FEM 二维模型, 但是因为 Love 波的质点振动方向与 IDT 的孔径方向平行, 即主要场量是 u_2 方向的位移。因此这种二维平面应变模型无法分析 Love 波, 将这种模型进行推广, 当 Δx_2 很小时

$$\frac{\partial u}{\partial x_2} \approx \frac{u(x_2 + \Delta x_2) - u(x_2)}{\Delta x_2} \quad (3.155)$$

通过对孔径方向(x_2)很薄的两个面上对应的节点的场量进行耦合, 即 $u(x_2)=u(x_2+\Delta x_2)$ 来实现 3D 模型近似 $\partial u/\partial x_2=0$ 的条件。这种方法保存一维近似假设的条件, 但是又能建立包括分析所有场量的模型。最终建立如图 5.24 所示的周期结构 Love 波传感器单元模型。

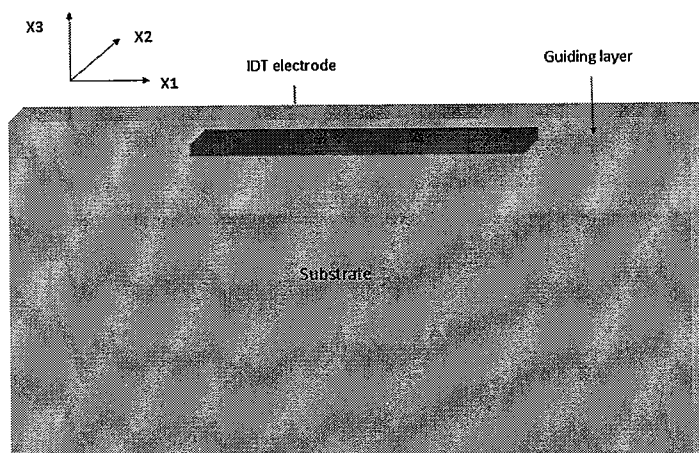


图 5.24 周期结构 Love 波传感器单元模型

为了对图 5.24 结构进行有限元分析, 我们选取了具有强大的前后处理和耦合场分析的通用有限元软件 ANSYS。由于对图 5.24 结构施加了反对称周期边界条件, 即波长等于 IDT 单元周期 2 倍长的整数倍。对于压电基片采用 20 个节点的 solid226 单元建模, 并将该单元的 keyopt(1) 的值设置为 1, 为了使节点在边界上的匹配, 金属电极和波导层采用 solid95 非压电单元。网格的划分通常需要权衡考虑计算精度和效率。Kanner^[51] 计算结果表明当采用一次单元时, 每个波长内取用 24 个单元时误差为 0.04%, 也就是保证每个单元内有 25 个节点, 本文中采用的是二次单元, 因此只需要 12 个单元就能满足基本要求。Love 波的能量主要是集中在基片与波导层的交界面上, 因此采用非等间距网格划分, 将交界面的网格划分较密, 并且根据有限元分析的结果表明, 如图 5.25 所示, 电场在电极的两端变化非常剧烈。因此需要在此位置加密网格。最终的网格划分模型如图 5.26 所示, 图 5.26 是为了显示需要, 只截取了表面一部分结果。在实际应用中, 我们通常选用基频模式进行检测。通过 ANSYS 对图 5.24 结构进行有限元分析, 通过 Love 波速度的估计, 合理设置基频模式频率搜索范围($F_{\text{beg}}, F_{\text{end}}$), 并通过 ANSYS

的模态分析获得基频Love波模式，并得到其本征频率。

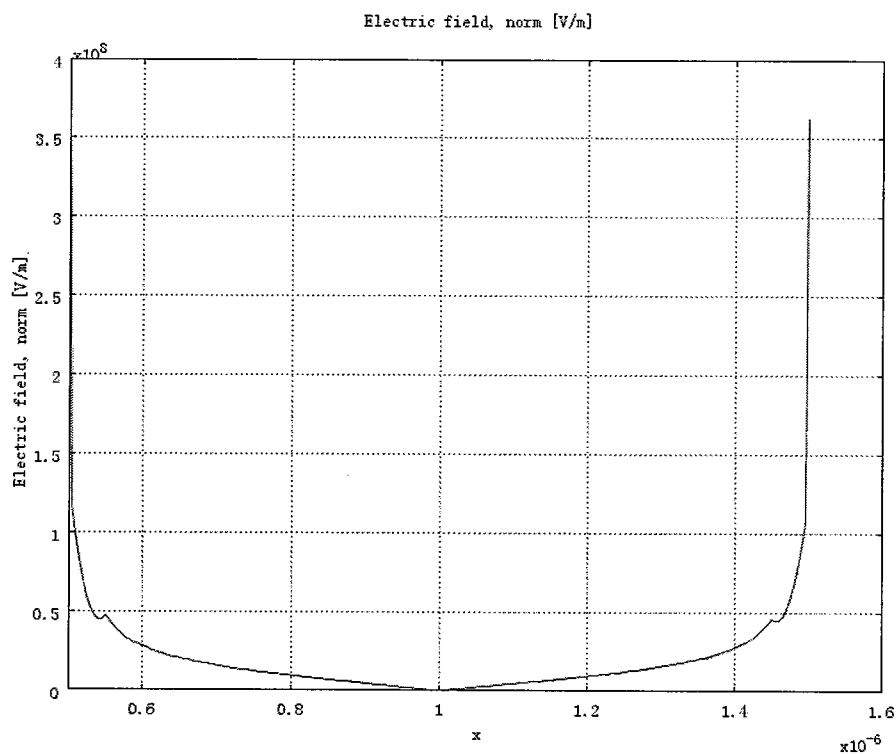


图 5.25 电极电场变化图（1 表示电极中心位置）

有限元分析中，为了考虑计算结果中收敛性的问题，我们采用通过逐步增加每个周期内单元密度，在本文的计算中，对本征频率的误差设置在 10^{-4} 数量级。从图 5.27 给出了每个波长含有的网格单元数与仿真误差率的关系，可以看出当每个波长内单元数增加时，结果趋于收敛，仿真精度也更高，根据本文计算精度的考虑，选取每个波长周期内单元密度为 28。

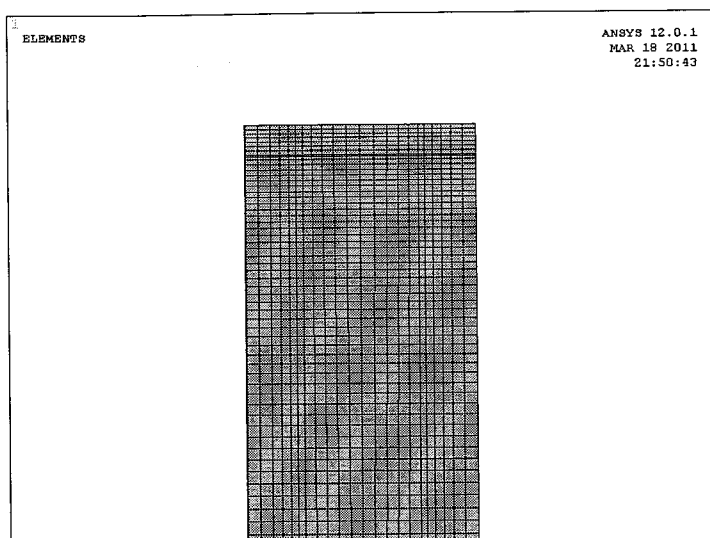


图 5.26 划分网格后的有限元模型

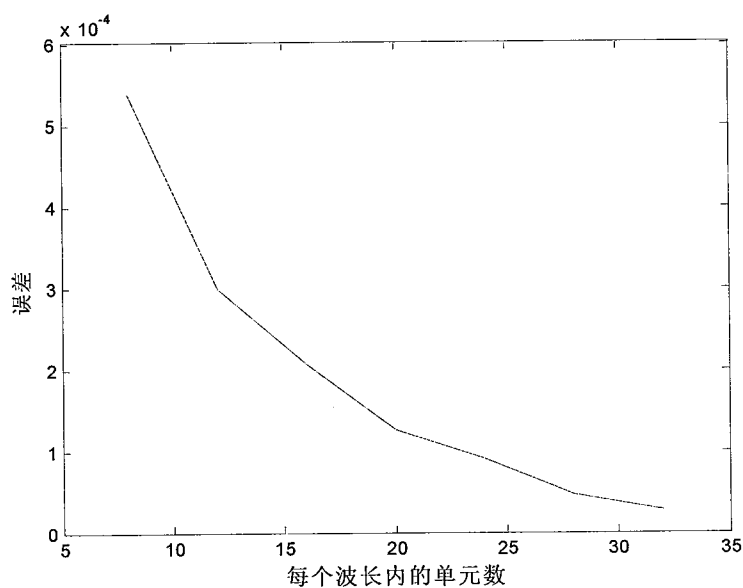


图 5.27 不同单元密度的误差

➤ 机电耦合系数

声表面波器件通过加载在叉指换能器上的电势激发声波，把接收到的声波能量转化为电能。研究表明，叉指换能器的辐射电导和机电耦合系数成正比，因此声表面波器件的插入损耗和带宽与基片材料的机电耦合系数有直接关系。Trindade^[98]等人提出采用开路—短路谐振频率来计算压电器件机电耦合系数的方法，定义为：

$$K = \frac{\omega_{oc}^2 - \omega_{sc}^2}{\omega_{oc}^2} \quad (3.156)$$

其中, ω_{oc} , ω_{sc} 表示IDT在开路和短路条件下对应的谐振频率, 我们通过对图 5.26 电极下区域节点电压自由度进行耦合, 通过对主节点施加 0 载荷代表短路条件, 对主节点不添加载荷边界条件来代表开路条件, 分别在这两种条件下获得特征频率, 并代入(3.156)计算Love波器件的机电耦合系数。

➤ 质量灵敏度

Love 波传感器表面由于附着或者吸附了待测物, 导致了声波传播的速度发生了改变, 因此会引起振荡器的频率的变化。传感器的质量灵敏度(mass sensitivity)的定义为^[99]:

$$S_m = \lim_{\Delta m \rightarrow 0} \frac{\Delta f / f}{\Delta m / a} \quad (3.157)$$

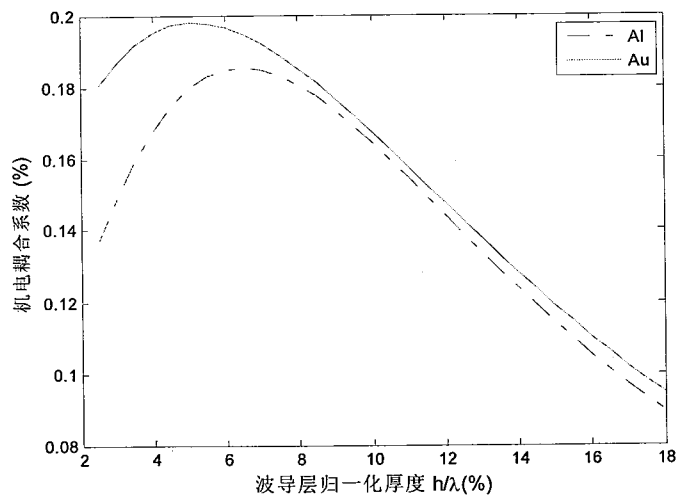
其中 f 为中心频率, Δf 是当面积为 a 的表面质量负载变化 Δm 时频率的变化。实际上在计算 Love 波传感器的灵敏度的时候, 通常将其波导层上施加一层很薄的微扰层。由于微扰层的影响, 会引起 Love 波速的下降, 因此器件的频率也会随之减小。根据 G. McHale^[100]等人的计算, 相对频率的改变只与基片和波导层的属性以及器件的工作频率有关, 而与微扰层无关。因此我们假设微扰层是和波导层相同的材料。这种假设并不影响灵敏度的计算结果。但是在有限元模型分析中我们可以将微扰层和波导层视为一层, 仅考虑波导层厚度微小的变化, 这样不但可以简化了模型, 而且可以达到更有效的网格划分, 提高计算速度和精度。

5.1.2 仿真结果与实验比较

本文给出的实例计算模型参数如下, IDT 周期为 20um, 对应波长 λ 为 40um, 波导层和压电基片分别采用 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英和 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X}$ LiTaO_3 的结构。基片的模型厚度方向为 2 个波长。IDT 电极分别采用铝和金, 厚度为 0.5% 个波长。其中 LiTaO_3 采用 Kovacs^[101]等人报道的材料参数, 其它的材料采用文献^[60]提供的参数。

➤ 机电耦合系数

当电极材料分别为铝和金时, 图 5.28所示为 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英和 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 结构的Love 波的机电耦合系数与波导层厚度的变化关系, 横轴为波导层厚度 h 与波长 λ 的比值, 纵轴为Love 波的机电耦合系数。由图可知, 其机电耦合系数均随着波导层厚度的增加先增大, 达到最大值以后, 再继续增大波导层厚度, 机电耦合系数反而会降低。这是因为当波导层厚度较小时, 声波主要在叉指换能器下的基片中传播, 此时机电耦合系数较小; 随着波导层厚度增加, 声波传播趋于叉指换能器所在的平面, 机电耦合系数也随之增大, 此时不同金属的影响比较明显, 采用重金属电极激励机电耦合系数较大, 再继续增加波导层的厚度, 越来越多的能量分布于波导层中, 离叉指换能器所在平面越来越远, 机电耦合系数也会随之下降, 此时不同金属电极的影响也不再明显。我们从图 5.28两种结构可见, 考虑提高器件的性能, 降低损耗, 对 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英结构, 波导层厚度变化对机电耦合系数的影响比较明显, 器件设计中波导层的厚度应选择小于 15% 波长。而对于 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 结构, 波导层厚度变化对机电耦合系数的影响比较小, 在小于 20%波长范围内, 机电耦合系数都比较大。



(a) $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英

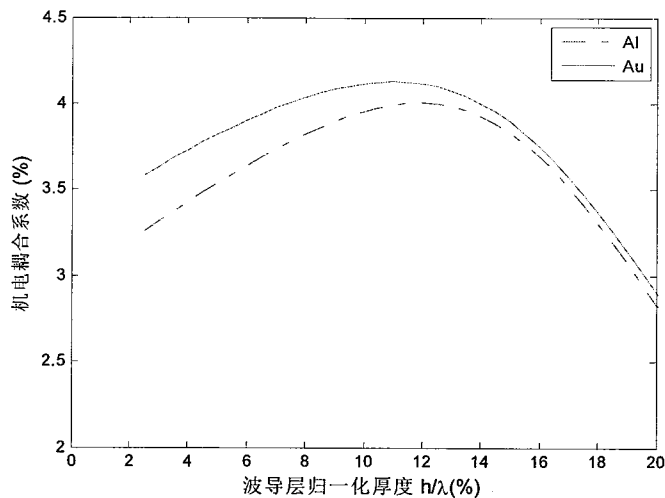
(b) $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$

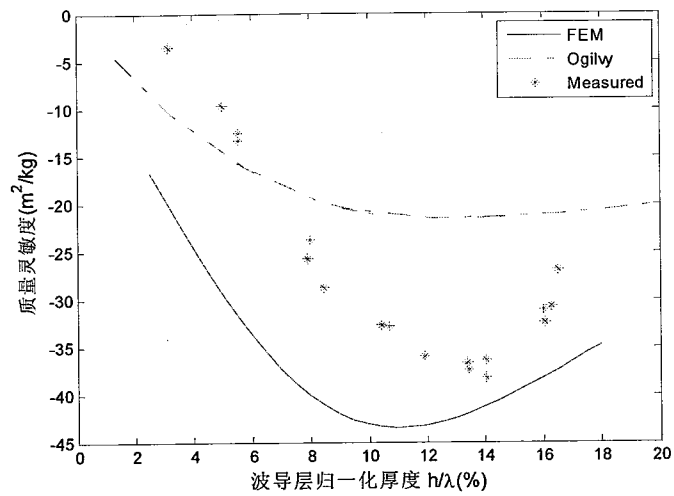
图 5.28 机电耦合系数随波导层厚度变化

➤ 质量灵敏度

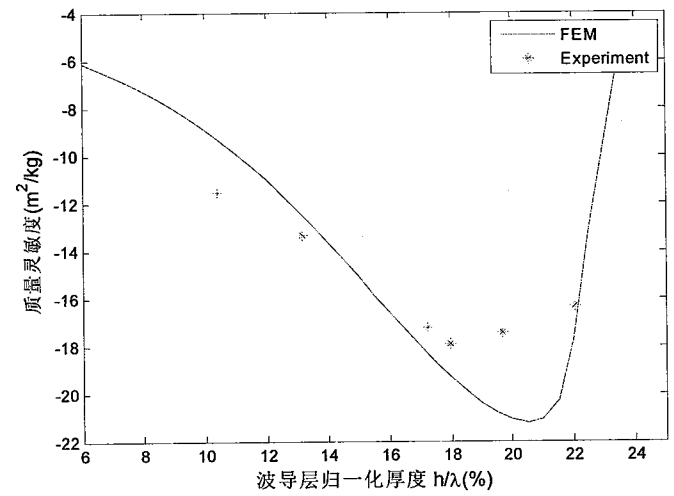
图 5.29 为 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英和 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 结构 Love 波器件其速度变化量与相对质量灵敏度和波导层厚度的变化关系。

其中，质量负载效应使得速度减小，因此灵敏度的值为负数，负数绝对值越大表示灵敏度越大。由图可见，Love 波器件其速度变化量与相对质量灵敏度均随着波导层厚度的增加先增大，达到最大值，然后再继续增加波导层厚度，其速度变化量与相对质量灵敏度反而随着波导层厚度的增加而减小，对 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英结构，其最佳膜厚约为 0.11λ ，而对于 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 结构，最佳膜厚约为 0.2λ 。

图 5.29a 中，虚线表示 Ogilvy^[102] 均匀层状理论计算得到的结果，‘*’表示文献^[102] 中实验中测量得到的结果，实线表示本文计算的结果。通过对比可见，本文的方法明显可以看出在超过最优波导层厚度时，器件的灵敏度会明显下降，与实验得到的结果更加符合，而且最优波导层厚度也接近实验的结果。图 5.29b 中，实线表示本文按照文献^[103] 的参数计算 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 结构的结果，‘*’表示文献中实验测量的结果^[103]，由图可见，实验结果与仿真的结果比较接近。在 0.2λ 处的差别可能是因为在该波导层厚度时，Love 波除了基波模式以外还存在高阶的模式，IDT 的一部分能量激励泄露到其它模式中去，导致灵敏度下降。



(a) $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英



(b) $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$

图 5.29 质量灵敏度随波导层厚度变化

本章小结

本章阐述了 ANSYS 进行压电有限元分析基本原理和方法。

1 有限长 ANSYS 二维模型仿真。通过一个 Pd 膜/YZ- LiNbO_3 结构的 H_2 气体传感器为例，对其二维建模，通过在器件的两端虚拟半圆形的边界，有效的减小了反射波的干扰。采用冲激信号激励，并结合快速傅立叶变换，得到了器件的频率响应。根据 Pd 膜的气体吸附原理，分析了低浓度时 H_2 气体吸附响应机理，通过计算得到了延迟线谐振器频率和损耗与吸附气体浓度的响应曲线。

2 有限长 ANSYS 三维模型仿真。由于受到计算机运算能力的限制,本章分析了输入和输出只有 4 对指条的 $\text{ZnO}/\text{XY-LiNbO}_3$ 延迟线传感器简单的模型,通过对输入加载正弦激励信号,在待测物质吸附到敏感膜上时引起敏感膜密度的变化的情况下,通过观察输入端时域的响应信号的相位延时来实现对待测物的检测,得到了延迟线传感器的质量灵敏度为 $45\text{m}^2/\text{kg}$ 。

3 无限周期结构 Love 波传感器 ANSYS 的仿真。基于 Love 传感器的周期结构和一维近似条件,提出了 Love 波有限元模型,并通过 ANSYS 软件对其进行了有限元分析。以 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英和 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 两种结构为例,分析了在不同 IDT 材料和波导层厚度情况下,器件的机电耦合系数和质量灵敏度变化规律。通过仿真计算可以得到,采用优化的波导层厚度能够提高器件的机电耦合系数与质量灵敏度。得到了 $\text{SiO}_2/\text{ST-90}^\circ\text{X}$ 石英结构的 Love 波传感器的波导层最优厚度约为 0.11λ ,对于 $\text{SiO}_2/36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ 结构的 Love 波传感器的波导层最优厚度约为 0.2λ ,而且通过和实验的结果进行比较,本文的方法优于文献^[102]中采用的方法。

本章创新点:

- 1 给出了指条较少情况下,有限长 SAW 延迟线型传感器结构的 ANSYS 建模与分析方法。
- 2 基于 ANSYS 分析周期 Love 波结构的机电耦合系数和质量灵敏度的通用性较好的方法。

第6章 总结和展望

随着声表面波技术尤其是声表面波传感器技术的发展,针对多层结构的设计一直是一个研究重点。目前,对于声表面波多层结构的仿真还没有非常成熟,精确的方法。本文在传统的分析单层结构的 COM 方法上,进行推广,将多层效应考虑到其中,通过周期有限元/边界元分析多层 SAW 结构,实现对器件响应的仿真。

首先,通过层状结构的波动方程出发,考虑到数值计算稳定性和形式简洁,本文采用了改进的矩阵法—刚度矩阵方法,并根据声表面波传感器的特点,推广到包括金属层,液体层等情况。给出了响应是位移,电势,激励源是应力、电荷,计算广义格林函数的方法。通过对广义格林函数的分析,进行多层声波传播的特性研究。

然后,在多层结构的广义格林函数的基础上,对声表面波的多层结构的周期栅阵进行周期的 FEM/BEM 分析,这种 FEM/BEM 分析的具体方法是:将半无限基片分成一定有限厚基片和另一部分半无限基片,将一定有限厚度基片和其它之上各波导层作为有限元分析部分。剩下的半无限基片进行边界元的分析,通过边界元分析得到分界面上广义应力与广义位移之间的阻抗矩阵,并将其代入有限元方程中,从而获得结构的 FEM/BEM 结果,并求得周期结构的谐波导纳。结合 COM 理论方法,利用谐波导纳提取多层结构的 COM 参数。最后结合 COM 理论和 P 矩阵相结合的能够实现对声表面波器件性能的仿真。通过与实验结果进行比较,表明了这种方法是一种快速、有效的仿真含有周期栅阵的多层结构 SAW 传感器方法。

最后,本文在第 6 章中重点研究了 ANSYS 软件在多层声表面波结构中的应用。主要包括三个方面,第一,二维模型的仿真,当孔径方向的位移与其它自由度解耦时,适合采用二维的有限元模型进行分析,二维简化能够明显的改善计算量,另外也通过改变边界的结构来减小反射的影响,因此基于这种条件的模型可

以直接通过 ANSYS 分析得到系统频率响应, 结合气体的吸附机理, 就能进行气体传感器的仿真。第二, 但是对于大部分其它耦合的情况, 则只能进行三维分析。就目前的普通计算机来说, 三维的有限元分析存在明显的制约, 包括指对数和器件的长度等都只能采取按比例进行近似, 本文采用适合激励信号为正弦信号的相位延迟响应。通过计算 $\text{ZnO}/\text{XY-LiNbO}_3$ 结构的 Love 波传感器质量灵敏度, 与文献报道范围吻合。第三, 多层结构的周期有限元分析方法针对一个周期进行建模和分析。这种周期结构可以在考虑电极质量负载效应的情况下, 进行结构的机电耦合系数和灵敏度的分析, 得到了优化的结构参数, 给 SAW 传感器设计提供了一种通用的方法。总之, 有限元方法非常适合分析多物理场耦合、不规则结构以及有限长模型, 考虑到使用通用的有限元分析软件, 对使用者要求也有所降低, 可以预见, 随着高性能计算机技术的发展, 有限元方法在声表面波分析中会有更大的应用。但是由于需要耗费大量的计算时间和计算资源, 不适合用来进行高性能器件的多参数的快速优化设计。

本文的主要创新性工作在于:

1. 推广了层状结构中的递归刚度矩阵法, 使得这种方法能运用于包括金属层和粘滞液体层的多层模型格林函数的计算。
2. 提出了一种分析多层结构栅阵的周期有限元/边界元方法, 并可以通过这种方法得到的谐波导纳提取 COM 参数, 并仿真器件的响应。
3. 在指条较少情况下, 针对有限长 SAW 延迟线型传感器结构的 ANSYS 建模与分析方法。
4. 基于 ANSYS 分析周期 Love 波结构的机电耦合系数和质量灵敏度的通用性较好的方法。

目前尚待解决的问题与后续工作:

- 1 在用有限元方法对声表面波器件直接仿真的方面, 模拟吸声橡胶对声波的吸收一直是一个很重要的问题, 因此需要以后在有限元方法建立吸声橡胶的模型, 使得仿真的模型更加接近实际。
- 2 在本文采用的有限元和边界元方法中, 都是基于二维模型, 忽略了孔径方向场

量的变化,实际上国外已经开展三维结构的有限元和边界元分析,如果能够在二维模型的基础上拓展到三维模型上去,可以有更大的应用前景。

2 在本文所采用的 COM 方程中并未考虑体波效应和 IDT 非对称的单相单向结构的,实际上可以通过修改 COM 方程将其考虑在内。在通过谐波导纳提取 COM 参数中,当结构参数固定后,COM 并非是常数,而是和频率有关系,开展对频散的 COM 参数进行研究对声表面波器件的精确模拟也有着重要的意义。

3 在多层膜结构的声表面波器件中,工艺一直是一个制约因素。由于工艺的原因造成膜的均匀性、一致性和材料参数等引起差异,都会对器件的性能造成影响,关于多层膜制作工艺以及膜结构尺寸的测量等都是以后需要研究的问题。