



中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

硕士学位论文

声表面波器件级联有限元模拟方法研究

作者姓名: 宋明鑫

指导教师: 张碧星研究员

中 研究所

学位类别:

学科专业:

研 究 所: 中国科学院声学研究所

2020 年 7 月

Research on simulation method of surface acoustic wave devices
based on hierarchical cascading technique for finite element
method

A thesis submitted to
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Master of Natural Science
in Acoustic

By
Song Mingxin
Supervisor: Professor Zhang Bixing

Institute of Acoustics
Chinese Academy of Sciences

July 2020

中国科学院大学

研究生学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名：宋明鑫
日期：2020年8月31日

中国科学院大学

学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：宋明鑫
日期：2020年8月31日

导师签名：张明鑫
日期：2020.8.31

摘 要

声表面波(SAW, Surface Acoustic Wave)器件的级联有限元方法(HCT-FEM)是采用单元矩阵级联的方式代替 FEM 对整体结构的建模,能够适用于复杂器件结构的快速模拟,对 SAW 器件模拟理论的发展起到了推动作用,具有很强的研究价值与应用前景。目前,准三维单元边界矩阵的计算以及 HCT-FEM 用于 SAW 器件结构参数优化并不完善。为此,本文提出了一种新的准三维单元边界矩阵计算方法与快速变频模拟方法,同时将 HCT-FEM 应用到压电声子晶体结构的分析中。

首先,介绍 HCT-FEM 模拟 SAW 器件的基本原理。依据有限元分析方法的基本原理与存在的局限性,阐述 HCT-FEM 的核心思想与算法流程,重点分析其计算速度快等技术优势的根本原因。以二维单元模型为例,完善级联公式的推导过程与逆级联算法流程,并分析和说明叉指换能器(IDT, Interdigital Transducer)的电阻效应与吸收层单元的级联。

然后,研究 SAW 器件的准三维级联模拟方法,提出一种新的准三维单元 B 矩阵(Boundary Matrix)计算方法。分析基本单元模型在二维与准三维时的区别,以及准三维模型能够模拟漏波等带有水平剪切分量声波模式的优势。结合准三维单元模型的特点,将其系统矩阵划分成 6×6 的子矩阵结构,合并模型前后侧面对应的方程式。接着利用合并后等式为零的特点,消去模型中前后侧面与内部自由度,获得维度很低的准三单元 B 矩阵。最后,级联该 B 矩阵实现完整 SAW 器件的模拟与分析。

接着,针对 SAW 器件设计中 IDT 指条周期不断优化的情况,提出一种 HCT-FEM 快速变频模拟与计算的方法。在准三维单元模型的基础上,分析 IDT 指条周期的变化对单元质量矩阵与刚度矩阵的影响。引入参数单元模型与波长变化因子,建立不同 IDT 周期对应单元系统矩阵间的简易函数关系。利用参考单元的 FEM 模型快速计算出任意 IDT 指条周期的单元系统矩阵,实现 SAW 器件的快速变频模拟与计算。

最后, 将 HCT-FEM 应用到实际的 SAW 器件模拟案例中, 首先是漏波谐振器的模拟与变频过程, 并采用实验的方法验证了模拟结果的可靠性。接着分析了电极电阻、二氧化硅层厚度对温度补偿型 SAW 谐振器性能的影响。作为 HCT-FEM 的进一步应用, 将三维单元模型用于压电声子晶体结构的级联模拟, 并通过逆级联过程获得了声表面波的位移场, 利用该位移场信息计算和研究压电声子晶体中声表面波透射系数的基本特性。

关键词: 声表面波器件, 级联有限元方法, 边界矩阵计算, 快速变频模拟方法

Abstract

The hierarchical cascading technique for finite element method (HCT-FEM) realizes the rapid simulation of surface acoustic wave devices with complex structure quickly using the cascade of basic units. It has promoted the development of simulation theory about SAW devices and has strong research value and application prospect. At present, HCT-FEM is not perfect in the calculation of the boundary matrix of the quasi-three-dimensional (2.5-D) model and in the optimization of structural parameters. To this end, this paper proposes a new method to calculating the boundary matrix of the 2.5-D model and a fast frequency conversion simulation method. At the same time, HCT-FEM is applied to the analysis of piezoelectric phononic crystal.

First, the basic principles of HCT-FEM are introduced. According to the advantages and limitations of the FEM, the core idea and algorithm flow of HCT-FEM are explained. At the same time, technical advantages such as the speed of HCT-FEM have been emphatically analyzed. Taking the two-dimensional element model as an example, the derivation of the cascade and its inverse process are improved. Finally, the resistance of IDT and the cascade of the absorption layer element are analyzed.

Then, the 2.5-D model cascade simulation of SAW devices is studied, and a new method to calculating the boundary matrix of 2.5-D model is proposed. and the advantages of 2.5-D model that can leak waves and other acoustic modes with horizontal shear components are analyzed through the difference between two-dimensional and 2.5-D model. Based on the characteristics of the 2.5-D model, the system is matrixed into 6×6 sub-matrix, and the equations corresponding to the degree of freedoms (DOFs) on the front and back sides of the model are combined. Then eliminate the zero entries in the system matrix to obtain a quasi-three-unit B matrix with very low dimensions. Finally, the B matrix is cascaded to realize the simulation and analysis of the complete SAW device.

Next, in view of the continuous optimization of the finger distance in the design of SAW devices, a HCT-FEM fast frequency conversion method is proposed. Based on the 2.5-D model, the influence of IDT period on the element mass matrix and stiffness matrix is analyzed. The reference unit model and the wavelength change factor are introduced to establish a simple function relationship between the matrix of the unit system corresponding to different IDT periods. The FEM model of the reference unit is used to quickly calculate the unit system matrix of any IDT period to realize the fast frequency conversion.

Finally, HCT-FEM is applied to the actual SAW devices case. The first case is the simulation and frequency conversion process of the leaky wave resonator, and the reliability of the simulation results is verified by experimental methods. The second case is to analyze the influence of electrode resistance and silicon dioxide layer thickness on the performance of temperature compensated SAW resonators. As a further application of HCT-FEM, three-dimensional model of element was cascaded to simulate piezoelectric phononic crystal, and the displacement field of SAW was calculated through the inverse cascade process, which is used to study the basic characteristics of the transmission coefficient.

Key words: Surface acoustic wave devices, Hierarchical cascading technique, Boundary matrix calculation, Frequency conversion method

目 录

第 1 章 绪论.....	1
1.1 研究背景及意义.....	1
1.2 国内外研究现状.....	2
1.2.1 SAW 器件结构发展.....	2
1.2.2 模拟理论的发展.....	4
1.3 本文主要研究内容.....	6
第 2 章 级联有限元方法	9
2.1 有限元模拟方法.....	9
2.1.1 有限元基本原理.....	9
2.1.2 有限元分析过程.....	11
2.2 级联有限元方法.....	14
2.2.1 级联模拟原理.....	14
2.2.2 级联公式推导.....	16
2.2.3 逆级联过程.....	20
2.3 电极电阻效应.....	21
2.4 吸收层单元级联.....	23
2.5 本章小结.....	24
第 3 章 准三维单元级联模拟	25
3.1 准三维模型与单元 B 矩阵.....	25
3.2 快速变频模拟方法.....	30
3.3 本章小结.....	33
第 4 章 SAW 器件模拟与实验验证	35
4.1 SAW 谐振器的模拟.....	35
4.1.1 漏波谐振器.....	35
4.1.2 TC-SAW 谐振器	39
4.2 实验验证.....	43
4.2.1 SAW 器件的制备与测试.....	43
4.2.2 测试结果分析与验证.....	46

4.3 压电声子晶体.....	48
4.3.1 压电声子晶体的模拟.....	48
4.3.2 传输系数的计算.....	54
4.4 本章小结.....	56
第 5 章 总结与展望	59
5.1 研究总结.....	59
5.2 研究展望.....	61
参考文献.....	63
致 谢.....	69
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果	71

图表目录

图 1.1	智能手机中的 SAW 器件.....	1
图 1.2	SAW 器件的基本结构示意图.....	3
图 1.3	三层结构的 IHP 型 SAW 器件示意图	4
图 1.4	简单 SAW 谐振器结构的单元级联示意图.....	5
图 2.1	椭圆形区域的三角形单元网格划分.....	10
图 2.2	有限元分析方法的基本流程.....	11
图 2.3	一对 IDT 结构的 FEM 建模.....	12
图 2.4	IDT 模型特征频率对应的声波振型.....	12
图 2.5	FEM 计算模型的导纳曲线	13
图 2.6	同周期 SAW 谐振器的基本单元.....	14
图 2.7	级联过程中单元 B 矩阵的更新.....	15
图 2.8	根据节点位置将模型自由度划分为四个部分.....	16
图 2.9	相邻单元的 B 矩阵级联.....	18
图 2.10	三种温补型谐振器的表面位移分布图.....	20
图 2.11	逆级联的算法过程.....	21
图 2.12	电极电阻对感应电流的作用.....	21
图 2.13	吸收层单元 B 矩阵的级联.....	24
图 3.1	单根电极单元的两类 FEM 模型	25
图 3.2	电极单元准三维模型的网格划化.....	27
图 3.3	两种 FEM 验证模型	28
图 3.4	模型一导纳实部与虚部的对比.....	29
图 3.5	谐振频点时模型一的表面位移分布图.....	29
图 3.6	长方体单元在各方向上同比例的拉伸.....	31
图 4.1	单端口 SAW 谐振器的结构示意图.....	35
图 4.2	SAW 谐振器的导纳计算结果.....	37
图 4.3	波长为 $4.01\mu m$ 时的直接建模与快速变频结果对比.....	37
图 4.4	TC-SAW 谐振器的电极基本单元结构示意图	40

图 4.5	同步单端口 TC-SAW 谐振器的导纳结果	41
图 4.6	不同温补层高度时的 TC-SAW 谐振器导纳幅值	42
图 4.7	随着温补层厚度增加 TC-SAW 谐振器相对带宽的变化	42
图 4.8	SAW 器件光刻工艺的流程圖.....	43
图 4.9	未封装的晶元.....	44
图 4.10	封装后的 SAW 器件.....	44
图 4.11	SAW 谐振器的测试平台.....	45
图 4.12	SAW 器件测试图.....	45
图 4.13	考虑寄生效应的电路拓扑结构.....	46
图 4.14	模拟计算与实验测试结果对比.....	47
图 4.15	线性坐标下模拟结果与测试结果的对比.....	47
图 4.16	IDT 扩展到二维声子晶体结构.....	49
图 4.17	声子晶体排布在延迟线上的分析结构.....	49
图 4.18	单个散射体单元模型.....	50
图 4.19	整体结构的基本单元级联示意图.....	50
图 4.20	一对 IDT 周期边界时的导纳响应.....	51
图 4.21	不同激励电压频率时的模型表面位移幅度与变形图.....	51
图 4.22	延迟线结构中的单电极模型与节点位置分布.....	52
图 4.23	发射端 IDT 基片表面的位移分布	53
图 4.24	接收端 IDT 基片表面的位移分布	53
图 4.25	发射端与接收端波数域中的谱分布.....	55
图 4.26	压电声子晶体中声表面波的透射系数.....	56
表 2.1	IDT 模型的结构参数.....	11
表 3.1	单根电极单元的几何结构参数.....	31
表 4.1	单电极基本单元的结构参数.....	36
表 4.2	HCT-FEM 单次频点计算的时间统计	38
表 4.3	TC-SAW 谐振器的结构参数	40

第1章 绪论

1.1 研究背景及意义

利用弹性体表面传播的声表面波（SAW, Surface Acoustic Wave）来实现对信号截取和处理的技术称为声表面波技术^[1]。20 世纪 70 年代叉指换能器（IDT, Interdigital Transducer）的发明极大地推动了声表面波技术的发展^[2]，利用半导体平面加工工艺，SAW 器件可以大批量生产，并具有体积小、质量轻、一致性强等特点。随着性能的不不断提升，大量性能优异的 SAW 器件在雷达、电视、移动通讯等设备中获得广泛的使用^[3-4]。特别是在无线通讯系统中，SAW 器件以其优良的通带选择性、极小的带内畸变以及实时信号处理的能力，已经成为了移动终端设备中不可或缺的组成部分^[5]。

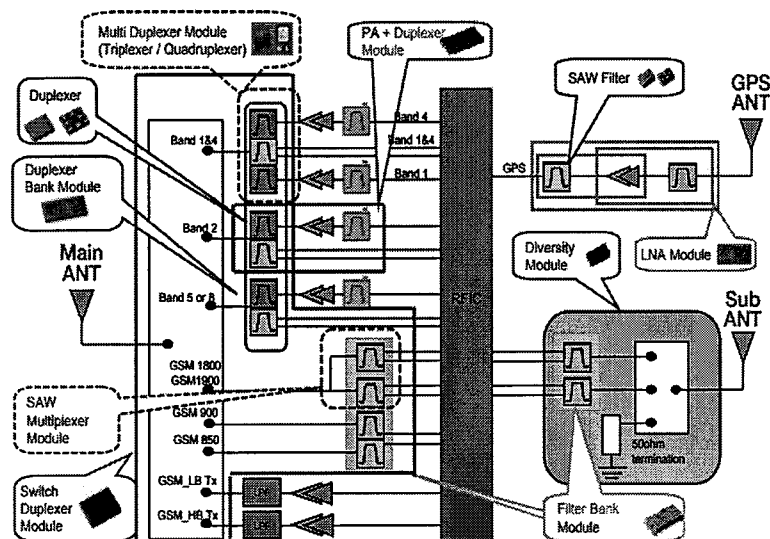


图 1.1 智能手机中的 SAW 器件

Figure 1.1 SAW devices in cellular phone

图 1.1 展示了智能手机射频前端模块中 SAW 器件的使用情况^[6]。其中，SAW 滤波器以单个独立元件或者模组的形式存在于各通信频段上，在信号的传输路径上起到筛选和分离通讯信号、抑制干扰和环境噪声等关键作用。包括 Wi-Fi、蓝牙、全球导航定位模块在内，一台智能手机通常需要 30~40 个 SAW 器件。特别

是近年来 4G LTE 通信技术的快速发展, 全球预计新增 40 个通讯频段, 对 SAW 器件的需求显著提升^[7]。与此同时, 通讯频段更加密集, 信号传输速度加快, 载波信号发射功率提升等变化都对 SAW 器件的性能提出了更高的指标要求。设计出满足行业发展需求的新一代高性能 SAW 器件是目前声表面波技术面临的机遇与挑战。而 SAW 器件的模拟技术是指导器件结构设计的关键环节与理论基础^[8]。通过模拟方法, 研究人员可以初步判断器件性能, 分析压电介质中声波的传播机制, 并通过大量参数组合, 优化出较为理想的器件响应。模拟理论的发展与进步不断推动着 SAW 器件性能的提升。同时, 模拟理论的计算精确与速度是声表面波器件设计、生产的保障, 是行业内的核心竞争力。

随着性能要求的提高, SAW 器件结构上呈现出多样化、复杂化的发展趋势。常规的有限元分析方法 (FEM, Finite Element Method) 对器件结构具有较好的通用性, 但是往往受限于大量网格划分时造成的计算速度慢、内存占用大等问题, 很难适用于有限长 SAW 器件结构的模拟^[9]。目前广泛使用的有限元-边界元方法 (FEM-BEM) 较好地解决了 FEM 模拟有限长器件结构时计算量大等问题, 但是对多样化的 SAW 器件结构适应性不强^[10]。为满足新型 SAW 器件的性能分析与设计要求, Koskela 等提出了一种级联有限元方法 (HCT-FEM, Hierarchical Cascading Technique for Finite Element Method) 应用于 SAW 器件的快速模拟^[11]。该方法一方面继承了 FEM 方法的通用性, 能够适用于不同的器件结构以及材料种类。同时, 能够较为快速地完成有限长器件结构的电学响应与声场信息计算。HCT-FEM 较好地适应了 SAW 器件模拟的新要求, 对模拟理论的发展起到了一定的推动作用, 具有较强的实用价值与研究意义。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 SAW 器件结构发展

声表面波是一种沿固体表面传播且声波振幅随深度方向迅速衰减的弹性波, 由英国物理学家瑞利在 1885 年首次发现^[12]。1965 年, IDT 的发明使得表面波的激发与检测变得尤为便利, 加速了声表面波技术的发展^[2]。利用半导体平面工艺可以实现 SAW 器件的批量化生产, 为其大规模使用提供了基础。SAW 器件基

本结构如图 1.2 所示^[13]。通过光刻等工艺在压电材料表面沉积一层梳状结构的叉指换能器，将激励电信号通过 IDT 施加在压电材料表面，利用材料的压电效应激发出声表面波。在声表面波的传播过程中实现滤波、延时、传感等信号处理功能^[1]。两端金属反射栅将左右扩散的声表面波反射回 IDT 区域，提高声波能量的利用率。

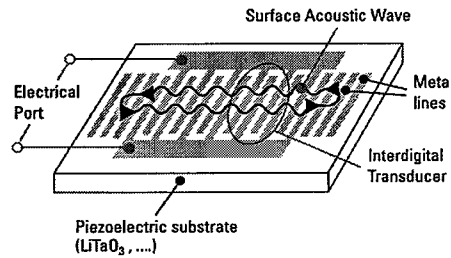


图 1.2 SAW 器件的基本结构示意图

Figure 1.2 The basic diagram of SAW device

近年来为提升 SAW 器件的性能表现，研究人员在器件结构设计上取得一系列重大的突破。首先为了提高 SAW 器件电学响应对环境温度变化的稳定性，研究人员在 IDT 表面覆盖一层温度补偿材料，提出了温度补偿型的声表面波(TC-SAW, Temperature Compensated Surface Acoustic Wave)器件^[14]。同时，通过设计叉指电极末端的指条形状抑制横向波模式激发，进一步提升 TC-SAW 器件的品质因数^[15]。为降低 SAW 器件的插入损耗，减少基片中体声波能量辐射现象，研究人员将 SAW 器件中的压电基底从单层拓展到二层或者三层，提出了超高性能(IHP, Incredible High Performance)的 SAW 器件^[16-17]。其一对 IDT 的基本结构组成如图 1.3 所示，蓝色区域代表压电材料，浅红色为低声速区，深红区域设置为高声速区，高低声速区组成声波的反射层。灰色区域为支撑层，顶端黄色区域为叉指电极。

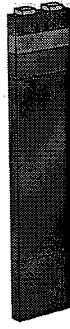


图 1.3 三层结构的 IHP 型 SAW 器件示意图

Figure 1.3 Schematic diagram of IHP SAW device with three layers structure

总结上述发展过程可以发现，随着性能的不不断提升，SAW 器件的结构与内部声波传播机制变得越来越复杂。从常规的器件结构发展到带有温度补偿层的 TC-SAW 器件，从单层基片结构发展到多层基片材料组成的 IHP 型器件。这些发展变化都对 SAW 器件的模拟技术提出了新的挑战。目前常用的耦合模模型与有限元-边界元方法难以适用于这种复杂器件结构的模拟与分析，发展新的模拟理论成为了行业内的迫切需要。

1.2.2 模拟理论的发展

SAW 器件的模拟技术一般借助数学模型或者数值分析方法，实现对实际结构所处状态较为精确的复现与分析。SAW 器件的发展与性能提高，在很大程度上取决于模拟理论的发展^[10]。SAW 器件的模拟理论具有很长的发展历史，从早期的 δ 函数模型、脉冲响应模型，以及等效电路模型，发展到耦合模（COM Coupling of Modes）模型，研究人员不断地提高模拟理论的可靠性与计算速度的快捷性^[18-23]。因其具有计算速度快及模拟精度高等特点，COM 模型广泛使用于 SAW 器件的优化设计。但是，随着 SAW 器件结构多样化的发展趋势，COM 模型难以适应 SAW 器件内部越来越复杂的声波传播机制。作为一种数值分析技术，有限元-边界元（FEM-BEM）方法很好地解决了 FEM 在分析有限长 SAW 器件结构时存在的计算时间长、内存占用量大等问题^[24-25]。而随着温度补偿层以及多层基片等新型 SAW 器件结构的出现，使得 FEM-BEM 对多样化器件结构适用性弱的问题越来越突出。

SAW 器件的 HCT-FEM 模拟方法最早是由 Koskela 等提出^[11,26-27]，该方法充

分利用了 SAW 器件结构中的周期性特点，从整体结构中分离出若干独立的基本单元，将完整器件看作是不同基本单元的多次级联。图 1.4 给出了一个简单 SAW 谐振器结构的单元级联过程^[11]。该谐振器由 6 根叉指换能器，以及左右 4 根金属反射栅构成，可以从有限长器件结构中分离出三种基本单元，即反射栅单元、正电极单元，以及负电极单元。只对三种基本单元建立 FEM 分析模型，并利用基本单元边界矩阵的一次代数运算表示单元的一次级联，直到扩展至 SAW 器件完整的指条数。在级联过程中，单元的边界矩阵可以重复利用，并且借助现代计算机强大的运算能力，不断提升算法的模拟速度，在该领域内受到广泛关注与积极研究。

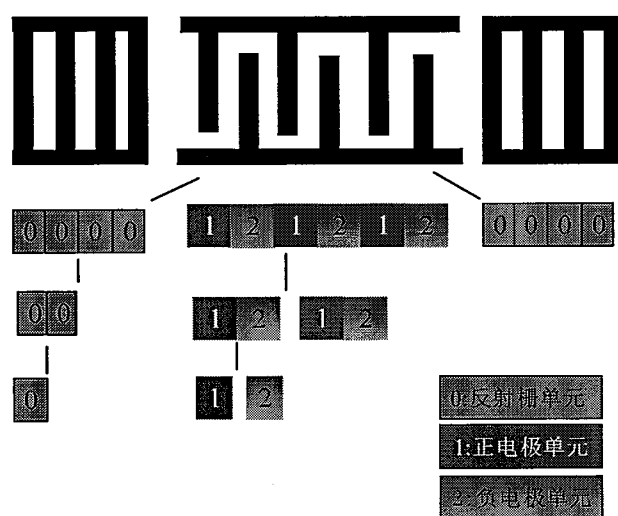


图 1.4 简单 SAW 谐振器结构的单元级联示意图

Figure 1.4 Schematic diagram of unit cascading for a simple SAW resonator

2017 年，Plessky 等首次利用 HCT-FEM 模拟了 5-IDT 的 CRF (Coupled Resonator Filters) 器件，级联了多个不同周期的 IDT 基本单元，扩大了算法的适用范围^[29]。Solal 等将级联方法中的 FEM 单元模型维度由二维扩展三维，将指条的横向效应纳入器件响应的影响因素中，提出了 SAW 器件三维结构的级联模拟方法^[30]。2018 年，Li 等将 HCT-FEM 运用到体声波器件的模拟以及横波抑制结构的参数优化中^[31-32]，赵旭鹏等分析了 SAW 器件中悬浮指情况下单元边界矩阵的形式^[33]。2019 年，Huang 等利用 HCT-FEM 的声波位移场计算能力，分析了有

限长 SAW 结构中不连续的指条空隙对表面波传播的影响^[34], 取得了良好效果。为提升 HCT-FEM 模拟方法中稀疏矩阵的运算速度, Matsuoka 与 Li 等利用图形处理单元(GPU, Graphics Processing Unit)多核计算的优势, 将算法实现移植到 GPU 硬件中^[35-36]。在三维结构的模拟中, 改进后的算法可以在 3 分钟左右的时间完成 280 根 IDT 构成 SAW 器件的单频点导纳计算。针对多种 SAW 器件结构的三维周期性单元模型, 2019 年 Koskela 与 Plessky 等利用两台 GPU 处理器并行计算的方式进一步提升矩阵计算速度, 并首次将该方法应用到 XBAR (X-Bulk Acoustic Resonator) 器件的分析中^[37]。

由模拟理论的最新进展可以看出, HCT-FEM 模拟有限长 SAW 器件结构的算法速度不断提升。并且, 其声场信息的计算能力对于分析器件的能量散射等现象具有深刻意义。同时, 在现阶段 HCT-FEM 模拟方法中的准三维单元 B 矩阵计算方法还有待进一步研究。并且, 针对不同 IDT 指条周期的参数优化过程, HCT-FEM 的模拟效率还有待提升。此外, HCT-FEM 目前多被用在 IDT 等具有单向周期排布的结构中, 针对更加普遍的双向周期压电声子晶体点阵结构目前还少有研究报告。

1.3 本文主要研究内容

本文提出了一种新的准三维单元 B 矩阵计算方法, 提升了 HCT-FEM 的模拟效率, 并通过实验验证了该方法的可靠性。在此基础上, 提出了 HCT-FEM 的快速变频模拟方法, 解决了 IDT 指条周期优化时计算速度慢及内存占用量大等问题。并首次将级联方法应用到压电声子晶体结构的模拟中, 取得良好效果。

第一章介绍课题的研究背景及意义, 同时分析 SAW 器件结构、模拟理论的发展, 着重介绍了 HCT-FEM 的国内外研究现状, 并概述本文的研究内容。

第二章介绍 SAW 器件 HCT-FEM 模拟方法的基本原理。首先介绍了有限元方法的基本原理与分析过程。在有限元方法的基础上, 阐述 HCT-FEM 的基本思想与计算优势, 并完成级联与逆级联的理论推导过程。最后, 分析电极的电阻效应与吸收层的单元级联。

第三章提出了新的准三维单元 B 矩阵计算方法与快速变频模拟方法。首先分析级联算法中二维单元模型与准三维单元模型的区别与联系。结合准三维单元

模型的特点, 将其单元系统矩阵划分为 6×6 的子矩阵结构。在周期边界条件下, 消去模型中前后侧面与内部自由度对应的方程式, 获得维度很低的准三维单元 B 矩阵, 进而提升 B 矩阵的级联速度。在此基础上, 分析了单元系统矩阵与 IDT 指条周期的关系。引入参考单元模型与波长变化因子, 利用参考单元的 FEM 模型快速计算出不同 IDT 周期对应的单元系统矩阵, 实现 SAW 器件频域响应的计算与快速变频效果。

第四章开展了 HCT-FEM 模拟 SAW 器件的具体实例以及实验研究。首先利用准三维模型及其单元级联算法, 模拟了常规的漏波谐振器, 并通过与实验测试结果的对比和分析, 验证了模拟计算结果的可靠性。此外, 利用快速变频模拟方法, 计算了当 IDT 周期一次改变时的漏波谐振器变频结果。接着利用 HCT-FEM 模拟了 TC-SAW 谐振器, 对比了电极电阻对谐振器导纳参数的影响, 并分析了随着二氧化硅温度补偿层厚度的增加, TC-SAW 谐振器相对带宽的变化规律。在 HTC-FEM 模拟压电声子晶体结构的案例中, 利用逆级联过程计算了压电基片表面的声表面波位移, 并利用该位移场信息计算和分析了压电声子晶体中声表面波透射系数的基本特性。

第五章对全文研究工作进行总结, 并根据已完成的情况和研究过程中遇到的问题, 提出下一步的工作设想。

第2章 级联有限元方法

本章主要介绍级联有限元方法(HCT-FEM)模拟 SAW 器件的基本原理与理论公式的推导过程。首先介绍传统 FEM 的原理与局限,接着阐述 HCT-FEM 的核心思想与技术优势,并完成级联公式及其逆过程的理论推导。最后,将电极的电阻效应纳入 HCT-FEM 的 SAW 器件模拟之中,并介绍吸收层的单元级联方法。

2.1 有限元模拟方法

在声学、固体力学等诸多物理领域中,研究人员虽然大多已经建立了完整的基本方程,但是实际问题中往往由于不规则的几何形状和复杂的边界条件难以获得明确的解析解。随着计算机运算能力的不断提升,数值分析技术越来越受到重视。其中,有限元方法因其计算精度高、对复杂结构适应能力强等特点,成为了处理实际工程问题的有效模拟和分析手段^[38]。同时,成熟的分析平台,简化了有限元理论复杂的程序编写过程,规范了模拟的基本流程,使得该方法更加通用与便捷。

2.1.1 有限元基本原理

有限元方法的基本思想是“化整为零”,把一个复杂的整体结构分解成若干规则的基本单元,各单元之间通过单元节点相互连接^[39]。单元内部的状态由单元节点上各自由度(DOFs, Degree Of Freedoms)的值通过内插的方式得到。FEM 利用这种离散方式把一个无限自由度的系统简化为有限个单元组成的结构,从而将空间内的微分方程转化成为线性方程组的形式,后者可以通过矩阵的形式进行存储和计算,借助现代计算机强大的运算能力,实现快速求解。如图 2.1 所示,把一个平面空间的椭圆形离散为多个规则的三角形单元,各个单元之间通过三角形的顶点,即单元节点相互连接。

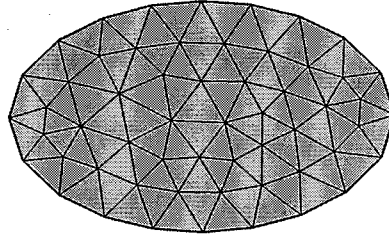


图 2.1 椭圆形区域的三角形单元网格划分

Figure 2.1 Meshing of the elliptical area using triangular elements

在准静态近似下, 压电介质内部的弹性波场与电场分别满足牛顿运动方程与麦克斯韦方程^[9]:

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u_i = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \\ \nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \end{cases} \quad \dots(2.1)$$

其中, 相同的角标表示 1 到 3 求和 (下同), ρ 为介质密度, 角频率 $\omega = 2\pi f$, u_i 为位移分量, $\mathbf{D}$ 为电位移矢量。

应变张量 T_{ij} 与电位移 $\mathbf{D}$ 满足^[9]:

$$T_{ij} = c_{ijkl}^E \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \quad \dots(2.2)$$

$$D_i = e_{ijk} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} - \varepsilon_{ij}^s \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad \dots(2.3)$$

其中, ϕ 表示电势, c_{ijkl}^E 、 e_{ijk} 和 ε_{ij}^s 分别为晶体材料的劲度常数、压电应力常数和介电常数。

根据有限元的基本原理, 首先建立压电介质的分析模型, 并进行网格划分。任一网格单元 a 上的节点自由度包括节点位移 u_a 与节点电势 ϕ_a , 单元内任意位置 (x, y, z) 的状态通过插值的方式获得^[40]:

$$\begin{cases} u(x, y, z) = \sum_{a=1}^n N_a(x, y, z) u_a(x_a, y_a, z_a) \\ \phi(x, y, z) = \sum_{a=1}^n N_a(x, y, z) \phi_a(x_a, y_a, z_a) \end{cases} \quad \dots(2.4)$$

其中, n 为节点个数, N_a 表示该节点对应的形函数。经过标准化 FEM 离散过程, 最终得到的线性方程组为^[11]:

$$(K+i\omega D-\omega^2 M)X=F \quad \dots(2.5)$$

其中, K 、 D 和 M 分别是模型的整体刚度矩阵、阻尼矩阵和质量矩阵。 X 表示模型中所有节点的位移和电势组成的矢量, F 为模型所有节点的电荷密度与应力组成的矢量。通过求解上述线性方程组, 可以计算出全部节点上自由度的值。同时, 单元内部的状态通过式(2.4)所示的插值方式获得。

2.1.2 有限元分析过程

以 SAW 器件的简化模型为例, 利用有限元分析平台计算一对 IDT 结构在周期边界条件时的频域特性。其过程可以大致分为以下几个步骤:



图 2.2 有限元分析方法的基本流程

Figure 2.2 Schematic diagram of the process of finite element analysis method

首先设定 IDT 的结构参数, 如表 2.1, 主要包括 IDT 的指条周期、金属电极的宽度与厚度、以及压电基片的厚度等。根据结构参数绘制出几何形状, 如图 2.3(a)所示。蓝色区域表示压电衬底, 其底部放置完美匹配层 (PML, Perfect Match Layer) 用于吸收基片底部的反射波, 模拟声波传播的半无限边界^[41-42]。黄色区域表示叉指换能器, 用于激发声表面波, 电极顶端覆盖真空层。接着, 指定模型中各部分的材料类型, 并设置合适的物理场。其中电极材料选用金属铝, 压电衬底材料为 128° Y-X 铌酸锂, 其材料参数包括密度、弹性矩阵、耦合矩阵、相对介电常数等。

表 2.1 IDT 模型的结构参数

Table 2.1 The structure parameters of IDT model

名称	IDT 指条周期	电极宽度	电极膜厚	基片厚度	PML 层
参数 (μm)	2	0.55	0.17	7	3

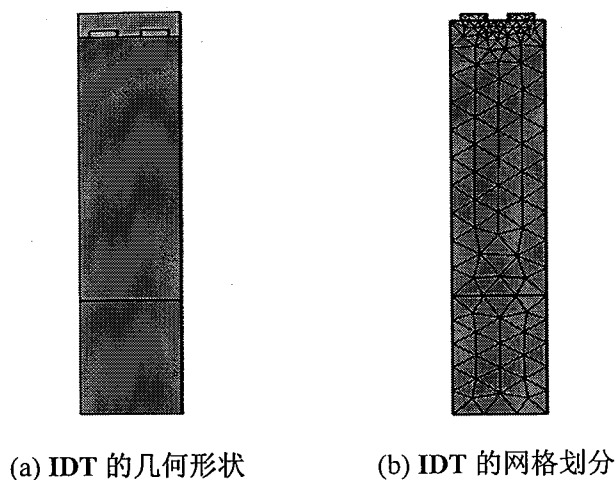


图 2.3 一对 IDT 结构的 FEM 建模

Figure 2.3 The geometry and mesh of IDT in FEM

然后，设置模型的外部激励与边界条件。在电极与压电基底接触的边线部分添加电压值分别为 1V 与 -1V 的激励终端。在模型左右两侧施加周期性边界条件，用于模拟无限长的 SAW 器件结构。采用如图 2.2(b)所示的三角形单元，对模型进行整体的网格划分。由于表面波能量大部分聚集在压电材料表面，在电极与靠近压电材料上表面部分的网格划分较为密集。最后，通过特征分析，计算该模型的特征频率并分析该特征频率下的声波模式。

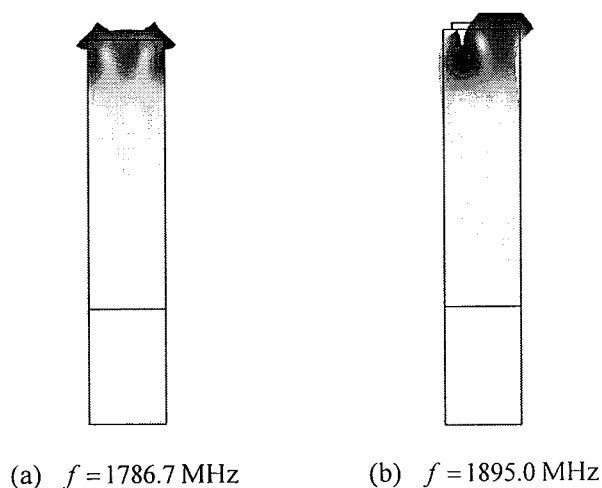


图 2.4 IDT 模型特征频率对应的声波振型

Figure 2.4 Acoustic wave mode at eigen frequency of IDT model

图 2.4 给出了特征频率为 1786.7MHz 与 1895MHz 时对应的声波振型。由声波聚集在压电介质上表面可以知道，模型在该频率下激发出表面波模态。依据特征分析结果，利用 FEM 中的频域分析方法，在 1750MHz~2100MHz 的频率区间内，计算 801 个频点的模型导纳曲线，获得器件的频域响应特征，如图 2.5。从图中可以知道，导纳曲线中出现两处明显的谐振峰与反谐振峰，其对应的频率点分别称为谐振频率 f_r 与反谐振频率 f_a 。由 SAW 器件的导纳曲线可以计算声表面波相速度、机电耦合系数以及反射率等参数，是分析 SAW 器件性能的重要依据^[1]。

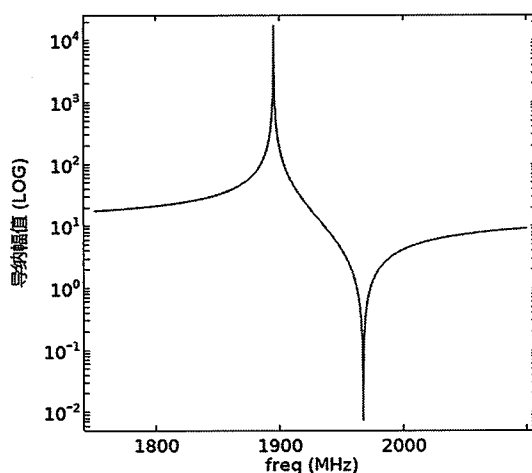


图 2.5 FEM 计算模型的导纳曲线

Figure 2.5 The admittance curve calculated by FEM frequency domain analysis

值得注意的是，FEM 中网格划分的精细度和合理性对计算结果是否收敛到精确值是非常重要的影响因素。IDT 的叉指间距在微米量级，为保证最终求解的准确性，模型网格划分时，通常要求在一个声波波长距离上的单元个数不少于 8 个。密集的网络会增加整体模型的自由度个数，造成内存资源占用大与计算速度慢等问题。而在实际的有限长 SAW 器件结构中，一般具有几百对这样的 IDT 结构，FEM 模型的自由度总数可达到百万，内存资源占用巨大。并且，随着模型系统矩阵维度的增加，矩阵求逆的时间复杂度提升，造成单个频率点的计算时间超过数小时。为获得特定频域区间上器件响应，需要完成上千个频率点的计算过程，其计算时间与内存占用难以适用于有限长 SAW 器件的分析与设计。借助 FEM

方法的精确性与通用性优势, 研究人员一般采用简化器件模型的方法, 分析一对或者几对 IDT 的声波传播规律^[43-44]。这种简化不可避免地引入近似条件, 计算结果与实际器件所处状态存在较大的偏差。

2.2 级联有限元方法

为了克服 FEM 模拟有限长 SAW 器件时自由度个数多引起的内存占用量大、计算时间长等问题, HCT-FEM 充分利用了 SAW 器件中 IDT 周期性排列的结构特点, 从整体结构中分离出基本单元, 用基本单元边界矩阵级联的方式代替整体结构的 FEM 建模, 有效提高了模拟效率。

2.2.1 级联模拟原理

在 SAW 器件的设计中, 为防止介质不连续造成的声波能量反射, IDT 的指条周期通常是保持不变的, 或者 IDT 周期存在若干分组设置的情况^[29], 这就说明了在 SAW 器件内部存在大量周期性排布的基本单元。如图 2.6 所示有限长结构的 SAW 谐振器典型结构, 梳状的金属指条作为施加电压激励的载体, 周期性的排布在压电层表面。以单独一根电极作为观察和分析对象时, 其叉指间距、金属占比、指条厚度等结构参数是固定不变的。利用微元的思想, 可以从完整的器件结构中分离出单根指条单元, 即基本单元, SAW 谐振器的整体结构可以由基本单元不断地级联组成。

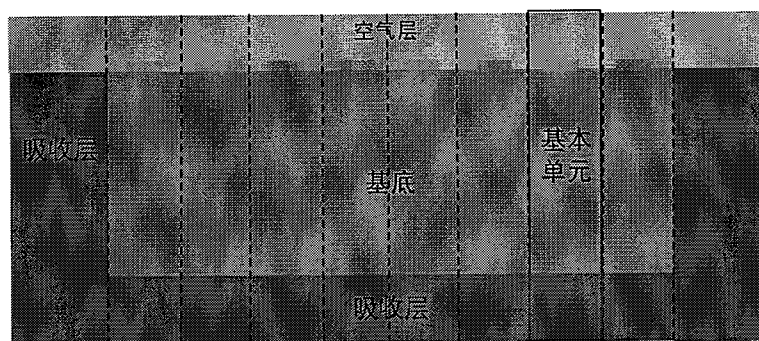


图 2.6 同周期 SAW 谐振器的基本单元

Figure 2.6 The basic units of synchronous SAW resonator

HCT-FEM 首先依托有限元方法建立基本单元的的分析模型, 在特定的分析

频率下构建出单元模型的系统方程, 即式(2.5)。由电荷守恒与应力守恒条件可以知道, 模型内部单元节点上的感应电荷与节点应力为零。相应地, 在基本单元的系统方程组中, 该内部自由度对应的方程式为零。HCT-FEM 利用矩阵重组、分块的方法, 将系统方程组中的该部分零项消去, 只保留单元左右边界和电极电荷对应的状态方程式, 称为边界方程组, 其系数矩阵称为边界矩阵(Boundary Matrix)。接着, 利用相邻单元间的公共边界, 合并两个单元的边界矩阵, 累加电极端口上的电荷值, 实现一次单元级联过程。不断进行该 B 矩阵的级联操作, 直到将基本单元扩展至完整的 SAW 器件结构。最后, 利用 SAW 器件左右两端的自由边界与整体系统正负电荷守恒条件, 求解最终的边界方程组, 获得器件的电学响应参数。

为获得较为理想的性能表现, 在实际的 SAW 器件设计中, IDT 根数往往可达到几百根。按照上述算法描述, 基本单元 B 矩阵的一次级联等价于模拟的 IDT 根数扩大 2 倍。如公式(2.6)所示, N 次级联步骤实现了 2^N 根 IDT 的模拟。由于消去了内部自由度, B 矩阵的维数较小, 合并一次方程组的用时很短。通过这种指数增长的方式, 增长至 1024 根 IDT 只需要进行 10 次级联操作, 大大提升了模拟效率。

$$I_0 = 1, I_1 = 2, I_2 = 4, I_3 = 8, \dots, I_N = 2^N \quad \dots(2.6)$$

特别地, 在级联过程中, B 矩阵的维数不随 IDT 的根数增加而扩大。图 2.7 展示了在单元级联过程中, B 矩阵的更新情况。图中黑色线表示各级单元两侧的自由度位置。B₁ 代表最初的基本单元边界矩阵, 级联一次后的边界矩阵 B₂ 只更新了矩阵内的数值, 矩阵维数保持不变。在后续的级联过程中, B 矩阵维度均只包括了单元左右两侧的自由度个数与激励端口数目。

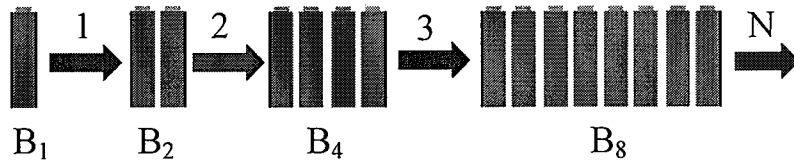


图 2.7 级联过程中单元 B 矩阵的更新

Figure 2.7 Updating of B matrix during unit cascade

以上分析可以看出, 相比于传统的 FEM 方法, HCT-FEM 从以下几个方面实现了对有限长 SAW 器件的快速模拟: 1)、采用基本单元级联的方式代替器件全结构 FEM 建模, 只对少数的几个小尺寸单元进行建模, 避免整体结构建模时产生的大量自由度, 同时保留了 FEM 方法的精确性与通用性; 2)、消去基本单元中内部节点对应的方程式, 降低级联矩阵的维度。由于模型内部自由度占比很大, 消去该部分零项后大大减小了方程组的个数, 提升单元矩阵的级联速度; 3)、级联过程中, IDT 根数的指数式增长。该方式可以从基本单元开始, 迅速扩展至大量指条个数, 使得有限长结构的快速模拟成为可能。

2.2.2 级联公式推导

依据 HCT-FEM 的基本原理, 从 SAW 器件整体结构中分离出若干独立的基本单元, 并对基本单元建立 FEM 模型。由模型的质量矩阵 M 、刚度矩阵 K 、阻尼矩阵 M , 构建基本单元的系统方程组, 即式(2.5)。进一步令 $A = (K + i\omega D - \omega^2 M)$, (2.5)式可转化为:

$$AX = F \quad \dots(2.7)$$

其中, A 称为模型的系统矩阵^[28]。

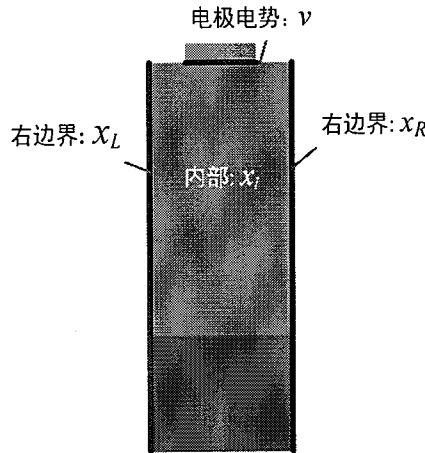


图 2.8. 根据节点位置将模型自由度划分为四个部分

Figure 2.8 Dividing DOFs into four parts according to the node position

由于模型内部处于应力与电荷守恒状态, 位于模型内部的单元, 其节点应力与电荷值为零, 在系统方程中该部分自由度对应的等式零。如图 2.8 所示, 根据

单元节点的位置信息将整体自由度矢量 X 划分成 $[x_L, x_I, x_R, v]$ 四个部分。其中, x_L 与 x_R 分别表示单元模型左侧和右侧边线上的自由度, 包括节点位移与电势。 v 表示电极与基片接触区域的电势自由度。除此之外, 模型剩余的自由度均属于内部自由度矢量 x_I 。基本单元的系统方程 A 做相应的重排与分块处理^[28]:

$$\begin{bmatrix} A_{LL} & A_{LI} & 0 & A_{LV} \\ A_{IL} & A_{II} & A_{IR} & A_{IV} \\ 0 & A_{RI} & A_{RR} & A_{RV} \\ A_{VL} & A_{VI} & A_{VR} & A_{VV} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_I \\ x_R \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ 0 \\ \tau_R \\ q \end{pmatrix} \quad \dots(2.8)$$

其中, τ_L, τ_R 分别表示模型左侧边线、右侧边线上的节点应力与电荷密度, q 为电极区域的节点电荷密度。

通过上述排列与分块处理, 将线性方程组中的零项集中在式(2.8)中的第二个方程式中。此外, 利用电端口上电压激励值相等的特点, 合并方程组中矢量 v 对应的方程式。合并后的 q 等价于电极产生的电荷值。由公式(2.8)中第二个方程等式为零的特点, 得到:

$$x_I = -A_{II}^{-1} (A_{IL}x_L + A_{IR}x_R + A_{IV}v) \quad \dots(2.9)$$

将 x_I 的上述表达式代入式(2.8), 消去方程组中的零项, 获得基本单元的边界方程组:

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_R \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ \tau_R \\ q \end{pmatrix} \quad \dots(2.10)$$

其系数矩阵称为 B 矩阵^[27]。其中, 各矩阵元素表示为:

$$\begin{cases} B_{11} = A_{LL} - A_{LI}A_{II}^{-1}A_{IL}, & B_{12} = -A_{LI}A_{II}^{-1}A_{IR}, & B_{13} = A_{LV} - A_{LI}A_{II}^{-1}A_{IV} \\ B_{21} = -A_{RI}A_{II}^{-1}A_{IL}, & B_{22} = A_{RR} - A_{RI}A_{II}^{-1}A_{IR}, & B_{23} = A_{RV} - A_{RI}A_{II}^{-1}A_{IV} \\ B_{31} = A_{VL} - A_{VI}A_{II}^{-1}A_{IL}, & B_{32} = A_{VR} - A_{VI}A_{II}^{-1}A_{IR}, & B_{33} = A_{VV} - A_{VI}A_{II}^{-1}A_{IV} \end{cases} \quad \dots(2.11)$$

通过上述消去模型内部自由度的方式, 降低了基本单元系统矩阵中的冗余。用维度较小的 B 矩阵描述基本单元的状态。相比于模型的系统矩阵 A , B 矩阵只保留了基本单元左右边界上的状态与电极电荷。在二维 FEM 模型中, SAW 器件中的反射栅单元与 IDT 单元结构相同。区别在反射栅中电极终端不产生感应电荷, 只起到反射声波的作用。算法中只需要在 IDT 基本单元 B 矩阵基础上, 将

电极电势对应的方程组调整为零就得到了反射栅单元的 B 矩阵。

在获得基本单元的 B 矩阵之后, 考虑如图 2.9 所示的两个相邻的单元 A 与单元 B 。其中单元 A 的边界方程组为:

$$\begin{bmatrix} B_{11}^A & B_{12}^A & B_{13}^A \\ B_{21}^A & B_{22}^A & B_{23}^A \\ B_{31}^A & B_{32}^A & B_{33}^A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_L^A \\ x_R^A \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_L^A \\ \tau_R^A \\ q^A \end{bmatrix} \quad \dots(2.12)$$

其边界矩阵记作 B^A 。单元 B 的边界矩阵与式(2.12)只在上标符号上有区别, 记作 B^B 。由于单元 A 、 B 之间存在公共边界, 处于公共边界上的节点自由度满足:

$$x_R^A = x_L^B = x_C, \quad \tau_R^A = -\tau_L^B = \tau_C \quad \dots(2.13)$$

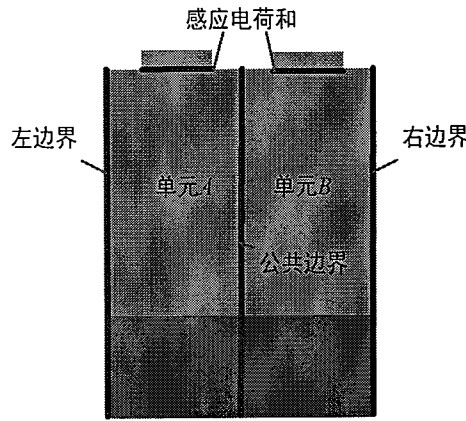


图 2.9 相邻单元的 B 矩阵级联

Figure 2.9 B matrix cascade of adjacent Unit

利用式(2.13), 合并 B^A 和 B^B 对应的边界方程组, 得到^[33]:

$$\begin{bmatrix} B_{11}^A & B_{12}^A & 0 & B_{13}^A \\ B_{21}^A & B_{22}^A + B_{11}^B & B_{12}^B & B_{23}^A + B_{13}^B \\ 0 & B_{21}^B & B_{22}^B & B_{23}^B \\ B_{31}^A & B_{32}^A + B_{31}^B & B_{32}^B & B_{33}^A + B_{33}^B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_L^A \\ x_C \\ x_R^B \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_L^A \\ 0 \\ \tau_R^B \\ Q \end{bmatrix} \quad \dots(2.14)$$

其中 $Q = q^A + q^B$, 表示单元 A 与单元 B 电极电荷值的累加。再次利用上式中第二个方程的等式为零的特点, 可以得到:

$$x_C = -(B_{22}^A + B_{11}^B)^{-1} [B_{21}^A x_L^A + B_{12}^B x_R^B + (B_{23}^A + B_{13}^B) v] \quad \dots(2.15)$$

将上述 x_C 的表达式代入式(2.14), 消去 x_C 对应的方程式, 得到 2 根 IDT 对应的边界方程组, 完成一次单元级联过程。不断的进行该 B 矩阵级联过程, 实现

IDT 模拟根数的增长。接着利用相同的方式，合并反射栅单元的 B 矩阵以及左右两侧 PML 单元的 B 矩阵。最终，得到单个的 B 矩阵方程组来描述完整 SAW 结构的边界状态与电极电荷。

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_R \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ \tau_R \\ Q \end{pmatrix} \quad \dots(2.16)$$

假设两侧的 PML 吸收了全部的入射声波，器件最外侧满足自由边界条件： $\tau_L = \tau_R = 0$ 。同时，由电荷守恒条件可以知道，SAW 器件中压电效应所产生的正负感应电荷和为零： $eQ = 0$ 。其中， e 表示 $1 \times N_{port}$ 的单位矩阵， N_{port} 为电端口个数。将上述条件代入：

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ eB_{31} & eB_{32} & eB_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_R \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \dots(2.17)$$

已知施加在 SAW 器件电极终端上的激励电压为 ΔV ，利用电压与电势的关系可知，该电压值等于实际的电极电势 v 与参考电势的差。即， $\Delta V = v - v_{ref}$ ，其中 v_{ref} 为参考电势^[28]。将 v 的上述表达式代入方程组(2.17)，移项后得到：

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ eB_{31} & eB_{32} & eB_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_R \\ v_{ref} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} B_{13} \\ B_{23} \\ eB_{33} \end{pmatrix} \Delta V \quad \dots(2.18)$$

上式中，方程组的系数矩阵与等式右端的常数项均为已知量。利用矩阵消元等方法，快速求解上述线性方程组。并将求解获得的 x_L, x_R, v_{ref} 代入整体结构的边界方程组式(2.16)，计算 SAW 器件的电极电荷值为

$$Q = [B_{31}x_L + B_{32}x_R + B_{33}(\Delta V + v_{ref})] \quad \dots(2.19)$$

最终，有限长 SAW 器件的终端电流可表示为 $I = iW\omega Q$ 。 W 为 IDT 的孔径长度。利用

$$Y(\omega) = \frac{I}{\Delta V} \quad \dots(2.20)$$

获得 SAW 器件在该分析频率点处的导纳值 $Y(\omega)$ 。特定频率范围内的导纳曲线反映了 SAW 器件的电学特性，为分析 SAW 器件的性能提供依据。

2.2.3 逆级联过程

根据上节的描述, HCT-FEM 通过级联基本单元的 B 矩阵, 不断叠加感应电荷, 求解最终的方程组以获得器件的感应电流。根据电流与激励电压的比值, 计算出该频率点处的导纳值。除电学参数的分析以外, SAW 器件中压电基片中的声场信息可以直观地体现结构内部声表面波的传播特性, 是深入理解器件性能优劣的关键指示。

图 2.10 是激光干涉仪扫描三种不同结构设置的 TC-SAW 谐振器, 在谐振频域附近, 得到基片中声表面波位移幅值的分布情况^[45-46], 图中红颜色区域表示较大的声表面波的位移幅值。从三幅图中可以清楚的看出, 相比于图(a), 图(b)与图(c)中 IDT 指条末端的假指或空隙区域有效地减少了声表面波的散射, 很好地将表面波能量集中在 IDT 孔径区域, 进而提升 SAW 器件的品质因数。这种声表面波位移场直观地显示了器件内部声表面波的分布情况, 对更加深入地分析影响器件性能的内在机理具有指导意义。

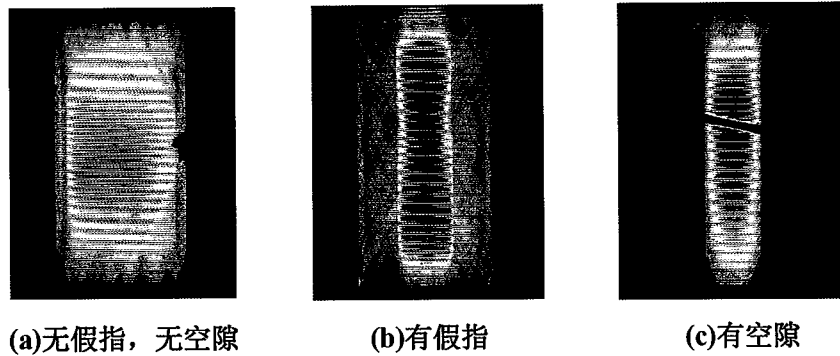


图 2.10 三种温补型谐振器的表面位移分布图

Figure 2.10 The SAW amplitude field image on top of three kinds of TC-SAW resonators

HCT-FEM 通过逆级联过程可以实现声波位移场的计算, 提供了利用声场信息分析 SAW 器件性能的方法^[28]。图 2.11 给出了级联的逆过程示意图, 其基本思路为, 从最顶层完整 SAW 器件的解矢量开始, 利用式(2.15)获得相邻单元的公共边界 x_{c1} 。 x_{c1} 与 x_R, x_L 分别构成次顶层状态的完整解矢量, 再次调用式(2.15), 获得下一级的公共边界 x_{c2} 。以此类推, 可以获得结构中所有基本单元的边界状态解矢量。接着, 对于结构中的每一个基本单元, 利用式(2.9)求出内部自由度 x_I 。

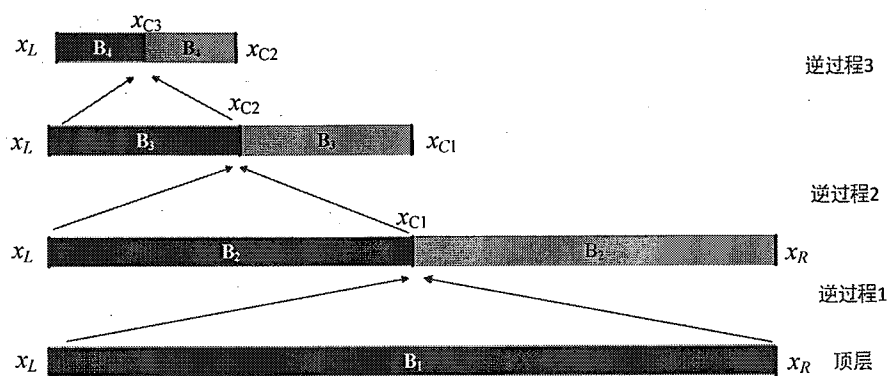


图 2.11 逆级联的算法过程

Figure 2.11 Schematic diagram of the inverse process of cascade algorithm

解矢量 x_l 与 x_L, x_R, v 就组成了每个基本单元完整的节点自由度信息，包括节点的各个位移场分量与电势值。按照 FEM 单元模型的节点位置信息，排列对应节点上的位移自由度就实现了器件声场信息的显示。值得注意的是，在 FEM 理论上，单元的级联与逆级联过程中不存在近似处理，HCT-FEM 没有精度上的损失，保证了计算结果的可靠性。

2.3 电极电阻效应

SAW 器件中一般采用金属铝或铜作为叉指换能器的材料。虽然两者都具有优良的导电性能，但是当指条长度很长、根数很多时，金属指条自身的电阻对感应电流的损耗作用不能再忽略不计。在 HCT-FEM 中，可以将 IDT 的电阻效应以唯相模型的形式添加到基本单元的 B 矩阵中^[28]。

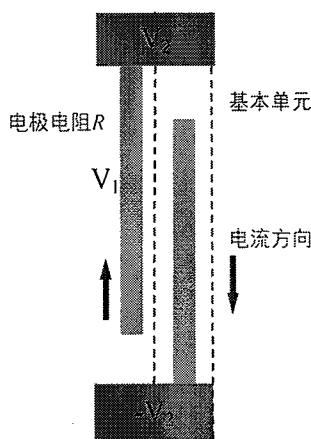


图 2.12 电极电阻对感应电流的作用

Figure 2.12 Effect of electrode resistance on induced current

如图 2.12 所示的一对叉指换能器结构示意图。黄色区域代表金属叉指换能器。前后两端的灰色区域表示汇流条，起到施加电压激励和导通电流的作用。电流从电极流向汇流条的过程中，会受到电极电阻的阻碍作用。假设施加在电极上的电压激励记作 V_1 ，产生的感应电流为 I ，电极的等效电阻值为 R 。那么电极电阻产生的电压降为 R 与 I 的乘积，汇流条上新的电压 V_2 可以表示为

$$V_2 = V_1 - RI \quad \dots(2.21)$$

将式(2.21)代入到单根指条单元的边界方程组中，得到

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_R \\ V_2 + RI \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ \tau_R \\ q \end{pmatrix} \quad \dots(2.22)$$

其中， $I = i\omega Wq$ ，令 $p = i\omega RW$ ，则有 $RI = pq$ ，代入(2.22)

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_R \\ V_2 + pq \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ \tau_R \\ q \end{pmatrix} \quad \dots(2.23)$$

由上式最后一行等式可知

$$B_{31}x_L + B_{32}x_R + B_{33}V_2 = (1 - B_{33}p)q \quad \dots(2.24)$$

令 $\alpha = \frac{1}{1 - B_{33}p}$ ，代入后得到

$$q = \alpha B_{31}x_L + \alpha B_{32}x_R + \alpha B_{33}V_2 \quad \dots(2.25)$$

将 q 的表达代入式(2.23)，得到新的基本单元边界方程组为

$$\begin{bmatrix} B_{11} + p\alpha B_{13}B_{31} & B_{12} + p\alpha B_{13}B_{32} & B_{13} + p\alpha B_{13}B_{33} \\ B_{21} + p\alpha B_{23}B_{31} & B_{22} + p\alpha B_{23}B_{32} & B_{23} + p\alpha B_{23}B_{33} \\ \alpha B_{31} & \alpha B_{32} & \alpha B_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_R \\ V_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ \tau_R \\ q \end{pmatrix} \quad \dots(2.26)$$

通过上述变换将单根电极的电阻损耗考虑进基本单元的边界方程组中，获得新的边界矩阵用于后续的级联过程。在边界矩阵的级联过程中，单根电极的电阻效应不断叠加，实现完整器件结构中的电极电阻效应模拟。电阻 R 是由电极金属

材料的电阻率、电极的横截面积，以及电极长度等参数决定。常用的金属铜的电阻率为 $1.75 \times 10^{-8} (\Omega \cdot \text{m})$ ，金属铝的电阻率为 $2.83 \times 10^{-8} (\Omega \cdot \text{m})$ 。

2.4 吸收层单元级联

为求解完整 SAW 器件结构的 B 方程组，HCT-FEM 在器件左右两侧级联上完美匹配层(PML)单元，用于吸收入射的声表面波，模拟器件左右两侧上节点应力与电荷密度 τ_L, τ_R 为零的自由边界状态。在声表面波的传输路径上，PML 一般采用坐标拉伸的方法衰减声波的幅值^[47]：

$$x_1 = x - i \int_0^L \varphi(x) dx \quad \dots(2.27)$$

其中， x 为表面波传播过程中真实的物理坐标， x_1 为引入的复数坐标。 $\varphi(x)$ 称为拉伸因子， L 为 PML 区域长度的坐标值。

考虑有限长 SAW 器件左侧的 PML 吸收区域。将稳态的声表面波复数表示记为 $Ae^{ik_x x}$ ，其幅值为 A ，波数为 k_x 。该声表面波沿着 $-x$ 方向进入到器件左侧声波吸收层单元区域。由于 PML 的坐标拉伸机制，利用式(2.27)，将物理坐标替换为复数坐标，此时声表面波可以表示为 $Ae^{\int_0^L \varphi(x) dx} e^{ik_x x}$ ，声波幅值由 A 变为了 $Ae^{\int_0^L \varphi(x) dx}$ 。当 $\varphi(x)$ 的实部大于零， L 趋于 $-\infty$ 时，声表面波的幅值衰减为零。

从上述衰减机制可以看出，在 HCT-FEM 求解最终的 B 矩阵方程组中，级联 PML 基本单元的长度越长，声表面波的幅度衰减越大，整体 SAW 器件左右两侧越接近于自由边界状态。但是随着 PML 单元长度增加，单元的网格划分增多，造成单元系数矩阵 A 的维度增大，影响单元 B 矩阵的计算速度。

由于完美匹配层中的参数具有一致性，可以将级联的思想进一步应用于 PML 结构中^[31]。首先，建立较小尺寸的 PML 基本单元模型，同样的方式提取模型的 B 矩阵。接着，通过级联该 PML 基本单元的 B 矩阵，不断叠加单元的吸声能力，当级联次数很多时，相当于无限长的 PML 区域放置在 SAW 器件左右两侧，较为精确地实现两侧自由边界状态。最后，将该 B 矩阵与 SAW 器件整体结构的边界矩阵合并后，求解最终的系统方程组。图 2.13 显示了完整 PML 吸收区域的单元 B 矩阵由较小单元 B 矩阵级联获得的流程示意图。

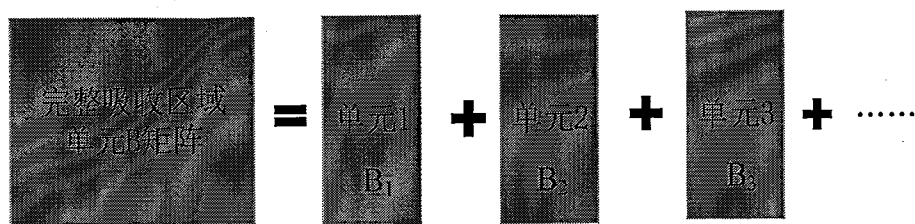


图 2.13 吸收层单元 B 矩阵的级联

Figure 2.13 The boundary matrix cascading of absorption region

2.5 本章小结

本章主要介绍了 HCT-FEM 模拟理论的基本原理与公式推导过程，为级联方法扩展与实际器件的模拟等提供理论基础。HCT-FEM 从 SAW 器件中分离出若干基本单元，利用基本单元 B 矩阵的级联实现有限长 SAW 器件结构的模拟，克服了传统 FEM 计算时间长、内存占用量大等问题。逆级联过程可以获得声波的位移信息，用于显示压电衬底等结构中的声表面波位移分布情况，为深入分析器件的性能表现提供依据。最后，介绍了考虑电极电阻效应的基本单元边界矩阵形式，以及 PML 基本单元的 B 矩阵级联方法。

第3章 准三维单元级联模拟

本章在 HCT-FEM 的基本理论背景下, 研究 SAW 器件的准三维单元级联模拟方法。结合准三维模型的特点, 对单元系统矩阵 A 的分块形式进行修正, 提出一种新的准三维单元 B 矩阵计算方法, 能够适用于 42° YX 钽酸锂衬底材料上漏波器件, 以及其他 SAW 器件的快速模拟。在此基础上, 研究准三维单元级联时的快速变频模拟方法。

3.1 准三维模型与单元 B 矩阵

HCT-FEM 模拟 SAW 器件时首先需要建立基本单元的 FEM 模型, 基本单元模型的特点决定了算法的精度与速度。图 3.1(a)所示的单根指条单元的二维 FEM 模型一般采用平面应变的设定, 认为应变只发生在该平面内, 忽略了与该面垂直方向的应变。这种做法简化了模型的复杂度, 但是当声波存在水平剪切的位移分量时, 例如漏波, 基于该二维单元模型的级联算法无法精确计算 SAW 器件的频域响应^[44]。为解决该问题, 一种方法是修改有限元理论中压电介质的基本方程, 施加适当的边界约束。该方法需要开发有限元理论用于压电器件的模拟程序, 算法流程复杂, 可靠性与计算速度也需要不断优化。

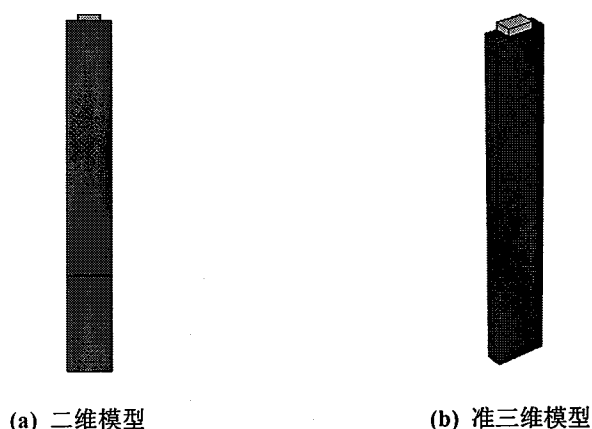


图 3.1 单根电极单元的两类 FEM 模型

Figure 3.1 Two types FEM model of single electrode unit

相比于单根指条单元的二维模型，图 3.1(b)所示的准三维模型，通过 Y 方向的拉伸，增添了模型的厚度，并在模型的前后侧面施加周期边界条件，模拟长度无限长的指条孔径，能够适用于带有水平剪切位移分量的声波传播^[44]。基于该准三维模型，我们提出一种新的准三维单元 B 矩阵计算方法。首先，利用成熟的有限元分析平台，基本单元的准三维模型可以较为简便地建立。接着构建出模型的系统方程组后，在周期边界条件下，合并模型前后侧面上自由度对应的方程式。接着，利用合并后等式为零的特点，将前后侧面、内部的自由度一并消去，获得新的准三维单元的 B 矩阵。采用同样的方式不断级联准三维单元的 B 矩阵，实现 IDT 模拟根数的增长。最后，求解整体结构的边界方程组。该方法通过方程式合并后的消去处理，降低了基本单元 B 矩阵的维度。同时，避免了大量有限元模拟理论的程度开发与测试流程，能够实现 42° 钽酸锂基片上漏波器件，以及其他瑞利波器件等的快速模拟。

在算法的理论推导过程中，首先依据单元节点的位置关系，将基本单元的整体自由度划分 $[x_L, x_B, x_F, x_I, x_R, v]$ 六个部分。相比于二维单元模型的自由度划分形式，增添了 x_B, x_F 两项，分别表示模型后侧面、前侧面上的节点位移与电势自由度。相应地，将准三维单元的系数矩阵 A 划分成 6×6 的子矩阵结构：

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} & A_{15} & A_{16} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} & A_{25} & A_{26} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} & A_{35} & A_{36} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} & A_{45} & A_{46} \\ A_{51} & A_{52} & A_{53} & A_{54} & A_{55} & A_{56} \\ A_{61} & A_{62} & A_{63} & A_{64} & A_{65} & A_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_L \\ x_B \\ x_F \\ x_I \\ x_R \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_L \\ \tau_B \\ \tau_F \\ 0 \\ \tau_R \\ q \end{bmatrix} \quad \dots(3.1)$$

其中， τ_B 与 τ_F 分别表示模型前后侧面上的节点应力与电荷密度。

在周期边界条件下，基本单元的准三维模型前后侧面上的节点自由度满足：

$x_B = x_F$, $\tau_B = -\tau_F$ 。代入式(3.1)，合并系统方程中的第二与第三个方程式：

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12}+A_{13} & A_{14} & A_{15} & A_{16} \\ A_{21}+A_{31} & A_{22}+A_{23}+A_{32}+A_{33} & A_{24}+A_{34} & A_{25}+A_{35} & A_{26}+A_{36} \\ A_{41} & A_{42}+A_{43} & A_{44} & A_{45} & A_{46} \\ A_{51} & A_{52}+A_{53} & A_{54} & A_{55} & A_{56} \\ A_{61} & A_{62}+A_{63} & A_{64} & A_{65} & A_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_L \\ x_B \\ x_I \\ x_R \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_L \\ 0 \\ 0 \\ \tau_R \\ q \end{bmatrix} \quad \dots(3.2)$$

观察上式的特点可以看出，合并后的方程组中出现了两项为零的等式。令

$x_{BI} = [x_B, x_I]$ ，上式可以写为：

$$\begin{bmatrix} A_{LL} & A_{LI} & 0 & A_{LV} \\ A_{IL} & A_{II} & A_{IR} & A_{IV} \\ 0 & A_{RI} & A_{RR} & A_{RV} \\ A_{VL} & A_{VI} & A_{VR} & A_{VV} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_{BI} \\ x_R \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ 0 \\ \tau_R \\ q \end{pmatrix} \quad \dots(3.3)$$

由式(3.3)可以发现，经过合并后的准三维单元的系统方程组与二维单元的系统方程组式(2.8)，在形式上保持了一致。那么，由公式(2.9)可以直接得到：

$$x_{BI} = -A_{II}^{-1} (A_{IL}x_L + A_{IR}x_R + A_{IV}v) \quad \dots(3.4)$$

将 x_{BI} 的表达式代入式(3.3)，消去模型前后侧面上的自由度矢量 x_F 、 x_B 与内部自由度 x_I 对应的方程式，获得 SAW 器件准三维单元模型的 B 矩阵。从图 3.2 可以看出，由于模型前后侧面施加了周期边界约束，准三维单元模型进行网格划分后在 Y 方向上只存在一个单元网格。大量的节点自由度集中前后侧面与模型内部。通过上述消去处理，系统方程组中只保留了左右侧面上少量自由度以及电端口对应的方程式，使得 B 矩阵的维度显著降低，对基本单元的后续级联过程起到加速效果。

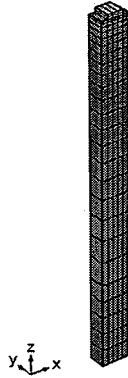


图 3.2 电极单元准三维模型的网格划分

Figure 3.2 Meshing of quasi three-dimensional model of electrode unit

为了验证上述准三维模型以及单元 B 矩阵级联算法设计的可靠性，我们将 HCT-FEM 级联计算的结果与 FEM 分析平台做比较。首先验证准三维单元 B 矩阵的级联过程。如图 3.3 (a)所示，利用 FEM 分析平台建立一对 IDT 组成的验证

模型一。在模型前后侧面施加周期性边界条件，利用频域分析方法计算该结构的导纳响应。其中，基片的压电材料设置为 42° YX 钽酸锂，电极为金属铝。IDT 的指条周期为 $2\ \mu\text{m}$ ，金属化比为 0.5，膜厚 $0.16\ \mu\text{m}$ 。底端 PML 层的高度为 $4\ \mu\text{m}$ 。

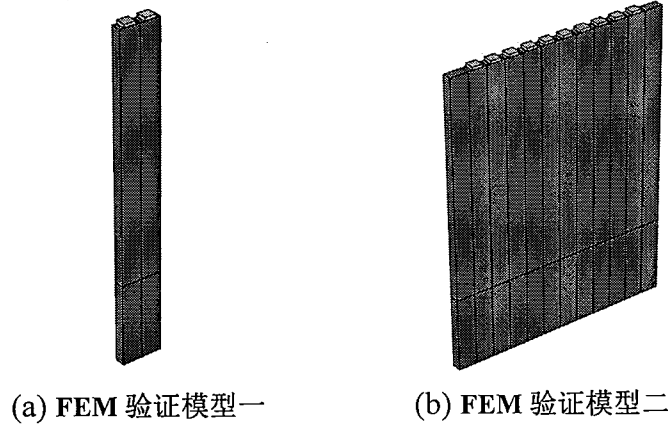


图 3.3 两种 FEM 验证模型

Figure 3.3 Two FEM models used for cascade algorithm verification

作为比较，建立单根电极单元的准三维 FEM 模型，构建单元系统方程组后，依据式(3.4)，计算准三维单元的 B 矩阵。进行 B 矩阵的一次级联后，得到 2 根 IDT 指条结构最终的边界方程组，如式(2.16)所示。由准三维单元模型左右侧面上的周期边界条件可知： $x_L = x_R$ ， $\tau_L = -\tau_R$ ，代入式(2.16)得到：

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ eB_{31} & eB_{32} & eB_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ x_L \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_L \\ -\tau_L \\ 0 \end{pmatrix} \quad \dots(3.5)$$

合并上式中第一个与第二个方程式：

$$\begin{bmatrix} B_{11} + B_{12} + B_{21} + B_{22} & B_{13} + B_{23} \\ e(B_{31} + B_{32}) & eB_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \dots(3.6)$$

观察式(3.6)可知，其线性方程组中的等式均为零。再次利用电极上激励电压的已知条件： $v = \Delta V + v_{ref}$ ，代入得到：

$$\begin{bmatrix} B_{11} + B_{12} + B_{21} + B_{22} & B_{13} + B_{23} \\ e(B_{31} + B_{32}) & eB_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_L \\ v_{ref} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} B_{13} + B_{23} \\ eB_{33} \end{pmatrix} \Delta V \quad \dots(3.7)$$

式(3.7)线性方程中，系数矩阵与等式右端常数项均为已知量，求解上述方程

组，并利用式(2.20)计算得到该 2 根 IDT 指条在左右侧面、前后侧面均为周期边界设置时的导纳值。

图 3.4 分别对比了 FEM 与 HCT-FEM 两种方法计算得到的模拟一的导纳实部与虚部。图中蓝色实线为 FEM 直接建模的计算结果，红色虚线为 HCT-FEM 通过单电极基本单元一次级联的求解结果。从图可以知道，两种方法接近于完全重合，验证了 HCT-FEM 中准三维模型与单元级联算法的正确性。在 FEM 理论的基础上，除去数据传输与存储方面可能存在的精度损失，HCT-FEM 模拟方法中不存在近似处理，保证了算法计算的准确性。

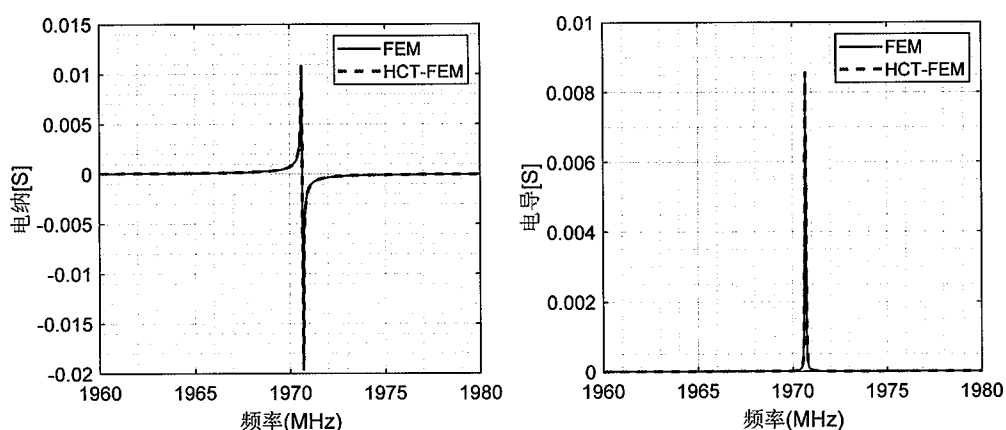


图 3.4 模型一导纳实部与虚部的对比

Figure 3.4 Comparison of the real and imaginary parts of the admittance of model one

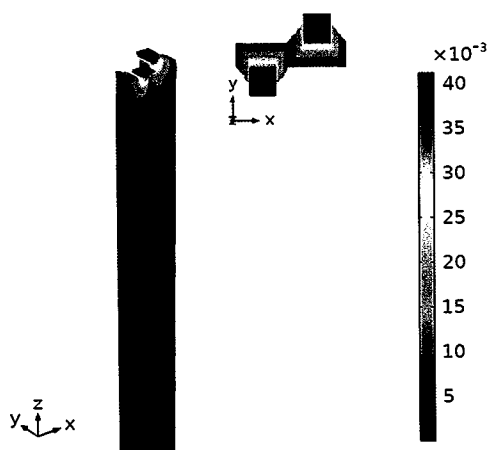


图 3.5 谐振频点时模型一的表面位移分布图

Figure 3.5 The surface displacement diagram of model one at resonance frequency

图 3.5 显示了在谐振点 1971.2MHz 处, 模型一表面位移幅度分布与变形情况, 图中位移的单位为微米。可以看出, 声表面波集中在基片表面, 随着深度的增加而迅速衰减。同时, 声波在 Y 方向上有较大的位移分量, 模型在前后侧面产生了较大的变形。通过以上分析直观地显示了准三维模型能够适用于这种带有水平剪切分量的声波模式传播。而二维平面应变模型, 由于忽略了这种 Y 方向上的应变, 造成了无法对该类声波进行准确模拟。

为了进一步验证不同类型准三维单元 B 矩阵间的级联过程, 图 3.3(b)利用 FEM 分析平台建立了由 2 对叉指换能器, 3 根反射栅, 以及左右各 1 个 PML 单元构成的同周期谐振结构。其中, 2 对叉指换能器分别设置为两个正负 1V 的电压终端, 模型左右侧面设置自由边界条件, 前后侧面为周期边界。叉指电极的材料参数与结构参数与模型一保持一致。在激励频率为 1970MHz 时, 计算该谐振结构的终端电流。同时, 利用准三单元的级联模拟方法, 将换能器单元、反射栅单元、PML 单元的 B 矩阵级联至相同的指条数。接着, 在相同的分析频点下, 由 $I = iW\omega Q$ 获得该结构的终端电流。结果显示, 两种计算方法的相对误差小于 10^{-12} , 再次验证了准三维单元级联方法的准确性。

模型二包含了 SAW 器件的三种基本单元类型, 即换能器单元、反射栅单元, 以及 PML 单元。实际 SAW 器件可以由该简单系统通过扩展得到, 对应于级联算法中只需要调整 B 矩阵的级联次数与各基本单元的 FEM 参数输入。例如, 增加换能器与反射栅的指条数目, 模拟完整的同步单端 SAW 谐振器。调整基本单元模型的结构参数或者压电基底的材料参数等。

3.2 快速变频模拟方法

在实际的 SAW 器件设计中, 通过优化 IDT 的指条周期, 激发出不同波长的声表面波, 以调整 SAW 器件的谐振频率。HCT-FEM 需要针对不同的波长分别建立相应的基本单元模型。频繁的单元建模、分析以及数据传输过程会消耗大量的计算时间与内存资源。针对上述问题, 本文提出一种 IDT 指条周期变化时的 HCT-FEM 快速变频模拟方法。

依据 HCT-FEM 的基本原理, 首先建立如图 3.1(b)所示单根电极的准三维模型, 并进行网格划分。其结构参数如下表 3.1 所示。其中, λ 为波长, 其余参数

均为 λ 的倍数。表 3.1 中的 0.08、0.5 等常数项可以根据实际器件设计中的需求进行调整, 这里选用了 SAW 器件设计中较为常用的膜厚波长比与金属化比进行方法说明。

表 3.1 单根电极单元的几何结构参数

Table 3.1 Geometric parameter setting in reference unit

名称	IDT 指条周期	膜厚	指宽	基片厚度	PML 层
参数	λ	0.08λ	0.5λ	8λ	2λ

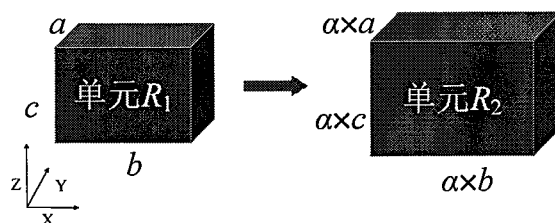


图 3.6 长方体单元在各方向上同比例的拉伸

Figure 3.6 Cuboid unit stretched in the same proportion in all directions

为推导不同波长对应准三维单元系统矩阵之间的关系, 考虑单根电极模型网格划分中的任意一个长方体单元 R_1 , 其长、宽、高分别用 a 、 b 、 c 表示, 如图 3.6 所示。当波长增加 α 倍 (由 λ 增大到 $\alpha\lambda$) 时, 单元 R_1 的长、宽、高在 Y、X、Z 三个方向上同比例拉伸 α 倍, 得到单元 R_2 。由有限元方法的基本理论可以知道, 长方体单元 R_1 的单元刚度矩阵与单元质量矩阵为^[9]

$$\begin{cases} K^e = \iiint_V [(DN_a)^T C (DN_a)] dV \\ M^e = \iiint_V (\rho N_a^T N_a) dV \end{cases} \quad \dots(3.8)$$

其中, 积分区域 V 为网格单元的体积, ρ 表示介质密度, C 为弹性矩阵, 由材料的弹性模量与泊松比决定。上标 T 代表矩阵的转置, D 为微分算子, 在笛卡尔坐标下:

$$D = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 & 0 \\ 0 & \partial/\partial y & 0 \\ 0 & 0 & \partial/\partial z \\ \partial/\partial y & \partial/\partial x & 0 \\ 0 & \partial/\partial z & \partial/\partial y \\ \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial x \end{bmatrix} \quad \dots(3.9)$$

相比于 R_1 ，长方体单元 R_2 的体积 V 扩大 α^3 倍。根据式(3.8)可以知道，节点形函数 N_a 与介质密度 ρ 保持不变，积分区域扩大了 α^3 倍， R_2 的单元质量矩阵 M^e 是 R_1 单元质量矩阵的 α^3 倍。从而，集总成整体质量矩阵中的每一元素也增为原来的 α^3 倍。对于刚度矩阵，首先考虑微分算子 D 的作用。在有限元计算中，微分算子 D 是由相邻节点间的函数差除以单元长度得到。由于单元长度与波长成正比，使得微分算子 D 与波长成反比，刚度矩阵中包含了两次微分算子。从而，在公式(3.8)中，被积函数与波长的平方成反比。由于单元网格体积与波长的立方成正比，使得刚度矩阵与波长成正比。

通过以上分析可以知道，在固定的网格划分模式下，当波长增加 α 倍时，对于模型中的每一网格单元，其质量矩阵和刚度矩阵分别增加 α^3 和 α 倍。模型中每个单元的质量与刚度矩阵进行装配后，模型的整体质量矩阵 M 与刚度矩阵 K 中每个元素扩大 α^3 和 α 倍。

当利用 HCT-FEM 进行大量的 IDT 周期优化时，我们首先引入波长为 λ_0 的参考单元 FEM 模型，并提取该参考模型的刚度矩阵 $K(\lambda_0)$ 与质量矩阵 $M(\lambda_0)$ 。假设频域分析的角频率为 ω_0 ，那么不考虑阻尼矩阵时，参考单元的系统矩阵可以表示为：

$$A(\lambda_0) = K(\lambda_0) - \omega_0^2 M(\lambda_0) \quad \dots(3.10)$$

在第 i 次模拟中，将波长调整为 λ_i ，其刚度矩阵与质量矩阵分别为 $K(\lambda_i)$ 和 $M(\lambda_i)$ ，从而系统矩阵为

$$A(\lambda_i) = K(\lambda_i) - \omega_0^2 M(\lambda_i) \quad \dots(3.11)$$

利用不同波长间单元质量矩阵与刚度矩阵间的关系，得到：

$$\begin{cases} K(\lambda_i) = \alpha K(\lambda_0) \\ M(\lambda_i) = \alpha^3 M(\lambda_0) \end{cases} \quad \dots(3.12)$$

其中 $\alpha = \frac{\lambda_i}{\lambda_0}$ ，称为波长变化因子。那么，式(3.11)可以表示为：

$$A(\lambda_i) = \alpha [K(\lambda_0) - \omega_0^2 \alpha^2 M(\lambda_0)] \quad \dots(3.13)$$

通过式(3.13)，我们建立了不同波长间单元系统矩阵的简易函数关系。在 SAW 器件 IDT 指条周期参数的优化设计中，只需要选取一个参考波长 λ_0 建立参考单元模型，一次提取模型的质量矩阵与刚度矩阵。接着，根据优化过程中任意波长 λ_i 与参考波长的比值，计算波长变化因子。利用式(3.13)，得到任意波长 λ_i 时的系统矩阵 $A(\lambda_i)$ 。针对不同波长的系统矩阵，提取单元的 B 矩阵，采用同样级联的方式计算 SAW 器件在不同 IDT 周期参数时的导纳响应，实现变频模拟效果。

这种基于准三维单元模型的 HCT-FEM 快速变频模拟方法，减少了基本单元频繁的 FEM 建模与分析过程，同时避免了多次数据传输对算法速度带来的影响，有效地提高了 HCT-FEM 的模拟效率。上述推导与算法流程中除了数据存储方面可能带来的精度损失，不存在近似处理，保证了计算结果的可靠性。

3.3 本章小结

本章主要研究了准三维单元的 B 矩阵计算方法与快速变频模拟方法。结合准三维模型的特点，对单元系统矩阵做新形式的分块处理。在周期边界条件下，合并准三维模型前后侧面上自由度对应的线性方程组，利用合并后等式为零的特点，将模型前后侧面、内部的自由度一并消去，获得新的准三维单元 B 矩阵，其矩阵维度大幅下降，加速了 B 矩阵的级联。并利用与有限元分析平台的对比结果检验了单元模型以及级联算法的正确性。在此基础上，推导了不同波长间单元系统矩阵的关系，引入参考单元模型与波长变化因子，建立了 HCT-FEM 快速变频模拟的计算方法，避免了 HCT-FEM 在 IDT 周期优化过程中频繁的单元建模与数据传输过程。

本章的创新点：(1) 提出了一种新的准三维单元边界矩阵计算方法。(2) 提出了 HCT-FEM 模拟 SAW 器件时的快速变频模拟方法。

第4章 SAW 器件模拟与实验验证

本章基于 HCT-FEM 方法开展 SAW 器件具体案例的模拟与实验验证的分析与研究。模拟的 SAW 器件包括漏波谐振器，温度补偿型谐振器以及压电声子晶体结构。并利用快速变频方法实现漏波谐振器的变频效果。最后实验制备了漏波谐振器元件，通过测试结果与模拟结果的对比，验证模拟方法的可靠性。

4.1 SAW 谐振器的模拟

SAW 谐振器是一类重要声学元件，体现了声表面波技术电学与声学相互融合的特点，对谐振器频域响应的精确模拟是 SAW 滤波器、双工器等器件设计的基础与关键^[1]。SAW 谐振器是在叉指换能器两端放置金属反射栅，将朝两端扩散的表面波反射回 IDT 的工作区域，在特定的频率上引起声波谐振。图 4.1 给出了单端口 SAW 谐振器的平面结构示意图，结构中每个 IDT 的叉指间距都相同时，称为同步单端口 SAW 谐振器^[48]。

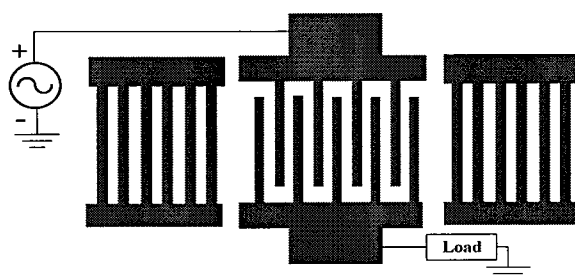


图 4.1 单端口 SAW 谐振器的结构示意图

Figure 4.1 Schematic diagram of one-port SAW resonator

4.1.1 漏波谐振器

漏波谐振器具有机电耦合系数大、频率稳定性强等优点，在实际移动通讯设备，以及生物传感等领域中获到广泛使用^[49-50]。这里，我们利用准三维单元级联方法以及快速变频模拟方法，实现同步单端口漏波谐振器的模拟与快速变频过程。谐振器基片的压电材料设置为 42° YX 钽酸锂，其介质密度、弹性矩阵、耦合矩

阵以及介电常数矩阵等材料参数由 Kovacs 等提出的方法计算获得^[51]。电极材料为金属铝，密度为 2700 kg/m^3 ，泊松比为 0.35，杨氏模量为 $70 \times 10^9\text{ Pa}$ 。单电极基本单元的结构参数如表 4.1 所示，基片末端 PML 层的比例因子设置为 1。漏波谐振器完整结构是由 121 根 IDT，与同周期的左右 40 根反射栅构成，并且 IDT 单元与反射栅单元之间的间距为零。

表 4.1 单电极基本单元的结构参数

Table 4.1 Structure parameters of single electrode model

名称	IDT 指条周期	膜厚	指宽	基片厚度	PML 层
值(μm)	4	0.32	2	32	8

依据表 4.1 中的结构参数，首先建立波长为 $4\mu\text{m}$ 的参考单元准三维 FEM 模型，提取模型的质量矩阵与刚度矩阵，并构建其系统矩阵 A_0 。同时，利用快速变频方法，计算当波长调整为 $4.01\mu\text{m}$ 时的单元系统矩阵。此时，波长变化因子 α 为 1.0025，利用式(3.13)获得新的系统矩阵 A_1 ，该过程只包含简单的矩阵乘法，计算速度很快。获得上述基本单元的系统矩阵 A_0 与 A_1 之后，经排序、分块、消去处理，利用公式(3.4)，分别计算两种波长对应准三维基本单元模型的边界矩阵 B_0 与 B_1 。

根据器件结构的设计要求，需要级联 B 矩阵至指定的换能器、反射栅的指条数。利用 B 矩阵级联一次 IDT 模拟根数扩大一倍的特点，可以将任意指条数 N 转换成二进制形式，即将 N 表示为以二为底的指数和。例如，当 N 等于 121 时，可以写成：

$$121 = 2^6 + 2^5 + 2^4 + 2^3 + 2^0 \quad \dots(4.1)$$

式中各项均为以 2 为底的指数项，可通过不断级联 B 矩阵获得。其中低次级联的过程项可以重复利用。上述 121 根 IDT 指条，共需要 10 次级联，有效提高算法的运算效率。

最后求解完整结构的 B 矩阵方程组。在 950MHz-1080MHz 之间，利用公式(2.20)，分别计算两种波长对应 SAW 谐振器 801 个频率点的导纳值。图 4.2 显示了该有限长 SAW 谐振器的导纳计算结果。图中红色线为 HCT-FEM 基于参考单

元计算得到的谐振器导纳幅值与实部，黑色线是利用快速变频方法将波长调整为 $4.01\mu\text{m}$ 时的计算结果。从图中可以知道，参考模型的谐振频率与反谐振频率为 987.7MHz 与 1027.2MHz 。并且在 1050MHz 附近，开始出现体声波辐射现象。当波长调整为 $4.01\mu\text{m}$ 时，导纳曲线的位置整体左移，谐振频点与反谐振频点出现在 985.1MHz 与 1024.6MHz ，频移的大小为 2.6MHz 。

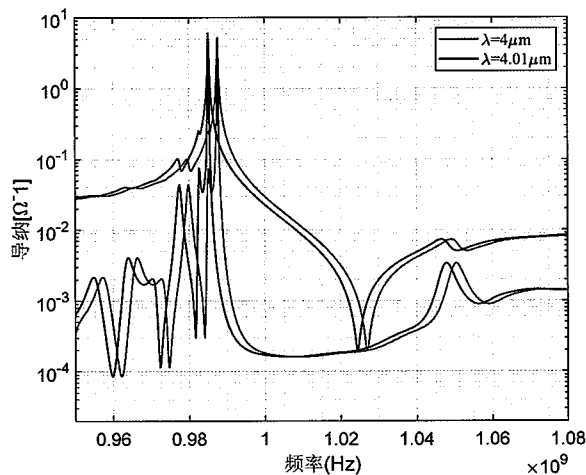


图 4.2 SAW 谐振器的导纳计算结果

Figure 4.2 Calculation result of SAW resonator admittance

为验证该快速变频模拟方法的可靠性，利用有限元方法直接建立波长为 $4.01\mu\text{m}$ 时的基本单元，构建其系统矩阵后，将单元边界矩阵的级联结果与快速变频结果对比，如图 4.3 所示。从图中可以看出，两者吻合较好。

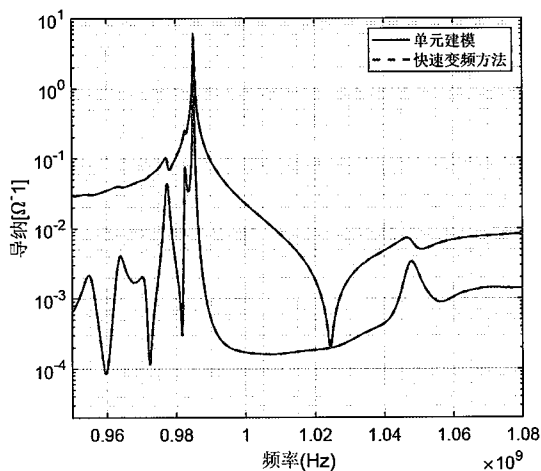


图 4.3 波长为 $4.01\mu\text{m}$ 时的直接建模与快速变频结果对比。

**Figure 4.3 Comparison between the direct modeling and fast frequency change at IDT
wavelength of $4.01\mu\text{m}$**

在上述 HCT-FEM 模拟有限长结构的漏波谐振器过程中, 单根电极单元的 FEM 模型自由度总数为 3174, 基本单元系统矩阵 A 的维度是 3174×3174 , 消去模型内部与前后侧面上的自由度后, 基本单元 B 矩阵的维度是 512×512 。 B 矩阵级联一次的时间为 0.057 秒, 完成单个频率点导纳计算的时间为 4.46 秒。表 4.2 统计了在单次频点计算中, HCT-FEM 各步骤的时间消耗情况。所用的台式计算机主板配置为 B360M, CPU 处理器为 6 核 i5-9400F, 主频率 2.9GHz。运行内存为 16.0GB, 内存工作的主频率为 2666MHz。

表 4.2 HCT-FEM 单次频点计算的时间统计

Table 4.2 Time calculation of single frequency analysis by HCT-FEM

过程项	用时(s)
构建单元系统矩阵	0.18
计算 B 矩阵	3.18
B 矩阵级联	0.9
求解最终方程组	0.2
总和	4.46

从表 4.2 中可以看出, 计算准三维单元 B 矩阵的时间占据了整个单频点分析时间的 70% 以上。原因在于该过程需要求解分块矩阵的逆, 即公式(2.11)。利用 GPU(Graphics Processing Unit)多核并行计算的优势, 能够加速该矩阵求逆过程。特别是在三维基本单元的级联模拟中, 分块矩阵的维数很大, GPU 加速的效果更加显著^[31]。相比之下, 由于低阶单元 B 矩阵可以重复利用, 全部 B 矩阵的级联耗时只占总体时间的 20%。并且, 有限长 SAW 器件结构中指条数目的增加对该部分时间消耗影响很小。

除此之外, 构建基本单元的系统矩阵需要首先建立 SAW 器件基本单元的准三维 FEM 分析模型, 并进行有限元分析。接着, 提取质量矩阵、刚度矩阵以及

节点位置等信息用于后续数值计算。利用成熟的有限元分析平台,完成上述准三维单元模型一次FEM分析的时间大致为10秒,单次数据传输的时间为14.26秒。当IDT周期参数发生变化时,HCT-FEM需要针对新的基本单元重新建模、分析,并完成大型矩阵等数据的传输过程。在SAW器件参数设计中,往往存在着几百次这样的优化过程,即需要对几百个波长值分别进行单元建模与数据传输,该过程的时间消耗与内存占用很大。而利用快速变频方法,只需建立一个参考单元模型,用矩阵数乘的方法代替了频繁单元建模与数据传输过程,节省了大量的时间与内存资源。式(3.13)完成单次数乘的时间为0.02秒,相对之下,HCT-FEM的模拟效率得到明显提升。

4.1.2 TC-SAW 谐振器

在低频LTE双工器中,例如Band 8与Band 26,发射信号带宽与接收信号带宽之间的带隙比较窄。为防止信号发生混叠,就要求SAW器件的频域响应对环境温度具有较好的稳定性。温度补偿型的SAW器件通常采用在电极上方覆盖二氧化硅层的方法降低SAW器件的频率温度系数^[52]。铌酸锂材料作为压电基底时具有较大的机电耦合系数,但是其温度系数(TCF, Temperature Coefficient)在-80ppm/K左右。二氧化硅材料具有正的温度系数,作为温度补偿层覆盖在叉指电极表面,可以使SAW器件整体结构的TCF降低到-15ppm/K左右^[13]。

由于这种温度补偿层的存在,TC-SAW器件的模拟成为难点。传统的FEM-BEM理论很难适用这种多层的器件结构。而HCT-FEM模拟方法中的基本单元由有限元理论建模,继承了有限元方法的通用性,对不同结构、不同材料具有较强的适用性。依据HCT-FEM的原理,首先从TC-SAW谐振器中分离出基本单元,建立基本单元的二维FEM模型。如图4.4所示,相比于漏波谐振器,在TC-SAW器件的单根电极单元中,电极上方存在温度补偿层。为保证基本单元级联时温度补偿层的连续性,在对模型整体自由度进行划分时,矢量 x_L 与 x_R 分别包括了基片与顶端温补层结构左右两侧上的节点位移与电势。

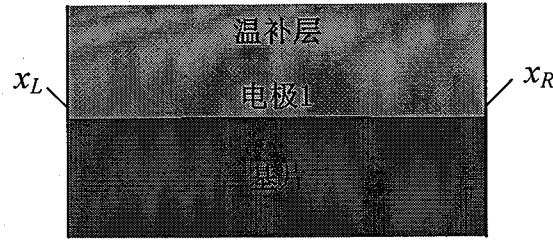


图 4.4 TC-SAW 谐振器的电极基本单元结构示意图

Figure 4.4 Illustration of the basic electrode unit of the TC-SAW resonator

HCT-FEM 模拟 TC-SAW 谐振器的结构参数如表 4.3 所示。其中，基片的压电材料为 128° YX 铌酸锂。铜电极的密度为 8960 kg/m^3 ，泊松比为 0.34，杨氏模量为 $120 \times 10^9 \text{ Pa}$ ，电阻率为 $1.75 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ 。二氧化硅温补层的密度为 2200 kg/m^3 ，泊松比为 0.17，杨氏模量为 $70 \times 10^9 \text{ Pa}$ 。完整的 TC-SAW 谐振器结构由 121 根 IDT 与左右 40 根反射栅组成，并且 IDT 孔径长度设置为 $40 \mu\text{m}$ 。

表 4.3 TC-SAW 谐振器的结构参数

Table 4.3 Structure of the test TC-SAW resonator

名称	波长	膜厚	指宽	温补层	基片厚度	PML 层
参数(μm)	2	0.17	1	0.63	12	4

依据表 4.3 中的结构参数，首先从 TC-SAW 谐振器中分离出若干基本单元，建立基本单元的二维 FEM 模型。接着构建出特定分析频率点的单元系统矩阵，利用式(2.9)，计算该基本单元的 B 矩阵。最后级联 B 矩阵至 TC-SAW 器件有限长结构的金属指条数，利用(2.20)，获得最终的谐振器导纳值。如图 4.5 所示，在 1600MHz-2500MHz 频域区间内，计算了该同步单端口 TC-SAW 谐振器 801 频率点的导纳结果，并对比了电极电阻为零时的导纳变化情况。图中黑色实线是考虑了电极电阻效应的 TC-SAW 导纳幅值与实部。红色虚线表示电极电阻为零时的导纳变化情况。

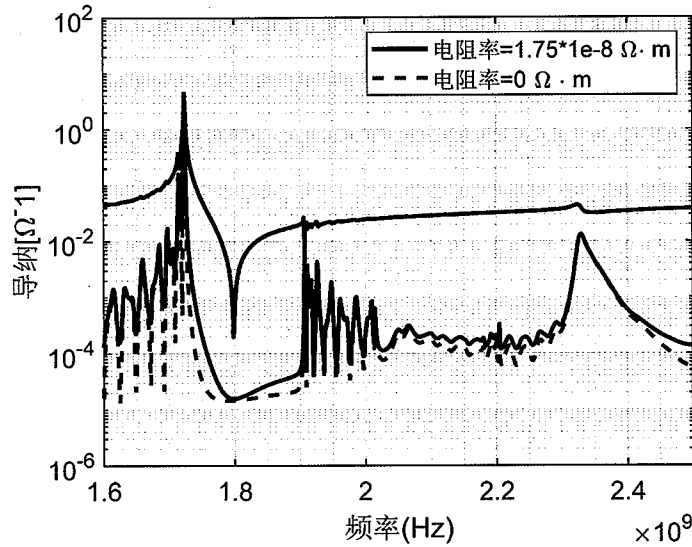


图 4.5 同步单端口 TC-SAW 谐振器的导纳结果

Figure 4.5 Calculation result of TC-SAW resonator admittance

从图中可以知道，TC-SAW 谐振器的谐振频率与反谐振频率出现在 1723.75MHz 与 1798MHz 处，在 2300MHz 处出现了明显的体声波辐射现象。电极电阻的存在不改变谐振频率的位置，主要对导纳实部，即电导的值，产生较大影响。特别是在 1700MHz-1800MHz 较低的频段内，电极电阻的存在提升了电导的最低值。当激励频率处于 1800MHz-1900MHz 范围内时，零电阻的 TC-SAW 谐振器的电导比较平坦，而电极电阻的存在使电导有上升趋势。

另一方面，温度补偿层在提高 TC-SAW 器件频率温度稳定性的同时，会影响基片材料的机电耦合系数，降低 SAW 器件的带宽^[53]。所以在器件的实际设计中，二氧化硅温度补偿层的高度需要优化调整，以保证器件具有合适的带宽。针对上述同步单端 TC-SAW 谐振器，在其 IDT 叉指周期 $2 \mu m$ 与电极厚度 $0.17 \mu m$ 保持不变的情况下，计算了二氧化硅层高度 h 分别为 $0.4 \mu m$ 、 $0.5 \mu m$ 、 $0.6 \mu m$ 、 $0.7 \mu m$ 、 $0.8 \mu m$ 时 TC-SAW 谐振器的频域响应。频域分析的区间设置为 1.6GHz-2.0GHz，图 4.6 给出了随着温补层高度的增加，谐振器导纳幅值的变化情况。

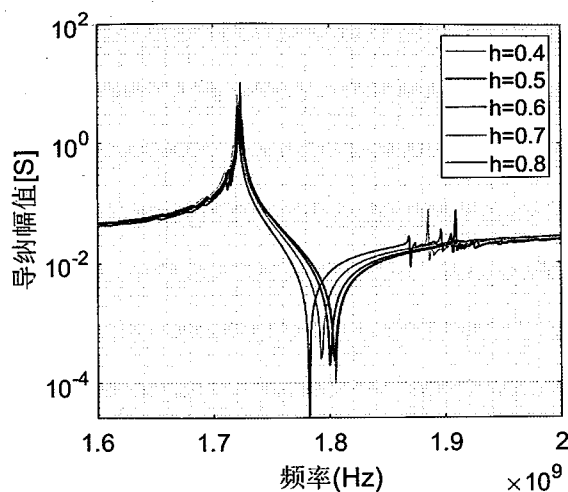


图 4.6 不同温补层高度时的 TC-SAW 谐振器导纳幅值

Figure 4.6 Admittance amplitude of TC-SAW resonator at different temperature compensation layer heights

从图 4.6 中可以看出,随着温度补偿层高度的增加,谐振器的谐振频率 f_r 变化很小,而反谐振 f_a 不断向低频率区域偏移。同时,五种不同温补层高度的谐振器都在 1.86GHz-1.91GHz 范围内激发体声波。由 $(f_a - f_r)$ 与 f_r 的比值计算谐振器的相对带宽。从图 4.6 之中可以看出,随着温补层高度的增加,TC-SAW 谐振器的相对带宽一直减小。在 $0.4 \mu\text{m}$ - $0.5 \mu\text{m}$ 之间,相对带宽的下降趋势缓慢,当高于 $0.5 \mu\text{m}$ 时,温补层的高度每增加 $0.1 \mu\text{m}$,相对带宽降低 0.4% 左右。

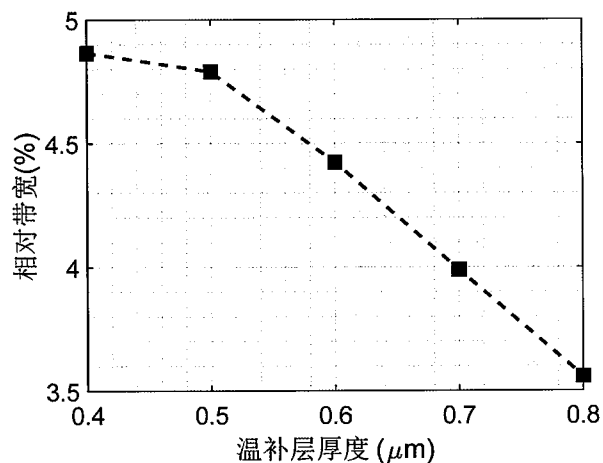


图 4.7 随着温补层厚度增加 TC-SAW 谐振器相对带宽的变化

Figure 4.7 The relative bandwidth change of TC-SAW resonator with the increase of the temperature compensation layer thickness

从以上分析过程中可以知道, HCT-FEM 模拟方法在实现有限长 TC-SAW 器件快速模拟的基础上, 可以通过调整基本单元 FEM 模型的结构参数, 分析不同参数下的性能表现, 进而指导 SAW 器件的设计。

4.2 实验验证

为进一步验证准三维级联模拟方法的可靠性, 我们将实际器件的测试结果与准三维单元级联的模拟结果进行对比分析。实验中所制备的同步单端漏波谐振器的基片材料采用 42°YX 钽酸锂, 电极材料为金属铝。IDT 的叉指周期为 $4\ \mu\text{m}$, 电极的膜厚为 $318\ \text{nm}$, 金属占空比为 0.5。IDT 根数为 50, 左右各分布 60 根反射栅。

4.2.1 SAW 器件的制备与测试

SAW 器件内部具有精密的叉指换能器结构, 单根金属指条的宽度与厚度通常在几个微米量级, 器件制备的工艺水平对其实际的性能表现会产生较大影响。目前通常利用成熟的半导体平面加工工艺, 借助高精度的光刻、显影等设备以及规范化的操作流程为器件性能提供保障。SAW 器件的制备工艺流程大致可以分成清洗、镀膜、光刻、划片、封装等五个主要步骤^[4]。在压电晶体打磨光滑后, 首先利用清洗工艺去除材料表面的粉末颗粒、金属杂质等污染物。镀膜工艺是利用电子束蒸发、磁控溅射等技术, 在压电基片表面沉积一层金属薄膜, 金属膜的厚度决定了 IDT 的高度, 其均匀性和一致性会影响 SAW 器件的成品率, 是制备工艺中的关键步骤。

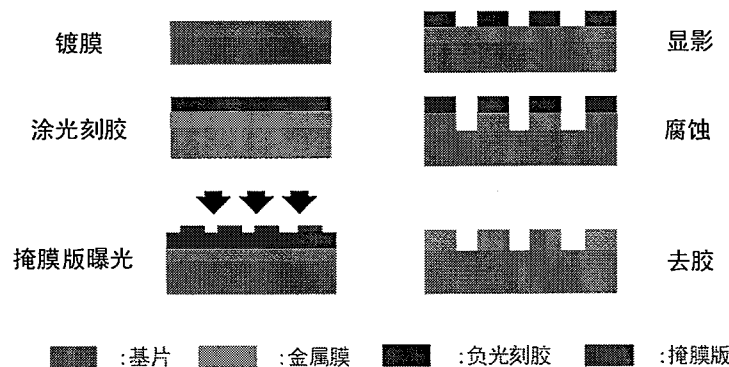


图 4.8 SAW 器件光刻工艺的流程

Figure 4.8 The general flow chart of SAW device fabrication by semiconductor process

如图 4.8 所示,光刻是将预先制备的掩膜版图形以复刻的方式转移到金属膜上。光刻流程可以细分为涂胶、前烘、曝光、显影、腐蚀与去胶等几个步骤。其中光刻胶有正胶和负胶两种类型。正光刻胶在曝光和刻蚀后,将无掩膜版覆盖的曝光区域刻蚀清洗掉,而负光刻胶最终刻蚀是未曝光的部分。接着,通过腐蚀溶液将没有光刻胶胶膜保护的金属膜溶解掉,形成有序的电极形状。由于 SAW 器件体积微小,一片晶元基片上往往复刻了上百个压电芯片。利用划片工艺可以分离出单个的芯片元件。最后,为避免叉指换能器等精密结构直接暴露于空气层受到腐蚀与破坏,需要在单个元件外层添加芯片保护结构和电路接连端口,使得元件能够长期稳定的使用。图 4.9 显示了划片前的晶元,图 4.10 显示了经过管座封装后的 SAW 器件。

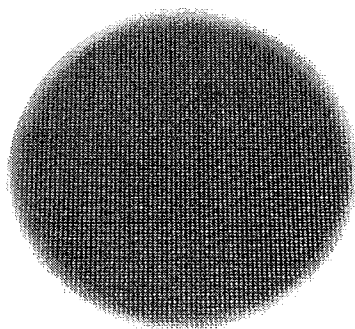


图 4.9 未封装的晶元

Figure 4.9 The bare chip before package

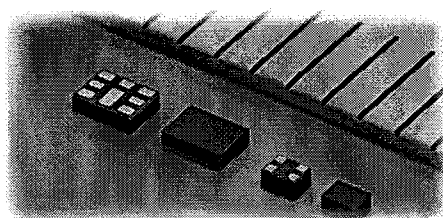


图 4.10 封装后的 SAW 器件

Figure 4.10 SAW device after packaging

SAW 器件完成制备后,使用射频探针等设备对其进行性能测试。完整的测试流程通常包括常温下的电学参数测试,以及高低温时的稳定性测试等。这里为了验证理论计算结果与实验测试结果的一致性,只对 SAW 器件进行常温下的电

学参数测试。同时,为避免器件外层封装结构产生的电磁波干扰,测试对象选择划片前晶元上的单个芯片元件。

实验中所用的测试仪器为一台高精度的射频探针。首先利用探针台上方的高倍显微镜明确测试元件的型号与位置,接着通过针脚按压的方式,在元件的电端口施加脉冲激励信号,采集回波信号,并在网络分析仪上显示、存储测试元件的S参数^[54-55](Scattering Parameters)。图4.11中图(a)与图(b)分别显示了显微镜下漏波谐振器的微结构以及晶元在探针台上的测试情况。图4.12为SAW器件电学性能测试的完整图示。

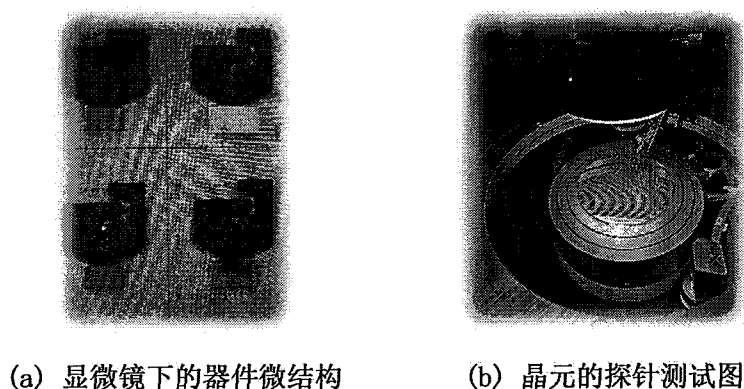


图 4.11 SAW 谐振器的测试平台

Figure 4.11 Test platform of SAW resonator test platform

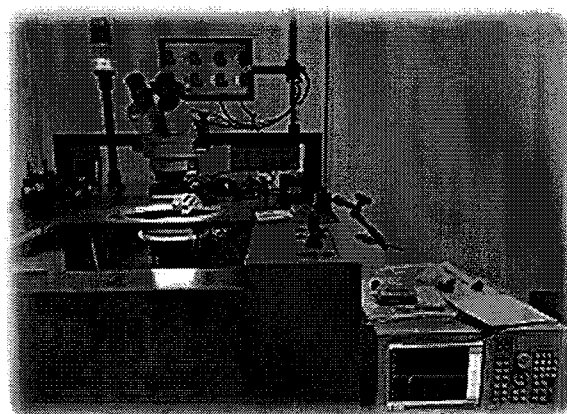


图 4.12 SAW 器件测试图

Figure 4.12 The diagram of SAW devices testing

4.2.2 实验结果分析与验证

在理论计算方面，我们采用 SAW 器件的准三维单元级联模拟方法。首先依据实验中漏波器件的结构参数与材料参数，建立单根指条单元以及 PML 单元的准三维模型。接着，利用式(3.4)获得单元 B 矩阵。级联电极单元 B 矩阵 7 次，模拟 50 根正负电压交替的 IDT 结构。级联反射栅单元 B 矩阵 8 次，得到 60 根金属发射栅结构的 B 矩阵。最后，将上述 IDT 的 B 矩阵、反射栅的 B 矩阵，以及 PML 的 B 矩阵级联至完整的有限长漏波谐振器结构，利用式(2.20)，获得该谐振器的导纳结果。

需要注意的是，经过上述半导体平面加工工艺，实际制备出的谐振器元件虽然避免了外层封装结构带来的电磁干扰，但是器件本身的电路寄生效应，例如相邻金属指条之间的寄生电容，汇流条等金属层的寄生电阻，以及寄生电感等都通过探针台，直接反映到了 SAW 器件的 S 参数测试数据中^[48]。这种器件内部结构产生的寄生效应会对理论计算与实验测试之间的对比带来比较大的干扰。

为了更加精确地验证准三维单元级联结果的可靠性，我们首先将实验的测试结果分为两组，通过拟合的方式提取该漏波谐振器内部寄生电阻、寄生电感，以及寄生电容的集总参数。针对该次实验制备的 SAW 谐振器结构参数，寄生电感 L_1 与 L_2 的值为 0.79nH ，寄生电感 C 为 0.73pF ，寄生电阻包含在电感元件中，其电阻值为 $0.25\text{m}\Omega$ 。然后，以电学连接的方式，将寄生效应添加到准三维单元级联结果中。最后，将模拟结果与实验测试结果进行对比分析。图 4.13 给出了由寄生电感、电容、电阻元件，以及准三维单元级联模拟结果所构成的电路连接结构示意图。该二端口系统左右各连接 50Ω 的标准阻抗元件。

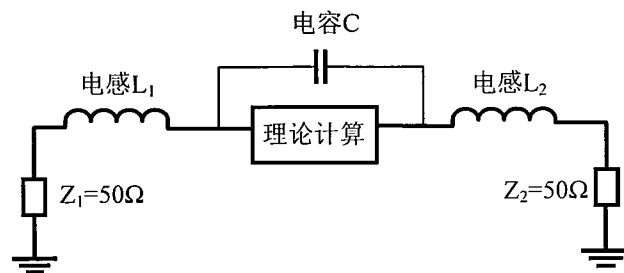


图 4.13 考虑寄生效应的电路拓扑结构

Figure 4.13 Circuit topology considering parasitic effects of SAW devices

将上述考虑了寄生参数的准三维单元级联模拟结果与实验测试结果对比,得到图 4.14。图中红色与粉红色实线表示漏波器件模拟得到的导纳幅值与实部,黑色与蓝色实线为该谐振器的实验测试结果。此外,图 4.15 显示了在 Y 坐标轴线性坐标下,模拟计算的导纳幅值与实部分别与测试数据的对比结果。

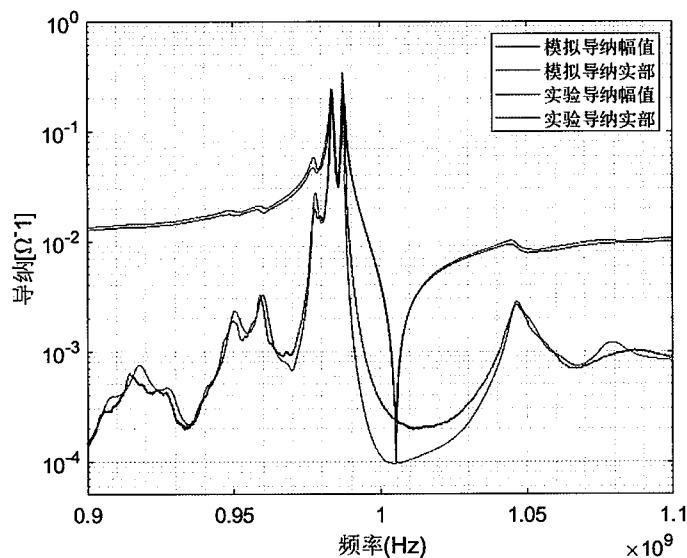


图 4.14 模拟计算与实验测试结果对比

Figure 4.14 Comparison of simulation calculation and experimental test

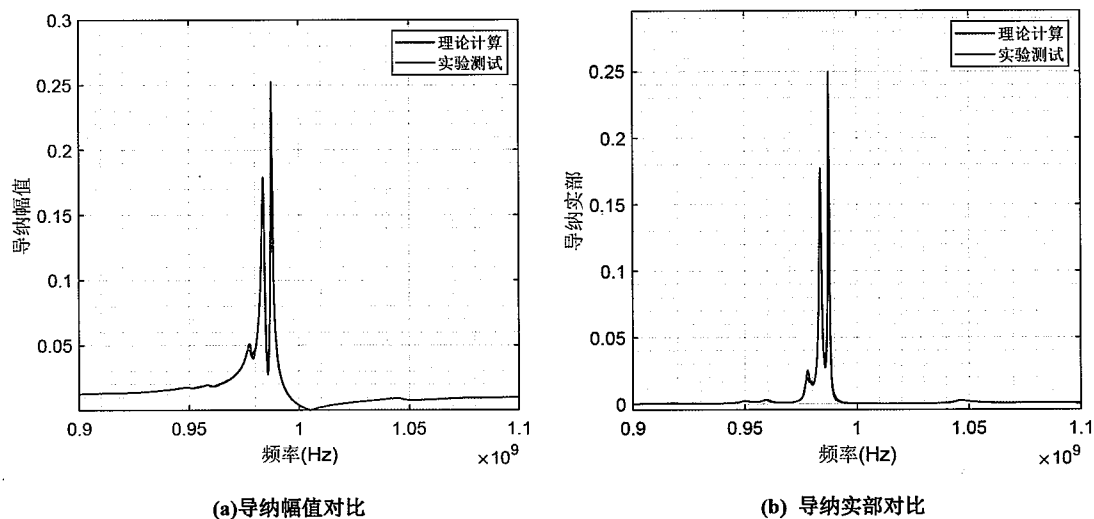


图 4.15 线性坐标下模拟结果与测试结果的对比

Figure 4.15 Comparison of simulation results and test results in linear coordinates

从图 4.14 与图 4.15 可以看出, 理论计算结果与实验测试结果整体趋势吻合良好, 谐振频率与反谐振频率的位置拟合比较准确。实验测试的结果中, 激励频率在 1.047GHz 附近时, 谐振器产生出明显体声波辐射, 而模拟计算结果也显示了良好的一致性。在 0.987GHz-1.045GHz 的频域区间内, 理论计算与实验测试在谐振器的电导值上出现较大偏差。考虑是在实际器件中, 压电材料的弹性阻尼作用会对声表面波的传播造成影响。而在 HCT-FEM 准三维基本单元的系统矩阵中, 阻尼矩阵 D 的元素值均为零, 与实际压电材料的真实状态还存在偏差。另外, 相比于测试数据, 在主谐振点 0.987GHz 处, 理论计算的导纳幅值偏大。考虑工艺精度, 测试误差等的影响, 上述实验结果在很大程度上证实了该准三维单元级联模拟方法的可靠性。级联模拟方法可以适用于不同的基片材料与器件结构, 上述结合寄生参数分析的实验验证过程, 对于不同类型的 SAW 器件具有普适性。

4.3 压电声子晶体

声子晶体是一种弹性散射体周期性排列在另一种介质上构成的新型声学材料^[56]。弹性波在声子晶体中传播时, 受其特定内部结构的作用, 在一定频率范围内会无法通过, 称为声子晶体的带隙^[57]。这种特殊的频率控制特性, 使得声子晶体在噪声控制、振动隔离和声波导等结构中被广泛使用^[58]。

4.3.1 压电声子晶体的模拟

压电声子晶体可以看作是 IDT 结构的拓展。IDT 结构中叉指电极以横向周期排列的方式, 附着在压电材料表面, 可以看作是一维声子晶体。将散射体的这种周期排列扩展至横向、纵向两个维度, 在压电基片表面形成一定规模的点阵, 就构成了更加普遍的二维周期的压电声子晶体结构。压电声子晶体目前越来越多地使用在 SAW 器件结构。例如, 声子晶体被有序地排布在 SAW 器件谐振器汇流条末端、叉指电极的上方等位置, 用于抑制声表面波的横向能量散射现象, 以提升器件的品质因数^[59-60]。

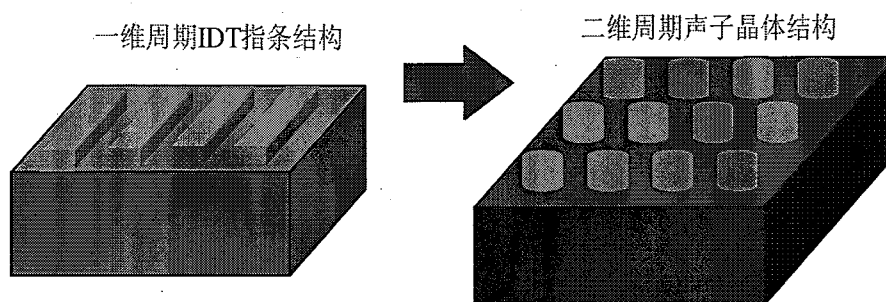


图 4.16 IDT 扩展到二维声子晶体结构

Figure 4.16 Extend IDT to two-dimensional phononic crystal structure

相比于传统 SAW 器件中的 IDT 结构, 压电声子晶体的分布更加密集。当使用有限元方法分析规模较大的压电声子晶体结构时, 整个模型的网格划分更加密集, 自由度总数与矩阵维度都很大, 计算速度比较慢。通常基于周期边界的假定, 利用有限元方法对单个或者一列、一行的散射体单元建模分析^[61]。而 HCT-FEM 的核心思想是基本单元的级联, 避免了完整器件结构的建模。同时, 算法中级联的基本单元类型包括三维 FEM 模型^[30], 对这种由大量周期性散射体单元构成的压电声子晶体结构具有很强的适用性。

我们采用 HCT-FEM 模拟双向周期分布的压电声子晶体结构, 并计算特定频率下的声表面波传输系数。如图 4.17 所示, 分析模型采用延迟线型结构^[62], 蓝色基底表示压电衬底材料, 圆柱形的声子晶体散射单元, 在横向与纵向上, 周期性的排列在左右两侧叉指换能器之间。左侧 IDT 用于激发特定频率的声表面波, 表面波在传输路径上受到声子晶体点阵作用后, 被右侧 IDT 接收。

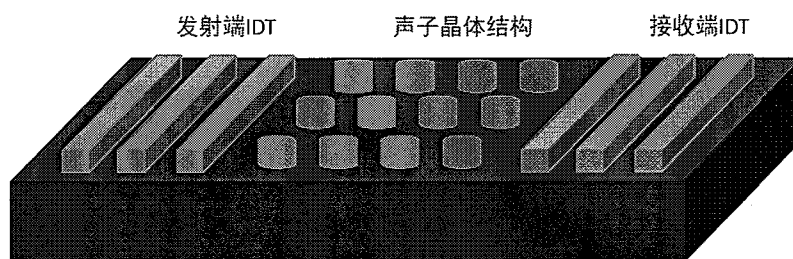


图 4.17 声子晶体排布在延迟线上的分析结构

Figure 4.17 Analytical structure of phononic crystals arranged on the delay line

依据级联有限元方法的基本思路,首先从上述分析结构中分离出若干独立的基本单元,分别建立基本单元的三维 FEM 模型。该延迟线型分析结构包括正负换能器指条单元,单个散射体单元以及左右两侧 PML 单元。其中,散射体单元结构如图 4.18,对该单元建立 FEM 分析模型,提取其基本单元 B 矩阵,通过纵向与横向两个方向的矩阵级联,扩展得到完整压电声子晶体点阵的 B 矩阵。

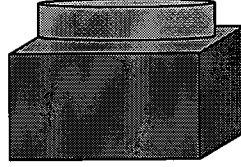


图 4.18 单个散射体单元模型

Figure 4.18 Schematic diagram of single scatterer element model

接着,利用各单元之间公共侧面上的相邻边界条件,将两侧换能器单元以及 PML 单元 B 矩阵级联到声子晶体点阵系统中。求解完整结构的频域响应后通过逆级联过程,计算出接收端与发射端中的声表面波位移场信息。图 4.19 给出了该延迟线型声子晶体分析结构的基本单元级联示意图。

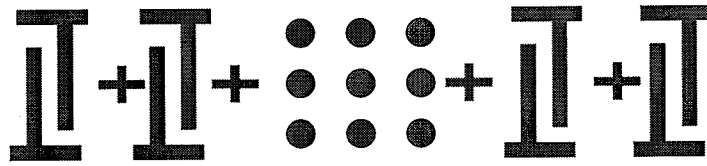


图 4.19 整体结构的基本单元级联示意图

Figure 4.19 Schematic diagram of the basic unit cascade of the overall structure

以铌酸锂压电基底为例,选用半径为 $7\ \mu\text{m}$ 的圆柱形金属铝为散射体,横向与纵向的周期均为 $10\ \mu\text{m}$,厚度为 $0.6\ \mu\text{m}$,均匀排布在 128° YX 切向铌酸锂压电材料表面。左右两侧的叉指电极材料为金属铝,指条周期 $24\ \mu\text{m}$,厚度为 $0.6\ \mu\text{m}$,金属占空比 0.5,孔径为长度 $240\ \mu\text{m}$ 。散射体纵向的周期数为 12,横向的周期数为 8,在其左右两端各放置 8 对 IDT,分别用于激励与接收声表面波。

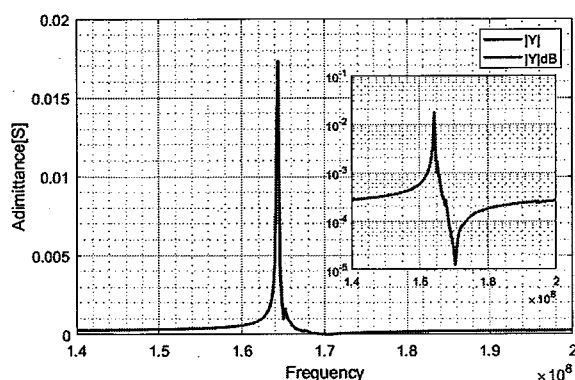


图 4.20 一对 IDT 周期边界时的导纳响应

Figure 4.20 Admittance response of a pair of IDT under periodic boundary

为分析 IDT 激发出声表面波的性质,这里取延迟线结构中的 1 对 IDT 模型,在模型左右两侧处于周期边界条件下,计算了该一对 IDT 的导纳响应。从图 4.20 中可以看出,该模型在激励电压频率为 164.4MHz 时出现明显的谐振峰。图 4.21 显示了激励电压频率为 164.4MHz 与 200MHz 时,该一对 IDT 模型中的声表面波位移幅度的分布情况。从图中可以看出,该频点时模型中激发出的声波为表面波模式,声波能量与位移集中在压电材料表面。

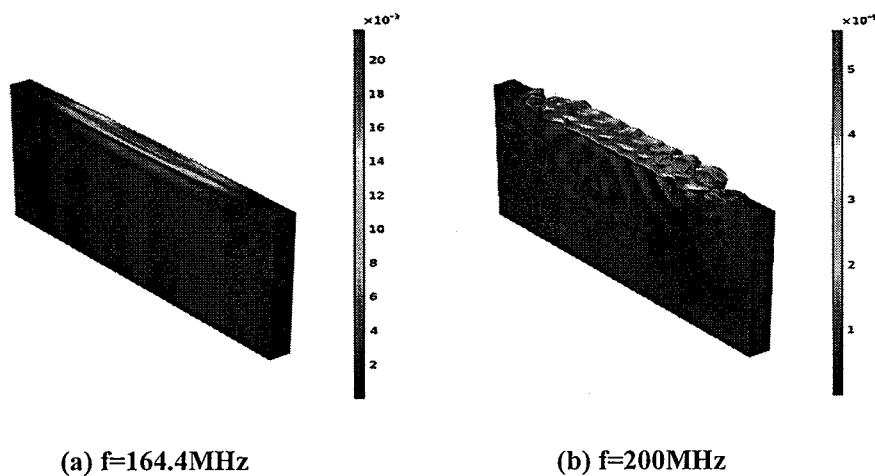


图 4.21 不同激励电压频率时的模型表面位移幅度与变形图

Figure 4.21 Displacement and deformation at different frequencies of excitation voltage

根据 HCT-FEM 模拟方法的基本思路,级联各个基本单元的 B 矩阵至完整的分析结构,并求解该整体结构的 B 矩阵方程组。最后,通过逆级联过程获得每个基本单元模型全部自由度的值。图 4.22 (a)中单根电极单元的三维 FEM 模型采用

24 节点的长方体网格单元, X 方向上共有 9 个节点分布, 节点之间的间距为 $1.5 \mu\text{m}$ 。图 4.22(b)绘制了该单元模型基片表面的节点位置分布图示, 9×61 的节点阵列分布在基片上表面。

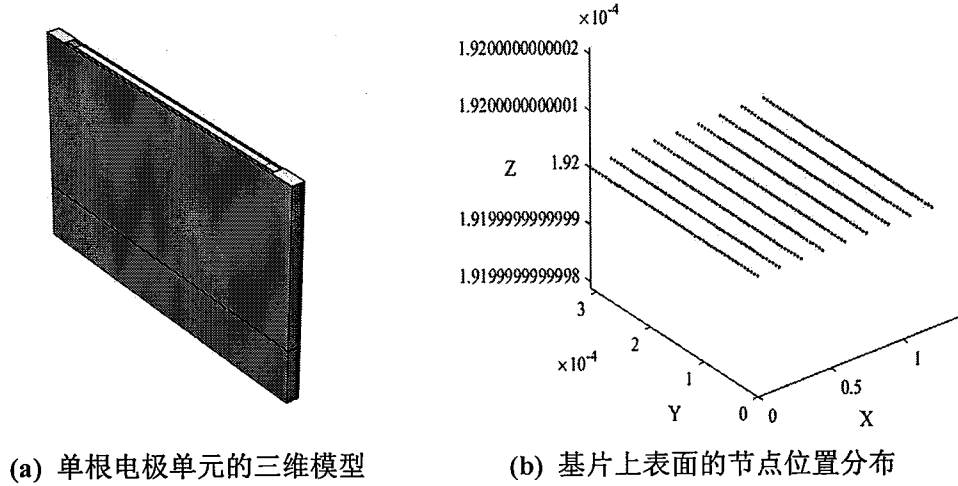


图 4.22 延迟线结构中的单电极模型与节点位置分布

Figure 4.22 Single electrode model and node position in delay line

在 128° YX 切铌酸锂基片上的声表面波模式以瑞丽波为主, X 方向与 Z 方向上的位移为主位移分量。利用上述基本单元的网格划分与节点位置信息, 将 HCT-FEM 逆级联得到的节点位移分量 u_z , 添加到对应节点的坐标位置, 实现基片表面二维空间的声波位移场信息显示。图 4.23 显示了当电极电压的激励频率为 175.7MHz 时, 延迟线结构中发射端 IDT 基片表面的声表面波 Z 方向位移分布情况。图 4.24 为接收端中的声表面波 Z 方向位移分布图。其中, 声表面波位移的单位为 μm 。

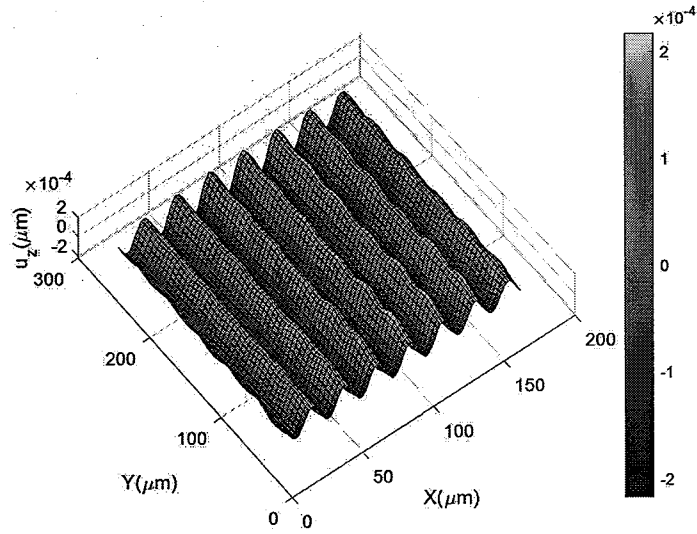


图 4.23 发射端 IDT 基片表面的位移分布

Figure 4.23 Displacement distribution of IDT substrate surface in transmitting area

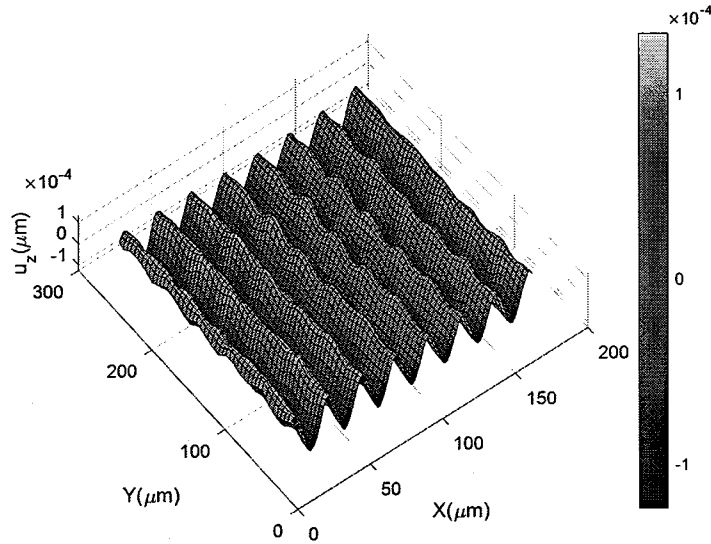


图 4.24 接收端 IDT 基片表面的位移分布

Figure 4.24 Displacement distribution of IDT substrate surface in receiving area

图中明暗交替的条纹表示在发射端 IDT 与接收端 IDT 中声表面波的波峰与波谷位置。八个波峰与八个波谷清晰地显示了声表面波的传播过程，分别对应于延迟线型分析结构中 8 对根正负电压交替的叉指电极。由于 IDT 中汇流条和空

隙等结构的存在，声表面波延 X 方向以椭圆形运动轨迹向前传播的同时，在 Y 方向也出现了不规则的褶皱。在接收区域，这种 Y 方向的褶皱变得更加明显。同时，从图 4.23 中声表面波在 X 方向上的起始位置可以看出，声表面波在通过压电声子晶体后，接收区域的声波相位发生了改变，压电声子晶体的存在起到了一定的延时作用。

4.3.2 传输系数的计算

声子晶体的传输系数用来表征声波穿过特定散射体结构时的反射与透射特性，是分析其频率控制特征的关键^[63-64]。压电声子晶体中散射体不同的尺寸、不同的排布周期都对表面声波的透射效果产生不同影响。在实际的 SAW 器件制备中，为满足特定的表面波透射系数要求，需要对压电声子晶体中散射体的几何结构进行优化设计。

为了计算声表面波在压电声子晶体结构中的透射系数，我们首先分析延迟线型结构中的声波位移场。由于空间域上的稳态声表面波位移与波数是一对傅里叶变换的关系^[65]：

$$u(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U(k_x, k_y) e^{i(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y \quad \dots(4.2)$$

$$U(k_x, k_y) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u(x, y) e^{-i(k_x x + k_y y)} dx dy \quad \dots(4.3)$$

其中， $u(x, y)$ 为声表面波的位移， $U(k_x, k_y)$ 是波数域中的系数， k_x 和 k_y 表示 x 方向与 y 方向的波数。

利用上述逆级联过程得到的声表面波位移，结合上述傅里叶变换的方法，将激励频率为 175.7MHz 时发射端 IDT 与接收端 IDT 基片上表面的声表面波位移分别变换到 x 方向波数域空间 (k_x)。其中，傅里叶变换的点数 N 等于 1024。并且由图 4.22(b) 所示基本单元模型的节点分布可以知到，空间域的采样间距 Δx 等于 $1.5\mu m$ ，那么离散得到的最小波数间隔：

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{\Delta x \times N} \quad \dots(4.4)$$

在单根电极单元的三维模型中，Y 方向上存在 61 个节点，发射端与接收端

各有 16 根金属指条，分别构成了 61×144 的数值矩阵。将位移数值矩阵的每一行元素经过傅里叶变换后，即可得到声表面波在波数域中的谱分布情况。

经过傅里叶变换后，声表面波位移幅度随着波数变化的分布情况如图 4.25 所示。图 4.25(a) 为发射端 IDT 的波数谱，图 4.25(b) 为接收端 IDT 的波数谱。

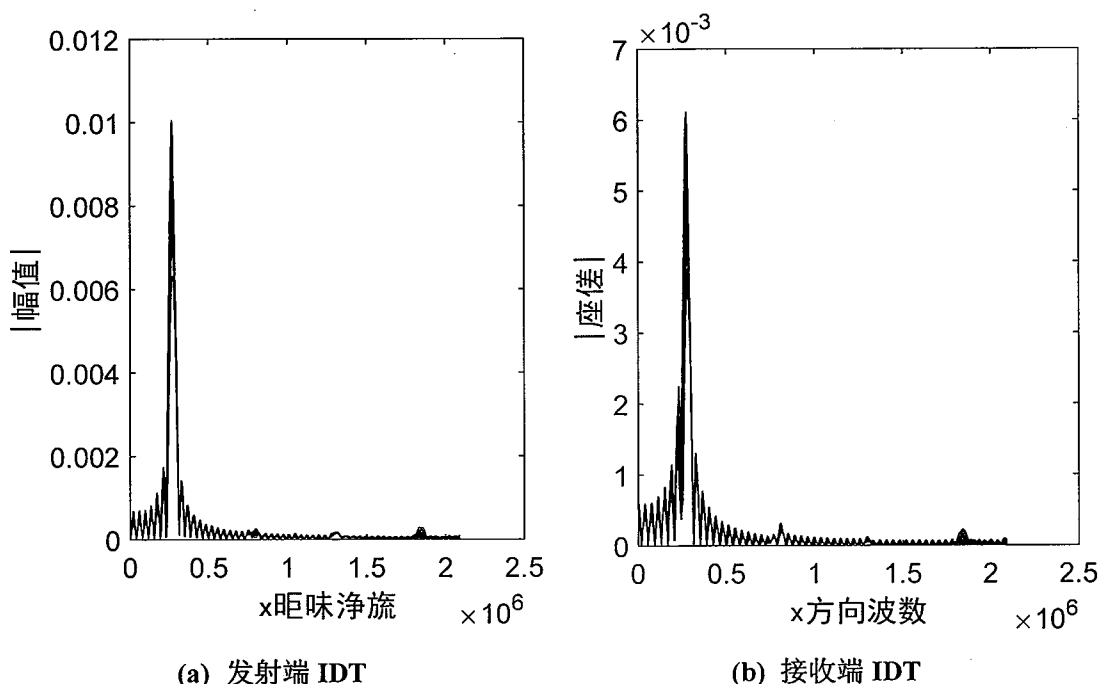


图 4.25 发射端与接收端波数域中的谱分布

Figure 4.25 Spectral distribution in wavenumber domain at transmitting and receiving area

从图 4.25(a) 中可以看出，在发射区域，当声表面波的波数等于 $0.265 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$ 时，波数谱中产生明显的峰值。该波数谱的幅值为 10.06×10^{-3} ，代表了入射声波的强度。同样地，在接收区域，当波数等于 $0.265 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$ 时，产生了幅值为 6.06×10^{-3} 的谱峰值，表示透射声波的强度。由于傅里叶变换是一种正交变换，发射区域的谱峰值与接收区域谱峰值之比就表示了声表面波的透射系数。即，对于该延迟线型压电声子晶体分析结构，当激发频率为 175.7MHz 时，声表面波的透射系数为 $\frac{6.06 \times 10^{-3}}{10.06 \times 10^{-3}} = 0.602$ 。

根据以上分析方法，我们计算了均匀分布在 150MHz-180MHz 之间的 8 个频

点, 即 150.0MHz、154.2MHz、158.5MHz、162.8MHz、167.1MHz、171.4MHz、175.7MHz, 以及 180.0MHz 对应的声表面波透射系数, 如图 4.26 所示。由于三维单元模型的网格数目多, 该方法完成单次频点透射计算的用时平均在 35 分钟左右。利用 GPU 硬件加速的方法可以进一步提升计算的速度。较大规模的声子晶体结构带隙仿真可以由该三维基本单元模型的级联, 结合 GPU 等加速算法进一步的实现。

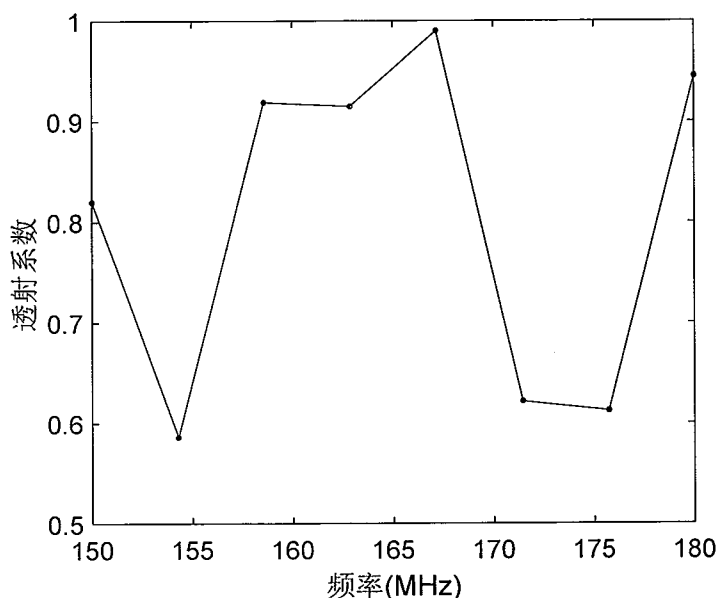


图 4.26 压电声子晶体中声表面波的透射系数

Figure 4.26 Transmission coefficient of SAW in piezoelectric phononic crystal

从图中可以看出, 当施加电压的频率为 167.1MHz 时, 激发出的声表面波透射系数最大, 达到 0.98, 压电声子晶体点阵对声表面波的反射作用很小。电压激励频率为 154.2MHz 时, 声表面波的透射系数最低, 为 0.58。在 160MHz-167MHz 之间, 声表面波的透射能力保持较高水平, 其透射系数的值均超过了 0.9。利用 GPU 硬件加速的方法可以细化计算频点, 确定该特定压电声子晶体结构的带隙分布。

4.4 本章小结

本章将级联方法应用到漏波谐振器, 温度补偿型谐振器以及压电声子晶体结构的模拟与分析中。漏波谐振器的模拟部分包括, 利用快速变频方法实现谐振频

率的调整,以及用实验测试结果验证准三维模型及其单元级联算法的可靠性。温度补偿型谐振器方面,对比了电极电阻,以及温补层厚度对器件导纳参数的影响。最后利用三维 FEM 单元模型的级联,分析压电声子晶体结构中的声表面波传播特性,提出了一种通过声表面波位移计算声子晶体透射系数的新方法。

本章的创新点:(1)将 HCT-FEM 快速变速模拟方法应用于 SAW 器件的实际模拟过程中,并利用直接单元建模的结果验证了变频模拟方法的可靠性和有效性。(2)首次将 HCT-FEM 模拟方法引入到压电声子晶体结构的分析中,提出了利用声子晶体结构中声表面波位移场信息计算透射系数的新方法。

第5章 总结与展望

5.1 研究总结

HCT-FEM 利用 SAW 器件内部周期性的结构特点,通过基本单元边界矩阵的级联实现完整结构的模拟,能够适用于多层复杂结构的 SAW 器件模拟与分析。本文围绕 HCT-FEM 的模拟效率提升与应用前景拓展进行研究。提出了一种新的准三维单元 B 矩阵计算方法以及快速变频模拟方法,并通过实验进行了验证。同时将 HCT-FEM 应用到压电声子晶体结构的分析中。

全文首先介绍了 HCT-FEM 的基本原理与理论公式的推导过程。从有限元分析方法的基本原理以及压电介质的基本方程出发,介绍了 FEM 模拟 SAW 器件的基本流程与存在的局限。由 FEM 模拟有限长 SAW 器件时计算速度慢,内存占用量大等问题,阐述了 HCT-FEM 的基本思想与技术优势,并完成了算法的理论推导过程。

依据上述基础理论,分析了级联算法中二维单元模型与准三维单元模型的区别与联系,提出了一种新的准三维单元 B 矩阵计算方法。利用有限元分析平台,建立 SAW 器件基本单元的准三维模型,结合该类模型特点,将其系统矩阵划分为 6×6 子矩阵结构。在周期边界条件,合并方程组,消去模型中前后侧面与内部自由度对应的方程式,使得准三维单元 B 矩阵的维度显著降低,加快了级联算法的计算速度。在此基础上,针对 SAW 器件设计中 IDT 指条周期不断优化的情况,推导了不同波长对应单元系统矩阵的关系。通过引入参考单元模型与波长变化因子,提出了一种快速变频模拟方法,避免了频繁的单元建模与数据传输过程,提升 HCT-FEM 的模拟效率。

最后,模拟了三种不同类型的 SAW 器件,包括漏波谐振器,温度补偿型谐振器以及压电声子晶体结构,并通过与实验测试数据的对比,验证了漏波谐振器模拟结果的可靠性。此外,分析了 TC-SAW 谐振器中电极电阻、温度补偿层的厚度对其性能的影响。并利用压电声子晶体结构中的声表面波位移,计算与分析了声表面波透射系数的基本特性。

本文的创新点:

(1) 提出了一种新的准三维单元 B 矩阵计算方法。

HCT-FEM 在模拟 SAW 器件的过程中, 首先需要建立基本单元的 FEM 模型。相比于二维模型, 基本单元的准三维模型克服了平面应变假定, 能够适用于漏波等带有水平剪切分量的声波模式传播。结合该模型的特点, 首先将基本单元准三维模型的整体自由度矢量划分为 $[x_L, x_B, x_F, x_I, x_R, v]$ 6 个部分, 系统矩阵划分为 6×6 的子矩阵结构。接着在周期边界条件下, 合并 x_B 与 x_F 对应的方程式。利用合并后等式为零的特点, 将模型前、后侧面和内部自由度对应的方程式一并消去, 获得准三维基本单元的 B 矩阵。其矩阵维度大幅下降, 加快了后续 B 矩阵的级联速度。同时该方法利用成熟的 FEM 分析平台快速建立基本单元的准三维模型, 避免了有限元理论模拟压电器件的大量程序开发与测试过程, 提升 HCT-FEM 的模拟效率。最后, 将模拟结果与实际漏波谐振器件的测试结果进行对比分析, 验证了模拟方法的可靠性。

(2) 提出了一种 IDT 指条周期变化时的 HCT-FEM 快速变频模拟方法。

在 SAW 器件的模拟与设计中, 通过改变 IDT 的指条周期调整器件的谐振频率, 而当 IDT 周期发生变化时, HCT-FEM 每次都需要建立相应的单元 FEM 模型。频繁的单元建模与数据传输过程造成了 HCT-FEM 计算速度慢、内存占用量大等问题。为解决该问题, 首先推导了波长发生改变时单元模型刚度矩阵与质量矩阵的变化情况, 建立起不同波长对应系统矩阵间的关系。接着, 引入参考波长及波长变化因子。利用参考波长的 FEM 模型快速计算出不同波长对应的单元系统矩阵, 很好地解决了频繁单元建模与数据传输造成算法计算时间长、内存占用量大的问题。

(3) 将 HCT-FEM 模拟方法引入到压电声子晶体结构的分析中, 提出了利用声表面波信息计算声子晶体透射系数的新方法。

由于压电声子晶体内部散射体数目众多, 声表面波传播机制复杂, 压电声子晶体结构的数值模拟一直比较困难, 而 HCT-FEM 对这种周期性排布的散射体结

构具有很强的适用性。利用三维单元模型的级联与逆级联过程,研究并分析了双向周期压电声子晶体结构中声表面波的传播特性。通过 IDT 单元 B 矩阵、散射体单元 B 矩阵和 PML 单元 B 矩阵的级联建立起完整的延迟型声子晶体分析结构。利用逆级联过程绘制发射端与接收端压电介质表面的声表面波位移,并在此基础上得到了声表面波透射系数,研究了其透射特性。

5.2 研究展望

SAW 器件的级联有限元模拟方法(HCT-FEM)继承了有限元方法的通用性,同时结合矩阵运算,实现了有限长器件结构的快速分析,是目前 SAW 器件模拟理论的研究热点。本文研究了一种准三维单元 B 矩阵的计算方法,以及快速变频模拟方法,提升了 HCT-FEM 在 SAW 器件模拟与结构参数优化中的效率。并且,将该方法的应用进一步拓展到压电声子晶体结构的模拟与分析中。但是本文研究的内容还存在需要改善与深入研究的地方,计划后续的主要工作有:

- 1) 提升三维基本单元级联的速度。三维单元模型网格数多,消去内部自由度后, B 矩阵维度依然很大,矩阵级联的速度优势难以体现。未来计划采用 GPU 集群的方式再次加快矩阵运算速度。
- 2) 计算声子晶体结构完整的带隙结构特征。依托三维单元级联速度的提升,未来计划分析较大规模压电声子晶体结构的完整带隙特征。