

行政院國家科學委員會專題計畫成果報告

點聚焦式超音波顯微鏡於薄膜物性反算之應用

Characterization of Thin-Film by Point-Focus Acoustic Microscopy

計畫編號：NSC88-2212-E002-020

執行期限：87年8月1日至88年7月31日

主持人：郭茂坤 國立台灣大學應用力學研究所

一、中文摘要：

由於超音波之穿透特性，以及超音波訊號與待測物體之機械性質有關特性，使得高頻超音波顯微鏡，成為在光學顯微鏡和電子顯微鏡之外，另外一個可用以瞭解微觀尺寸物體的工具。超音波顯微鏡可直接用以解析物體內部之結構，如晶粒大小，晶體缺陷、孔隙比、裂縫...等；同時，若將超音波顯微鏡所量測得之 $V(z)$ 曲線，與理論計算結果比較，則超音波顯微鏡具有量測微小物體之彈性常數、密度、黏滯性...等機械性質的潛力。

本計畫將點聚焦式超音波顯微鏡正算與反算程式的整合，以反算等向半平面及等向薄膜鍍層半平面試體之物性及厚度。

關鍵詞：點聚焦超音波顯微鏡、薄膜鍍層

Abstract

Since acoustic waves interact directly with the elastic properties of the material through which they propagate. By using the acoustic fields to form an image, one can study the spatial variations of properties directly. The acoustic microscope thus provides a unique capability for investigating aspects of material that are not revealed by either the light or electron microscopes. On the other hand, acoustic microscope requires a comparison of the measured signal

with corresponding theoretical calculations.

In this project, the acoustic properties of isotropic solids and multi-layered isotropic thin-film are characterized by using $V(z)$ curves of point-focus acoustic microscope.

Keywords: thin-film point-focus acoustic microscopy.

二、研究方法：

目前以超音波顯微鏡進行試體定量檢測的研究中，主要均由 $V(z)$ 曲線實驗數據中擷取其表面聲波模態之相位速度 V_{SAW} ，再將之與理論計算的表面聲波頻散行為進行比對，以求取試體之材料常數或鍍層厚度。本計畫則直接利用完整 $V(z)$ 曲線形狀(即其隱含之材料資料)，作為進行試體反算工作之基礎。利用此方法時的 $V(z)$ 曲線正算模擬結果，除了在峰尖峰谷的位置須與實驗曲線相近外，曲線的振幅大小也須要相近；因此正算模擬之準確度及計算效率的要求，均比只利用曲線振盪周期 Δz 計算表面波速進而反算的方法來得高。

2.1 正算模擬

點聚焦式超音波顯微鏡之 $V(z)$ 表示式為[1]

$$V(z) \propto \int_0^{\infty} \frac{1}{L(k)} \cdot [\tilde{p}^m(k)]^2 \cdot R(k) \cdot e^{-2\gamma_w(h+z)} k dk \quad (1)$$

其中 k 為水平波數， $\tilde{p}^m(k)$ 為入射波

場， $\gamma_w = \sqrt{k^2 - \omega^2 / c_w^2}$ ； $\omega = 2\pi f$ ； ρ_w ， c_w ；耦合液體的質量密度與波速； f 指顯微鏡鏡頭之工作頻率； $L(k)$ 及 $R(k)$ 分別定義為：

$$L(k) = -\rho_w \omega^2 / \gamma_w$$

$$R(k) = 1 - 2L(k) \cdot [G_w^{-1}(k)]_{22}$$

$[G_w^{-1}(k)]_{22}$ 為該液-固半平面整何之整體勁度矩陣之逆矩陣中的(2,2)元素。

半空間彈性介質，其勁度矩陣為

$$G_1(k) = \begin{bmatrix} M_1^h & M_2^h \\ M_2^h & L + M_5^h \end{bmatrix} \quad (2)$$

鍍單層之半空間試體，勁度矩陣為

$$G_2(k) = \begin{bmatrix} M_{12} & M_{22} & M_{32} & M_{42} \\ & L + M_{52} & -M_{42} & M_{62} \\ & & M_{12} + M_1^h & -M_{32} + M_2^h \\ & & & M_{52} + M_5^h \end{bmatrix} \quad (3)$$

其中， $M_i (i=1,2 \dots 5)$ 之定義，詳見[2]。由(1)式可以很準確的模擬點聚焦超音波顯微鏡的 $V(z)$ 曲線。

2.2 成本函數之定義

假設用以進行反算之 $V(z)$ 曲線取樣範圍為 $-Z \sim 0\lambda_w$ (Z 為正值，此範圍以水中聲波波長 λ_w 為參考)，又在此範圍內用以建構成本函數所使用之資料點取樣頻率為 s (單位 pt/λ_w)。如此，可得一個 z 之陣列為：

$$z_i = -Z + i/s, \quad i=0, \dots, K$$

(其中 $K = Z \cdot s$)而資料點總點數則為 $K+1$ 。

定義正規化(normalized)之離散 $V(z)$ 函數為：

$$\bar{V}(z_i) = V(z_i) / V(z_k) \quad i=0, \dots, K \quad (4)$$

因此當超音波顯微鏡直接聚焦於試體表面位置上時， $\bar{V}(z_k = 0) = 1$ 。若實驗試體真正量測而得之AMS曲線表示為 $V'(z)$ 。給定欲反算未知參數(如：試體材料常數或幾何參數等)一個猜測值所模擬而得之臆測曲線稱為 $V^e(z)$ 。則根據最小平方差之概念，可以定義成本函數LS為：

$$LS = \sum_i^K [\bar{V}^e(z_i) - \bar{V}'(z_i)]^2 + 1 \quad (5)$$

由(5)式知，只有當 $V^e(z) = V'(z)$ 時可得成本函數LS之極小值為+1。執行反算時，須考慮反算參數之物理特性，本研究將

$$h > 0 \quad C_p > \sqrt{2}C_s \quad (6)$$

視為反算問題的限制條件，進行成本函數之最佳化。

2.3 函數值最小化之方法

傳統的非線性反算法(nonlinear inversion algorithms)，主要均藉助於成本函數之局部導函數性質，以判斷有利的搜尋方向。然而此類方法若初始猜測值之選取與確切值相去太遠時，搜索過程極易收斂到起始猜測值鄰近的局部最小值，而得到不正確的結果。

本研究主要以簡單體法[3]配合具搜尋全局最小值之能力之模擬退火法(simulated annealing method, ASA)[4]進行最佳化計算。根據林[5]之研究，此方法收斂至確切解之成功率較高。而所花費計算時間又相對的經濟。

三、研究結果：

本研究同時考慮半空間以及鍍單層的半空間兩種試體。其中半空間試體只考慮力學性質反算；而鍍單層的半空間試體，則同時考慮鍍層厚度及鍍層材料力學性質未知。

3.1 半空間試體之波速反算

考慮鋁之半空間試體，由量測之 $V(z)$ 曲線配合正算模擬以反算試體之壓力波及剪力波兩個波速。圖(1)所示為以簡單體法反算波速之搜尋過程。橫軸為反算迭代次數，縱軸為則波速結果，虛線代表正確波速值位置。而頭三個取樣點即為所給定之初始猜測值。可看出剪力波速 C_s 的反算較易收斂到正確值(約15次的迭代)，而壓力波速 C_p 則約需25次的迭代。

3.2 厚層與波速之反算

本研究中同時考慮氧化鋅鍍層-矽底層(ZnO-Si)、以及矽鍍層-氧化鋅底層(Si-ZnO)兩種情況。

首先考慮 ZnO-Si：隨著鍍層厚度增加， $V(z)$ 曲線亦呈現越來越不規則的趨勢，使得成本函數產生許多局部的極小值，因此反算的困難度亦隨之增加。圖(2a)、(2b)為鍍層厚度為 $1.4\mu\text{m}$ 時之結果；圖(3a)、(3b)則為 $h=4.6\mu\text{m}$ 之結果。由圖(2)及(3)仍然可發現 C_s 的反算總是較容易收斂至正確值，而 C_p 及 h 則均長期停留於確切解附近，之後才逐漸收斂至確切解。

其次考慮 Si-ZnO 試體，此時底層材料之波速較慢，形成慢底形構。圖(4a)、(4b)為鍍層厚度 $h=0.2\mu\text{m}$ 時之結果。可發現 C_s 的反算仍是較容易收斂至正確值，而 C_p 及 h 則慢慢才逐漸收斂至確切解；同時可發現 Si-ZnO (亦即慢底試體) 的收斂遠比 ZnO-Si (快底試體) 來得慢。

四、結論

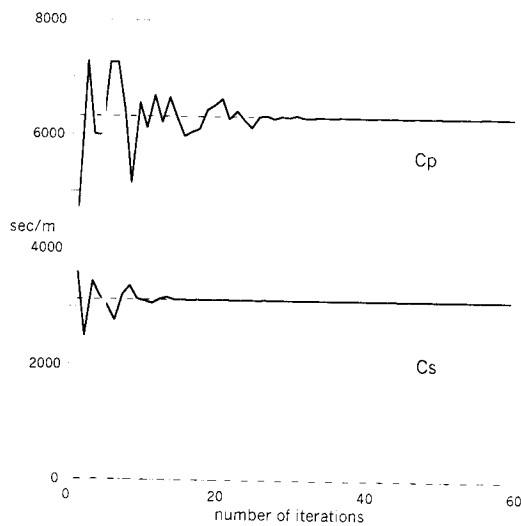
本報告利用完整的 $V(z)$ 曲線進行介質及厚度反算，可以使用較少的曲線 (亦即較少的實驗次數)。同時當超音波顯微鏡之工作距離過短時，振盪周期 Δz 判斷不易，以傳統方法決定表面聲波相位速之準確性將受影響，因此以完整的 $V(z)$ 曲線進行反算是一個可行的方式。利用完整的 $V(z)$ 曲線進行反算時，必須有正確的正算模擬，不止所模擬得知 $V(z)$ 曲線與實際的 $V(z)$ 曲線在曲線形狀上相似，曲線的振幅大小更要近似。

五、參考文獻

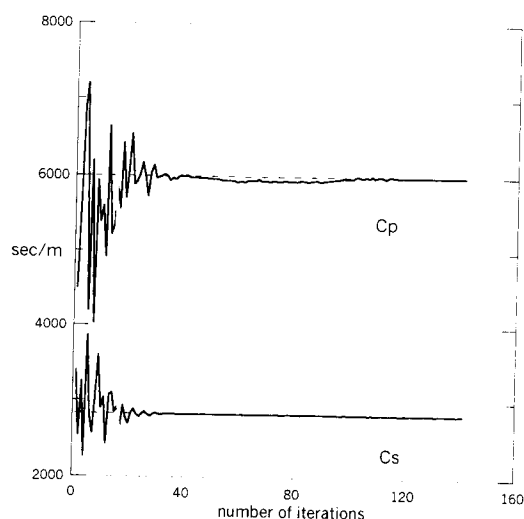
- [1] 郭茂坤, 1997-1998, 點聚焦超音波顯微鏡之模擬, 行政院國家委員會專題計畫成果報告。
- [2] 劉季宇, 1996, 超音波顯微鏡之

正算與反算模擬於度層及裂縫檢測之應用, 台大應力所博士論文。

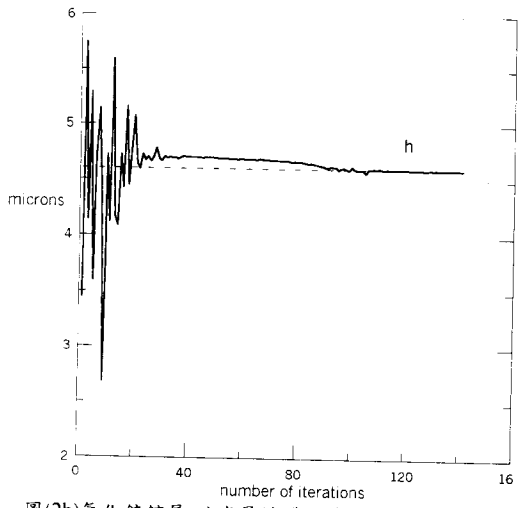
- [3] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, 1999. Numerical Recipes in Fortran, Cambridge Univ. Press, New York.
- [4] L. Ingber, 1989. Very fast simulated reannealing, Mathl. Comput. Modelling, Vol.12, pp. 967-973
- [5] 林資榕, 1994, 二維半無窮域之移動聲源反算, 台大應力所碩士論文。



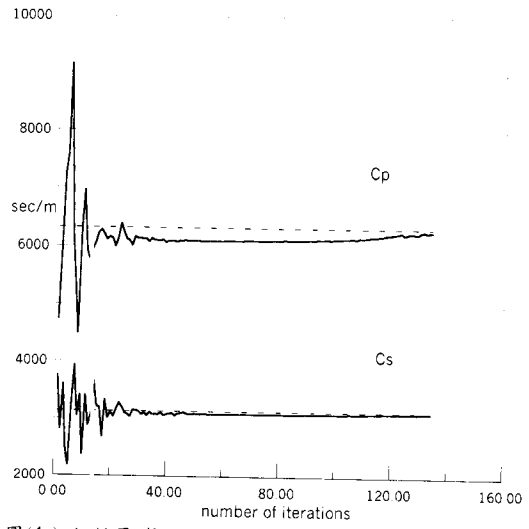
圖(1)半平面鋁值試體之橫波、縱波反算示意圖



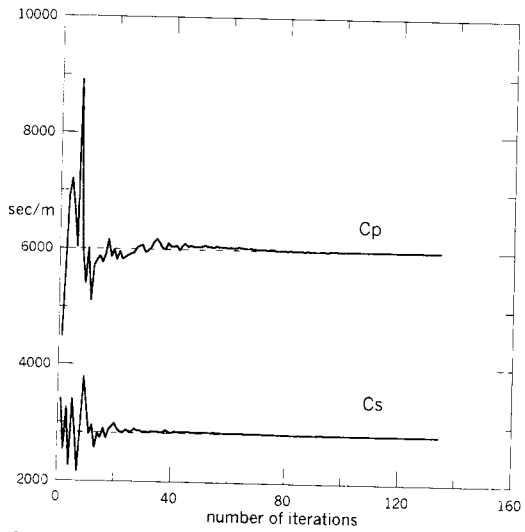
圖(2a)氧化鋅鍍層-矽底層試體之波速示意圖



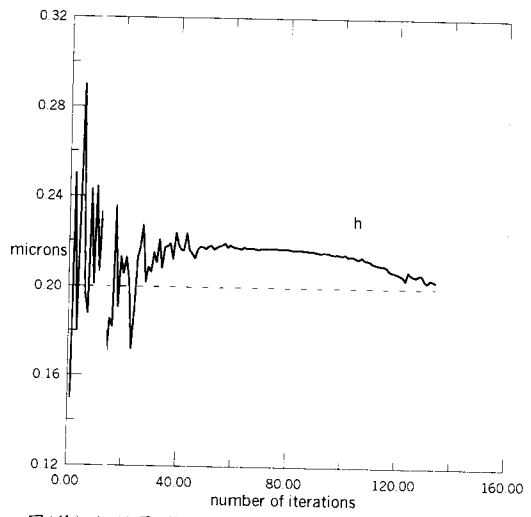
圖(2b)氧化鋅鍍層-矽底層試體之層厚($1.4 \mu\text{m}$)示意圖



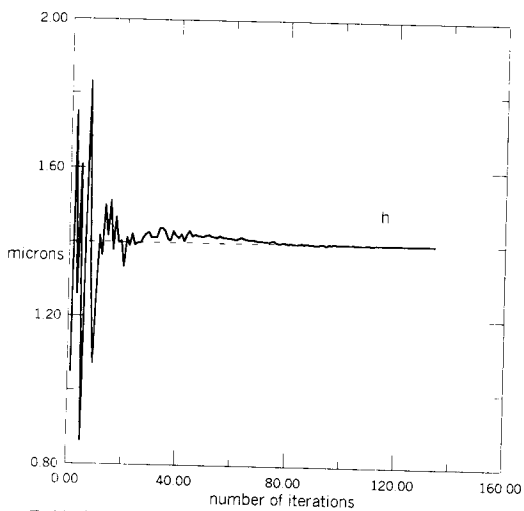
圖(4a) 鋁鍍層-氧化鋅底層試體之波速反算示意圖



圖(3a)氧化鋅鍍層-矽底層試體之波速示意圖



圖(4b) 鋅鍍層-氧化鋅底層試體之層厚($0.2 \mu\text{m}$)示意圖



圖(3b)氧化鋅鍍層-矽底層試體之層厚($1.4 \mu\text{m}$)示意圖