

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

微型週期性結構表面聲波頻溝理論分析與微機電實驗初探

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2212-E-002-057-

執行期間：91 年 08 月 01 日至 92 年 10 月 31 日

執行單位：國立臺灣大學應用力學研究所

計畫主持人：吳政忠

報告類型：精簡報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 93 年 1 月 16 日

行政院國家科學委員會專題研究計畫期末報告

微型週期性結構表面聲波頻溝理論分析與微機電實驗初探

計畫編號： NSC 91-2212-E-002-057

執行期間：91年8月1日至92年10月31日

主持人：吳政忠 台灣大學應用力學研究所

一、中文摘要

本計畫旨在研究聲子晶體之超聲波頻溝現象，藉由平面波展開法理論分析(plane wave expansion method)結合實驗量測，進行微型週期性結構表面聲波頻溝現象之研究。經由彈性振動材料組成之週期性結構，在適當調整其材料常數後通過之聲波有頻溝現象存在，此類結構稱為聲子晶體(Phononic crystals)。聲子結構的應用，可作為二維表面聲波濾波器，阻止特定角度與頻率入射的聲子傳遞，達成濾波之效果。本報告使用平面波展開法來計算二維聲子晶體之聲波頻溝，可針對指定入射角度及結構尺寸設計濾波頻率。並進行微米尺寸之聲子晶體實驗，設計高頻表面聲波交指叉換能器，進行表面聲波頻溝現象之研究，實現微米等級之聲子晶體結構，並驗證表面聲波頻溝現象。

關鍵詞：聲子晶體、頻溝、平面波展開法、表面聲波

Abstract

The purpose of the research is to study the characteristics of the acoustic band gaps in the 2D phononic crystals. The phononic crystal is a kind of periodic elastic material structure that exists band gaps, in which the elastic wave propagation of particular frequency is forbidden. The band gaps phenomena are studied using the plane-wave expansion method, which is composed of the Bloch's theorem and of the reciprocal lattice vector. The IDT (inter-digital transducer) and a micro scale 2D phononic crystal consists of silicon with a square periodic arrangement of cylindrical holes

were designed to verify the band gaps of surface acoustic waves. The fabrication process using the MEMS (Micro Electro Mechanical Systems) technique were studied and realized in the research. These results provide useful guidelines for the design of a phononic crystal device as a frequency filter.

Keywords: phononic crystals, band gaps, plane wave expansion method, SAW (surface acoustic wave)

二、計畫緣由與目的

近年來由於光通訊之蓬勃發展，一般對於光子晶體(Photonic crystals)之興趣逐年迅速增長[1]。所謂光子晶體，即為週期性之介電質結構，因週期性結構之緣故，導致電磁波通過晶體時由於反射波對入射波造成干涉，發生所謂的頻溝現象(Band gap)，阻擋在某些頻率振盪之電磁波通過。由此頻溝現象，光子晶體可應用於光纖通訊上，例如近來十分熱門之高密度分波多工器(DWDM)濾波器，即為其應用之一。而由光子(Photon)與聲子(Phonon)之類比性，可推斷由振動材料組成之週期性結構，在適當調整其材料常數後，通過之聲波亦有頻溝現象存在，則將此類結構稱為聲子晶體(Phononic crystals)。

針對二維聲子晶體的研究直到1993年才有所突破。首先是Kushwaha與Halevi [2~4]於1993年所提出的理論，研究兩種相異之等向性彈性材料所架構的二維週期性結構，但僅針對微體波之振動提出波傳理論。Tanaka與Tamura[5~7]於1998年選用立

方晶系的兩種材料(AlAs與GaAs)組合成為二維聲子晶體，提出表面波的波傳理論，說明在一般情況下，聲子晶體的表面波頻帶分佈。

聲子晶體的頻溝現象，可應用於微體波濾波器或表面聲波濾波器，阻止特定角度與頻率入射的聲子傳遞，藉以達成濾波之效果，此為研究聲子晶體的主要動機。另外，完整的聲子頻溝可以在某些選擇的頻率範圍內，提供需要高精密度的機械系統一個完全無振動的環境，例如適當設計機體週期性結構以降低聲音引致之震動。而於水下量測實驗用來發射與接收聲波的壓電探頭，或者是醫學上所使用的超音波探頭，都是由週期排列的壓電板所組成，也屬於聲子晶體的範疇。因此發展一個適用於聲子晶體的波傳理論，藉以瞭解聲子晶體的材料選擇與結構週期排列之行為，對結構的波傳行為及其頻溝現象的影響，將有助於濾波器、高精密度系統以及探頭的設計與製造。

本計畫旨在發展用平面波展開法來計算二維聲子晶體之聲波頻溝，利用有限個倒晶格向量以及布拉克定理展開波動方程式，並配合表面波條件與邊界條件，針對高度異向性材料組成的聲子晶體進行波傳理論分析，可計算二維聲子晶體表面波之頻散曲線，預測頻溝出現之頻段與寬度。並規劃微米尺寸之聲子晶體實驗進行驗證，設計高頻表面聲波交指叉換能器，進行表面聲波頻溝現象之研究，並探討聲子晶體之微機電製程技術，作為日後研製相關應用元件之依據。

三、研究方法與成果

(一) 推導三斜晶系(Triclinic)材料的二維聲子晶體表面波傳理論

聲子晶體之表面聲波理論推導的對象為聲子晶體中的一個初基單胞，如圖 1 所示。利用倒晶格向量的觀念，並導入布拉克定理來展開彈性波動方程式，以計算應力波於彈性體內傳播的頻散關係曲線。

根據動態彈性力學理論，一般彈性材

料在線彈性範圍內，應力波於彈性體內的傳播行為可由以下波動方程描述：

$$\rho(\mathbf{r}) \cdot \ddot{\mathbf{u}}_i(\mathbf{r}, t) = \partial_j [C_{ijmn}(\mathbf{r}) \cdot \partial_n \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)] \quad (1)$$

其中 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 為位置向量， $\rho(\mathbf{r})$ 為位置相關之質量密度， $C_{ijmn}(\mathbf{r})$ 為位置相關之彈性係數， $\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$ 為位移向量， $\tau_{ij}(\mathbf{r}, t)$ 表示柯西應力張量。

考慮一二維聲子晶體 (x - y 平面)，由於每一個單胞的質量密度均相同，在經過晶格平移之後並不會改變其值，如圖 2 所示聲子晶體之布里路因區及其最小重複區。因此我們利用倒晶格向量(reciprocal lattice vector, RLV)的觀念，將整個單胞的質量密度、彈性常數及位移場對倒晶格向量展開成傅立葉級數(Fourier series)之形式：

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} \rho_{\mathbf{G}} \\ C_{ijmn}(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} C_{\mathbf{G}}^{ijmn} \\ \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t} (e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} \mathbf{A}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{k}_z z}) \end{aligned} \quad (2)$$

將之代入波動方程(1)，可求得相關之特徵值與特徵向量，並據以架構滿足表面邊界條件之表面波解。以最一般化的異向性材料波傳理論，即三斜晶系(Triclinic symmetry materials)，經過推導與集項之後可得到一個簡單的矩陣形式如下：

$$\begin{bmatrix} \begin{pmatrix} M_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z S_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z^2 N_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} L_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z O_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z^2 T_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} U_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z K_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z^2 V_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} L_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z O_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z^2 T_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} M_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z S_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z^2 N_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} U_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z K_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z^2 V_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} W_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z J_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \\ +k_z^2 X_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(1)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} W_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z J_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \\ +k_z^2 X_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(2)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} M_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(3)} \\ +k_z S_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(3)} \\ +k_z^2 N_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{(3)} \end{pmatrix} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_{\mathbf{G}'}^1 \\ A_{\mathbf{G}'}^2 \\ A_{\mathbf{G}'}^3 \end{bmatrix} = 0 \quad (3)$$

針對特定晶格排列之聲子晶體，若以 k_z 為波數與頻率的函數，在給定波數與頻率值後可將(3)式用另一組矩陣來表示：

$$(\mathbf{A}k_z^2 + \mathbf{B}k_z + \mathbf{C}) \cdot \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (4)$$

取 n 項倒晶格向量代入計算，式(4)共可求得 $6n$ 個特徵值，其中可分為兩組特徵值，這兩組特徵值所對應的平面波各自代表上傳波與下傳波，在計算聲子晶體的表面波波傳行為時，上下傳波依據衰減及傳播方向而定。我們只取出符合表面波條件的那組特徵值，因此得到 $3n$ 個特徵值 $k_z^{(l)}, (l=1 \sim 3n)$ 。可利用符合表面波條件的位移向量，及滿足在 $z=0$ 處應力場為零的邊界條件，由「邊界函數」(boundary function)找到給定的波數所對應之符合邊界條件的表面波頻率。如此，只要掃過整個 k 空間就可以得到完整的二維聲子晶體表面波頻散關係，並可看出聲子晶體頻溝現象出現的位置與頻寬。

(二) 建構二維聲子晶體表面波傳電腦分析程式

根據上述之理論，可撰寫電腦分析程式以計算相關聲子晶體之頻散曲線圖。程式可針對等向性、立方晶系與六角晶系等三類材料做為算例，配合正方晶格與六角晶格兩種材料排列方式，探討不同對稱形式材料之聲子晶體表面波之頻散關係與頻溝現象。

算例中設計空氣/矽之聲子晶體結構尺寸，以利使用微機電製成技術製作相關元件。矽晶圓被選擇當做基底材料而在其上打出週期性的洞(半徑： $3 \mu\text{m}$ ，晶格常數： $10 \mu\text{m}$)，這樣的排列形成一個微米級聲子結構。以平面波展開法對此聲子晶體結構進行分析，理論模擬使用的倒置晶格向量數量為49且聲子結構之填充率 $f=0.283$ ，其相關體波與表面波之頻散曲線如圖3所示。圖3中表面波沿 Γ -X 方向波傳可知頻溝區域出現於 195MHz 和 225MHz 之間，其餘頻段皆存在可能的模態解。上述結果將作為後續實驗之依據。

(三) 高頻表面聲波交指叉換能器之設計與試作

利用聲波耦合模態 (coupling of modes) 設計模式分析一約 200MHz 之表面聲波遲延器 (Delay line) 之頻率響應。為在非壓電

材料矽晶圓上產生表面波，我們在矽晶圓上蒸鍍一層氧化鋅，厚度約 $1.7 \mu\text{m}$ ，並在薄膜上製作交指叉電極(IDT)以利產生某一頻率的表面波。為了證明頻率位於頻溝處的表面波無法穿透聲子結構，我們設計兩組不同頻率的 IDT，分別為 $32.8 \mu\text{m}$ 和 $21.6 \mu\text{m}$ ，其中心頻率是位於頻溝處外面之 137 MHz 及位於頻溝處裡面 197 MHz。

(四) 以微機電製程製作微米級二維聲子晶體

氧化鋅壓電薄膜為一種重要的壓電材料，有很多不同的用途。將氧化鋅沈積在矽基材上製作之層狀表面聲波濾波器將有以下幾項優點：與其他壓電薄膜相較有較高之機電耦合係數；薄膜結構近於單晶結構；具有將表面聲波元件與半導體製程整合的潛能。

本實驗採用射頻濺鍍法 (RF magnetron sputtering system) 生長氧化鋅薄膜，具有高度 C 軸 (002) 取向、密度高、表面平坦且顆粒較細的多晶薄膜，並具有較快的沈積速率。

氧化鋅薄膜的品質會因製程參數之差異，影響薄膜的特性。表1 列出濺鍍氧化鋅的參數。靶材的直徑為 100 mm，厚度為 3 mm，由純度 99.9% 之氧化鋅燒結而成。為了得到均勻之厚度，靶材至基材之距離為 13 cm。實驗所使用的基材為單面拋光之矽晶圓 (100)，厚度為 $500 \mu\text{m}$ 。使用 X 光繞射儀分析 C 軸取向的程度，以及掃描電子顯微鏡觀察表面粗糙度及沈積之氧化鋅是否具有柱狀之晶體結構，其結果如圖4。

微米級二維聲子晶體之製作可分成三個主要的步驟，如圖5至圖7。首先，利用 lift-off 製程將層狀表面聲波濾波器製作在矽晶圓上。利用 lift-off 製程具有兩個好處：其一為能防止底切現象，使光罩上的圖案能獲得完整的轉換；另外將可避免氧化鋅薄膜因使用濕蝕刻製程被蝕刻掉，製程中鋁蝕刻液 (磷酸：醋酸：水 = 1：1：10) 蝕刻之時間大約為 2 到 4 分鐘。實做出來的交指叉換能器如圖8所示。

第二步驟為定義出聲子晶體所在之區域。最後一道光罩將被用來製作二維聲子晶體陣列。因表面波之能量大部分被侷限於距表面兩個波長內，所以二維聲子晶體週期排列之圓柱至少要有 $80\text{ }\mu\text{m}$ 深，而電感耦合電漿離子蝕刻（ICP, Inductively Coupled Plasma-reactive)將可達成此目標。不同於活性離子蝕刻(RIE)，ICP蝕刻具有較高的蝕刻率且能有效地減少側向蝕刻，適合用來製作高深寬比的結構。另外，為了保護其它已完成區域被蝕刻，因此選擇較厚之光阻AZP4620替代來S1813。製作之結果如圖9、圖10所示。

(五) 頻溝現象之理論與實驗比較

在微機電製程方面，完成上述微米二維聲子晶體結構之製作後，以網路分析儀8714ES進行高頻表面聲波訊號之量測。經由前述所設計兩組不同頻率的IDT，分別為 $32.8\text{ }\mu\text{m}$ 和 $21.6\text{ }\mu\text{m}$ ，將可比較出表面波頻溝之作用。結果顯現IDT的中心頻率是 137 MHz 左右時，由於頻率位於頻溝處外面，因此表面波穿透聲子結構而具有很少的衰減，如圖11所示。而圖12則顯示IDT的中心頻率是 197 MHz ，由於頻率位於頻溝處裡面，我們發現大部分的能量被聲子晶體擋住，無法傳到另一邊的接收端IDT。實驗的結果顯示在這一頻率範圍確有表面波頻溝的現象產生。

實驗之結果。我們成功的觀察到當頻率在預期頻溝內時，表面波無法通過二維聲子晶體結構。當頻率響應不是在 $195\sim 225\text{ MHz}$ 的頻溝內，因此其頻率響應維持一良好的形狀，與沒有聲子晶體結構時相差不大。而當表面波頻率在二維聲子晶體頻溝時之實驗結果。我們發現在這兩個例子中，能穿透二維聲子晶體的能量非常的小。表2為表面聲波的穿射係數，當中心頻率在頻溝內時，穿射係數小於 3×10^{-2} ；相反地，中心頻率在頻溝外時，其值在0.1到1之間。綜言之，此實驗結果使二維聲子晶體的頻溝現象得到良好的證實。

四、計畫進度與未來工作

聲子晶體相關背景理論與研究，牽涉之理論分析與製程技術極為廣泛，內容橫跨電機與力學領域。關鍵理論與技術則含括週期性結構之波傳理論、微機電製程、表面聲波濾波器之設計等。本計畫結合微機電製程與表面聲波指叉換能器探討微米級聲子晶體之研究。計畫的研究內容包括以平面波展開法來計算二維聲子晶體之聲波頻溝，建構二維聲子晶體表面波傳電腦分析程式。並配合高頻表面聲波交指叉換能器之設計與試作，探討以微機電製程製作微米級二維聲子晶體之可能，進行頻溝現象之理論與實驗比較。本計畫的研究內容均依原先訂定的進度順利完成，成果具學術與應用價值，除於研討會發表外，平面波展開法發展之成果亦投稿於國外著名物理期刊[8]。計畫成果除可分析表面波頻溝現象，並建立微機電製程之程序，有助於作為日後後續研製相關應用元件之依據。

五、參考文獻

- [1] E.Yablonovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics," *Phys. Rev. Lett.* 58, 2059-2062, 1987.
- [2] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, "Acoustic Band Structure of Periodic Elastic Composites," *Phys. Rev. Lett.* 71(13), 2022-2025, 1993.
- [3] M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, "Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites," *Phys. Rev. B* 49(4), 2313-2322, 1994.
- [4] M. S. Kushwaha and P. Halevi, "Band-gap engineering in periodic elastic composites," *Appl. Phys. Lett.* 64(9), 1085-1087, 1994.
- [5] Yukihiro Tanaka and Shin-ichiro Tamura, "Surface acoustic waves in two-dimensional periodic elastic structures," *Phys. Rev. B* 58(12),

7958-7965, 1998.

- [6] Yukihiro Tanaka and Shin-ichiro Tamura, *Phys. Rev. B* 60(19), 13294-13297, 1999.
- [7] Yukihiro Tanaka, Yoshinobu Tomoyasu, and Shin-ichiro Tamura, *Phys. Rev. B* 62(11), 7387-7392, 2000.
- [8] Wu, T.-T., Huang, Zi-Gui and Lin, S.-C. "Surface and bulk acoustic waves in 2D phononic crystals with general anisotropy," *Phys. Rev. B*, 2003 (accepted)

六、圖表

表 1 濺鍍氧化鋅的參數

靶材	ZnO target
靶材直徑 (cm)	10
靶材至基材距離 (cm)	13
濺鍍機壓力 (Pa)	8×10^{-5}
功率 (W)	200
基材溫度 (°C)	220
Ar (sccm)	48
O ₂ (sccm)	48
Ar / O ₂ ratio	1
濺鍍時間 (min)	160
ZnO 厚度	1.64~1.78 μm

表 2 表面聲波穿射係數

波長 (μm)	穿射係數
32.8	8.67×10^{-1}
28	9.16×10^{-1}
24.8	2.07×10^{-1}
21.6	8.77×10^{-3}
20	2.04×10^{-2}
13.6	1.20×10^{-1}

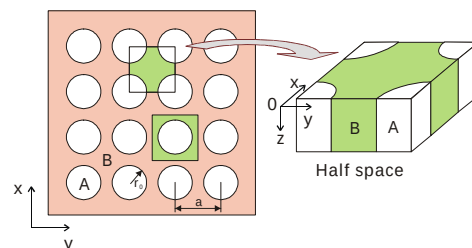


圖 1 聲子晶體材料排列示意圖
(正方晶格)

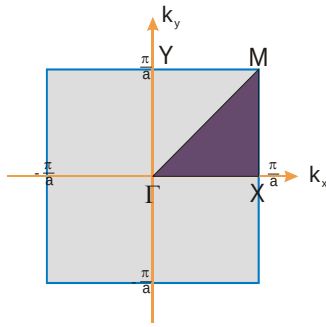


圖 2 聲子晶體之布里路因區及其最小重複區域（正方晶格）

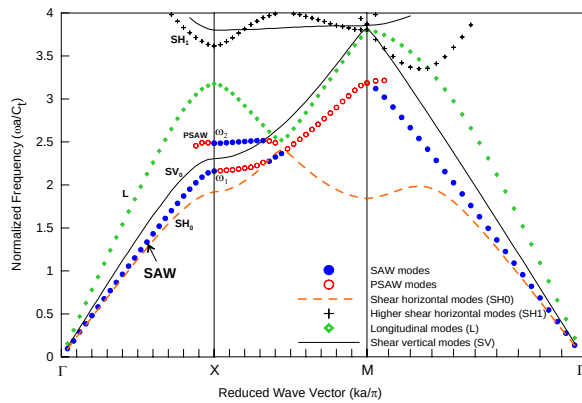


圖 3 表面波與微體波模態頻散曲線 (Air-Si, $f = 0.286$, Sq.)

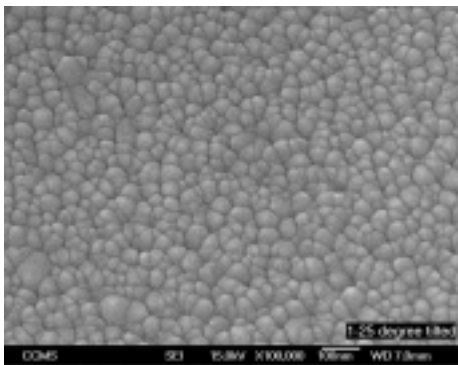


圖 4 電子顯微鏡下之氧化鋅薄膜

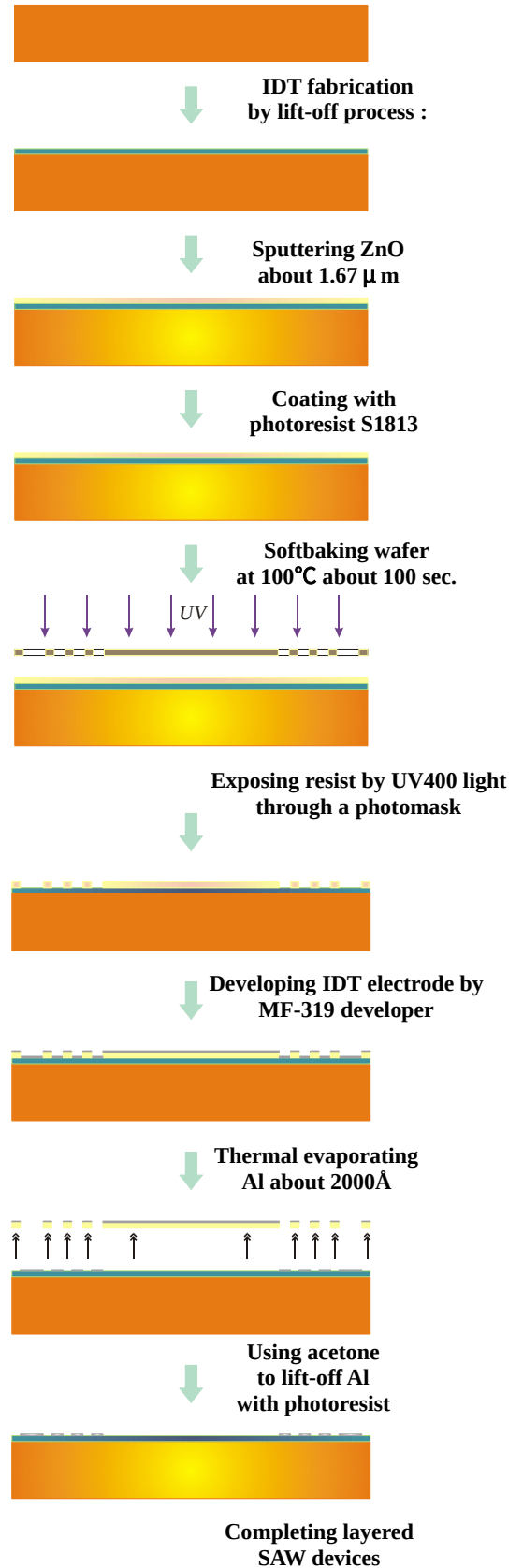


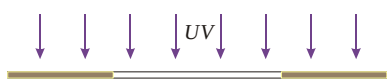
圖 5 層狀表面聲波元件製作步驟



Coating with photoresist
S1813 on ZnO and
IDT electrode



Softbaking wafer
at 100°C about 100 sec.



Exposing resist by
UV400 light
through a photomask



Developing the square region
and removing
photoresist



$H_3PO_4+HAc+H_2O$
1 : 1 : 10
solution etching ZnO



Removing
the photoresist

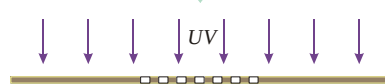
圖 6 定義聲子晶體所在區域製作步驟



Coating with
photoresist AZP 4620



Softbaking wafer
at 100°C about 100 sec.



Exposing resist by UV400
light through a photo mask



Developing 2-D
phononic crystals and
removing photoresist



Hardbaking wafer
at 95°C about 50 min.



ICP etching 2-D phononic
crystals about 2 hours



Carrying out the
2-D phononic crystals



Removing photoresist
and completing the
whole processes

圖 7 製作二維聲子晶體陣列步驟

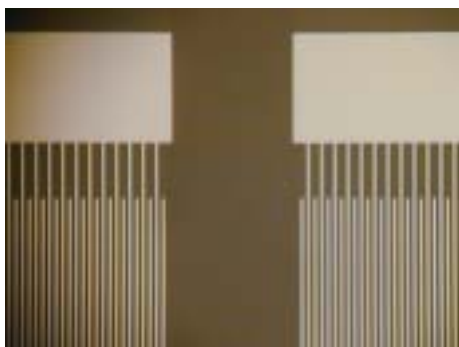


圖 8 光學顯微鏡下之交指叉換能器影像

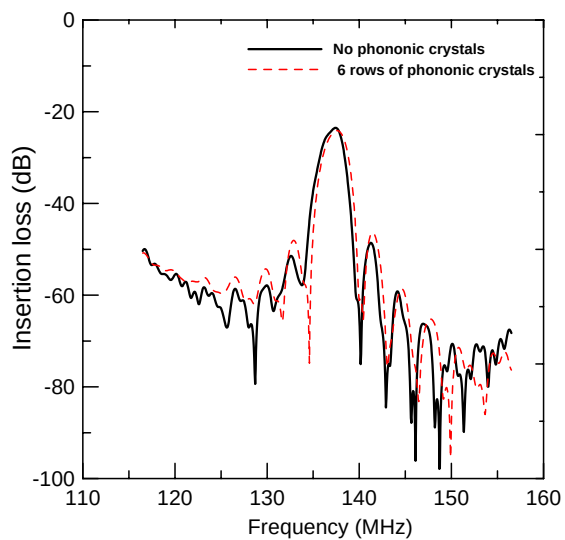


圖 11 IDT 頻率位於頻溝外之頻率反應圖
($\lambda=32.8\mu\text{m}$)

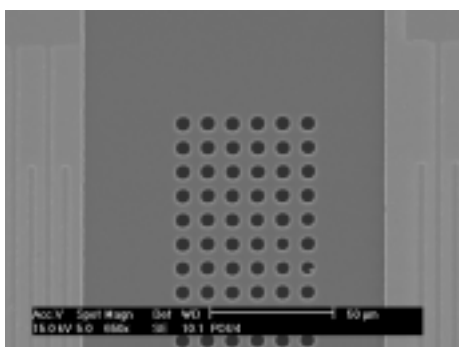


圖 9 二維聲子晶體陣列之 SEM 影像
(上視圖)

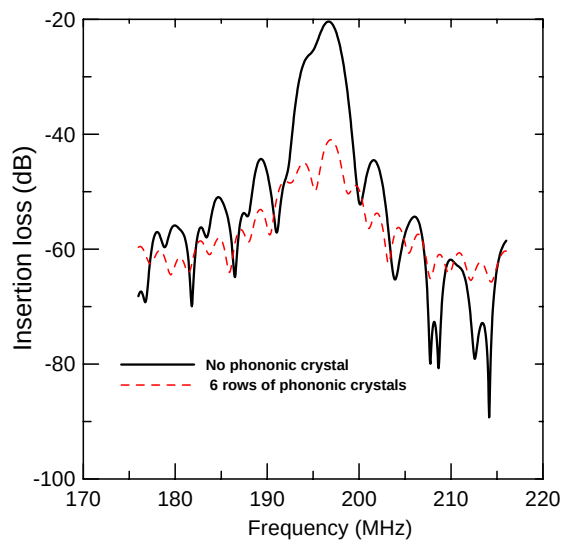


圖 12 IDT 頻率位於頻溝內之頻率反應圖
($\lambda=21.6\mu\text{m}$)

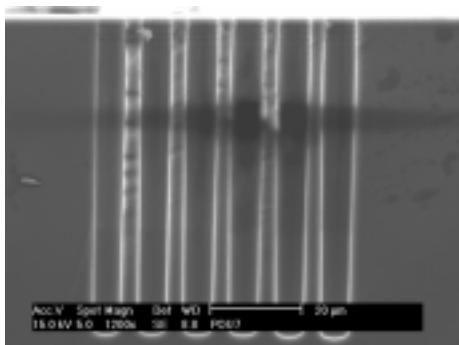


圖 10 二維聲子晶體陣列之之 SEM 影像
(側視圖)