

Onde de Love Piézoacoustique

Bernard Collet, Michel Destrade

Laboratoire de Modélisation en Mécanique, CNRS-UMR 7607,75252 Paris, France, courriel : bc@ccr.jussieu.fr

Résumé

Une sélection de résultats analytiques et numériques concernant la propagation d'ondes planes harmoniques guidées dans un bicouche piézoélectrique est présentée. L'étude effectuée concerne les modes transverses horizontaux (ondes de Love). L'analyse repose sur l'utilisation du formalisme de Stroh associé à la notion d'impédance d'interface. Les courbes de dispersion et les amplitudes des champs continus sont donnés et brièvement commentés.

Introduction

Les hétérostructures piézoélectriques composées d'un massif recouvert d'une ou plusieurs couches jouent un rôle important dans les systèmes micro-électromécaniques (MEMS). De nombreux capteurs et filtres à ondes de surface utilisent une architecture de type couche sur massif. Ainsi nous pouvons avoir une couche diélectrique ou piézoélectrique d'épaisseur finie sur un substrat piézoélectrique. Pour certaines configurations, il est possible de découpler une onde transverse horizontale couplée aux champs électriques (onde de Love piézoélectrique) d'une onde polarisée dans le plan sagittal purement élastique (onde de Rayleigh).

Les ondes de Love sont particulièrement bien adaptées à la conception de filtres hautes fréquences et bio-capteurs en environnement liquide. Nous considérons le cas d'une structure composée d'une couche isolante faite d'un semi-conducteur non-piézoélectrique de symétrie cubique $m3m$, déposée sur un crystal piézoélectrique de symétrie orthorhombique $2mm$ en coupe Y après rotation autour de Z .

A l'aide de techniques analytiques avancées, nous obtenons l'équation de dispersion sous forme explicite lorsque la face supérieure de la couche est court-circuitée. Les calculs détaillés correspondants ont été présentés dans un autre travail [1], ici on se borne à rappeler et commenter les principaux résultats. Ces résultats sont exploités via des simulations numériques qui illustrent les comportements variés de la structure selon l'angle de coupe du substrat : spectres de dispersion des vitesses de phase et de groupe, existence (ou disparition) d'une bande interdite pour le mode fondamental, profils de variation des champs impliqués avec la profondeur.

Résolution

Ce paragraphe est consacré à la présentation d'une procédure permettant obtenir les courbes de dispersion d'une onde de Love dans une structure constituée d'une couche de germanium Ge , déposée sur un substrat en

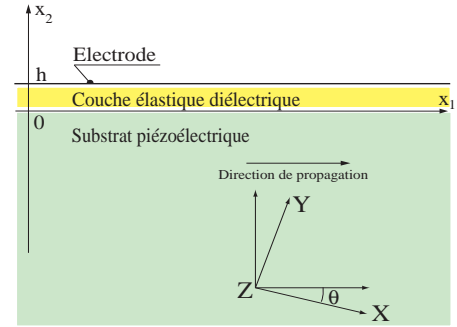


Figure 1: Géométrie de la structure et système de coordonnées.

niobate de potassium $KNbO_3$. La couche est métallisée sur sa face supérieure et portée au potentiel zéro. Nous rappelons que le germanium est un semiconducteur non-piézoélectrique, de symétrie $m3m$, et que le niobate de potassium est un crystal à fort couplage piézoélectrique, de symétrie $2mm$ (bien entendu, la méthodologie est aussi valable pour d'autres combinaisons de matériaux ayant le même degré de symétrie, ou de plus grandes, telle que la silice SiO_2, \dots).

Ici, les faces de la couche sont orientées parallèlement à un plan de symétrie alors que le substrat est coupé le long d'un plan contenant l'axe Z et faisant un angle $\theta \neq 0, 90^\circ$ avec le plan $Y = 0$, voir Figure 1.

Ainsi pour la couche, les quantités physiques qui joueront un rôle sont [2] : $\tilde{c}_{44} = 67.1 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$, $\tilde{\epsilon}_{11} = 16.6\epsilon_0$, $\tilde{\rho} = 5330 \text{ kg/m}^3$, et $\tilde{v} = \sqrt{\tilde{c}_{44}/\tilde{\rho}} = 3550.31 \text{ m/s}$. Pour le substrat, ce seront :

$$\begin{aligned} c_{44} &= m^2 \tilde{c}_{44} + n^2 \tilde{c}_{55}, & c_{55} &= n^2 \tilde{c}_{44} + m^2 \tilde{c}_{55}, \\ c_{45} &= mn(\tilde{c}_{44} - \tilde{c}_{55}), & e_{24} &= m^2 \tilde{e}_{24} + n^2 \tilde{e}_{15}, \\ e_{15} &= n^2 \tilde{e}_{24} + m^2 \tilde{e}_{15}, & e_{14} &= mn(\tilde{e}_{24} - \tilde{e}_{15}), \\ \epsilon_{11} &= m^2 \tilde{\epsilon}_{11} + n^2 \tilde{\epsilon}_{22}, & \epsilon_{22} &= n^2 \tilde{\epsilon}_{11} + m^2 \tilde{\epsilon}_{22}, \\ \epsilon_{12} &= mn(\tilde{\epsilon}_{22} - \tilde{\epsilon}_{11}), \end{aligned} \quad (1)$$

où : $m = \cos \theta$, $n = \sin \theta$, et [3] : $\tilde{c}_{44} = 7.43$, $\tilde{c}_{55} = 2.5$ (10^{10} N/m^2), $\tilde{e}_{24} = 11.7$, $\tilde{e}_{15} = 5.16$ (C/m^2), $\tilde{\epsilon}_{11} = 34\epsilon_0$, $\tilde{\epsilon}_{22} = 780\epsilon_0$, $\tilde{\rho} = 4630 \text{ kg/m}^3$.

L'onde de Love est décrite par les champs suivants : le déplacement transverse u_3 , le potentiel électrique ϕ , la traction σ_{32} , et l'induction électrique D_2 dans le substrat, et par les champs correspondants \hat{u}_3 , $\hat{\phi}_3$, $\hat{\sigma}_{32}$, \hat{D}_2 dans la couche. Nous recherchons une solution qui se propage le long de l'axe x_1 (aligné avec un axe de symétrie dans une face de la couche) avec la vitesse v et le vecteur d'onde k ,

et qui est atténuée le long de l'axe x_2 (normal aux plans de coupe). Ainsi,

$$\{u_3, \phi, \sigma_{32}, D_2\} = \{U_3(kx_2), \varphi(kx_2), ikt_{32}(kx_2), ikd_2(kx_2)\}e^{ik(x_1-vt)}, \quad (2)$$

où $U_3, \varphi, t_{32}, d_2$ sont des fonctions de kx_2 seulement et

$$\{\hat{u}_3, \hat{\phi}_3, \hat{\sigma}_{32}, \hat{D}_2\} = \{\hat{U}_3(kx_2), \hat{\varphi}(kx_2), ikt_{32}(kx_2), ik\hat{d}_2(kx_2)\}e^{ik(x_1-vt)}, \quad (3)$$

où $\hat{U}_3, \hat{\phi}_3, \hat{\sigma}_{32}, \hat{D}_2$ sont des fonctions de kx_2 seulement. Le produit kh est choisi comme paramètre de dispersion dans lequel h désigne l'épaisseur de la couche. Tout d'abord il nous faut déterminer la (ou les) vitesse(s) v de l'onde pour chaque valeur de kh . Pour cela on forme les matrices suivantes :

$$T = \begin{bmatrix} c_{44} & e_{24} \\ e_{24} & -\epsilon_{22} \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} c_{45} & e_{14} \\ e_{14} & -\epsilon_{12} \end{bmatrix}, \\ Q = \begin{bmatrix} c_{55} & e_{15} \\ e_{15} & -\epsilon_{11} \end{bmatrix}, \quad J = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

puis [4] : $N_1 = -T^{-1}R$, $N_2 = T^{-1}$, $N_3 = RT^{-1}R - Q$, et enfin, la matrice de Stroh,

$$N = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \\ N_3 + (\rho v^2)J & N_1^t \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Ensuite nous calculons N^{-1} and N^2 et on définit les vecteurs $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$ par

$$\mathbf{k}_1 = \begin{bmatrix} N_{[32]}^{-1} + \hat{c}\hat{\epsilon}N_{[14]}^{-1} \\ N_{[32]} + \hat{c}\hat{\epsilon}N_{[14]} \\ N_{[32]}^2 + \hat{c}\hat{\epsilon}N_{[14]}^2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{k}_2 = \begin{bmatrix} \hat{\epsilon}N_{[21]}^{-1} - \hat{c}\hat{\epsilon}N_{[12]}^{-1} \\ \hat{\epsilon}N_{[21]} - \hat{c}\hat{\epsilon}N_{[12]} \\ \hat{\epsilon}N_{[21]}^2 - \hat{c}\hat{\epsilon}N_{[12]}^2 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{k}_3 = \begin{bmatrix} N_{[42]}^{-1} + \hat{\epsilon}^2N_{[24]}^{-1} \\ N_{[42]} + \hat{\epsilon}^2N_{[24]} \\ N_{[42]}^2 + \hat{\epsilon}^2N_{[24]}^2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{k}_4 = \begin{bmatrix} N_{[31]}^{-1} + \hat{c}^2N_{[13]}^{-1} \\ N_{[31]} + \hat{c}^2N_{[13]} \\ N_{[31]}^2 + \hat{c}^2N_{[13]}^2 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

où

$$\hat{c} = \hat{c}_{44}\sqrt{v^2/\hat{v}^2 - 1} \tan \sqrt{v^2/\hat{v}^2 - 1}kh, \quad \hat{\epsilon} = \hat{\epsilon}_{11} \coth kh. \quad (7)$$

Notons au passage que \hat{c} est toujours définie comme une quantité réelle, car lorsque $v < \hat{v}$, $\hat{c} = -\hat{c}_{44}\sqrt{1 - v^2/\hat{v}^2} \tanh \sqrt{1 - v^2/\hat{v}^2}kh$.

Alors l'équation de dispersion rationalisée est

$$\Delta_1^2 + \Delta_2^2 + 4\Delta_3\Delta = 0, \quad (8)$$

où $\Delta = \det[\mathbf{k}_1|\mathbf{k}_2|\mathbf{k}_3]$, $\Delta_1 = \det[\mathbf{k}_4|\mathbf{k}_2|\mathbf{k}_3]$, $\Delta_2 = \det[\mathbf{k}_1|\mathbf{k}_4|\mathbf{k}_3]$, et $\Delta_3 = \det[\mathbf{k}_1|\mathbf{k}_2|\mathbf{k}_4]$. Pour un kh donné, cette équation n'a en tout et pour tout qu'une seule inconnue, v^2 . Sa résolution numérique peut être menée avec le degré de précision désiré. Cependant l'équation (8) a en général de nombreuses racines : certaines sont légitimes, d'autres sont parasites et ne correspondent pas à une onde de Love. Le processus de sélection des racines est maintenant décrit.

Tout d'abord ne sont conservées que les racines v^2 de (8) qui sont réelles et positives. Puis on en prend la racine

carrée v et on s'assure qu'elle est inférieure à la *vitesse limite* v_L , au dessous de laquelle l'atténuation de l'onde dans la profondeur du substrat n'est plus assurée. Cette dernière quantité est calculée comme étant la plus petite racine positive de l'équation [5] :

$$-4(12t + r^2)^3 + (-72tr + 2r^3 + 27s^2)^2 = 0, \quad (9)$$

où

$$r = \omega_2 - 3\omega_3^2/8, \quad s = \omega_1 - \omega_2\omega_3/2 + \omega_3^3/8, \\ t = \omega_0 - \omega_1\omega_3/4 + \omega_2\omega_3^2/16 - 3\omega_3^4/256. \quad (10)$$

Ici les ω_i sont déterminés en identifiant l'équation

$$\det(N - qI) = 0 \quad \text{avec} \quad q^4 + \omega_3q^3 + \omega_2q^2 + \omega_1q + \omega_0 = 0. \quad (11)$$

Pour chaque v solution de (8) plus petite que v_L , N est calculée par (5) puis on résout la quartique (11) en ne conservant que les deux racines q_1 et q_2 qui ont une partie imaginaire négative (condition d'atténuation). Ensuite on construit les quatre vecteurs $\mathbf{a}^i, \mathbf{b}^i$ ($i = 1, 2$), définis par :

$$\mathbf{a}^i = \left[q_i^2 + 2\frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_{22}}q_i + \frac{\epsilon_{11}}{\epsilon_{22}}, \frac{e_{24}}{\epsilon_{22}}q_i^2 + 2\frac{e_{14}}{\epsilon_{22}}q_i + \frac{e_{15}}{\epsilon_{22}} \right]^t, \\ \mathbf{b}^i = (q_iT + R)\mathbf{a}^i, \quad (12)$$

et les matrices 2×2 suivantes: $A = [\mathbf{a}^1|\mathbf{a}^2]$, $B = [\mathbf{b}^1|\mathbf{b}^2]$. Alors la *condition aux limites exacte* est:

$$|iBA^{-1} - \text{Diag}(\hat{c}, \hat{\epsilon})| = 0. \quad (13)$$

Ecrite sous cette forme, qui implique les tenseurs d'impédance de surface du substrat et de la couche, cette condition constitue un test d'existence [6] : si le déterminant n'est pas égal à zéro, alors la racine v de (8) doit être éliminée; sinon, la vitesse est valide et l'onde de Love existe.

Nous pouvons maintenant construire la solution complète du problème. Dans le substrat, l'onde est donnée par (2), où

$$[U_3(kx_2), \varphi(kx_2)]^t = \gamma_1 e^{ikq_1x_2} \mathbf{a}^1 + \gamma_2 e^{ikq_2x_2} \mathbf{a}^2, \\ [t_{32}(kx_2), d_2(kx_2)]^t = \gamma_1 e^{ikq_1x_2} \mathbf{b}^1 + \gamma_2 e^{ikq_2x_2} \mathbf{b}^2. \quad (14)$$

Ici γ_1 et γ_2 sont les solutions d'un système de deux équations. La première équation est : $[iBA^{-1} - \text{Diag}(\hat{c}, \hat{\epsilon})][\gamma_1, \gamma_2]^t = \mathbf{0}$ (qui représente bel et bien une seule équation d'après (13)). La deuxième équation s'obtient en fixant la valeur d'un des champs à l'interface substrat/couche : si par exemple $U_3(0)$ qui est donné, alors la deuxième équation est: $(\gamma_1 \mathbf{a}^1 + \gamma_2 \mathbf{a}^2) \cdot [1, 0]^t = U_3(0)$.

Dans la couche, l'onde est donnée par (3), où

$$\hat{U}_3(kx_2) = U_3(0) \left(\cos \sqrt{v^2/\hat{v}^2 - 1}kx_2 \right. \\ \left. + \tan \sqrt{v^2/\hat{v}^2 - 1}kh \sin \sqrt{v^2/\hat{v}^2 - 1}kx_2 \right), \\ \hat{\varphi}(kx_2) = \varphi(0) (\cosh kx_2 - \coth kh \sinh kx_2), \quad (15)$$

et $\hat{\sigma}_{23} = \hat{c}_{44}\hat{u}_{3,2}, \hat{D}_2 = -\hat{\epsilon}_{11}\hat{\phi}_{,2}$.

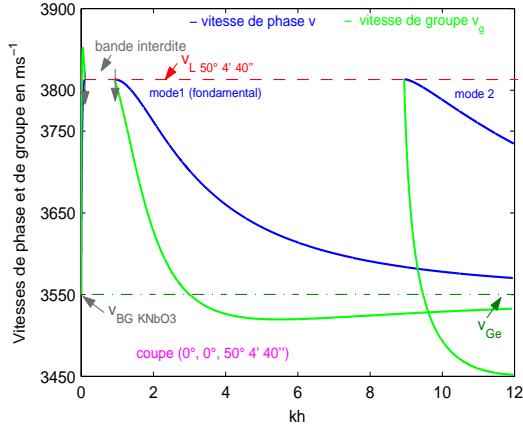


Figure 2: Vitesses de phase et de groupe des modes 1 et 2 en fonction de kh pour une coupe d'angle $\theta = 50^\circ 4' 40''$.

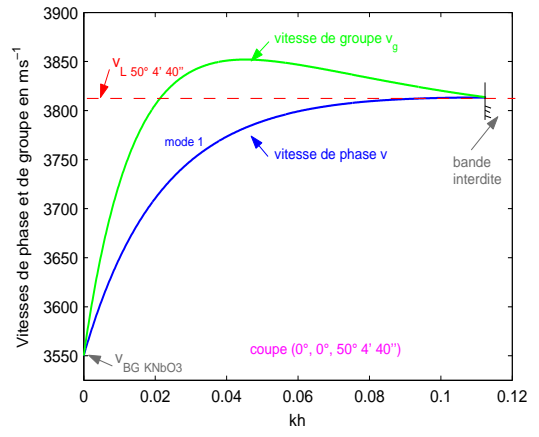


Figure 3: Zoom sur les vitesses de phase et de groupe du mode 1 en fonction de kh pour une coupe d'angle $\theta = 50^\circ 4' 40''$.

Résultats numériques et commentaires

Nous présentons dans cette section un ensemble restreint de résultats numériques concernant les spectres de dispersion et les profils des champs continus suivant la profondeur de pénétration, lesquels nous donnent un condensé d'informations sur les comportements des modes de Love étudiés. Les courbes de dispersion sont obtenues sur une large plage du produit kh sans l'observation d'instabilités numériques. Les figures 2. à 5. montrent les variations de la vitesse de phase et de groupe en fonction de kh pour les premiers modes de propagation. On peut remarquer que contrairement au cas plus classique de coupes non tournées où seul le premier mode est excitable à toutes les fréquences, les autres montrent des fréquences de coupures. Ici le premier mode présente une bande interdite en fréquence dont la largeur dépend de l'angle de coupe du substrat. Aux faibles nombre d'onde (basse fréquence), les vitesses de phase et de groupe du mode fondamental tendent vers la vitesse des ondes de Bleustein-Gulayev. Lorsque le nombre d'onde augmente le taux d'énergie canalisée par la couche croît. L'ensemble des modes coalescent (à haute fréquence) et tendent vers la vitesse de l'onde de volume transversale du matériau le plus lent dans notre cas le Ge. Les figures 6. à 9. illustrent les variations des amplitudes des champs pour les deux premiers modes. A une vitesse de phase et une épaisseur de couche fixées la pénétration de l'onde diminue lorsque l'ordre du mode augmente. Pour limiter la puissance du signal fournie l'amplitude du champ de déplacement à l'interface a été fixée à $u_3(0) = 1\text{\AA}$. Les épaisseurs de couche sélectionnées varient de $3\ \mu\text{m}$ à $12\ \mu\text{m}$ ce qui conduit pour des vitesses de phase moyennes à des fréquences de quelques centaines de MHz utilisées actuellement dans les capteurs et filtres RF. Dans le cas de la coupe $\theta = 50^\circ 4' 40''$ l'excitation du mode 2 permet d'atteindre pour une épaisseur de couche de $6\ \mu\text{m}$ une fréquence de l'ordre du GHz.

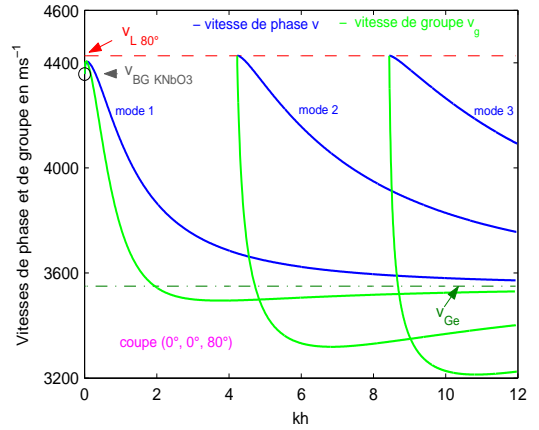


Figure 4: Vitesses de phase et de groupe des trois premiers modes en fonction de kh pour une coupe d'angle $\theta = 80^\circ$.

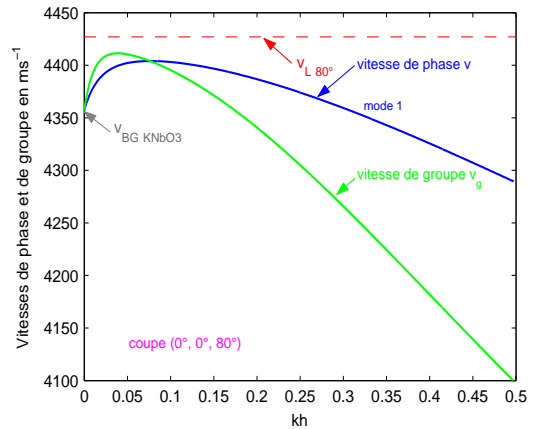


Figure 5: Zoom sur les vitesses de phase et de groupe du mode 1 en fonction de kh pour une coupe d'angle $\theta = 80^\circ$.

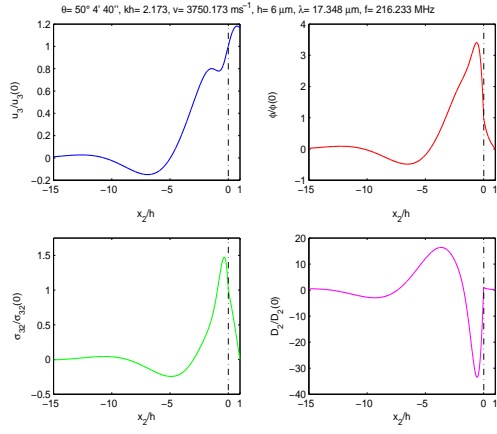


Figure 6: Amplitude des champs du mode 1 en fonction de la profondeur normalisée x_2/h pour une coupe d'angle $\theta = 50^\circ 4' 40''$.

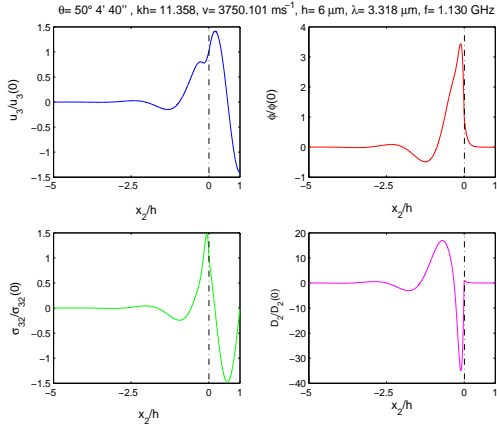


Figure 7: Amplitude des champs du mode 2 en fonction de la profondeur normalisée x_2/h pour une coupe d'angle $\theta = 50^\circ 4' 40''$.

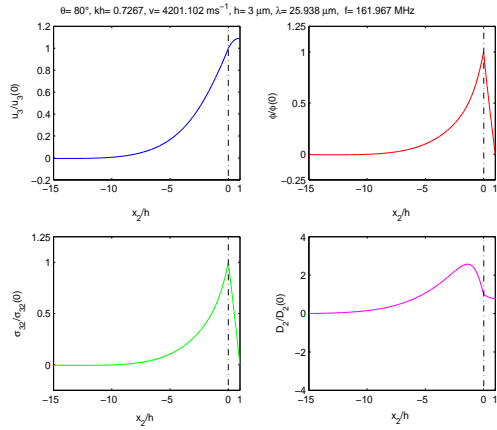


Figure 8: Amplitude des champs du mode 1 en fonction de la profondeur normalisée x_2/h pour une coupe d'angle $\theta = 80^\circ$.

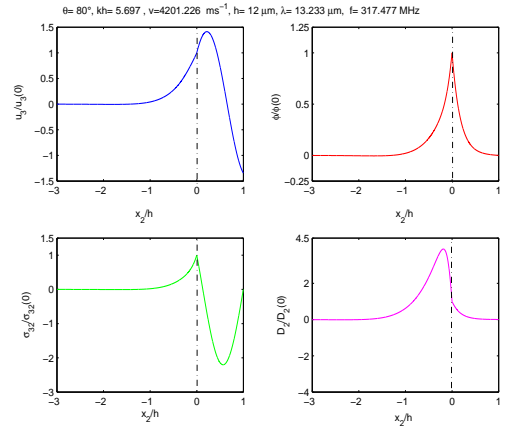


Figure 9: Amplitude des champs du mode 2 en fonction de la profondeur normalisée x_2/h pour une coupe d'angle $\theta = 80^\circ$.

Conclusion

Nous avons donné les grandes lignes d'une nouvelle approche analytique accompagnée de simulations numériques concernant la propagation des ondes de surface piézoélectriques à polarisation transversales (Ondes de Love). Les résultats préliminaires obtenus pourront servir de référence à la validation de modèles asymptotiques (couches ultra-minces). Par ailleurs ce travail pourra être généralisé aux structures multicouches déposées sur substrat. L'optimisation de l'angle de coupe ainsi que celle de l'épaisseur de couche en vue d'une sensibilité maximale aux perturbations de surface (gaz, liquide,...) sont des perspectives.

References

- [1] B. Collet and M. Destrade, "Love waves in piezoelectric layered structures," *soumis*.
- [2] W. Martienssen and H. Warlimont, Eds. *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*. Berlin: Springer, 2005.
- [3] M. Zgonik, R. Schlessner, I. Biaggio, E. Voit, J. Tscherry, and P. Günter, "Material constants of KNbO₃ relevant for electro- and acousto-optics," *J. Appl. Phys.*, vol. 74, p. 1287, 1993.
- [4] T. C. T. Ting, *Anisotropic elasticity: theory and applications*. New York: Oxford University Press, 1996.
- [5] Y. B. Fu, "An explicit expression for the surface-impedance matrix of a generally anisotropic incompressible elastic material in a state of plane strain," *Int. J. Non-linear Mech.*, vol. 40, pp. 229–239, 2005.
- [6] A. L. Shuvalov and A. G. Every, "Some properties of surface acoustic waves in anisotropic-coated solids, studied by the impedance method," *Wave Motion*, vol. 36, pp. 257–273, 2002.