

УДК 539.3

DOI: 10.32326/1814-9146-2025-87-4-514-526

**НЕКОТОРЫЕ АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУР
С ТОНКИМИ ПЛАСТИНАМИ ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ
НА ПОДЛОЖКЕ (0001) СРЕЗА α -САПФИРА***

© 2025 г.

**Калинчук В.В., Пименов М.С.,
Турчин А.С., Широков В.Б.**

*Южный научный центр Российской академии наук,
Ростов-на-Дону, Российская Федерация*

vkalin415@mail.ru

Поступила в редакцию 20.10.2025

Разработана перспективная для создания акустоэлектронных устройств широкого назначения математическая модель пьезоактивной гетероструктуры «пластинка W -среза кристалла танталата лития, нанесенная через буферный слой диоксида кремния на подложку (0001) среза α -сапфира», где W определяет нормаль к поверхности среза кристалла. Модель позволяет учитывать ориентацию среза кристалла, направление распространения сдвиговой горизонтально поляризованной волны, а также геометрические размеры составляющих элементов гетероструктуры. Это позволяет в широком диапазоне изменять ее параметры с целью достижения максимальных значений коэффициента электромеханической связи. Проведено исследование свойств гетероструктуры при наличии и в отсутствие буферного слоя. Для последнего случая анализ позволил определить наиболее оптимальные ориентацию среза пластинки танталата лития и его толщину, при которых возможно достижение оптимального уровня коэффициента электромеханической связи. Максимальное значение этого коэффициента при заданной ориентации среза и определенных геометрических параметрах гетероструктуры достигается путем выбора направления распространения волны. Исследование гетероструктуры с буферным слоем диоксида кремния показало, что его введение значительно увеличивает коэффициент электромеханической связи. Проведено детальное исследование распределения амплитуды акустической волны и плотности потока энергии по глубине гетероструктуры. Расчеты показали, что амплитуда волны и степень локализации упругой энергии в пьезоактивном слое зависят от наличия буферного слоя и от толщины пьезоактивного слоя. Это напрямую сказывается на значении коэффициента электромеханической связи. Его максимум наблюдается при небольшой толщине пьезоактивного слоя. Таким образом, существуют оптимальные значения параметров гетероструктуры, позволяющие достичь максимального значения коэффициента электромеханической связи. Проведенное исследование представляет интерес для разработчиков акустоэлектронных приборов и устройств широкого назначения.

* Выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 25-29-00863.

Ключевые слова: сдвиговые горизонтально поляризованные волны, гетероструктура с участием танталата лития, тонкие пластины W -среза кристалла танталата лития, (0001) срез α -сапфира, поверхностная акустическая волна, коэффициент электромеханической связи, плотность потока энергии.

Введение

В разработке устройств акустоэлектроники значительную роль играют элементы, использующие поверхностные акустические волны (ПАВ). Элементы с ПАВ активно применяются в интегральных устройствах микроэлектроники (фильтры, резонаторы, линии задержки) [1–3], в микроэлектромеханических системах [4], сенсорах [5, 6], акустооптических системах [7]. Миниатюризация акустоэлектронных устройств и повышение их рабочих частот приводит к необходимости использовать в качестве активных элементов тонкие пленки. Однако методы нанесения тонких пленок не позволяют выбирать ориентацию с наиболее эффективным возбуждением ПАВ. Кроме того, высокотемпературные методы нанесения пленок из-за различия коэффициентов теплового расширения у пленки и подложки приводят к большим деформациям и полидоменности пленок. Недавно появились методы переноса тонких монокристаллических пластинок ниобата лития [7–10] на подложки при низких температурах. Это позволяет ориентировать пластинки ниобата лития для использования направлений наиболее эффективного возбуждения ПАВ [7, 8, 11–14]. Танталат лития (LiTaO_3) наряду с ниобатом лития широко применяется в качестве активного элемента в интегральных устройствах микроэлектроники. Благодаря высоким пьезоэлектрическим показателям и стабильным свойствам этот материал используют в качестве подложек для устройств на основе ПАВ. Существенным преимуществом танталата лития по сравнению с ниобатом является его высокая механическая прочность, что имеет важное значение при применении планарных технологий для создания микроэлектронных систем. Новые методы переноса тонких монокристаллических пластинок на подложки при достаточно низких температурах [9, 10] позволяют ориентировать монокристаллические пластинки для использования направлений наиболее эффективного [13, 14] возбуждения ПАВ. Поверхностная волна локализуется вблизи поверхности гетероструктуры. Эффективность возбуждения волны зависит от величины локализации волны в сегнетоэлектрическом слое, это связано с материалом подложки. Поэтому для каждой гетероструктуры необходим анализ влияния ориентации и толщины активного слоя, материала подложки на эффективность возбуждения ПАВ. Такой анализ для гетероструктуры ниобат лития/кремний выполнен в [15]. В настоящей статье представлены результаты анализа акустических свойств гетероструктуры «пластинка W -среза кристалла танталата лития, нанесенная через буферный слой плавленого кварца на подложку (0001) среза α -сапфира» при различной толщине пластины танталата лития и фиксированной толщине диоксида кремния. Исследовалось влияние параметров гетероструктуры на эффективность возбуждения ПАВ, амплитуду смещений и распределение плотности потока энергии. Исследование показало, что наличие буферного слоя существенно увеличивает коэффициент электромеханической связи (КЭМС) гетероструктуры. Степень увеличения напрямую зависит от толщины пьезоактивного слоя. В частности, увеличение толщины пьезоактивного слоя при фиксированной толщине буферного слоя уменьшает КЭМС.

1. Формулировка задачи

В рассмотрение вводятся прямоугольная декартова система координат $x_1x_2x_3$ и совпадающая с ней в исходном состоянии кристаллографическая система координат XYZ [16]. Подложка (0001) среза монокристаллического сапфира ориентирована вдоль оси x_3 – тригональной оси кристалла. Ось x_1 лежит в плоскости симметрии и ортогональна оси x_3 . Ось x_2 ортогональна указанным осям и составляет с ними правую систему координат. Оси X, Y, Z – кристаллографические оси, связанные с направлениями $[10\bar{1}0], [\bar{1}2\bar{1}0], [0001]$ соответственно. Угол β – один из углов Эйлера, характеризует поворот пластинки вокруг оси X . Направление распространения поверхностной волны в 3D-расчетах – вдоль оси x_1 . Геометрия задачи представлена на рис. 1.

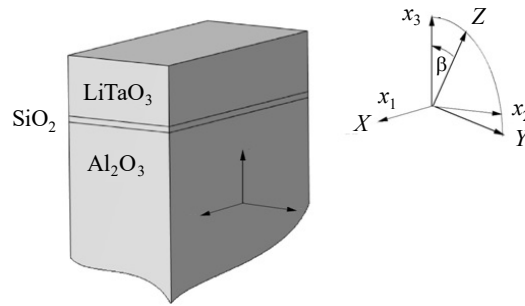


Рис. 1. Гетероструктура с танталатом лития и кристаллографические оси танталата лития

Рассматривается задача о возбуждении акустических волн на поверхности сегнетоэлектрической гетероструктуры, состоящей из пьезоэлектрической пластины танталата лития ($h_2 \leq x_3 \leq h_2 + h_1, |x_1|, |x_2| \leq \infty$), нанесенной на буферный слой диоксида кремния $0 \leq x_3 \leq h_2, |x_1|, |x_2| \leq \infty$. Последний лежит на поверхности подложки (0001) среза монокристаллического α -сапфира $x_3 \leq 0, |x_1|, |x_2| \leq \infty$, ориентированного вдоль тригональной оси кристалла. Движение гетероструктуры описывается уравнениями движения [17, 18]

$$\rho \frac{\partial^2 u_l^{(n)}}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{lm}^{(n)}}{\partial x_m}, \quad (1)$$

где $n = 1, 2, 3; l, m = 1, 2, 3$. Индексом $n = 1$ отмечены величины для пластины танталата лития, индексом $n = 2$ – для буферного слоя диоксида кремния, индексом $n = 3$ – для сапфировой подложки; $u_l^{(n)}$ – компоненты вектора смещения вдоль координатных осей x_l ; $\sigma_{lm}^{(n)}$ – напряжения на соответствующих плоскостях пластины. Уравнения (1) дополнены уравнениями квазистатики для электрической индукции

$$\frac{\partial D_m^{(n)}}{\partial x_m} = 0. \quad (2)$$

Выражения для компонент тензоров напряжений $T_l^{(1)}$ и компонент векторов индукции $D_m^{(1)}$ представляются формулами

$$\begin{aligned} T_i^{(n)} &= c_{ik}^{E(n)} S_k^{(n)} + e_{mi}^{(n)} \frac{\partial \varphi^{(n)}}{\partial x_m}, \\ D_m^{(n)} &= e_{ml}^{(n)} S_l^{(n)} - \epsilon_{ml}^{S(n)} \frac{\partial \varphi^{(n)}}{\partial x_l}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь по повторяющимся индексам подразумевается суммирование: $i, k = \overline{1, 6}$, $l, m = \overline{1, 2, 3}$. Для i, k в представлениях (3) используется нотация Фойгта [19]: $i \rightarrow ii$, $i = \overline{1, 2, 3, 4} \rightarrow 23, 5 \rightarrow 13, 6 \rightarrow 12$. Для напряжений приняты обозначения: $T_i^{(n)} = \sigma_{ii}^{(n)}$, $i = \overline{1, 2, 3}$, $T_4^{(n)} = \sigma_{23}^{(n)}$, $T_5^{(n)} = \sigma_{13}^{(n)}$, $T_6^{(n)} = \sigma_{12}^{(n)}$; для деформаций: $S_j^{(n)} = \partial u_j^{(n)} / \partial x_j$, $j = \overline{1, 2, 3}$ (нет суммирования), $S_4^{(n)} = \partial u_2^{(n)} / \partial x_3 + \partial u_3^{(n)} / \partial x_2$, $S_5^{(n)} = \partial u_1^{(n)} / \partial x_3 + \partial u_3^{(n)} / \partial x_1$, $S_6^{(n)} = \partial u_1^{(n)} / \partial x_2 + \partial u_2^{(n)} / \partial x_1$; $\varphi^{(n)}$ – электрический потенциал, $c_{ik}^{E(n)}$ – компоненты тензора упругости, $e_{mi}^{(1)}$ – электроупругие коэффициенты, $e_{mi}^{(2)} = e_{mi}^{(3)} = 0$, $\varepsilon_{ml}^{S(n)}$ – диэлектрическая проницаемость при постоянной деформации. Предварительные исследования показали, что, как и в случае ниобата лития [15], эффективность возбуждения поперечных упругих волн (SH-волн) намного выше эффективности возбуждения рэлеевских волн. В связи с этим далее рассматриваются сдвиговые горизонтально поляризованные волны, удовлетворяющие условиям:

$$u_2^{(n)} = u_2^{(n)}(x_1, x_3), \quad u_1^{(n)} = u_3^{(n)} = 0, \quad \partial / \partial x_2 = 0, \quad n = \overline{1, 2, 3}. \quad (4)$$

Поверхность гетероструктуры $x_3 = h_1 + h_2$ с нормалью x_3 предполагается свободной от механических напряжений: $T_k^{(1)}(x_1) = 0$, $|x_1| \leq \infty$, $k = \overline{3, 4, 5}$, колебания – установившимися по гармоническому закону. На границах пластинки – буферный слой ($x_3 = h_2$) и буферный слой – подложка ($x_3 = 0$) задаются условия равенства напряжений и смещений, а также электрических потенциалов и нормальных компонент векторов индукции:

$$u_m^{(1)}(h_2) = u_m^{(2)}(h_2), \quad \varphi^{(1)}(h_2) = \varphi^{(2)}(h_2), \quad (5)$$

$$T_k^{(1)}(h_2) = T_k^{(2)}(h_2), \quad D_3^{(1)}(h_2) = D_3^{(2)}(h_2),$$

$$u_m^{(2)}(0) = u_m^{(3)}(0), \quad \varphi^{(2)}(0) = \varphi^{(3)}(0), \quad (6)$$

$$T_k^{(2)}(0) = T_k^{(3)}(0), \quad D_3^{(2)}(0) = D_3^{(3)}(0).$$

На верхней поверхности пластинки $x_3 = h_1 + h_2$ рассмотрены два типа электрических условий:

– открытые

$$D_3^{(1)}(h_1 + h_2) = 0; \quad (7)$$

– закрытые

$$\varphi^{(1)}(h_1 + h_2) = 0. \quad (8)$$

Различие скоростей распространения ПАВ для этих двух случаев позволяет вычислить КЭМС по формуле

$$K = \sqrt{\frac{c_f^2 - c_g^2}{c_f^2}} \approx \sqrt{2 \frac{c_f - c_g}{c_f}}, \quad (9)$$

где c_f – скорость распространения ПАВ на электрически свободной поверхности (индекс f – free), c_g – скорость распространения ПАВ на закороченной (металлизированной и заземленной) поверхности (индекс g – ground). Вдоль направления распространения волны x_1 заданы периодические граничные условия. В конечно-элементной задаче вдоль оси x_2 заданы периодические условия с нулевым периодом или условия непрерывности, что не влияет на ПАВ. Размер подложки в численных

расчетах задан равным 150 мкм. Нижняя поверхность подложки заземлена. Далее рассмотрим особенности ПАВ на гетероструктурах $\text{LiTaO}_3//\text{SiO}_2//\text{Al}_2\text{O}_3$ с различными срезами пластинки танталата лития.

2. Влияние ориентации среза пластины LiTaO_3 на эффективность возбуждения ПАВ

Как уже отмечалось, КЭМС для рэлееской волны значительно меньше КЭМС сдвиговой волны. В связи с этим в настоящей статье рассматриваются только сдвиговые поверхностные волны. Значения величин материальных постоянных в уравнении (3) для танталата лития ($\rho = 7450 \text{ кг/м}^3$) представляются в виде таблицы [20]:

$$\begin{pmatrix} c^E (\text{ГПа}) & e^T \\ e (\text{Кл/м}^2) & \varepsilon/\varepsilon_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 232,97 & 46,89 & 80,23 & -11,03 \\ 46,89 & 232,97 & 80,23 & 11,03 \\ 80,23 & 52,91 & 275,36 & \\ -11,03 & 11,03 & & 93,90 \\ & & & 93,90 & -11,03 \\ & & & -11,03 & 93,04 \\ & & & 2,596 & -1,589 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1,589 & 0,082 \\ 1,589 & 0,082 \\ & 1,882 \\ 2,596 \\ & 2,596 \\ -1,589 \\ 40,9 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -1,589 & 1,589 & & 2,596 \\ 0,082 & 0,082 & 1,882 & \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 40,9 \\ & 40,9 \\ & & 43,3 \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Упругие константы для сапфира ($\rho = 3970 \text{ кг/м}^3$, $\varepsilon_{11}/\varepsilon_0 = \varepsilon_{22}/\varepsilon_0 = 9,4$, $\varepsilon_{33}/\varepsilon_0 = 11,5$) задаются таблицей [21]

$$c(\text{ГПа}) = \begin{pmatrix} 497,5 & 162,6 & 115,5 & 22,5 \\ 162,6 & 497,5 & 115,5 & -22,5 \\ 115,5 & 115,5 & 503,3 & \\ 22,5 & -22,5 & & 147,4 \\ & & & 147,4 & 22,5 \\ & & & 22,5 & 167,4 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Константы для прослойки из плавленого кварца имеют значения: $\rho = 2220 \text{ кг/м}^3$, $\varepsilon/\varepsilon_0 = 3,8$, $c_{11} = 78,22 \text{ ГПа}$, $c_{12} = 15,69 \text{ ГПа}$ [22].

На рис. 2 приведены результаты вычисления КЭМС для СН ПАВ на гетероструктуре $\text{LiTaO}_3//\text{SiO}_2//\text{Al}_2\text{O}_3$ при толщине пластинки танталата лития 1 мкм и толщине буферного слоя плавленого кварца 200 нм в зависимости от двух углов α и β . Угол β определяет ориентацию среза пластинки кристалла танталата лития, угол α – направление распространения волны в плоскости пластинки. Как следует из рисунка, максимум КЭМС достигается при $\alpha = 0$, $\beta = 63^\circ$. Поэтому в дальнейшем будем исследовать КЭМС для различных углов при направлении распространения волны вдоль оси x_1 .

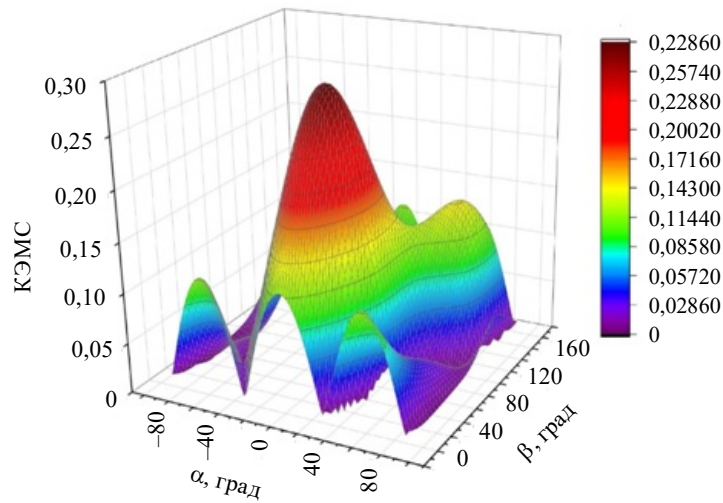


Рис. 2. Зависимость КЭМС сдвиговой ПАВ на поверхности гетероструктуры от эйлеровых углов

3. Эффективность возбуждения ПАВ в гетероструктуре $\text{LiTaO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$

Исследуется зависимость КЭМС гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ от толщины пластинки танталата лития h_1 , отнесенной к длине волны λ . На рис. 3 представлена зависимость фазовых скоростей ПАВ на свободной и закороченной поверхностях и КЭМС в зависимости от угла β для гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$. Здесь толщина пластинки $h_1 = 1$ мкм, длина волны $\lambda = 4$ мкм, то есть $h_1/\lambda = 0,25$. Результаты расчетов при других значениях толщины пластинки h_1 от 0,15 до 2 мкм, но при фиксированном $h_1/\lambda = 0,25$ практически не отличаются от результатов, приведенных на рис. 3.

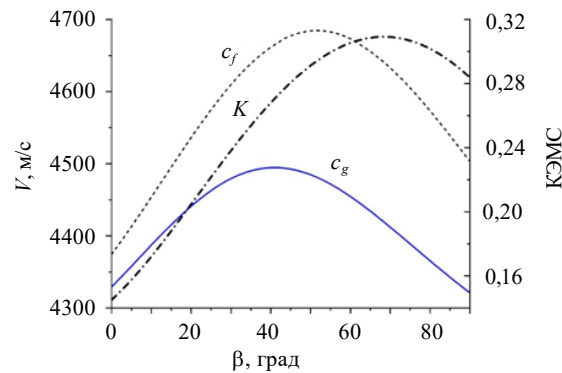


Рис. 3. Зависимости скоростей c_g на закороченной и c_f на свободной поверхностях гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ и КЭМС сдвиговой ПАВ от угла β

Как следует из рисунка, максимальное значение КЭМС в рассматриваемом случае достигается при $\beta = 69^\circ$ и равно 0,309. Изменение КЭМС в пределах одного процента вблизи максимума наблюдаются в интервале углов от 69 до 75° . Для угла $\beta = 67^\circ$ из этого интервала проведен расчет КЭМС для различных значений h_1/λ . Эти результаты приведены на рис. 4. Здесь изменение КЭМС вблизи максимума $K = 0,315$ в пределах одного процента наблюдаются в интервале h_1/λ от 0,27 до 0,37.

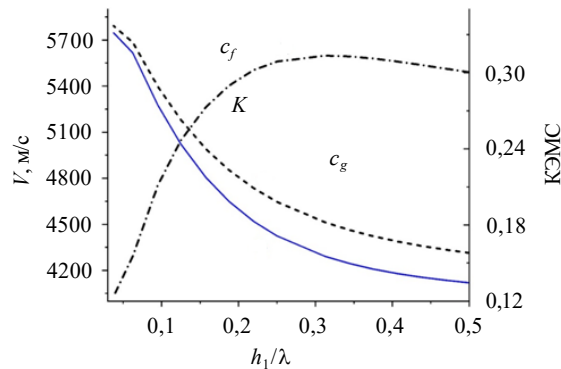


Рис. 4. Зависимости скоростей c_g на закороченной и c_f на свободной поверхностях гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ и КЭМС сдвиговой ПАВ от величины h_1/λ ($\beta = 67^\circ$)

4. Эффективность возбуждения ПАВ в гетероструктуре $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$

Введение буферного слоя существенно влияет на степени локализации ПАВ в сегнетоэлектрическом слое гетероструктуры и на КЭМС. В статьях [9, 10, 12] исследовано влияние параметров гетероструктуры с участием ниобата лития на эффективность возбуждения ПАВ. В настоящей статье исследуется степень локализации ПАВ при различной толщине пластины LiTaO_3 и фиксированной толщине SiO_2 в гетероструктуре $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$. Влияние буферного слоя на степень локализации волны иллюстрируют рис. 5–7, на которых представлены распределения амплитуды смещения u_2 (рис. 5) и плотности потока упругой энергии W , SH ПАВ (рис. 6, 7) в гетероструктуре $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ в зависимости от глубины при различных значениях длины волны λ таких, что $h_1/\lambda = 0,25$ (на рис. 5 это значение отмечено индексом κ_0). Цифрами 1, 2, 3 и 4 на всех рисунках отмечены кривые, соответствующие толщине пластины танталата лития 0,25, 0,5, 1,0 и 2,0 мкм соответственно. Толщина SiO_2 фиксирована и равна 0,2 мкм. Цифрой 5 отмечена кривая, соответствующая отсутствию буферного слоя. Интервалы $[\kappa_0, \kappa_1]$, $[\kappa_0, \kappa_2]$, $[\kappa_0, \kappa_3]$ и $[\kappa_0, \kappa_4]$ определяют размер фиксированной толщины слоя диоксида кремния при $h_1/\lambda = 0,25$ и различных значениях h_1 , равных 0,25; 0,5; 1,0 и 2,0 мкм соответственно.

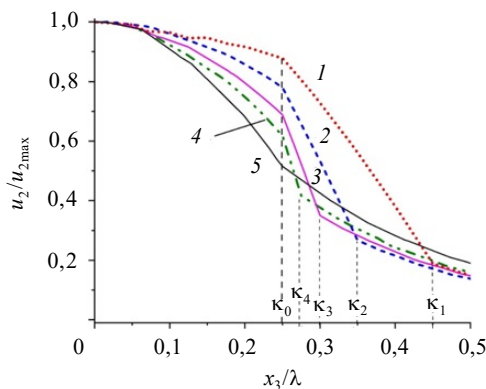


Рис. 5. Зависимость относительного смещения u_2 сдвиговой ПАВ для гетероструктур с танталатом лития от глубины x_3

Как следует из рисунка, наличие прослойки существенно увеличивает амплитуду ПАВ в сегнетоэлектрическом слое. Максимальная амплитуда наблюдается при минимальной толщине пластины, равной 0,25 мкм. Увеличение h_1 приводит к уменьшению амплитуды волны. Ее минимум наблюдается при максимальной толщине пластины, равной 2,0 мкм.

Аналогично ведет себя и плотность потока упругой энергии, распределение которого по толщине гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ в зависимости от глубины при различных значениях длины волны таких, что $h_1/\lambda = 0,25$, представлено на рис. 6 и 7 (фрагмент). На фрагменте (см. рис. 7) значение $h_1/\lambda = 0,25$ отмечено индексом κ_0 . Интервалы $[\kappa_0, \kappa_1]$, $[\kappa_0, \kappa_2]$, $[\kappa_0, \kappa_3]$ и $[\kappa_0, \kappa_4]$ определяются фиксированной толщиной прослойки относительно $h_1 = 0,25; 0,5; 1,0$ и $2,0$ мкм соответственно. Как следует из рис. 6, наличие прослойки существенно увеличивает степень локализации ПАВ в сегнетоэлектрическом слое. Максимальная локализация энергии наблюдается при толщине пластины, равной 0,25 мкм. Увеличение h_1 приводит к уменьшению плотности потока энергии волны. Ее минимум наблюдается при максимальной толщине пластины, равной 2,0 мкм.

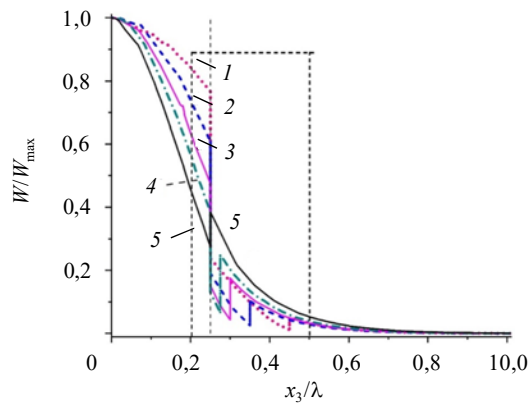


Рис. 6. Распределение плотности потока упругой энергии SH ПАВ для гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ по толщине при различных значениях h_1 , но фиксированных значениях $h_1/\lambda = 0,25$ и $h_2 = 0,2$ мкм

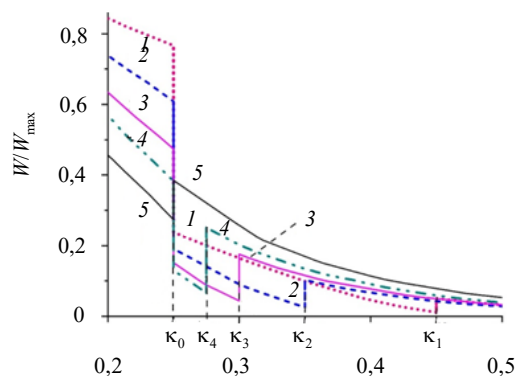


Рис. 7 (фрагмент). Распределение плотности потока упругой энергии SH ПАВ по толщине гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ при различных h_1 , но фиксированных значениях $h_1/\lambda = 0,25$ и $h_2 = 0,2$ мкм

На рис. 8 представлены графики зависимости КЭМС от угла β для гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ для различных толщин сегнетоэлектрического слоя танталата лития при фиксированных значениях $h_1/\lambda = 0,25$ и $h_2 = 0,2$ мкм. Цифрами 1, 2, 3, 4, 5, 6 и 7 отмечены кривые, соответствующие $h_1 = 0,5; 0,75; 1,0; 1,25; 1,75; 2,0$ мкм. Цифрой 8 отмечена кривая, соответствующая отсутствию прослойки ($h_2 = 0$).

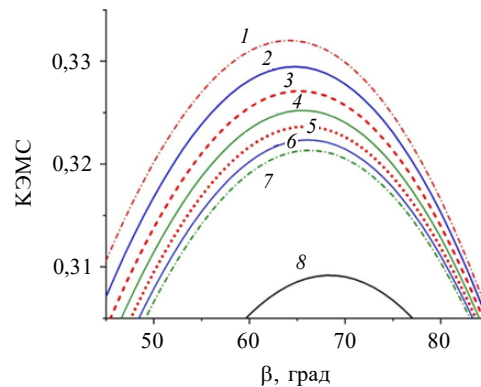


Рис. 8. Зависимость КЭМС сдвиговой ПАВ на поверхности гетероструктуры $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ от угла β

Как следует из графиков, наличие прослойки SiO_2 приводит к существенному увеличению КЭМС, значение которого зависит от толщины LiTaO_3 . В частности, при толщине пластины 0,5 мкм нанесение прослойки SiO_2 сразу повышает КЭМС на 20%. Дальнейшее увеличение толщины пластины ниобата лития приводит к уменьшению КЭМС. От наличия прослойки зависит также ориентация среза танталата лития, на котором достигается максимум КЭМС. В отсутствие прослойки он достигается при $\beta = 70^\circ$. Нанесение буферного слоя при $h_1 = 0,5$ мкм уменьшает этот угол на 6° . Дальнейшее увеличение толщины пластины LiTaO_3 увеличивает значение угла, на котором достигается максимум КЭМС, в пределах $65\text{--}68^\circ$.

Заключение

В конечно-элементной среде COMSOL-Multiphysics разработана математическая модель пьезоактивной гетероструктуры « W -срез $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ », где W определяет нормаль к поверхности кристалла. Модель позволяет учитывать геометрические размеры гетероструктуры, ориентацию среза кристалла и направление распространения волны. Для гетероструктуры « W -срез $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ » в широком диапазоне изменения параметров изучено влияние ориентации среза кристалла, направления распространения волны, а также геометрических размеров буферного слоя на КЭМС сдвиговых горизонтально поляризованных ПАВ. Пьезоактивная составляющая гетероструктуры представляет собой пластину W -среза танталата лития, нанесенную с буферным слоем плавленого кварца на подложку (0001) среза α -сапфира. Найдены ориентации срезов пластин танталата лития с максимальным КЭМС для возбуждения сдвиговых волн. Расчеты выполнены для различных толщин пластин при фиксированном отношении толщины пластины к длине волны, равному 0,25. При уменьшении толщины пьезоактивного слоя для гетероструктуры с прослойкой наблюдается увеличение КЭМС, что связано с локализацией упругой энергии в пьезоактивном слое. Для гетероструктуры без про-

слоей SiO_2 при фиксированном значении $h_1/\lambda = 0,25$ максимальное значение КЭМС равно 0,31 при угле $\beta = 69^\circ$. Изменение КЭМС вблизи максимума в пределах одного процента наблюдается в интервале углов от 60° до 75° . Для угла $\beta = 67^\circ$ из этого диапазона рассчитано поведение КЭМС при различных значениях h_1/λ . Изменения КЭМС вблизи максимума, равного 0,31, в пределах одного процента здесь наблюдаются в интервале h_1/λ от 0,27 до 0,37. Включение в гетероструктуру дополнительного диэлектрического слоя SiO_2 толщиной 200 нм приводит к увеличению КЭМС и сдвигу максимального значения в сторону меньших углов β . Это связано с увеличением локализации упругой энергии в пьезоактивном слое.

Список литературы

1. Matthews H. *Surface Wave Filters: Design, Construction and Use*. New York: Wiley, 1977. 521 p.
2. Морган Д. *Устройства обработки сигналов на поверхностных акустических волнах*. М.: Радио и связь, 1990. 416 с.
3. Орлов В.С., Бондаренко В.С. *Фильтры на поверхностных акустических волнах*. М.: Радио и Связь, 1984. 272 с.
4. Beeby S., Ensel G., White N.M., Kraft M. *MEMS Mechanical Sensors*. Boston–London: Artech House, 2004. 269 p.
5. Priya R.B., Venkatesan T., Pandlyarajan G., Pardya H.M. A short review of SAW sensors. *Journal of Environmental Nanotechnology*. 2015. Vol. 4. Iss. 4. P. 15–22. DOI:10.13074/jent.2015.12.154171.
6. Mandal D., Banerjee S. Surface acoustic wave (SAW) sensors: Physics, materials, and applications. *Sensors*. 2022. Vol. 22. Iss. 3. P. 1–38. <https://doi.org/10.3390/s22030820>.
7. Chen G., Li N., Ng J.D., Lin H.-L., Zhou Y., Fu Y.H., Ting Lee L.Y., Yu Y., Liu A.-Q., Danner A.J. Advances in lithium niobate photonics: development status and perspectives. *Advanced Photonics*. 2022. Vol. 4. Iss. 3, P. 034003-1 – 034003-43). DOI: 10.1117/1.AP.4.3.034003.
8. Solal M., Pastureaud T., Ballandras S., Aspar B., Biasse B., Daniau W., Hodé J.M., Calisti S., Laude V. Oriented lithium niobate layers transferred on 4" (100) silicon wafer for RF SAW devices. *IEEE Ultrasonics Symposium, Proceedings*. Munich, Germany. 2002. Vol. 1. P. 131–134. DOI: 10.1109/ULTSYM.2002.1193369.
9. Pastureaud Th., Solal M., Biasse B., Aspar BBriot., J.-b., Daniau W., Steichen W., Lardat R., Laude V., Laens A., Friedt J.-m., Ballandras S. High-frequency surface acoustic waves excited on thin-oriented LiNbO_3 single-crystal layers transferred onto silicon. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 2007. Vol. 54. Iss. 4. P. 870–876. DOI: 10.1109/TUFFC.2007.321.
10. Wang Jia L., Chen F. Ion-cut lithium niobate on insulator technology: Recent advances and perspectives. *Applied Physics Reviews*. 2021. Vol. 8. No 1. Article No011307. DOI: 10.1063/5.0037771.
11. Murakami S., Watanabe K., Takigawa R. Investigation of the interface between LiNbO_3 and Si fabricated via room-temperature bonding method using activated Si nano layer. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2023. Vol. 62. P. SG1041-1 – SG1041-5. DOI: 10.35848/1347-4065/acc2cb.
12. Hsu T.-H., Tseng K.-J., Li M.H. Large coupling acoustic wave resonators based on $\text{LiNbO}_3/\text{SiO}_2/\text{Si}$ functional substrate. *IEEE Electron Device Letters*. 2020. Vol. 41. Iss. 12. P. 1825–1828. DOI: 10.1109/LED.2020.3030797.
13. Zhang S., Lu R., Zhou H., Link S., Yang Y., Li Z., Huang K., Ou X., Gong S. Surface acoustic wave devices using lithium niobate on silicon carbide. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 2020. Vol. 68. Iss. 9. P. 3653–3666. DOI: 10.1109/TMTT.2020.3006294.
14. Wu S., Wu Z., Qian H., Bao F., Xu F., Zou J., Tang G. A high-performance NS-SAW resonator using 30° YX-lithium niobate. *Joint Conference of the European Frequency and Time Forum and IEEE International Frequency Control Symposium (EFTF/IFCS)*. Paris, France. 24–28 Apr. 2022. P. 1–4. DOI: 10.1109/EFTF/IFCS54560.2022.9850557.

15. Shirokov V.B., Pimenov M.S., Mikhailova I.B., Turchin A.S., Kalinchuk V.V. Features of excitation of acoustic waves on the surface of the LiNbO₃/Si heterostructure. *Science of the South of Russia*. 2024. Vol. 20. No 3. P. 7–15. DOI: 10.7868/S25000640240302.
16. Шаскольская М.П. *Кристаллография*. М.: Высшая школа, 1984. 376 с.
17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости*. М.: Наука, 1987. 248 с.
18. Викторов И.А. *Звуковые поверхностные волны в твердых телах*. М.: Наука, 1981. 288 с.
19. *Физическая акустика. Т. 1. Часть А. Методы и приборы ультразвуковых исследований*. Под ред. У. Мэзона. М.: Мир, 1966. 592 с.
20. Warner A.W., Оное М., Coquin G.A. Determination of elastic and piezoelectric constants for crystals in class (3m). *The Journal of the Acoustical Society of America*. 1967. Vol. 42. No 6. P. 1223–1231.
21. Gladden J.R., So Jin H., Maynard J.D., Saxe P.W., Le Page Y. Reconciliation of ab initio theory and experimental elastic properties of Al₂O₃. *Applied Physics Letters*. 2004. Vol. 85. No 3. P. 392–394. DOI: 10.1063/1.1773924.
22. *Акустические кристаллы*. Под ред. М.П. Шаскольской. М.: Наука, 1982. 632 с.

References

1. Matthews H. *Surface Wave Filters: Design, Construction and Use*. NewYork. Wiley. 1977. 521 p.
2. Morgan D. *Surface Acoustic Wave Filters*. Amsterdam. London. Academic Press. 2007. 429 p.
3. Orlov V.S., Bondarenko V.S. *Filtry na poverkhnostnykh akusticheskikh volnakh [Filters on Surface Acoustic Waves]*. Moscow. Radio i Svyaz Press. 1984. 272 p. (In Russian).
4. Beeby S., Ensel G., White N.M., Kraft M. *MEMS Mechanical Sensors*. Boston. London. Artech House. 2004. 269 p.
5. Priya R.B., Venkatesan T., Pandlyarajan G., Pardya H.M. A short review of SAW sensors. *J. Environ. Nanotechnol.* 2015. Vol. 4. Iss. 4. P. 15–22. DOI:10.13074/jent.2015.12.154171.
6. Mandal D., Banerjee S. Surface acoustic wave (SAW) sensors: Physics, materials, and applications. *Sensors*. 2022. Vol. 22. Iss. 3. P. 1–38. <https://doi.org/10.3390/s22030820>.
7. Chen G., Li N., Ng J.D., Lin H.-L., Zhou Y., Fu Y.H., Ting Lee L.Y., Yu Y., Liu A.-Q., Danner A.J. Advances in lithium niobate photonics: development status and perspectives. *Adv. Photonics*. 2022. Vol. 4. Iss. 3. P. 034003-1–034003-43). DOI: 10.1117/1.AP.4.3.034003.
8. Solal M., Pastureauud T., Ballandras S., Aspar B., Biasse B., Daniau W., Hodé J.M., Calisti S., Laude V. Oriented lithium niobate layers transferred on 4" (100) silicon wafer for RF SAW devices. *IEEE Ultrasonics Symposium: Proceedings*. Munich, Germany. 2002. Vol. 1. P. 131–134. DOI: 10.1109/ULTSYM.2002.1193369.
9. Pastureauud Th., Solal M., Biasse B., Aspar BBriot, J.-b., Daniau W., Steichen W., Lardat R., Laude V., Laens A., Friedt J.-m., Ballandras S. High-frequency surface acoustic waves excited on thin-oriented LiNbO₃ single-crystal layers transferred onto silicon. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 2007. Vol. 54. Iss. 4. P. 870–876. DOI: 10.1109/TUFFC.2007.321.
10. Wang Jia L., Chen F. Ion-cut lithium niobate on insulator technology: Recent advances and perspectives. *Appl. Phys. Rev.* 2021. Vol. 8. No 1. Article No011307. DOI: 10.1063/5.0037771.
11. Murakami S., Watanabe K., Takigawa R. Investigation of the interface between LiNbO₃ and Si fabricated via room-temperature bonding method using activated Si nano layer. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2023. Vol. 62. P. SG1041-1 – SG1041-5. DOI: 10.35848/1347-4065/acc2cb.
12. Hsu T.-H., Tseng K.-J., Li M.H. Large coupling acoustic wave resonators based on LiNbO₃/SiO₂/Si functional substrate. *IEEE Electron Device Letters*. 2020. Vol. 41. Iss. 12. P. 1825–1828. DOI: 10.1109/LED.2020.3030797.
13. Zhang S., Lu R., Zhou H., Link S., Yang Y., Li Z., Huang K., Ou X., Gong S. Surface acoustic wave devices using lithium niobate on silicon carbide. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 2020. Vol. 68. Iss. 9. P. 3653–3666. DOI: 10.1109/TMTT.2020.3006294.

14. Wu S., Wu Z., Qian H., Bao F., Xu F., Zou J., Tang G. A high-performance NS-SAW resonator using 30° YX-lithium niobate. *Joint Conference of the European Frequency and Time Forum and IEEE International Frequency Control Symposium (EFTF/IFCS)*. Paris, France. 24–28 Apr. 2022. P. 1–4. DOI: 10.1109/EFTF/IFCS54560.2022.9850557.
15. Shirokov V.B., Pimenov M.S., Mikhailova I.B., Turchin A.S., Kalinchuk V.V. Features of excitation of acoustic waves on the surface of the LiNbO₃/Si heterostructure. *Science of the South of Russia*. 2024. Vol. 20. No 3. P. 7–15. DOI: 10.7868/S25000640240302.
16. Shaskolskaya M.P. *Kristallografiya [Crystallography]*. Moscow. Vysshaya shkola Publ. 1984. 376 p. (In Russian).
17. Landau L., Pitaevskii L., Kosevich A., Lifshitz E. *Theory of Elasticity*. Vol. 7. Elsevier Science. 2012. [Online]. <https://books.google.ru/books?id=NXRaWJb4HdkC>.
18. Viktorov I.A. *Zvukovye poverkhnostnye volny v tverdykh telakh [Sound Surface Waves in Solids]*. Moscow. Nauka Publ. 1981. 288 p. (In Russian).
19. *Physical Acoustics. Principles and Methods*. Eds. W.P. Mason, R.N. Thurstons. New York. Academic Press. 1981. 390 p.
20. Warner A.W., Onoe M., Coquin G.A. Determination of elastic and piezoelectric constants for crystals in class (3m). *The Journal of the Acoustical Society of America*. 1967. Vol. 42. No 6. P. 1223–1231.
21. Gladden J.R., So Jin H., Maynard J.D., Saxe P.W., Le Page Y. Reconciliation of ab initio theory and experimental elastic properties of Al₂O₃. *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 85. No 3. P. 392–394. DOI: 10.1063/1.1773924.
22. *Akusticheskie kristally [Acoustic Crystals]*. Ed. M.P. Shaskolskaya. Moscow. Nauka Publ. 1982. 632 p. (In Russian).

SOME ACOUSTIC PROPERTIES OF HETEROSTRUCTURES WITH THIN LITHIUM TANTALATE PLATES ON A (0001)-CUT α -SAPPHIRE SUBSTRATE*

Kalinchuk V.V., Pimenov M.S., Turchin A.S., Shirokov V.B.

*Southern Scientific Center of the Russian Academy of Sciences,
Rostov-on-Don, Russian Federation*

vkalin415@mail.ru

Received by the Editor 2025/10/20

A promising mathematical model for the creation of wide-purpose acoustoelectronic devices has been developed for a piezoactive heterostructure consisting of a W -cut lithium tantalate crystal plate deposited through a silicon dioxide buffer layer onto a (0001)-cut α -sapphire substrate, where W defines the normal to the crystal cut surface. The model takes into account the crystal cut orientation, the direction of propagation of a horizontally polarized shear wave, and the geometric dimensions of the heterostructure's constituent elements. This allows for a wide range of parameter variations to achieve maximum values of the electromechanical coupling coefficient. The heterostructure's properties have been studied with and without a buffer layer. For the latter case, the analysis allowed for determining the optimal orientation of the lithium tantalate plate cut and its thickness, which would ensure the optimal level of electromechanical coupling. The maximum value of this coefficient, for a given cut orientation and specific geometric parameters of the heterostructure, is achieved by selecting the wave propagation direction. A study of a heterostructure with a silicon dioxide buffer layer revealed that its introduction significantly increases the electromechanical coupling coefficient. A detailed study of the

* The research was supported by Russian Science Foundation (project No 25-29-00863).

acoustic wave amplitude and energy flux density distribution across the heterostructure's depth was conducted. Calculations revealed that both the wave amplitude and the degree of elastic energy localization in the piezoactive layer depend on the presence of the buffer layer and the thickness of the piezoactive layer, which directly affects the electromechanical coupling coefficient. Its maximum is observed at a small piezoactive layer thickness. Thus, optimal heterostructure parameter values exist that allow for achieving the maximum electromechanical coupling coefficient. This study is of interest to developers of acoustoelectronic devices and general-purpose devices. achieving maximum EMCC. This study is of interest to developers of acoustoelectronic devices and general-purpose devices.

Keywords: shear, horizontally polarized waves, lithium tantalate-based heterostructure, thin *W*-cut lithium tantalate crystal slabs, (0001)-cut α -sapphire, surface acoustic wave, electro-mechanical coupling coefficient, energy flux density.