

The Piezoelectric Analysis of SAW Hydrogen Sensor Based on ANSYS*

DONG Ningning, YIN Chenbo*, ZHANG Zili, ZHU Bin

(School of Mechanical and Power Engin., Nanjing University of Technology, Nanjing 210009, China)

Abstract: The structure of the surface acoustic wave (SAW) sensor was designed. The finite element model of SAW hydrogen sensor was developed and simulated using ANSYS platform. As the sensor was exposed to $1\ 000 \times 10^{-6}$ hydrogen, the thickness, the density and the elastic modulus of the Pd film have changed correspondingly, which lead to the change of output voltage and frequency. When the thickness of Pd film increased, transmission of SAW in the piezoelectric substrate slowed down, the frequency became smaller and the amplitude of the output voltage increased; when the density decreased, the amplitude of the output voltage became smaller; when the elastic decreased, the amplitude of output voltage increased and have a slight delay.

Key words: surface acoustic wave (SAW); Hydrogen sensor; ANSYS; piezoelectric analysis

EEACC: B50 doi:10.3969/j.issn.1004-1699.2011.07.004

基于 ANSYS 的声表面波氢气传感器压电分析*

董宁宁, 殷晨波*, 张子立, 朱斌

(南京工业大学 机械与动力工程学院, 南京 210009)

摘要: 设计了声表面波氢气传感器的结构, 利用 ANSYS 软件建立了声表面波传感器的有限元模型, 并对 SAW 氢气传感器进行了仿真, 最后用数据处理软件 Origin 分析了敏感薄膜的材料参数对传感器输出的影响。传感器通入 $1\ 000 \times 10^{-6}$ 的氢气后, 钯膜的厚度、密度、弹性模量等发生了相应改变, 进而导致输出电压、频率等发生改变。分析表明: 钯膜的厚度增大时, 声表面波在压电基底上的传播速度减慢, 频率变小, 输出端电压的幅值增大; 钯膜的密度变小时, 输出端电压的幅值变小; 钯膜的弹性模量变小时, 输出端电压的幅值增大, 时间上略有延迟。

关键词: 声表面波; 氢气传感器; ANSYS; 压电分析

中图分类号: TP212.2

文献标识码: A

文章编号: 1004-1699(2011)07-0950-04

声表面波 (Surface Acoustic Wave, SAW) 是一种能在压电衬底表面产生并传播的机械波 (或称弹性波), 在介质表面进行换能和传播, 其振幅随深入压电衬底的深度按指数规律衰减。SAW 传感器具有体积小、分辨率高、成本低、灵敏度高, 易实现微型化、集成化和智能化, 易与计算机接口并能实现远距离检测等多种优点。经过数十年的研究, H_2 、 NO_2 、CO 等 SAW 气体传感器被越来越广泛地应用在有害气体检测、临床分析等领域, 在面向产业化方面取得了实质性的进展^[1]。目前常用的 SAW 气体传感器有两种: 谐振器型与延迟线型^[2-6]。

ANSYS 作为一种商业有限元分析软件由于它具有良好的用户界面, 强大的求解器和通用性等优点而

成为进行 SAW 器件仿真的一个热点^[2-3]。本文采用 ANSYS 仿真中的稀疏矩阵法分别分析了钯膜的厚度、密度和弹性模量等材料参数对输出结果的影响。

1 SAW 氢气传感器的压电分析

1.1 SAW 氢气传感器的结构及原理

建模过程中, 我们设传感器的高度为 $138\ \mu\text{m}$, 长度和宽度都为 $523.2\ \mu\text{m}$ 。钯膜放置在压电材料的中央, 尺寸为 $65\ \mu\text{m} \times 138\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$ 。输入和输出端的叉指形电极分布在钯膜的两侧, 叉指电极的周期为 $46\ \mu\text{m}$, 等于声表面波在压电材料 PZT4 中传播的波长, 声表面波在两端电极间的传播距离等于三个波长的长度 $138\ \mu\text{m}$ 。声波在 PZT4 中的传播速度为 $4\ 600$

m/s,正弦电压的频率取 100 MHz,由此得出声表面波的波长为 46 μm 。钯膜的厚度应远远小于波长,取 1 μm 。传感器的几何模型如图 1 所示。

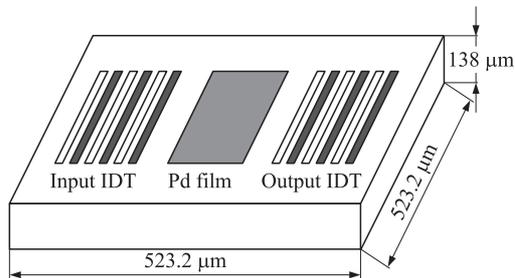


图1 SAW 氢气传感器的几何模型

SAW 器件中应用的 IDT 是 SAW 传感器中重要的组成部分,它是通过淀积、光刻、刻蚀等工艺制作在压电材料上的状如人手交叉的一系列金属电极,通常采用金、银、铜、铝等材料。当输入电信号施加到汇流条上时,每个指条对之间有一定的电压,这个电压在压电材料上产生与指条长度方向垂直的电场^[7]。由于逆压电效应,压电基底表层在电场方向产生压缩或拉伸变形,如果输入电信号是交变电压,两根相邻指条之间的压电基底表层会交替压缩和拉伸的弹性振动,此弹性振动在基底表层的传播就形成了弹性表面波。

1.2 SAW 传感器的压电分析方法

SAW 氢气传感器中,压电基底采用 PZT4 (锆钛酸铅),上世纪五十年代发现了锆钛酸铅(PZT)为基的三元系、四元系,满足了对压电陶瓷的不同的特殊要求。本文在仿真分析时采用的敏感薄膜为金属钯^[8]。为忽略两端电极间的电磁溃通,简化计算,叉指电极采用无质量的形式,直接用压电基底上相应的节点用作电极,将这些节点的电压自由度分别耦合在一起,向其中的某一个节点施加电压即可^[9]。压电分析可使用的耦合单元有 SOLID5、PLANE13 和 SOLID98 单元。SOLID98 单元是一种 10 节点的六边形单元^[10],本文所用基底形状是长方体,所以划分网格时选用 SOLID98 单元进行压电耦合场分析。同时,敏感薄膜采用同样形状的结构分析单元 SOLID92,这样更易于两种材料的结合。先将两种材料用 GLUE 命令粘贴在一起,然后划分网格。

划分网格后的 SAW 传感器及由节点自由度耦合的叉指电极分别如图 2 和图 3 所示。

Ansys 中的压电分析具体的分为三个步骤:预处理、求解和后处理。在做瞬态分析前,需指定瞬态积分参数,对于压电分析,二阶瞬态积分参数 ALPHA=0.25, DELTA=0.5,一阶瞬态积分参数 THETA=0.5,所用命令为 TINTP,0.25,0.5,0.5^[11]。

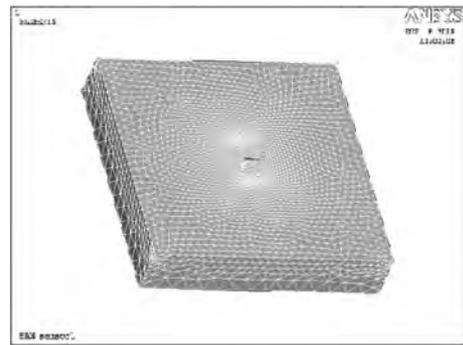


图2 划分网格后的 SAW 氢气传感器

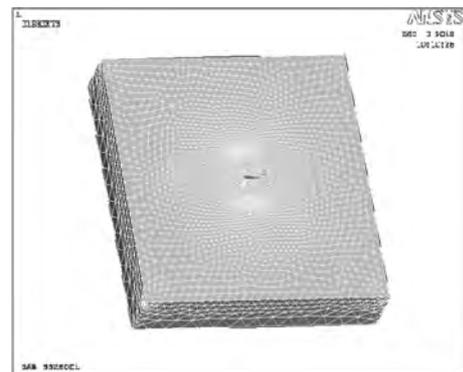


图3 耦合了叉指电极的网格图

将压电基底的下表面固定,对电极节点施加正弦电压,根据对传感器频率分析的结果,正弦电压的频率为 100 MHz,每个载荷步的时间长度为 0.9 ns^[9]。由于载荷步较多,有 220 多步,而且载荷是随时间变化的函数,因此采用循环的方式进行加载和求解。求解时我们选用稀疏矩阵法,在时间历程后处理中,通过 NSOL 命令得到输出端节点的电压和位移随时间的变化。

2 仿真结果及分析

由 SAW 传播理论可知,声表面波振幅最强的部分是压电基片表面 1~2 波长的深度,随着压电基片深度加大振幅减小,其幅值大小与电场分布强弱成正比,仿真电场在压电基片表面分布最强。图 4 为声表面波在压电基底表面的传播情况。



图4 声表面波在压电基底上的传播

在氢气体积分数小于3%的情况下,钽膜由于吸收了氢气,晶格膨胀,体积增大了10%,密度从 $12\,023\text{ kg/m}^3$ 减少到 $11\,680\text{ kg/m}^3$;钽膜由 α 相转变到 β 相,杨氏弹性模量减少了14%,由 $1.21\times 10^{11}\text{ Pa}$ 变为 $1.04\times 10^{11}\text{ Pa}$ 。当通入 $1\,000\times 10^{-6}$ 的氢气时,改变相应的参数,将得到的数据保存,然后用数据处理软件Origin7.0进行进一步的处理,得到钽膜的厚度、密度以及弹性模量分别对输出结果的影响。

2.1 钽膜的厚度对输出的影响

为得到钽膜的厚度改变对输出电压的影响,取以下两个阶段的结果进行对比:①没有氢气时的原始状态,如图5中实线所示;②吸收氢气后,只改变钽膜的厚度,不改变其密度和弹性模量,如图5中虚线所示。

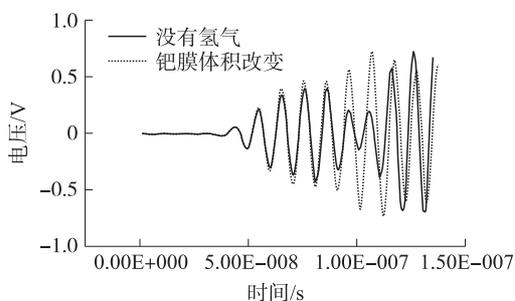


图5 没有氢气和只改变钽膜厚度时输出端电压的比较

由图5可以看出,钽膜厚度的增大使声表面波的传播延迟,延迟时间为 1.8 ns ,并且使输出端电压的幅值明显增大,两个仿真阶段中电压幅值的最大差为 0.53 V 。两个阶段的输出波形在时间上出现延迟最早是在仿真开始 105 ns 后,也就是该声表面波氢气传感器的响应时间为 100 ns 左右。

2.2 钽膜的密度对输出的影响

吸收氢气后,只改变钽膜的厚度,不改变其密度和弹性模量,如图6中实线所示;钽膜吸收了氢气,改变其厚度和密度,不改变弹性模量,如图6中虚线所示。

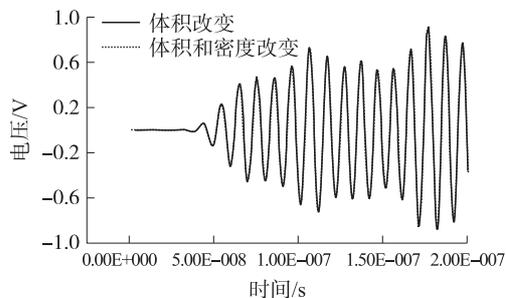


图6 只有钽膜的体积改变和体积与密度同时改变时,输出端电压的比较

由图6可以看出,钽膜的密度变小后,输出端电压的幅值变小,最大下降了 $0.005\,28\text{ V}$ 。而输出波形在时间上并没有延迟,而是与相同厚度下的输出

波形基本吻合。

2.3 钽膜的弹性模量对输出的影响

钽膜吸收了氢气,改变其厚度和密度,不改变弹性模量,如图7中实线所示;同时改变钽膜的厚度、密度和弹性模量,如图7中虚线所示。

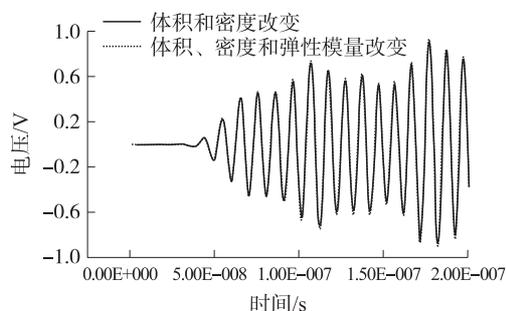


图7 钽膜的体积和密度改变与钽膜的全部参数改变时输出端的电压

由图7可以看出这两个仿真阶段输出端电压的正峰值、峰值差和峰值出现时间差,钽膜的弹性模量减小时,输出端电压的幅值增大,最大增加了 0.022 V 左右,在时间上与弹性模量没有改变时基本吻合,略有滞后。

3 结语

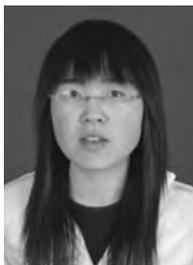
通过以上分析可以得出,钽膜吸收氢气后,导致其材料属性发生一系列的变化,分析钽膜的每个参数改变对声表面波的影响,发现每个参数的改变对其影响并不是朝相同方向的:体积增大使声表面波的传播速度变慢,而弹性模量变小使其传播速度变快;体积增大以及弹性模量变小都是输出电压的幅值变大,而密度的减小使峰值变小。也就是说,如果薄膜的密度和弹性模量朝不同的方向变化,传感器的敏感性大大提高。分析钽膜参数的改变对声表面波传播和输出结果的影响,可以为改进敏感薄膜的性能提供有益的借鉴。

参考文献:

- [1] Wen C B, Zhu C C, Ju Y F, et al. A Novel NO_2 Gas Sensor Using Dual Track SAW Device [J]. Sensors and Actuators A-Physical, 2010:168-173.
- [2] KANNAN T. Finite Element Analysis of Surface Acoustic Wave Resonators [D]. University of Saskatchewan, 2006:15-112.
- [3] Ippolito S J, Kalantar-zadeh K, Powell D A, et al. A 3-Dimensional Finite Approach for Simulating Acoustic Wave Propagation in Layered SAW Devices [J]. Proceedings of the IEEE Ultrasonics Symposium, 2003:303-306.
- [4] 周俊静,殷晨波,涂善东,等. SAW 氢传感器的研究进展 [J]. 传感器与微系统, 2007, 26(3):1-3.
- [5] 杨明艳,毛伟,贝伟斌,等. 声表面波 DDT 有机氯农药免疫生物传感器的研究 [J]. 传感技术学报, 2007, 20(1):1-4.
- [6] 施文康,刘艾. 延迟线型声表面波传感器的研究 [J]. 传感技术

学报,1999,12(4):337-340.

- [7] Hejczyk T, Urbanczyk M, Jakubik WP. Analytical Model of Semiconductor Sensor Layers in SAW Gas Sensors [J]. Acta Physica Polonica A,2010;1148-1152.
- [8] Ramakrishnan N, Nemade HB, Palathinkal RP. Finite Element Method Simulation of a Surface Acoustic Wave Hydrogen Sensor with Palladium Nano-Pillars as Sensing Medium [J]. Sensor Letters,2010;824-828.
- [9] Atashbar M Z, Bazuin B J, Simpeh M, et al. 3D FE Simulation of H₂ SAW Gas Sensor [J]. Sensors and Actuators B,2005;111-112;213-218.
- [10] ANSYS Coupled-Field Analysis Guide, Release 8.0, ANSYS Inc.
- [11] 祝效华,于志祥,等. ANSYS 高级工程有限元分析范例精选 [M]. 北京:电子工业出版社,2004.



董宁宁(1987-),女,南京工业大学机械与动力工程学院硕士研究生,主要研究方向为微氢气传感器,机械设计及理论, dongningning00 @ yahoo.com.cn;



殷晨波(1963-),男,教授,博士生导师。机械与动力工程学院副院长,车辆与工程机械研究所所长。主要研究方向为工程机械数字化创新设计与制造,氢能安全技术,风力发电叶片制造装备技术,汽车结构轻量化设计,汽车覆盖件冲压成形与回弹仿真等。