

Исследование параметров поверхностных акустических волн в слоистой структуре нитрид алюминия/алмаз

А. С. Козлов, А. С. Койгеров

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

akozlofs@yandex.ru

Аннотация. В данной работе представлено исследование параметров акустических волн в слоистой структуре нитрид алюминия/алмаз. Подложки на основе алмаза отлично подходят для устройств на поверхностных акустических волнах (ПАВ), благодаря высокой скорости распространения акустической волны в данном материале. Благодаря сильным пьезоэлектрическим свойствам нитрида алюминия, появляется возможность для создания высокочастотных устройств. Для оценки параметров поверхностных акустических волн в слоистой структуре нитрид алюминия/алмаз было проведено моделирование в среде COMSOL Multiphysics, представлена визуализация полученных данных, рассчитана фазовая скорость волны и получены коэффициент электромеханической связи при разных толщинах слоев структуры.

Ключевые слова: поверхностные акустические волны; алмаз; нитрид алюминия; акустоэлектроника; COMSOL

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время устройства на ПАВ (резонаторы, линии задержки, фильтры и т. д.) активно используются в составе современного тракта обработки сигнала.

Применение слоистых структур, новых материалов и различных конфигураций электродов позволяет достичь уменьшения габаритов устройства, а также увеличить его рабочие частоты, на данный момент вплоть до 5 ГГц.

Акустоэлектронные устройства представляют собой пьезоэлектрическую подложку с металлической структурой (встречно-штыревые преобразователи), на поверхности. Металлическая структура, на поверхности является периодичной, так что для оценки параметров поверхностных акустических волн устройства используют тестовую ячейку (рис. 1а), размер которой составляет один период встречно-штыревых преобразователей (ВШП).

Использование алмаза в качестве подложки для устройства на ПАВ позволяет достичь высоких значений рабочих частот прибора из-за высокой скорости распространения акустической волны в данном материале. В качестве пьезоэлектрического слоя в устройствах с алмазной подложкой чаще всего используют оксид цинка [1], но в данной работе в качестве пьезоэлектрического слоя был выбран нитрид алюминия, т. к. этот материал имеет большую скорость распространения акустической волны, а также более предпочтительные электрические, механические и химические свойства [2–4].

Работа пакета мультифизического моделирования COMSOL Multiphysics основана на методе конечных элементов (МКЭ). Метод конечных элементов (МКЭ) представляет собой численный метод, основанный на разделении исследуемого объекта на несколько элементов и последующем приближенном описании свойств в каждой из этих областей с использованием определенных констант и математических соотношений для определения характеристик каждого элемента. МКЭ является наиболее подходящим методом для моделирования физических процессов в твердых телах. Использование средств моделирования при разработке устройства позволяет тестировать различные комбинации материалов без изготовления физического прототипа. Набор инструментов COMSOL Multiphysics позволяет использовать его для расчета свойств пьезоэлектрических кристаллов для устройств на ПАВ [5, 6].

Целью работы является расчет скорости распространения волны на свободной и металлизированной поверхности, расчет коэффициента электромеханической связи (КЭМС), расчет эффективного значения КЭМС в слоистой структуре нитрид алюминия/ алмаз при разных значениях толщины слоя металла и пьезоэлектрического материала.

II. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ В COMSOL MULTIPHYSICS

На рис. 1а представлена тестовая ячейка, которая служит для оценки параметров, кроме того, в COMSOL имеется возможность моделирования полноценных устройств на ПАВ. Пример численного расчета параметров акустических волн в COMSOL представлен в работе [7].

Пьезоэлектрические и упругие свойства среды распространения акустической волны связываются системой уравнений [8]:

$$\begin{cases} T_{ij} = C_{ijkl}S_{kl} - e_{kij}E_k \\ D_i = \varepsilon_{ij}E_j + e_{ijk}S_{jk}, \end{cases} \quad (1)$$

где T – тензор напряжения; S – тензор деформаций; C – тензор модуля упругости; e – тензор пьезомодуля; ε – тензор модуля диэлектрической проницаемости; E – векторы напряженности электрического поля D – вектор индукции электрического поля [7].

Для модели необходимо задать такие условия как: геометрия, свойства материала, сетку и граничные условия.

Геометрия. Рабочее пространство ограничено по трем осям:

- по оси X находится направление распространения ПАВ, и рабочее пространство ограничивается до длины волны λ ($\lambda = 2$ мкм);
- по оси Y ограничение в $\lambda/4$ с применением граничных условий;
- по оси Z рабочая область ограничена до 8λ , т. к. ПАВ распространяется в приповерхностном слое.

Ω_2 – область металлических электродов; Ω_4 – область пьезоэлектрика; Ω_1 – область не пьезоэлектрической подложки; Ω_3 – область идеально согласованного слоя, поглощающего волны, распространяющиеся вглубь подложки.

Свойства материала. Константы для материалов электродов и пьезоэлектрического материала были взяты из встроенной библиотеки COMSOL, константы алмазной подложки были взяты из работы [2].

Сетка. Внешний вид построенной сетки представлен на рис. 2г. Плотность сетки составляет 12 элементов на длину волны.

Граничные условия. Они необходимы для корректного моделирования и ускорения расчетов. Т.к в работе рассматривается не полноценное устройство, а лишь тестовая ячейка, то граничные условия будут следующие:

- механические условия (рис. 1):
 - 1, 2, 3, 4 – периодические;
 - 5 – свободные;
 - 6 – фиксированные;
- электрические условия (рис. 1):
 - 1, 2, 3, 4 – периодические;
 - 5, 6 – нулевой заряд.

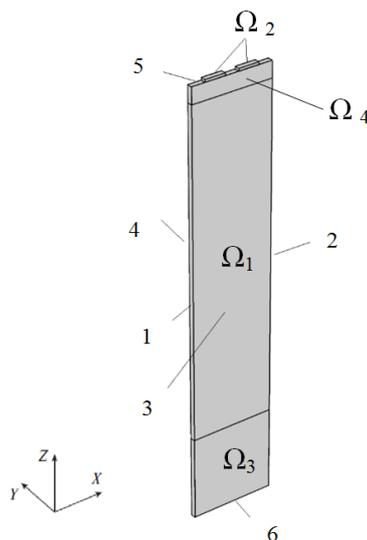


Рис. 1. Тестовая ячейка одного периода ВПП

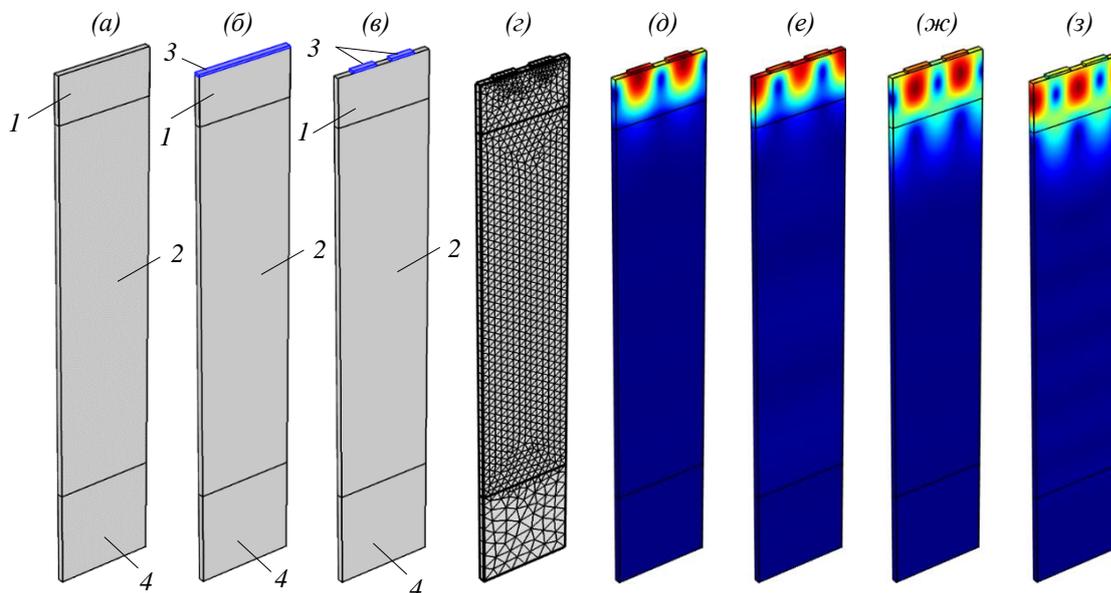


Рис. 2. Тестовые ячейки для анализа параметров ПАВ на свободной поверхности (а), под металлизированной поверхностью (б), под металлическими электродами (в), сетка (г), результат численного анализа первой собственной частоты (волна Рэлея) (д), второй собственной частоты (волна Рэлея) (е), результат численного анализа первой собственной частоты (мода Сезава) (ж), второй собственной частоты (мода Сезава) (з). Геометрия: 1 – пьезоэлектрик, 2 – не пьезоэлектрическая подложка, 3 – металл, 4 – идеально согласованный слой.

III. РАСЧЕТ ПРОСТЫХ ТЕСТОВЫХ ЯЧЕЕК

В COMSOL Multiphysics есть возможность проводить анализ в области собственных частот, а также анализ полной проводимости в заданном частотном диапазоне [7].

В анализе рассматривались волна Рэлея (рис. 2 д,е) и мода Сезава (рис. 2 ж,з).

А. Анализ в области собственных частот

Для данного анализа использовались тестовые ячейки с геометрией с рис. 2а для свободной поверхности и с геометрией с рис. 2б для металлизированной поверхности ($h(Al)/\lambda=0.01\%$, где $h(Al)$ – толщина металлизации)

Расчет в данной области частот осуществляется с помощью решателя *Eigenfrequency*. По завершению на основе полученных частот рассчитывается фазовая скорость на свободной поверхности и на поверхности под металлизацией с толщиной близкой к нулю, а также коэффициент электромеханической связи.

Параметр фазовой скорости рассчитывается исходя из значений полученного набора собственных частот (f_1 и f_2) в результате моделирования. Расчетная формула имеет вид [7]:

$$V = \lambda \frac{f_1 + f_2}{2}. \quad (2)$$

Для ускорения расчетов модели было подсчитано примерное значение собственной частоты, около которой будет идти поиск.

График с полученными значениями фазовых скоростей на свободной поверхности при разных значениях толщины пьезоэлектрического слоя ($h(AlN)$) изображен на рис. 3а.

После расчета фазовых скоростей на свободной и металлизированной поверхностях можно оценить КЭМС как:

$$K^2 = 2 \frac{V_0 + V_m}{V_0}, \quad (3)$$

где V_0 – скорость на свободной поверхности, V_m – скорость на металлизированной поверхности.

Графики с полученными значениями КЭМС при разных значениях толщины пьезоэлектрического слоя изображены на рис. 3б.

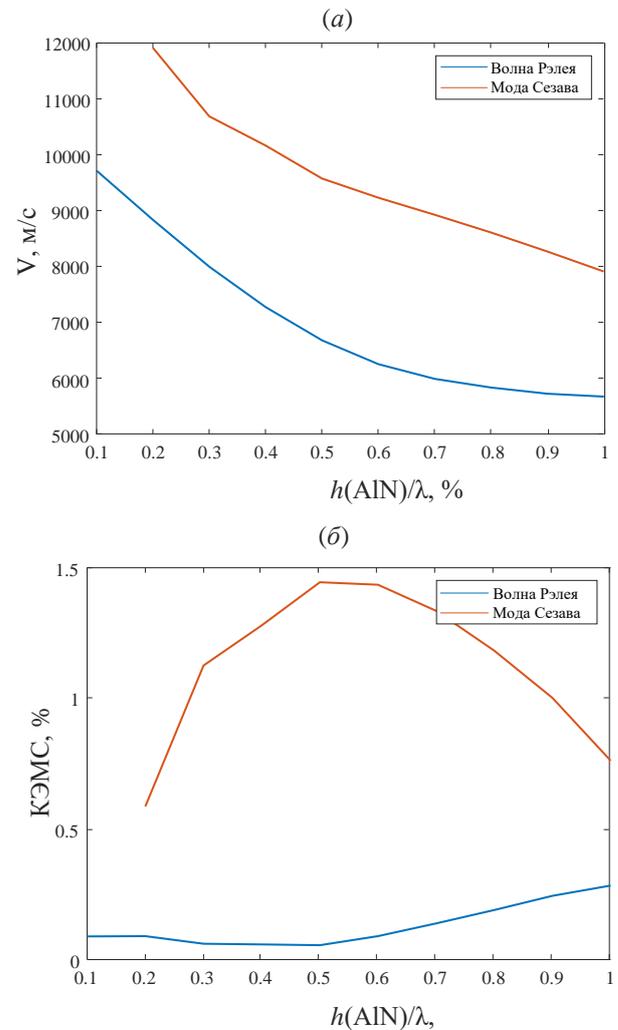


Рис. 3. Графики фазовых скоростей (а) на свободной поверхности при разных значениях толщины пьезоэлектрического слоя ($h(AlN)/\lambda = 0.1, 0.2, \dots, 1$), КЭМС (б) при разных значениях толщины пьезоэлектрического слоя ($h(AlN)/\lambda = 0.1, 0.2, \dots, 1$)

Полученные значения совпадают со значениями, которые были получены в работе [2].

В. Анализ в заданном частотном диапазоне

При анализе в заданном частотном диапазоне была использована геометрия тестовой ячейки, которая изображена на рис. 2в.

В заданном частотном диапазоне тестовую ячейку можно проанализировать при помощи решателя *Frequency response*. Диапазон частот при грубом подсчете был задан в пределах от 3 ГГц до 6 ГГц. При точном подсчете диапазон частот был сужен до 4–5.5 ГГц.

Исходя из результатов анализа в области собственных частот, была выбрана толщина пьезоэлектрического слоя равная половине длины волны, т. к. при ней достигается наибольшее значение КЭМС.

Во время данного анализа производится расчет полной проводимости ячейки в заданном частотном диапазоне.

График мнимой части проводимости тестовой ячейки позволяет определить эффективные значения КЭМС по формуле:

$$K^2 = \frac{\pi f_r / (2f_a)}{tg(\pi f_r / (2f_a))}, \quad (4)$$

где f_a – частота параллельного резонанса, f_r – последовательного резонанса.

На рис. 4 изображены результаты анализа в частотной области при значении $h(Al)/\lambda = 2\%$.

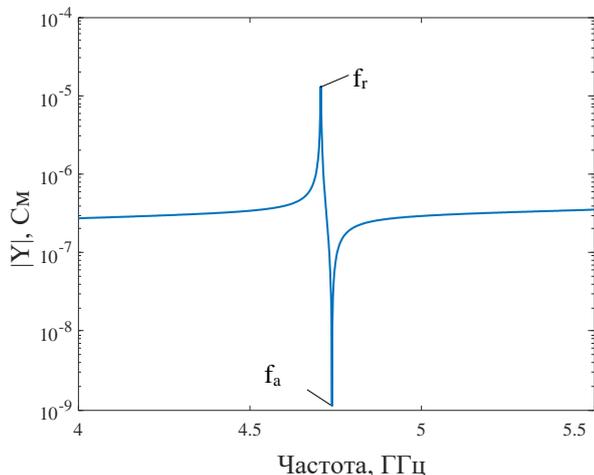


Рис. 4. Анализ значений проводимости в частотной области ($h(Al)/\lambda = 2\%$)

При вышеуказанном значении толщины электродов значение эффективного КЭМС достигает 1.7 %.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе исследования при помощи компьютерного моделирования в среде COMSOL Multiphysics были получены параметры поверхностно акустических волн слоистой структуры нитрид алюминия/ алмаз.

Был проведен расчет тестовой ячейки в области собственных частот, а также в области заданных частот при разных параметрах толщины слоев структуры.

Представленный в работе подход моделирования предоставляет разработчикам эффективный инструмент для расчета и анализа при поиске оптимальных параметров в слоистых структурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Diamond-based surface acoustic wave devices / H. Nakahata, S. Fujii, K. Higaki, A. Hachigo, H. Kitabayashi, S. Shikata, N. Fujimori // *Semicond. Sci. Technol.* 2003. V. 18. № 3. pp. 96-104.
- [2] SAW Sensors on Aln/Diamond/Si Structures / M. Benetti, D. Cannata, A. D'Amico, F. Di Pietrantonio, A. Macagnano, E. Verona // *SENSORS*, 2004 IEEE, Vienna, Austria, 2004. vol. 2. pp. 753-756.
- [3] Surface Acoustic Wave Velocity in Single-Crystal AlN Substrates / G. Bu, D. Ciplys, M. Shur, L.J. Schowalter, S. Schujman and R. Gaska // in *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, Jan. 2006. V. 53. № 1. pp. 251-254.
- [4] Квашинин Г.М., Сорокин Б.П., Бурков С.И. Анализ распространения СВЧ волн Лэмба в пьезоэлектрической слоистой структуре на основе алмаза // *Акустический журнал*. 2021. Т. 67. № 6. с. 595-602.
- [5] Shimko A., Plessky V. Fast SAW Device Simulation in COMSOL Using the Hierarchical Cascading Method // 2018 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS). Kobe, Japan. 2018. pp. 1-3.
- [6] Passive wireless SAW – MEMS pressure sensor/microphone. / Stroganov K., Pashchenko V., Kalinin V., & Plessky V. // 2014 European Frequency and Time Forum (EFTF). Neuchatel, Switzerland. 2014. pp. 147-149.
- [7] Койгеров А.С., Корляков А.В. Моделирование методом конечных элементов устройств на поверхностных акустических волнах с использованием пакета COMSOL // *Микроэлектроника*. 2022. Т. 51. 4. с. 272-282.
- [8] Осетров А.В., Нгуен В.Ш. Расчет параметров поверхностных акустических волн в пьезоэлектриках методом конечных элементов // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2011. Т. 4, № 4. с. 71-80.