

Исследование способов температурной компенсации в слоистых структурах на поверхностных акустических волнах

Б. Ц. Ракшаев, П. Б. Кондитеров, А. С. Койгеров

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

rakshaev00@mail.ru

Аннотация. Приведены результаты исследования поведения температурного коэффициента частоты (ТКЧ) в многослойных структурах, используемых для повышения термостабильности устройств на поверхностных акустических волнах. Выполнено моделирование тестовых структур методом конечных элементов в пакете COMSOL. Рассмотрены два типа слоистых структур. Первый тип – пленка диоксида кремния/танталит лития, второй тип – танталат лития/пленка диоксида кремния/кремний. Результаты расчета показали возможность минимизировать ТКЧ соответствующим выбором толщины слоев. Сравнение полученных результатов с известными данными из литературных источников показало хорошее совпадение.

Ключевые слова: поверхностная акустическая волна; температурная компенсация; танталат лития; метод конечных элементов; пьезоэлектрическая подложка

I. ВВЕДЕНИЕ

Устройства на поверхностных акустических волнах (ПАВ) широко используются в радиочастотных трактах систем связи благодаря своим превосходным характеристикам, в том числе малому размеру и низкой стоимости [1]. Но по сравнению с тонкопленочным объемным акустическим резонатором (FBAR) характеристики устройств ПАВ нуждаются в дальнейшем улучшении, например, повышению Q-фактора и температурной стабильности [2]. К настоящему времени достигнут значительный прогресс в ряде направлений, таких как оптимизация толщин электродов встречно-штыревых преобразователей (ВШП), технология склеивания подложек и пластин [3–7]. На сегодняшний день уже известна конструкция для температурной компенсации (TCSAW) устройств на ПАВ. Недавно компания Murata выпустила конструкцию ПАВ структуры, названную авторами И.Н.Р. (Incredible high performance – невероятно высокие характеристики) SAW (surface acoustic wave – поверхностная акустическая волна) [8, 9], которая состоит из комбинации тонкого пьезоэлектрического материала со стеклом брэгговских отражателей. Брэгговский отражатель был выполнен из нескольких материалов с низким акустическим сопротивлением и материалов с высоким импедансом поочередно на кремниевой подложке. Сообщалось, что такая структура может концентрировать энергию вытекающих ПАВ и достигать более высокой добротности и коэффициента электромеханической связи. Однако по некоторым коммерческим соображениям, более подробная

информация о характеристиках распространения ПАВ в такой структуре не сообщалась.

В этой статье мы исследовали два типа слоистых структур: SiO₂/ВШП/36°Y-X LiTaO₃ (LT) и И.Н.Р. SAW со структурой ВШП/36°Y-X LiTaO₃ (LT)/SiO₂/Si с целью анализа таких характеристик как ТКЧ и коэффициент электромеханической связи (КЭМС).

II. МЕТОДИКА РАСЧЕТА И МОДЕЛИРОВАНИЕ

A. Методика расчета

Описание поведения распространяющихся акустических волн в устройствах осуществляется при помощи нахождения их собственных частот с помощью пакета COMSOL. В дальнейшем на основании данного параметра при любых других, но известных внешних условиях (например, температуры) можно рассчитать основные характеристики проектируемых устройств (фазовую скорость, КЭМС), которые можно выразить следующим образом:

$$v_{f,m} = f\lambda \quad (1)$$

$$k^2 = 2 \frac{v_f - v_m}{v_f} \quad (2)$$

где v_f – фазовая скорость на свободной поверхности, v_m – фазовая скорость металлизированной поверхности, f – собственная частота, λ – длина акустической волны, k^2 – КЭМС.

ТКЧ рассчитывается по известной формуле:

$$TKЧ = \frac{\Delta f}{(T - T_0)f_{T_0}} \quad (3)$$

где T – рабочая температура, T_0 – эталонная температура, которая установлена равной 25°C для моделирования, f_{T_0} – частота при 25°C, Δf – сдвиг частоты, вызванный колебаниями температуры [8].

Для решения задачи нахождения собственных частот можно использовать метод конечных элементов (МКЭ). В данной работе использовался программное обеспечение COMSOL Multiphysics, позволяющее моделировать физические процессы в трехмерных структурах на основе построения систем частных дифференциальных уравнений.

Схематичное изображение исследуемых моделей представлено на рис. 1.

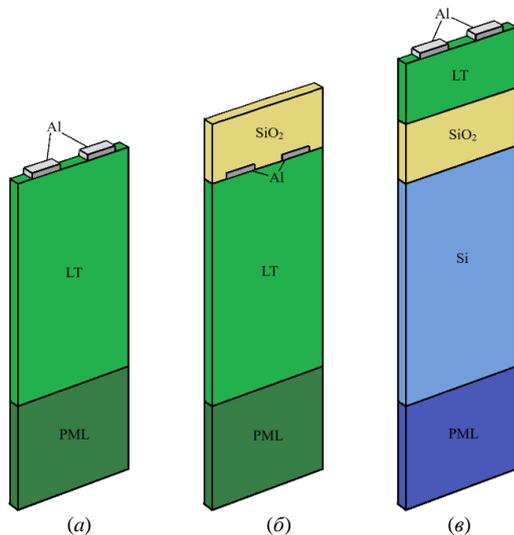


Рис. 1. Модели ПАВ-структур: (а) – простая модель LiTaO_3 , (б) – TCSAW, (в) – I.N.P. SAW

В модели, показанной на рис. 1а, представлены алюминиевые электроды ВПП, нанесенные непосредственно на пьезоэлектрическую подложку танталата лития.

В. Геометрические размеры

При построении геометрии длина волны (λ) тестовых структур была установлена равной 2 мкм. Учитывался полный период, поэтому на левой и правой поверхностях были применены симметричные периодические граничные условия.

Для возбуждения и детектирования ПАВ (рис. 1) применяют ВПП, состоящий из плоских параллельных металлических электродов, расположенных на поверхности пьезоэлектрического материала и попеременно соединенных друг с другом через общие шины. Эффективность генерации и детектирования ПАВ максимальна, когда период следования электродов ВПП совпадает с половиной длины акустической волны. При этом ПАВ будут распространяться в двух противоположных направлениях.

Размеры устройства приведены в табл. 1.

ТАБЛИЦА I. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ РАЗМЕРЫ МОДЕЛИ

Размеры конструкции	Значение, мкм
Длина волны (λ)	2
Высота электрода	0.1
Период следования электродов	1
Ширина электрода	0.5
Толщина модели	0.2

Высота блоков Si и PML были равны 2λ и λ соответственно. В этом исследовании предполагалось, что волны распространяются вдоль направления x ; тогда волны, распространяющиеся вдоль других направлений, можно было бы игнорировать.

С. Материальные параметры

В настоящее время наиболее популярными пьезоэлектрическими подложками у разработчиков ПАВ-устройств являются такие материалы как кварц, ниобат лития и танталат лития. В статье приводятся исследования с использованием $36^\circ \text{YX-LiTaO}_3$, параметры которого приведены в табл. 2. Требуемый

угол среза задается через углы Эйлера встроенными средствами COMSOL.

ТАБЛИЦА II. МАТЕРИАЛЬНЫЕ КОНСТАНТЫ

Параметр	Символ	LiTaO_3 [10]	SiO_2 [11]	Si [11]
Плотность (кг/м^3)	ρ	7460	2200	2330
Упругие константы (10^{11}Па)	C_{11}	2.33	78.5	166
	C_{12}	0.47	16.1	64
	C_{13}	0.8	16.1	64
	C_{14}	-0.11	-	-
	C_{33}	2.75	78.5	166
	C_{44}	0.94	31.2	80
Пьезоэлектрические константы (К/м^2)	e_{15}	2.6	-	-
	e_{22}	1.6	-	-
	e_{31}	0	-	-
	e_{33}	1.9	-	-
Диэлектрические константы (10^{-11}Ф/м)	ϵ_{11}	36.8	3.32	10.62
	ϵ_{33}	38	3.32	10.62

Материальные константы у пьезоэлектрических материалов сильно зависят от внешней температуры. Изменение свойств у танталата лития можно выразить через температурные коэффициенты, тогда упругие, пьезоэлектрические и диэлектрические константы будут определяться как:

$$C_{ij}(t) = C_{ij}(t_0)(1 + TC_{ij}(t - t_0))$$

$$e_{ij}(t) = e_{ij}(t_0)(1 + Te_{ij}(t - t_0))$$

$$\epsilon_{ij}(t) = \epsilon_{ij}(t_0)(1 + T\epsilon_{ij}(t - t_0))$$

где $C_{ij}(t_0)$, $e_{ij}(t_0)$, $\epsilon_{ij}(t_0)$ – тензоры упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических констант при комнатной температуре, TC_{ij} , Te_{ij} , $T\epsilon_{ij}$ – соответствующие температурные коэффициенты, приведенные в табл. 3.

ТАБЛИЦА III. ТЕМПЕРАТУРНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ

Параметры температурных коэффициентов	Символ	LiTaO_3 [10]	SiO_2 [10]	Si ($10^{-7}\text{Па/}^\circ\text{C}$) [10]
Упругие константы ($10^{-4}\text{Па/}^\circ\text{C}$)	TC_{11}	-1.03	2.39	0.68
	TC_{12}	-3.41	5.84	-1
	TC_{13}	-0.5	5.84	-1
	TC_{14}	6.67	-	-
	TC_{33}	-0.96	2.39	-0.68
	TC_{44}	-0.43	1.51	-0.44
Пьезоэлектрические константы ($10^{-4}\text{К/}(\text{м}^2\text{C})$)	Te_{15}	-1.32	-	-
	Te_{22}	-0.6	-	-
	Te_{31}	0.87	-	-
	Te_{33}	1.54	-	-
Диэлектрические константы ($10^{-4}\text{Ф/}(\text{м}^2\text{C})$)	$T\epsilon_{11}$	-	0.263	-
	$T\epsilon_{33}$	-	0.016	-

III. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты моделирования характеристик распространения ПАВ определяются собственными частотами при различных толщинах пленок и температуры окружающей среды. По рассчитанным данным с помощью формул (2), (3) можно построить графики зависимости КЕМС и ТКЧ от соотношения

h_{SiO_2}/λ (рис. 3, 4) и h_{LiTaO_3}/λ (рис. 5, 6), где h_{SiO_2} – толщина пленки SiO_2 , h_{LiTaO_3} – толщина $LiTaO_3$, λ – длина волны.

На рис. 2 представлена картина механических смещений ПАВ для различных конфигураций: на рис. 2а изображена традиционная подложка $36^\circ YX-LiTaO_3$ с нанесенными сверху электродами ВШП, в которой механические смещения представляют собой картину вытекающих ПАВ; на рис. 2б – конфигурация из $SiO_2/ВШП/36^\circ Y-X LiTaO_3$; на рис. 2в – структура И.Н.Р. SAW, представляющая собой ВШП/ $36^\circ Y-X LiTaO_3/SiO_2/Si$.

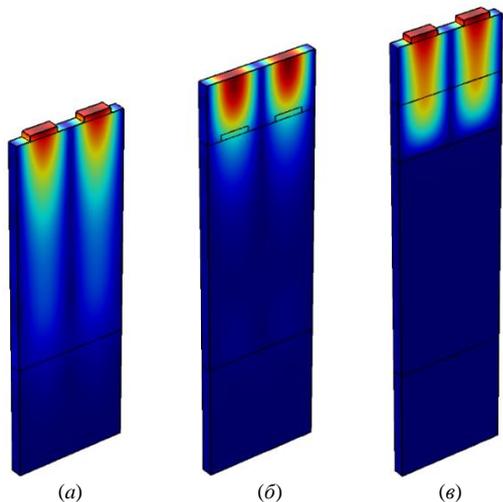


Рис. 2. Полученные результаты механических смещений моделей: (а) – простая модель $LiTaO_3$, (б) – TCSAW, (в) – И.Н.Р. SAW

А. Структура TCSAW

Как известно, для традиционной подложки $36^\circ Y-X LiTaO_3$ без поверхностного слоя ($h_{SiO_2}=0$) фазовая скорость v_f равна 4212 м/с, КЭМС – 5 %, ТКЧ – $-32 \text{ ppm}/^\circ\text{C}$ [12]. По полученным данным, с добавлением слоя SiO_2 КЭМС такой слоистой структуры имеет тенденцию увеличиваться и достигает максимального значения при толщине $h_{SiO_2}/\lambda=16.17\%$ (рис. 3). Дальнейшее увеличение толщины слоя h_{SiO_2}/λ приводит к ослаблению пьезоэлектрических свойств, вследствие чего КЭМС уменьшается.

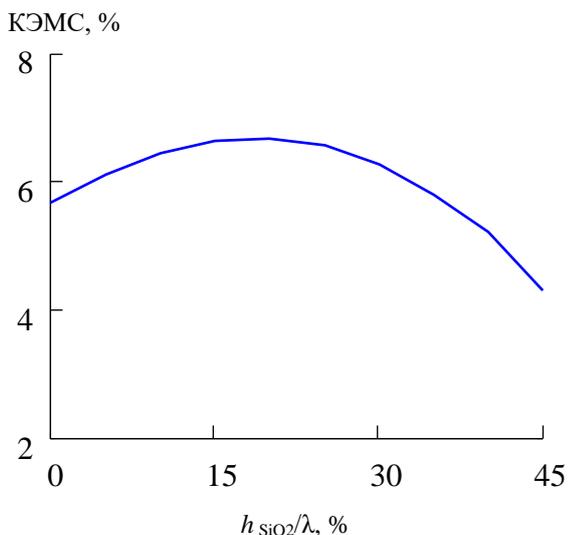


Рис. 3. Зависимость квадрата коэффициента электромеханической связи от толщины пленки SiO_2 для структуры TCSAW

Кроме того, главная особенность данной структуры заключается в температурной компенсации, график зависимости ТКЧ, которой приведен на рис. 4. Как видно из рис. 4 при определенном значении толщины компенсирующего слоя $h_{SiO_2}/\lambda=30.32\%$ наблюдается отсутствие температурного влияния (ТКЧ = 0 $\text{ppm}/^\circ\text{C}$). Это объясняется определенным соотношением свойств материалов, так как пьезоэлектрический материал имеет постоянный отрицательный ТКЧ (рис. 4, прямая 1), а диэлектрический слой – положительный.

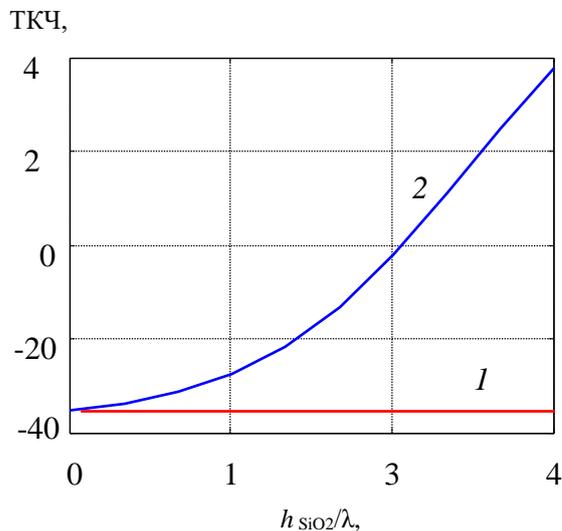


Рис. 4. Зависимость ТКЧ от толщины пленки SiO_2 для структуры TCSAW: 1 – традиционная подложка $36^\circ Y-X LiTaO_3$; 2 – рассматриваемая слоистая структура TCSAW

В. Структура И.Н.Р. SAW

Анализ картины собственных колебаний, приведенной на рис. 2в, показывает, что в слоистой структуре, за счет специально подобранной комбинации слоев, акустическую волну удастся удерживать вблизи поверхности на меньшей глубине, тем самым уменьшая утечку волны в объем подложки. На рис. 5 показана зависимость ТКЧ от толщины пьезоэлектрического слоя танталата лития при выбранном значении относительной толщины пленки SiO_2 – 30 % (кривая 2).

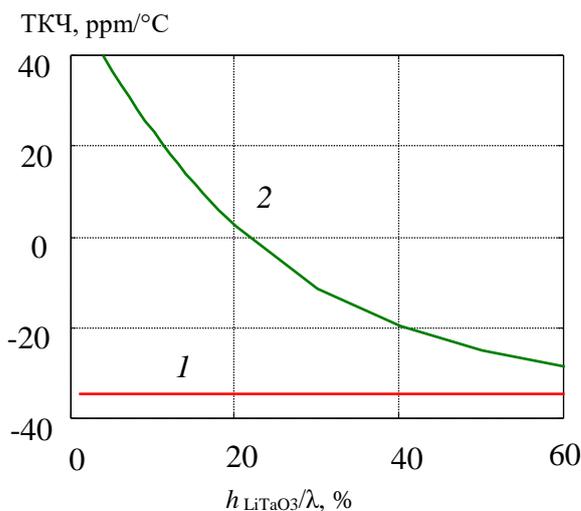


Рис. 5. Зависимость ТКЧ от толщины слоя пьезоэлектрического материала $36^\circ Y-X LiTaO_3$ при фиксированной толщине пленки $h_{SiO_2}/\lambda=30\%$ для структуры И.Н.Р. 1 – традиционная подложка $36^\circ Y-X LiTaO_3$; 2 – рассматриваемая слоистая структура И.Н.Р. SAW

Из рис. 5. становится понятно, что при толщинах $h_{\text{LiTaO}_3}=0.2..0.22\lambda$ и $h_{\text{SiO}_2}=0.3\lambda$ ТКЧ такой структуры можно минимизировать до значения $0..6\text{ppm}/^\circ\text{C}$. Более того, если посмотреть на график зависимости КЭМС (рис. 6), то при таком соотношении пленок обеспечивается еще и повышенное значение КЭМС относительно традиционной монокристаллической подложки.

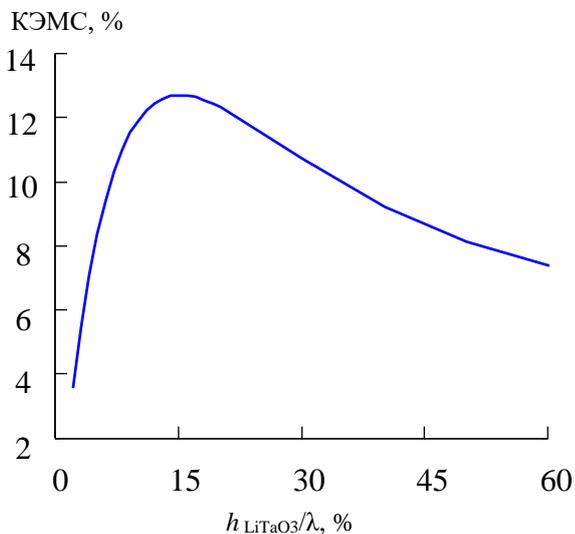


Рис. 6. Зависимость квадрата коэффициента электромеханической связи от толщины слоя пьезоэлектрического материала $36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$ при фиксированной толщине пленки $h_{\text{SiO}_2}/\lambda=30\%$ для структуры И.Н.Р.м

Как видно из рис. 6, большим преимуществом структур И.Н.Р. является не только температурная стабилизация, но и увеличение КЭМС. На графике представлены результаты зависимости КЭМС от изменения толщины $36^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$, начиная с 0.01λ до 0.6λ . На всем этом промежутке значение КЭМС имеет только одну максимальную точку при $h_{\text{LiTaO}_3}\approx 0.15\lambda$ и приблизительно стремится к 8% при дальнейшем увеличении толщины пьезоэлектрического материала.

Полученные графики (рис. 5, 6) показывают относительно неплохое сходство с результатами из работы [13], где исследования проводились для другого среза, а именно $42^\circ\text{Y-X LiTaO}_3$.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследования свойств поверхностных акустических волн в слоистых структурах с использованием танталата лития и пленки диоксида кремния методом конечных элементов показано, что зависимости значений таких параметров как КЭМС и

ТКЧ от толщины слоев имеют нелинейный характер. Рассчитаны значения ТКЧ для двух типов слоистых структур. Показано, что для вытекающих ПАВ в анализируемых структурах можно достичь $\text{ТКЧ}\approx 0\text{ ppm}/^\circ\text{C}$, но при этом будет меняться такой параметр как КЭМС. Представленные в работе результаты демонстрируют возможности по улучшению такого основного показателя как температурная стабильность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Kadota M. High performance and miniature surface acoustic wave devices with excellent temperature stability using high density metal electrodes // 2007 IEEE Ultrasonics Symposium Proceedings, New York, NY, USA, 2007, pp. 496-506.
- [2] Li M. et al. A Fully Matched TE-A Carrier Aggregation Quadplexer Based on BAW and SAW Technologies // 2014 IEEE International Ultrasonics Symposium, Chicago, IL, USA, 2014, pp. 77-80.
- [3] Hashimoto K.-Y. et al. Optimum leaky-SAW cut of LiTaO₃/sub 3/ for minimised insertion loss devices // 1997 IEEE Ultrasonics Symposium Proceedings. An International Symposium, Toronto, ON, Canada, 1997, pp. 245-254.
- [4] Makkonen T. et al. Side radiation of Rayleigh waves from synchronous SAW resonators. IEEE Transactions on Ultrasonics Ferroelectrics and Frequency Control // 2002 IEEE Ultrasonics Symposium, Proceedings, Munich, Germany, 2002, vol. 1. pp. 85-88.
- [5] Inoue S, Nakamura K, Nakazawa H. et al. Analysis of Rayleigh Wave Radiations from Leaky SAW Resonators // 2013 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS), Prague, Czech Republic, 2013, pp. 1953-1956.
- [6] Kimura T, Kadota M, Ida Y. High Q SAW Resonator Using upper-electrodes on Grooved-electrodes in LiTaO₃ // 2010 IEEE MTT-S International Microwave Symposium, Anaheim, CA, USA, 2010, pp. 1740-1743.
- [7] Takai T, Iwamoto H, Takamine Y. et al. Investigations on design technologies for SAW quadplexer with narrow duplex gap // 2016 IEEE MTT-S International Microwave Symposium (IMS), San Francisco, CA, USA, 2016, pp. 1-4.
- [8] Takai T, Iwamoto H, Takamine Y. et al. Incredible High Performance SAW resonator on Novel Multi-layered Substrate // 2016 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS), Tours, France, 2016, pp. 1-4.
- [9] Hashimoto K, Asano H, Omori T, et al. Ultra-wideband surface acoustic wave devices using Cu-grating/rotated YX-LiNbO₃-substrate structure // 2004 IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest, Fort Worth, TX, USA, 2004, Vol.2. pp. 917-920.
- [10] Sun X. et al. Achieving both high electromechanical response and stable temperature behavior in Si/SiO₂/Al/LiTaO₃ sandwich structure // AIP Advances 1 March 2019; 9 (3), pp. 035145.
- [11] Zhang Z., Wen Z., Wang C. Investigation of Surface Acoustic Waves Propagating in ZnO-SiO₂-Si Multilayer Structure // Ultrasonics, 2013. vol. 53, pp. 363-368.
- [12] Morgan D. Surface Acoustic Wave Filters with Applications to Electronic Communications and Signal Processing Second edition 2007. P. 448.
- [13] Takai T. et al. I.H.P. SAW technology and its application to microacoustic components (Invited) // 2017 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS), Washington, DC, USA, 2017, pp. 1-8.