

Исследование поверхностных акустических волн в слоистых структурах на основе сапфира

И. А. Балакай*, А. С. Койгеров

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

*iabalakay@stud.etu.ru

Аннотация. Рассмотрены тестовые 2,5D-ячейки слоистых структур на основе сапфира. Моделирование проводится методом конечных элементов в системе автоматизированного проектирования COMSOL Multiphysics. Получены собственные моды поверхностных акустических волн Рэлеевского типа и Лява. Изучены зависимости фазовых скоростей данных мод и коэффициента электромеханической связи от толщины пьезоэлектрического слоя для определённых срезов составляющих структуру материалов. Проведён анализ эффективного коэффициента электромеханической связи, рассчитываемого по графику адмиттанса в частотной области. Полученные данные находятся в соответствии с литературой и могут быть использованы при создании устройств на поверхностных акустических волнах.

Ключевые слова: сапфир; метод конечных элементов; COMSOL; слоистые структуры; поверхностные акустические волны

I. ВВЕДЕНИЕ

В качестве основного элемента моделируемых в работе тестовых структур выступает сапфировая подложка. Сапфир не является пьезоэлектрическим материалом, но обладает высокой фазовой скоростью распространения поверхностных акустических волн (ПАВ) (например, в слоистой структуре AlN/сапфир 5700 м/с [1]), большей, чем в традиционных пьезоэлектриках, таких как танталат лития, ниобат лития и кварц. Благодаря чему использование сапфира в качестве среды распространения акустических волн перспективно в сфере создания устройств, работающих в гигагерцовом диапазоне, например фильтров и резонаторов [2].

Несмотря на то, что из всех известных на сегодняшний день непьезоэлектрических монокристаллов наибольшей скоростью ПАВ обладает алмаз (≈ 11000 м/с [3]), его производство осуществляется посредством дорогостоящих методов CVD (химического осаждения из паровой фазы) и НТНР (высокой температуры и высокого давления) [4]. Монокристаллы сапфира дешевле в производстве благодаря возможности применения методов с низкой себестоимостью, например EFG (метод Степанова) [5], а также их изготовление весьма распространено в России [6], что повышает доступность на рынке.

В работе исследуются моды Рэлеевского типа и Лява. Последние возбуждаются в слоистой структуре «сапфир/пьезоэлектрическая плёнка» по причине различия в фазовых скоростях поперечной волны в слоях структуры, когда скорость в пьезоэлектрической плёнке ниже, чем в подложке [7]. Волны Лява, используемые в ПАВ-сенсорах, демонстрируют наибольшую

чувствительность среди всех типов ПАВ, а также обладают возможностью распространяться в жидких средах, предопределяя широкое применение в сенсорике, особенно в биосенсорах [8].

Выбранная 2,5D-геометрия моделируемой в COMSOL методом конечных элементов (МКЭ) ячейки отличается от 3D тем, что позволяет быстрее проводить расчёты. Во время расчётов не теряются решения для объёмной структуры (в отличие от 2D-геометрии), которые можно получить путём домножения на требуемый коэффициент (апертуру).

II. МЕТОД РАСЧЁТА И ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ

A. Метод расчёта

COMSOL Multifisics выполняет численный расчёт методом конечных элементов в узловых точках сетки модели по уравнениям пьезоакустики в дискретной форме. Движение частиц среды и изменение потенциала Φ при прохождении акустической волны можно описать уравнениями [9]:

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_k} \\ e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} - \varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_k} = 0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \end{cases}, \quad (1)$$

где ρ – плотность материала; u – компоненты механического смещения в декартовой системе координат x ; t – время; C – тензор модуля упругости; e – тензор пьезоэлектрических модулей; ε – тензор модуля диэлектрической проницаемости.

Каждый рассчитанный узел сетки будет обладать 4 степенями свободы: u_1, u_2, u_3 , и Φ .

Фазовая скорость волны в структуре v связана с собственной частотой f и длиной волны λ (2), где v определяют как полусумму скоростей симметричной и антисимметричной мод [10].

$$v = f \lambda. \quad (2)$$

Коэффициент электромеханической связи k^2 (КЭМС) определяют по формуле [9]:

$$k^2 = 2 \frac{v_f - v_m}{v_f}, \quad (3)$$

где v_f , v_m – фазовые скорости на свободной и металлизированной поверхностях, соответственно.

При наличии нагрузки поверхности, выполненной не сплошной металлизацией, а периодическими электродами, эффективный КЭМС K^2 удобно определять, основываясь на частотной зависимости адмиттанса [9]:

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

где f_r и f_a – частоты резонанса и антирезонанса для конкретной акустической моды, соответственно.

В. Построение модели

Тестовая ячейка любой из 2 рассматриваемых структур состоит из определённого среза сапфировой подложки и пьезоэлектрической плёнки, поверх которой нанесены алюминиевые электроды. Внизу структуры расположен идеально согласованный слой. Геометрия структур (с плёнками AlN и ZnO), а также сетка элементов изображены на рис. 1. Размер ячейки в направлении движения волны составляет 1λ . Электроды следуют с периодом $\lambda/2$. Сетка построена из расчёта 12 элементов на длину волны в приповерхностной области, но на глубине задана более грубо.

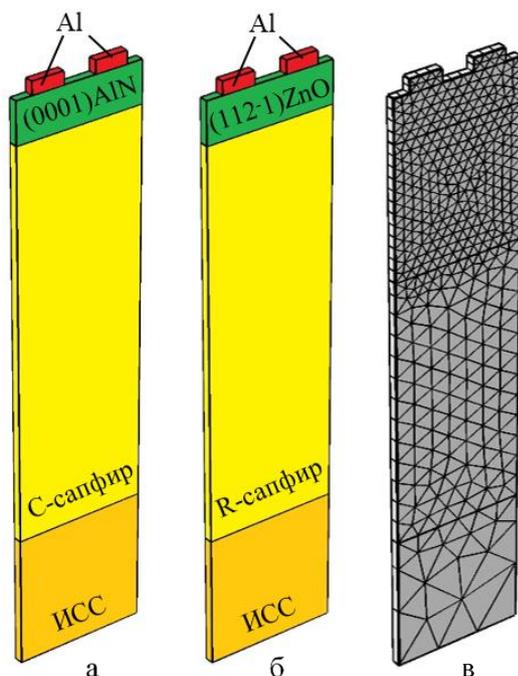


Рис. 1. Структуры исследуемых тестовых ячеек: (а) – сапфир с плёнкой AlN, (б) – сапфир с плёнкой ZnO, (в) – используемая при расчётах методом МКЭ сетка элементов

Параметры материалов для моделируемых тестовых ячеек (рис. 1) C-сапфир/(0001)AlN и R-сапфир/(1120)ZnO приведены для стандартной ориентации (0001) в табл. I, а требуемый срез определяется в COMSOL путём их пересчёта через углы Эйлера, которые задают поворотную систему координат.

ТАБЛИЦА I. ФИЗИЧЕСКИЕ КОНСТАНТЫ

Параметр	Символ	AlN [11]	ZnO*	Сапфир [11]
Плотность материала (кг/м ³)	ρ	3260	5680	3980
Упругие константы (10 ⁹ Па)	C_{11}	345	209,714	497
	C_{12}	125	121,14	164
	C_{13}	120	105,359	111
	C_{14}	-	-	-23,5
	C_{33}	395	211,194	498
Пьезоэлектрические константы (К/м ²)	C_{44}	118	42,3729	147
	e_{15}	-0,48	-0,480508	-
	e_{31}	-0,58	-0,567005	-
Относительные диэлектрические проницаемости (10 ⁻¹¹ Ф/м)	e_{33}	1,55	1,32044	-
	ϵ_{11}	8	8,5446	9,356
	ϵ_{33}	9,5	10,204	11,525

* – параметры взяты из библиотеки материалов COMSOL

III. РАСЧЁТ ЯЧЕЕК В ОБЛАСТИ СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ

В работе исследуются акустические моды Рэлея и Лява. Механические смещения, наблюдаемые при их прохождении, проиллюстрированы качественно на рис. 2.

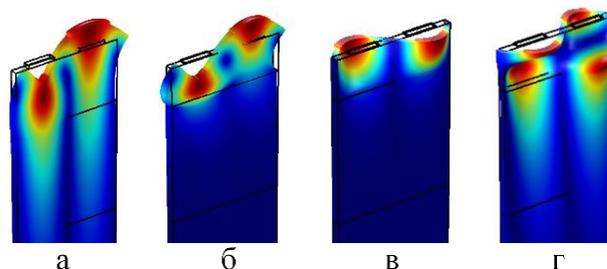


Рис. 2. Визуализация поля механических смещений для следующих мод: фундаментальной Рэлея в структуре C-сапфир/(0001)AlN (а) и в структуре R-сапфир/(1120)ZnO (б), фундаментальной Лява в структуре R-сапфир/(1120)ZnO (в), 1 Лява в структуре R-сапфир/(1120)ZnO (г) (красные области соответствуют максимальному смещению, синие – минимальному)

А. Структура C-сапфир/(0001)AlN

C-сапфир, так же как и AlN, задаётся ориентацией (0001). Это стандартный срез, используемый в COMSOL по умолчанию и не требующий определения поворотной системы координат через углы Эйлера.

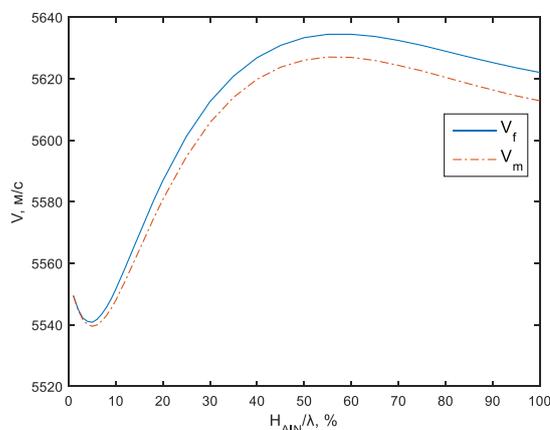


Рис. 3. Скорости распространения фундаментальной моды Рэлея в зависимости от нормированной на длину волны толщины плёнки AlN

Исследуем скорости распространения фундаментальной моды Рэля (рис. 3) и определим КЭМС (рис. 4) в зависимости от нормированной на длину волны толщины плёнки AlN. Сравним на графике КЭМС k^2 с эффективным КЭМС K^2 из [12].

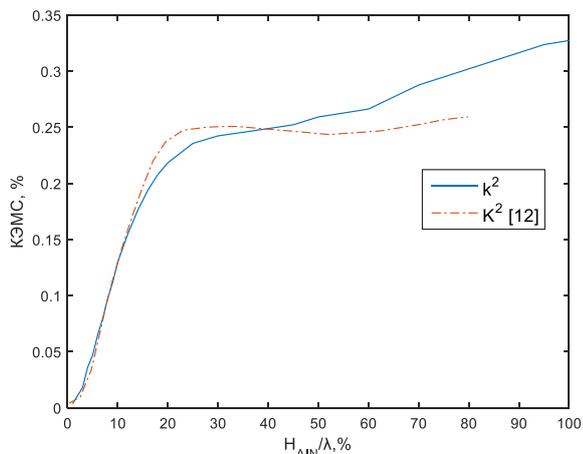


Рис. 4. КЭМС фундаментальной моды Рэля в зависимости от нормированной на длину волны толщины плёнки AlN в сравнении с [12]

В. Структура R-сапфир/(1120)ZnO

R-сапфир задаётся в Comsol с помощью поворотной системы координат, определяемой углами Эйлера (90° , 57.6° , 150°). Аналогично, для плёнки ZnO среза (1120) углы Эйлера имеют значения (α , 90° , 0°), где α может принимать произвольные значения от 0° до 90° [13].

Рассмотрим фундаментальную моду Лява. Определим угол α , при котором КЭМС будет максимален (рис. 5) и исследуем зависимости фазовой скорости и КЭМС от толщины плёнки ZnO при оптимальном значении α (рис. 6 и 7, соответственно). При расчёте зависимости КЭМС от α выберем толщину слоя плёнки $H_{ZnO}/\lambda = 32\%$, так как согласно [13], величина КЭМС будет максимальна.

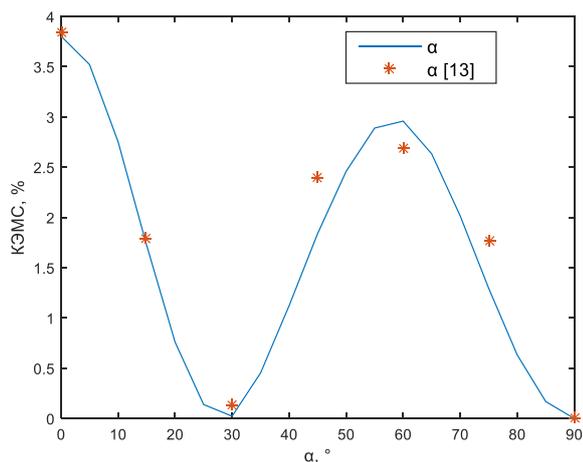


Рис. 5. КЭМС фундаментальной моды Лява в зависимости от угла Эйлера α для поворотной системы координат плёнки ZnO

По рис. 5 можно заключить, что КЭМС фундаментальной моды Лява максимален при $\alpha = 0^\circ$, что находится в полном соответствии с [13].

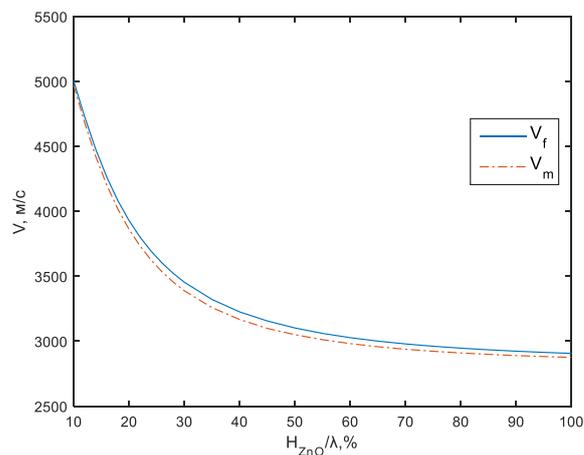


Рис. 6. Скорости распространения фундаментальной моды Лява в зависимости от нормированной на длину волны толщины плёнки ZnO

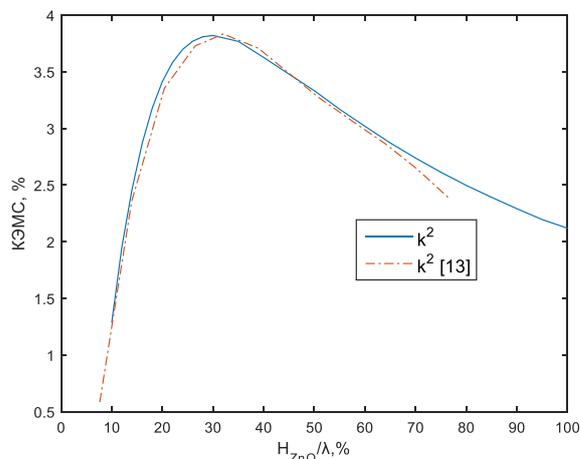


Рис. 7. КЭМС фундаментальной моды Лява в зависимости от нормированной на длину волны толщины плёнки ZnO в сравнении с [13]

Таким образом, полученные данные сопоставимы со справочными значениями, что свидетельствует о корректности моделирования.

IV. РАСЧЁТ ЯЧЕЕК В ЧАСТОТНОМ ДИАПАЗОНЕ

А. Структура C-сапфир/(0001)AlN

Для проведения анализа полной проводимости в частотной области выбрана толщина плёнки нитрида алюминия $H_{AlN}/\lambda = 55\%$, при которой, согласно рис. 3 и рис. 4, будет наблюдаться максимальная скорость фундаментальной моды Рэля и достаточно высокое значение КЭМС. Исследование проводится при нормированной толщине алюминиевых электродов $h_{Al}/\lambda = 3\%$.

На рис. 8 приведена зависимость адмиттанса слоистой структуры от частоты f , нормированной на величину $f_f = 2,8171$ ГГц – частоту, соответствующую v_f данной моды (при $\lambda = 2$ мкм). Резонансных скачков адмиттанса на участках частот, соответствующих второй гармонике, моде Сезава, моде Лява, незаметно. Значит, их K^2 весьма мал. Рассчитанный по формуле (4) и графику (рис. 8) эффективный КЭМС волны Рэля составил $K^2 = 0,221\%$, что близко к значению $k^2 = 0,263\%$ (рис. 5).

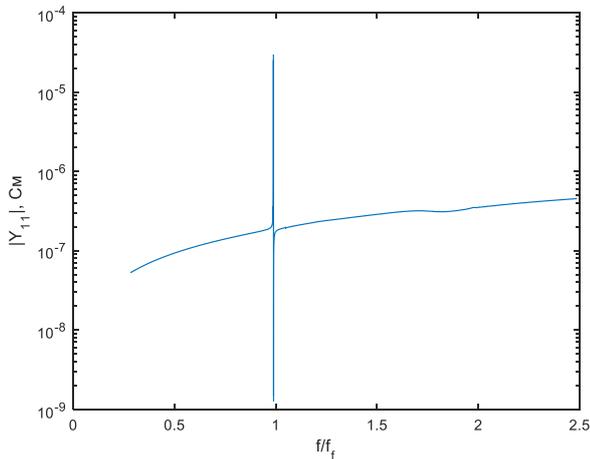


Рис. 8. Адмиттанс структуры С-сапфир/(0001)AlN в зависимости от нормированной частоты. Наблюдается фундаментальная мода Рэлея

В. Структура R-сапфир/(1120)ZnO

Исследование проводится при нормированной толщине Al электродов $h_{Al}/\lambda = 1\%$ и толщине плёнки оксида цинка $H_{ZnO}/\lambda = 32\%$ при $\alpha = 0^\circ$ для максимизации значений K^2 фундаментальной и 1 мод Лява. На рис. 9 приведена зависимость адмиттанса слоистой структуры от f , нормированной на $f_f = 1,6982$ ГГц.

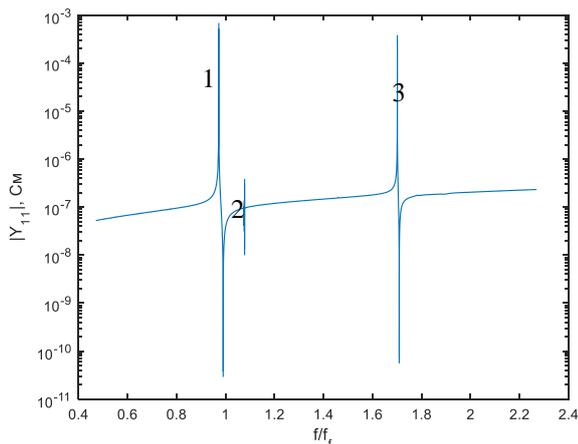


Рис. 9. Адмиттанс структуры R-сапфир/ (1120) ZnO в зависимости от нормированной частоты. Наблюдаются моды: 1 – фундаментальная Лява, 2 – фундаментальная Рэлея, 3 – первая Лява

ТАБЛИЦА II. СОПОСТАВЛЕНИЕ РАСЧЁТНЫХ И СПРАВОЧНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПАВ

Мода	Параметр	Структура*	
		С-сапфир, (0001)AlN 55 %, Al 3%	R-сапфир, (1120) ZnO 32 % Al 1% при $\alpha = 0^\circ$
Фунд. Рэлея	v , м/с	5574; 5685 [12]	3658; -
	K^2 , %	0,221; 0,24 [12]	0,013; -
	k^2 , %	0,263; -	0,005; -
Фунд. Лява	v , м/с	-	3343; 3424 [13]
	K^2 , %	-	4,387; -
	k^2 , %	-	3,8; 3,86 [13]
1 Лява	v , м/с	-	5800; 5888 [13]
	K^2 , %	-	1,113; -
	k^2 , %	-	0,939; 0,95 [13]

*(в процентах приведены значения толщины слоя относительно λ)

Для фундаментальной и 1 мод Лява K^2 составил 4,387 % и 1,113 %, соответственно. На рис. 7 можно увидеть, что величина k^2 несколько ниже эффективной.

Результаты, полученные в разделах III и IV, обобщены в виде табл. II, в которой наблюдается весьма низкий КЭМС фундаментальной моды Рэлея в структуре R-сапфир/(1120). Это объясняется тем, что угол α оптимально выбран для волны Лява. Для исследования волны Рэлея в данной ячейке следует подобрать другое подходящее значение α .

V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках проведённого исследования были изучены перспективные слоистые структуры, сформированные на основе сапфировых подложек с нанесёнными плёнками AlN или ZnO. Предложенные модельные ячейки позволяют анализировать параметры ПАВ, которые можно использовать для разработки высокочастотных устройств. Для изготовления устройств, функционирующих на частотах свыше 2 ГГц, рекомендуется использовать структуру с AlN, работающую на фундаментальной волне Рэлея, либо структуру с ZnO, использующую первую моду Лява, так как соответствующая скорость акустических волн превышает 5500 м/с. Кроме того, за счёт более низкого КЭМС структура с плёнкой нитрида алюминия лучше подходит для применений, связанных с получением узкой полосы пропускания в сравнении со структурой с плёнкой оксида цинка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Morgan D. Surface acoustic wave filters: With applications to electronic communications and signal processing. // Academic Press. 2010. P. 448.
- [2] Naumenko N. Multilayered structure as a novel material for surface acoustic wave devices: Physical insight. // ISBN. 2011. P. 978-953.
- [3] Ro R., Lee R., Lin Z. X., Sung C. C., Chiang Y. F., Wu S. Surface acoustic wave characteristics of a (100) ZnO/(100) AlN/diamond structure // Thin Solid Films. 2013, Vol. 529. P. 470-474.
- [4] Ren Y., Li X., Lv W., Dong H., Cheng Q., Yue F. et al. Recent progress in homoepitaxial single-crystal diamond growth via MPCVD // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2024, Vol. 35. № 7. P. 525.
- [5] Klejch M., Němec M., Kubát J., Polák J. Preparation, properties and application of sapphire single-crystal fibers grown by the EFG method // EPJ Web of Conferences. EDP Sciences. 2013, Vol. 48. P. 00007.
- [6] Рыбкина Е.А. Рынок синтезированных монокристаллов (сапфиров): реалии и перспективы // Инновации. 2016. № 9 (215). С. 106-110.
- [7] Luo J. T. et al. Love-mode surface acoustic wave devices based on multilayers of TeO₂/ZnO (1120)/Si (100) with high sensitivity and temperature stability // Ultrasonics. 2017, Vol. 75. P. 63-70.
- [8] Mandal D., Banerjee S. Surface acoustic wave (SAW) sensors: Physics, materials, and applications // Sensors. 2022, Vol. 22. № 3. P. 820.
- [9] Койгеров А.С. Применение метода конечных элементов для расчета параметров поверхностных акустических волн и устройств на их основе // Микроэлектроника. 2024. Т. 53. №2. С. 142-155.
- [10] Койгеров А.С., Балышева О.Л. Быстрый численный расчет параметров поверхностных акустических волн Рэлея для модели связанных мод // Известия высших учебных заведений России. Радиоэлектроника. 2022. Т. 25. № 5. С. 67-79.
- [11] Tsubouchi K., Sugai K., Mikoshiba N. AlN material constants evaluation and SAW properties on AlN/Al₂O₃ and AlN/Si // 1981 Ultrasonics Symposium. IEEE. 1981. P. 375-380
- [12] Uehara K., Yang C. M., Shibata T., Kim S. K. et al. Fabrication of 5-GHz-band SAW filter with atomically-flat-surface AlN on sapphire // IEEE Ultrasonics Symposium. 2004, Vol. 1. P. 203-206.
- [13] Wang Y., Zhang S.Y., Xu J. et al. Characteristics of surface acoustic waves in (1120) ZnO film/R-sapphire substrate structures // Science China Physics, Mechanics & Astronomy. 2018. Vol. 61. P. 1-8.