

电极对薄膜体声波谐振器性能的影响

焦向全¹, 张睿¹, 马晋毅², 杜波², 钟慧¹, 石玉¹

(1. 电子科技大学 电子薄膜与集成器件国家重点实验室, 四川 成都 610054; 2. 中国电子科技集团公司第二十六研究所, 重庆 400060)

摘要:采用有限元分析软件 COMSOL Multiphysics 仿真了三维结构的谐振器, 探讨了不同的顶电极形状对谐振器性能的影响。有效机电耦合系数(k_{eff}^2)随电极-压电层厚度比增大而减小, 其中电极形状为三角形的谐振器在厚度比为 0.05 时获得最大 k_{eff}^2 (5.73%)。品质因数 Q 值变化趋势与 k_{eff}^2 相反, 由三角形电极在厚度比为 0.25 时, 获得最大 Q 值为 1 314。不同电极形状的谐振器的优值随电极-压电厚度比先增大后减小, 最大值为 65.4, 由正方形电极在比值为 0.15 时获得。

关键词:薄膜体声波谐振器; 有限元; 有效机电耦合系数; 品质因数; COMSOL

中图分类号: TN713+.2

文献标识码: A

Influence of Electrode on the Electrical Characteristics of Film Bulk Acoustic Resonator

JIAO Xiangquan¹, ZHANG Rui¹, MA Jinyi², DU Bo², ZHONG Hui¹, SHI Yu¹

(1. State Key Lab. of Electronic Thin Films and Integrated Devices, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China; 2. 26th Institute of China Electronics Technology Group Corporation, Chongqing 400060, China)

Abstract: A finite element method analyzing software of COMSOL Multiphysics was used to simulate the 3D bulk acoustic wave (BAW) resonator. The influences of different types of top electrodes to the characteristics of BAW were discussed. The effective electromechanical coupling coefficient was decreased with the increase of thickness ratio of electrode to piezoelectric layer. The maximum k_{eff}^2 of 5.73% was achieved at the thickness ratio of 0.05 with the triangular top electrode. The Q -value had a trend opposite to k_{eff}^2 . The maximum value was 1 314, which was also obtained with the triangular electrode at the thickness ratio of 0.25. The figure of merit first increased and then reduced with the increase of thickness ratio of electrode to piezoelectric layer. The maximum value was 65.4 achieved at the thickness ratio of 0.15 with the square electrode.

Key words: film bulk acoustic wave resonator; finite element; effective electromechanical coupling coefficient; quality factor; COMSOL

0 引言

薄膜体声波(BAW)谐振器是根据压电转换效应, 利用微机械加工技术制成的一种三明治结构的薄膜器件。与常用的声表面波滤波器相比, 体声波滤波器具有插入损耗低, 选择性好, 功率容量高, 工作频率高及静电保护强等特点^[1-2], 常用来制作双工器、多工器、压控振荡器、生物传感器及加速传感器等, 在无线通讯和传感器领域具有越来越多的市场份额^[3]。

薄膜体声波谐振器多层结构中, 电极的材料、厚度及形状等因素对谐振器的机电耦合系数、品质因数(Q)值和寄生模量等性能有直接影响。传统的仿真, 如 Mason 模型、MBVD 模型等一维仿真对实际器件作了很大简化, 用于确定谐振器的材料、厚度及谐振频率等基本参数, 但无法模拟实际器件不同的三维结构对谐振器基本性能及寄生效应的影响。三维有限元(FEM)仿真可解决这些问题。本文使用 COMSOL Multiphysics 有限元分析软件, 通过构建不同电极形状的三维 BAW 模型, 讨论电极形状和

收稿日期: 2014-08-07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61101038); 四川关键技术研究发展基金资助项目(2011GZ0220)

作者简介: 焦向全(1982-), 男, 河南巩义人, 博士生, 主要从事射频微波器件的设计与研究。E-mail: xqjiao2008@163.com。通信作者: 石玉(1965-), 男, 甘肃兰州人, 教授, 博士生导师, 主要从事电子信息材料与元器件的研究。E-mail: shiyu_aaa@163.com。

电极-压电厚度比对 BAW 谐振器有效机电耦合系数(k_{teff}^2)、Q 值和优值(FOM)的影响,并讨论了电极形状对寄生模量的影响,为实际谐振器设计提供规律性指导。

1 BAW 设计原理

BAW 的实现机理是压电转换效应,压电材料在电场中发生极化时,会因电荷中心的位移而发生形变。交变的电信号会导致压电材料的机械振动而形成体声波。当输入的射频信号与压电材料的固有振动频率一致时,便形成谐振。根据不同厚度的压电材料对应不同的谐振频率,可制成不同谐振频率的谐振器。由于声速较电磁波的速度低 4 个数量级,体声波谐振器的尺寸可制作得很小。

通常 BAW 的主体部分由顶电极、压电层、底电极和支撑层 4 部分组成,如图 1 所示。在顶电极上部和支撑层下部边缘,声波发生反射,被限制在这个多层结构中。由于声波在多层结构中传播,相当于压电层的有效厚度增加,降低了谐振频率,最终谐振频率由整个结构的厚度决定。

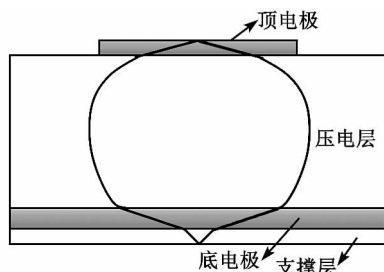


图 1 BAW 基本结构及声波纵波振动模式

BAW 谐振器的边缘设计不合理,就会形成侧向驻波,表现为在主谐振曲线上出现寄生模量;而 BAW 的边缘效应主要体现在顶电极的形状设计上。如果电极设计不好,寄生模量会很大,会影响谐振曲线的平坦性,甚至会增大损耗^[4]。选取合适的电极形状对谐振器性能影响至关重要,本文采用正方形、圆形、三角形和任意四边形 4 种形状(见图 2)来阐述电极对谐振器性能的影响。

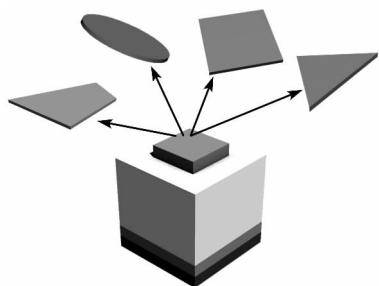


图 2 不同电极形状的 BAW 3D 仿真模型

2 COMSOL Multiphysics 仿真

2.1 仿真求解原理

COMSOL Multiphysics 是一种有限元分析方法。有限元法的基础是变分原理和加权余量法,基本思路是把实际模型离散成互不重叠的单元,每个单元内选择一些合适的节点构造插值点,然后把实际物理问题的未知量改写成依靠这些节点的线性方程组,通过适当的数值方法求解^[5]。

将薄膜体声波谐振器离散后,每个有限元所依赖的方程组^[6]为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{a}} \\ \dot{\mathbf{b}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{uf} \\ \mathbf{K}_{uf}^T & \mathbf{K}_{ff} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{q} \end{bmatrix} \quad (1)$$

式中: \mathbf{M} 为质量矩阵; \mathbf{K}_{uu} 、 \mathbf{K}_{uf} 和 \mathbf{K}_{ff} 分别为机械刚度矩阵、压电耦合矩阵和介电矩阵; \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 分别为节点位移矢量和节点电位矢量; \mathbf{F} 和 \mathbf{q} 为机械力矢量和电荷电量。材料参数确定和网格划分后,式(1)左边的条件就确定了^[1]。当求解完成频率相应分析后,将电极表面每个节点的电荷值积分,得到总的表面电荷 q ,求得导纳

$$Y(\omega) = \frac{J}{V} = \frac{i\omega q}{V} \quad (2)$$

式中: J 为表面电荷密度; V 为电极上施加电压; ω 为谐振频率。

谐振器的 Q 为

$$Q = (\omega W_{\text{tot}}) / P_{\text{ave}} \quad (3)$$

式中: W_{tot} 为存储能量峰值; P_{ave} 为平均功率损耗。对结果进行可视化处理时,COMSOL 软件后预置了导纳和品质因数选项,可直接选择绘制其相对于频率的变化曲线。

2.2 建模及参数选择

COMSOL Multiphysics 仿真环境简化了建模过程的所有步骤——模型定义、网格划分、指定物理、求解,最后进行结果的可视化处理^[7]。

本模型中,选取 Si_3N_4 作为支撑层,厚为 $0.15 \mu\text{m}$ 。压电层为 AlN ,厚度为 $2 \mu\text{m}$ 。选取 W 为上、下电极材料,厚度分别设定为 $0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ 和 $0.5 \mu\text{m}$,与压电层的厚度比分别为 $0.05, 0.10, 0.15, 0.20$ 和 0.25 。顶电极形状虽然不同,但面积均为 $900 \mu\text{m}^2$ 。

网格划分时有限元大小选择“特别细化”选项,划分后的总自由度约为 55 000 个。

物理模块选择压电器件,电极外加电压设为

1 V, 匹配阻抗为 50 Ω 。除损耗因子, 建模中应用的所有材料参数均来自于 COMSOL 软件微系统模块材料库。根据英国 Morgan Technical Ceramics 公司提供的材料参数, 多数材料的品质因数 Q_m 为 100 ~ 1 000, 介电损耗 $\tan \delta$ 为 0.001 ~ 0.010。因此, 仿真中的损耗因子设为

结构损耗因子:

$$\eta_E = 1/Q_m = 0.001 \quad (4)$$

介电损耗因子:

$$\eta_S = \tan \delta = 0.01 \quad (5)$$

最后在求解选项里选择“频域”进行计算。

2.3 仿真结果分析

有限元计算结果出来后, 根据导纳随频率的变化曲线可确定谐振器的串联谐振频率 f_s 和并联谐振频率 f_p , 则谐振器的有效机电耦合系数

$$k_{\text{teff}}^2 = \frac{f_p^2 - f_s^2}{f_p^2} \quad (6)$$

不同形状的电极在不同的电极-压电层厚度比下, 对谐振器 k_{teff}^2 的影响如图 3 所示。由图可看出, 随着电极厚度增加, k_{teff}^2 整体呈下降趋势。这是由于电极厚度增加, 机械振动损耗增加, 造成机电耦合系数下降。三角形电极和任意四边形电极随厚度增加, k_{teff}^2 持续下降, 而正方形和圆形电极则呈周期性的峰值和谷值。这是由于电极厚度增加时, 谐振器纵向振动频率降低, 所激励的横向振动的频率也减小, 横向振动波长增长。对于正方形和圆形电极, 横向振动的最终结果是形成驻波, 而固定了尺寸的电极对不同波长的抑制程度不同。当电极尺寸为接近半波长的整数倍时, 波全反射, 能量损失较少; 反之, 能量就会有较大损耗。这样, 随着波长的增加, 横向振动能量的损失会出现周期性变化, 最终导致 k_{teff}^2

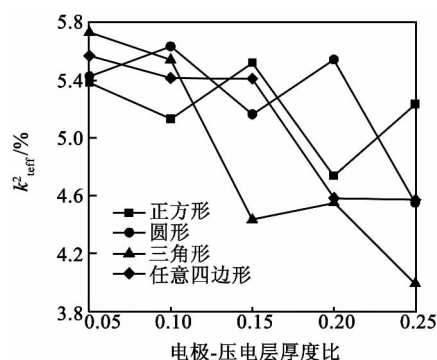


图3 不同电极形状的 BAW 在不同电极-压电层厚度比下的有效机电耦合系数曲线

周期性变化。 k_{teff}^2 最大值为 5.73%, 由电极形状为三角形的谐振器在电极-压电层比为 0.05 时获得。

不同电极的 Q 值曲线如图 4 所示。由于电极厚度增加, 电阻减小, 因而谐振器的电阻损耗减小, 导致 Q 值随电极-压电层厚度比增大呈上升趋势。另外可以看出, 三角形和任意四边形的 Q 值相对较高, 尤其是在高厚度比时。这是由于在厚度比增大到一定程度时, 机械损耗占主导作用^[3]。由于正方形和圆形电极横向机械振动较强, 导致相应的机械损耗增加, Q 值降低。同 k_{teff}^2 一样, Q 值最大值也由形状为三角形的 BAW 获得, 其值为 1 314, 对应的电极-压电层比为 0.25。

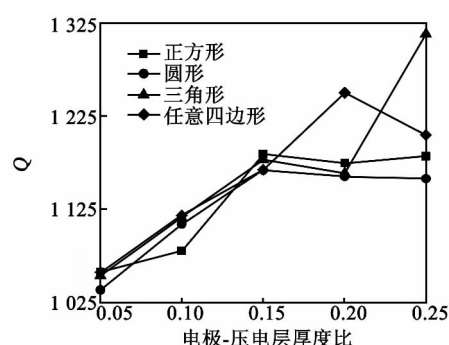


图4 不同电极形状的 BAW 在不同电极-压电层厚度比下的 Q 值曲线

综合考虑谐振器的性能, 可以用优值 (FOM) 表示为

$$FOM(f) = k_{\text{teff}}^2 \times Q(f) \quad (7)$$

不同电极形状的 FOM 曲线如图 5 所示。 FOM 最高点出现位置表现出一定的规律性: 先增高再降低。随着电极-压电层厚度比率的增大, 在厚度比为 0.10 处三角形 FOM 值达到最大。在 0.15 处, 正方形和任意四边形的 FOM 分别达到最高点。圆形的 FOM 在 0.20 处最高。所有最高点中, 正方形的 FOM 值最大 (达到了 65.4), 而三角形的最小 (约为 61.9)。

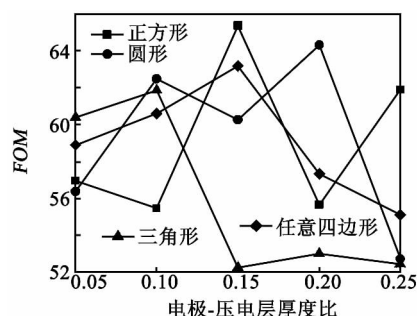


图5 不同电极形状的 BAW 在不同电极-压电层厚度比下的优值曲线

在电极-压电层厚度比为 0.05 时,不同电极的导纳随频率的变化如图 6 所示。由图可看出,不同电极形状 BAW 的导纳最大点(f_s 处)约在 1.721 GHz 处,但略有差别。正方形、圆形和任意四边形的导纳最低点(f_p 处)位置相同,仿真数值为 1.769 3 GHz,但三角形的 f_p 偏右,在 1.770 8 GHz 处。串、并联谐振频率间较宽的带宽造成了三角形的机电耦合系数最大。另外可见,在频率 f_s (1.721 GHz)以上,正方形和任意四边形在接近 f_s 的地方出现了较强的横向寄生振动,而圆形和三角形在远离 f_s 的地方(约 1.74 GHz)附近才出现寄生峰。此外,在 f_p 附近,圆形和正方形的寄生峰的变化较大。这些寄生峰在后续设计滤波器时,会形成带内纹波,影响滤波器的带内特性。

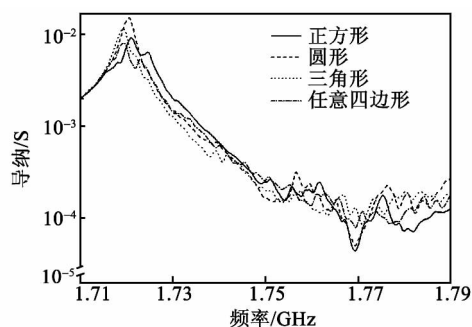


图 6 电极-压电层厚度比为 0.05 时,导纳随频率变化曲线

3 结束语

用有限元仿真工具 COMSOL Multiphysics 软件构建三维 BAW 模型,采用正方形、圆形、三角形和任意四边形 4 种不同的电极形状,仿真电极形状不同对谐振器性能的影响。讨论了不同电极形状对谐振器的 k_{eff}^2 、 Q 值的影响,分析了不同形状的电极在不同的电极-压电层厚度比下的 FOM 的变化规律,描绘了不同形状电极的导纳随频率的变化曲线。结果表明:随厚度比增大,存在 k_{eff}^2 总体下降, Q 值

上升的变化规律。在各种 BAW 的最佳优值中,正方形的优值最大(达到 65.4),而三角形的 FOM 最小(约为 61.9)。

参考文献:

- [1] 杜波,马晋毅,江洪敏,等. 微声薄膜耦合谐振滤波器有限元建模与仿真[J]. 压电与声光, 2012, 34(5): 672-675.
DU Bo, MA Jinyi, JIANG Hongmin, et al. Finite element modeling and simulation of film bulk acoustic wave coupling resonator filters [J]. Piezoelectrics & Acousto-optics, 2012, 34(5): 672-675.
- [2] FRANK Z B, BRADLEY P B. Bulk acoustic wave RF technology [J]. IEEE Microwave Magazine, 2008, 9(5): 65-80.
- [3] KEN-YA H. RF bulk acoustic wave filters for communications [M]. Norwood: ARTECH HOUSE, 2009: 97-101.
- [4] LARSON III J D, RUBY R C, BRADLEY P. Bulk acoustic wave resonator with improved lateral mode suppression: Europe Patent, 1041717A2[P]. 2000-10-04
- [5] 王刚,安琳. COMSOL Multiphysics 工程实践与理论仿真[M]. 北京:电子工业出版社, 2012.
- [6] LERCH R. Simulation of piezoelectric devices by two- and three-dimensional finite elements [J]. IEEE Trans Ultrason, Ferroelect, Freq Contr, 1990, 37(3): 233-247.
- [7] 吕琼莹,杨艳,焦海坤,等. 基于 COMSOL Multiphysics 超声波电机的谐振特性分析[J]. 压电与声光, 2012, 34(6): 864-867.
LV Qiongying, YANG Yan, JIAO Haikun, et al. The resonant feature analysis of ultrasonic motor based on COMSOL multiphysics [J]. Piezoelectrics & Acousto-optics, 2012, 34(6): 864-867.