

密级:



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

硕士学位论文

薄膜体声波谐振器横向结构优化与仿真

作者姓名: 张玲玲

指导教师: 宫俊杰 研究员 中国科学院声学研究所
刘梦伟 副研究员 中国科学院声学研究所

学位类别: 工程硕士

学科专业: 电子与通信工程

研究所 : 中国科学院声学研究所

二零一七 年 五 月

Optimization and Simulation of Lateral Structure
of Film Bulk Acoustic Resonator

By

Lingling Zhang

A Dissertation Submitted to
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Master of Electronics and Communication Engineering

Institute of Acoustics
Chinese Academy of Sciences

May, 2017

中国科学院声学研究所
学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明：本论文的所有工作，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：张玲玲

日期： 年 月 日

学位论文使用授权说明

本人完全了解中国科学院大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

- 按照中国科学院大学要求提交学位论文的印刷本和电子版本；
- 中国科学院大学与中国科学院声学研究所有权保留学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务；
- 中国科学院大学与中国科学院声学研究所可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；

（保密论文在解密后遵守此规定）

论文作者签名：张玲玲 导师签名：廖俊生

日期： 年 月 日

摘要

薄膜体声波谐振器 (Film Bulk Acoustic Resonator, FBAR) 具有高工作频率、小尺寸等优点, 已被广泛应用于通信系统中, 使滤波器件实现了微型化封装、低插入损耗、强带外抑制能力、高功率承受能力等优点。然而, 随着 FBAR 器件尺寸的不断微型化发展, 横向尺寸对器件性能的影响已不可忽略, 其中一个最明显的影响就是器件中存在的横向声波。横向声波的存在会造成能量的损耗, 导致 FBAR 滤波器的插入损耗变大、通带内滤波曲线不平滑。传统的一维分析模型无法分析器件横向尺寸结构对器件性能的影响, 其模拟结果与器件的实际情况存在较大的差别, 这就需要建立将 FBAR 横向尺寸考虑在内的二维或三维模型。

本文通过建立 FBAR 的二维和三维有限元仿真分析模型, 得到了能够减弱横向寄生模式强度的切趾图形和抑制横向寄生模式产生的边框结构, 并对两种方法减弱和抑制横向寄生模式的原理做了一定的分析:

基于切趾法的基本思想, 建立了 Mo/ZnO/Mo 结构和 Mo/AlN/Mo 结构的三维有限元模型, 模型的横向形状有方形、圆形和非正五边形, 得到了阻抗特性曲线、史密斯曲线以及 TE 波纵向位移振型图, 计算了史密斯曲线“不圆度(NC)”的值。结果表明: 非正五边形结构可以有效地减少模型中横向声波产生的寄生模式, 其 NC 值为 0.0151, 比方形结构和圆形结构的 NC 值分别减少 67.5% 和 36%; 增加横向面积可以减少横向声波产生的寄生模式, 横向形状为非正五边形、面积为 $40000\mu\text{m}^2$ 时 NC 值为 0.0055, 比面积为 $10000\mu\text{m}^2$ 时减少 63.6%; 压电材料为 ZnO 时, 横向波产生的寄生模式较少, 横向形状为非正五边形, 串联谐振频率为 1.76GHz 时, Mo/ZnO/Mo 结构的 NC 值为 0.0129, 比 Mo/AlN/Mo 结构的 NC 值减少 14.6%。

基于能陷法的基本思想, 首先建立了横向形状为方形、纵向结构分别为 Mo/ZnO/Mo 和 Mo/AlN/Mo 的三维有限元模型, 计算得到两种结构的频散曲线分别为 TYPE I 型和 TYPE II 型, 分析了能陷法抑制寄生模式的原理。在此基础上, 分别为 TYPE I 型和 TYPE II 型 FBAR 设置了具有能陷作用的凸型和凹型边框结构。对频散特性为 TYPE I 型结构设置了不同厚度和宽度的“凸”型结构边框, 计算得到了阻抗相位曲线的“波纹比率” R 。结果表明: 边框厚度为 $0.15\mu\text{m}$, 宽度为

5 μm 时, 对横向声波产生的寄生模式抑制效果最好, 此时 R 的值最小为 0.0886, 比不加边框时减少 17.7%。最后分析了边框抑制横向声波模式的机理, 为 FBAR 器件的带内性能提高提供了指导。

关键词: 薄膜体声波谐振器, FBAR, 切趾法, 能陷法, 寄生模式, 频散曲线

Abstract

Film Bulk Acoustic Resonators (FBARs), with high operating frequency and small size, have been widely used in duplexers and filters, allowing small filter packages, low insertion losses, steep filter skirts as well as high power durability. However, with the miniaturization of FBAR devices, the effect of lateral dimension cannot be neglected. The most obvious is the presence of lateral acoustic waves. Those lateral acoustic waves can cause energy losses, which lead to the increase of insertion loss in FBAR filters and unwanted ripples in the filter passband. The one-dimensional model of FBAR fails to analyze the influence of the lateral structure, and the performance of FBAR simulated by one-dimensional model is different from the actual devices. Thus, two-dimensional or three-dimensional FBAR models taking the lateral effect into consideration are urgently needed.

In this paper, two-dimensional and three-dimensional FEM simulation models of FBAR are established. The apodized shape of weakening the lateral spurious modes and the frame structure of suppressing the lateral spurious modes are obtained. Besides, how the apodized shape and the frame structure can weaken or suppress the spurious lateral modes are discussed.

Based on the apodized method, three-dimensional FEM models of FBAR consisting of Mo/ZnO/Mo and Mo/AlN/Mo are established, with lateral shapes being rectangular, circular, and non-pentagon. The impedance characteristic curves, Smith curves, vibration modes of TE waves and the "Non-circularity (NC)" of Smith curves are calculated. The results show that the non-pentagon shape is able to weaken the lateral spurious mods effectively, with its NC being 0.0151 which reduces 67.5% and 36% respectively compared with the square and circular shapes. The lateral spurious modes decrease while the lateral area becomes larger. When the area size is $40000\mu\text{m}^2$, the value of NC is 0.0055, which reduces 63.6% compared with the area size being $10000\mu\text{m}^2$. The model constructed of Mo/ZnO/Mo shows less spurious modes, and its NC value is 14.6% less than the one consisted of Mo/AlN/Mo with both their lateral shapes of non-pentagon and their resonance frequencies of 1.76GHz.

Based on the energy-trap method, the FBARs, with lateral shape of rectangular and longitudinal structure of Mo/ZnO/Mo or Mo/AlN/Mo, are simulated by three-dimensional FEM. The obtained dispersion curves of these two models are TYPE I and TYPE II, respectively. The reason why the spurious modes are suppressed by the energy-trap method is discussed. According to the dispersion curves, a raised frame or a recessed frame is applied to the FBAR model. The raised frame is applied to the Mo/ZnO/Mo model and the values of "phase ripple" of the phase response are calculated. The minimum "phase ripple" is at frame thickness being $0.15\mu\text{m}$ and width being $5\mu\text{m}$ where it has the greatest improvement on the suppression of lateral spurious modes. The value of "phase ripple" is 0.0886 which is 17.7% less than the model without frames. Finally, the reason why a raised frame is able to suppress the lateral spurious modes is discussed. All what we have done will provide guidance for improving band performance of FBAR devices.

Key Words: Film Bulk Acoustic Resonator, FBAR, Apodization Method, Spurious Method, Energy Trapping Method, Dispersion Curve

目 录

摘 要	I
Abstract.....	III
目 录	V
第一章 绪 论	1
1.1 薄膜体声波谐振器 (FBAR) 发展概述	1
1.2 研究背景与意义	3
1.3 国内外研究现状	4
1.4 本论文主要研究内容	6
第二章 薄膜体声波谐振器基础	7
2.1 压电效应与压电方程	7
2.1.1 压电效应	7
2.1.2 压电方程	9
2.2 薄膜体声波谐振器工作原理	10
2.3 薄膜体声波谐振器结构类型与材料选择	12
2.3.1 结构类型	12
2.3.2 材料选择	14
2.4 薄膜体声波谐振器的一维分析模型	15
2.4.1 一维等效电路模型	15
2.4.2 Mason 模型的 ADS 库	18
2.5 本章小结	20
第三章 基于切趾法的低杂散模式 FBAR 仿真分析	21
3.1 薄膜体声波谐振器一维仿真结果	21
3.2 有限元方程	22
3.3 薄膜体声波谐振器 ANSYS 建模	25

3.4 仿真结果及分析	27
3.4.1 不同形状的 FBAR 仿真结果分析.....	27
3.4.2 不同面积的 FBAR 仿真结果分析.....	29
3.5 不同压电材料构成的 FBAR 仿真结果分析.....	30
3.5.1 仿真结果分析	30
3.5.2 寄生模式对梯型滤波器滤波曲线的影响	33
3.6 本章小结	35
第四章 基于能陷法的低杂散模式 FBAR 仿真分析	37
4.1 频散曲线计算	37
4.2 能陷法的基本原理.....	39
4.3 薄膜体声波谐振器的 COMSOL 建模	45
4.4 仿真结果及分析	47
4.5 本章小结	51
第五章 结论与展望	53
参考文献	55
致 谢	61
个人简历、在学期间发表的论文	63

第一章 绪 论

薄膜体声波器件得到了几十年的广泛研究,市场占有率不断提高,从军事、工业市场逐渐向消费类无线产品发展,主要应用于射频滤波器和双工器中。可以预计在未来的几年内,将有大量的人力物力投入到相关的研究和产品开发工作中去,薄膜体声波技术发展前景广阔^[1]。

1.1 薄膜体声波谐振器 (FBAR) 发展概述

无线通信系统的整机尺寸越来越小,无线通信可用的频率资源越来越拥挤,对高性能滤波器的需求变得越来越迫切。当滤波器频率高于 2.5GHz 时,声表面波 (SAW) 滤波器的叉指电极间距变得很小,导致电流密度太大产生电迁移和发热等问题。相比 SAW 滤波器,薄膜体声波 (FBAR) 滤波器更适合于高频应用。FBAR 技术的本质是将声能储存在微米级的压电薄膜三明治结构中,它们比传统的 LC 谐振器和 SAW 谐振器具有更高的频率和品质因数 Q ,比介质陶瓷同轴谐振器的体积小、成本低,其优越的综合性能有望取代 SAW 技术成为下一代微声学器件的主导技术。薄膜体声波技术最重要的应用领域是智能手机中的滤波器和双工器,除此之外,也被应用于卫星通信以及雷达系统中。最近几年,基于 FBAR 的传感器也得到越来越多的关注,如应用于食品工业、环境、公共安全监测的“电子鼻”^[2],应用于蛋白质、DNA、血糖有机分子成分分析的生物传感器^[3],应用于轮胎压力监测系统、室内导航、可穿戴设备中的高精度压力传感器等^[4]。

FBAR 这一名称源于体声波 (BAW, Bulk Acoustic Wave),BAW 的概念是 20 世纪 60 年代提出的。1965 年, Newell 在文章中首次提出了基于声波反射层的固态装配型谐振器^[5]; 1967 年, Slicker 和 Roberts 报道了在石英晶片上真空蒸镀硫化镉 (CdS) 压电薄膜的复合结构谐振器^[6],当时,由于 MEMS 微加工技术还没有发展起来,微制造工艺也没有完善起来,体声波谐振器的研制仅仅处于实验室研究阶段,在实际的产品中并没有得到应用;直到 1980 年,日本的 Nakamura^[7]、美国的 Grudkowski^[8]和美国的 Lakin^[9]三个研究组各自报道了在 Si 芯片上溅射 ZnO 压电薄膜制成的薄膜体声波谐振器 (Film Bulk Acoustic Resonator, FBAR),自此,薄膜体声波谐振器开始得到越来越多的研究学者的

关注；1987 年，日本东芝公司的 Satoh^[10] 研究组报道了 FBAR 单片集成电路，他们的 FBAR 器件采用空气隙结构，利用 ZnO 作为压电层，谐振频率达到 400MHz，器件实际尺寸为 1mm^2 ；1990 年，西屋公司的 Krishnaswamy、Rosenbaum 等人^[11] 首次将 FBAR 结构滤波器扩展到 GHz 频段，薄膜体声波技术开始应用于手机通信市场；1999 年，Aglient 科技公司的 Ruby 等人^[12] 报道了高性能的 FBAR 滤波器，并利用此高性能的滤波器制备出了应用于美国 PCS1900MHz 频段附近的双工器，到 2001 年，Aglient 公司^[13] 首次实现薄膜体声波双工器的大规模商业化生产，自此，FBAR 在滤波器、双工器、多工器应用方面取得巨大成功。

在 FBAR 市场上，Avago 公司（2005 年以前为安捷伦的半导体事业部）一直处于 FBAR 行业领头公司地位，自 2005 年正式成立以来，在 FBAR 市场上取得了巨大的成功，公司成立的第二年即 2006 年，FBAR 滤波器、双工器、多工器等产品的出货量突破了 2 亿只，截至 2012 年，Avago 公司的 FBAR 滤波器技术已成功应用于多个产品设计中，支持多达 15 个不同频带应用^[14]。随着 4G/LTE 多频段智能手机的普及，智能手机变得更为复杂，面对着多频段工作、更高数据率等独特问题，FBAR 技术具有的低插入损耗、高矩形系数、高频带隔离性和极小化尺寸等独特优势，正促使所有主要智能手机制造商快速地导入这个技术来解决智能手机面临的独特问题^[15]。

与传统的介质滤波器和声表面波滤波器相比，FBAR 滤波器具有体积小、工作频率高、插入损耗低、带外抑制大、温度系数低以及良好的抗静电冲击能力^[16] 等优点，图 1-1 (a) 给出了 Avago 公司 FBAR 双工器与 SAW 双工器在插入损耗方面的对比^[17]，可以看出，FBAR 双工器的插入损耗更低、滤波器的通带更宽。随着移动通信系统频率不断地提高，FBAR 滤波器的优点更为突出，当射频频率高于 2GHz 时，由于 SAW 器件的叉指电极变得更加细密，导致电阻逐渐变大，损耗增大，利用 SAW 技术实现的滤波器很难达到低插入损耗、高矩形度的要求。而 FBAR 技术与传统的半导体工艺兼容，通过控制压电薄膜的厚度可以实现高频率，满足了高频滤波器件的性能要求。图 1-1 (b) 给出了 SAW 与 FBAR 技术适用的频率范围^[16]，可以看出，体声波器件在未来高频应用方面占据了主导地位。

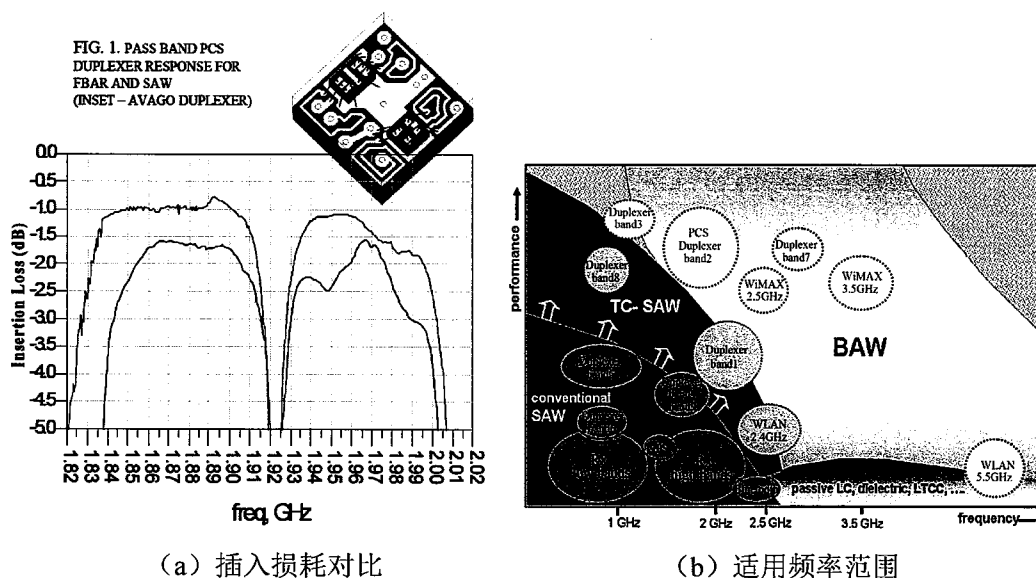


图 1-1 SAW 器件与 BAW 器件性能及适用频率范围对比图

1.2 研究背景与意义

通信设备的多功能化发展趋势要求我们要在原有的电路中集成更多的功能模块来实现其功能多样化的需求，这就意味着集成在电路中的功能器件的尺寸必须尽可能的小，器件的微型化是电子通信行业非常明朗的发展趋势，FBAR 作为最具有应用前景的技术也必须顺应这一大的发展趋势，向着微型化不断迈进。FBAR 器件尺寸不断向着微型化发展，横向结构对器件性能的影响就会越发明显，其中一个问题就是横向模式声波的存在。对于依赖厚度振动而实现谐振的 FBAR 器件来说，横向声波会导致器件能量的损耗从而降低 FBAR 器件的品质因数 Q 。除此之外，这些横向声波会在 FBAR 的工作频率附近产生寄生谐振，寄生谐振会出现在 FBAR 滤波器的通带内影响滤波器的滤波特性。

自 FBAR 首次出现以来，一维 Mason 传输线模型^[18]、将压电薄膜的机械损耗考虑在内的 Butterworth-Van Dyke (BVD) 模型^{[19][20]}以及在 BVD 模型的基础上建立的将压电薄膜的介质损耗、电极的机械损耗和电极的引线损耗等考虑在内的 MBVD 模型^[21]，一直处于 FBAR 研究模型的基石地位，因为这些一维模型将 FBAR 的物理结构与电学性能密切联系在了一起，可以较为准确地对 f 和 k_{eff}^2 进行模拟。然而，随着对 FBAR 技术研究的深入，一维模型的不足也显现了出来：一方面，一维模型对器件品质因数 Q 的模拟结果值与实际值相差很大，例如通常采用 Mason 模型模拟的 FBAR 和 SMR 的 Q 值可以达到几千甚至一万以

上,但目前实际大多数器件的 Q 值通常在 1000 左右,甚至更小^[22];另一方面,一维模型无法给出寄生模式在 FBAR 阻抗特性曲线上的分布情况,如采用传统一维模型得到的 FBAR 阻抗特性曲线是光滑的,而三维模型仿真得到的模拟结果以及实际测量得到的 FBAR 电学阻抗特性曲线存在很多寄生谐振^[23]。

一维仿真模型存在的问题除了源于器件制备中材料的性能与理论值存在差异外,更重要的原因是一维模型没有考虑器件的横向声波损耗、界面反射损耗等因素;另外,随着器件的微型化发展,横向结构对器件性能的影响越来越明显,实际研制的器件性能与其有效功能区域(压电薄膜上下电极的共同区域)的形状、大小有很大关系,如 Avago 公司研制的非平行四边形 FBAR 器件较矩形器件能够显著改善 Smith 圆图的带内平滑度^[24],而一维模型只能对压电薄膜体声波谐振器进行纵向的尺寸优化设计,不能对器件的横向尺寸进行优化设计。

以上论述说明,压电薄膜体声波谐振器的模拟设计和优化分析需要建立包括纵向、横向在内的三维振动模型,不但要进行纵波分析,还需进行横波分析,以改善器件带内由于横波所带来的波动,最大限度地提高 FBAR 器件的性能,并最终提高整个 FBAR 信号处理器的性能。

1.3 国内外研究现状

随着 FBAR 技术研究的深入,各类数值分析方法以及分析手段在其研究过程中被使用。目前用于压电薄膜体声波谐振器优化设计的振动模拟和分析方法包括激光干涉三维振动测试法、传输矩阵法和有限元法三种方法。三维振动测试法^{[25][26]}可分析实际结构的声波模式,但多用于设计结果的验证,且测试设备复杂、昂贵。传输矩阵法^[27]可分析多层介质的频散特性,Kaitila 等人采用此方法对 SMR 凸形边框结构进行了较好的分析^[28],但是,传输矩阵法只能对多层介质的纵向结构进行分析,而无法将多层介质横向结构的影响考虑在内。有限元方法是一种计算机辅助数值计算方法,这一方法相当的成熟并被广泛应用在工程实例中,有限元方法不仅能够建立二维模型而且可以建立包含横向结构在内的三维模型,其在 FBAR 的分析研究过程中起着重要的作用。Makkonen 等人采用三维有限元法对不同形状的 Si/ZnO 双层膜片结构进行了分析,并与实际测量结果进行了比较^[29],Ohara 等人采用有限元法对 FBAR 器件的底电极结构进行优化,以抑制声能泄露提高 Q 值^[30]。

国内外在对压电谐振器件进行研究的过程中,有限元方法得到越来越多的关注,已有许多学者发表了运用有限元方法分析压电谐振器特性的相关文章,并且取得了意义深远的结果。1990年,Kunkel等人^[31]运用有限元方法计算分析了压电陶瓷板的模态数据,使用得到的这些数据解释了不同模态之间的关系。Lerch^[32]通过二维和三维有限元方法对压电介质进行分析,得到了介质的固有频率、相关模态数以及在外力和电场作用下的动态响应。Makkonen等人^[33]在1997年对晶体谐振器进行二维有限元建模,分析了谐振器尺寸、材料参数等对谐振频率的影响,并且研究了影响寄生谐振的参数选取问题;在2000年,又发表文章利用三维有限元模型探讨了固态装配型谐振器的本征值问题,并分析了谐振器顶电极几何结构对器件谐振特性的影响^[34]。国内也有一些研究学者利用有限元方法进行了压电谐振器件的研究,例如兰州大学的王省哲教授等人^[35]利用ANSYS软件分析了不同压电贴片厚度和大小以及外加电压等因素对压电声波器件的动态响应的影响,初步得到了器件几何参数对其性能的影响。姜德义教授等人^[36]利用ANSYS软件对压电陶瓷晶片进行了正反谐振模态的分析与讨论。运用有限元法分析FBAR的特性时,除了考虑压电层的影响外,我们还需要考虑电极结构对FBAR特性的影响。国内在这方面的研究较少,目前有浙江工商大学^[43]和中国电子科技集团第二十六研究所^[44]利用有限元分析软件研究了电极形状对FBAR特性的影响。

目前,针对压电薄膜体声波谐振器的横向结构优化主要包括切趾法(Apodization)和能陷法(Energy Trap)。切趾法是由Larson III等人^[37]于2001年提出,通过改变谐振器功能区域的形状来抑制体声波谐振器的带内杂波。能陷法由Kaitila等人^[38]于2003年提出,是通过在压电换能器上电极的边缘设置边框,以消除某些横向波的激发,从而减少横向能量损耗来提高 Q 值。国外已有很多研究学者开展了对切趾法与能陷法的研究,Rosén等人^[39]在2005年发表的文章中提出的椭圆形状的电极结构,Link等人^[40]在2006年发表的文章中提出的枕型电极结构,这些形状的电极都可以很好地减少FBAR中由于横向波产生的寄生模式;Jiunn-Horng Lee等人^[41]在2004年运用有限元方法研究了能陷法对横向波产生的寄生模式的抑制作用,得到了抑制横向寄生模式效果最优的边框结构,2013年Puneet Kumar等人^[42]提出了可以抑制寄生模式的阶梯型的边框结构。国内对切趾法和能陷法的研究相对较少,浙江工商大学^[43]和中国电子科技集团

第二十六研究所^[44]对切趾法进行了相关的研究，而对能陷法的研究很少有相关文献报道。

1.4 本论文主要研究内容

随着 FBAR 小型化的发展趋势，横向结构对器件性能的影响越来越明显，建立包含横向结构在内的三维分析模型，分析横向结构对器件性能的影响越来越重要。

本文主要内容是：建立了 FBAR 的有限元仿真分析模型，分析了不同横向结构的 FBAR 模型中横向寄生模式的分布情况；基于切趾法的基本原理，设计了能够减弱横向寄生模式的切趾图形；基于能陷法的基本原理，设计了能够抑制横向寄生模式产生的边框结构。论文具体的章节安排如下：

第一章，为绪论部分，介绍了本文的研究背景及国内外学者对薄膜体声波谐振器中的横向寄生模式的研究现状。

第二章，介绍了 FBAR 相关的基础知识，包括压电效应、压电方程、FBAR 的工作原理、结构类型和材料的选择以及 FBAR 的一维分析模型。

第三章，基于切趾法的基本原理，建立了不同面积、不同形状的 FBAR 三维有限元模型，利用有限元软件 ANSYS 仿真得到了模型的阻抗特性曲线、史密斯曲线，分析了不同横向结构对寄生模式分布的影响，得到了减弱横向寄生模式的切趾图形；另外，计算得到了 Mo/AlN/Mo 和 Mo/ZnO/Mo 两种结构的 TE 波纵向位移振型图，分析了不同压电材料的 FBAR 中横向杂散模式的分布情况。

第四章，对能陷法抑制杂散模式进行了研究。首先计算了 Mo/AlN/Mo 和 Mo/ZnO/Mo 两种结构的 FBAR 的频散特性。依据所得频散曲线，对 Mo/ZnO/Mo 结构的 FBAR 设计了不同厚度、不同宽度的凸型边框结构，分析了能陷法对 FBAR 中横向寄生模式的抑制情况，并得到了横向寄生模式最少时的边框结构。

第五章，为结论和展望，总结了本论文的主要工作，并对以后的研究方向做了说明。

第二章 薄膜体声波谐振器基础

2.1 压电效应与压电方程

2.1.1 压电效应

正压电效应由皮埃尔·居里和雅克·居里兄弟在电气石中发现，逆压电效应由他们通过实验验证， α 石英晶体是最早发现的压电晶体。正压电效应产生的原因是，当晶体受到外部机械力的作用时，晶体内部正负电荷中心会发生相对位移而产生极化，晶体极化的产生导致其表面上出现符号相反的正负电荷，因此晶体中就会产生电场。逆压电效应是由于压电弹性材料受到电场的作用时，晶体内部产生压电应力，由于压电应力的作用而产生压电形变，晶体的机械形变与电场强度成线性关系。图 2-1 所示为 α 石英晶体的压电效应^[45]。

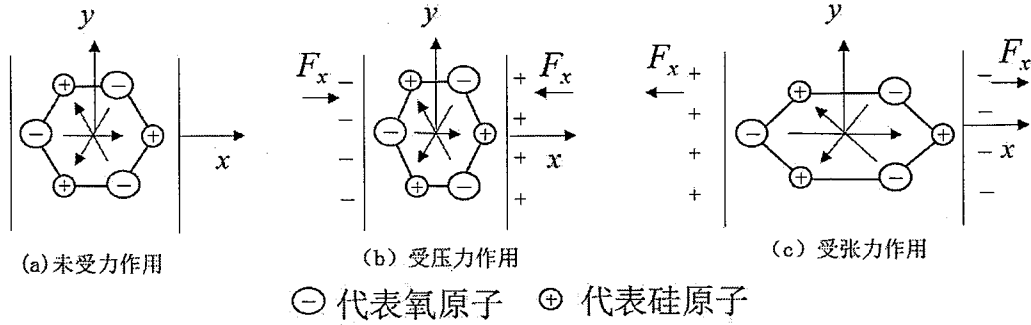


图 2-1 α 石英晶体正压电效应示意图

一般情况下，以矩阵的形式表示的正压电效应如式 (2-1) 所示，

$$\begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{pmatrix} \quad (2-1)$$

其中， $\mathbf{D}$ 为电位移矢量， $\mathbf{T}$ 为应力张量，压电常数矩阵 $\mathbf{d}$ 为 3 行 6 列矩阵，正压电效应矩阵表达式可简写成，

$$D_m = \sum_{j=1}^6 d_{mj} T_j \quad m=1,2,3 \quad (2-2)$$

以矩阵形式表示的逆压电效应如式 (2-3) 所示,

$$\begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{21} & d_{31} \\ d_{12} & d_{22} & d_{32} \\ d_{13} & d_{23} & d_{33} \\ d_{14} & d_{24} & d_{34} \\ d_{15} & d_{25} & d_{35} \\ d_{16} & d_{26} & d_{36} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix} \quad (2-3)$$

其中, S 为应变, E 为电场, 逆压电效应中压电常数矩阵与正压电效应中压电常数矩阵互为转置矩阵, 逆压电常数矩阵为 6 行 3 列矩阵, 逆压电效应矩阵表达式可简写成,

$$S_i = \sum_{n=1}^3 d_{ni} E_n, \quad i=1,2,3,4,5,6 \quad (2-4)$$

压电晶体的介电性能与弹性性能之间的耦合关系正是通过压电常数 d 表现出来, 由正压电效应简写表达式 (2-2) 可得到正压电常数的表示如式 (2-5) 所示,

$$d_{mj} = \frac{\partial P_m}{\partial T_j} \quad (2-5)$$

式 (2-5) 表明正压电常数的定义如下: 由于应力分量 T_j 的改变, 引起极化强度分量 P_m 的改变与应力分量 T_j 的改变之比, 或者说极化强度分量 P_m 随应力分量 T_j 的变化率。

由逆压电效应简写式 (2-4) 可得逆压电常数表示如式 (2-6) 所示,

$$d_{ni} = \frac{\partial S_i}{\partial E_n} \quad (2-6)$$

式 (2-6) 表示的逆压电常数的物理意义如下: 由于电场强度分量 E_n 的改变, 引起应变分量 S_i 的改变与电场强度分量 E_n 的改变之比, 或者说应变分量 S_i 随电场强度分量 E_n 的变化率。

压电常数矩阵的具体表达形式与晶体的对称性密切相关, 通常情况下, 晶体对称性越高, 压电常数矩阵中独立压电常数的个数越少。对于 FBAR 常用压

电材料 AlN 和 ZnO，二者皆为六方 $6mm$ 点群，其压电常数只有 5 个独立变量，压电常数矩阵形式如式 (2-7) 所示：

$$d = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2-7)$$

2.1.2 压电方程

晶体介电性质的电学规律可以用电位移 D 与电场强度 E 之间的关系表示，即，

$$D_m = \sum_{n=1}^3 \epsilon_{mn} E_n, \quad m=1,2,3 \quad (2-8)$$

晶体弹性性质的力学规律可以用应力张量 T 和应变张量 S 之间的关系（广义胡克定律）来表示，即，

$$T_i = \sum_{j=1}^6 c_{ij} S_j \quad i=1,2,3,4,5,6 \quad (2-9)$$

压电晶体压电性质所遵从的机电规律要用电位移 D ，电场 E ，应力张量 T 和应变张量 S 之间的关系来描述，这样就得到了压电方程^[45]。

压电元件在实际工作中，有自由和夹持两种机械边界条件，有短路和开路两种电学边界条件，机械边界条件和电学边界条件自由组合可得到四种不同的边界条件：机械自由和电学短路；机械夹持和电学短路；机械自由和电学开路；机械夹持和电学开路。在进行计算时，为了计算方便，不同的边界条件要选取不同的自变量，这样就得到四类压电方程：

第一类压电方程：机械自由和电学短路条件，此时， T 和 E 为自变量， S 和 D 为因变量，压电方程为，

$$\begin{aligned} S &= s^E T + d_l E \\ D &= dT + \epsilon^T E \end{aligned} \quad (2-10)$$

s^E 为短路弹性顺服常数， ϵ^T 为自由介电常数， d 为第一类压电常数（压电应变常量）。

第二类压电方程：机械夹持和电学短路条件，此时， S 和 E 为自变量， T 和 D 为因变量，压电方程为，

$$\begin{aligned} T &= c^E S - e_t E \\ D &= e S + \varepsilon^S E \end{aligned} \quad (2-11)$$

c^E 为短路弹性劲度常量， ε^S 为机械夹持介电常数， e 为第二类压电常数（压电应力常数）。

第三类压电方程：机械自由和电学开路条件，此时， T 和 D 为自变量， S 和 E 为因变量，压电方程为，

$$\begin{aligned} S &= s^D T + g_t D \\ E &= -g T + \beta^T D \end{aligned} \quad (2-12)$$

s^D 为开路弹性顺服常量， β^T 为自由介电隔离率，是自由介电常数 ε^T 的倒数， g 为第三类压电常数（压电电压常数）。

第四类压电方程：机械夹持和电学开路条件，此时， S 和 D 为自变量， T 和 E 为因变量，压电方程为，

$$\begin{aligned} T &= c^D S - h_t D \\ E &= -h S + \beta^S D \end{aligned} \quad (2-13)$$

c^D 为开路弹性劲度常量， β^S 为夹持介电隔离率，等于夹持介电常数 ε^S 的倒数， h 为第四类压电常数（压电劲度常量）。

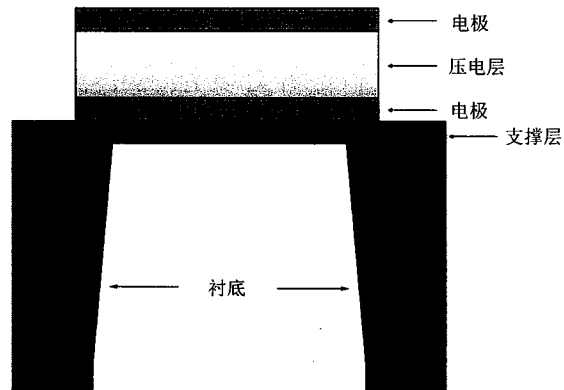
2.2 薄膜体声波谐振器工作原理

薄膜体声波谐振器是由衬底、声波反射层、上下电极和压电薄膜层构成，结构示意图如图 2-2 (a) 所示，有时为了增加器件的牢固性会在底电极下面生长一层支撑层，通常采用 Si_3N_4 或 SiO_2 。薄膜体声波谐振器工作原理是体声波的驻波谐振^[46]，压电薄膜和上下电极组成的压电三明治结构是产生驻波谐振的核心部分。体声波的驻波谐振产生原理是：当在上下电极施加一交变电压时，由于压电薄膜的逆压电效应将部分电能转化为机械能，进而在三明治结构体内激励起沿厚度方向传播的体声波，体声波被限制在压电三明治结构体内，当声波在厚度方向的传播路径刚好是半波长或半波长的奇数倍时，就会形成驻波谐振。

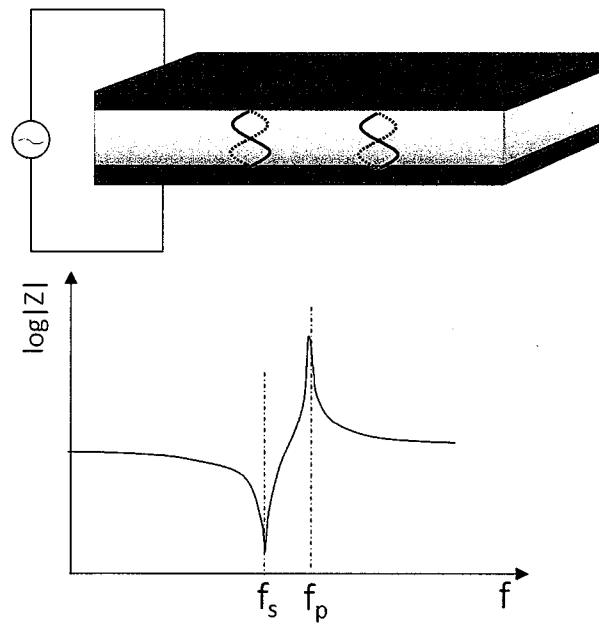
谐振频率为，

$$f = \frac{v}{2d} \quad (2-14)$$

其中 v 是压电材料中纵波的声速， d 是压电薄膜厚度。图 2-2 (b) 给出了 FBAR 的电学阻抗特性曲线，曲线中的串联谐振频率 f_s 和并联谐振频率 f_p 相距很近。



(a) 结构示意图



(b) 工作原理

图 2-2 薄膜体声波谐振器结构及工作原理示意图

2.3 薄膜体声波谐振器结构类型与材料选择

2.3.1 结构类型

由薄膜体声波谐振器的工作原理我们知道，谐振的产生需要将逆压电效应激励起的体声波限制在三明治结构内，因此，在上下电极的边界处必须达到合适的边界条件才能使体声波尽可能多的被限制在三明治结构体内。根据电磁场电磁波理论我们知道，当负载的阻抗为零或无穷大时，入射波将发生全反射，因此在压电三明治结构的上下电极边界处设置声阻抗为零或无穷大的材料层即可实现声波的全反射。声阻抗为零的边界条件可以通过“电极-空气层”界面来实现，因为空气的声阻抗很小近似等于零；声阻抗无穷大的边界条件实现的方法是在衬底和三明治结构之间制备声阻抗为无穷大的布拉格反射层，布拉格反射层是由厚度为四分之一波长的高低阻抗材料组成，反射层的层数越多其反射声波的效果越好。

目前，依据不同的声波反射方法，主要存在三种结构类型的 FBAR 器件，它们的结构示意图如图（2-3）所示。图 2-3（a）为背空腔型 FBAR 结构，它是由压电三明治结构和背面部分刻蚀的硅衬底组成。背空腔型 FBAR 器件地制备采用 MEMS 体硅微加工技术（bulk micromachining），先是在硅衬底上沉积电极和压电薄膜，完成三明治结构的制作，制作完成后通过湿法腐蚀或干法刻蚀将去除衬底背面的一部分硅，形成悬空的压电三明治结构。在这种结构中，由于薄膜的悬空会使得器件的机械牢固性较差，为了提高牢固性，通常会先在衬底上沉积一层支撑层，然后再制作压电三明治结构。由于这种结构的制作过程只涉及到基本的光刻、沉积、刻蚀工艺，其工艺制作过程简单，是较早使用的一种结构。图 2-3（b）所示的是空气隙型结构的 FBAR，它实现体声波全反射的方法与背空腔型结构的 FBAR 一样，都是利用阻抗接近于零的空气将声波限制在压电三明治结构内。此种结构的 FBAR 采用的是 MEMS 表面微加工技术（surface micromachining），通过利用牺牲层材料来实现空气隙结构。这种结构的 FBAR 与背空腔型 FBAR 相比，机械牢固性提高了，但是由于去除牺牲层材料工艺的引入使得器件制备过程变得复杂。这一结构 FBAR 得到广泛的实际应用，安华高科技、三星等公司的 FBAR 产品大都基于这种结构。图 2-3（c）是固态装配型结构的 FBAR，这种结构的 FBAR 通过布拉格反射层来实现声波的全反射。由于布拉格反射层反射声波的能力不如金属-空气界面好，因此，这种器件

的性能没有前两种好。另外，由于布拉格反射层结构导致器件厚度过高，与其他射频器件实现集成比较困难，但是，这种结构的 FBAR 机械牢固性较好。

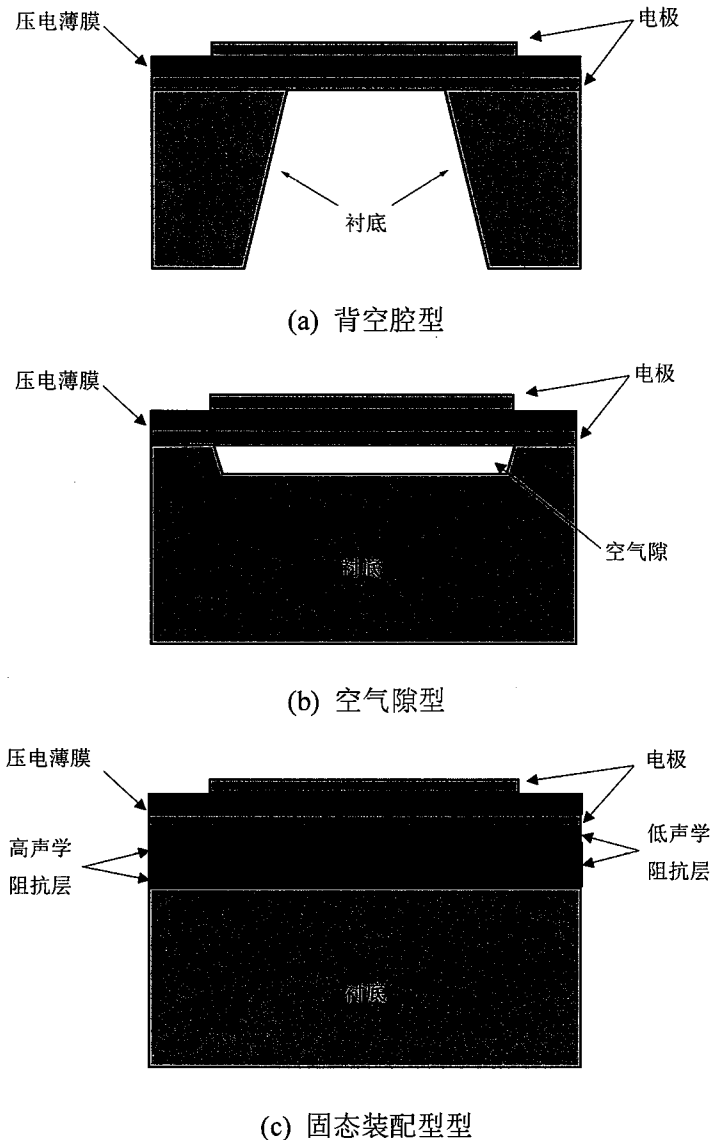


图 2-3 FBAR 的三种结构类型示意图

综合比较以上三种结构的 FBAR 可知，在器件制作工艺上，体硅背刻蚀型工艺最简单，空气隙型次之，固态装配型最复杂；在性能上，固态装配型结构的 FBAR 其 Q 值要比背空腔型和空气隙型结构的 FBAR 低；在器件可靠性上，固态装配型 FBAR 的牢固性最好，空气隙型的次之，背空腔型的 FBAR 牢固性

最差；在制造成本方面，固态装配型的最高，其次是空气隙型，背空腔型结构的 FBAR 制作成本最低。

2.3.2 材料选择

薄膜体声波谐振器的性能与构成它的材料有着密切的关系，合适的电极材料和压电材料能使器件的性能得到提高，在选取材料时需要综合考虑材料的电学特性及声学特性。

在 MEMS 技术发展过程中，应用最广泛的压电材料有氧化锌（ZnO）、氮化铝（AlN）和锆钛酸铅（PZT），三种压电材料的材料参数^[47]对比如表 2-1 所示。

表 2-1 三种常用压电材料性能参数对比

	AlN	ZnO	锆钛酸铅
压电耦合系数 (%)	6.5	7.8	8-15
介电常数	9.5	9.2	80-400
纵波声速 (m/s)	10400	6350	4000-6000
温度系数 (ppm/°C)	-25	-60	—
热导率 (W/mK)	280	60	1.8
CMOS 兼容性	兼容	不兼容	不兼容
固有损耗	低	低	高
制备工艺	成熟	成熟	不成熟

FBAR 常用的压电材料为氧化锌（ZnO）和氮化铝（AlN），在选择 FBAR 的压电材料时，需考虑材料的机电耦合系数、介电常数、纵波声速、材料固有损耗、温度系数、热导率、化学稳定性和制备工艺等。压电材料的机电耦合系数决定了 FBAR 的机电耦合系数和 FBAR 滤波器的带宽；介电常数和 FBAR 的尺寸（面积、厚度）共同决定着 FBAR 的静态电容，高的介电常数可以减小 FBAR 的尺寸；纵波声速影响着 FBAR 器件的厚度，在器件频率一定的情况下，声速越大薄膜的厚度越厚；材料的固有损耗影响 FBAR 的品质因数 Q 以及 FBAR 滤波器的插入损耗，较低的固有损耗会使得滤波器件插入损耗较小；材料的温度系数影响着器件频率随温度的变化情况，温度系数越小，由此材料制得的器件在实际工作中的温度稳定性越好；热导率影响的是器件的功率容量，热导率高

的材料有助于增加器件的功率容量；材料的化学稳定性影响器件在潮湿环境中的稳定性，材料化学稳定性越好，器件在潮湿环境中的可靠性越高。

FBAR 常用的电极材料有 Al、Mo、W 和 Pt，在选择电极材料时主要考虑的材料参数是电极材料的密度、电阻率以及声学阻抗，同时能够保证压电薄膜可以在电极上均匀生长。选择密度低的电极材料可以减少对压电薄膜振动的影响；电阻率低的材料其能量的损耗也低；声阻抗高的材料可以保证对声波良好的反射。Pt 和 W 的密度较高而 Al 的声阻抗较低，相比较而言，Mo 具有相对较低的电阻、较高的声阻抗和较低的密度，是最适合的电极材料。

2.4 薄膜体声波谐振器的一维分析模型

一维模型是最早用来分析 FBAR 器件谐振特性的模型，包括一维 Mason 传输线模型^[18]、BVD 模型^{[19][20]}以及 MBVD 模型^[21]。一维模型可以用来对实际将要制作的器件进行合理的纵向结构的尺寸设计，其成立的条件是假设器件横向尺寸远大于波长。利用 Agilent 公司设计的 ADS (Advanced Design System) 软件，可以方便的建立 FBAR 的 Mason 等效电路的 ADS 库，通过给定不同材料以及不同纵向尺寸，就可以得到纵向结构对 FBAR 器件谐振特性的影响。

2.4.1 一维等效电路模型

Mason 模型是以它的提出者 Mason 来命名的，在给出各层材料参数的情况下可以对 FBAR 的谐振特性进行仿真分析。压电层的 Mason 等效电路模型如图 2-4 所示，

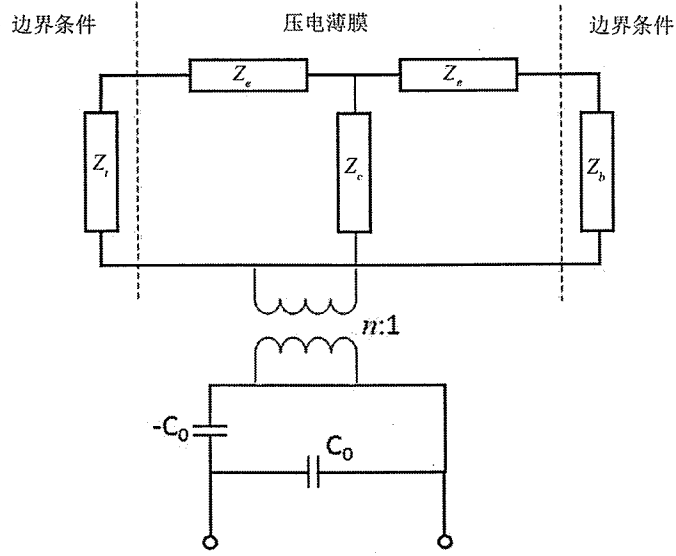


图 2-4 压电层 Mason 模型等效电路

其中, $Z_e = jZ_p \tan \theta$, $Z_c = -jZ_p \csc 2\theta$, Z_p 为压电薄膜的特征阻抗, $\theta = kh$, $2h$ 是压电层厚度, k 为波数。静态电容 $C_0 = \frac{\epsilon_{zz}^s \cdot A}{2h}$, ϵ_{zz}^s 是恒应变下的介电常数, A 是 FBAR 电极面积。变压比 $n^2 = \frac{k_t^2 \omega C_0 Z_p}{2\theta}$, k_t^2 为机电耦合系数, ω 为圆频率。

普通声学层的等效电路如图 2-5 所示,

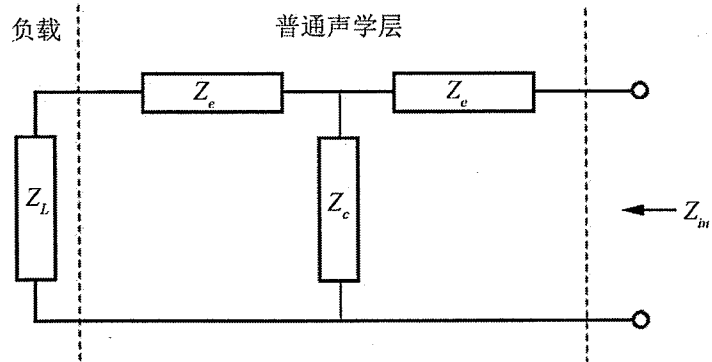


图 2-5 普通声学层 Mason 等效电路

其中, $Z_e = jZ_a \tan \theta_1$, $Z_c = -jZ_a \csc 2\theta_1$, Z_a 为压电薄膜的特征阻抗, $\theta_1 = kh_1$, $2h_1$ 是压电层厚度, k 为波数。

综上，可以得到整个 FBAR 器件的 Mason 等效电路模型如图 2-6 所示，整个模型结构层次清晰，大大简化了 FBAR 的 ADS 库的建立过程。

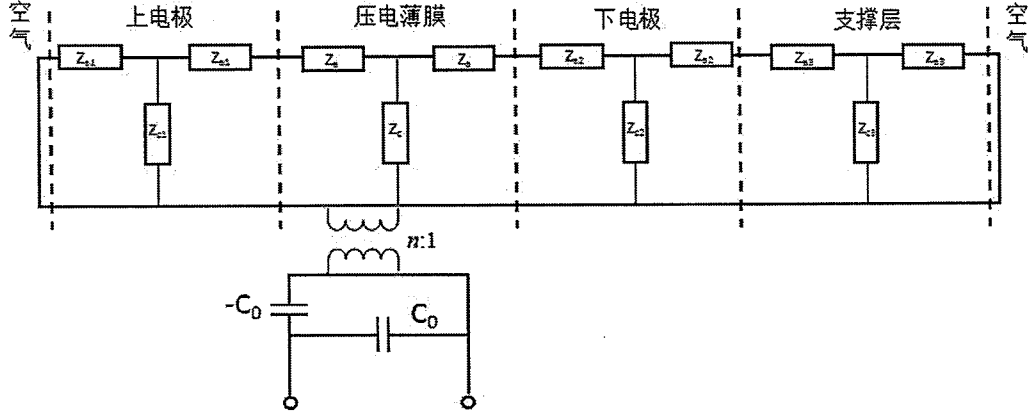


图 2-6 FBAR 的 Mason 等效电路模型

其阻抗特性表达式如式 (2-14) 所示^[48],

$$\begin{aligned}
 Z &= \frac{1}{j\omega C_0 + \frac{1}{-\frac{1}{j\omega C_0} + \frac{1}{n^2} \cdot \left(-jZ_p \cdot \csc 2\theta + \frac{1}{\frac{1}{jZ_p \cdot \tan \theta + Z_t} + \frac{1}{jZ_p \cdot \tan \theta + Z_b}} \right)}}} \\
 &= \frac{1}{j\omega C_0} \left[1 - k_t^2 \frac{\tan \theta}{\theta} \cdot \frac{(z_t + z_b) \cdot \cos^2 \theta + j \cdot \sin 2\theta}{(z_t + z_b) \cdot \cos 2\theta + j(z_t z_b + 1) \cdot \sin 2\theta} \right]
 \end{aligned} \quad (2-14)$$

其中， $z_t = \frac{Z_t}{Z_p}$ 是从压电薄膜上表面向上看的归一化声学阻抗， $z_b = \frac{Z_b}{Z_p}$ 是从压电薄膜下表面向下看的归一化声学阻抗。对于忽略电极影响的理想 FBAR，只要使式 (2-14) 中的 $z_t = z_b = 0$ 即可。

BVD 模型是由 Butterworth 和 Van Dyke 提出的，这一模型引入了器件的机械损耗，可以很好地模拟 FBAR 在谐振点附近的谐振频率，理想情况和考虑压电层机械损耗的 FBAR 的 BVD 模型如图 2-7 所示，

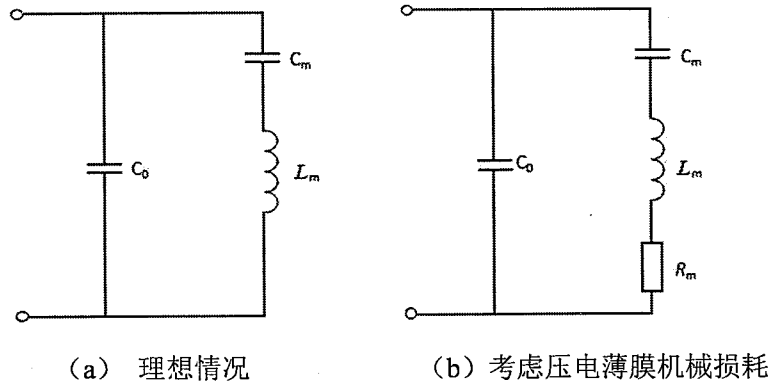


图 2-7 FBAR 的 BVD 等效电路图

其中 C_0 为静态电容, C_m 、 L_m 、 R_m 分别为动态电容、动态电感和机械损耗。

MBVD 模型是由 Larson 等人提出的, 相比于 BVD 模型, 这一模型将电极的引线损耗和机械损耗以及压电薄膜的介质损耗都考虑在内, 其对 FBAR 的模拟更加准确, MBVD 模型的电路图如图 2-8 所示,

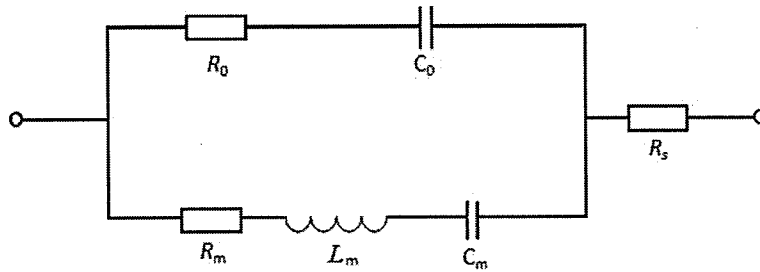


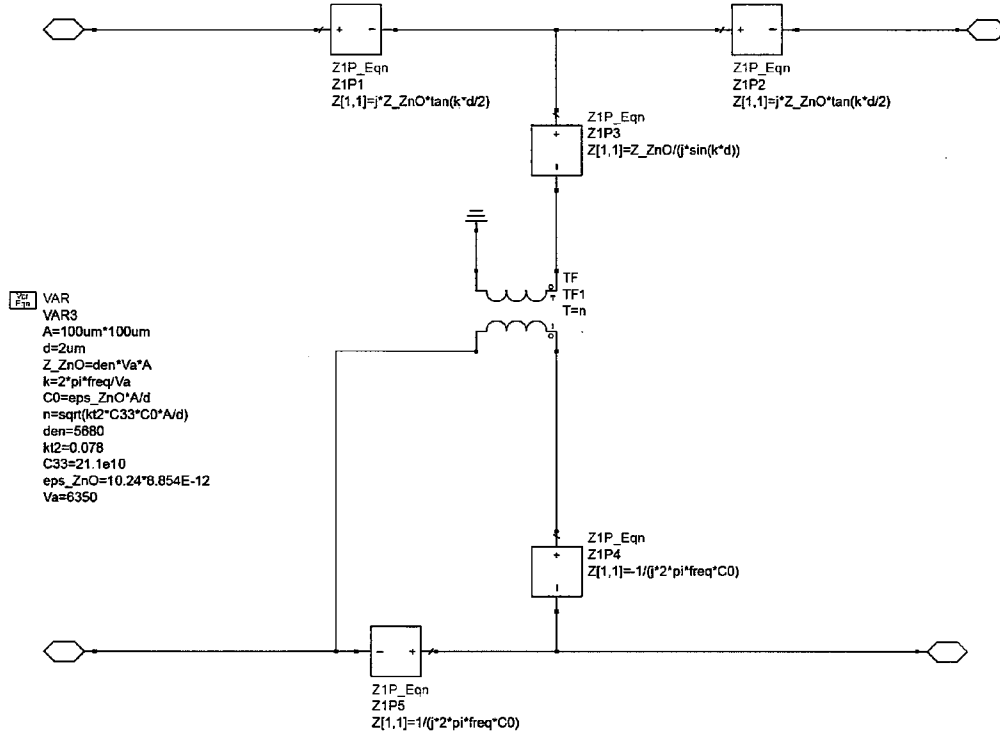
图 2-8 FBAR 的 MBVD 等效电路图

其中, C_0 和 R_0 分别为静态电容和压电材料的介质损耗, C_m 、 L_m 、 R_m 分别为动态电容、动态电感和机械损耗, R_s 为电极的引线损耗和机械损耗。

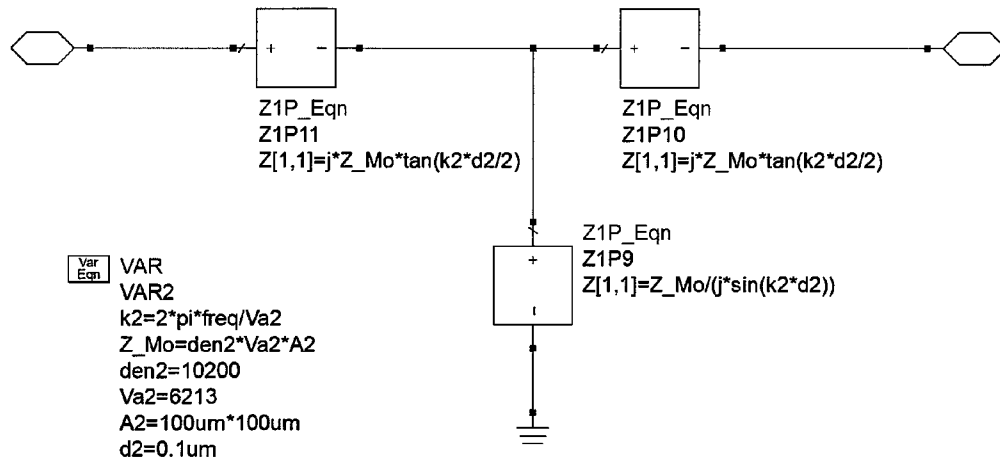
2.4.2 Mason 模型的 ADS 库

根据 2.4.1 小结 Mason 等效电路模型, 可以方便的建立 FBAR 的 ADS 库^[49], 本文建立的 ADS 模型包含了上电极、压电层和底电极结构。主要是分析不同材料 (电极材料和压电材料) 和不同厚度 (压电层厚度和电极厚度) 的 FBAR 的谐振特性曲线。在 ADS 中建立的压电层的仿真模块如图 2-9 (a) 所示, $P1$ 、 $P2$ 为电学端口, $P3$ 、 $P4$ 为声学端口可以实现与普通声学层的级联。普通声学层 (电

极层) 的 ADS 仿真模块如图 2-9 (b) 所示, $P1$ 、 $P2$ 为声学端口, 实现与压电层的声学端口的级联。



(a) 压电层



(b) 普通声学层

图 2-9 压电层及普通声学层的 ADS 库

将压电层的仿真模型与普通声学层的仿真模型级联可以得到包含上电极、压电层和底电极三层结构的 FBAR 的 ADS 仿真模型，如图 2-10 所示。利用此 ADS 仿真电路，就可以分析不同材料、不同纵向尺寸结构对 FBAR 谐振特性的影响，具体的仿真结果会在第三章讲到。

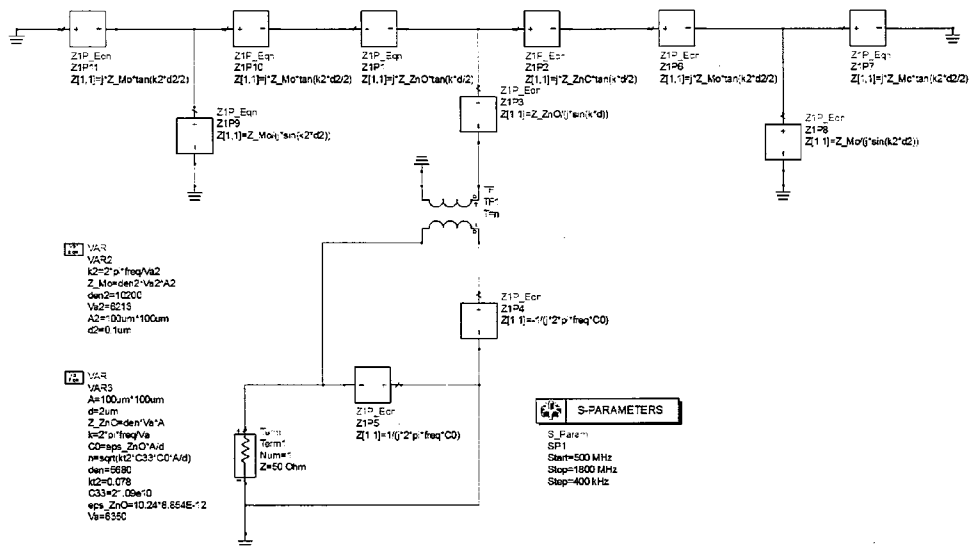


图 2-10 FBAR 的 ADS 库

2.5 本章小结

本章内容主要是介绍了与 FBAR 有关的一些基础知识。

首先介绍了正压电效应和逆压电效应的产生原因；介绍了压电器件在实际工作中，由两种机械边界条件和两种电学边界条件而产生的四类压电方程；介绍了 FBAR 的基本工作原理；介绍了 FBAR 的三种结构类型，FBAR 常用的压电材料和电极材料的选择标准；最后介绍了 FBAR 的一维仿真模型，包括 Mason 模型、BVD 模型和 MBVD 模型，并建立了 Mason 模型的 ADS 库。

第三章 基于切趾法的低杂散模式 FBAR 仿真分析

描述压电器件及其负载的压电方程比较复杂，相应的求得的二维和三维方程的解也相当复杂，因此压电器件的精确建模仿真通常需要运用数值方法——有限元法（Finite Element Method, FEM）。目前这一方法已相当成熟并被大量应用于工程实例中，线性压电材料的有限元公式由 Allik 和 Hughes 提出^[50]，在这之后，有限元法（FEM）被广泛应用于压电器件的仿真。尽管有限元法（FEM）的计算量很大，但是随着计算机计算速度和内存容量的不断提高，有限元法（FEM）的应用变得越来越普遍。有限元法（FEM）可适用于几何尺寸复杂的模型，可适用于不同的压电材料和晶体各向异性，采用有限元法（FEM），模型的简化容易、仿真计算准确、灵活。薄膜体声波谐振器的主谐振频率附近出现的寄生谐振受到器件尺寸的影响，如器件的宽度和厚度比，对于宽度和厚度比大的器件来说，一维模型足够可以用来对器件的设计进行仿真，对于长度和宽度比大的器件来说，二维模型足够可以用来进行仿真，但是，如果将器件横向形状变化对寄生谐振的影响展现出来只能运用三维模型。

3.1 薄膜体声波谐振器一维仿真结果

利用 2.4.2 小节建立的 FBAR 的 ADS 仿真模型，仿真得到 Mo/ZnO/Mo 结构的 FBAR 的谐振特性曲线如图 3-1 所示。图中显示出了电极厚度（压电层厚度为 $2\mu\text{m}$ ）和压电材料厚度（电极厚度为 $0.2\mu\text{m}$ ）对 FBAR 谐振特性的影响情况。

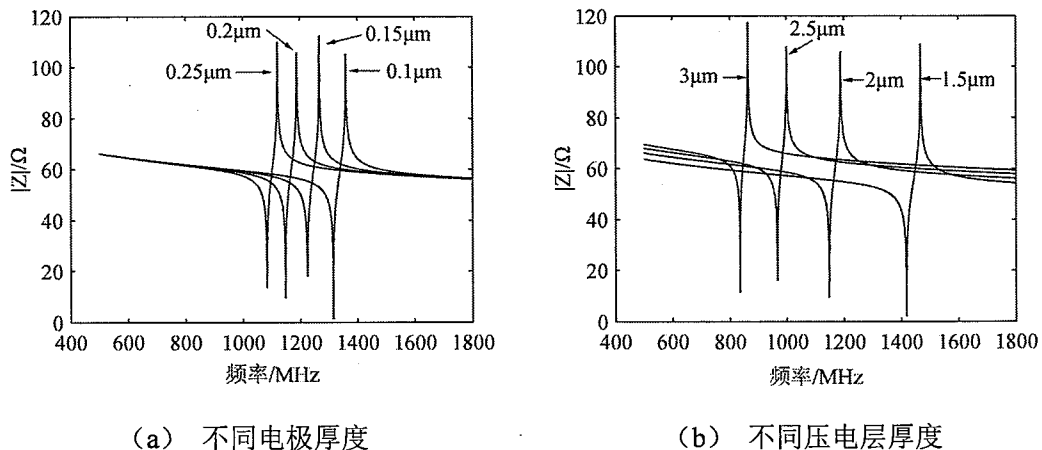


图 3-1 不同材料以及厚度的 FBAR 谐振特性曲线

随着电极、压电层厚度增加, FBAR 的谐振频率均是降低的, 利用一维分析模型, 可以快速得到某一频率时电极及压电层的厚度。

通过一维仿真得到的阻抗曲线可以看到, 阻抗曲线是非常平滑的, 没有寄生模式出现, 而在本章接下来的分析中, 利用 ANSYS 建立的 FBAR 三维仿真模型, 其阻抗特性曲线出现了许多寄生谐振, 这些寄生谐振正是一维模型无法仿真得到的。

3.2 有限元方程

有限元模型的求解基础是压电材料中将机械量和电学量联系起来的矩阵方程。压电材料中本征压电方程如下^[51],

$$\begin{aligned} T_{6 \times 1} &= c_{6 \times 6}^E S_{6 \times 1} - e_{6 \times 3}^T E_{3 \times 1} \\ D_{3 \times 1} &= e_{3 \times 6} S_{6 \times 1} + \varepsilon_{3 \times 3}^S E_{3 \times 1} \end{aligned} \quad (3-1)$$

其中 T 是应力向量, S 是应变向量, E 是电场强度, 单位为 V/m , e 是压电常数矩阵, 单位为 C/m^2 , c^E 是电场不变情况下的弹性常数矩阵, 单位是 N/m^2 , ε^S 是恒应变下的介电常数矩阵, 单位是 F/m , 上脚标“T”代表矩阵的转置。

准静态条件下电场 E 与电势 ϕ 的关系如式(3-2)所示,

$$E = -\nabla \phi \quad (3-2)$$

其中, $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3})^T$

应变向量 S 可以通过机械位移 u 计算得到, 表达式如式(3-3)所示,

$$S = \nabla_s u \quad (3-3)$$

这里的 ∇_s 为 6 行 3 列的矩阵, 形式如式(3-4)所示,

$$\nabla_s = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} & \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \end{bmatrix} \quad (3-4)$$

由牛顿第二定律，可将压电材料的弹性性质表示成式(3-5)所示，

$$\nabla_T \cdot T = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (3-5)$$

这里 $\nabla = \begin{bmatrix} \partial/\partial x_1 & 0 & 0 & 0 & \partial/\partial x_3 & \partial/\partial x_2 \\ 0 & \partial/\partial x_2 & 0 & \partial/\partial x_3 & 0 & \partial/\partial x_1 \\ 0 & 0 & \partial/\partial x_3 & \partial/\partial x_2 & \partial/\partial x_1 & 0 \end{bmatrix}$ ， ρ 为压电材料的密度。压电材料的电

性能由麦克斯韦方程表示，考虑到材料的绝缘性，即压电材料体内无体电荷，可以得到，

$$\nabla \cdot D = 0 \quad (3-6)$$

为求得方程式(3-1)的解，还需要适当的机械边界条件和电场边界条件，边界条件和等式(3-1)-(3-6)共同决定了压电振动情况。

运用有限元法（FEM）求解问题时，需要将物理求解域离散化，即利用有限元软件中的网格划分方法将整个模型离散化成体积较小的单元，通过较小单元的线性插值得到整个连续物理场的解。

由图 3-2 所示的薄膜体声波谐振器的物理求解域，利用映射网格划分法将其划分成六面体小单元，需要求解的连续场量为机械位移 u_i ($i=1, 2, 3$) 和电势 ϕ ，由线性插值函数可得二者的表达式如式(3-7)所示，

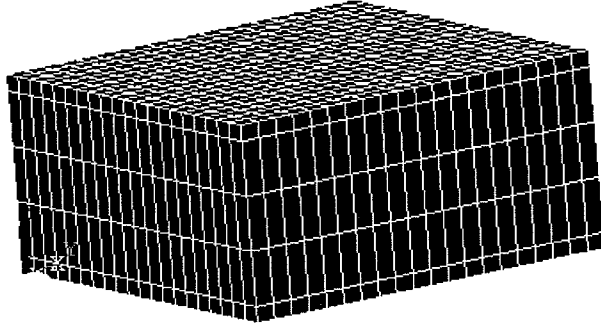


图 3-2 FBAR 模型的网格划分

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{r}) &= \sum_{j=1}^n a_{ij} N_j(\mathbf{r}), i=1,2,3, \\ \phi(\mathbf{r}) &= \sum_{j=1}^n b_j N_j(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in V_e. \end{aligned} \quad (3-7)$$

其中，位置矢量 $\mathbf{r}$ 为： $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)^T$ ， n 是节点的个数， a_{ij} 是位移自由度， b_j 是电自由度，位移自由度和电自由度的值是未知的，它们的值通过求解有限元方程得到。在式(3-7)中， $N_j(\mathbf{r}) = N_j(x_1, x_2, x_3)$ 是单元的形函数，满足以下的插值特征，

$$N_j(\mathbf{r}_i) = N_j(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}) = \delta_{ij}, i, j = 1, \dots, n \quad (3-8)$$

其中， $\mathbf{r}_i$ 是 i 的位置， δ_{ij} 是克罗内克函数 ($i=j$ 时，值为 1； $i \neq j$ 时，值为 0)，式(3-8)说明自由度的值等于节点处连续场量的值。式(3-7)矩阵形式表示如下，

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{r})_{3 \times 1} &= \mathbf{N}_u(\mathbf{r})_{3 \times 3n} \mathbf{a}_{3n \times 1} \\ \phi(\mathbf{r}) &= \mathbf{N}_p(\mathbf{r})_{1 \times n} \mathbf{b}_{n \times 1} \end{aligned} \quad (3-9)$$

其中， $\mathbf{N}_u(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{N}_p(\mathbf{r})$ 为形函数矩阵， $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$ 分别是机械自由度和电自由度。

通过以上的压电方程式以及位移、电势的插值函数式可以得到矩阵形式的有限元方程，

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \ddot{\mathbf{u}} \\ \ddot{\phi} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\phi} \\ \mathbf{K}_{u\phi}^T & \mathbf{K}_{\phi\phi} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \phi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{Q} \end{Bmatrix} \quad (3-10)$$

其中, M 为系统的质量矩阵, K_{uu} 、 $K_{u\phi}$ 、 $K_{\phi\phi}$ 分别为系统的机械刚度矩阵、压电耦合矩阵和介电常数矩阵, 当模型的材料参数给定, 有限元网格生成后, 这些矩阵就完全唯一确定了; F 是载荷力向量, Q 是电极表面的电荷量。

3.3 薄膜体声波谐振器 ANSYS 建模

实际的 FBAR 器件为背空腔型结构, 建模仿真其振动特性时, 将实际的器件进行了简化, 模型仅包含有效区域部分, 即顶电极-压电层-底电极的三明治结构。仿真采用了 ANSYS 软件, 建立了三种形状的 FBAR 模型, 如图 3-3 所示。三维有限元仿真模型包括顶电极、压电层和低电极三层结构, 顶电极和底电极材料均为 Mo, 单元类型采用 Solid45; 压电层材料为 AlN 或者 ZnO, 单元类型采用 Solid5, 整个模型的形状有方形、圆形和非正五边形。仿真中采用了映射网格划分方法, 划分的单元类型为六面体单元, 节点自由度为位移和电压。对模型施加位移约束条件为模型四周固支, 施加的电压条件为上电极加 1V 电压, 底电极加 0V 电压, 分析类型为谐响应分析。

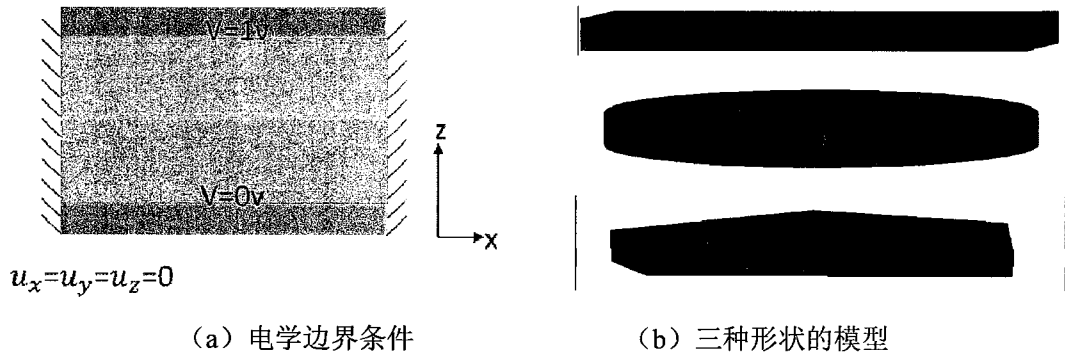


图 3-3 FBAR 仿真模型

压电材料 AlN 和 ZnO 均属于六方晶系 6mm 点群, 它们的弹性系数矩阵、压电矩阵、相对介电常数矩阵满足如下形式:

ZnO 的弹性系数矩阵、压电矩阵、相对介电常数矩阵分别为:

$$c = \begin{bmatrix} 209.7 & 121.1 & 105.1 & 0 & 0 & 0 \\ 121.1 & 209.7 & 105.1 & 0 & 0 & 0 \\ 105.1 & 105.1 & 210.9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 42.47 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 42.47 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 44.3 \end{bmatrix} (GPa) \quad (3-11a)$$

$$e = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -0.48 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.48 & 0 & 0 \\ -0.573 & -0.573 & 1.32 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} (C/m^2) \quad (3-11b)$$

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} 8.55 & 0 & 0 \\ 0 & 8.55 & 0 \\ 0 & 0 & 10.24 \end{bmatrix} \quad (3-11c)$$

AlN 的弹性系数矩阵、压电矩阵、相对介电常数矩阵分别为：

$$c = \begin{bmatrix} 345 & 125 & 120 & 0 & 0 & 0 \\ 125 & 345 & 120 & 0 & 0 & 0 \\ 120 & 120 & 395 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 118 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 118 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 110 \end{bmatrix} (GPa) \quad (3-12a)$$

$$e = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -0.48 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.48 & 0 & 0 \\ -0.58 & -0.58 & 1.55 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} (C/m^2) \quad (3-12b)$$

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 11 \end{bmatrix} \quad (3-12c)$$

需要说明的是，上述给出的材料参数矩阵，其行向量或列向量的排列顺序是按照 IEEE 的标准给出的，即 x, y, z, yz, xz, xy ，而在 ANSYS 软件中，参数矩阵行向量或列向量的输入顺序是 x, y, z, xy, yz, xz ，因此，在输入材料的矩阵参数时，要对上述矩阵中的参数的顺序做相应的调整。

ANSYS 仿真分析所依赖的有限元方程式(3-10)，谐响应分析完成后，利用式(3-13)求得 FBAR 的阻抗特性曲线^[51]，

$$Z = j \frac{U}{2\pi fQ} \quad (3-13)$$

其中 U 是施加在上电极表面的电压的幅值， Q 是上电极表面的电荷量， Q 可以通过有限元分析的后处理得到。

3.4 仿真结果及分析

本小节仿真分析了不同形状、不同面积的 FBAR 模型中横向寄生模式的产生情况，仿真并计算得到了模型的阻抗特性曲线和史密斯圆图，通过 FBAR 的阻抗曲线可以直观地看出横向寄生模式地分布情况，通过对史密斯曲线进行拟合分析得到“不圆度 (Non-Circularity, NC)”的值^[57], NC 的数值大小可以对横向杂散模式的强弱进行量化。不圆度 NC 的定义如下：在史密斯圆图上确定一个中心点 $C(x_0, y_0)$ ，使得该中心点到史密斯曲线上每一个点的距离 r 的方差 σ^2 最小，求出中心点与曲线上每一个点的距离的均方差 σ 和均值 E ，两者的比值即为不圆度 NC。NC 的数值越小说明史密斯曲线越光滑，产生的横向寄生模式越少。

3.4.1 不同形状的 FBAR 仿真结果分析

三种模型电极材料均为 Mo，厚度为 $0.2\mu\text{m}$ ，压电层材料为 AlN，厚度为 $2\mu\text{m}$ ，模型的面积均为 $10000\mu\text{m}^2$ 。ANSYS 谐响应计算完成后，通过时间历程后处理器 (post26) 得到 FBAR 的阻抗特性曲线，并计算得到史密斯曲线，如图 3-4 所示，不圆度 NC 的值，如表 3-1 所示。

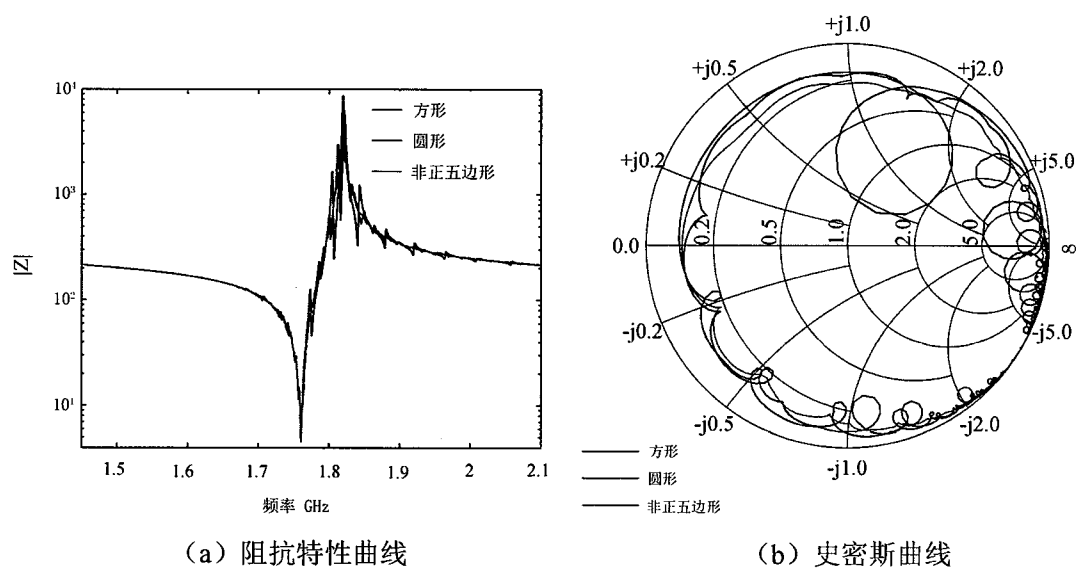


图 3-4 不同形状的 FBAR 阻抗特性曲线及史密斯曲线

表 3-1 不同形状的 NC 值:

形状	方形	圆形	非正五边形
NC	0.0464	0.0236	0.0151

从所得阻抗特性曲线可以看到有效区域形状不同, 横向寄生模式的强弱不同。有效区域形状为方形时, FBAR 谐振频率附近的杂散模式较多, 圆形和非正五边形的杂散模式均有减少, 并且非正五边形 FBAR 的阻抗曲线几乎为光滑曲线。计算得到非正五边形的 NC 值为 0.0151, 比方形结构和圆形结构的 NC 值分别减少 67.5% 和 36%, 说明非正五边形结构可以减少模型中横向声波产生的寄生模式。

FBAR 的工作频率是基于厚度方向传播的体声波, 这一声波被限制在压电层内引起驻波谐振。但实际上, 由于 FBAR 的横向尺寸有限, 导致 FBAR 体内也激励起沿横向传播的体声波, 横向谐振表现在阻抗特性曲线上即为小的寄生谐振模式, 在史密斯圆图上即为一系列的小圆。FBAR 的工作频率^[46]近似计算为,

$$f_0 = \frac{v_L}{2d} \quad (3-14)$$

其中 v_L 是厚度方向传播的声波波速, d 是 FBAR 的厚度。

出现在 FBAR 工作频率 f_0 附近的横向模式声波, 其谐振频率近似计算为,

$$f_T = \frac{Nv_T}{2L}, N=1,2,3,\dots \quad (3-15)$$

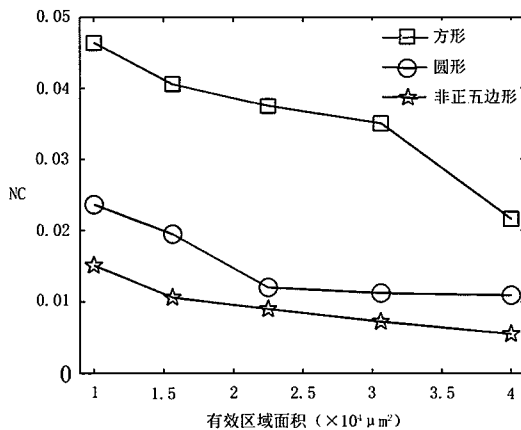
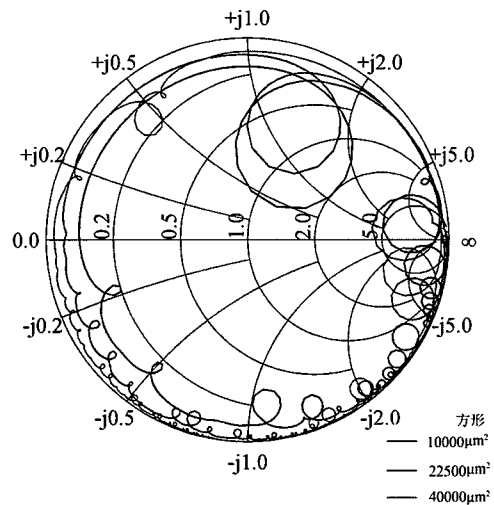
其中 v_T 是横向传播的声波波速, L 是 FBAR 横向尺寸。

横向模式声波的 N 阶谐频出现在 FBAR 工作基频 f_0 附近, 即 $Nf_T \approx f_0$ 时, 会在 f_0 附近出现横向寄生模式。寄生模式的振动强度随着 N 的增大而减弱, 或随传输距离 L 的增大而减弱; 另外, 它还与横向边界上传输距离相同的点的数量有关, 即横向边界上具有相同 L 的点的个数有关, 点数越多寄生模式的振动强度就越强。

与方形相比, 圆形和非正五边形结构的 FBAR, 其横向边界不再平行, 边界上的点经多次反射到达起点所经历的传输距离各不相同, 横向模式振动在频域上分散更为均匀, 具有谐振频率相同的点的数量减少, 单一频率振动强度减弱, 从而使阻抗特性曲线更为平滑。

3.4.2 不同面积的 FBAR 仿真结果分析

由上述讨论知道,当 FBAR 横向声波的传输路径变长时,FBAR 工作频率附近的杂散模式将会减少,本小结仿真了不同面积下 FBAR 横向杂散模式的产生情况。模型的面积分别为 $S_1=10000\mu\text{m}^2$ 、 $S_2=15625\mu\text{m}^2$ 、 $S_3=22500\mu\text{m}^2$ 、 $S_4=30625\mu\text{m}^2$ 、 $S_5=40000\mu\text{m}^2$,厚度均为为 $0.2\mu\text{m}-2\mu\text{m}-0.2\mu\text{m}$,并且对有效区域形状为方形、圆形和非正五边形的情况分别进行了仿真分析,得到史密斯曲线及 NC 的值如图(3-5)所示。由图 3-5(a)可以看到,随着 FBAR 有效区域面积的增大, NC 的数值减小,当横向形状为非正五边形时,横向面积为 $40000\mu\text{m}^2$ 时的 NC 值为 0.0055,比横向面积为 $10000\mu\text{m}^2$ 时减少 63.6%,说明横向面积的增加可以减少横向声波产生的寄生模式。这是因为面积的增加使得横向模式声波的传播路径变大,相应的横向模式声波的谐振阶数 N 变大, N 的增大使得横向杂散模式的强度减弱。

(a) 不同形状及面积的 NC 值

(b) 方形不同面积的史密斯曲线

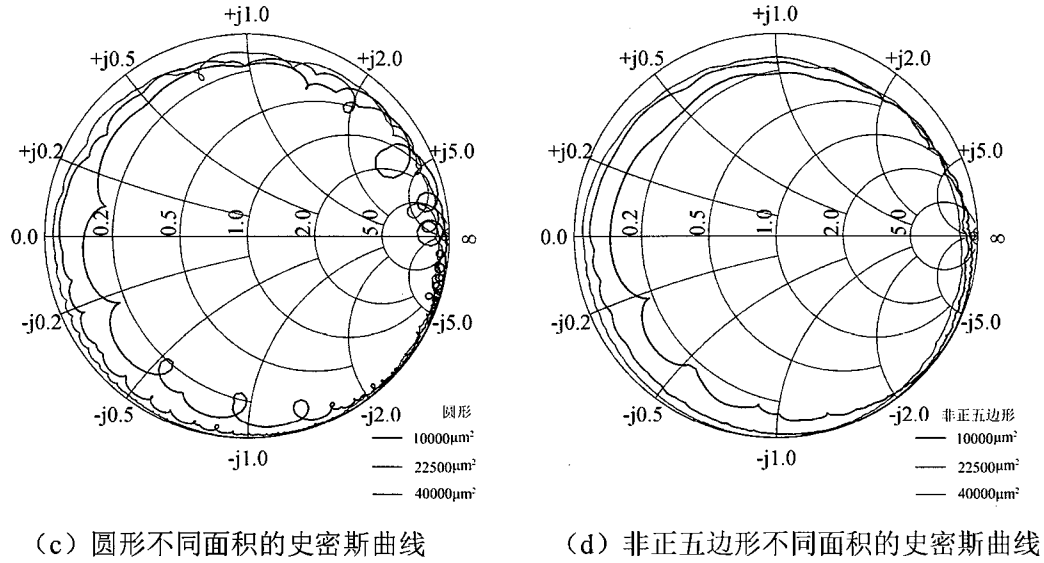
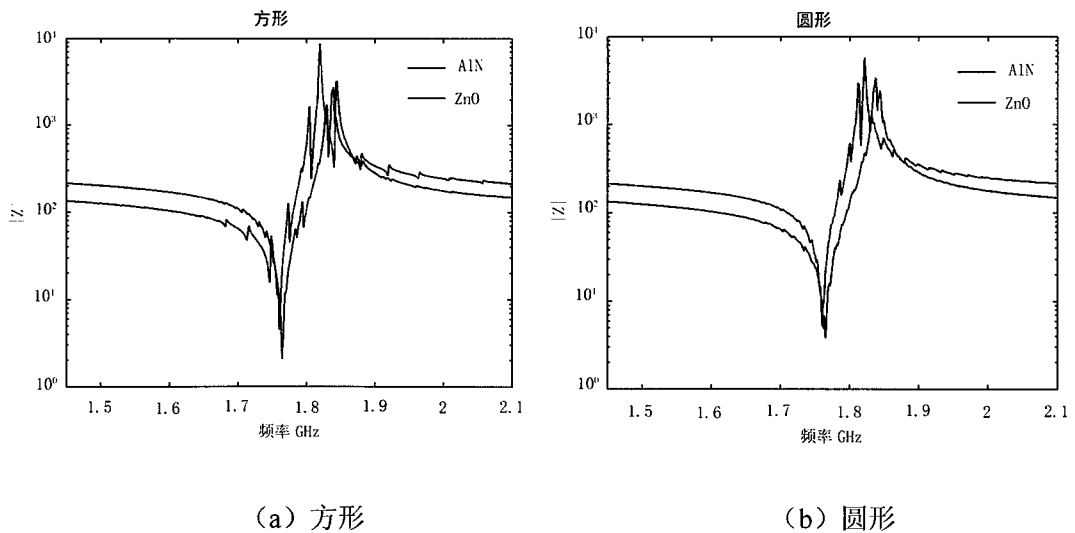


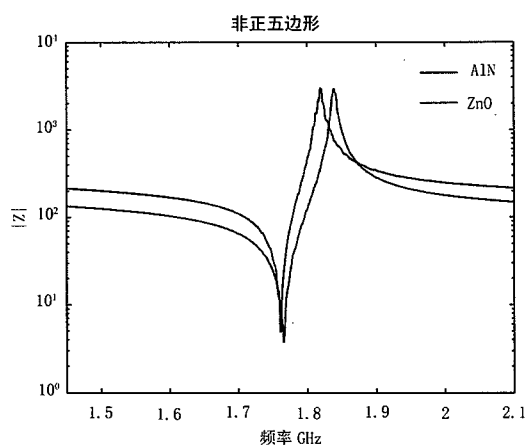
图 3-5 不同面积的史密斯曲线及 NC 值

3.5 不同压电材料构成的 FBAR 仿真结果分析

3.5.1 仿真结果分析

目前，用于 FBAR 的压电材料主要为 AlN 和 ZnO，两者的材料参数在 3.3 节中已给出。为了分析由这两种压电材料构成的 FBAR 中横向寄生模式的产生情况，建立了有效区域形状为方形、圆形和非正五边形，面积为 $10000\mu\text{m}^2$ 的 FBAR 模型，ANSYS 仿真分析得到的阻抗特性曲线如图 3-6 所示，计算所得的 NC 值如表 3-2 所示。





(c) 非正五边形

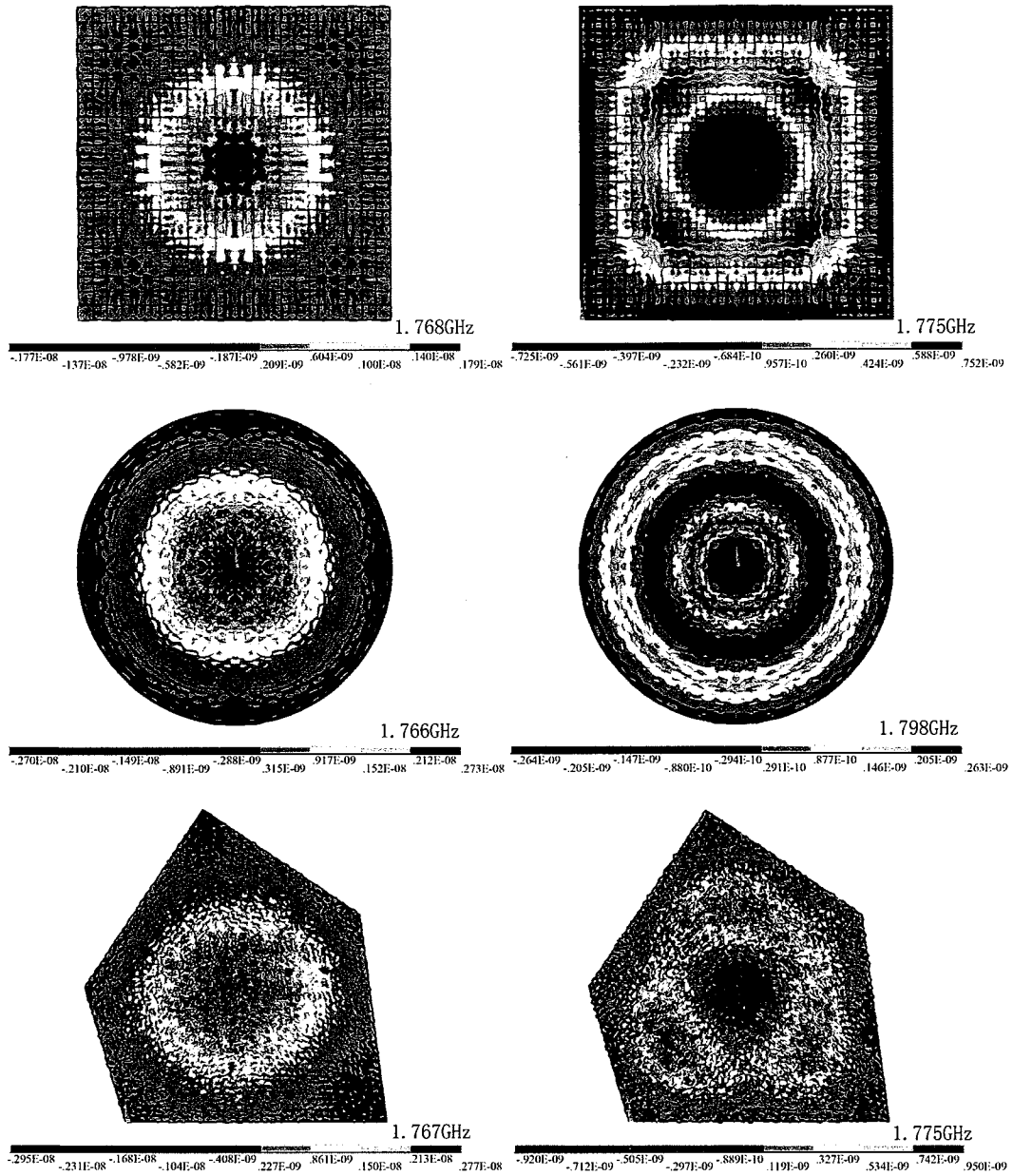
图 3-6 不同压电材料三种形状的阻抗特性曲线

 表 3-2 不同压电层材料的 NC 值:

形状	方形	圆形	非正五边形
ZnO	0.0542	0.0173	0.0129
AlN	0.0464	0.0236	0.0151

对仿真结果进行分析发现, 在相同的谐振频率 $f_s=1.76\text{GHz}$ 时, 比较 NC 的值可以看出, FBAR 模型横向形状为方形时, ZnO 做压电材料时产生的横向寄生模式较 AlN 做压电材料时要多; 但是, 采用“切趾法”设计的横向形状为圆形和非正五边形时, ZnO 做压电材料时产生的横向寄生模式较少, 圆形和非正五边形的 NC 值分别为 0.173 和 0.0129, 比 AlN 做压电材料时的 NC 值分别减少 26.7% 和 14.6%。

图 3-7(a)(b)所示分别是压电材料为 ZnO 和 AlN 时, 不同横向形状的 FBAR 模型中串联谐振频率 ($f_s=1.76\text{GHz}$) 附近厚度伸缩 (TE) 模式纵向位移振型图, 振型出现的频率标注在每个振型图的右下角。可以看出, 有效区域形状为圆形和非正五边形时, 一阶和高阶的横向杂散模式处的谐振强度均减弱。图 3-7(a)中的杂散模式出现在大于 f_s 处, 而图 3-7(b)中的杂散模式出现在小于 f_s 处, 并且, 图 3-7(a)中杂散模式的振动强度要小于图 3-7(b), 这和 NC 值的比较结果一致。



(a) 压电材料为 ZnO

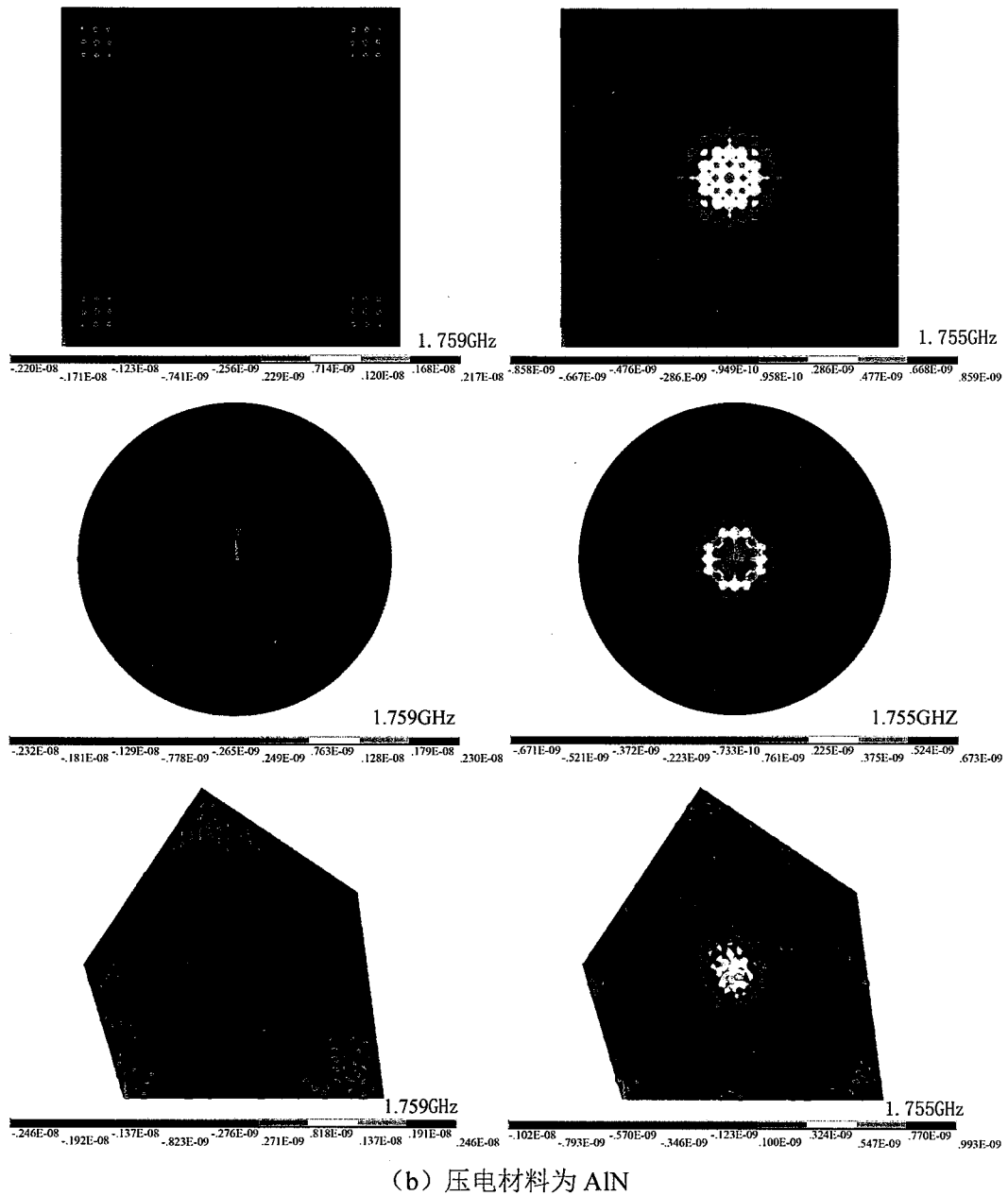


图 3-7 串联谐振频率附近 TE 波纵向位移振型图

3.5.2 寄生模式对梯型滤波器滤波曲线的影响

FBAR 滤波器的常用拓扑结构有梯形结构、桥式结构以及混合结构三种^[58]。梯形结构的滤波器是由一组串联 FBAR 和一组并联 FBAR 构成，其结构简单，结构示意图如图 3-8 所示。其中，所有串联分支 FBAR 的谐振频率相同，所有并联分支 FBAR 的谐振频率也都相同，并且串联分支 FBAR 的串联谐振频率等于

并联分支 FBAR 的并联谐振频率，这样就组成了以并联分支 FBAR 的串联谐振频率为下阻带衰减点，以串联分支 FBAR 的并联谐振频率为上阻带衰减点的带通滤波器。

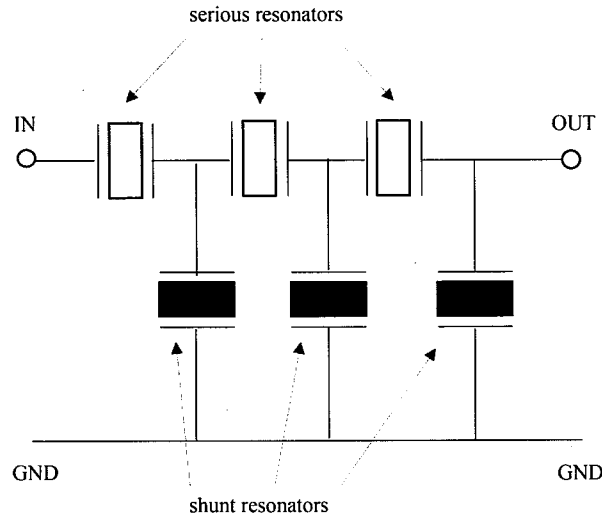


图 3-8 阶梯型结构滤波器

为了分析横向寄生模式对 FBAR 滤波器的通带滤波特性产生的影响，仿真了梯形结构的 FBAR 滤波器，滤波器串联分支 FBAR 的串联谐振频率和并联谐振频率分别为 1.84GHz 和 1.90GHz，FBAR 的顶电极、压电层和底电极的厚度分别为 $0.15\mu\text{m}$ 、 $2\mu\text{m}$ 和 $0.2\mu\text{m}$ ；并联分支 FBAR 的串联谐振频率和并联谐振频率分别为 1.76GHz 和 1.82GHz，FBAR 的顶电极、压电层和底电极的厚度分别为 $0.2\mu\text{m}$ 、 $2\mu\text{m}$ 和 $0.2\mu\text{m}$ 。仿真得到有效区域形状为方形、圆形和非正五边形时的 FBAR 构成的 3-3 阶滤波器反射系数曲线如图 3-9 所示。可以看到三种不同形状的 FBAR 构成的滤波器带外衰减情况相同，有效区域为方形的 FBAR 构成的滤波器由于横向寄生模式的影响，导致滤波器的带内波动明显；有效区域形状为圆形和非正五边形的 FBAR 构成的滤波器带内平滑。基于不同的压电材料，组成了四种梯型滤波器：串并联分支 FBAR 压电材料均为 AlN、串并联分支 FBAR 压电材料均为 ZnO、串联分支 FBAR 压电材料为 AlN 并联分支 FBAR 压电材料为 ZnO、串联分支 FBAR 压电材料为 ZnO 并联分支 FBAR 压电材料为 AlN。比较图 3-9 四幅图可以看出在相同的谐振频率下，压电材料为 ZnO 的 FBAR 横向

寄生模式较少，由其构成的滤波器带内平滑度更好。

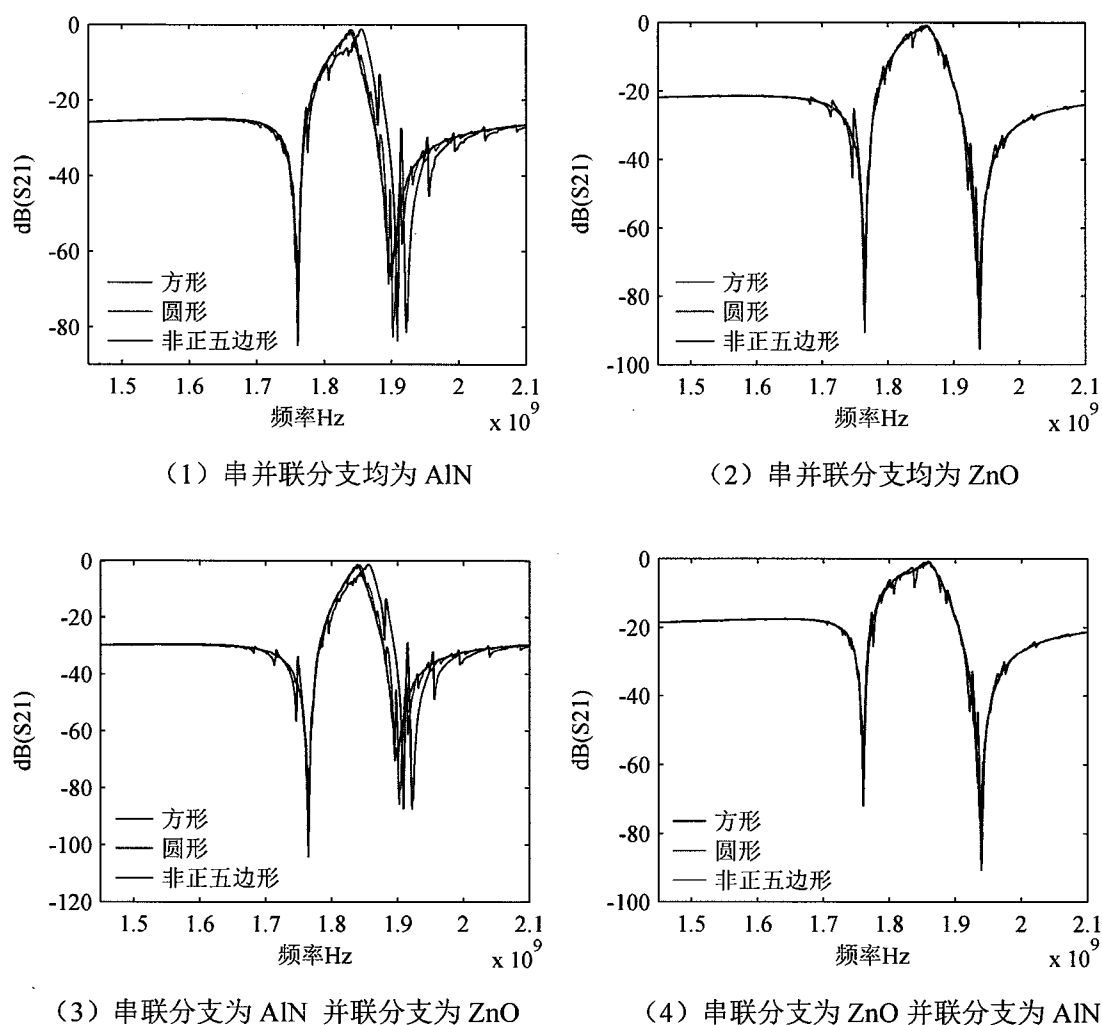


图 3-9 3-3 阶梯形 FBAR 滤波器的构成及其传输特性

3.6 本章小结

本章建立了 FBAR 的三维仿真分析模型，计算得到了阻抗特性曲线、史密斯曲线、史密斯曲线的拟合值不圆度 NC 以及 TE 波纵向位移振型图。分析比较了不同形状、不同面积的 FBAR 中横向波寄生模式的分布情况；仿真得到了不同压电材料的 FBAR 构成的梯型滤波器的传输特性曲线，分析了横向杂散模式对梯形结构滤波器的影响。由仿真结果得知，当 FBAR 有效区域形状为非正五边形时，工作频率附近横向寄生模式最少，此时 NC 值为 0.0151，比方形结构和圆形结构的 NC 值分别减少 67.5%和 36%；FBAR 有效区域面积越大，工作频率

附近横向寄生模式越少，横向形状为非正五边形、面积为 $40000\mu\text{m}^2$ 时 NC 值为 0.0055，比面积为 $10000\mu\text{m}^2$ 时减少 63.6%；在相同的谐振频率下，用 ZnO 做压电材料比用 AlN 做压电材料时横向寄生模式少，当横向形状为非正五边形，串联谐振频率为 1.76GHz 时，Mo/ZnO/Mo 结构的 NC 值为 0.0129，比 Mo/AlN/Mo 结构的 NC 值减少 14.6%。3-3 阶梯型滤波器的仿真结果表明有效区域为圆形和非正五边形 FBAR 滤波器的带内波动更小，当梯型滤波器的串并联分支 FBAR 由不同的压电材料构成时，滤波器传输特性要优于串并联分支 FBAR 由同种压电材料构成。

第四章 基于能陷法的低杂散模式 FBAR 仿真分析

能陷法是通过在 FBAR 有效区域和外部区域之间设置适当宽度和厚度的边框来实现寄生模式的抑制，依据器件不同的频散特性需要设置不同的边框结构来实现能陷条件。本章首先计算了 Mo/ZnO/Mo 结构和 Mo/AlN/Mo 结构的 FBAR 的频散曲线，基于所得频散曲线，利用 COMSOL 软件建立了 FBAR 的二维模型，通过设定不同宽度和不同厚度的边框结构，分析能陷法对不同频散特性的器件中横向声波产生的寄生模式的抑制情况。

4.1 频散曲线计算

频散曲线表示了波数随频率的变化情况，导致频散现象的原因有：几何结构的边界条件，如边界条件导致的声波反射；声波传输介质的材料特性，如材料的各向异性。频散曲线常用的理论计算方法有传输矩阵法、全局矩阵法、以及有限元法。Ngoc Bich Nguyen 等人^[52]运用这三种方法计算了 FBAR 中声波的频散特性，三种方法计算得到的频散曲线具有很好的一致性，相比较而言，通过有限元法来计算频散曲线的方法更简洁。有限元仿真计算频散曲线的方法分为时域有限元（TD-FEM）方法和频域有限元（ED-FEM）方法两种，利用时域有限元方法计算频散曲线时，需要对提取的位移函数进行二维离散傅里叶变换，即对提取到的位移函数从时域变换到频域，然后再从空间域变换到波数域；利用频域有限元方法计算频散曲线时，只需对提取的位移函数进行一维离散傅里叶变换，即只需将提取到的位移函数从空间域变换到波数域。有限元法计算 FBAR 的频散曲线采用的是频域有限元方法^[53]，国内外学者对有限元法计算 FBAR 的频散曲线的研究可见于文献[54][55][56]等。目前，已发表的文献中运用有限元法计算 FBAR 的频散特性，建立的模型均为二维有限元仿真模型，运用三维有限元模型进行 FBAR 频散曲线的计算国内外还尚未有相关文献报道，本文首次采用三维有限元模型计算了 FBAR 的频散特性，与二维有限元模型相比，三维模型更接近器件的实际结构，它包含了所有横向结构，其计算结果更准确。

本小节计算 FBAR 模型的频散特性，建立了横向形状为方形、纵向结构为 Mo/ZnO/Mo 和 Mo/AlN/Mo 结构的三维模型，如图 4-1 所示。Mo/ZnO/Mo 结构上电极、压电层、底电极厚度分别为 $0.1\mu\text{m}$ - $1.41\mu\text{m}$ - $0.1\mu\text{m}$ ；Mo/AlN/Mo 结构上

电极、压电层、底电极厚度分别为 $0.2\mu\text{m}$ - $2\mu\text{m}$ - $0.2\mu\text{m}$ ，两种模型横向面积均为 $100\times 100\mu\text{m}^2$ ，串联谐振频率 $f_s=1.76\text{GHz}$ 。采用映射网格划分方法将模型离散化成六面体单元，横向划分了 200 份，压电层纵向划分 3 份，电极纵向划分 1 份。

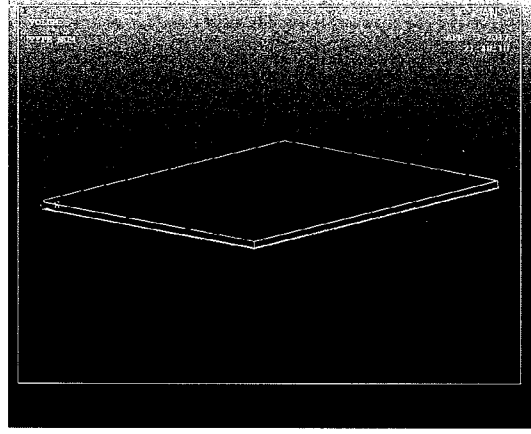


图 4-1 方形结构 FBAR 三维模型

ANSYS 谐响应分析完成后，提取了压电层上表面的位移，对其进行了空间傅里叶变换，得到的频散曲线如图 4-2 所示。图 4-2(a)显示，TE1 模式的横向波数为实数时，频率大于串联谐振频率 f_s ，说明 Mo/ZnO/Mo 结构的频散特性为 TYPE I 型。图 4-2(b)显示，TE1 模式的横向波数为实数时，频率小于串联谐振频率（截止频率） f_s ，说明 Mo/AlN/Mo 结构的频散特性为 TYPE II 型。

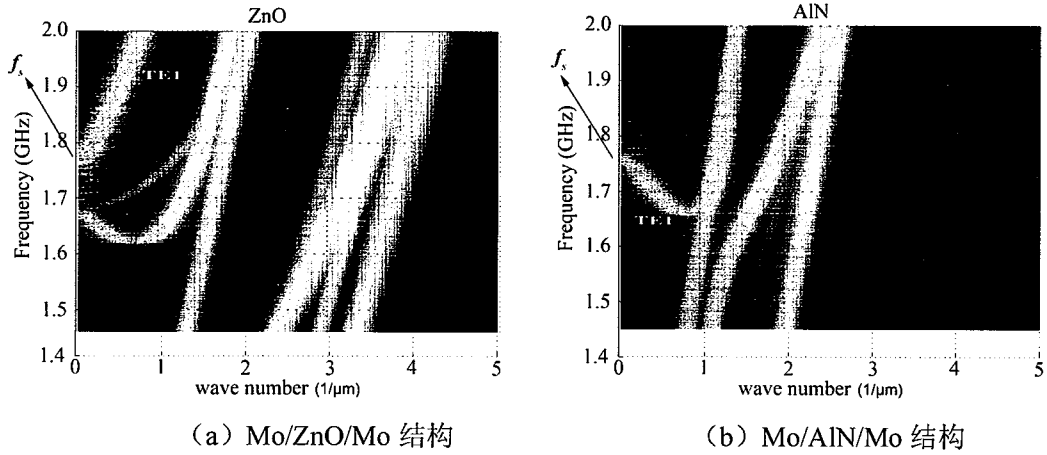


图 4-2 FBAR 频散曲线

另外，从频散曲线得到的波的分布特性与 3.5.1 小结中的 TE 波纵向位移振型图相吻合，即：Mo/ZnO/Mo 结构的横向波寄生模式出现在大于 $f_s=1.76\text{GHz}$ 的

频率处, 方形、圆形、非正五边形一阶寄生模式分别出现在 1.768GHz、1.766GHz、1.767GHz 处, 高阶寄生模式分别出现在 1.775GHz、1.798GHz、1.775GHz 处; 而 Mo/AlN/Mo 结构的横向波寄生模式出现在小于 $f_s=1.76\text{GHz}$ 频率处, 方形、圆形、非正五边形一阶寄生模式均出现在 1.759GHz 处, 方形、圆形、非正五边形高阶寄生模式均出现在 1.755GHz 处。

4.2 能陷法的基本原理

利用边框结构抑制寄生模式是由 J. Kaitila 等人在 2003 年发表的文章中提出, 这一方法的提出是基于 1963 年 Shockley, Curran, 和 Koneval^[59]在文章中提出的能陷思想: 如果谐振器有效区域以外的部分其截止频率比谐振器的谐振频率高, 那么谐振器中产生的振动能量就会被限制在谐振器中, 而有效区域外部的振动能量呈指数衰减, 指数衰减并不代表能量的损耗而是指能量被限制在了一个特定的区域内。图 4-3 左图给出了具有能陷特点的器件结构示意图, 图 4-3 右图是 TE1 模式的频散曲线。

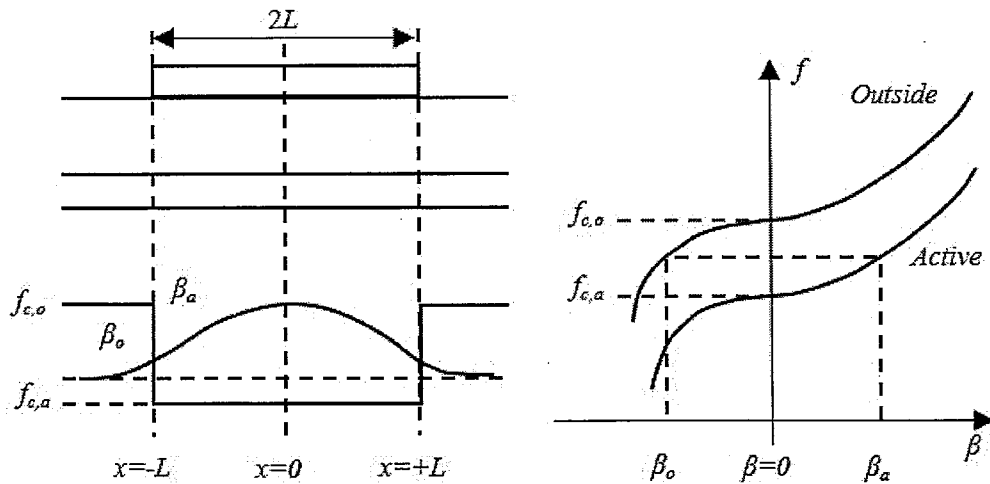


图 4-3 满足能陷条件的器件结构及频散曲线 (TE 模式)

在分析能陷法实现寄生模式的抑制之前, 首先分析无边框的结构中声波模式的分布情况:

压电器件的有效机电耦合系数可表示为式(4-1),

$$k_{\text{eff}}^2 = \frac{U_m^2}{U_e U_d} \quad (4-1)$$

其中 U_e , U_m , U_d 分别为弹性能、机电耦合能和电能，具体计算式表示如下，

$$U_e = \frac{1}{2} \int_V T s^E T dV \quad (4-2)$$

$$U_m = \frac{1}{4} \int_V (T dE + E dT) dV \quad (4-3)$$

$$U_d = \frac{1}{2} \int_V E \varepsilon^T E dV \quad (4-4)$$

假设器件中 z 方向的位移和 x 方向的位移相互独立，即满足式(4-5)，

$$u(x, z) = u_x(x) \cdot u_z(z) \quad (4-5)$$

根据式(4-1)机电耦合系数的定义式，可将 x 方向的机电耦合系数表示为式(4-6)，

$$k_x^2 = \frac{(\int E_x u_x dx)^2}{\int E_x^2 dx \cdot \int u_x^2 dx} \quad (4-6)$$

其中 E_x 为 z 方向的电场在 x 方向的分量，可取为常数 1。

根据图 4-3，将 x 方向的位移 $u_x(x)$ 表示为式(4-7)，

$$u_x(x) = \begin{cases} a \cdot \cos(\beta_a x) & -L \leq x \leq +L \\ b \cdot \exp(-\beta_o x) & x > L \end{cases} \quad (4-7)$$

其中 β_a 和 β_o 分别为有效区域和有效区域以外部分的横向波数，系数 a 和 b 可以通过应用边界条件求得。

应用 $x=L$ 和 $x=-L$ 处的连续边界条件，即 u_x 和其一阶导数 du_x/dx 在 L 和 $-L$ 处均连续，即，

$$\begin{cases} u_x(x)|_{x=L^-} = u_x(x)|_{x=L^+} \\ \frac{du_x(x)}{dx}|_{x=L^-} = \frac{du_x(x)}{dx}|_{x=L^+} \end{cases} \quad (4-8)$$

将(4-7)式代入式(4-8)得到，

$$\begin{cases} a \cdot \cos(\beta_a L) = b \cdot \exp(-\beta_o L) \\ -a \cdot \beta_a \cdot \sin(\beta_a L) = -\beta_o \cdot b \cdot \exp(-\beta_o L) \end{cases} \quad (4-9)$$

式(4-9)中两式相除得到谐振条件式，

$$\beta_a \tan(\beta_a L) = \beta_o \quad (4-10)$$

由于 β_a 和 β_o 均为频率 f 的函数，即 $\beta = \beta(f)$ ，所以(4-10)式亦与频率 f 有关，这意味着横向机械边界条件决定了器件的工作模式。

由(4-10)式分析讨论寄生模式的产生情况，将从外部的横向波数 $\beta_o \rightarrow \infty$ 和 $\beta_o = 0$ 两种情况来讨论：

1) $\beta_o \rightarrow \infty$ ，此时外部区域不存在横向声波。

将 $\beta_o \rightarrow \infty$ 带入到式(4-10)可以得到，

$$\beta_a L = (2n+1) \cdot \frac{\pi}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4-11)$$

由式(4-7)和式(4-6)可求得 x 方向的机电耦合系数，

$$k_x^2 = \frac{2 \cdot \sin^2(\beta_a L)}{\beta_a^2 L^2 \left(1 + \frac{1}{\beta_a L} \cdot \sin(\beta_a L) \cos(\beta_a L) \right)} \quad (4-12)$$

将(4-11)式带入到式(4-12)得到 $\beta_o \rightarrow \infty$ 时的 x 方向的机电耦合系数为，

$$k_{x,n}^2 = \frac{8}{\pi^2} \cdot \frac{1}{(2n+1)^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4-13)$$

式(4-13)表明，随着 n 的增大， x 方向的耦合系数逐渐减小， $n=0$ 时的模式为器件工作的主模， $n>0$ 时的模式为寄生模式，寄生模式的产生是由于电场 E_x 可以和对称模式声波产生耦合，即对称模式声波的 x 方向的耦合系数式(4-6)不为零。

将式(4-11)带入到式(4-7)得到有效区域 x 方向的位移表达式，

$$u_x(x) = a \cdot \cos\left(\frac{2n+1}{L} \cdot \frac{\pi}{2} x\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad -L \leq x \leq +L \quad (4-14)$$

由式(4-14)得到 n 取 0、1、2 时 x 方向位移曲线 u_x 如图 4-4 所示，由位移曲线可以看出，当 $n=0$ 时，式(4-6)在 $-L < x < L$ 内积分不为零，当 $n>0$ 时，式(4-6)在 $-L < x < L$ 内积分也不为零，说明此时存在寄生模式。

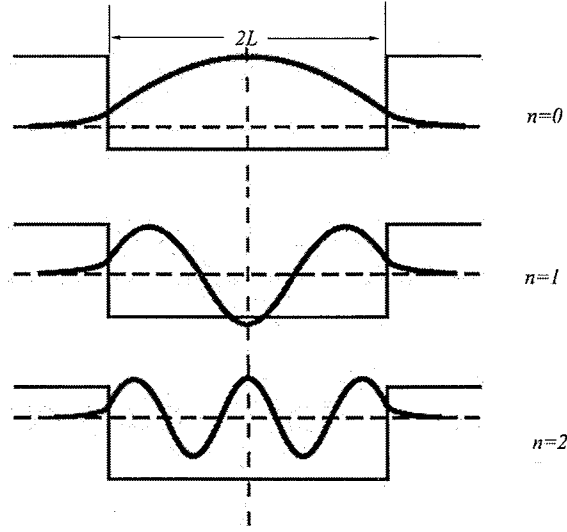


图 4-4 无边框时有效区域横向位移

2) $\beta_o=0$ ，此时外部区域传播的声波幅度为常数。

将 $\beta_o=0$ 带入到式(4-10)得到，

$$\beta_a L = n \cdot \pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4-15)$$

将此式带入到(4-12)式中得到 $\beta_o=0$ 时的 x 方向的机电耦合系数为，

$$k_{x,n}^2 = \begin{cases} 1 & n = 0 \\ 0 & n \neq 0 \end{cases} \quad (4-16)$$

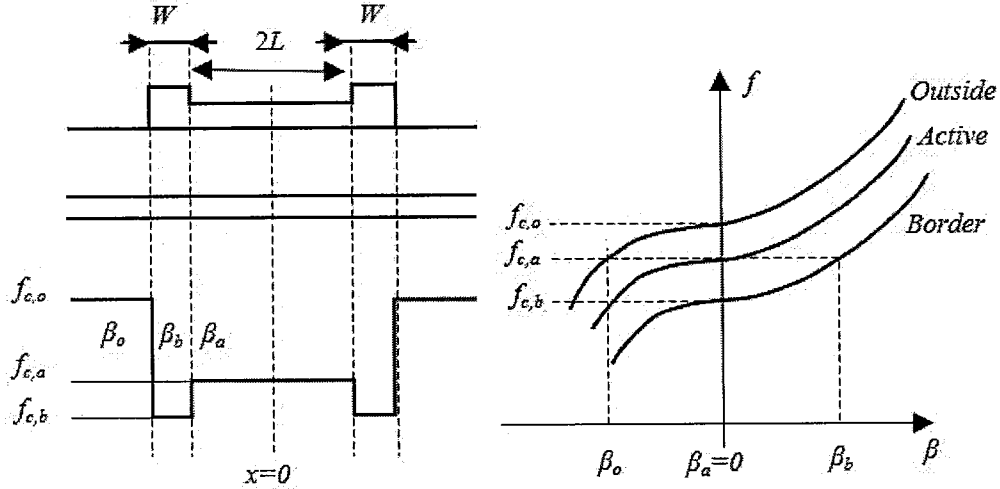
说明此时只有 $n=0$ 时的主模出现， $n>0$ 时的寄生模式为零。

综上所述，当 $\beta_o \rightarrow \infty$ 时，有效区域内存在主模和寄生模式；当 $\beta_o=0$ 时，有效区域内只有主模不存在寄生模式。

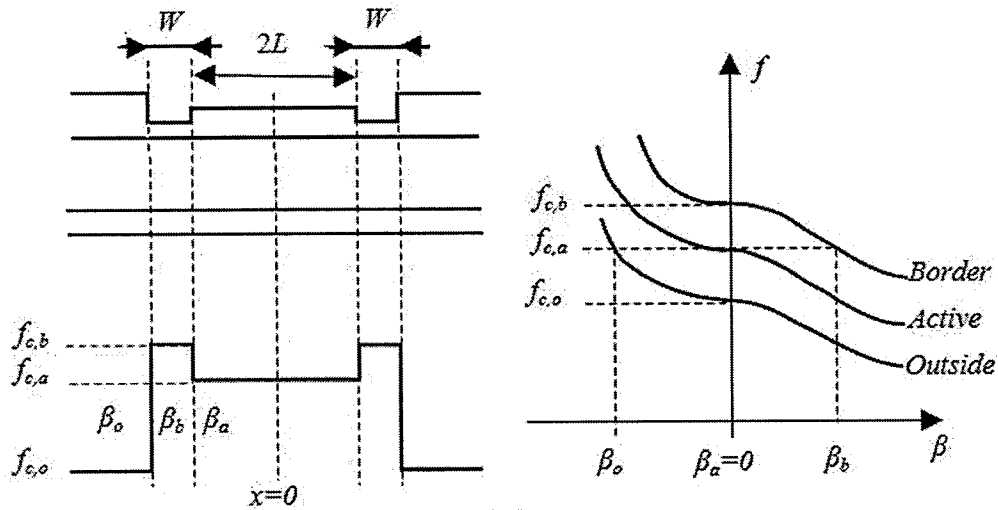
上述分析中， $\beta_o=0$ 的情况表示了器件的横向尺寸无限大，在横向尺寸无限大的谐振器中，由于没有横向边界的限制，就不会产生横向谐振，因此也就不会产生寄生模式。对于横向尺寸有限的谐振器来说，如果在谐振器的有效区域的边界 L 和 $-L$ 处，横向位移 u_x 的一阶导数 du_x/dx 能够满足边界条件： $du_x/dx=0$ ，那么也可以抑制寄生模式的出现。能陷法正是通过设置合适的边框结构来达到上述的边界条件，实现寄生模式的抑制。

能陷法实现寄生模式的抑制要根据不同的频散特性设计不同的边框结构。对于 TYPE I 型的频散曲线，若要满足： $du_x/dx=0$ ， $x=\pm L$ ，需要设置如图 4-5(a)左图所示的“凸”形结构的边框，此时频散特性如 4-5(a)右图所示，边框区域的横

向波数 β_b 为实数，有效区域以外部分的横向波数 β_o 为虚数。而对于 TYPE II 型的频散曲线，若要满足： $du_x/dx=0, x=\pm L$ ，则需要设置如图 4-5(b)左图所示的“凹”形边框结构，此时的频散特性如图 4-5(b)右图所示，边框区域的横向波数 β_b 为实数，有效区域以外部分的横向波数 β_o 为虚数。



(a) 凸型边框器件结构及频散曲线 (TE 模式)



(b) 凹型边框器件结构及频散曲线 (TE 模式)

图 4-5 器件结构及频散曲线 (TE 模式)

对于具有 TYPE I 型频散特性和 TYPE II 型频散特性的器件，施加边框后，

x 方向的横向位移 u_x 均可表示成式(4-17)所示,

$$u_x(x) = \begin{cases} a \cdot \cos(\beta_a x) & -L < x < +L \\ b \cdot \cos(\beta_b x + \gamma) & +L < x < +(L+W) \\ c \cdot \exp(-\beta_o x) & x > +(L+W) \end{cases} \quad (4-17)$$

其中 γ 为相位常数。

当器件工作在串联谐振频率时, 此时有效区域的横向波数 $\beta_a=0$, 将 u_x 和其一阶导数 du_x/dx 在 L 和 $-L$ 处的连续性边界条件代入式(4-17)得到,

$$\begin{cases} u_x(x)|_{x=L^-} = u_x(x)|_{x=L^+} \\ u_x(x)|_{x=(L+W)^-} = u_x(x)|_{x=(L+W)^+} \\ \frac{du_x(x)}{dx}|_{x=L^-} = \frac{du_x(x)}{dx}|_{x=L^+} \\ \frac{du_x(x)}{dx}|_{x=(L+W)^-} = \frac{du_x(x)}{dx}|_{x=(L+W)^+} \end{cases} \quad (4-18)$$

将式(4-17)代入式(4-18)得到,

$$\begin{cases} a = b \cdot \cos(\beta_b L + \gamma) \\ b \cdot \cos[\beta_b (L+W) + \gamma] = c \cdot \exp[-\beta_o (L+W)] \\ 0 = -\beta_b \cdot b \cdot \sin(\beta_b L + \gamma) \\ -\beta_b \cdot b \cdot \sin[\beta_b (L+W) + \gamma] = -\beta_o \cdot c \cdot \exp[-\beta_o (L+W)] \end{cases} \quad (4-19)$$

式(4-19)经化简可得器件工作在串联谐振频率时, 边框宽度 W 与横向波数 β_b 、 β_o 之间满足的关系式,

$$\beta_b \tan(\beta_b W) = \beta_o \quad (4-20)$$

对比式(4-20)和式(4-10)可以发现, 式(4-20)中的 β_b 和 W 代替了式(4-10)中的 β_a 和 L 。边框尺寸的设定与边框区域的横向波数 β_b 和外部区域的横向波数 β_o 相关。

设置边框结构后, x 方向的耦合系数如下:

在 $x=\pm L$ 处, 满足 $du_x/dx=0$ 的边界条件, 将此边界条件代入式(4-17)的第一个式子可得到,

$$\beta_a L = n \cdot \pi, n = 0, 1, 2, \dots \quad (4-21)$$

将式(4-21)代入式(4-12)得到 x 方向的机电耦合系数为,

$$k_{x,n}^2 = \begin{cases} 1 & n=0 \\ 0 & n \neq 0 \end{cases} \quad (4-22)$$

说明此时只有 $n=0$ 时的主模出现, $n>0$ 时的寄生模式为零。

设置边框结构后, $-L < x < L$ 横向位移 u_x 如下:

加入边框之后, 将式(4-21)带入到式(4-17)第一个等式中得到有效区域内横向位移 u_x 为,

$$u_x(x) = a \cdot \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n=0,1,2,\dots \quad -L \leq x \leq +L \quad (4-23)$$

由式 (4-23) 得到 n 取 0、1、2 时 x 方向位移曲线 u_x 如图 4-6 所示, 由位移曲线可以看出, 当 $n=0$ 时, 式 (4-6) 在 $-L < x < L$ 内积分不为零, 而当 $n>0$ 时, 式 (4-6) 在 $-L < x < L$ 内积分为零, 说明此时不存在寄生模式。

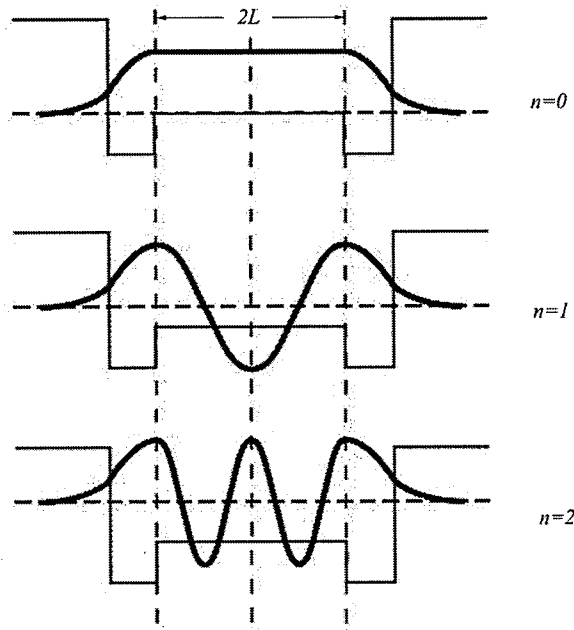


图 4-6 凸型边框结构有效区域横向位移

4.3 薄膜体声波谐振器的 COMSOL 建模

COMSOL Multiphysics 是一款大型的高级数值仿真软件, 目前已经在声学、电磁学、微系统、半导体等许多领域得到了广泛地应用。COMSOL Multiphysics 以有限元法为基础, 它实现真实物理现象的仿真是通过求解偏微分方程 (单场) 或方程组 (多场) 来完成, 可实现高度精确的数值仿真。利用 COMSOL 的微机

电系统模块 (MEMS Module) 可以实现 FBAR 的谐振特性分析。

本小节在 COMSOL 中建立了 Mo/ZnO/Mo 结构的 FBAR 模型如图 4-7 (a) 所示, 包含了底电极、压电层和顶电极的二维模型。由 4.1 节计算所得的频散曲线我们知道, Mo/ZnO/Mo 结构的 FBAR 频散特性为 TYPE I 型, 因此, 对其设置了凸型结构的边框, 如图 4-7 (b) 所示。边框的厚度分别为 $0.05\mu\text{m}$ 、 $0.1\mu\text{m}$ 、 $0.15\mu\text{m}$, 边框的宽度分别为 $1\mu\text{m}$ 、 $2\mu\text{m}$ 、 $3\mu\text{m}$ 、 $4\mu\text{m}$ 、 $5\mu\text{m}$ 、 $6\mu\text{m}$ 、 $7\mu\text{m}$ 、 $8\mu\text{m}$ 、 $9\mu\text{m}$ 、 $10\mu\text{m}$ 。

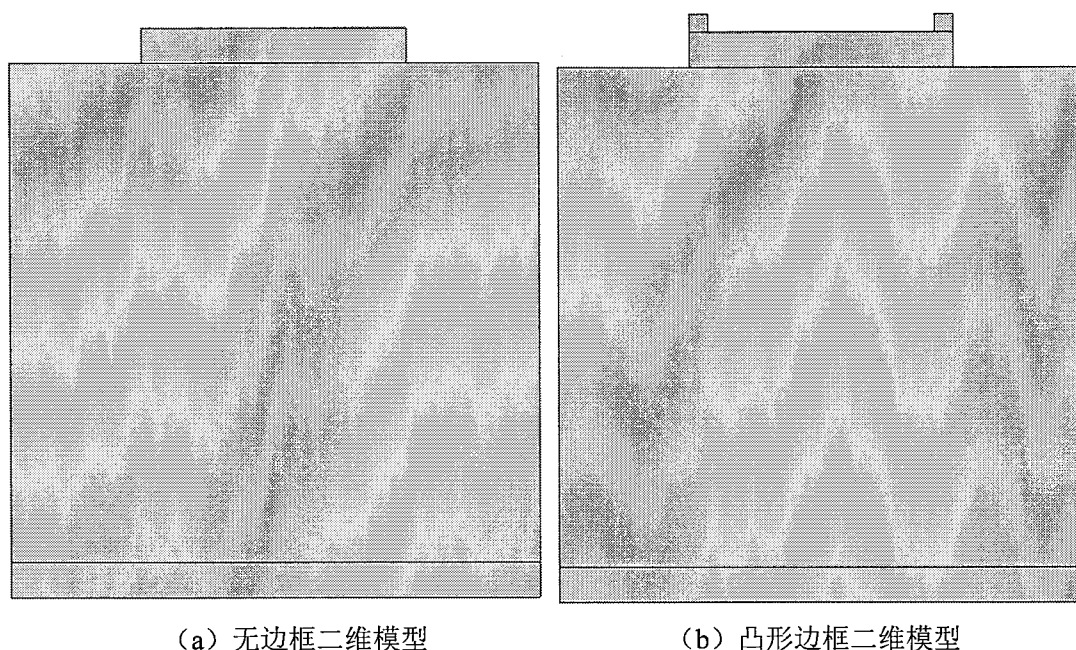


图 4-7 FBAR 二维模型

利用 COMSOL 软件建立 FBAR 分析模型的具体步骤如下:

1、新建二维模型文件。在 COMSOL 主界面, 单击“模型向导 (Model Wizard)”进入到空间维度, 选择二维模型, 物理场选择结构力学>压电设备, 研究类型选择“频域”。

2、创建几何模型。右键“模型开发器 (Model Builder)”下的“几何”标签可以建立不同形状的几何模型, 在“几何”标签的设置窗口可以设置集合的尺寸单位, 在新建的几何模型的设置窗口通过位置基准和尺寸建立新的矩形: 位置基准选择“中”, 上电极、压电层、下电极厚度分别为 $0.1\mu\text{m}$ 、 $1.41\mu\text{m}$ 、 $0.1\mu\text{m}$, 顶电极横向尺寸为 $100\mu\text{m}$, 压电层、底电极横向尺寸为 $200\mu\text{m}$ 。

3、添加材料。右键“模型开发器 (Model Builder)”下的“材料”标签，选择“增加材料”选项打开 COMSOL 的材料库，选择电极材料 Mo 以及压电材料 ZnO。

4、固体力学模块的设置。在“模型开发器 (Model Builder)”的“固体力学”标签中为模型分配材料类型，上下电极材料为 Mo，压电层材料为 ZnO；为模型设置边界条件为压电层和底电极边界固定约束位移“ $u=0$ ”。

5、静电模块的设置。在“模型开发器 (Model Builder)”的“静电”标签中为模型设置电学条件：压电层上电极加载 1V 电压，底电极接地。

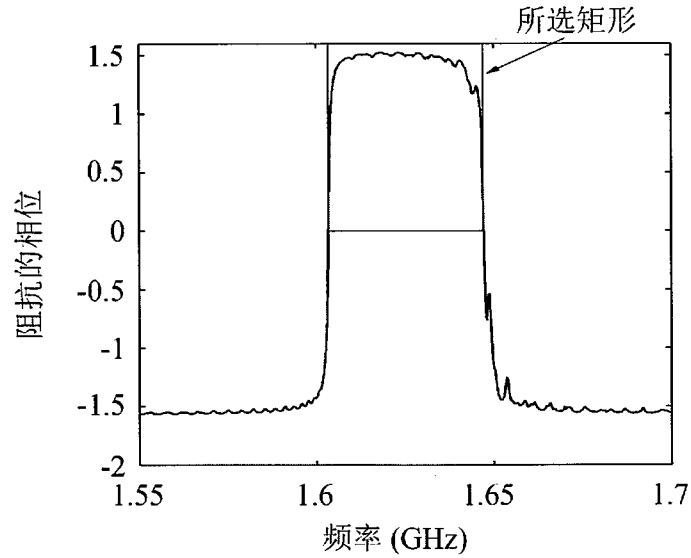
6、网格划分。利用“模型开发器 (Model Builder)”中的“网格”标签为模型划分网格。本文所建模型的网格划分为横向尺寸为 $0.2\mu\text{m}$ ，上下电极纵向尺寸为 $0.1\mu\text{m}$ ，压电层纵向尺寸为 $0.3525\mu\text{m}$ （纵向划分了 4 份）。

7、研究设定。在“模型开发器 (Model Builder)”中的“研究 1”标签中设置频率范围为 1550MHz-1700MHz，步长为 0.325MHz。

8、阻抗曲线和相位曲线的绘制。以上所有步骤设置完成且无错误提示就可以开始计算，计算完成后右击“模型开发器 (Model Builder)”中的“结果”标签选择“一维绘图组”绘制阻抗特性曲线和阻抗的相位曲线，阻抗特性曲线的表达式为： $1/\text{abs}(es.Y11)$ ，相位曲线的表达式为 $\arg(1/es.Y11)$ 。

4.4 仿真结果及分析

在 4.1 小结计算得到的 Mo/ZnO/Mo 结构的 FBAR，其频散特性为 TYPE I 型，横向寄生模式出现在大于串联谐振频率 f_s 的范围，为了较直观地比较出不同厚度和宽度的凸型边框结构对频率区间 $[f_s, f_p]$ 内杂散模式的抑制情况，定义了相位曲线的“波纹比率” $R^{[60]}$ ，如图 4-8 所示。在相位特性曲线上，横向区间选取频率区间 $[f_s, f_p]$ ，纵向区间选取 $[0, 1.6]$ ，计算得到矩形的面积 A_{sel} ，对于每一种厚度和宽度情况下的相位曲线，计算得到其在区间 $[f_s, f_p]$ 上的积分值 A_n ，相位曲线的“波纹比率”即定义为 $R = (A_{sel} - A_n) / A_{sel}$ ，由 R 的定义式可以看出 R 的值越小说明相位曲线越光滑，在串联谐振频率和并联谐振频率区间内产生的寄生模式越少。


 图 4-8 “波纹比率” R 的示意图

利用 4.3 小结建立的仿真模型，仿真得到了不同厚度和宽度情况下 FBAR 的阻抗相位曲线，将 COMSOL 中得到的阻抗相位曲线的数据导入 MATLAB 中，计算出每一种厚度和宽度时的阻抗相位曲线的“波纹比率” R ， R 值的变化情况如图 4-9 所示。

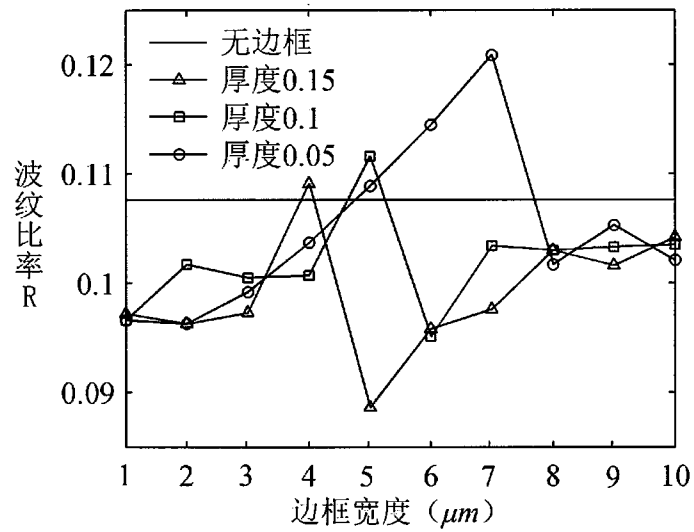


图 4-9 波纹比率的值随边框变化曲线

通过比较相位曲线的“波纹比率” R 可以看出，在所设计的这几种厚度和宽度的边框结构中，当边框厚度为 $0.15\mu\text{m}$ 、宽度为 $5\mu\text{m}$ 时，相位曲线的“波纹比率” R

最小为 0.0886，比不加边框时减少 17.7%，说明此时横向寄生模式得到了较好地抑制。图 4-10 红色曲线是设置厚度为 $0.15\mu\text{m}$ 、宽度为 $5\mu\text{m}$ 的边框时仿真得到的阻抗相位曲线，蓝色曲线是不加边框时仿真得到的曲线，通过两者的对比可以看出，加边框后串联谐振频率与并联谐振频率之间相位曲线变得更光滑，寄生模式减少。

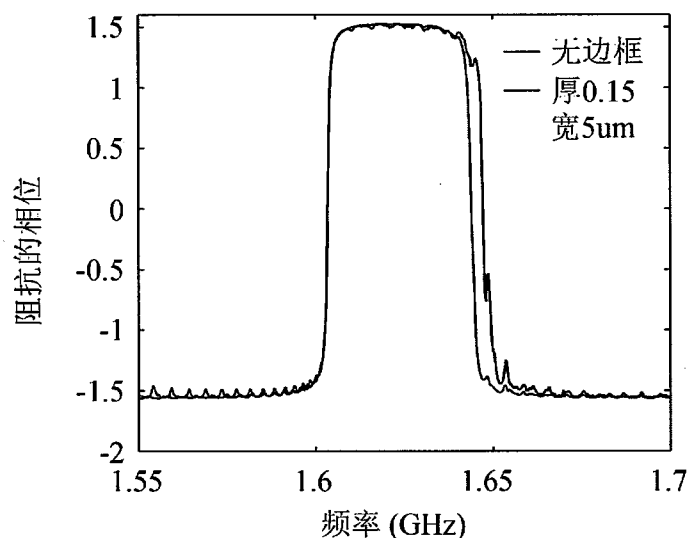
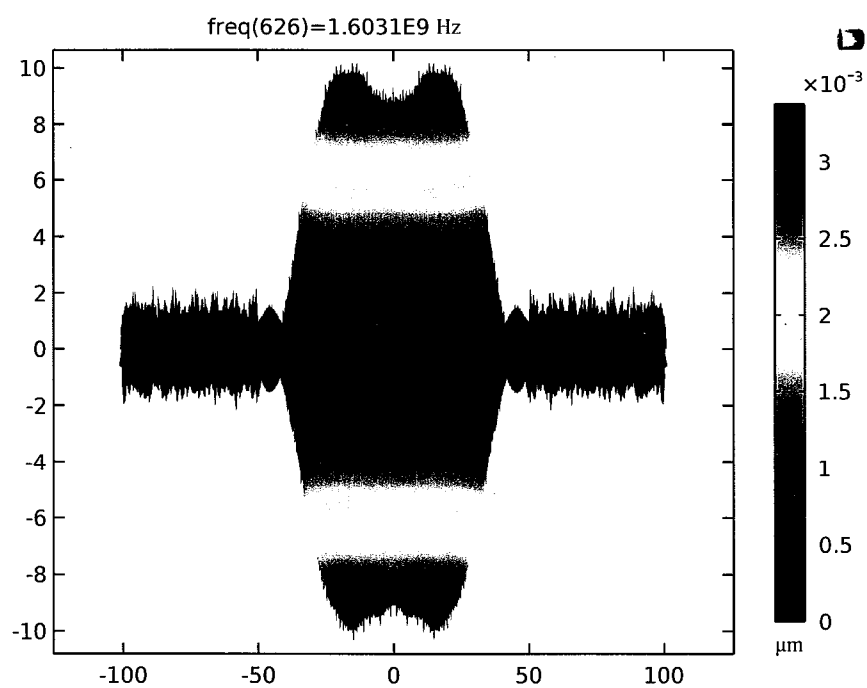
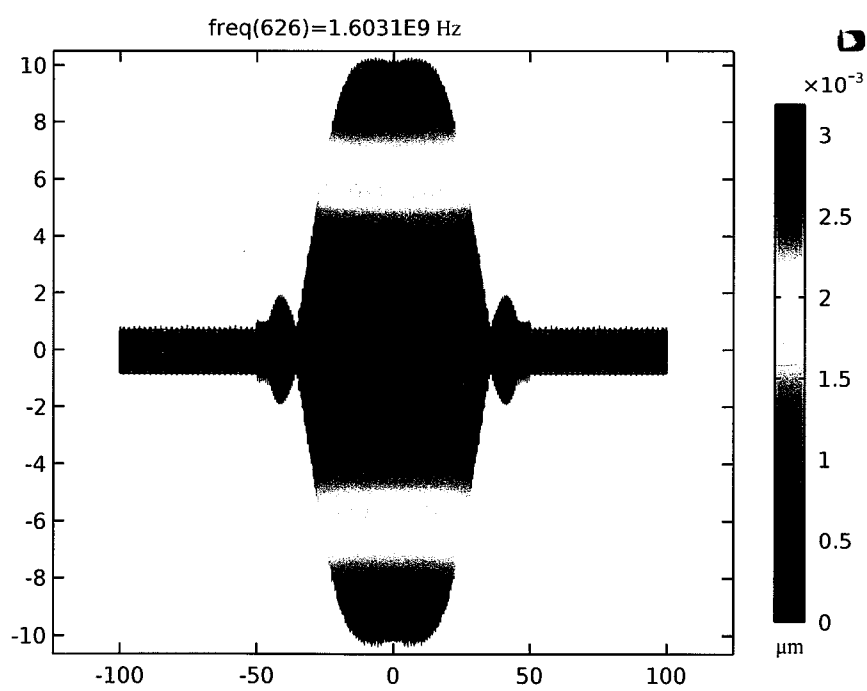


图 4-10 无边框与加边框之后相位曲线对比图

无边框与加边框之后，串联谐振频率 $f_s=1.603\text{GHz}$ 处的 FBAR 模型的位移振型图分别如图 4-11(a)、(b)所示。对比图 4-11(a)和(b)可以看出，无边框时，有效区域的位移振动幅度稍有降低且出现两个峰值和一个谷值，有效区域以外的部分存在较多寄生振动，说明有效区域内激起的声波有一部分损失在了有效区域之外。而加入边框之后，有效区域的振动幅度更加的平滑，且有效区域以外部分的寄生振动消失了，寄生振动得到了很好地抑制。综上可知，通过仿真得到的边框结构可以较好地抑制器件中产生的寄生振动，减少有效区域能量的损耗。



(a) 无边框的位移振型图



(b) 有边框的位移振型图

图 4-11 无边框与加边框之后位移振型对比图

4.5 本章小结

本章内容讲述了利用能陷法来实现寄生模式的抑制。

首先, 基于 FBAR 常用的两种压电材料 AlN 和 ZnO, 建立了方形结构 FBAR 的三维模型, 采用频域有限元方法计算得到了 Mo/ZnO/Mo 和 Mo/AlN/Mo 结构的 FBAR 的频散曲线。介绍了能陷法抑制寄生模式的原理, 根据不同的频散曲线类型, 设置不同的边框结构, 即 TYPE I 型频散类型设置“凸”型边框, TYPE II 型频散类型设置“凹”型边框, 给出了 COMSOL 软件建立 FBAR 二维模型的建模步骤。为 Mo/ZnO/Mo 结构 (TYPE I 型) 的 FBAR 设计了凸型结构的边框, 计算了阻抗相位曲线的波纹比率 R 的值, 给出了施加边框前后模型的位移振型图。通过仿真得到: 当设置的凸型边框厚度为 $0.15\mu\text{m}$, 宽度为 $5\mu\text{m}$ 时, 对横向声波产生的寄生模式抑制效果最好, 此时阻抗相位曲线的波纹比率 R 的值最小为 0.0886, 比不加边框时减少 17.7%; 施加边框后有效区域的位移振型图更加平滑。

第五章 结论与展望

本论文的研究工作得到了国家自然科学基金（批准号：11374327）的资助。

FBAR 器件微型化发展是实现无线通信系统功能多样化所必须的，随着器件尺寸的不断减小，横向结构对 FBAR 器件性能的影响已不能忽略。传统一维模型的分析结果与器件的实际性能存在较大差距，正是因为一维模型无法将器件横向结构的影响考虑在内。因此，建立 FBAR 的二维或三维模型来对器件进行横向结构的优化，提高器件的性能就显得尤为重要。本文的主要内容是通过对 FBAR 的二维和三维模型进行仿真分析，计算得到了可以减弱横向寄生模式强度的切趾形状和抑制横向寄生模式产生的边框结构，并对切趾法和能陷法的原理进行了一定的分析。

本文具体的工作内容总结如下：

1、基于切趾法的基本思想，利用有限元分析软件 ANSYS，建立了 FBAR 有效区域（顶电极-压电层-底电极）的三维仿真模型，此三维模型的横向结构分为不同的面积大小和不同的形状（方形、圆形、非正五边形）；对所建立的三维模型进行了谐振分析，得到了阻抗特性曲线和史密斯曲线，通过比较计算所得的史密斯曲线的“不圆度 NC”的值，得到了非正五边形结构的 FBAR 中横向声波产生的寄生模式最少。

2、分析了 FBAR 常用的两种压电材料 ZnO 和 AlN 中横向寄生模式的分布情况，计算了史密斯曲线的 NC 值和 TE 模式纵向位移振型图。通过比较发现，在相同谐振频率下，ZnO 做压电材料时产生的横向寄生模式较少。此外，利用不同压电材料构成的 FBAR 分别作为梯型滤波器的串联分支和并联分支，得到了通带波纹较少的梯型滤波器结构。

3、基于能陷法的基本思想，建立了横向形状为方形、纵向结构为 Mo/ZnO/Mo 和 Mo/AlN/Mo 的 FBAR 三维模型，计算得到两种结构的频散类型分别为 TYPE I 型和 TYPE II 型，分析了能陷法抑制寄生模式的原理。在此基础上，为 TYPE I 型的 FBAR 模型设置了不同厚度和宽度的“凸”型结构边框，计算得到了阻抗相位曲线的“波纹比率” R 和模型的位移振型图。当边框厚度为 $0.15\mu\text{m}$ ，宽度为 $5\mu\text{m}$ 时， R 的值最小为 0.0886，比不加边框时减少 17.7%，此时位移振型图也更加平滑。

综上所述，本文主要创新之处：分析了薄膜体声波谐振器有效区域形状、面积大小对寄生模式的影响，得到了能够减弱寄生模式的切趾图形；分析了不同厚度和宽度的起能陷作用的边框结构对横向寄生模式的抑制作用，得到了能够抑制横向寄生模式的“凸”型边框结构；对横向形状为方形、纵向为压电夹心结构的薄膜体声波谐振器进行有限元分析，得出矩形夹心式压电波导的频散曲线。本文的工作将为压电薄膜体声波谐振器性能的提升提供理论依据。

另外，在本文研究的基础上，还有一些方面需要做更进一步的完善与研究：

首先，本文所建立的模型适用于背空腔型和空气隙型结构的 FBAR，对于固态装配型结构的 FBAR 没有进行建模与仿真，对于本文得到的切趾图形和边框结构是否能改善固态装配型结构的 FBAR 中横向寄生模式需要做进一步的仿真验证；本文仿真得到了适用于频散特性为 TYPE I 型的凸型边框结构，适用于频散特性为 TYPE II 型的凹型边框结构还需要进一步完成。

总之，随着 FBAR 的微型化，对 FBAR 进行三维有限元仿真计算是一个比较好的方法，在模型的建立和仿真计算方面还有很多需要提高和优化的地方，这样才能使得仿真计算的结果能够更接近器件的实际情况。