

Finite-Difference Time-Domain Method for the Numerical Analysis of Thin-Film Bulk Acoustic Wave Resonators

CHI Zhi-peng¹, ZHAO Zheng-Ping^{1,2*}

1. School of Information Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China;
2. Micro/Nano Technology Center, Hebei Semiconductor Research Institute, Shijiazhuang 050051, China

Abstract: This paper describes the new application of the finite-difference time-domain (FDTD) method for the numerical analysis of electromechanical phenomena of thin-film bulk acoustic wave resonators (FBAR). The piezoelectric governing equations, Newton's equation and electrical equation are discretized in spatial and temporal domain by the FDTD theory, and the numerical solutions of the acoustic propagation in the time domain can be obtained directly by these difference equations. The impedance characteristics of a AlN FBAR are presented by the proposed numerical method, and the results are demonstrated to be according with the analytical solutions of the 1-D Mason model.

Key words: piezoelectric material; FDTD method; FBAR

EEACC: 8390

薄膜体声波谐振器的 FDTD 数值分析

池志鹏¹, 赵正平^{1,2*}

1. 河北工业大学信息工程学院, 天津 300130;
2. 河北半导体研究所微米纳米中心, 石家庄 050051

摘要: 提出了基于时域有限差分方法对薄膜体声波谐振器进行数值分析的新方法。利用时域有限差分法理论对压电材料的控制方程、牛顿方程和电学方程在空间和时间进行了离散化, 通过得到的差分方程直接得出了声场传播的时域数值解。使用该数值方法对薄膜体声波谐振器的电学特性阻抗进行了分析, 并将结果与一维 Mason 模型的解析解进行了比较验证。

关键词: 压电材料; 时域有限差分法; 压电谐振器

中图分类号: TN713

文献标识码: A

文章编号: 1004-1699(2008)03-0494-04

薄膜体声波谐振器 (FBAR: thin film bulk acoustic resonators) 具有频率高、Q 值高、体积小、承受功率大、换能效率高, 且与超大规模集成电路工艺兼容的优点, 目前已成为通讯器件研究的热点之一。在 FBAR 器件设计和优化中, 广泛使用等效电路法和解析法, 但这二种方法在分析复杂结构的 FBAR 时显得相当困难, 人们于是开始倾向于采用有限差分法^[1]与有限元法^[2]这样的数值方法。本文提出另一种新的数值方法: 时域有限差分法 (FDTD, Finite-difference Time-domain Method), 它比以往的数值方法相比有概念清晰, 方法简单、直观等特点。

1 FDTD 的基础理论

时域有限差分法 (FDTD) 最早是解决电磁问题的一种数值技术, 在 1966 年由 K. S. Yee 首次提出^[3-4]。为求解时域 Maxwell 旋度方程, 用中心差分格式表示场分量对空间和时间变量的微分, 即得到的时域有限差分方程组, 通过差分迭代计算出电磁场通过电场和磁场的耦合传播时域过程。

设一个含空间和时间变量的场量 $F(z, t)$, 将其所在空间沿 z 轴离散化分成很多网格单元, 同样对其所在时域同样进行离散化, $F(z, t)$ 在时间和空间中离散值取以下符号表示。

$$F(z, t) = F(k z, n t) = F_k^n \quad (1)$$

其中, t 表示时间增量步长, z 表示沿 z 轴向的网格步长, k 和 n 分别是空间步长和时间步长的个数。为求解有关 $F(z, t)$ 的偏微分方程,用有限差分式表示 $F(z, t)$ 对空间和时间变量的微分, Yee 对空间微商和时间微商采用具有二阶精度的中心差分近似:

$$\frac{\partial F_k^n}{\partial z} = \frac{F_{k+1/2}^n - F_{k-1/2}^n}{z} \quad (2)$$

$$\frac{\partial F_k^n}{\partial t} = \frac{F_k^{n+1/2} - F_k^{n-1/2}}{t} \quad (3)$$

以上通过各离散点上场量 F_k^n 的差商来近似替代在该点对时间和空间偏导数,这样,待求的偏微分方程定解问题可转化为一组相应的差分方程的问题。

为保证离散后差分方程组解的稳定性和数值色散,时间步长 t 与空间步长 z 需要满足以下关系式:

$$t \leq z/V \quad (4)$$

$$z \leq \min/20 \quad (5)$$

其中, V 为压电材料中声波的传播速度, \min 是信号所对应的最高频率波长。

2 薄膜体声波谐振器的理论和 FDTD 模型

FBAR 的结构同石英谐振器相同,它是由上下平面金属电极和夹在它们中间的一层压电薄膜材料组成,当电压施加在电极上时,压电材料由于逆压电效应产生机械形变并在薄膜内激励出体声波,并在两电极平面之间来回反射,形成机械谐振。它以厚度伸缩模式为主要振动模式,其压电材料一维偏微分压电控制方程为^[5]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = c^D \frac{\partial v}{\partial z} - h \frac{\partial D}{\partial t} \quad (6)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -h \frac{\partial v}{\partial z} + s \frac{\partial D}{\partial t} \quad (7)$$

牛顿运动方程为:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial T}{\partial z} \quad (8)$$

电学方程为:

$$I = A \frac{\partial D}{\partial t} \quad (9)$$

$$V_T = \int_0^d E dz \quad (10)$$

其中 T 和 v 分别是描述力学量的应力和质点速度, E 和 D 分别是电场强度和电位移, c^D 是恒电位移下的弹性常数, h 是压电应力常数, s 是恒应变下的介电隔离率, ρ 是压电材料的密度, A 为电极的横截面积,

d 为压电材料厚度, I 是流经 FBAR 的电流, V_T 是 FBAR 两段的电压。

对(6) ~ (10) 方程应用 FDTD 的方法即可得到压电材料沿 z 轴方向的一维差分方程:

$$T_k^{n+1/2} = T_k^{n-1/2} + \frac{c^D t}{z} (v_{k+1/2}^n - v_{k-1/2}^n) - h(D_k^{n+1/2} - D_k^{n-1/2}) \quad (11)$$

$$E_k^{n+1/2} = E_k^{n-1/2} - \frac{h t}{z} (v_{k+1/2}^n - v_{k-1/2}^n) + s(D_k^{n+1/2} - D_k^{n-1/2}) \quad (12)$$

$$v_{k+1/2}^{n+1} = v_{k+1/2}^n + \frac{t}{z} (T_{k+1}^{n+1/2} - T_k^{n+1/2}) \quad (13)$$

$$I_k^{n+1/2} = A(D_k^{n+1/2} - D_k^{n-1/2})/t \quad (14)$$

$$V_T^{n+1/2} = \int_{k=0}^d E_k^{n+1/2} dz \quad (15)$$

考虑到厚度振荡的换能器压电材料内部 $\partial D/\partial z = 0$,故方程(11)、(12)和(14)中的电位移强度 D 没有下标 k ,所以电位移 D 作为激励源较为方便,当电位移 D 分量作为激励源施加在电极上时,利用(11) ~ (15) 逐个时间步长对模拟区域各网格点的各分量进行交替计算,在执行到适当的时间步数后,即可获得需要的时域数值结果。这种差分格式为显示格式,即从 n 层到第 $n + 1$ 层时,差分方程提供了逐点计算的直接表达式,每一步计算都无需作矩阵求逆运算,避免了矩阵求逆运算带来的许多问题。

声波在压电材料和金属电极等不同声学阻抗的弹性体之间传播时,会发生反射和透射物理现象,由于分界面处法向应力和法向质点速度都是连续的,故只需要更改 FDTD 差分方程式中的 c^D 、 h 和常数参量,这样可以把反射和透射的物理过程直接蕴含进去,对分析多层弹性体中声波的传输过程带来了极大的方便。在 FBAR 两端弹性体最外界与空气接触面上,由于其二者声学阻抗相差悬殊,可认为 $z = 0$ 和 $z = d$ 界面处应力分量 $T = 0$,形成声波全反射边界。

激励源为 $D = e^{-l(t-t_0)/T} \sin(2 f_0 t)$,其产生调制高斯脉冲信号,其有效脉冲频谱带宽为 $1/2 T$,有效频谱中心位于 f_0 。

FBAR 电学特性阻抗由迭代获得的一段时域内的电流 I 和电压 V_T 变化值计算得出,可以对它们进行快速傅里叶变换(FFT) 处理即可获得压电材料两端的电学特性阻抗 $Z(w)$,但是考虑到时域信号有限采样时间和非整周期采样以及时域信号振荡信号的幅值剧烈变化等都会对 FFT 频谱分析造成严重影响,本文采用了 Prony 分析方法^[6],用指数函数的一个线性组合来描述等间距采样数据

的数学模型,能够估算给定信号的频率、衰减、幅值和初相的算法,而且采样时间比 FFT 少两个数量级别。

3 数值算例

利用 FDTD 分析薄膜体声波谐振器 FBAR,它由 $2.73\ \mu\text{m}$ 厚度的压电材料 AlN 和两端对称的厚度 t 为 $1\ \mu\text{m}$ 电极 Al 组成,AlN 和 Al 的主要物理特性见表 1^[7]。该 FBAR 机械谐振基频在忽略电极厚度情况下为 2 GHz。FDTD 仿真时,FBAR 沿 z 轴方向空间网格步长为 $13.664\ \text{nm}$,时间步长为 $1.25\ \text{ps}$ 。

表 1 FBAR 组成材料的物理参数

Material	$C^D\ \text{N/m}^2$	$\rho\ \text{kg/m}^3$	$S\ \text{m/F}$	$h\ \text{N/C}$
ALN	$4.12\text{e}+11$	3512	$1.03\text{e}+10$	$1.59\text{e}+10$
AL	$110\text{e}+9$	2695	0	0

采用位于频谱中心 2 GHz 处,带宽为 2 GHz 的高斯脉冲激励源,其压电体和电极内部的应力、质点速度和电场强度随时间变化的分布如图 1 所示,可以发现这三种分量在经历短暂的暂态后,进入稳定的谐振状态。可以观察到压电材料和电极分界面处,应力和质点速度都发生反射和透射物理现象,并且在两端电极内部也发生了驻波现象。从图 1(a) 可看出 FBAR 的中心位置应力随时间幅度变化最为剧烈,两端点应力幅度为零,从图 1(b) 可看出在 FBAR 中心位置质点速度随时间变化为零,两端质点速度随时间幅度变化最为剧烈,且两端质点速度运动方向相反,这些应力和质点速度在 FBAR 两端点的分布正好体现了机械自由边界条件。从图 1(c) 可以观察到由于两端电极被看成理想导体,并不存在机电耦合现象,故尽管电极内部存在应力和质点速度分量,可电场强度在其内部内部的幅度仍为零,而在 FBAR 压电材料内部电场强度的分布仍与其内部的应力分布情况类似,在 FBAR 的中心位置随时间幅度变化最为剧烈,这是因为 FBAR 内部电场强度和应力幅度随时间变化剧烈的程度都与相应位置的质点速度幅度沿 Z 轴方向变化剧烈程度有关,从图 1(b) 可看出中心位置附近质点速度变化最为激烈的时刻,也正是此处的电场强度和应力的幅度最大的时刻。

最后,利用 FDTD 算法对不同电极厚度的 FBAR 的特性阻抗分别进行了计算。仿真结果分别如图 2 所示,可见电极厚度的大小与 FBAR 的基频谐振频率值成反比。图 2 还将 FDTD 得出的数值解和利用梅森模型^[5]计算的结果进行了比较,可以

观察两种方法得出的特性阻抗曲线基本一致,从理论上验证了 FDTD 算法的正确性。

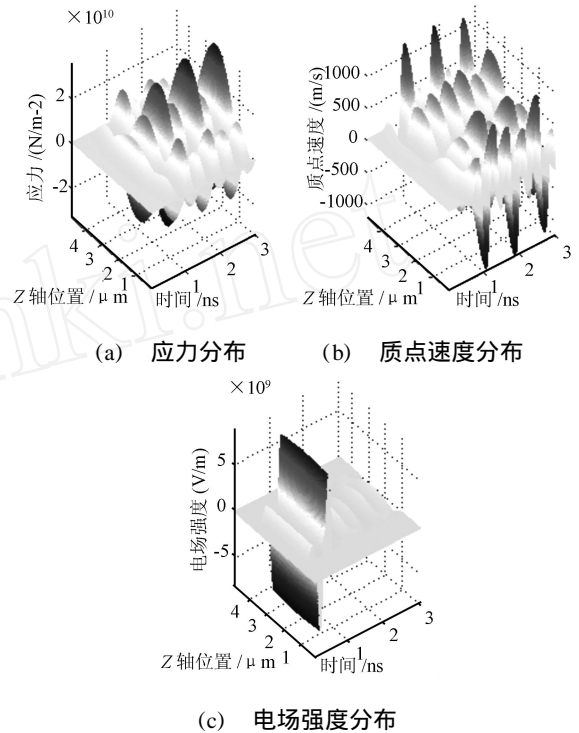


图 1 电极厚度 $t = 1\ \mu\text{m}$,激励信号的中心频率 2 GHz 和带宽 2 GHz 时,应力、质点速度和电场强度分布图

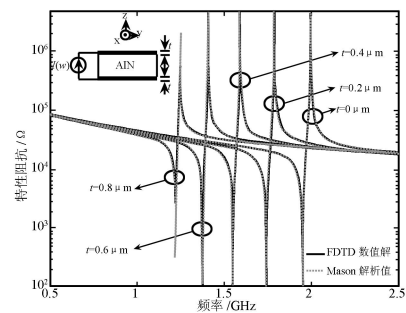


图 2 求解压电谐振器在不同厚度 t 的金属电极情况下的电学特性阻抗: FDTD 算法与梅森解析解的比较

4 结束语

本文提出了用有限时域差分方法对薄膜体声波谐振器进行数值分析的新方法,直接模拟了其内部声波的传播及其与两端电极的相互作用过程,清晰地描绘出了声波传播过程的时间和空间的二维图像,并通过该方法得到了正确的特性阻抗。由于 FDTD 方法较之其它数值分析方法有直观、且相对而言比较简单,避免了使用更多的数学工具,而且具有节约存储空间和计算时间等优点,借助其在电磁场中成熟的理论基础,FDTD 数值模型有潜力成为分析复杂结构 FBAR 的有效工具。

参考文献:

- [1] Lloyd P and Redwood M. Finite-Difference Method for the Investigation of the Equivalent Circuit Characteristics of Piezoelectric Resonators[J]. Jour. Acoust. Soc. Am, 1966;39(2): 346-361.
- [2] Lerch R. Simulation of Piezoelectric Devices by Two- and Three- Dimensional Finite Elements[J]. IEEE Transactions On Ultrasonics, 1990;37(2):233-247.
- [3] Yee K S. Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media[J]. IEEE Trans. Antennas Propagat, 1966;14(3):302-307.
- [4] 王长清, 祝西里. 电磁场中的时域有限差分法[M]. 北京: 北京大学出版社, 1994.
- [5] 应崇福主编. 超声学[M]. 北京: 科学出版社, 1990.
- [6] Pereda J A. Computation of Resonant Frequencies and Quality Factors of Open Dielectric Resonators by a Combination of the Finite Difference Time-Domain (FDTD) and Prony's Methods [J]. IEEE Microwave Guided Wave Lett, 1992;2(11):431-433.
- [7] John G. Gualtieri, John A. Kosinski and Arthur Ballato. Piezoelectric Materials for Acoustic Wave Applications[J]. IEEE. Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr, 1994;41(1):53-59.



池志鹏(1972-),男,讲师,现攻读博士学位,研究方向为微电子机械系统, chizhipeng@sohu.com



赵正平(1947-),男,原信息产业部电子第十三研究所所长,现任中电科技集团公司副总经理,研究员级高级工程师,享受政府特殊津贴专家,国家级有突出贡献中青年专家。多年来一直从事砷化镓集成电路与微米、纳米技术研究,是该领域的专家和学术带头人。科研成果显著,多项科研成果获国家、省部级科技进步奖, zhaozp@cetc.com.cn