

AlN 压电薄膜换能器性能的仿真研究

李响,马希直

(南京航空航天大学 机电学院,江苏 南京 210016)

摘要:在压电换能器的制作中,电极对其谐振和反谐振频率、机电耦合系数及品质因数等重要性能有着直接的影响。该文针对 AlN 压电薄膜复合结构,采用 COMSOL Multiphysics 有限元软件对电极-AlN-不锈钢结构的三维模型进行了压电-结构耦合分析。基于此模型,通过改变电极厚度、材料及压电层的介电和机械损耗等参数,来研究换能器的性能参数变化,研究结果对后续以不锈钢为基底的压电超声换能器的制作起到了一定的理论指导作用。

关键词:AlN 薄膜;压电换能器;COMSOL;有效机电耦合系数;品质因数

中图分类号:TN65 **文献标识码:**A

Simulation Study on Performance of AlN Piezoelectric Thin Film Transducer

LI Xiang, MA Xizhi

(College of Mechanical and Electrical Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract:In the fabrication of piezoelectric transducers, the electrode has a direct influence on the important performances, such as resonance and anti-resonance frequency, quality factor, electromechanical coupling coefficient, etc. Aiming at the AlN piezoelectric film composite structure, a piezoelectric-structure electromechanical coupling analysis of the 3D model based on electrode-AlN-stainless steel structure is carried out by using COMSOL Multiphysics finite element analysis software in this paper. Based on this model, the transducer performance parameters change is studied by altering the electrode thickness and materials, dielectric loss and mechanical loss of piezoelectric layer. The results of the study on the follow-up to stainless steel as the base of the piezoelectric ultrasonic transducer system has a certain theoretical guidance.

Key words:AlN thin film; piezoelectric transducer; COMSOL; effective electromechanical coupling coefficient; quality factor

0 引言

近年来,随着微机电系统(MEMS)技术的发展,压电薄膜材料被广泛的应用于传感器、执行器及换能器等器件中。AlN 作为 III-V 族化合物,具有稳定的六方纤锌矿结构^[1],这使其在沿(002)晶向(即 c 方向)受力时能够产生压电效应。AlN 压电薄膜虽然压电性相对较低,但其具备化学稳定性好,抗击穿场强度高,介电损耗小,良好的热传导性,纵声波传播速度快等优异的物理和化学性能。因此,其在高频声表面波(SAW)和体声波(BAW)器件的应用方面备受关关注^[2]。同时,AlN 薄膜材料与 MEMS 工艺具有良好的兼容性,AlN 薄膜材料不仅可实现在

硅衬底上的择优生长^[3],还可在各种金属底电极材料上生长^[4]。

随着有限元仿真技术的发展,有限元软件也层出不穷,在小尺度下,谐振器、换能器和执行器的设计必须同时考虑多种物理现象在其工作中的影响。COMSOL Multiphysics^[5]专门提供了 MEMS 仿真模块,该模块提供了预定义的用户接口和相应的多物理场接口,可应用于一系列的多物理场仿真,包括电磁-结构、热-结构或流固耦合等。本文利用压电-结构耦合对 AlN 压电薄膜换能器多层结构进行了仿真分析,讨论了在压电薄膜三维复合结构中,电极的厚度、材料及介电、机械损耗等因素对薄膜压电换能器的谐振频率 f_s 和反谐振频率 f_p 、机电耦合系

收稿日期:2016-11-29

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51475229)

作者简介:李响(1993-),男,安徽阜阳人,硕士生,主要从事超声油膜厚测量系统的研究。通信作者:马希直(1964-),男,陕西耀县人,副教授、博士,主要从事现代流体润滑理论及轴承技术、气体挤压膜悬浮机理等方面的研究。

数 k 及品质因数等性能的影响,为后续的 AlN 薄膜换能器的制作和实验研究工作提供了一定的理论指导。

1 压电有限元耦合分析理论

有限元法是以变分原理和剖分插值为基础的^[6]。对于压电弹性体振动问题的求解,我们采用哈密顿变分原理,把待进行结构振动分析的整个连续体剖分成有限个单元,这些单元在其边界处连续,以边界的节点处的参数为未知量,构造可给出未知量节点值和单元内任意点值关系的插值函数,从而建立整个连续体近似满足的方程组,由计算机完成计算。

有限元分析中采用的压电耦合方程为 e 型压电方程:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{D} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}^E & -\mathbf{e}' \\ \mathbf{e} & \boldsymbol{\varepsilon}^S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{S} \\ \mathbf{E} \end{bmatrix} \quad (1)$$

式中: \mathbf{T} 为应力向量; \mathbf{D} 为电位移向量; \mathbf{c}^E 为弹性系数矩阵; \mathbf{S} 为应变向量; \mathbf{E} 为电场矢量; \mathbf{e} 为压电应力常数矩阵; \mathbf{e}' 为 \mathbf{e} 的转置矩阵; $\boldsymbol{\varepsilon}^S$ 为介电常数矩阵。

对于简谐激励,经剖分单元,变分处理后可得^[7]

$$(\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M})\mathbf{U} = \mathbf{P}\mathbf{V} \quad (2)$$

$$\mathbf{P}'\mathbf{U} + C_0 \mathbf{V} = \mathbf{Q} \quad (3)$$

式中: \mathbf{K} 为总刚度矩阵; \mathbf{P} 为总机电耦合矢量; \mathbf{P}' 为 \mathbf{P} 的转置矩阵; \mathbf{M} 为总质量矩阵; \mathbf{U} 为压电体节点位移矢量; ω 为简谐振动的角频率; C_0 为夹紧电容; \mathbf{V} 为电极间的电压; \mathbf{Q} 为电极面上的电荷量。

由式(2)、(3)可计算出 f_s 、 f_p 及导纳等压电体的特性参数。

1.1 共振频率及其振动模式

共振频率是电端短路时的自由振动频率,结合式(2)、(3)可知:

$$(\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M})\mathbf{U} = 0 \quad (4)$$

要使式(4)有非零解,则应使 $|\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M}| = 0$, 对式(4)求非零解 ω_i , 即第 i 个共振频率,与之相对应的非零解 \mathbf{U}_i 即为振动模式。

1.2 反共振频率及其振动模式

反共振频率是电端开路时的自由振动频率,将式(2)代入式(3)可得

$$\left(\mathbf{K} + \frac{1}{C_0} \mathbf{P}\mathbf{P}' - \omega^2 \mathbf{M}\right)\mathbf{U} = 0 \quad (5)$$

式(5)的非零解 ω_i , 即第 i 个反共振频率,与之相对应的非零解 \mathbf{U}_i 为振动模式。

1.3 输入导纳-频率特性

当给定 V 和 ω 时,由式(2)可得

$$\mathbf{U} = (\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M})^{-1} \mathbf{P}\mathbf{V} \quad (6)$$

将式(6)代入式(3)可得

$$\mathbf{Q} = [\mathbf{P}'(\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M})^{-1} \mathbf{P} + C_0] \mathbf{V} \quad (7)$$

又因电流 $I = \frac{dQ}{dt}$, 则输出导纳为

$$Y = \frac{I}{V} = \frac{j\omega Q}{V} \quad (8)$$

对每个频率进行计算,可得到导纳-频率曲线。

1.4 有效机电耦合系数

机电耦合系数 k 是用来描述压电体机械能与电能之间转换效率的一个参数,反映了压电材料的综合性能,作为换能器材料,为了有效的转换能量,希望有较高的 k 值。而有效机电耦合系数 k_{teff} 是对共振时的压电振子定义的,不仅与材料的性质有关,且与振子的振动模式有关。

经相关理论计算推导^[8],有效机电耦合系数为

$$k_{\text{teff}} = \sqrt{\frac{f_p^2 - f_s^2}{f_p^2}} \quad (9)$$

因此,可根据导纳-频率曲线确定出 f_p 和 f_s , 进而求出 k_{teff} 。

2 压电薄膜换能器有限元建模与仿真分析

2.1 有限元模型的建立

本文主要是对基于 AlN 压电薄膜换能器的三维复合结构进行仿真分析,为后续的 AlN 超声传感器的制作提供一定的理论指导。其基本结构如图 1 所示,由电极-AlN-不锈钢三层结构组成,其中不锈钢既可作为基底又能起到下电极的作用。

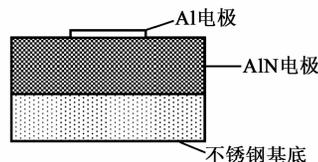


图1 AlN压电薄膜换能器截面简图

仿真中建立表面为正方形的三维结构,电极厚度分别为 $0.1 \mu\text{m}$ 、 $0.2 \mu\text{m}$ 、 $0.3 \mu\text{m}$ 、 $0.4 \mu\text{m}$ 和 $0.5 \mu\text{m}$, 根据常用的几种电极材料,将电极材料设置为铝(Al)、钼(Mo)和铂(Pt)3种,电极面积为 $400 \mu\text{m}^2$, AlN 压电层厚为 $5 \mu\text{m}$, 不锈钢基底厚度也取 $5 \mu\text{m}$, 面积为 $2500 \mu\text{m}^2$ 。

由于模型的横向对称性,同时为了节省计算时

间和减少资源占用。因此,在建立三维模型时,只需建立完整模型的 1/4 即可^[9]。在实际的复合结构中,边界横向延伸尺寸很大。在建模时可在横向边界上添加完美匹配层(PML),对弹性波进行吸收,以更接近实际情况。在施加边界条件时,首先在相应的对称面上施加对称边界条件;机械边界条件采用与实际情况更吻合的机械夹持^[10](横向边界设置为固定约束),电学边界条件为电极下表面施加 1 V 电压,压电层下表面接地。

采用扫掠网格划分,以得到较好的网格分布。物理场选择固体力学模块下的压电器件,选择频率求解方式,扫描频率为 1 000~1 300 MHz,步长为 1 MHz。为了对比不同损耗对复合结构性能影响,对 AlN 压电层添加不同的机械损耗和介电损耗;根据 Morgan Electro Ceramics(MEC)公司提供的材料参数,多数压电材料的机械损耗 η_E 和介电损耗 η_{eS} 都在 0.1~0.001 之间,因此,本文采取了 3 组不同的损耗参数,即 $\eta_E = 0.001, \eta_{eS} = 0.01; \eta_E = 0.001, \eta_{eS} = 0.1; \eta_E = 0.01, \eta_{eS} = 0.01$ 。

2.2 仿真结果分析

2.2.1 共振位移及振型分析

当压电振子发生谐振时,其中心点的位移会达到一个最大值,图 2 是电极材料为 Al、厚 0.1 μm 、 $\eta_E = 0.001, \eta_{eS} = 0.01$ 时的位移-频率数据。由图可看出,当频率为 1 151 MHz 时,模型发生共振。图 3 为共振时位的移振型图。由图可看出,在模型中心处的振动位移最大,向两边逐渐衰减,尤其在电极区域外,衰减速度极快,说明复合结构的振动区域大小与电极尺寸有关。同时,通过在 Comsol 后处理中显示位移场箭头可看出,箭头方向并不完全沿厚度方向,说明存在一定的横向寄生振动,在设计 AlN 压电换能器时,可利用有限元仿真软件,通过对电极结构进行优化设计时尽量抑制横向振动的产生,使其更多地作纵向振动。

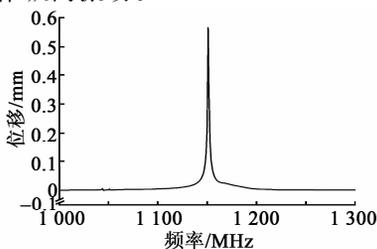


图 2 频率-位移曲线图

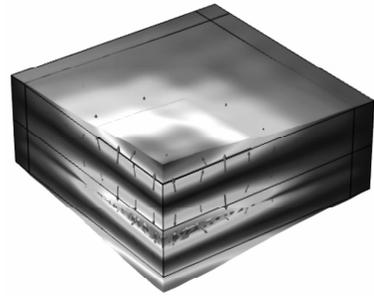


图 3 压电换能器共振时的振动位移图

2.2.2 共振和反共振频率分析

由压电相关理论可知,当压电振子处于共振状态时,流经压电振子的电流达到最大值,因此,在共振点等效阻抗最小,导纳最大;当压电振子处于反共振状态时,流经压电振子的电流最小,因此,在反共振频率附近,等效阻抗最大,导纳最小。图 4 为 Al 电极厚 0.1 μm 、 $\eta_E = 0.001, \eta_{eS} = 0.01$ 时的频率-导纳曲线。通过分析压电振子的导纳特性曲线,可确定其共振和反共振频率。图 5、6 分别为同等损耗下不同电极材料随电极厚度变化的共振和反共振频率。

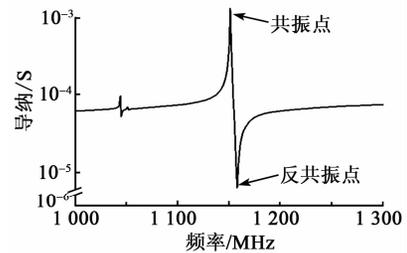


图 4 频率-导纳曲线

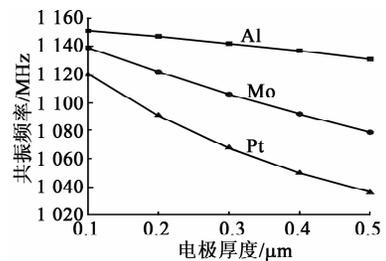


图 5 不同电极材料在不同电极厚度下的共振频率曲线

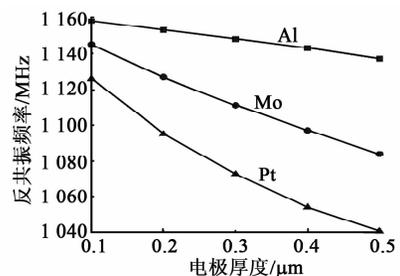


图 6 不同电极材料在不同电极厚度下的反共振频率曲线

由图 5、6 可看出,随着电极厚度的增加,共振与反共振频率呈下降趋势,但对于不同的电极材料,不仅频率值存在差异,下降速度也不同。经分析可知,相同条件下,Al 电极的共振及反共振频率最大,Mo 其次,Pt 最低;同样,Al 电极受厚度变化的影响较小,Mo 其次,Pt 受电极厚度影响最大。这是由于 Mo 和 Pt 的密度和弹性模量都比 Al 大,金属电极质量越大即密度越大,其对压电复合结构的频率影响越大,由于 Al 的密度最小,所以其影响较小,Mo 其次,Pt 最大。另随着金属电极厚度的增加,电极材料的声阻抗变大,相应体波的传播路径延长,造成能量的损失,所以会引起振动频率的降低。

图 7 为 Al 电极材料的压电复合结构在不同损耗下共振频率随电极厚度变化曲线。由图可看出,对于不同的介电损耗和机械损耗,共振频率曲线基本重合,但在机械损耗变化情况下,共振频率有偏差。而介电损耗变化时,共振频率基本不变。可见,机械损耗对共振频率的影响比介电损耗大,反共振频率与共振频率的变化基本一致。

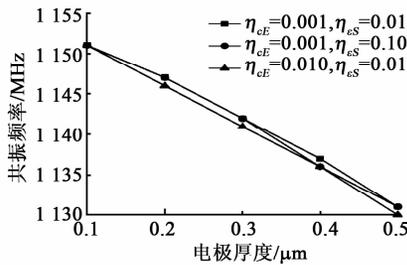


图 7 不同损耗下共振频率随电极厚度变化曲线

2.2.3 品质因数和 k_{teff} 分析

k_{teff} 和品质因数是两个表征压电复合结构性能的重要参数。不同 η_{eE} 和 η_{eS} 下,0.1 μm 厚 Al 电极的频率-品质因数曲线如图 8 所示,其他参数下的曲线与此类似。由于本研究采用的是对称模型,其品质因数应是完整模型的 4 倍。由图可看出,在共振频率附近,品质因数值达到了最大值(约 3 000),说明在共振处压电复合结构损耗达到了最大值;而随着 η_{eE} 和 η_{eS} 的增大,复合结构的整体能量损耗增加,品质因数值随之整体下降。

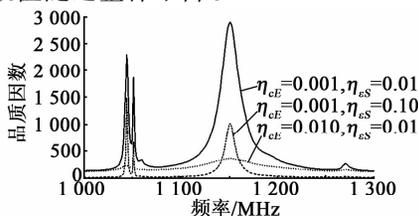


图 8 不同损耗下的频率-品质因数曲线

图 9 为 $\eta_{eE}=0.001$ 、 $\eta_{eS}=0.01$ 时不同电极材料下品质因数随电极厚度变化曲线。由图可看出,电极材料为 Al 时,品质因数较大,即 Al 作为电极时其损耗较小,尤其是随着电极厚度的增加,Al 电极下的品质因数基本不变,而另外两种材料则呈下降趋势,因此,在电极厚度较大时,Al 相对于其他两种材料更适合作为压电复合结构的电极。

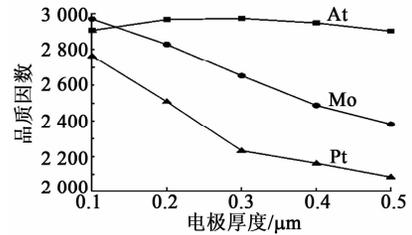


图 9 不同电极材料下品质因数随电极厚度变化曲线

机电耦合系数决定了压电薄膜电能和机械能间的转换比例,也决定了压电薄膜换能器的带宽。图 10 为不同电极材料下由式(9)计算出的 k_{teff} 随电极厚度变化的曲线。由图可看出,Al 作为电极时, k_{teff} 最大($k_{\text{teff}}=0.11$),略小于文献[11-12]中的测量值($k_{\text{teff}}=0.13$),这是由于不锈钢基底的特性阻抗比 AlN 的特性阻抗大,换能器振动时对压电振子起阻尼作用,降低了其频带宽度,从而使 k_{teff} 变小。 k_{teff} 并不是随着电极厚度呈固定趋势变化,Pt 作为电极时,机电耦合系数曲线呈现一种周期性的上下变化,且变化幅度较大;由于电极厚度的取值不多,Al 和 Mo 的变化并不是一个完整的周期变化,且变化幅度较小;这是因为厚度较大的金属电极有较低的阻抗损耗,但机械损耗会增大,使 k_{teff} 在一定电极厚度范围内上下波动。因为机械损耗和介电损耗对共振和反共振频率的影响不大,因此,其对机电耦合系数的影响也较低。

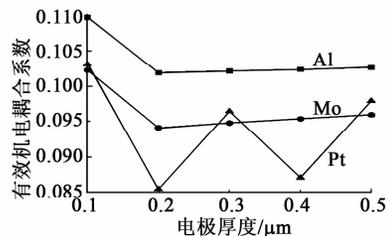


图 10 不同电极材料下 k_{teff} 随电极厚度变化曲线

3 结束语

本文针对 AlN 压电薄膜复合结构,采用 COM-SOL Multiphysics 有限元软件对电极-AlN-不锈钢结构的三维模型进行了压电-结构耦合分析。讨论

了不同电极厚度、材料及不同的介电损耗和机械损耗对其共振和反共振频率、机电耦合系数、品质因数等性能的影响。经分析可得,随着电极厚度的增加,共振与反共振频率呈现下降趋势,但对于不同的电极材料,不仅频率值存在差异,下降速度也不同,其中Al作为电极时,得到的共振频率最大,且受电极厚度的影响较小。对于不同损耗,机械损耗比介电损耗对共振频率的影响大;电极材料为Al时,品质因数较大,在电极厚度增大时,Al电极下的品质因数基本不变,电极材料为Mo、Pt时,其品质因数呈下降趋势。因此,在电极厚度较大时,Al相对于其他两种材料更适合作为压电复合结构的电极。有效机电耦合系数随电极厚度变化呈周期性的上、下变化。通过对改变电极参数可得更大的机电耦合系数。

参考文献:

- [1] DUBOISA M A, MURALTB P. Properties of aluminum nitride thin films for piezoelectric transducers and microwave filter applications [J]. Appl Phys Lett, 1999, 74(20): 3032-3034.
- [2] LIUFU D, KAO K C. Piezoelectric, dielectric, and interfacial properties of aluminum nitride films[J]. J Vac Sci Technol A, 1998, 16(4): 2360-2366.
- [3] CALIENDO C, IMPERATORI P, CIANCI E. Structural, morphological and acoustic properties of AlN thick films sputtered on Si(001) and Si(111) substrates at low temperature [J]. Thin Solid Films, 2003, 441: 32-37.
- [4] AKIYAMA M, KAMOHARA T, KANO K, et al. Enhancement of piezoelectric response in scandium aluminum nitride alloy thin films prepared by dual reactive cosputtering [J]. Advanced Materials, 2009, 21: 593-596.
- [5] 吕琼莹, 杨艳, 焦海坤. 基于COMSOL Multiphysics超声波电极的谐振特性分析[J]. 压电与声光, 2012, 34(6): 864-867.
- LYU Qiongying, YANG Yan, JIAO Haikun. The resonance feature analysis of ultrasonic motor based on COMSOL multiphysics[J]. Piezoelectrics & Acousto-optics, 2012, 34(6): 864-867.
- [6] 栾桂冬, 张金铎, 王仁乾. 压电换能器和换能器振[M]. 北京: 北京大学出版社, 2005.
- [7] ERMERT H, KARG R. Multifrequency acoustical holography[J]. IEEE Trans Sonics and Ultrasonic, 1979, 26: 279.
- [8] LERCH R. Simulation of piezoelectric devices by two and three dimensional finite elements[J]. IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 1990, 37(2): 233-247.
- [9] MAKKONEN, HOLAPPA T A, SALOMAA M M. Finite element simulations of thin-film composite BAW resonators[J]. IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 2001, 48(5): 1241-1258.
- [10] KAGAWA Y, YAMABUCHI T. Finite element simulation of a composite piezoelectric ultrasonic transducer [J]. IEEE Transactions on Sonics and Ultrasonics, 1979, 26(2): 81-88.
- [11] 鲜晓军, 林书玉, 王登攀, 等. 基于类 1-3-2 型压电复合材料高频水声相控阵换能器研究[J]. 重庆邮电大学学报(自然科学版), 2016, 28(3): 389-394.
XIAN Xiaojun, LIN Shuyu, WANG Dengpan, et al. Study of high frequency phased-array underwater transducer based on analogous 1-3-2 piezocomposite material[J]. Journal of University of Posts and Telecommunications (Natural Science Edition), 2016, 28(3): 389-394.
- [12] 刘付德, 梁子南. 氮化铝薄膜做微波压电换能器的机电耦合系数的测定[J]. 电子测量与仪器学报, 1990, 4(1): 37-41.
LIU Fude, LIANG Zinan. Determination of the electro-mechanical coupling coefficient of piezoelectric AlN thin films [J]. Journal of Electronic Measurement and Instrument, 1990, 4(1): 37-41.