— ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ —

УДК 54.03, 621.38

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ СВОЙСТВ І.Н.Р.-СТРУКТУРЫ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ФИЛЬТРОВ НА ПОВЕРХНОСТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛНАХ

© 2024 г. А.С. Койгеров^{1,*}, О.Л. Балышева^{2,**}

¹Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ" им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: a.koigerov@gmail.com

**E-mail: balysheva@mail.ru

Поступила в редакцию 09.02.2024 г. После доработки 28.03.2024; 11.04.2024 г. Принята к публикации 15.04.2024 г.

Приведены результаты исследования температурных свойств I.Н.Р.-структур на многослойной подложке танталат лития/пленка диоксида кремния/кремний, используемых для улучшения характеристик устройств на поверхностных акустических волнах. Выполнено моделирование тестовых структур методом конечных элементов в пакете COMSOL и рассчитан температурный коэффициент частоты. Представлено сравнение рассчитанного коэффициента передачи резонаторного фильтра на традиционной монокристаллической подложке танталата лития 36° *XX*-среза и I.H.P.-фильтра при различных значениях температуры. Показана возможность минимизации температурного коэффициента частоты подбором толщины слоев подложки. Сравнение полученных результатов с известными данными показало хорошее совпадение. Практическая значимость состоит в использовании результатов моделирования и рассчитанных параметров при разработке различных классов устройств на многослойных подложках, в том числе с I.H.P.-структурами.

DOI: 10.31857/S0023476124040096, EDN: XCXFXG

ВВЕДЕНИЕ

Монокристаллы танталата лития, обладающие выраженным пьезоэлектрическим эффектом, успешно применяются для подложек устройств на поверхностных акустических волнах (ПАВ) в течение нескольких десятков лет. Однако ни танталат лития, ни олин из сушествующих монокристаллов не обладают необходимым набором физических свойств, обеспечивающих одновременное достижение предельно возможных технических характеристик устройств (например, рабочей частоты, полосы пропускания, температурной стабильности и т.д.). В условиях постоянно растуших требований к характеристикам устройств на ПАВ монокристаллические подложки уже не удается адаптировать к современным и перспективным применениям. В последние годы повышенное внимание уделяется композитным многослойным подложкам для ПАВ-применений, поскольку они обладают большим потенциалом улучшения важнейших характеристик устройств на традиционных монокристаллических подложках. Комбинация нескольких материалов позволяет сочетать наиболее выгодные свойства каждого из них для получения параметров ПАВ, одновременно нереализуемых в монокристаллических подложках.

Примером могут служить І.Н.Р. ПАВ-фильтры. Впервые ПАВ-структура на многослойной подложке, названная I.H.P. (Incredible high performance – невероятно высокие характеристики), была предложена в 2016 г. [1]. Идея структуры основана на минимизации утечки энергии вытекающих поверхностных акустических волн (ВПАВ) внутрь подложки за счет формирования стека брегговских отражателей в виде комбинации материалов с высоким и низким акустическим сопротивлением. Кроме того, сочетание материалов с отрицательным температурным коэффициентом частоты (ТКЧ), таких как ниобат и танталат лития, с материалом, имеющим положительный ТКЧ, например пленкой диоксида кремния, позволяет повысить температурную стабильность всей подложки.



Рис. 1. Типовая І.Н.Р. ПАВ-структура: оригинальный трехслойный вариант (а) и модифицированный двухслойный вариант (б): *1* – электроды, *2* – пьезоэлектрический слой, *3* – функциональный слой (SiO₂), *4* – низкоскоростной слой (AlN), *5* – основная подложка.

Предложенная І.Н.Р. ПАВ-структура резонатора показана на рис. 1а. Электроды (1) размещены на подложке, состоящей из тонкого пьезоэлектрического слоя (2), слоя с низким (3) и высоким (4) акустическим импедансом на основной поддерживающей подложке (5). В [1] предложена, теоретически и экспериментально исследована I.H.P.-структура 42°YX–LT/SiO₂/AlN/Si. В подложке в качестве пьезоэлектрического слоя используется танталат лития среза 42° YX, для слоя с низким акустическим импедансом (функционального слоя) выбран диоксид кремния, а в качестве слоя с высоким акустическим импедансом (или высокоскоростного слоя) взят нитрид алюминия. Изготовленный резонатор показал улучшение ТКЧ до значения 8 ppm/°C, что составило одну пятую от величины для монокристаллической подложки танталата лития. Дальнейшие исследования [2-4] позволили изготовить I.H.P.-резонатор, в котором наряду с улучшением ТКЧ достигнуты расширение полосы пропускания на 20% и повышение *Q*-фактора в 4 раза по сравнению с традиционным резонатором. Было показано [3], что I.H.P.-структура 42°YX-LT/SiO₂/AlN/Si обеспечивает удержание примерно 98% энергии ПАВ на глубине около двух длин волн, практически такой же эффект достигается в структуре с двумя слоями на поддерживающей подложке 42° YX-LT/SiO₂/Si (рис. 1б). Обнаружено, что значение коэффициента электромеханической связи (КЭМС), большее, чем у монокристаллической подложки 42° YX танталата лития, достигается при относительной толщине танталата лития от 0.1 до 0.3λ , а меньшее значение ТКЧ – при относительной толщине слоя диоксида кремния 0.3λ.

Исследование І.Н.Р. ПАВ-структур было продолжено с расширением перечня используемых для слоев материалов [5–7], оптимизации конструкций встречно-штыревого преобразователя (**ВШП**) [8], а также применения таких структур для разработки фильтров с рабочими частотами более 3 ГГц [9, 10]. Например, в работе [11], посвященной І.Н.Р. ПАВ-структурам, показана существующая взаимосвязь основных параметров резонаторов и построенных на их основе фильтров (таких как резонансная частота, ТКЧ, *Q*-фактор, полоса пропускания, вносимое затухание) как с толщиной слоев многослойной подложки, так и с параметрами электродов.

В настоящее время продолжаются активные исследования возможностей улучшения основных характеристик І.Н.Р. ПАВ-структур [12, 13]. В частности, анализируются источники и возможные методы подавления побочных откликов, снижения потерь с оценкой их влияния на достигаемую величину добротности, совершенствуются методы и подходы к моделированию подобных структур [14].

Цель настоящей работы — исследование температурных свойств І.Н.Р. ПАВ-структуры в пакете COMSOL Multiphysics для минимизации ТКЧ. В качестве пьезоэлектрического слоя выбран танталат лития среза 36°*YX*, монокристаллические подложки которого традиционно используются для производства отечественных радиочастотных ПАВ-фильтров.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАВ-СТРУКТУР

В качестве тестовых структур в работе рассмотрены фрагменты ВШП размером в одну длину волны с алюминиевыми электродами (ширина электродов ВШП – $\lambda/4$), расположенного на монокристаллической подложке танталата лития, и I.H.P.-структура: алюминиевые электроды на подложке танталат лития/пленка диоксида кремния/кремний. Геометрия ячейки представлена на рис. 2а.

Необходимые при моделировании значения материальных констант (констант упругости, пьезоэлектрических и диэлектрических констант), плотности, а также температурные коэффициенты материальных констант применяемых материалов взяты из [15–19].

На первом этапе рассмотрен анализ ВПАВ на традиционной подложке 36° YX-среза танталата лития. Как видно из анализа собственных частот, картина механических смещений, показанная на рис. 26, соответствует типовой ВПАВ, энергия которой сосредоточена в слое порядка нескольких длин волн. Известно, что для распространяющейся ВПАВ характерна утечка в глубину подложки, что является дополнительным фактором, влияющим на потери распространения по сравнению с ПАВ Рэлея.

На рис. 2в представлен фрагмент І.Н.Р. ПАВ-структуры Al/36°*YX*–LT/SiO₂/Si. Анализ картины собственных колебаний (рис. 2г) показывает, что в слоистой подложке за счет специально подобранной комбинации слоев акустическую волну удается удерживать вблизи поверхности на меньшей глубине, тем самым уменьшая утечку волны в объем подложки. На рис. 3 представлена зависимость нормированной амплитуды механического смещения от расстояния, отражающая глубину проникновения волны в подложку. Результаты расчетов показывают, что глубина проникновения волны для I.H.P.-структуры сокращается вдвое по сравнению с монокристаллической подложкой и не превышает двух длин волн, что подтверждает эффект удержания энергии у поверхности.

Температурные свойства подложек для устройств на ПАВ характеризует числовое значение ТКЧ (на практике часто ограничиваются рассмотрением только ТКЧ 1-го порядка), показывающего изменение частоты при изменении температуры на 1°С. ТКЧ рассчитывается по известной формуле

$$TK\Psi = \frac{1}{f}\frac{df}{dT} = TKC - TKP,$$
 (1)

где f — частота, T — температура, ТКС — температурный коэффициент скорости, ТКР — температурный коэффициент расширения подложки. Практически ТКЧ можно определить, рассчитав относительное смещение частоты.

Для оценки температурных свойств I.H.P.-структуры рассмотрена температурная зависимость констант используемых материалов, представленная в виде выражения [20]:

$$k_{ij}(T) = k_{ij}(T_0) \cdot (1 + a_{ij}(T - T_0)), \qquad (2)$$

где $k_{ij}(T)$ — материальная константа для данной температуры, T_0 — комнатная температура (25°С), $k_{ij}(T_0)$ — материальная константа при комнатной температуре, a_{ij} — температурный коэффициент материальной константы.

Температурный коэффициент плотности материала вычисляется по известным значениям коэффициентов линейного расширения [20]. Расчеты в COMSOL проводили в области собственных частот (Study-Eigenfrequency). На рис. 4 показана зависимость ТКЧ от толщины пьезоэлектрического слоя танталата лития при выбранных различных значениях относительной толщины пленки SiO₂ от 30 до 100% (кривые 2-5). Рассчитана зависимость ТКЧ для полностью закороченной металлизированной поверхности при бесконечно тонком металлическом слое (относительная толщина металлического слоя $Hm/\lambda \rightarrow 0$). Прямая 1 отражает значение ТКЧ для монокристаллической подложки 36° YX-LT. Расчеты показывают, что с увеличением толщины слоя танталата лития для пленки толщиной от 30 до 75% наблюдается монотонное

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 69 № 4 2024



Рис. 2. Тестовые структуры: а — электроды с периодом $p = \lambda/2$ на монокристаллической подложке, б картина механических смещений для одной из собственных частот на монокристаллической подложке, в — І.Н.Р.-структура, г — сетка, д — картина механических смещений для одной из собственных частот І.Н.Р.-структуры. Особенности модели: 1 — пьезоэлектрический материал, 2 —электроды, 3 — слой SiO₂, 4 — слой Si, 5 — идеально согласующий слой.



Рис. 3. Распредение полного смещения по глубине подложки при нанесении электродов относительной толщиной $h/\lambda = 5.5\%$: *1* – монокристаллическая подложка, *2* – I.H.P.-структура.

уменьшение ТКЧ от положительных до отрицательных значений с переходом через 0 при толщине пьезоэлектрического слоя ~25–35%. Для



Рис. 4. Зависимость ТКЧ в І.Н.Р.-структуре от относительной толщины пьезоэлектрического слоя ($h_{\rm LT}$) при различных толщинах пленки SiO₂ ($h_{\rm SiO2}$): *I* – ТКЧ традиционной подложки танталата лития 36° *YX*-среза, *2* – $h_{\rm SiO2}/\lambda = 30$, *3* – $h_{\rm SiO2}/\lambda = 50$, *4* – $h_{\rm SiO2}/\lambda = 75$, *5* – $h_{\rm SiO2}/\lambda = 100\%$.

пленки SiO₂ толщиной в одну длину волны при увеличении толщины пьезоэлектрического слоя ТКЧ сначала уменьшается, а потом увеличивается, принимая только положительные значения. Можно выбрать такое соотношение толщины пьезоэлектрического слоя и пленки диоксида кремния, при которых ТКЧ будет составлять 0-7 ppm/°C, что является неплохим результатом по сравнению с базовым значением ТКЧ для танталата лития, равным -35 ppm/°C.

На следующем этапе было принято решение для рассчитанных значений толщин слоев, при которых достигается минимальное значение ТКЧ, рассчитать характеристику полосового фильтра на ПАВ и оценить влияние температуры. Выбранные значения толщин слоев составили $h_{SiO2} = 0.3\lambda$, $h_{LT} = 0.25\lambda$.

Выбран резонаторный ПАВ-фильтр типа DMS (Double Mode SAW filters) [21], топология которого представлена на рис. 5а. Входные ВШП состоят из 47 электродов, выходные – из 37 электродов. Крайние электроды преобразователей, примыкающих друг к другу, имеют плавно изменяющийся период следования электродов, что минимизирует утечку ВПАВ при переходе от одного структурного элемента к другому, как предложено в [22], тем самым зазоры между ВШП–ВШП отсутствуют, так же как и между ВШП и отражательной структурой. Материал электродов – алюминий, относительная толщина металлизации – 5.5%, коэффициент металлизации электродов – 0.5, число элементов



Рис. 5. Пример моделирования фильтра DMS в COMSOL: а – топология фильтра, б – построенная сетка в COMSOL, в – распределение потенциала в многослойной подложке.

в отражательных структурах – 50 закороченных электродов. Расчет проводили в COMSOL в Study-Frequency response для участка с малой апертурой. Последовательность расчета подробнее представлена в [23]. Из расчетов были исключены такие виды потерь, как резистивные и потери на распространение (вязкостные и от воздушной нагрузки), с целью оценки потерь на утечку волны в глубину подложки. Визуализация результатов расчета для одной из частотных точек представлена на рис. 5в. Коэффициент передачи фильтра на традиционной подложке танталата лития среза 36° YX представлен на рис. 6а, 6б. Фильтр имеет следующие параметры: центральная частота 927 МГц, полоса пропускания 30 МГц, вносимое затухание -0.4 дБ. Уход центральной частоты в диапазоне температур -65-+80°С составил 4.7 МГц, что соответствует ТКЧ = -35 ppm/°C. I.H.P.-фильтр,



Рис. 6. Амплитудно-частотная характеристика фильтра на ПАВ в зависимости от температуры окружающей среды: а, б – на подложке танталата лития; в, г – для структуры І.Н.Р.: –60 (*1*), 25 (*2*), 85°С (*3*).

коэффициент передачи которого показан на рис. 6в, 6г, имеет параметры: центральная частота 904 МГц, полоса пропускания 27.5 МГц, вносимое затухание -0.1 дБ. Уход центральной частоты в диапазоне температур $-60-+85^{\circ}\text{C}$ составил не более 0.8 МГц, что соответствует ТКЧ = $-6 \text{ ppm}/^{\circ}\text{C}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Выполненные расчеты показали, что использование технологии І.Н.Р. с применением пьезоэлектрического слоя танталата лития среза 36° YX позволяет улучшить температурную стабильность.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 69 № 4 2024

Расчетное значение ТКЧ составило -6 ppm/°C для толщины пленки $H_{SiO2} = 0.3\lambda$. Полученные результаты для пьезоэлектрического слоя рассмотренного среза $36^{\circ}YX$ хорошо согласуются с теоретическими и экспериментальными результатами (например, [3]) для подобных І.Н.Р.-структур с пьезоэлектрическим слоем танталата лития срезов $42^{\circ}YX$ и $50^{\circ}YX$. Сходство получено как в виде кривых, так и в порядке необходимых толщин слоев для осуществления температурной компенсации. Возможные различия в численных значениях объясняются рассмотрением в данной работе другого среза танталата лития.

Однако наряду с существенным уменьшением ТКЧ в І.Н.Р.-структуре сопутствующими факторами является изменение параметров ПАВ и соответствующее изменение характеристик фильтра. Использование выбранных толшин приводит к уменьшению скорости акустической волны, изменению КЭМС и параметров отражения, что является нежелательным при заданных значениях центральной частоты и полосы пропускания. Поэтому необхолимо корректировать топологию и пересчитывать характеристики фильтра для удовлетворения необходимым требованиям. Положительным фактором в I.Н.Р. ПАВ-фильтре служит существенное снижение вносимого затухания. Следует учитывать и тот факт, что для увеличения порядка фильтра и повышения прямоугольности характеристик, как правило, используется каскадное соединение нескольких ПАВ-звеньев фильтра. Таким образом, полученный результат позволяет спрогнозировать выигрыш по вносимому затуханию.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненные исследования І.Н.Р. ПАВ-структуры Al/36°*YX*–LT/SiO₂/Si подтвердили эффект удержания энергии ПАВ у поверхности на глубине не более 2λ. Подбор толщины слоев танталата лития и диоксида кремния позволил улучшить температурную стабильность по сравнению с температурной стабильностью монокристаллической подложки. Расчет коэффициента передачи І.Н.Р. ПАВ-фильтра с центральной частотой 904 МГц и полосой пропускания 27 МГц показал уход центральной частоты при изменении температуры от -60 до $+85^{\circ}$ С не более 0.8 МГц, что соответствует TKH = -6 ppm/°C. Выполненные расчеты с учетом наложенных при моделировании ограничений показали снижение уровня вносимого затухания за счет использования І.Н.Р.-структуры на 0.3 дБ.

Несмотря на очевидные преимущества ПАВ-фильтров на многослойных подложках, в том числе I.Н.Р.-фильтров, разработка подобных устройств с оптимальными характеристиками требует дальнейшего интенсивного изучения. Этапу производства должен предшествовать этап всестороннего анализа, включая моделирование с оценкой таких ключевых показателей, как температурная стабильность, *Q*-фактор, вносимые потери, полоса пропускания.

Представленные в работе результаты не только демонстрируют возможности улучшения основных показателей — температурной стабильности и вносимого затухания фильтров, но и предоставляют разработчикам эффективный инструмент моделирования с целью оптимального подбора параметров многослойных подложек для последующей разработки и промышленного производства отечественных I.H.P. ПАВ-фильтров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Takai T., Iwamoto H., Takamine Y. et al. // Proc. of the 2016 IEEE Intern. Ultrason. Symp. (IUS), Tours, France, 18–21 September 2016. P. 1–4. https://doi.org/10.1109/ULTSYM.2016.7728455
- Takai T., Iwamoto H., Takamine Y. et al. // Proc. of the 2016 IEEE MTT-S Intern. Microwave Symposium (IMS), San Francisco, CA, USA, 22–27 May 2016. P. 1–4. https://doi.org/10.1109/MWSYM.2016.7540214
- 3. *Takai T., Iwamoto H., Takamine Y. et al.* // Proc. of the 2017 IEEE Intern. Ultrason. Symp. (IUS), Washington, DC, USA, 6–9 September 2017. P. 1–8.
- https://doi.org/10.1109/ULTSYM.2017.8091876
 4. Takai T., Iwamoto H., Takamine Y. et al. // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. 2019. V. 66. P. 1006.

https://doi.org/10.1109/TUFFC.2019.2898046

 Nagatomo S., Iwamoto H., Taniguchi Y. // Proc. Symposium on Ultrasonic Electronics. 2019. V. 40. P. 25.

https://www.jstage.jst.go.jp/article/use/40/0/40_1P3-2/_pdf

- *Xiao Q., Dai M., Chen J. et al.* // Acoust. Phys. 2019.
 V. 65. № 6. *P.* 652.
- Chen P., Li G., Zhu Z. // Micromachines. 2022. V. 13. P. 656. https://doi.org/10.3390/mi13050656
- 8. *Qian Y., Shuai Y., Wu C. et al.* // Piezoelectrics and Acoustooptics. 2023. V. 45. № 3. P. 350.
- Takamine Y., Takai T., Iwamoto H. et al. // Proc. of the 2018 Asia-Pacific Microwave Conference (APMC), Kyoto, Japan, 6–9 November 2018. P. 1342. https://doi.org/10.23919/APMC.2018.8617381
- Kimura T., Omura M., Kishimoto Y., Hashimoto K. // IEEE MTT-S Intl. Microwave Symp. 2018. P. 846. https://doi.org/10.23919/APMC.2018.8617381
- Nakagawa R., Iwamoto H., Takai T. // Jpn. J. Appl. Phys. 2020. V. 59. № SKKC09. https://doi.org/10.35848/1347-4065/ab867c
- Qian Y., Shuai Y., Wu C. et al. // Micromachines. 2023. V. 14. P. 1929. https://doi.org/10.3390/mi14101929
- Pan H., Yang Y., Li L. et al. // Micromachines. 2024.
 V. 15. P. 12. https://doi.org/10.3390/mi15010012
- Zhang Q., Chen Z., Chen Y. et al. // Micromachines. 2021. V. 12. P. 141. https://doi.org/10.3390/mi12020141
- Kovacs G., Anhorn M., Engan H. et al. // Proc. 1990 IEEE Ultrasonic Symposium Honolulu. Hawaii. Dec. 1990. V. 1. P. 435. https://doi.org/10.1109/ULTSYM.1990.171403
- 16. *Aslam M.Z., Jeoti V., Karuppanan S. et al.* // Proc. International Conference on Intelligent and Advanced

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 69 № 4 2024

System (ICIAS). 2018. P. 1. https://doi.org/10.1109/ICIAS.2018.8540581

- Wang Y., Liu X., Shang S. et al. // Proc. 2019 14th Symposium on Piezoelectricity, Acoustic Waves and Device Applications (SPAWDA). 2019. P. 1. https://doi.org/10.1109/SPAWDA48812.2019.9019330
- Smith R.T., Welsh F.S. // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. № 6. P. 2219. https://doi.org/10.1063/1.1660528
- Ma R., Liu W., Sun X., Zhou S., Lin D. // Micromachines. 2022. V. 13. P. 202. https://doi.org/10.3390/mi13020202

- 20. Двоешерстов М.Ю., Петров С.Г., Чередник В.И., Чириманов А.П. // ЖТФ. 2001. Т. 71. № 4. С. 89.
- Morita T., Watanabe Y., Tanaka M., Nakazawa Y. // IEEE Ultrason. Symp. Proc. 1992. P. 95. https://doi.org/10.1109/ULTSYM.1992.276057
- 22. *Макаров В.М., Иванов П.Г., Данилов А.Л., Зая В.Г. //* Радиотехника и электроника. 2008. Т. 53. № 3. С. 377.
- 23. *Койгеров А.С., Балышева О.Л.* // Радиотехника и электроника. 2022. Т. 67. № 11. С. 1152. https://doi.org/10.31857/S0033849422110055

THE STUDY OF TEMPERATURE PROPERTIES OF I.H.P. STRUCTURE AND ITS APPLICATION FOR FILTERS ON SURFACE ACOUSTIC WAVES

A. S. Koigerov^{a,*}, O. L. Balysheva^{b,**}

^aSaint Petersburg Electrotechnical University "LETI", 197376 St. Petersburg, Russia ^bSaint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation (SUAI), 190000, St. Petersburg, Russia *e-mail: a.koigerov@gmail.com

**e-mail: balysheva@mail.ru

Abstract. The results of investigation of temperature properties of I.H.P.-structures on multilayer lithium tantalate/silicon dioxide film/silicon substrate used to improve the characteristics of surface acoustic wave devices are presented. Finite element modeling of the test structures was performed in COMSOL software and the temperature frequency coefficient was calculated. A comparison of the calculated transmission coefficient of a resonator filter on a conventional 36°YX-cut lithium tantalate monocrystal substrate and an I.H.P.-filter at different temperature values is presented. The possibility of minimizing the temperature coefficient of frequency by selecting the thickness of the substrate layers is shown. Comparison of the obtained results with the known data showed good agreement. The practical significance consists in the use of modeling results and calculated parameters in the development of various classes of devices on multilayer substrates, including those with I.H.P.-structures.