

# UNIVERSITE DE LIMOGES

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCE – TECHNOLOGIE – SANTE

FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES

Laboratoire Xlim (UMR 6172), équipe MINACOM

Thèse N° [69-2007]

Thèse pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE LIMOGES

**Discipline : Electronique des Hautes fréquences et  
Optoélectronique**

**Spécialité : Communications optiques et micro-ondes**  
présentée et soutenue par

***Sylvain GIRAUD***

le 5 Décembre 2007

***Étude, conception et réalisation de résonateurs  
piézoélectriques pour des applications hautes fréquences***

***Thèse dirigée par Dominique CROS***

Jury :

<b>Michel PRIGENT</b>	Professeur à l'Université de Limoges - Xlim	Président
<b>Sylvain BALLANDRAS</b>	Directeur de Recherche – LPMO Besançon	Rapporteur
<b>Bertrand DUBUS</b>	Directeur de Recherche – IEMN/ISEN Lille	Rapporteur
<b>Didier ALBRECHT</b>	Ingénieur – DGA	Examineur
<b>Claude MULLER</b>	Ingénieur – CSEM Neuchâtel	Examineur
<b>Daniel CHEBANCE</b>	Ingénieur – CNES	Examineur
<b>Michel AUBOURG</b>	Chargé de Recherche – Xlim	Examineur
<b>Dominique CROS</b>	Professeur à l'Université de Limoges – Xlim	Examineur
<b>Roger PETIT</b>	Ingénieur – DGA	Invité
<b>Stéphane BILA</b>	Chargé de Recherche – Xlim	Invité



# REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse, M. Dominique CROS, qui m'a « supporté » pendant ces trois années de thèse et qui m'a laissé appliquer mes décisions personnelles même si elles n'avaient pas l'air, à première vue, prometteuses.

Je remercie la DGA et M. Didier ALBRECHT pour avoir financé et encadré ces trois années de thèse.

Je suis très honoré que le M. Michel PRIGENT, Professeur au laboratoire Xlim, ait accepté de présider le jury au cours de ma soutenance.

J'adresse mes plus sincères remerciements à M. Sylvain BALLANDRAS, du laboratoire FEMTO-ST à Besançon, et à M. Bertrand DUBUS, du laboratoire IEMN à Lille, d'avoir accepté de rapporter ce travail de thèse.

Je remercie tous les autres membres de jury, M. Daniel CHEBANCE, M. Claude MULLER, et les invités M. Roger PETIT et M. Jean-Marc LESAGE.

J'adresse ensuite mes remerciements à mon « maître à penser », M. Michel AUBOURG, sans qui rien n'aurait été possible, et à M. Stéphane BILA, pour sa disponibilité et sa gentillesse.



# SOMMAIRE

## INTRODUCTION GÉNÉRALE

### CHAPITRE I : LES RÉSONATEURS PIÉZOÉLECTRIQUES ET LEURS APPLICATIONS DANS LES ÉMETTEURS-RÉCEPTEURS RF

I Introduction.....	17
II Piézoélectricité et résonateurs .....	18
II.1 Rappels historique.....	18
II.2 Résonateurs piézoélectriques.....	19
II.2.1 Résonateurs SAW.....	19
II.2.2 Résonateurs BAW à Quartz.....	21
III Les résonateurs BAW pour des applications hautes fréquences .....	22
III.1 Résonateur BAW élémentaire ou transducteur .....	22
III.2 FBAR (Film BAW Resonator).....	25
III.3 SBAR (Solidly-mounted BAW Resonator).....	27
IV Matériaux utilisés .....	29
IV.1 Caractéristiques physiques.....	29
IV.1.1 Matériaux piézoélectriques.....	29
IV.1.2 Électrodes .....	32
IV.1.3 Autres matériaux employés .....	36
IV.2 Techniques de dépôt .....	37
IV.2.1 La pulvérisation cathodique DC .....	38
IV.2.2 La pulvérisation par ablation laser.....	39
V Application et intégration des résonateurs BAW dans les émetteurs récepteurs RF.....	40
V.1 Applications des résonateurs BAW dans les émetteurs récepteurs RF.....	40
V.1.1 Oscillateurs locaux .....	41
V.1.2 Filtres RF .....	43
VI Intégration des filtres BAW dans les chaines RF.....	53
VI.1 Intégration hybride SiP (System in Package).....	53
VI.2 Intégration monolithique SoC (System on Chip).....	54
VII Conclusion .....	56

## CHAPITRE II : MISE EN ÉQUATION DU PROBLÈME PIÉZOÉLECTRIQUE

I Introduction.....	59
II Structure cristalline .....	61
II.1 Structures élémentaires.....	61
II.1.1 Les rangées : repérage d'une direction .....	61
II.1.2 Plans réticulaires : repérage d'un plan.....	62
II.1.3 Les mailles .....	63
II.2 Structures atomiques d'un cristal.....	64
II.3 Symétries d'orientation des cristaux .....	65
III Mécanique des solides déformables .....	68
III.1 Contraintes.....	68
III.2 Déformations .....	70
III.3 Relation Contraintes Déformations : loi de Hooke.....	72
III.4 Élasticité des matériaux isotropes et du système hexagonal .....	73
III.4.1 Matériaux isotropes.....	74
III.4.2 Matériaux du système hexagonal 6mm .....	75
IV Couplage électrique mécanique .....	76
IV.1 Solide piézoélectrique.....	76
IV.2 Mise en équation des mécanismes physiques .....	79
IV.3 Écriture tensorielle.....	82
V Résolution en ondes planes : équation de Christoffel.....	84
V.1 Ondes planes élastiques de volume.....	84
V.2 Approximation quasi statique.....	85
V.3 Équation de Christoffel généralisée .....	86
V.4 Cas des matériaux 6mm .....	88
V.4.1 Propagation suivant l'axe z.....	88
V.4.2 Surface des lenteurs.....	90
V.4.3 Résonateurs BAW .....	92
VI Conditions aux limites .....	93
VI.1 Mécaniques.....	93
VI.2 Électriques.....	94
VII Les pertes dans les résonateurs BAW .....	95
VII.1 Pertes mécaniques .....	95
VII.2 Pertes électriques.....	96
VII.3 Pertes piézoélectriques .....	96
VIII Conclusion.....	97

# CHAPITRE III : MODÉLISATION 1D D'UN RÉSONATEUR BAW ET SYNTHÈSE DE FILTRES RF

I Introduction.....	101
II Approximation unidimensionnelle (1D) .....	103
II.1 Partie active et conditions d'application de l'approximation 1D.....	103
II.2 Équations 1D dans un milieu stratifié .....	105
II.2.1 Impédance caractéristique et impédance acoustique.....	105
II.2.2 Modélisation d'une couche de matériau non-piézoélectrique .....	106
II.2.3 Modélisation d'une couche de matériau piézoélectrique.....	108
II.2.4 Conditions mécaniques aux limites et aux interfaces.....	113
III Modèles unidimensionnels « acoustiques » .....	114
III.1 Le modèle de Mason .....	114
III.1.1 Couche de matériau non-piézoélectrique .....	114
III.1.2 Couche de matériau piézoélectrique .....	115
III.1.3 Modèle de Mason d'un résonateur SMR et étude du miroir de Bragg .....	116
III.2 Modèle de la permittivité piézoélectrique.....	120
IV Le modèle MBVD (Modified Butterworth Van-Dyke).....	125
V Application du modèle MBVD à la synthèse de filtre.....	129
V.1 Méthodologie.....	129
V.2 Définition de l'architecture du filtre .....	130
V.3 Synthèse du filtre .....	131
V.4 Considérations logicielles.....	132
V.4.1 Paramètres et variables d'optimisation.....	132
V.4.2 Analyse du filtre.....	133
V.4.3 Fonction d'optimisation.....	134
V.4.4 Optimisation multi-variables contrainte .....	134
V.5 Exemple de synthèse d'un filtre répondant à la norme UMTS .....	134
VI Conclusion .....	141

# CHAPITRE IV : MODÉLISATION 3D DES RÉSONATEURS BAW PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

I Introduction.....	145
II La méthode des éléments finis.....	147
II.1 Modélisation mathématique et formulation variationnelle.....	149
II.1.1 Formulation en champ électrique et déplacement mécanique .....	150
II.1.2 Formulation en potentiel électrique et déplacement mécanique .....	152
II.2 Choix du type d'élément .....	154
II.3 Paramétrisation en fréquence [45] .....	158
III Analyse d'un résonateur suspendu (FBAR).....	160
III.1 Description de la structure.....	160
III.2 Analyse de la réponse électrique .....	162
III.3 Visualisation et analyse des modes parasites .....	163
IV Optimisation de la qualité de la réponse électrique.....	166
IV.1 Oscillateur et bruit de phase .....	166
IV.1.1 Bruit de phase .....	166
IV.1.2 Impact du bruit de phase dans les circuits RF .....	167
IV.2 Optimisation du coefficient de qualité $Q$ .....	169
IV.3 Solution n°1 : Électrode supérieure apodisée.....	172
IV.4 Solution n°2 : Électrode supérieure chargée sur les bords.....	175
V Analyse d'un résonateur SMR .....	179
V.1 Description de la structure.....	179
V.2 Analyse de la réponse électrique .....	181
V.3 Visualisation et analyse des modes parasites .....	182
VI Conclusion .....	186

## CONCLUSION GÉNÉRALE

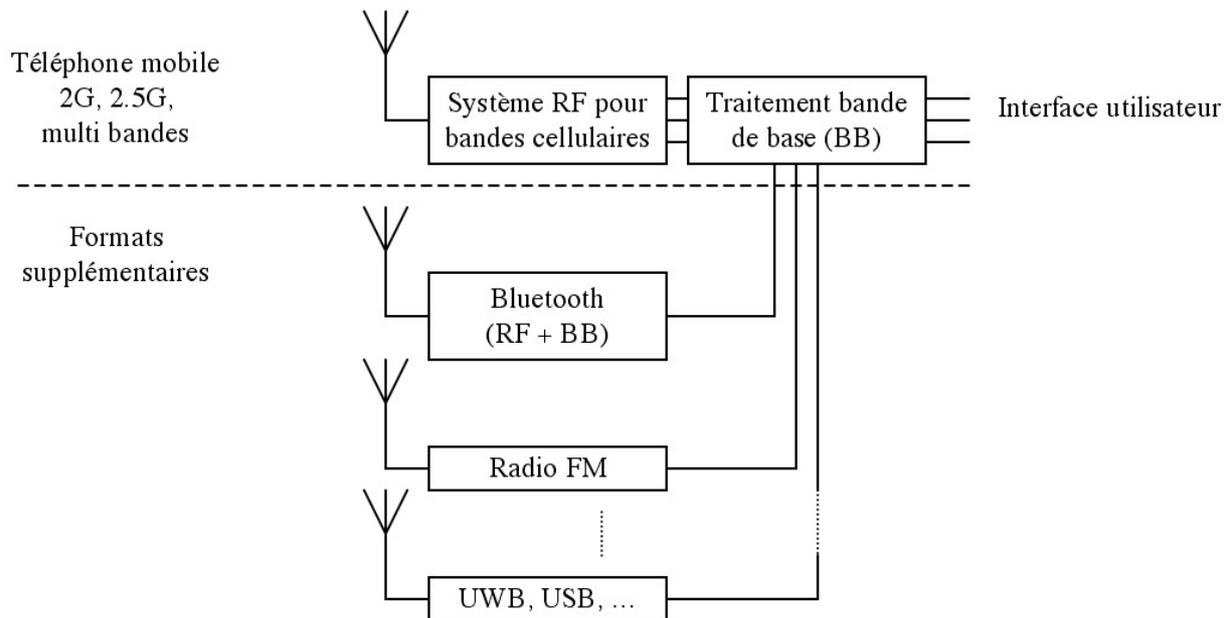
## ANNEXE I : CALCUL TENSORIEL

## ANNEXE II : ELEMENTS FINIS $P_2$ EN DIMENSION $N=1$

## BIBLIOGRAPHIE



La figure 2 montre que la complexité des terminaux mobiles ne cesse de croître. Le développement d'un téléphone multi standard est un défi technologique important. L'ajout de fonctionnalités supplémentaires doit se faire sans augmentation de la taille, du coût et surtout de la consommation électrique. Il est donc nécessaire d'utiliser des éléments passifs, sélectifs en fréquence et totalement intégrables sur silicium.



**Figure 2 : Exemple de terminal radio pour un téléphone mobile multi standard [1]**

À l'heure actuelle, deux technologies se partagent les fonctions hyperfréquences dans les émetteurs-récepteurs. La technologie céramique est généralement employée pour les filtres duplexeurs où des niveaux de puissance élevés sont nécessaires et la technologie SAW (Surface Acoustic Wave), pour les filtres inter-étages où la sélectivité est très importante. Leurs inconvénients sont l'encombrement pour la technologie céramique et les limites physiques du motif d'excitation, en termes de tenue en puissance et de montée en fréquence, pour la technologie SAW. De manière à palier ces points négatifs et éventuellement à améliorer les performances de systèmes RF, des axes de recherches sont en cours. Parmi ceux-ci, l'utilisation d'ondes acoustiques de volume générée grâce à un matériau piézoélectrique semble être une solution intéressante qui a déjà séduit de nombreux équipementiers du secteur de la téléphonie mobile. Plusieurs configurations sont possibles pour l'utilisation de ces ondes et sont regroupées sous le terme générique BAW (Bulk Acoustic Wave). Ce travail de thèse s'inscrit donc dans le cadre de cette technologie.

Les résonateurs BAW semblent être de bon candidats pour remplacer les technologies céramique et SAW. En effet, seule la technologie BAW est compatible avec les techniques d'intégration CMOS sur substrat bas coût Silicium. De plus, le fait d'utiliser la propagation des ondes acoustiques suivant l'épaisseur d'un empilement de couches minces permet de réduire de manière considérable la surface occupée par ces composants. La structure de ces résonateurs permet, de plus, d'envisager une bonne tenue en puissance tout en gardant une sélectivité importante à des fréquences élevées.

Le sujet de cette thèse porte sur le développement d'outils informatiques permettant de concevoir et de réaliser des résonateurs basés sur la technologie BAW et fonctionnant dans le domaine des micro-ondes ( $f > 1GHz$ ). Ces outils font appel à certaines approximations justifiées par le comportement physique des résonateurs, par l'application visée (1D) ou par le traitement informatique du problème (3D). Ce mémoire présente, en quatre chapitres, ces outils et les premiers résultats obtenus.

Le premier chapitre décrit, après un bref historique et une présentation des résonateurs SAW (Surface Acoustic Wave) et à Quartz, l'intérêt de la technologie BAW dans les applications RF. Le bond technologique concernant les techniques de dépôt et notamment la maîtrise des dépôts en couches minces a permis de concevoir des structures à couches piézoélectriques fonctionnant sur un mode d'épaisseur à hautes fréquences. Le choix des matériaux est une donnée essentielle dans la technologie BAW car il est nécessaire de trouver un compromis entre performance et compatibilité technologique d'intégration. Actuellement, le Nitrure d'Aluminium (AlN) est le matériau le plus utilisé pour la fabrication des structures BAW. Cependant, ses performances acoustiques et électriques dépendent du matériau sur lequel il est déposé et de la technique de dépôt employée. Les résonateurs BAW ont pour but d'être utilisés dans les émetteurs-récepteurs RF comme référence de fréquence dans le circuit d'oscillateur local et comme composant élémentaire dans les filtres duplexeur et inter-étages. L'intérêt principal est de réduire considérablement la consommation électrique et la taille de ces circuits, pour des performances égales voire supérieures.

Le deuxième chapitre présente la mise en équation du problème piézoélectrique. Certaines notions de cristallographie nécessaires à la compréhension du comportement élastique des matériaux (anisotropie) et à l'explication de l'origine physique du phénomène piézoélectrique sont d'abord rappelées. Les matériaux piézoélectriques ont la capacité de se polariser électriquement sous l'action d'une pression et de se déformer sous l'action d'un

champ électrique. La piézoélectricité constitue donc un couplage entre le comportement élastique et électrique des solides. L'aspect mécanique des solides déformables en petites déformations est modélisé par la loi de Hooke. La piézoélectricité peut être vue comme une généralisation du problème de l'élasticité couplé au problème électromagnétique. Les équations constitutives de la piézoélectricité relient donc la loi de Hooke et les équations de Maxwell. La résolution du problème par une approximation en ondes planes (équations de Christoffel) et la formulation des conditions aux limites mécaniques et électriques permettent de mettre en évidence certaines propriétés exploitées dans les résonateurs BAW.

L'approximation du comportement unidimensionnel du résonateur BAW est explicitée au début du chapitre III. Les conditions nécessaires à sa validité viennent du dimensionnement des structures BAW et des contraintes technologiques. Lorsque ces conditions sont respectées, une simplification des équations peut être effectuée. Ceci permet alors de formuler des modèles qui facilitent la conception des résonateurs. En fonction de l'étude visée, certains modèles seront plus appropriés que d'autres. Ainsi, le modèle de Mason permet une analyse du point de vue acoustique en considérant une excitation électrique. À l'inverse, le modèle de la permittivité piézoélectrique peut être intégré dans un logiciel de simulation électromagnétique et permet d'introduire le comportement acoustique du résonateur dans une analyse électrique. Enfin, le modèle MBVD (Modified Butterworth-Van Dyke) modélise directement la réponse électrique du résonateur grâce à un circuit électrique équivalent. Ce modèle est utilisé pour la synthèse de filtres à résonateurs BAW dans une procédure d'optimisation décrite à la fin du chapitre III. Cette dernière permet de déterminer les valeurs optimales de chaque élément du circuit équivalent pour répondre à une spécification électrique donnée (gabarit). Le modèle MBVD permet ensuite d'effectuer une cosimulation du filtre global dans Momentum.

Le quatrième et dernier chapitre est consacré au développement de l'outil de simulation tridimensionnelle EMXD et à l'étude 3D des résonateurs BAW. Cet outil permet d'effectuer une analyse 3D de structures à géométries complexes intégrant des matériaux piézoélectriques et dont les caractéristiques physiques peuvent dépendre de la fréquence. Pour ce faire, il utilise la méthode des éléments finis. Cette technique numérique fait intervenir la formulation variationnelle du problème et permet de le résoudre en se plaçant dans un espace de solutions de dimensions finis. La construction de cet espace est effectuée grâce au maillage de la structure par des éléments géométriques (tétraèdres, pentaèdres ou hexaèdres). L'analyse 3D des résonateurs BAW permet de mettre en évidence des phénomènes physiques dont les

modèles 1D ne tiennent pas compte, en particulier, la propagation des ondes acoustiques dans les dimensions latérales et l'éventuelle apparition d'ondes stationnaires dues aux limites physiques de la structure. Ces dernières peuvent être électriquement couplées et peuvent détériorer la forme de la réponse en fréquence. Ceci a un impact non négligeable sur les performances des circuits RF à résonateurs BAW. Notre logiciel de simulation EMXD permet alors d'étudier plusieurs solutions pour supprimer les modes parasites de la réponse électrique. La technique de paramétrisation en fréquence et l'utilisation d'un solveur multifrontal ultra parallèle en font un outil de calcul puissant.

Dans la conclusion générale, nous évoquerons les perspectives envisagées pour ce travail de thèse. En effet, les outils de simulation 1D couplés à notre outil 3D vont maintenant nous permettre de développer une procédure de conception complète d'un résonateur BAW, depuis le choix des matériaux, de l'épaisseur des couches jusqu'à la forme des électrodes et du motif d'excitation. EMXD constitue un outil particulièrement pratique et rapide pour optimiser les différentes étapes de cette procédure. Il rend aussi possible l'étude des couplages acoustiques et électriques pouvant exister entre résonateurs. Nous envisageons donc, à plus long terme, la simulation de structures à résonateurs comme des filtres. Enfin, le chaînage d'une analyse statique et d'une analyse dynamique pourrait être intéressant pour étudier des structures polarisée avec une tension continue et éventuellement développer des circuits agiles en fréquence.



CHAPITRE I :  
LES RESONATEURS PIEZOELECTRIQUES ET  
LEURS APPLICATIONS DANS LES  
EMETTEURS-RECEPTEURS RF



## I INTRODUCTION

La piézoélectricité est un phénomène physique exploité dans de nombreux domaines d'application. À titre d'exemple, le briquet électronique ou l'allume gaz sont des systèmes qui transforment une pression en une décharge électrique. À l'inverse, le générateur à ultrason pour l'échographie ou l'injecteur électronique des voitures transforment une commande électrique en déplacement mécanique. Le secteur des télécommunications est le plus gros consommateur de circuits piézoélectriques (filtres à ondes de surfaces, oscillateurs à Quartz, lignes à retard). L'essor grandissant des systèmes sans fils n'a fait qu'accélérer cette tendance.

L'intégration de plus en plus poussée et l'augmentation de la capacité des appareils de télécommunications portatifs sont des défis majeurs pour les fabricants de composants microélectroniques [1]. La montée en fréquence et l'augmentation de la bande passante permet d'augmenter le débit des données. Cependant, l'encombrement des bandes de fréquences pousse aussi à une canalisation de l'information. Il faut donc développer des composants de plus en plus petits, sélectifs en fréquence et qui consomment peu. La recherche de solutions permettant de repousser les limites des technologies actuelles et la maîtrise des techniques de dépôts en couches minces ont permis d'envisager l'utilisation de matériaux piézoélectriques dans le domaine des micro-ondes. Ces derniers permettent une diminution de la taille des composants et sont compatibles avec les techniques de fabrications actuelles [3].

Les filtres à ondes de volumes (Bulk Acoustic Waves : BAW) commencent à s'imposer sur le marché de la téléphonie mobile car ils ont permis de lever les verrous technologiques des filtres à ondes de surface (Surface Acoustic Waves : SAW). Début janvier 2004, Agilent Technologies annonçait qu'il avait produit son 100 millionième filtre à FBAR (Film Bulk Acoustic Waves Resonator) depuis la mise en production du produit en décembre 2001. La demande a été si forte qu'Agilent a dû augmenter sa production à six millions de filtres par mois. Depuis, plusieurs industriels comme Infineon, EPCOS ou ST-Microelectronics ce sont lancés sur ce marché en pleine expansion. Les performances électriques, mécaniques et la fiabilité des filtres BAW dépendent de la structure employée pour les résonateurs, des matériaux et des techniques de dépôts. De plus, plusieurs types de couplage permettent de synthétiser des réponses de filtres. Le choix défini sur chaque critère est déterminé par l'application visée. Les résonateurs BAW sont employés dans plusieurs fonctions RF et pourront même, à terme, être intégrés avec les organes actifs de la chaîne d'émission réception.

## II PIEZOELECTRICITE ET RESONATEURS

La piézoélectricité est la propriété physique que possèdent certains matériaux à se polariser électriquement lorsqu'ils sont soumis à une contrainte mécanique (effet direct) et à se déformer mécaniquement lorsqu'ils sont soumis à un champ électrique (effet indirect). L'application d'un champ électrique alternatif entraîne l'apparition d'une onde élastique et vice-versa.

### II.1 RAPPELS HISTORIQUE

Ce phénomène physique fut mis en évidence en 1880 par les frères Pierre et Jacques Curie qui étudiaient les propriétés cristallines du Quartz. Cette découverte ouvrit alors la voie à la génération contrôlée d'ondes élastiques jusqu'alors connues et étudiées par les géophysiciens lors des tremblements de Terre. À la fin du XIXe siècle, il était connu que les ondes sismiques se propageaient en volume sous la forme d'ondes longitudinales et d'ondes transversales. Ce n'est qu'en 1885 que Lord Rayleigh démontra la propagation des ondes sismiques sous la forme d'ondes de surface plus lentes que les ondes de volume. Viendront ensuite les ondes de Lamb, dites « ondes de plaques », les ondes d'interfaces démontrées par Stoneley ou les ondes de Love, dans les milieux stratifiés.

La première réalisation utilisant le phénomène piézoélectrique fut une balance à quartz. La masse à mesurer, déposée sur la surface du cristal, perturbe la fréquence de résonance du Quartz de manière proportionnelle à son poids. Mais, il faudra attendre 1915 et la première guerre mondiale pour voir apparaître des composants électroniques intégrant un cristal de Quartz. Le premier SONAR (Sound Navigation And Ranging) constitué d'un générateur d'ondes élastiques et d'un capteur piézoélectrique fut mis au point par Paul Langevin pour détecter la présence de sous-marins allemands. L'onde acoustique (40 kHz) se propage dans l'eau et se réfléchit sur les obstacles se trouvant sur sa course. L'écho renvoyé est détecté par le capteur piézoélectrique et le temps écoulé entre l'émission et la réception permet de connaître la distance séparant l'émetteur de l'obstacle. Ce principe fondamental est toujours utilisé, mais les techniques, les matériaux utilisés et l'électronique de commande ont été améliorés. Au cours de la seconde guerre mondiale, la transposition de ce principe aux ondes électromagnétiques a donné naissance au RADAR (Radio Detection And Ranging).

L'introduction de résonateurs à Quartz à grand coefficient de qualité dans les circuits électroniques a considérablement amélioré la stabilité des oscillateurs dans les émetteurs-récepteurs de radiodiffusion. Le développement de modèles électriques équivalents (Van Dyke en 1925) des résonateurs piézoélectriques a permis leur emploi pour la synthèse de filtres.

## II.2 RESONATEURS PIEZOELECTRIQUES

Les matériaux piézoélectriques constituent un lien, une passerelle, entre deux domaines de la physique : l'acoustique et l'électromagnétisme. Ils permettent de convertir un signal hyperfréquence en une onde acoustique progressive. La structure du résonateur et celle du motif d'excitation déterminent la manière dont cette onde va se propager. Pour une propagation sur la surface de la couche du matériau piézoélectrique, l'onde est appelée « onde de surface » (SAW : Surface Acoustic Wave) et pour une propagation suivant l'épaisseur, l'onde est appelée « onde de volume » (BAW : Bulk Acoustic Wave). Ces deux possibilités sont exploitées dans les structures suivantes.

### II.2.1 RESONATEURS SAW

Les premiers résonateurs SAW intégrés à peignes inter digités ont été fabriqués en 1965 par White et Voltmer [4] sur un substrat de Quartz. La structure (Figure I-1), toujours utilisée à l'heure actuelle, est constituée d'un substrat piézoélectrique sur lequel est déposé un motif d'excitation en forme de peigne inter digité (IDT). Depuis, plusieurs matériaux ont été exploités sous forme massive (niobate de Lithium, Tantalate de Lithium, Quartz) ou stratifiée (Oxyde de Zinc sur Silicium, Nitrure d'Aluminium sur Diamant ou Saphir).

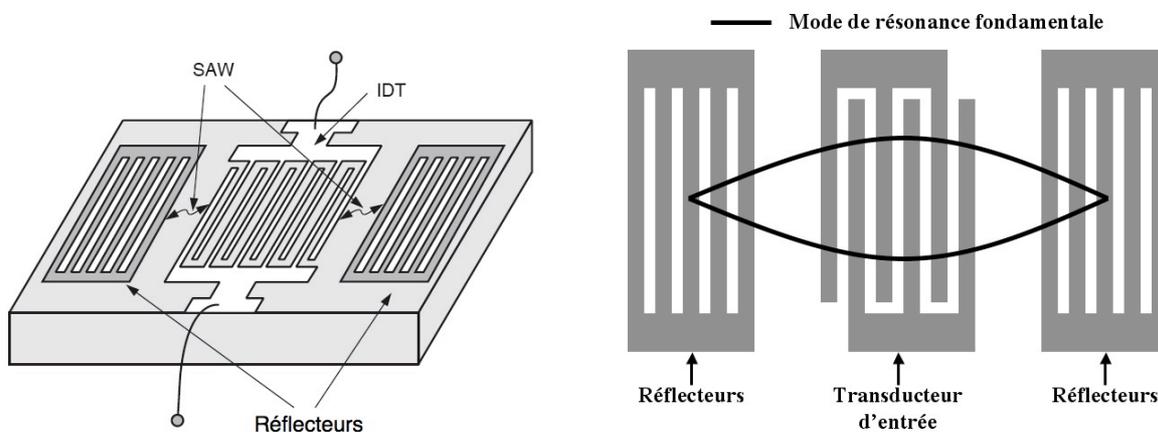
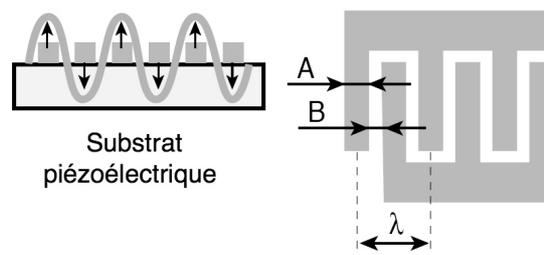


Figure I-1 : Résonateur SAW

Le motif d'excitation (Figure I-2) est constitué de deux électrodes inter digitées (IDT). Ce type de structure permet de fixer la fréquence pour laquelle une onde acoustique est générée. Les doigts sont périodiquement placés toutes les demi-longueurs d'ondes acoustique ( $\lambda/2$ ). L'épaisseur de chaque doigt détermine la fréquence de couplage par la relation :

$$f_{\text{résonance}} = \frac{v_{\text{acoustique}}}{2(A+B)}. \text{ Ainsi, pour une fréquence de 800MHz, la valeur de } A \text{ doit être fixée à}$$

1,2  $\mu\text{m}$  et pour une fréquence de 2GHz, A est fixé à 0,5  $\mu\text{m}$ . L'onde acoustique générée se propage à la vitesse  $v_{\text{acoustique}}$  sur la surface du substrat jusqu'aux réflecteurs. Ces derniers sont aussi des motifs inter digitées mais court-circuités électriquement. L'espace entre les doigts est choisi de manière à réfléchir l'onde acoustique de longueur d'onde correspondante. L'ensemble constitue alors une cavité résonante acoustique. À une fréquence donnée, l'énergie électrique envoyée sur le motif d'excitation est convertie en énergie acoustique et reste confinée dans le résonateur.



**Figure I-2 : Principe du transducteur inter digité**

Les filtres et sources à ondes de surface sont très largement employés dans les terminaux radio des appareils portables actuels. Les résonateurs SAW permettent de réunir de bonnes performances pour un encombrement réduit. Néanmoins, la montée en fréquence et le besoin de puissance d'émission ont poussé les concepteurs à envisager d'autres solutions (SAW passivés). En effet, la fréquence d'utilisation des résonateurs SAW est principalement limitée par la résolution des procédés de photolithographie employés lors de la fabrication des motifs inter digités. La tenue en puissance est directement liée à l'épaisseur des doigts et à leur écartement. Des courants trop élevés entraînent un échauffement du métal et un phénomène d'électromigration [5] qui détériore la structure des liaisons métalliques. Des tensions trop importantes entraînent des phénomènes de claquage dans l'air entre les électrodes. La fiabilité des applications SAW limite donc leur utilisation à des niveaux de puissance inférieurs à 1W, voire 3W grâce aux nouvelles techniques de passivation.

### II.2.2 RESONATEURS BAW A QUARTZ

Le matériau piézoélectrique le plus utilisé en configuration BAW est le Quartz. Le résonateur est constitué d'un cristal de quartz, taillé suivant un axe cristallographique particulier et placé entre deux fines électrodes métalliques (Figure I-3).

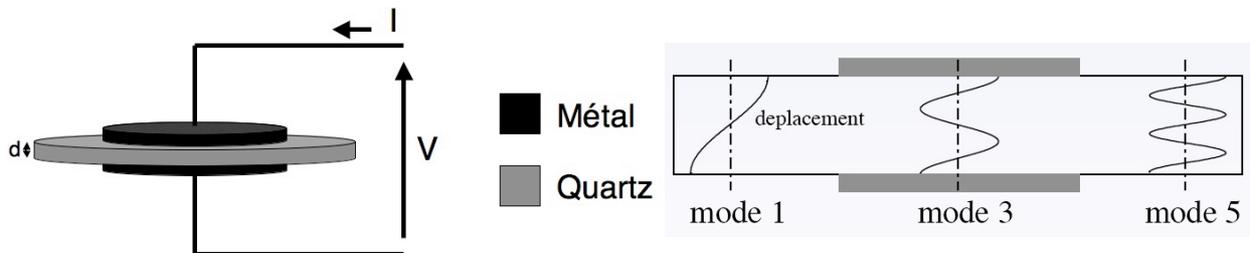


Figure I-3 : Résonateur à Quartz

L'application d'une tension alternative entre les électrodes entraîne la génération d'une onde acoustique qui se propage suivant l'épaisseur de la couche piézoélectrique. Les interfaces matériaux air constituent des miroirs acoustiques naturels sur lesquels l'onde se réfléchit. L'énergie acoustique reste alors confinée dans le résonateur. Ce système possède une fréquence particulière très précise appelée : « fréquence de résonance » pour laquelle les multiples réflexions aux interfaces se recombinent de manière constructive et donnent naissance à une onde stationnaire. La polarisation de cette onde détermine le mode de vibration du résonateur (Tableau I-1).

Axe de taille	Mode de vibration	Déformée	Gamme de fréquence
XY,NT	Flexion		1 à 100 kHz
X, X+5°	Élongation		50 à 200 kHz
CT,DT	Cisaillement de surface		150 à 800 kHz
AT, BT, FC, SC	Cisaillement d'épaisseur		1 à 300 kHz

Tableau I-1 : Modes de vibrations des résonateurs à Quartz

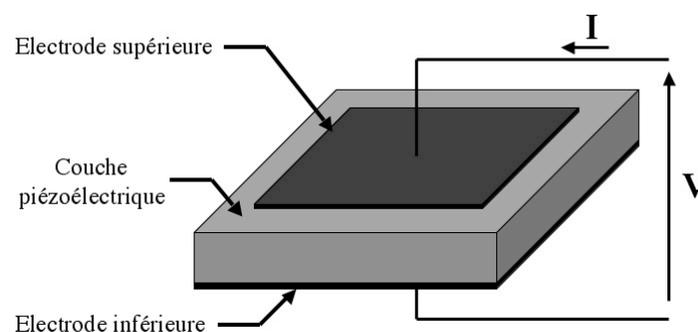
Pour un mode d'élongation d'épaisseur (Thickness Extensional Mode), la fréquence de résonance est donnée par la relation :  $f_{résonance} = v_{acoustique} / 2d$ . Elle est inversement proportionnelle à l'épaisseur de la couche piézoélectrique  $d$  et dépend de la vitesse de propagation  $v_{acoustique}$  de l'onde mécanique dans ce matériau. L'augmentation de la fréquence est donc conditionnée par une diminution de l'épaisseur de la couche piézoélectrique. Pour atteindre des fréquences de l'ordre du GHz, une épaisseur de quelques micromètres est nécessaire. Tailler un cristal massif devient alors très difficile. De plus, l'épaisseur des électrodes, jusqu'ici considérée comme négligeable par rapport à celle du quartz, commence à devenir prépondérante dans le calcul de la fréquence de résonance. Les techniques issues de la microélectronique comme la pulvérisation cathodique DC ou l'ablation Laser permettent de déposer des matériaux céramiques piézoélectriques (AlN, ZnO, PZT) en couches minces (100 nm à 1 $\mu$ m) et donc de résoudre le problème de l'épaisseur.

### III LES RESONATEURS BAW POUR DES APPLICATIONS HAUTES FREQUENCES

Il existe deux familles de résonateurs utilisant les ondes acoustiques de volume : les structures suspendues (FBAR) et les structures solidaires du substrat (SBAR). Chacune présente des avantages et des inconvénients suivant l'application visée. Dans les deux cas, le résonateur est constitué d'un résonateur élémentaire soutenu mécaniquement par un support.

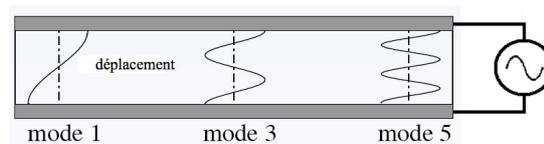
#### III.1 RESONATEUR BAW ELEMENTAIRE OU TRANSDUCTEUR

Le résonateur BAW élémentaire est constitué d'une couche de matériau piézoélectrique dont les deux faces sont métallisées (Figure I-4). Comme pour le résonateur à Quartz, l'excitation électrique appliquée entre les électrodes crée une onde acoustique qui se réfléchit aux interfaces matériau air.



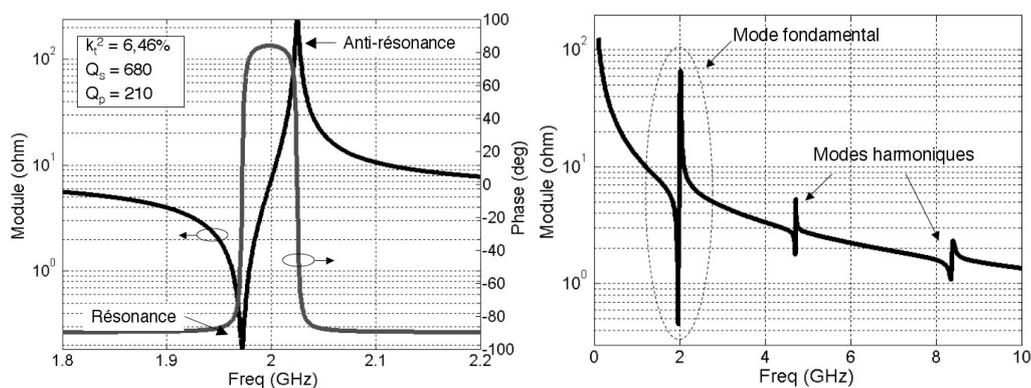
**Figure I-4 : Résonateur BAW élémentaire**

À certaines fréquences, ces multiples réflexions se recombinent en phase ou en opposition de phase. Dans le premier cas, l'interférence est constructive et donne naissance à une onde stationnaire dont le déplacement mécanique est maximum. Cette fréquence particulière est appelée : « fréquence de résonance » ou « fréquence de résonance série ». L'impédance électrique du résonateur passe alors par un minimum. Dans le second cas, l'interférence est destructive et l'impédance électrique est maximale puisque le déplacement mécanique et la polarisation électrique sont en opposition de phase. Cette fréquence est appelée : « fréquence d'anti-résonance » ou « fréquence de résonance parallèle ». La résonance du mode fondamental s'établit lorsque la demi-longueur d'onde acoustique correspond à l'épaisseur totale du résonateur (Figure I-5). Les résonances harmoniques s'établissent pour des multiples impairs de la demi-longueur d'onde. Les modes pairs ne peuvent être excités puisque le couplage piézoélectrique ne s'effectue que lorsque les électrodes sont portées à des potentiels différents. En dehors des fréquences de résonances, le résonateur se comporte comme une capacité. Le matériau piézoélectrique possède une permittivité non nulle et se comporte comme un diélectrique.



**Figure I-5 : Modes de résonance du résonateur BAW élémentaire**

Le module de l'impédance d'un résonateur BAW est donc très élevé aux basses fréquences, diminue au fur et à mesure que la fréquence augmente et présente des singularités aux fréquences de résonances séries et parallèles (Figure I-6). La phase s'inverse à chaque singularité.



**Figure I-6 : Module et phase de l'impédance d'un résonateur BAW**

L'écart relatif entre la fréquence de résonance série et la fréquence de résonance parallèle du mode fondamental est une caractéristique fréquentielle supplémentaire des résonateurs BAW. Il représente le coefficient de couplage électromécanique effectif ( $k_{eff}^2$ ) de la structure c'est-à-dire le degré d'interaction entre le domaine mécanique et le domaine électrique. Il exprime le rapport entre l'énergie convertie dans le résonateur et l'énergie totale [6].

$$k_{eff}^2 = \frac{U_{em}^2}{U_m \cdot U_e}$$

avec :  $U_{em}$  = énergie d'interaction électromécanique

$U_m$  = énergie mécanique

$U_e$  = énergie électrique

En pratique, les valeurs des énergies sont difficilement accessibles. Ce coefficient est donc déterminé à partir des valeurs des fréquences de résonances série et parallèle par l'expression :

$$k_{eff}^2 = \frac{\pi^2}{4} \frac{f_p - f_s}{f_p}$$

avec :  $f_s$  = fréquence de résonance série

$f_p$  = fréquence de résonance parallèle

Pour caractériser les pertes électriques et mécaniques intrinsèques des résonateurs BAW, deux coefficients de qualité ( $Q_s$  et  $Q_p$ ) sont utilisés.  $Q_s$  est défini à la résonance série et  $Q_p$ , à la résonance parallèle [7]. Ils mesurent la sélectivité du résonateur.

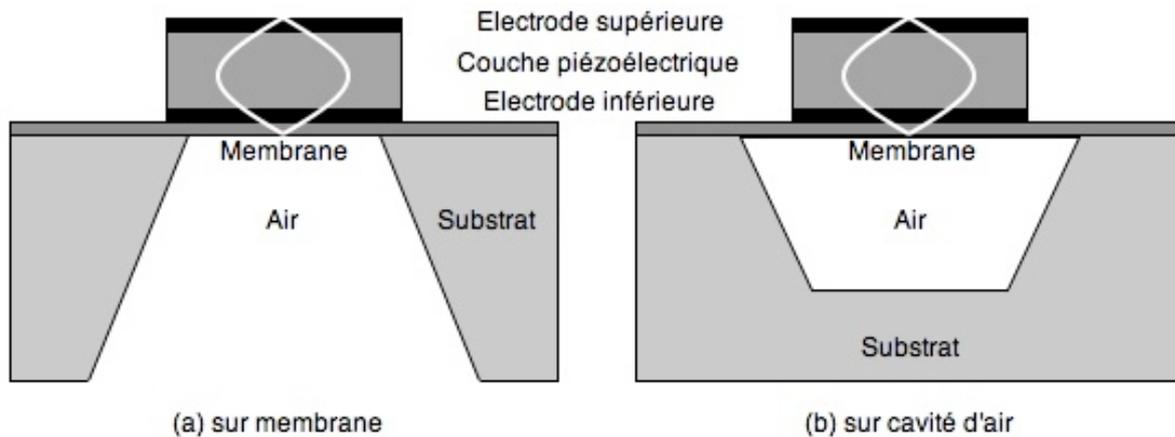
$$Q_s = \frac{f}{2} \frac{\partial \varphi_z}{\partial f} \Big|_{f=f_s} \qquad Q_p = \frac{f}{2} \frac{\partial \varphi_z}{\partial f} \Big|_{f=f_p}$$

avec :  $\varphi_z$  = phase de l'impédance du résonateur

Le résonateur élémentaire doit être soutenu mécaniquement par un support. L'objectif d'intégration des résonateurs BAW, grâce aux technologies CMOS, avec des fonctions actives ou passives hautes fréquences impose l'utilisation d'un substrat commun. Le résonateur élémentaire sera donc soutenu par une structure issue d'un substrat silicium avancé (Si Haute Résistivité, SiGe, ...).

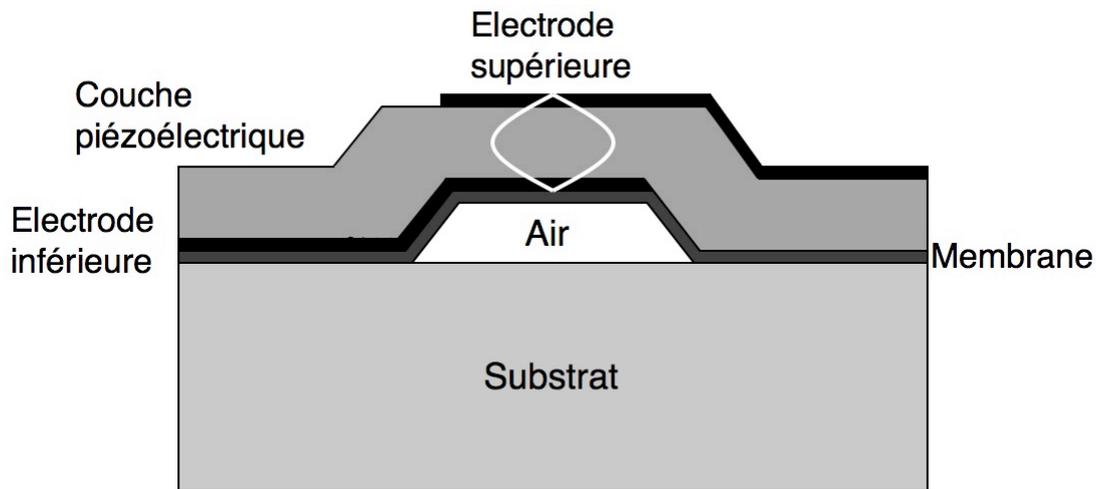
### III.2 FBAR(FILM BAW RESONATOR)

Le support de la structure FBAR est constitué d'une membrane, généralement d'épaisseur inférieure ou égale à celle de la couche piézoélectrique, et d'un substrat. Le résonateur élémentaire et sa membrane sont ensuite suspendus dans l'air par micro usinage de volume (Figure I-7) ou de surface (Figure I-8).



**Figure I-7 : Résonateurs à micro usinage de volume**

Dans le cas d'un micro usinage de volume, le substrat est gravé localement par gravure humide (TMAH ou KOH) ou sèche (Deep RIE). La gravure humide impose des flans de  $54^\circ$  pour le Silicium (Figure I-7a) et donc un encombrement important alors que la gravure sèche permet d'obtenir des flans parfaitement droits. Néanmoins, elle est plus difficile à mettre en oeuvre. La gravure nécessite l'utilisation d'une couche d'arrêt que l'on peut garder comme membrane ou supprimer à la fin du processus, l'électrode inférieure pouvant constituer un support suffisamment rigide. L'oxyde de Silicium ( $\text{SiO}_2$ ) ou le nitrure de Silicium ( $\text{SiN}$ ) sont les matériaux les plus fréquemment utilisés pour la couche d'arrêt. Cette structure est intéressante car elle nécessite peu d'étapes de fabrication. Cependant, elle est relativement fragile et délicate à fabriquer. En effet, la membrane est soumise à des contraintes mécaniques et a tendance à se déformer ou à se déchirer. Le micro usinage de volume par la face arrière du substrat impose l'utilisation d'un wafer possédant un bon état de surface et une bonne planéité. De plus, un alignement double face des masques de gravure est nécessaire. Le micro usinage d'une cavité d'air par le biais de trous permet d'éviter ces contraintes, mais fragilise encore plus la structure (Figure I-7b).



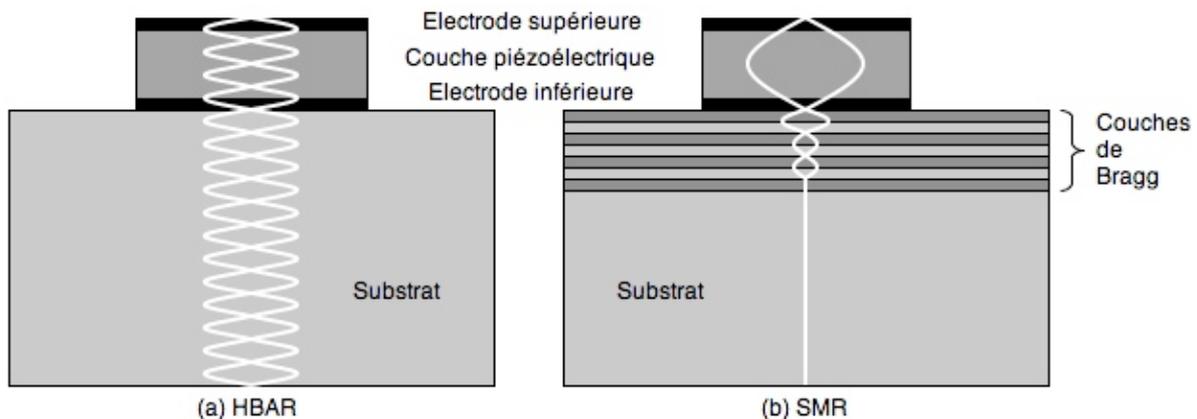
**Figure I-8 : Résonateurs à micro usinage de surface**

Dans le cas d'un micro usinage de surface (Figure I-8), l'ensemble résonateur élémentaire membrane est déposé sur une couche sacrificielle généralement constituée d'oxyde de Silicium ( $\text{SiO}_2$ ) ou de résine. Comme son nom l'indique, cette couche est supprimée à la fin du processus de fabrication par gravure humide et laisse place à une lame d'air. Cette structure est intéressante car elle peut être employée sur un large choix de substrat et sans en diminuer la résistance mécanique. Ainsi, son intégration sur des wafers du commerce est facilitée. Néanmoins, ce type de résonateur reste fragile et sa conception nécessite une parfaite maîtrise des contraintes mécaniques. De plus, le choix des techniques de dépôt et des matériaux employés pour les électrodes et pour la couche piézoélectrique est conditionné par le matériau de la couche sacrificielle. L'utilisation de l'oxyde de Silicium ( $\text{SiO}_2$ ) impose le choix de matériaux insensibles à son attaque acide et l'utilisation de résine demande des conditions de température incompatibles avec certaines techniques de dépôt.

Les structures sur membrane permettent de se rapprocher du comportement du résonateur élémentaire seul en minimisant les pertes acoustiques dans le substrat. L'onde acoustique, générée dans la couche piézoélectrique, se propage dans les électrodes et la membrane, se réfléchit aux interfaces matériau air et reste confinée dans le résonateur. La membrane constitue leur gros point faible puisque qu'elle doit à la fois jouer son rôle de support mécanique et ne pas trop influencer le comportement du résonateur. Sa conception nécessite donc une attention particulière et sa fabrication reste délicate.

### III.3 SBAR (SOLIDLY-MOUNTED BAW RESONATOR)

Le résonateur élémentaire peut aussi être solidaire du substrat, en étant soit directement déposé sur sa surface (Figure I-9a), soit déposé sur un ensemble de couches d'isolation acoustique (Figure I-9b). Dans le premier cas, le résonateur élémentaire se comporte comme un transducteur excitant une cavité sur un mode harmonique du mode fondamental (HBAR : Harmonic BAW Resonator) et dans le second cas, il est isolé du substrat (SMR : Solidly Mounted Resonator).



**Figure I-9 : Résonateurs solidaires du substrat**

Un résonateur HBAR est constitué du résonateur élémentaire (Métal-piézoélectrique-Métal) déposé directement sur un substrat faible pertes (diamant, saphir, Niobate de Lithium  $\text{LiNbO}_3$ ) et possédant un bon état de surface sur sa face arrière. Une partie de l'onde acoustique générée dans la couche piézoélectrique se propage dans le substrat et se réfléchit sur sa face arrière. Le substrat constitue alors une cavité acoustique dont le facteur de qualité dépend de l'atténuation de l'onde lors de la propagation et de sa dispersion lors de la réflexion. Jusqu'à maintenant, le meilleur produit  $Q.f$  obtenu est de  $1,1 \cdot 10^{14}$ , soit un coefficient de qualité  $Q=68000$  à  $1,6\text{GHz}$  en utilisant une couche d' $\text{AlN}$  déposée sur un substrat de saphir [8]. Cette valeur est largement supérieure aux facteurs de qualité obtenus pour les autres types de résonateurs. Cependant, l'encombrement excessif du spectre autour de la fréquence de résonance choisie, le faible coefficient de couplage piézoélectrique effectif ( $k_t^2$ ) et l'incompatibilité des substrats faible pertes avec la technologie CMOS font que cette structure HBAR sera principalement employée dans les oscillateurs et non dans les applications de filtrage hautes fréquences. Le meilleur produit  $Q.f$  obtenu grâce à un substrat Silicium et une couche piézoélectrique de Niobate de Lithium est de  $4,2 \cdot 10^{12}$  soit un coefficient de qualité  $Q=2800$  à  $1,507\text{GHz}$  [9].

De manière à obtenir une structure plus robuste, plus adaptée aux techniques de fabrication industrielles des circuits intégrés et pour tenter de limiter l'apparition de modes de plaques dans les membranes, K.M. Lakin et al proposent, en 1995, une structure solidaire du substrat (Solidly Mounted Resonator) [10]. Le support de cette structure est plus complexe que celui d'une structure suspendue, mais le but est toujours de confiner l'onde acoustique dans le résonateur élémentaire de manière à minimiser les pertes acoustiques. Le principe, déjà formulé par Newell, en 1965, pour une application aux résonateurs à Quartz, consiste à modifier l'impédance acoustique vue par le résonateur élémentaire, au bas de l'électrode inférieure. En empilant des couches de matériaux d'impédances acoustiques très différentes et en faisant en sorte que leurs épaisseurs correspondent à un quart de la longueur d'onde acoustique à la fréquence de résonance, l'ensemble de ces couches constitue un miroir de Bragg acoustique sur lequel se réfléchit l'onde issue du résonateur élémentaire.

Cette structure est donc plus fiable qu'une structure suspendue, elle est compatible avec un grand nombre de substrat et permet une meilleure dissipation de la chaleur par conduction. Cependant, elle nécessite plus d'étapes de fabrication. De plus, la conception et la fabrication du miroir de Bragg demande un très grand soin pour ne pas introduire de modes parasites.

Plusieurs couples de matériaux peuvent être employés pour le miroir de Bragg. La technologie développée par Infineon [11] utilise des couches alternées d'Oxyde de Silicium et de Tungstène ( $\text{SiO}_2/\text{W}$ ). Elle est compatible avec les techniques de fabrication BiCMOS et permet d'obtenir des coefficients de couplage piézoélectrique effectifs supérieurs à 6,7% et des coefficients de qualité compris entre 1200 et 1500 autour de 2GHz. Les couples métal/oxyde sont souvent employés, mais ils nécessitent un changement de bâti lors du dépôt du résonateur élémentaire. La fabrication d'un résonateur SMR en un seul run peut être effectuée en utilisant le matériau piézoélectrique du résonateur élémentaire à la place du métal. Des structures SMR à réflecteur de Bragg  $\text{AlN}/\text{SiO}_2$  ont permis d'obtenir des facteurs de qualité d'environ 670 à 5GHz [12] et 520 à 8GHz [13].

## IV MATERIAUX UTILISES

Le choix des matériaux dans les résonateurs BAW dépend des techniques employées pour la fabrication. Les céramiques piézoélectriques les plus fréquemment utilisées sont le nitrure d'Aluminium (AlN), l'oxyde de Zinc (ZnO) ou le Zirconate Titanate de Plomb (PZT). Néanmoins, l'emploi de matériaux possédants de meilleures caractéristiques acoustiques, comme le Niobate de Potassium (KNbO<sub>3</sub>), constitue toujours un axe de recherche important. Les métaux ou alliages constituant les électrodes et la qualité de leur dépôt influencent la croissance de la couche piézoélectrique et donc le fonctionnement des résonateurs.

### IV.1 CARACTERISTIQUES PHYSIQUES

#### IV.1.1 MATERIAUX PIEZOELECTRIQUES

Les résonateurs BAW utilisent une couche de matériau piézoélectrique pour convertir l'énergie électrique en énergie mécanique. Elle constitue le cœur de la structure et a un impact majeur sur les performances finales du résonateur.

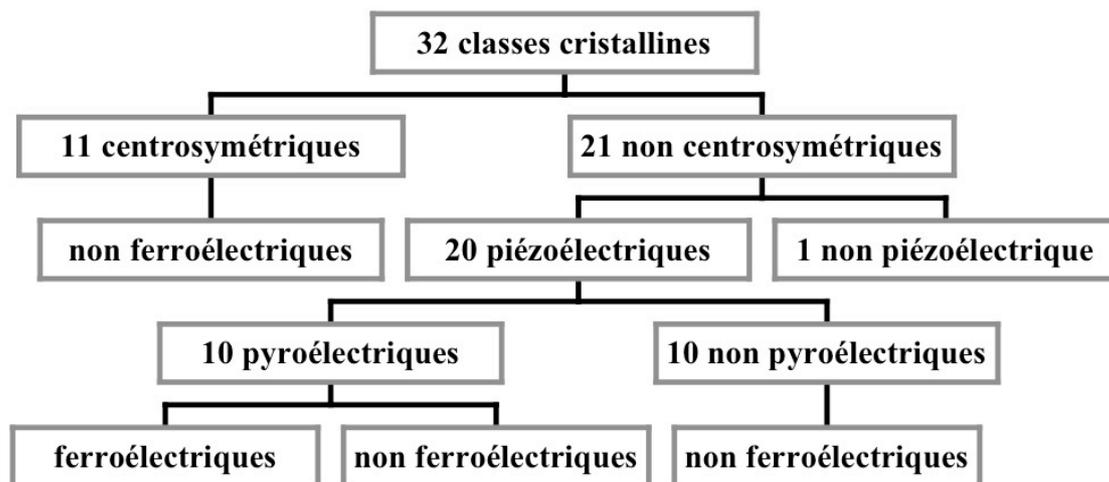


Figure I-10 : Propriétés des classes cristallines

Tous les matériaux piézoélectriques ont une structure cristalline qui ne possède pas de centre de symétrie (Figure I-10). Dans certains cas, cette absence de symétrie crée un déséquilibre de charges dans la maille élémentaire et entraîne l'apparition d'une polarisation électrique spontanée. Les cristaux correspondants sont dits polaires. Si cette polarisation varie avec la température, ces cristaux sont pyroélectriques, de plus, si cette polarisation peut être inversée sous l'action d'un champ électrique externe, ils sont ferroélectriques.

Pour les applications hautes fréquences, l'intérêt s'est surtout porté sur des matériaux non polaires, de classe cristalline wurtzite à maille hexagonale, tels que le nitrure d'Aluminium (AlN), l'oxyde de Zinc (ZnO) et le Sulfure de Cadmium (CdS). Certains éléments pyroélectriques de la famille des oxydes à structure cristalline perovskite, comme le Niobate de Lithium ou de Potassium ( $\text{LiNbO}_3$ ,  $\text{KNbO}_3$ ) et le Zirconate ou Titanate de Plomb (céramiques PZT), n'ont été que rarement utilisés. En effet, la variation de leurs propriétés piézoélectriques avec la température ou le champ électrique les rend difficilement compatibles avec les technologies d'intégration CMOS.

Les caractéristiques physiques du matériau piézoélectrique employé (Tableau I-2) déterminent les performances finales du résonateur. De plus, les contraintes de fabrication et d'intégration doivent être prises en compte. Les critères de choix ne sont donc pas basés que sur les aspects électriques et mécaniques, mais aussi sur l'aspect technologique, et ils doivent permettre de déterminer le meilleur compromis pour l'application visée.

	AlN	ZnO	PZT (MOCVD)	KNbO <sub>3</sub>
$k_t^2$ (%) couche mince	7	9	22	49
$\epsilon_r$	10.5	8.8	420	41.5
$v_{\text{acoustique}}$ (m/s) (mode longitudinal)	11050	6340	4619	7820
$\alpha$ (dB/cm) @ 1GHz	8	25	1000	-
TCF (ppm/°C)	-25	-60	-	-
Stabilité chimique	Oui	Non	Non	Oui
Intégration CMOS	Oui	Non	Non	Non
Référence	[14]	[14]	[15]	[16]

**Tableau I-2 : Caractéristiques des matériaux piézoélectriques les plus fréquents pour des applications hautes fréquences**

- Le coefficient de couplage électromécanique  $k_t^2$  représente la capacité du matériau à convertir l'énergie électrique en énergie mécanique et vice-versa. Dans un résonateur, les autres éléments surchargent la couche piézoélectrique et diminuent le déplacement mécanique. Ce coefficient de couplage diminue et devient le coefficient de couplage effectif ( $k_{\text{eff}}^2$ ). L'écart entre les fréquences de résonance série et parallèle et donc la bande passante des filtres à résonateurs BAW dépendent de ce paramètre.
- La permittivité  $\epsilon_r$  fixe la valeur de la capacité statique formée par les électrodes et par la couche piézoélectrique. Plus la permittivité est grande, plus la surface des électrodes est petite.
- La vitesse de propagation acoustique (suivant l'épaisseur)  $v_{\text{acoustique}}$  détermine l'épaisseur de la couche piézoélectrique pour une fréquence de résonance fixée. Plus cette vitesse est faible, plus la couche est fine. Pour les matériaux, comme l'AlN et le ZnO qui ont une croissance colonnaire, plus l'épaisseur de la couche est faible, plus la qualité du dépôt est maîtrisée.
- $\alpha$  représente l'atténuation de l'onde acoustique lors de la propagation. Ces pertes acoustiques représentent la majeure partie des pertes dans les résonateurs BAW et déterminent, avec les pertes électriques, le coefficient de qualité (Q). Plus ce dernier est élevé, plus la sélectivité du résonateur est importante.
- La dérive fréquentielle en température (TCF) exprime la variation des propriétés physiques du matériau piézoélectrique avec la température. La stabilité fréquentielle du résonateur dépend presque totalement de ce paramètre.
- Les étapes de gravure humide, lors de la fabrication des résonateurs BAW, nécessitent l'emploi d'agents chimiques corrosifs. La stabilité chimique du matériau doit être assurée tout au long du processus de fabrication de manière à préserver ses propriétés physiques et mécaniques.
- Le fort taux d'intégration promis par ces résonateurs ne peut être atteint qu'en fabriquant tous les circuits sur une même puce. Cependant, tous les matériaux piézoélectriques ne sont pas compatibles avec les technologies CMOS actuelles. En effet, certains composés volatiles, comme le Zinc (Zn), le Plomb (Pb) ou le Potassium (K), peuvent contaminer les matériaux semi-conducteurs et limiter la durée de vie des porteurs.

D'une manière générale, le Niobate de Potassium ( $\text{KNbO}_3$ ) paraît être le matériau le plus intéressant pour la réalisation de résonateurs BAW. Cependant, la valeur élevée de son coefficient de couplage électromécanique reste, pour l'instant, théorique. En effet, les résultats rapportés jusqu'à présent sont très inférieurs, entre 2 et 3%. Ces faibles valeurs viennent essentiellement de l'apparition de domaines dont la polarisation spontanée n'est pas orientée suivant l'axe souhaité. Les techniques et les conditions de dépôt employées sont encore au stade expérimental [16], mais le Niobate de Potassium ( $\text{KNbO}_3$ ) reste un matériau prometteur.

Les céramiques PZT présentent de fortes valeurs de coefficient de couplage et de permittivité, ainsi qu'une vitesse acoustique assez faible. Néanmoins, les pertes acoustiques restent beaucoup trop importantes aux hautes fréquences. De plus, ces matériaux sont très difficiles à intégrer du fait de leur instabilité chimique et du Plomb qu'ils contiennent.

Le ZnO possède un coefficient de couplage électromécanique et une permittivité supérieures à l'AlN. Cependant, ses pertes acoustiques et sa dérive fréquentielle en température (TCF) sont plus élevées, et il n'est pas compatible avec les technologies de fabrication CMOS.

À première vue, l'AlN ne semblait pas être le matériau idéal pour une utilisation dans les dispositifs hautes fréquences, mais l'intégration de plus en plus poussée et la réduction des coûts de fabrication en ont fait un bon compromis. C'est pourquoi l'AlN est le matériau le plus employé, à l'heure actuelle, dans les systèmes commercialisés intégrant des résonateurs BAW.

#### ***IV.1.2 ÉLECTRODES***

La qualité et l'orientation du film d'AlN dépendent de la technique de dépôt employée, mais aussi du matériau de la couche sur laquelle il croît. En effet, les mailles des deux couches doivent être compatibles pour que la croissance se fasse et pour que la couche soit bien orientée. Dans les résonateurs BAW, la couche piézoélectrique croît directement sur la surface de l'électrode inférieure. Plusieurs études ont montré [17 et 18] que la réponse finale du résonateur dépend des caractéristiques mécaniques, électriques et technologiques du métal employé (Tableau I-3).

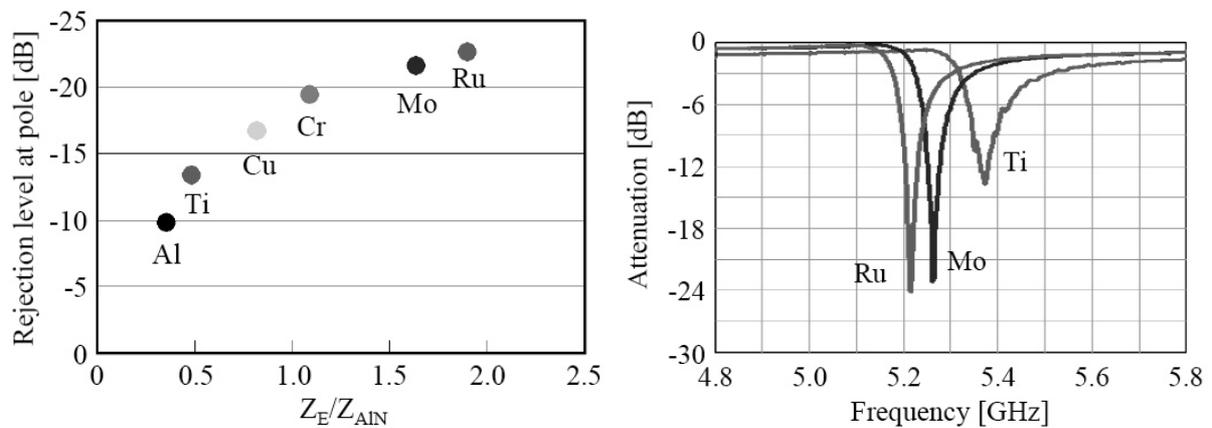
AlN	Propriétés physiques	Al	Ti	Cu	Cr	Mo	Ru
3255	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	2700	4507	8920	7140	10280	12370
11050	$V_{\text{acoustique}}$ (m/s)	5100	4140	3570	5940	6190	5970
37,6	$Z_a$ (MPa.s/m)	13,77	18,66	31,84	42,41	63,63	73,85
8	$\alpha$ (dB/cm) @ 1GHz	236	--	--	--	5	--
-	Conductivité $\sigma$ (.10 <sup>7</sup> S/m)	3,8	0,25	5,9	0,79	2	1,41
4,2	Coefficient de dilatation thermique (.10 <sup>-6</sup> /K)	23,1	8,6	16,5	4,9	4,8	6,4
-	Désaccord de maille avec l'AlN (%)	23,15	-5,5	13,8	6,9	1,1	15

**Tableau I-3 : Propriétés physiques de matériaux utilisés comme électrodes**

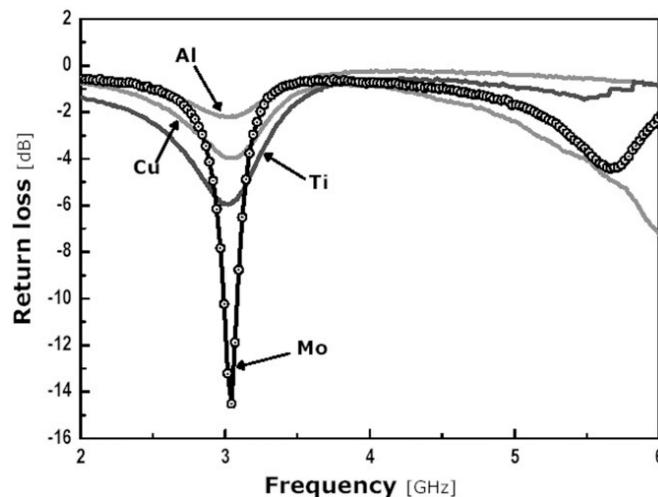
- La masse volumique  $\rho$  (kg/m<sup>3</sup>) doit être la plus faible possible. La montée en fréquence des résonateurs impose l'utilisation d'électrodes de plus en plus « légères ». Pour un matériau dense, l'épaisseur de l'électrode doit donc être plus faible. Mais, plus cette épaisseur est faible, plus les pertes électriques sont importantes.
- L'impédance acoustique  $Z_a$  (Pa.s/m) représente la résistance que le milieu oppose à sa mise en mouvement. Plus elle est élevée, moins le matériau se déforme. Si le rapport entre l'impédance acoustique du métal et celle du matériau piézoélectrique est supérieur à 1, l'onde incidente se réfléchit à l'interface et reste confinée dans la couche piézoélectrique. Les pertes acoustiques dans les électrodes ne jouent plus qu'un rôle mineur et le coefficient de qualité est plus élevé.
- L'atténuation  $\alpha$  doit être la plus faible possible pour minimiser l'impact des pertes acoustiques sur le coefficient de qualité. Comme décrit précédemment, en respectant certaines règles, cette contrainte peut être relâchée.
- La conductivité électrique  $\sigma$  (S/m) doit être la plus élevée possible pour minimiser les pertes électriques dans les électrodes et maximiser le coefficient de qualité du résonateur.

- Le matériau doit avoir une maille élémentaire et un coefficient de dilatation thermique compatibles avec ceux du matériau piézoélectrique et un bon état de surface pour minimiser la désorientation et maximiser le coefficient de couplage électromécanique.
- Il doit aussi être stable chimiquement pour supporter les étapes restantes du processus de fabrication.

Dans le cas de l'AlN, l'Aluminium (Al), le Titane (Ti), le Cuivre (Cu) et le Chrome (Cr) ne sont pas les matériaux idéaux. Ils possèdent une impédance acoustique trop faible. Pour que l'énergie mécanique reste bien confinée dans la couche piézoélectrique, le rapport doit être au moins égal à 1,5 [18]. Ainsi, les pertes acoustiques dans les électrodes sont minimisées (Figure I-11 et I-12).



**Figure I-11 :** Atténuation, à la résonance, en fonction du rapport d'impédance acoustique pour différents matériaux [18]

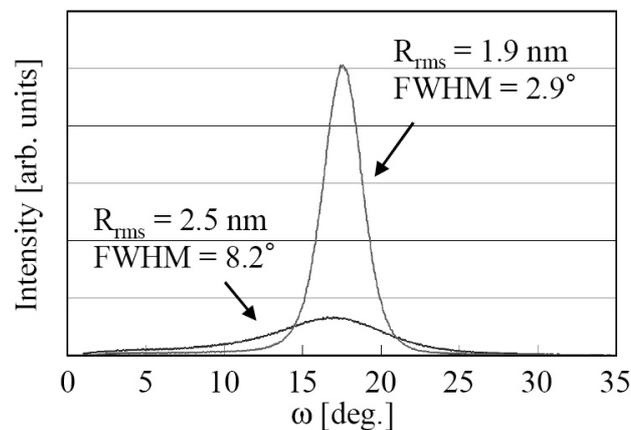


**Figure I-12 :** Mesures d'atténuation avec plusieurs métaux [17]

Jusque récemment, le Molybdène semblait être le matériau idéal pour les applications à base d'AlN. Il présentait les meilleures performances sur l'ensemble des critères mécaniques, électriques et technologiques. Il possède une impédance acoustique 1,7 fois supérieure à celle de l'AlN, une conductivité électrique élevée, un coefficient de dilatation thermique proche de celui de l'AlN et un désaccord de maille quasi nul.

En 2004 [18], une nouvelle étude portant sur l'utilisation du Ruthénium (Ru) a été publiée. Ce métal présente une très forte impédance acoustique et une conductivité élevée. Il permet d'obtenir de meilleures performances électriques que le Molybdène (Mo).

La mesure de la largeur du pic de diffraction aux rayons X (FWHM) dans la direction (002) a permis de mettre en évidence que l'état de surface de la couche de Ruthénium influence l'orientation de la couche d'AlN (Figure I-13). Une rugosité de surface de 2,5 nm entraîne une valeur de FWHM (Full Width at Half Minimum) de 8,2° alors qu'une rugosité de 1,9 nm donne un FWHM de 2,9°. Pour obtenir des valeurs comparables (2,5° pour une rugosité de 2,3 nm) avec des électrodes en Molybdène (Mo), une couche d'AlN doit être intercalée entre le substrat et l'électrode inférieure. Cette couche sert de vecteur de croissance et oriente correctement le Molybdène [19].



**Figure I-13 : Mesure de diffraction aux rayons X pour la couche d'AlN déposée sur Ruthénium [18]**

Le Ruthénium est donc un matériau parfaitement adapté à la fabrication des résonateurs BAW. Ces propriétés électriques et mécaniques sont mieux adaptées que celles des autres matériaux et, malgré un désaccord de maille important, il permet d'obtenir une bonne orientation de la couche d'AlN.

### IV.1.3 AUTRES MATERIAUX EMPLOYES

Le tableau I-4 regroupe les propriétés physiques de quelques matériaux souvent utilisés dans les structures BAW. Le Silicium (Si) et le Silicium-Germanium (SiGe) sont des substrats employés par les technologies CMOS et BiCMOS. Le Carbure de Silicium (SiC), l'Oxyde de Silicium (SiO<sub>2</sub>) ou le Nitrure de Silicium (SiN) peuvent être utilisés pour la membrane des résonateurs FBAR ou pour les couches du miroir de Bragg acoustique des structures SMR.

	SiC	SiO <sub>2</sub>	Si	Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	SiGe
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	3200	2261	2332	3270	3827
$v_{\text{acoustique}}$ (m/s)	9500	6886	2200	11000	6201
$Z_a$ (MPa.s/m)	30,4	15,57	19,67	36	23,73
$\epsilon_r$	10	4,5	11,7	7,5	14
Référence	[20]	[21]	[21]	[22]	[23]

**Tableau I-4 : Propriétés physiques de quelques matériaux utilisés comme membranes ou substrats dans les résonateurs BAW**

Ces études ont permis de déterminer certains paramètres à prendre en compte pour la conception de résonateurs BAW utilisant de l'AlN. Le choix des matériaux a un impact crucial sur les performances des structures BAW. Des études similaires devront être menées pour les autres matériaux piézoélectriques, notamment pour l'emploi du Niobate de Potassium (KnbO<sub>3</sub>). L'augmentation des performances des résonateurs passe aussi par l'amélioration des techniques de dépôt.

## IV.2 TECHNIQUES DE DEPOT

La réalisation d'un résonateur BAW fonctionnant à hautes fréquences nécessite la croissance d'un film mince piézoélectrique dont l'épaisseur varie entre une centaine de nanomètres et 1 à 2 micromètres. Cette couche piézoélectrique doit être parfaitement épitaxiée et monocristalline. L'AlN est un matériau à croissance colonnaire, c'est-à-dire que la couche qu'il compose est constituée de colonnes. Les endroits où les colonnes prennent naissance s'appellent des sites de nucléation. Ces sites ont une topologie et une densité différentes en fonction du matériau utilisé et déterminent l'orientation et la densité de la couche. Le coefficient de couplage diminue si la désorientation de la couche piézoélectrique est trop importante [24 et 25]. Les principales méthodes utilisées pour fabriquer des films minces sous vide font appel aux techniques de dépôt chimique, CVD (Chimical Vapor Deposition), ou physique, PVD (Physical Vapor Deposition), en phase vapeur.

Le dépôt chimique en phase vapeur permet de réaliser des dépôts sur un substrat chauffé à partir d'un précurseur gazeux et d'une réaction chimique. Dans certains cas, cette réaction nécessite d'être assistée par un plasma. Cette méthode s'appelle alors dépôt chimique en phase vapeur assisté plasma ou PECVD (Plasma Enhanced Chimical Vapor Deposition). Ces techniques sont assez lourdes à mettre en œuvre, elles ne permettent pas d'obtenir des films denses et les risques de contaminations par des gaz issus de la réaction chimique sont relativement importants.

Les techniques de dépôt physique en phase vapeur (PVD) sont plus intéressantes. Elles consistent à vaporiser des matériaux par chauffage, à les transporter dans un vide poussé ( $10^{-6}$  à  $10^{-7}$  torrs) et à les déposer sur un ou plusieurs substrats par condensation. Le chauffage des matériaux peut être effectué grâce à une résistance électrique, à un canon à électrons, au couplage avec un générateur hautes fréquences (Pulvérisation cathodique Magnétron), à un arc électrique (Pulvérisation cathodique DC) ou à un faisceau Laser (Ablation Laser). Les films obtenus sont denses, les processus sont relativement faciles à contrôler et il n'y a pas ou peu de contamination.

### IV.2.1 LA PULVERISATION CATHODIQUE DC

La pulvérisation cathodique DC est largement employée dans l'industrie car sa température d'opération inférieure à 100°C la rend compatible avec les filières technologiques silicium. Une cible, constituée du matériau à déposer, et un substrat hôte, sur lequel va croître le film, sont placés dans une enceinte à vide remplie d'un gaz réactif. La cible est polarisée négativement (3 à 5 kV) et le substrat d'accueil est relié à la masse. Sous l'effet du champ électrique, quelques électrons sont extraits de la cible et sont accélérés jusqu'au substrat créant ainsi une décharge. Ces électrons ionisent dans leur course les atomes du gaz présent dans l'enceinte et forment un plasma froid. Sous l'action du champ électrique, ces ions positifs sont alors accélérés vers la cible et la pulvérisent en lui arrachant des atomes ainsi que des électrons qui participeront à leur tour au processus d'ionisation. Les atomes libérés de la cible se condensent en film mince sur les parois de l'enceinte et sur le substrat (Figure I-14).

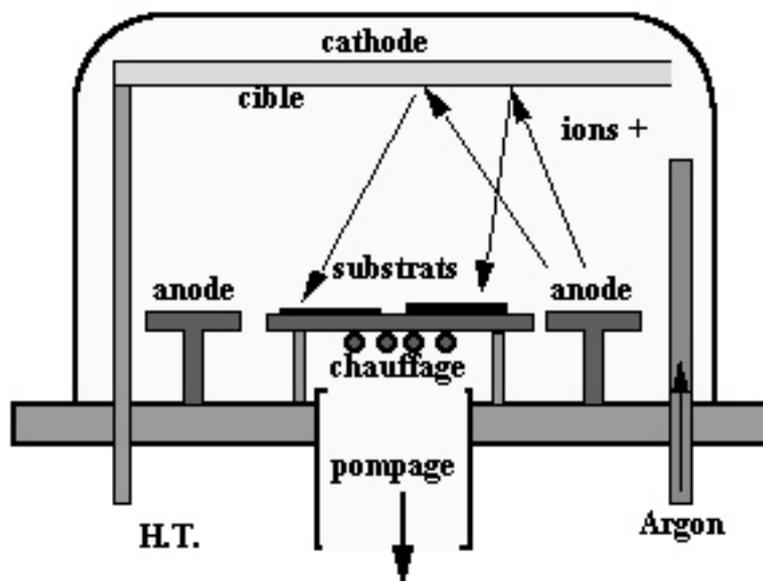


Figure I-14 : Pulvérisation cathodique DC

Cette technique présente l'avantage d'être très simple à mettre en oeuvre. Son inconvénient majeur est lié à la nécessité d'utiliser une enceinte à vide poussé ( $10^{-1}$  à  $10^{-2}$  torr) pour entretenir une décharge stable et limiter les impuretés dans les films déposés. La présence d'impuretés dans l'enceinte se fait d'autant plus ressentir au niveau des couches que, par suite du phénomène de rétro diffusion des particules pulvérisées, les vitesses de dépôt sont relativement faibles (inférieures à quelques micromètres par heure).

#### IV.2.2 LA PULVERISATION PAR ABLATION LASER

La technique d'ablation laser n'est pas encore entrée dans sa phase d'industrialisation car les phénomènes d'interaction laser matière ne sont pas totalement maîtrisés et font encore l'objet de recherches. Le système est constitué d'une cible et d'un substrat chauffé placés dans une enceinte à vide (Figure I-15). Le faisceau d'un Laser pulsé passe par une lentille pour être concentré sur la surface de la cible. Lorsque la densité de puissance atteint quelque mégawatts par centimètre carré, il se produit une éjection de matière dans une direction perpendiculaire à la surface irradiée. Les atomes éjectés se condensent en un panache plasma, migrent vers le substrat et s'y déposent. L'épaisseur du film dépend du nombre d'impact et de la densité d'énergie fournie par le Laser lors de l'impact (fluence). La qualité physico-chimique du dépôt dépend de la pression dans l'enceinte, de la température du substrat et de la pureté atomique de la cible.

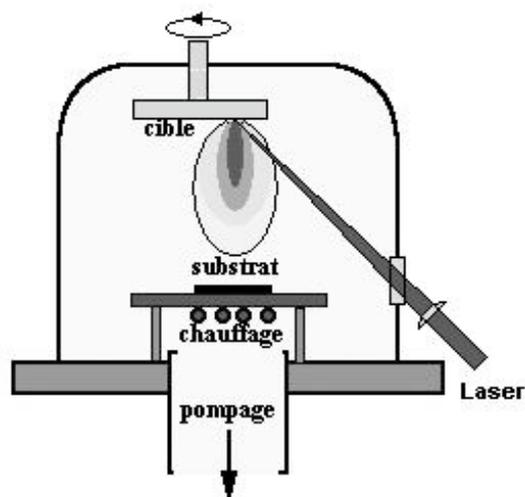


Figure I-15 : Ablation Laser

Malgré une vitesse de croissance faible, l'ablation Laser est une technique prometteuse. Son principal avantage est d'effectuer des transferts stoechiométriques de matière. Ceci permet d'obtenir des dépôts plus purs avec des espèces chimiques plus complexes. Cette technique permet aussi d'améliorer l'état de surface des dépôts en conservant la densité des sites de nucléations tout au long de la croissance de la couche. Les dernières avancées technologiques ont permis de réduire le temps de commutation (10 ns) et d'augmenter la puissance des Lasers (Laser femtoseconde). Ainsi, la technique d'ablation Laser rendra possible le dépôt de films ultra-fins tout en diminuant la température de chauffage du substrat.

## V APPLICATION ET INTEGRATION DES RESONATEURS BAW DANS LES EMETTEURS RECEPTEURS RF

Dans le contexte actuel de réduction de taille et de consommation des nouveaux systèmes de télécommunications sans fils, l'intégration complète du terminal RF est fortement souhaitée. Les dimensions des composants BAW sont très inférieures à celles des structures céramiques puisqu'ils utilisent des ondes acoustiques dont la vitesse est  $10^5$  fois moins importante que celle des ondes électromagnétiques. Ils possèdent une meilleure tenue en puissance que les composants SAW et sont compatibles avec les technologies de fabrication CMOS. Ils sont donc considérés comme étant les seuls à pouvoir allier performances électriques et intégration dans les terminaux RF de demain.

### V.1 APPLICATIONS DES RESONATEURS BAW DANS LES EMETTEURS RECEPTEURS RF

Les résonateurs BAW peuvent être utilisés soit dans les oscillateurs, soit dans les filtres RF présents dans les émetteurs récepteurs hautes fréquences (Figure I-16). Ces deux fonctions sont très importantes car elles déterminent la sélectivité des récepteurs et l'encombrement spectral des émetteurs.

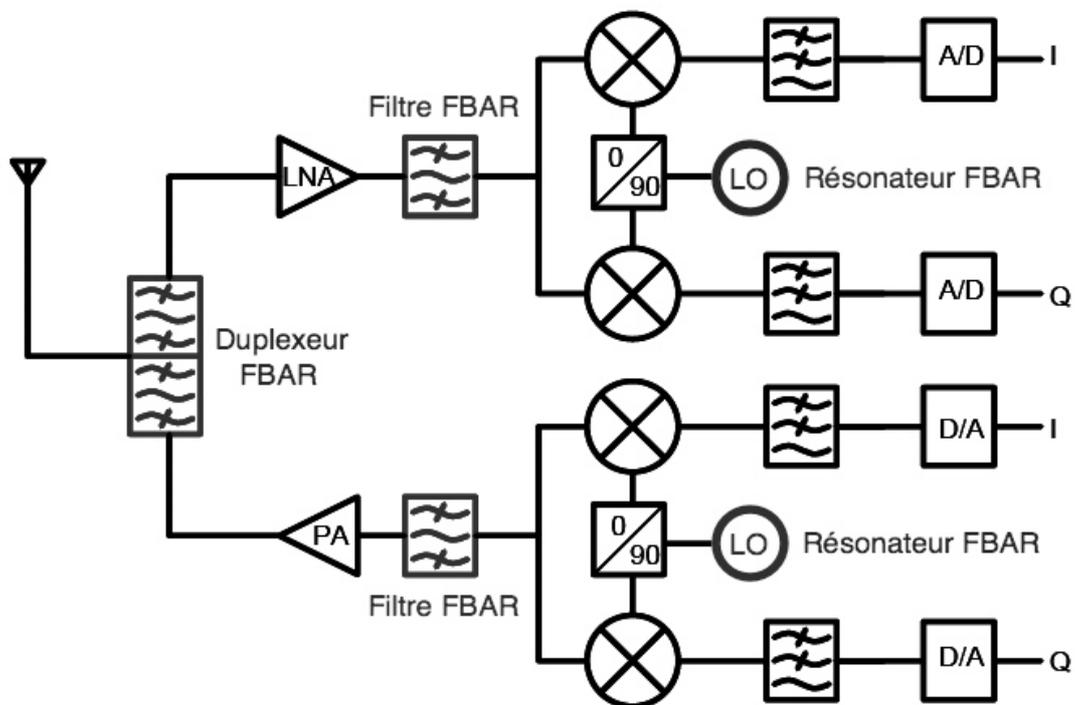
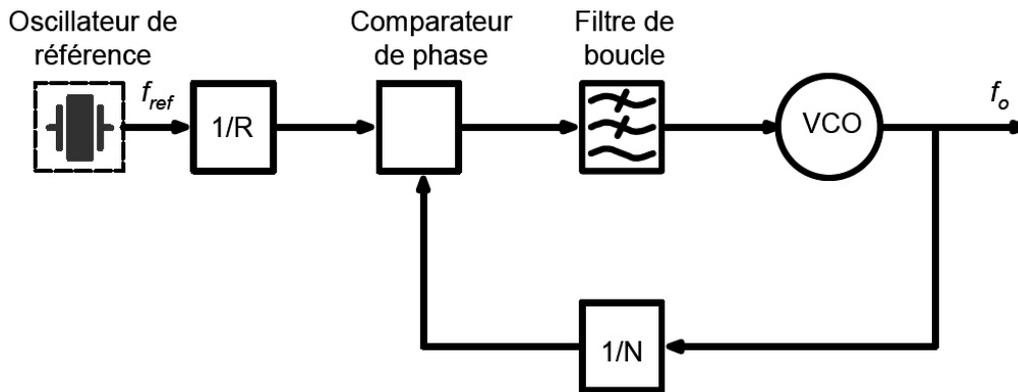


Figure I-16 : Émetteur-récepteur à conversion directe intégrant des résonateurs BAW

### V.1.1 OSCILLATEURS LOCAUX

Les résonateurs BAW présentent des facteurs de qualité assez élevés, une bonne stabilité en fréquence et une consommation assez faible permettant d'obtenir des oscillateurs performants à faible bruit de phase. Ils sont utilisés comme source de référence de fréquence dans des montages d'oscillateurs locaux classiques (Pierce [26] ou Colpitts [27]), dans des boucles à verrouillage de phase (PLL) (Figure I-17) ou pour des sélecteurs de canaux [28].



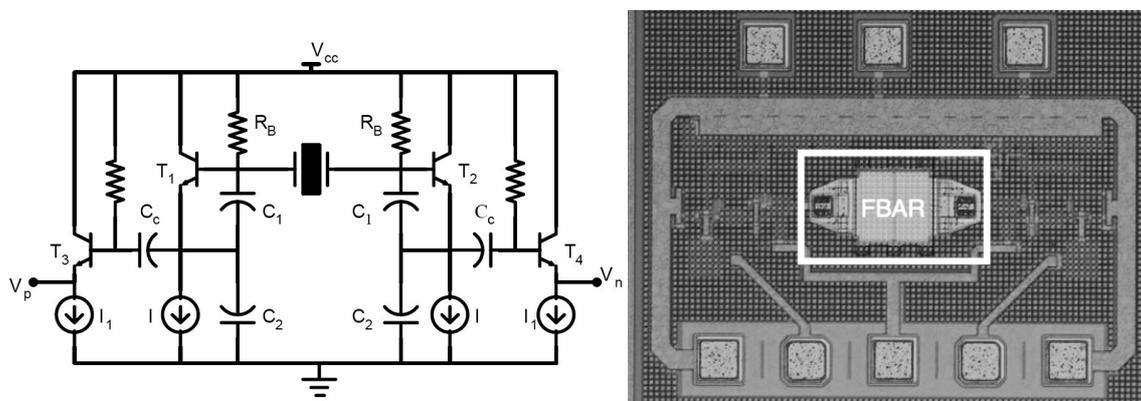
**Figure I-17 : Boucle à verrouillage de phase intégrée**

Le générateur de fréquence est au cœur de tout système RF de télécommunications. En émission, il permet de générer le signal de la fréquence porteuse et, en réception, le signal de l'oscillateur local. Ces performances en termes de stabilité fréquentielle et de bruit de phase sont donc cruciales.

Le signal sinusoïdal de référence est le plus souvent obtenu par synthèse de fréquence, en multipliant la fréquence de résonance d'un résonateur à Quartz grâce à une boucle à verrouillage de phase (PLL). Bien que le résonateur à Quartz ait un fort coefficient de qualité à basse fréquence et un faible bruit de phase, les performances de ce système sont assez faibles. En effet, l'oscillateur contrôlé en tension et le diviseur de fréquence ont une forte consommation électrique et introduisent des pertes. La boucle de rétroaction réduit la bande passante et augmente le bruit de phase. Enfin, le temps de mise en marche des synthétiseurs de fréquence est assez long. La montée en fréquence ne fait qu'augmenter ces problèmes. Un synthétiseur délivrant une sinusoïde à 434 MHz avec un bruit de phase de  $-112\text{dBc/Hz}$  à 500kHz d'offset consomme environ  $400\ \mu\text{W}$  [26]. Pour un système délivrant un signal à 900 MHz avec un bruit de phase de  $-127\text{dBc/Hz}$  à 330kHz d'offset, la consommation passe à 130 mW. L'intégration totale des fonctions du synthétiseur permet de réduire la consommation,

mais il nécessite toujours un résonateur à Quartz non intégrable. Ce dernier peut éventuellement être remplacé par un circuit résonant LC passif et ainsi réduire le temps de mise en marche et la puissance consommée, mais les performances en termes de variation de fréquence et de bruit de phase pour un tel système sont importantes.

Les résonateurs BAW fonctionnent directement à des fréquences supérieures à 1 GHz. Utilisés dans un oscillateur, ils permettent de s'affranchir du circuit de synthèse de fréquence RF. Le résonateur, placé dans la boucle de rétro réaction d'un montage Pierce [26] totalement intégré en technologie CMOS, a permis d'obtenir un oscillateur fonctionnant à 1,9 GHz, possédant une bonne stabilité en fréquence, un bruit de phase de  $-120\text{dBc/Hz}$  à 100kHz d'offset, un temps de démarrage inférieure à 800ns et une consommation de  $300\mu\text{W}$ . L'oscillateur à montage Colpitts équilibré publié dans [27] génère un signal à 5,46 GHz et un bruit de phase de  $-121\text{dBc/Hz}$  à 100kHz d'offset. Cette structure (Figure I-18), étant déjà équilibrée, ne nécessite pas d'étage de conversion et peut être branchée directement sur un mélangeur ou un diviseur. De plus, ce circuit peut être adapté pour générer des fréquences entre 10 et 20 GHz.



**Figure I-18 : Oscillateur Colpitts équilibré fonctionnant à 5,46 GHz**

Les résonateurs HBAR semblent être les plus performants pour ce type de structures puisqu'ils fonctionnent sur un mode harmonique pour lequel le coefficient de qualité est très élevé. Cependant, les oscillateurs dont les caractéristiques ont été publiés intègrent soit des structures FBAR, soit des structures SMR fonctionnant sur le mode fondamental. En effet, les contraintes technologiques imposées par le substrat des résonateurs HBAR entraînent une diminution du taux d'intégration et une augmentation du coût. Son utilisation n'est donc pas adaptée à une production de masse d'un oscillateur totalement intégré.

### V.1.2 FILTRES RF

L'émetteur-récepteur à conversion directe est la structure généralement employée pour la norme WCDMA (UMTS). Elle permet une communication « full-duplex » et nécessite l'utilisation de deux filtres RF en émission et en réception (Figure I-19). Le filtre inter-étages d'émission permet de mettre en forme le signal modulé avant amplification. Le filtre duplexeur, dans lequel passe le signal amplifié, doit être capable de supporter des niveaux de puissance élevés en émission, de recevoir de très faibles signaux et de garantir une isolation importante entre les deux voies. Pour la norme WCDMA, cette isolation doit être de 50 dB, sachant que l'écart entre les bandes d'émission et de réception, respectivement situées à [1920-1980 MHz] et [2110-2170MHz], n'est que de 130 MHz. Le filtre inter étage en réception permet d'atténuer le signal couplé en entrée du circuit de détection et de réduire les contraintes de non linéarité sur les étages suivants.

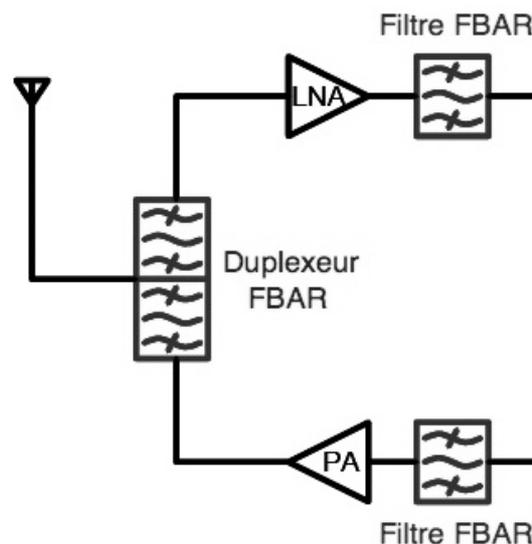


Figure I-19 : Filtres RF à résonateurs BAW

Actuellement, les filtres inter-étages sont souvent mis en oeuvre grâce à la technologie SAW et les filtres duplexeur, grâce à la technologie céramique. Ces dernières doivent faire face à un besoin d'intégration et d'autonomie de plus en plus poussées, à une réduction des coûts et à une montée en fréquence des systèmes de télécommunication. Grâce aux progrès des techniques de dépôt en couche mince, la technologie BAW apparaît comme étant une bonne alternative. Elle permet d'allier performances électriques et intégration dont les systèmes de télécommunication de demain ont besoin.

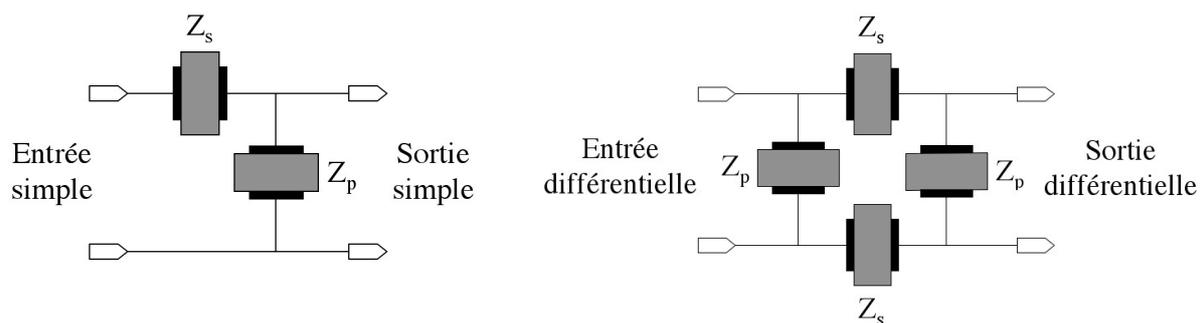
Les filtres passe-bande miniatures à résonateurs BAW commencent d'ailleurs à faire leur apparition sur le marché. Ils présentent les mêmes performances électriques que les filtres SAW, mais avec un encombrement réduit. Leur bonne tenue en puissance et leur forte sélectivité en font des concurrents directs des filtres céramiques. Enfin, leur compatibilité technologique avec les techniques d'intégration actuelles (CMOS ou Bi-CMOS) promet une intégration complète de la chaîne RF sur un même substrat et donc une diminution du coût et de l'encombrement.

Ces filtres sont constitués de plusieurs résonateurs électriquement ou mécaniquement couplés. Chaque résonateur représente un pôle dans la réponse fréquentielle finale. Le couplage électrique peut être effectué en configuration série et parallèle (filtre en échelle ou « Ladder ») ou en configuration croisée (filtre en treillis ou « Lattice »). Le couplage mécanique est effectué par empilement direct de résonateurs (filtres SCF) ou par l'intermédiaire de couches (filtres CRF).

### V.1.2.1 Couplage électrique des résonateurs

#### V.1.2.1.a Les Filtres en échelle (Ladder)

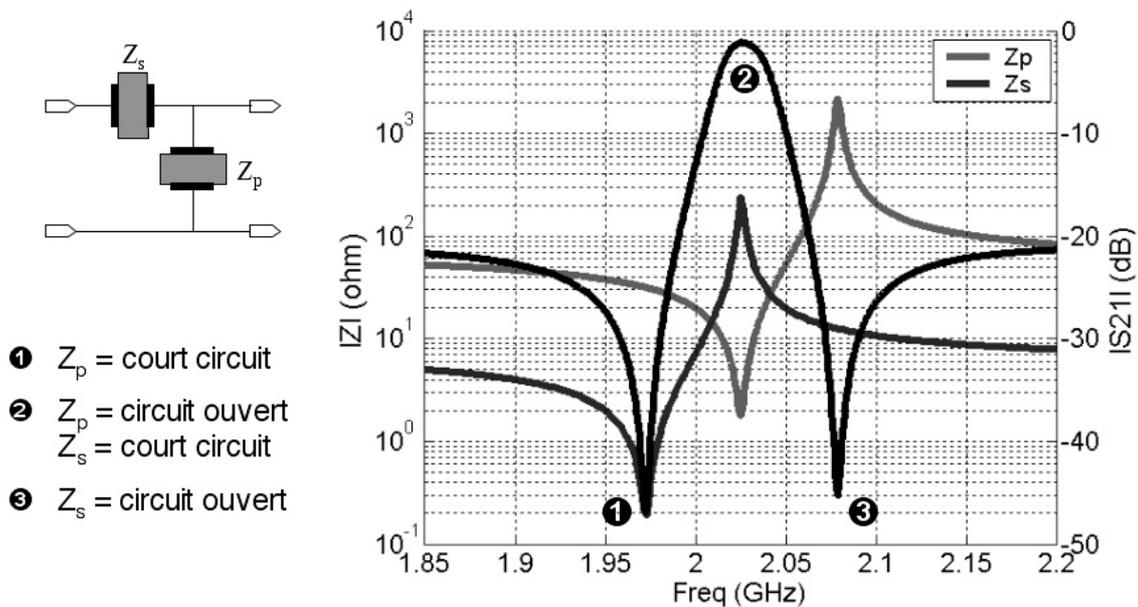
Les filtres en échelle (Figure I-20) sont constitués de résonateurs reliés électriquement en série ou en parallèle. Cette association permet la réalisation de fonctions de filtrage simple ou différentielles, équilibrées ou non.



**Figure I-20 : Topologie de filtres en échelle**

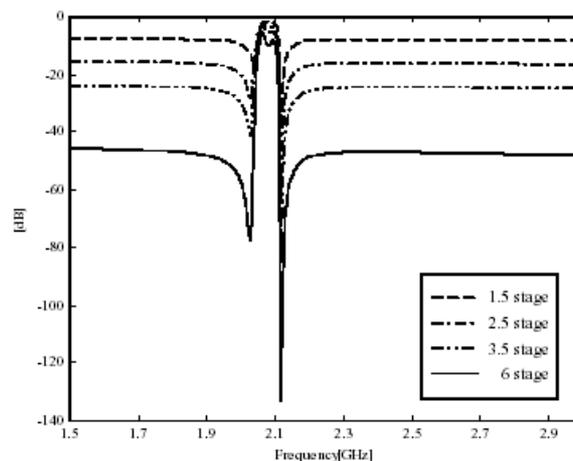
Chaque résonateur représente un pôle et un zéro de transmission dans la réponse du filtre. Les pertes d'insertion d'un tel filtre sont liées non seulement au facteur de qualité des résonateurs, mais aussi à la précision des fréquences de résonance série et parallèle de chaque type de résonateurs. À la résonance, un résonateur BAW se comporte comme un court-circuit ( $Z$  est minimum) et à l'anti-résonance, comme un circuit ouvert ( $Z$  est maximum). La mise en

parallèle d'un résonateur inverse ces comportements. Pour obtenir une réponse de filtre et minimiser les pertes d'insertions, il faut faire coïncider les fréquences de résonance des résonateurs en série avec les fréquences d'anti-résonances des résonateurs en parallèle (Figure I-21). La bande passante du filtre dépend donc directement du coefficient de couplage électromécanique.



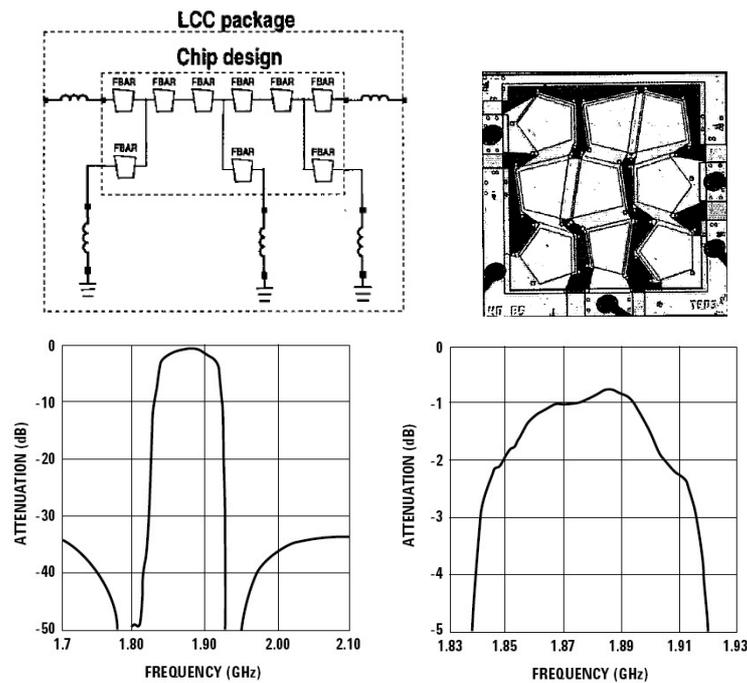
**Figure I-21 :** Synthèse de filtre pour une topologie en échelle à 1 étage

La réjection hors bande d'un étage dépend du niveau d'impédance de chaque résonateur et celle du filtre global, du nombre d'étages (Figure I-22). L'augmentation du nombre d'étage augmente les pertes d'insertions.



**Figure I-22 :** Mesure de la variation de l'atténuation hors bande pour une topologie en échelle en fonction du nombre d'étage

Les filtres en échelles sont aujourd'hui fabriqués pour des applications de téléphonie mobile couvrant la bande de fréquence 500 MHz - 3.5 GHz. Les deux matériaux piézoélectriques les plus employés sont l'AlN et le ZnO, ce qui implique une bande passante étroite comprise entre 0.5 et 5%. À titre d'exemple, la Figure I-23 présente un filtre en échelle conçu par Agilent pour une application répondant à la norme de communication U.S. PCS-1900 [29].



**Figure I-23 :** Exemple de filtre BAW en échelle [29] [30]

Ce filtre est composé de 9 résonateurs qui constituent 3,5 étages en échelle. Les résonateurs en série ont une surface d'électrode doublée, de manière à minimiser les pertes et à optimiser l'atténuation dans la bande. Ce sont des structures à cavité d'air sur un substrat de Silicium, constitués d'une couche d'AlN et d'électrodes en Molybdène. Le coefficient de couplage électromécanique est de 6%. Le décalage fréquentiel entre les résonateurs en série et en parallèle est donc de 3% et permet d'obtenir la bande passante de 60 MHz nécessaire au respect de la norme U.S. PCS-1900.

Les filtres BAW en échelle se caractérisent par une forte sélectivité, mais une atténuation hors bande relativement faible. La bande passante est limitée par le coefficient de couplage électromécanique des matériaux utilisés. Cette topologie est largement utilisée dans les filtres duplexeurs où l'isolation entre les voies d'émission et de réception demande de fortes sélectivités.

V.1.2.1.b Les filtres en treillis (Lattice)

Les filtres en treillis ont une topologie croisée constituée de résonateurs reliés électriquement en série ou en parallèle (Figure I-24). Cette association permet la réalisation de fonctions de filtrage différentielles, équilibrées ou non.

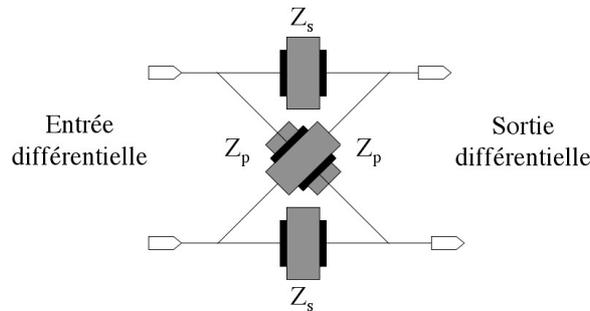


Figure I-24 : Topologie de filtres en treillis

Pour cette topologie, la position des pôles dépend du niveau des impédances et non de la position des fréquences de résonance et d'anti-résonance (Figure I-25). Un zéro apparaît sur le paramètre de transmission  $S_{21}$  lorsque les impédances des résonateurs séries et parallèles sont égales ( $Z_s = Z_p$ ). Cette condition impose une différence de potentielle nulle en sortie. Aucune puissance n'est alors transmise à la charge.

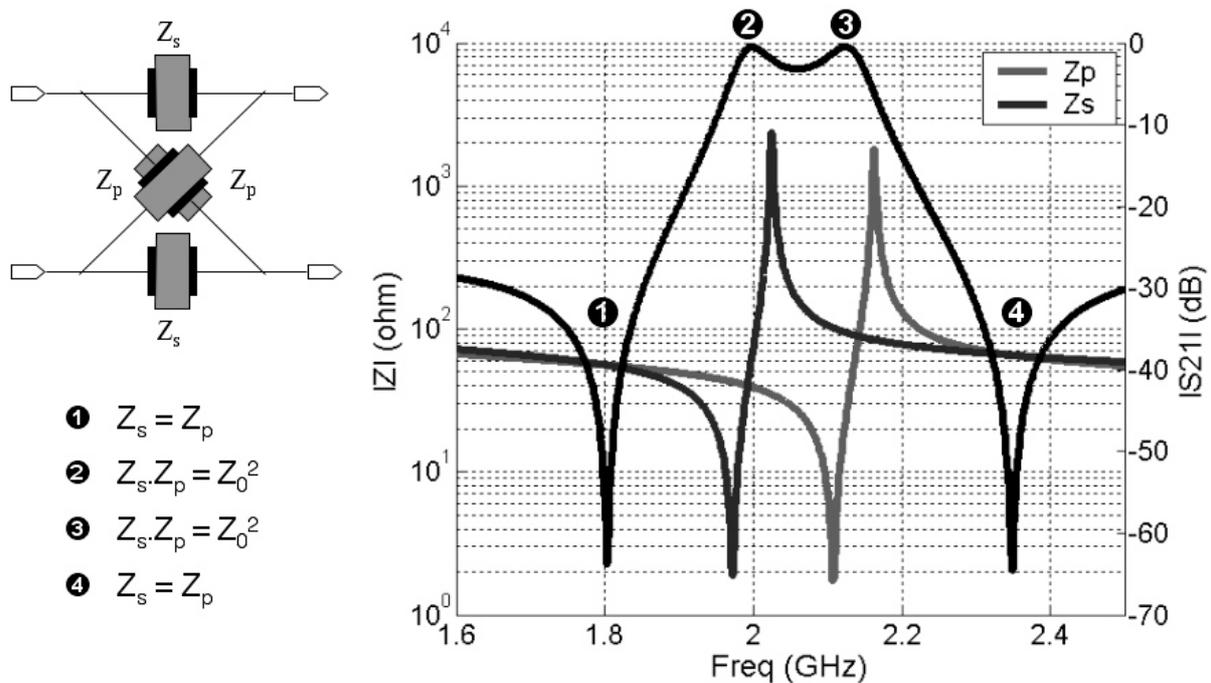
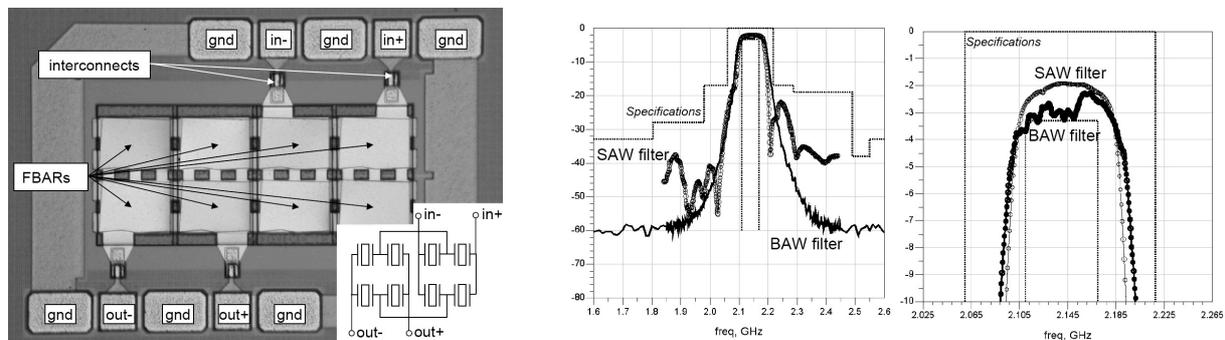


Figure I-25 : Topologie de filtres en treillis

$S_{21}$  est maximum ( $S_{11}$  minimum) lorsque le produit des impédances des résonateurs série et parallèle est égal au carré de l'impédance de normalisation ( $Z_s.Z_p = Z_0^2$ ). Les pertes d'insertions sont déterminées par la variation des impédances entre ces valeurs et l'atténuation hors bande est fixée par le rapport des impédances des résonateurs séries et parallèles. Le coefficient de couplage a une influence sur la bande passante puisqu'il déplace les fréquences pour lesquelles les conditions  $Z_s=Z_p$  et  $Z_s.Z_p = Z_0^2$  sont vérifiées. Pour un même niveau d'impédances, l'écart entre les pôles et la bande passante augmente avec le coefficient de couplage et, de manière générale, un  $k_t^2$  élevé permet d'obtenir une bande passante plus large.

La Figure I-26 présente un filtre double treillis, conçu au CSEM (Centre Suisse d'Electronique et de Microtechnique) dans le cadre du projet européen MARTINA, pour une application fonctionnant à 2,14 GHz et répondant à la norme WCDMA [31].



**Figure I-26 :** Exemple de filtre BAW en treillis [31] [32]

Ce filtre est composé de huit résonateurs qui constituent un filtre treillis à deux étages. Les résonateurs sont des structures à pont d'air sur un substrat BiCMOS, constitués d'une couche d'AlN et d'électrodes en Platine. Leur coefficient de couplage électromécanique est de 6,5% et leur facteur de qualité de 900. Le décalage fréquentiel entre les résonateurs en série et en parallèle est obtenu par surcharge de l'électrode supérieure et permet d'obtenir la bande passante de 60 MHz nécessaire au respect de la norme WCDMA.

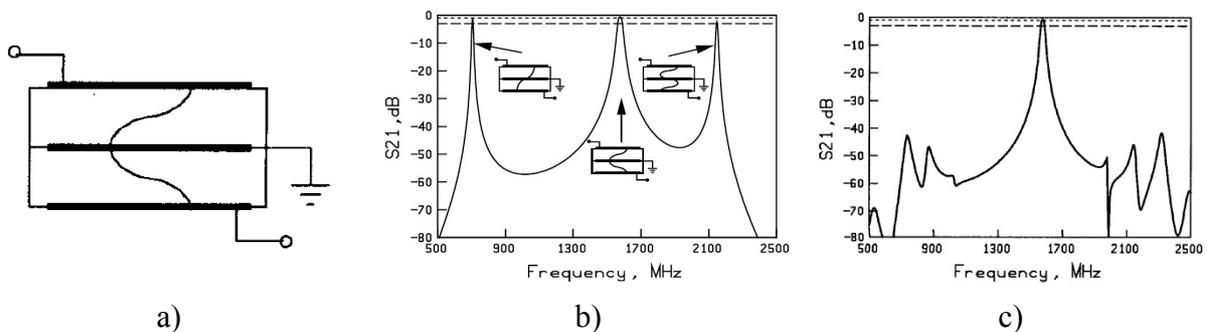
Les filtres BAW en treillis se caractérisent par une faible sélectivité, mais une atténuation hors bande élevée. Cette topologie est surtout utilisée dans les filtres inter étages. Ils peuvent être avantageusement couplés avec les filtres en échelles pour synthétiser des réponses plus complexes, tirants partie des avantages de chaque structure. Les filtres en échelle-treillis présentent alors une très forte sélectivité et une importante réjection hors bande.

### V.1.2.2 Couplage mécanique des résonateurs

Le couplage acoustique permet de s'affranchir de l'impact du coefficient de couplage des résonateurs sur la bande passante des filtres en échelle. Ici, la structure élémentaire fonctionne sur un mode fondamental où la résonance parallèle (anti-résonance) est évitée. De plus, ce type de couplage permet d'obtenir des structures différentielles avec une isolation galvanique totale.

#### V.1.2.2.a Les Filtres SCF (Stacked Crystal Filters)

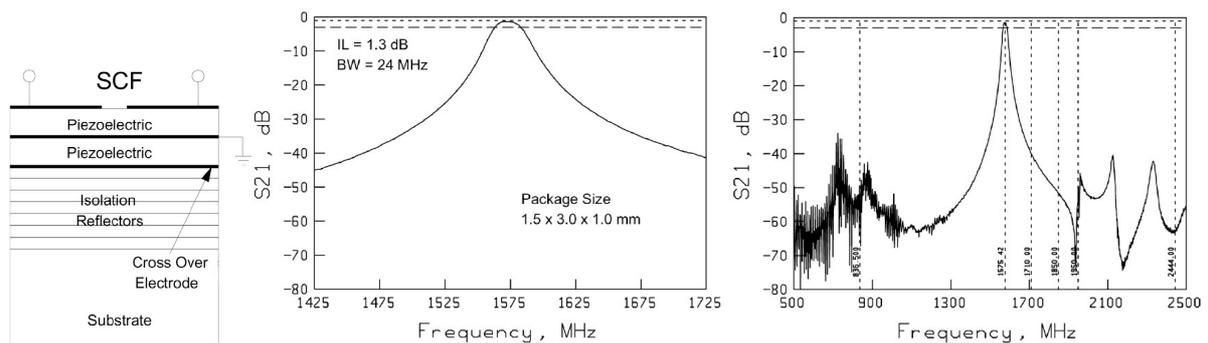
La structure élémentaire (section) d'un filtre SCF est présentée sur la Figure I-27a. Elle est constituée de deux résonateurs élémentaires empilés et partageant une électrode commune. Typiquement, l'électrode du milieu est reliée à la masse, le signal d'entrée est appliqué sur l'électrode supérieure et le signal de sortie est prélevé sur l'électrode inférieure.



**Figure I-27 : Filtre SCF élémentaire FBAR et SMR (AlN/SiO<sub>2</sub>) [33]**

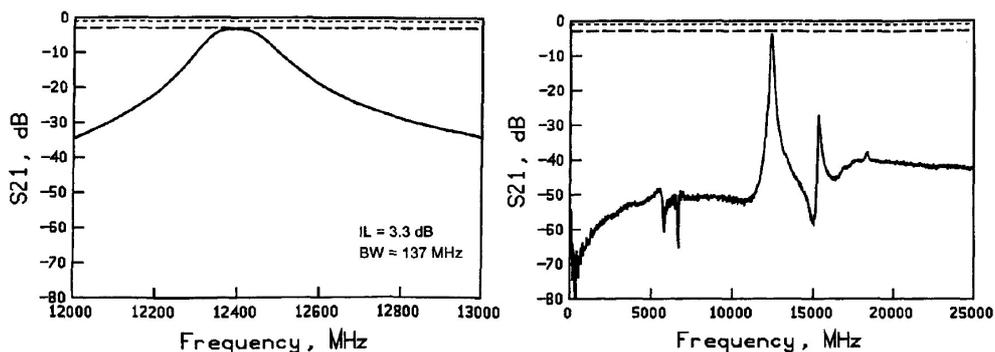
Cette structure possède une réponse en fréquence assez complexe (Figure I-27b). Le mode fondamental, correspondant au couplage maximum, s'installe lorsque l'épaisseur totale correspond à une longueur d'onde  $\lambda$  c'est-à-dire lorsque l'épaisseur de chaque résonateur élémentaire correspond à une demi-longueur d'onde. Ce mode possède la résonance la plus forte (pertes minimum) et la plus large bande. La résonance basse fréquence correspond à un mode en  $\lambda/2$  sur l'ensemble de la structure et la résonance haute fréquence, à un mode en  $3\lambda/2$ . Ce motif se répète aux fréquences harmoniques et plus la fréquence augmente, plus les modes présents autour du fondamental se rapprochent. Cet encombrement du spectre rend l'utilisation d'une telle réponse assez compliquée. Elle peut être améliorée en déposant la structure sur un miroir de Bragg à bande passante réduite limitant ainsi le couplage des modes parasites. Sur la Figure I-27c, la réponse en fréquence ne présente plus les modes supérieur et inférieur. La structure élémentaire, sur son mode fondamental, représente un pôle. Il faut donc en assembler plusieurs pour synthétiser une réponse de filtre plus complexe.

La structure d'un filtre SCF à 2 sections montées en série est présentée sur la Figure I-28 [34]. Une section est composée de deux résonateurs élémentaires. Les couches piézoélectriques sont en Nitrure d'Aluminium (AlN), les électrodes en Aluminium (Al) et le substrat est en Silicium (Si). Le réflecteur de Bragg est constitué de neuf couches alternées d'AlN et de SiO<sub>2</sub>. La Figure I-28 montre la réponse de ce filtre conçu pour la bande GPS (Global Positioning System). Il présente de faibles pertes d'insertions (1,3 dB), une bande passante de 1,5% (24 MHz@1575MHz) et une très forte réjection hors bande.



**Figure I-28 :** Filtre SCF 2-pôles sur SMR 9 couches (AlN/SiO<sub>2</sub>) [34]

Le filtre 2-pôles précédent a été adapté pour un fonctionnement à 12,4 GHz (Figure I-29). L'épaisseur des couches piézoélectriques (AlN) est fixée à 260 nm et celle des électrodes (Al) à 50 nm. Les pertes d'insertions sont de 3,3 dB, une bande passante de 1,1% (137 MHz@12400MHz) et une réjection hors bande qui présente quelques parasites.



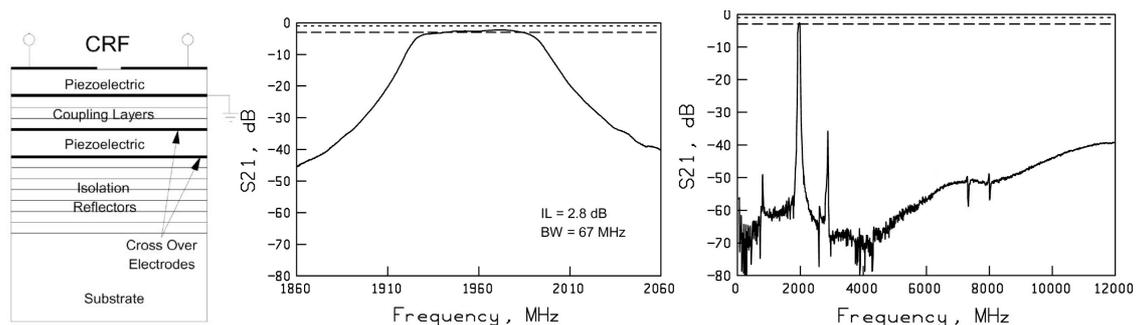
**Figure I-29 :** Filtre SCF 2-pôles sur SMR 9 couches (AlN/SiO<sub>2</sub>) [12]

La fabrication de ce type de filtre est assez complexe car il faut déposer deux couches de matériau piézoélectrique et un miroir de Bragg acoustique. Cependant, l'empilement des résonateurs permet d'obtenir des structures très compactes. L'ajustement de la fréquence de résonance peut être effectué par une simple retouche de l'épaisseur de l'électrode supérieure.

La largeur de la bande passante des filtres SCF est limitée par le surcouplage entre les résonateurs élémentaires. La configuration SCF élémentaire se comporte comme un seul résonateur fonctionnant sur le mode 2 (mode en  $\lambda$ ). Son coefficient de couplage effectif est donc réduit et correspond à la moitié de celui d'un résonateur seul.

#### V.1.2.2.b Les Filtres CRF (Coupled Resonator Filter)

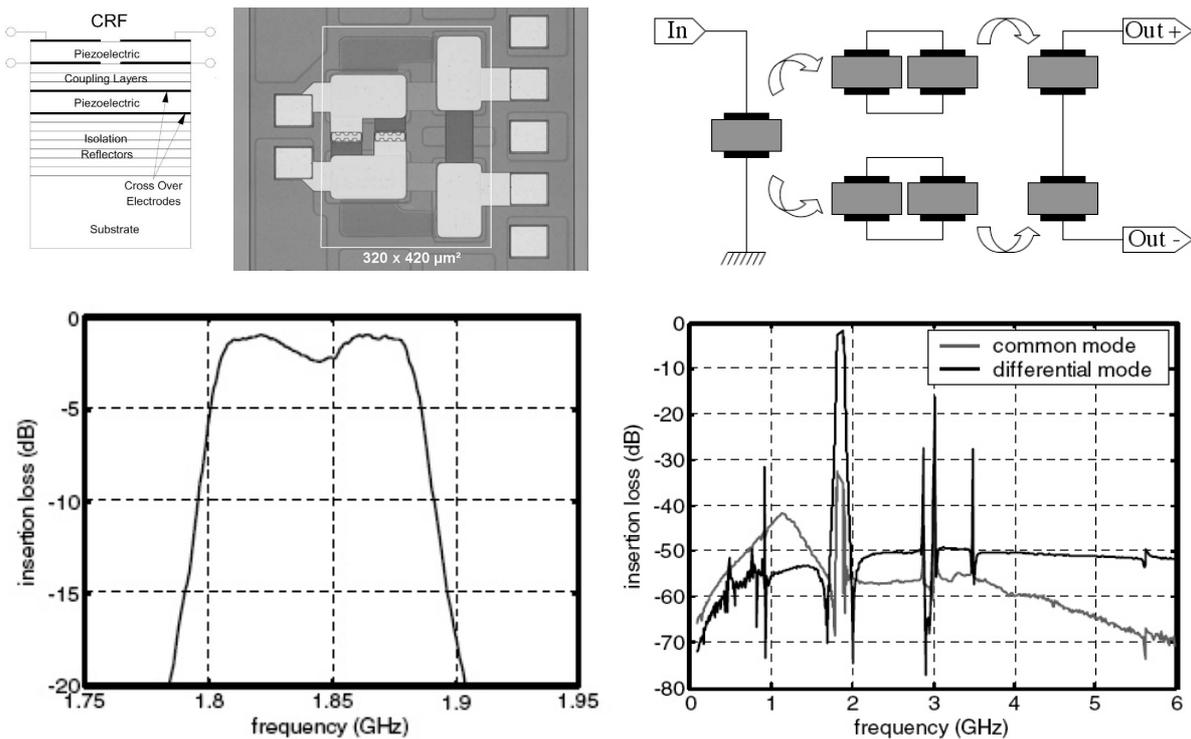
Le problème de la largeur de bande passante limitée est résolu par la diminution du couplage entre les deux résonateurs superposés. Ils agissent alors l'un envers l'autre comme des transducteurs indépendants, fonctionnant sur le mode 1 (mode en  $\lambda/2$ ) et qui s'échangent de l'énergie. Ils représentent alors chacun 1 pôle. Cette configuration est appelée « Coupled Resonator Filters » (CRF). La bande passante est contrôlée par le niveau de couplage acoustique entre résonateur. Ce couplage est assuré par l'intermédiaire d'une séquence de couches acoustiques (Figure I-30) d'épaisseur  $\lambda/4$ . La réponse en transmission du coupleur est définie de manière à permettre un couplage électrique optimal entre le générateur et la charge.



**Figure I-30 : Filtre CRF 4-pôles [34]**

La Figure I-30 présente un filtre CRF 4-pôles conçu pour la bande de téléphonie mobile à 1960 MHz et répondant à la norme GSM. Comme pour le filtre SCF de la Figure I-, Les couches piézoélectriques sont en AlN et les électrodes en Aluminium. Les pertes d'insertions sont un peu plus élevées (2,8 dB), mais la bande passante à  $-3$ dB passe à 3,6% ( $67\text{MHz}@1960\text{MHz}$ ). Ce filtre pourrait être employé pour des applications CDMA puisque sa bande passante à  $-1$ dB est relativement plate et surtout plus large que celle d'un canal (60MHz).

Cette configuration permet une isolation galvanique totale et un mode d'interconnexion différentiel. De plus, comme le montre la Figure I-31, elle peut être utilisée comme convertisseur de modes (simple vers différentiel ou différentiel vers simple) ou comme transformateur d'impédance.



**Figure I-31 : Filtre CRF 4-pôles avec sortie différentielle isolée [35]**

La structure CRF de la Figure I-31 a été développée par Infineon pour une application GSM-1800 [35]. Elle est constituée de huit résonateurs qui constituent un filtre quatre pôles. L'entrée est en mode simple et la sortie en mode différentiel. Elles sont isolées électriquement et possèdent des impédances différentes ( $50\Omega$  en entrée et  $200\Omega$  différentielle en sortie). Ce filtre présente des pertes d'insertions de 1 dB et une bande passante à  $-3\text{dB}$  de 4,3% ( $79,7\text{MHz}@1840\text{MHz}$ ). Les résonateurs ont fait l'objet d'une conception particulière du bord de leur électrode supérieure de manière à supprimer les modes parasites. Ainsi, l'ondulation résiduelle dans la bande de fréquence [1,75-1,95 GHz] est inférieure à  $\pm 0,5\text{dB}$  en module et à  $\pm 5^\circ$  en phase. La réjection hors bande reste autour de  $-50\text{dB}$  et les quelques pics parasites présent sur la réponse du filtre sont supprimés en optimisant la bande passante du résonateur de Bragg. Enfin, ce filtre présente une bonne atténuation (entre  $-40$  et  $-50$  dB) du mode commun. Ce paramètre représente l'équilibre entre les voies de la sortie différentielle.

## VI INTEGRATION DES FILTRES BAW DANS LES CHAINES RF

Deux méthodes d'intégration des filtres BAW dans les chaînes RF sont actuellement en compétition. La première technologie, dite SiP (System in Package), consiste à assembler chaque module de la chaîne RF sur un support hôte puis à l'encapsuler. La deuxième, appelée SoC (System on Chip) consiste à fabriquer toute la chaîne RF sur un substrat monolithique.

### VI.1 INTEGRATION HYBRIDE SiP (SYSTEM IN PACKAGE)

L'intégration hybride SiP (System in Package) consiste à implémenter une chaîne RF en assemblant chaque module et en les reliant électriquement. Les circuits actifs et les filtres BAW sont d'abord réalisés sur des wafers séparés puis découpés en circuits indépendants. Ils sont ensuite déposés sur un substrat hôte et interconnectés par des fils de bonding (Figure I-32) ou par des billes de bumping. Le module BAW est ensuite protégé par encapsulation et finalement, le circuit est mis en boîtier. Le circuit NWA19P [36] de la Figure I-32 est fabriqué par Infineon depuis novembre 2004. Il intègre une chaîne RF complète pour la norme GSM-1900 (filtre de réception, amplificateur faible bruit sur substrat SiGe et convertisseur simple vers différentiel) dans un boîtier de  $3 \times 3 \text{ mm}^2$ .

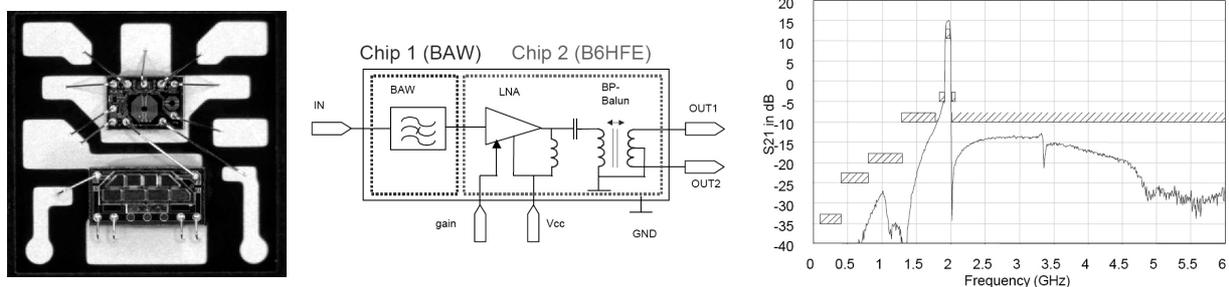


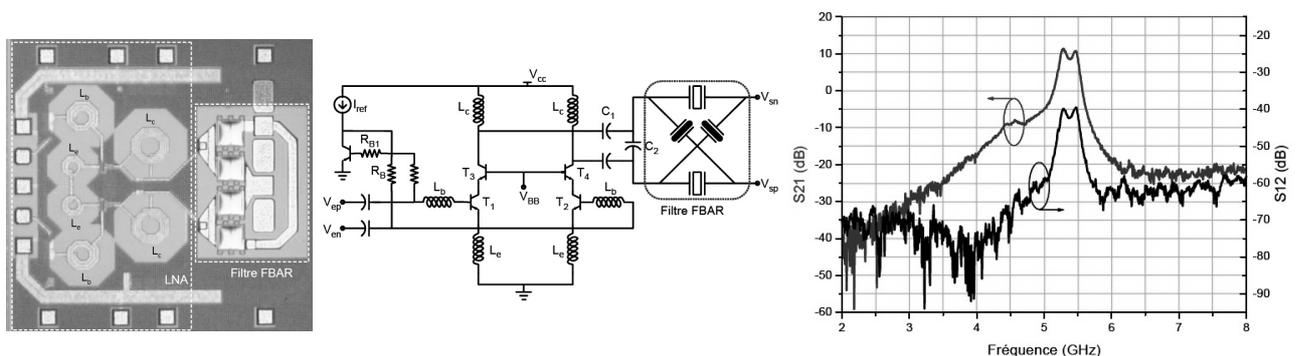
Figure I-32 : Intégration hybride d'un filtre BAW et d'un LNA reliés par bonding [36]

À l'heure actuelle, cette méthode permet d'obtenir les meilleurs rendements de fabrication. Chaque module est testé avant assemblage, éliminant ainsi les circuits actifs défectueux ou les filtres BAW ne respectant pas les spécifications en fréquences. De plus, il est possible, en ne changeant que le filtre, d'adapter le circuit pour différentes normes de télécommunication et ainsi réduire le coût de fabrication. Néanmoins, le coût de l'assemblage modulaire peut devenir très élevé pour des circuits où les filtres BAW n'occupent qu'une faible surface. Dans ce cas l'intégration monolithique (SoC) semble plus adaptée.

## VI.2 INTEGRATION MONOLITHIQUE SoC (SYSTEM ON CHIP)

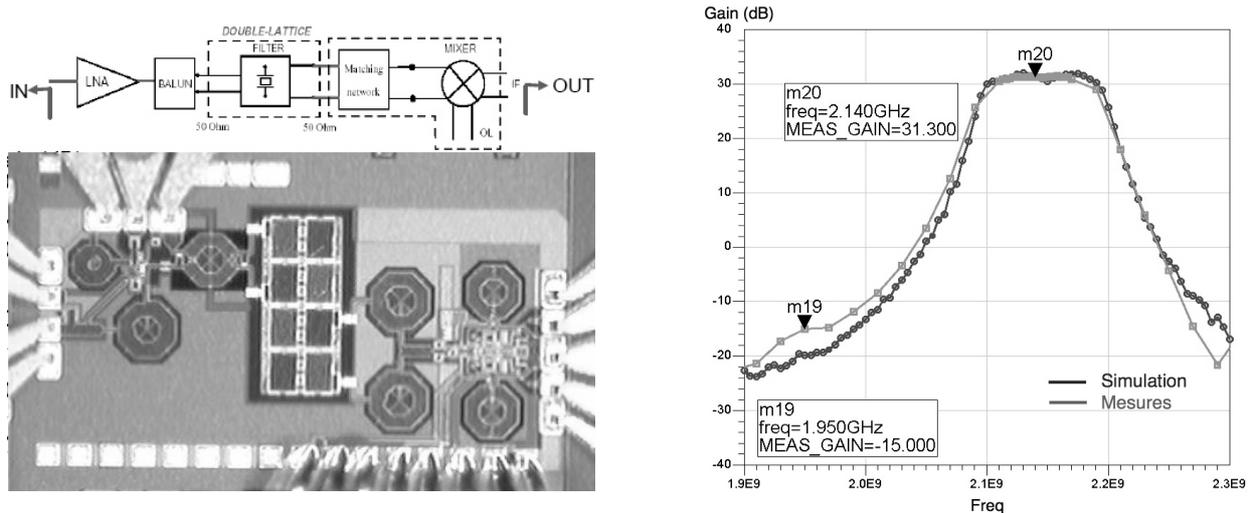
L'approche monolithique semble la plus prometteuse en termes de performances et de densité d'intégration. Cependant, avant de réussir à industrialiser la fabrication d'une chaîne RF complète, les problèmes liés au rendement des filtres BAW restent à résoudre. La technologie « Above-IC » permet d'intégrer les filtres BAW avec des composants actifs et passifs sur un même wafer BiCMOS ou CMOS (Si, SiGe). Les fonctions actives de la chaîne RF sont préalablement réalisées et recouvertes d'une couche de passivation. Les résonateurs BAW sont ensuite déposés « au dessus » de ces circuits intégrés et sont connectés par des vias creusés dans la couche de passivation. Ici, les structures SMR ne sont pas intéressantes car l'interconnexion de la structure BAW et de la partie active nécessite la gravure de l'ensemble des couches du miroir de Bragg. L'utilisation de structures suspendues est moins coûteuse.

L'intégration monolithique permet donc la réalisation de chaînes RF très performantes, à faible encombrement et à coût relativement réduit. Ce concept a été employé pour la première fois pour la réalisation d'un oscillateur à résonateur BAW [37].



**Figure I-33 : Intégration monolithique « above-IC » d'un LNA filtrant [38]**

Plus récemment, l'évolution des procédés de dépôt et la compatibilité technologique des matériaux utilisés pour la réalisation des dispositifs BAW ont permis l'intégration de filtres avec un [38] ou plusieurs organes [39] d'une chaîne de réception WCDMA (Figure I-33 et I-34). La densité d'intégration obtenue ( $2,44 \text{ mm}^2$ ) est largement supérieure à celle du circuit de la Figure I-32, tout en ayant des performances de gain satisfaisantes et une structure plus complexe. Des résonateurs à cavité d'air sont employés car ils ne fragilisent pas la structure du wafer et nécessite peu d'étape de fabrication.



**Figure I-34 :** Intégration SoC d'une chaîne de réception WCDMA [39]

Cette approche est donc prometteuse, mais certaines améliorations sont nécessaires pour envisager une industrialisation. Le rendement de fabrication des filtres BAW doit tendre vers 100% pour minimiser le taux de rejet final de manière à ne pas perdre le bénéfice de la réduction du coût. La maîtrise des épaisseurs, sur toute la surface du wafer, de la couche piézoélectrique et des électrodes est primordiale puisqu'elles affectent directement la réponse en fréquence des filtres. L'utilisation de cette technique, pour des applications multi-standards, ne pourra être envisagée que par le développement d'une méthode d'accord des résonateurs.

À court terme, la technologie d'intégration monolithique (SoC) des BAW présente peu d'avantages par rapport à la technologie SiP. Elle est plus chère et présente un rendement plus faible. Néanmoins, la réduction potentielle du coût et l'augmentation de la densité d'intégration la rendent très prometteuse. Grâce à sa structure en couche, elle offre la place nécessaire pour l'association des résonateurs avec un circuit de commande ou d'accord. Ainsi, les contraintes sur les épaisseurs des couches et sur le rendement pourraient être relâchées. De plus, si la gamme d'accord des résonateurs est suffisamment grande, le développement de circuits multi-standards pourrait être envisagé. Enfin, les spécifications des filtres répondants à la norme WCDMA sont si difficiles à atteindre que la technologie d'intégration monolithique semble être une meilleure voie pour la conception des modules RF de demain.

## VII CONCLUSION

Les techniques de dépôt en couches minces ont permis le développement de nouveaux résonateurs à ondes acoustiques de volume (BAW) fonctionnant à hautes fréquences. Depuis le lancement du premier filtre FBAR par Agilent en Décembre 2001, les plus importants fabricants de circuits RF pour les télécommunications ont investi dans cette technologie. Ainsi, Agilent s'est focalisé sur les structures à cavité d'air, tandis qu'EPCOS a choisi les structures à pont d'air et qu'Infineon et ST-Microelectronics optimisent leurs structures SMR.

Le matériau piézoélectrique le plus employé à l'heure actuelle est sans aucun doute l'AlN. Bien qu'il n'est pas les meilleures caractéristiques électriques ou mécaniques, ce matériau possède tous les avantages requis pour un taux d'intégration maximum. L'étude de sa croissance en couche mince a fait l'objet de nombreuses recherches et la détermination du meilleur métal à utiliser est encore d'actualité, le Ruthénium ayant récemment détrôné le Molybdène.

Les techniques de dépôt sont aussi en cours de développement. Malgré une vitesse de croissance faible, l'ablation Laser semble être une technique prometteuse. Elle permet d'effectuer des transferts stoechiométriques de matière et ainsi d'obtenir des dépôts plus purs qu'avec les techniques de pulvérisation classiques et avec des espèces chimiques complexes.

Les résonateurs BAW ont commencé à conquérir les organes de génération de fréquence et de filtrage dans les émetteurs récepteurs RF. Dans les oscillateurs, ils permettent de réduire la consommation et le bruit de phase grâce à un fort coefficient de qualité et à un fonctionnement sur un mode fondamental directement à hautes fréquences.

L'assemblage de plusieurs résonateurs permet de synthétiser des réponses de filtres dont les caractéristiques dépendent de la topologie. Les filtres en échelle présentent une forte sélectivité mais une faible réjection hors bande. À l'inverse, les filtres en treillis présentent une faible sélectivité mais une forte réjection hors bande. Une association échelle-treillis permet de tirer parti des avantages des deux configurations. Les filtres empilés (SCF et CRF) exploitent un couplage acoustique des résonateurs et permettent d'obtenir des filtres très compacts.

L'intégration monolithique des résonateurs BAW avec les autres organes actifs et passifs des chaînes RF est en cours de développement. Les premiers résultats obtenus grâce à la technologie « Above-IC » sont plus que prometteurs. Cette technique ouvre aussi la voie de l'accordabilité en fréquence des résonateurs.

CHAPITRE II :  
MISE EN EQUATION DU PROBLEME  
PIEZOELECTRIQUE



## I INTRODUCTION

Tous les matériaux présentés dans le chapitre I et employés pour la réalisation des résonateurs BAW sont des cristaux. Ce sont des milieux ordonnés constitués d'un réseau sur lequel sont disposés des motifs. L'agencement des atomes sur la maille élémentaire peut présenter des centres ou des axes de symétrie qui permettent de classer les cristaux suivant leur degré de similitude. Ainsi, tous les cristaux d'une classe réagissent de la même manière à une même excitation. En effet, la symétrie de la maille élémentaire détermine complètement le comportement élastique des solides.

Un cristal soumis à une contrainte mécanique, suivant un axe donné, se déforme généralement de manière différente dans les autres directions. Ce comportement est dit anisotrope. Si sa maille élémentaire possède un axe de symétrie, toute direction obtenue par rotation autour de cet axe possèdera le même comportement mécanique. Si le cristal répond de la même manière quelle que soit la direction de l'excitation, le matériau est dit isotrope.

L'outil mathématique qui permet de rendre compte du comportement anisotrope des cristaux s'appelle un tenseur. C'est une application multi-linéaire entre deux champs de vecteurs. Ici, on introduit tout d'abord le tenseur des rigidités pour représenter l'état de contrainte et de déformation d'un volume soumis à des forces. La loi correspondante s'appelle la loi de Hooke.

Pour certains cristaux ioniques, l'agencement des atomes dans la maille élémentaire n'est pas centro-symétrique. Au repos, les barycentres des charges positives et négatives sont confondus. Soumis à une contrainte mécanique, le déplacement des ions crée une polarisation dans la maille élémentaire et donc l'apparition d'un champ électrique macroscopique. C'est l'effet piézoélectrique direct ou effet Curie. La réciproque existe, c'est l'effet piézoélectrique inverse ou effet Lippman. Les équations constitutives de la piézoélectricité font intervenir le tenseur piézoélectrique et permettent de rendre compte de ce phénomène.

La génération d'onde acoustique progressives dans les cristaux piézoélectriques est possible en appliquant un champ électrique variable suivant certaines directions. Les vitesses et polarisations de ces ondes dépendent de l'anisotropie du cristal dans la direction de propagation. Ces ondes rencontrent sur leur parcours des interfaces possédant certaines conditions limites et subissent une atténuation due aux pertes intrinsèques des matériaux.

Afin de bien comprendre les principes physiques mis en jeu dans les matériaux piézoélectriques, nous rappelons dans une première partie les propriétés fondamentales des cristaux. L'agencement de la maille élémentaire et les axes de symétrie qu'elle présente sont particulièrement intéressants, notamment dans le cas de la classe 6mm qui regroupe le Nitrure d'Aluminium (AlN) et l'Oxyde de Zinc (ZnO).

La deuxième partie présente la mise en équation de la relation contrainte déformation (loi de Hooke) qui permet de modéliser le comportement d'un solide élastique soumis à une contrainte mécanique et en petites déformations. Cette loi est utilisée dans l'analyse des résonateurs BAW pour les matériaux constitutifs des électrodes, de la membrane dans les structures FBAR ou du réflecteur de Bragg dans les structures SMR. On parlera alors de problème purement acoustique. L'introduction du tenseur des rigidités  $c$  dans cette relation permet de modéliser le caractère anisotrope de certains matériaux. Dans le cas d'un matériau isotrope, on utilisera plutôt le module d'Young  $E$  et le coefficient de Poisson  $\nu$ .

Les matériaux piézoélectriques ont la capacité de coupler le champ électrique et la déformation mécanique. La troisième partie de ce chapitre présente la provenance, la modélisation de ce phénomène physique et sa mise en équation. En se basant sur un modèle unidimensionnel, on peut remarquer que la piézoélectricité peut être représentée par un terme de couplage électrique-mécanique introduit dans les équations de Maxwell qui régissent les phénomènes électromagnétiques et dans la loi de Hooke qui régit les phénomènes mécaniques. La piézoélectricité peut donc être vue comme une généralisation du problème mécanique.

La résolution de système d'équations couplées via le tenseur piézoélectrique peut être considéré en effectuant l'approximation d'une propagation en ondes planes. On doit alors résoudre l'équation de Christoffel généralisée à la piézoélectricité. Ce calcul est effectué dans la troisième partie de ce chapitre. Les propriétés cristallines des matériaux prennent alors tout leur sens car elles sont mises à profit dans les résonateurs BAW. L'axe de rotation d'ordre 6 des cristaux de classe 6mm et surtout la forme du tenseur qui en découle permet d'envisager la génération d'une onde plane quasi longitudinale de volume. Cette dernière est la seule à être piézoélectriquement couplée lorsque l'axe d'ordre 6 est normal au plan des électrodes.

Enfin, les conditions aux limites et la modélisation des pertes viennent compléter les outils mathématiques nécessaires à la modélisation complète des résonateurs BAW.

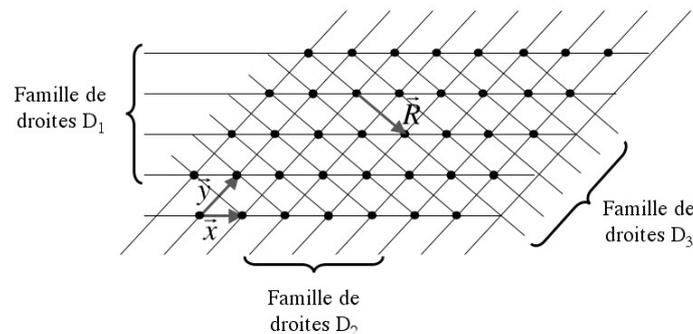
## II STRUCTURE CRISTALLINE

Un cristal est un arrangement ordonné d'atomes, d'ions ou de molécules. Le milieu cristallin se caractérise par la présence d'une infinité de points, appelés nœuds, ayant le même environnement atomique et qui se déduisent les uns des autres par translation de trois vecteurs élémentaires  $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ . L'ensemble de ces points constitue un réseau qui traduit la périodicité spatiale du cristal.

### II.1 STRUCTURES ELEMENTAIRES

#### II.1.1 LES RANGEES : REPERAGE D'UNE DIRECTION

Les nœuds du réseau sont disposés aux intersections de trois familles de droites parallèles. La Figure II-1 illustre (pour un réseau plan) la décomposition en trois familles de droites parallèles. Sur chacune de ces droites, appelées rangées, les nœuds sont équidistants. Trois entiers relatifs  $(u, v, w)$ , définissent la rangée d'indice  $[u, v, w]$  par le vecteur :  $\vec{R}_{u,v,w} = u\vec{x} + v\vec{y} + w\vec{z}$  joignant un nœud à son suivant immédiat. Ainsi, sur la Figure II-1 ( $w=0$ ), les rangées de la famille  $D_3$  sont notées  $[2, -1, 0]$ .

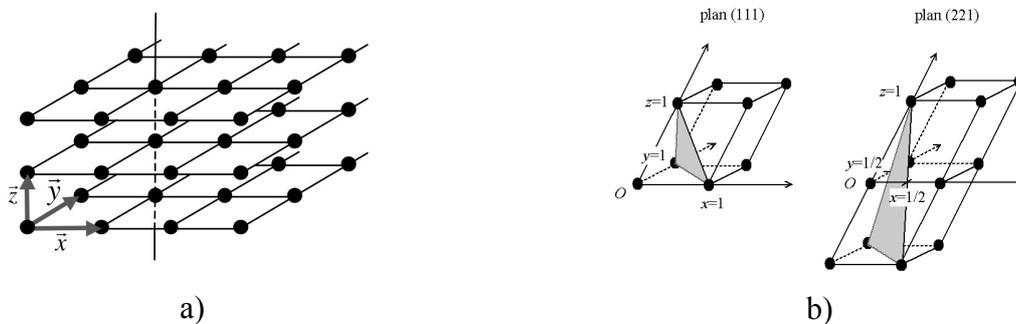


**Figure II-1 :** Illustration des rangées suivant trois familles de droites dans un cristal

L'examen de cette figure montre que la densité linéaire de nœuds varie avec la direction. Elle est élevée sur les rangées des familles  $D_1 [1,0,0]$  et  $D_2 [0,1,0]$  et plus faible sur  $D_3 [2,-1,0]$ . Pour un cristal donné, le nombre de nœuds par unité de volume étant fixé, la direction de plus grande densité correspond à l'écartement maximal entre rangées voisines. Ici, les rangées de la famille  $D_1$  sont les plus écartées. La densité est donc maximale dans la direction  $x$ . Plus les atomes sont proches, dans une direction, plus les forces de cohésions sont grandes. La différence de cohésion suivant la direction permet d'expliquer l'anisotropie de certains cristaux.

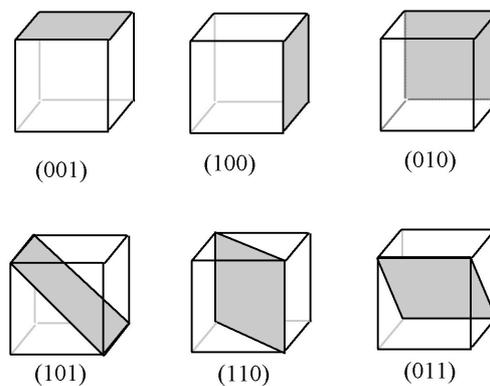
### II.1.2 PLANS RETICULAIRES : REPERAGE D'UN PLAN

Il est possible de répartir tous les nœuds du réseau dans une famille de plans parallèles équidistants, appelés plans réticulaires, qui se déduisent les uns des autres par la translation élémentaire d'une rangée quelconque non contenue dans un plan réticulaire (Figure II-2a).



**Figure II-2 : Illustration des plans réticulaires dans un cristal**

Pour repérer ces plans, on considère le plan le plus proche de l'origine, mais qui n'y passe pas. L'intersection de ce plan avec les trois axes définit trois points (Figure II-2b) dont les coordonnées sont  $(P,0,0)$ ,  $(0,Q,0)$  et  $(0,0,R)$ . Les inverses de ces coordonnées donnent les indices de Miller, notés  $(hkl)$  avec  $h=1/P$ ,  $k=1/Q$  et  $l=1/R$ . Un indice négatif est surmonté d'une barre. Un indice est nul si les plans sont parallèles à l'axe correspondant.



**Figure II-3 : Plans réticulaires parallèles à un axe dans un cristal**

Le nombre de nœuds par unité de volume étant fixe, les plans à petits indices (100), (010), (001), qui sont les plus écartés, portent la plus grande densité de nœuds par unité de surface. Ces plans à forte cohésion sont potentiellement des plans de clivage car les liaisons inter réticulaires sont relativement faibles. Ils réfléchissent les rayons X plus fortement que les autres plans.

### II.1.3 LES MAILLES

Le réseau constitue aussi un empilement de parallélépipèdes identiques construit sur les trois vecteurs de base  $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$  linéairement indépendants (Figure II-4a). Ces parallélépipèdes aux sommets desquels sont les nœuds sont appelés mailles. Le réseau d'un cristal donné est unique, mais le choix des trois vecteurs de base ne l'est pas. Il est donc possible de définir plusieurs mailles ne présentant pas la même symétrie (Figure II-4b).

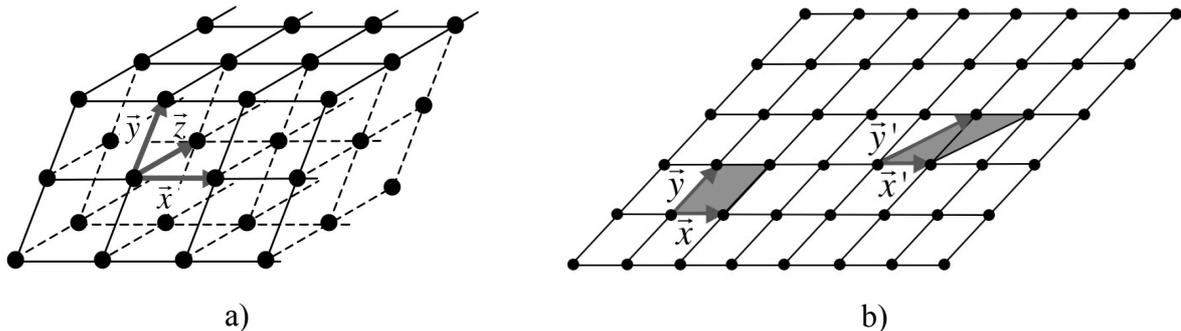


Figure II-4 : Illustration des mailles dans un cristal

Une maille bâtie sur les trois vecteurs de base est dite *élémentaire* si elle contient un nœud du réseau à chaque sommet, mais aucun nœud à l'intérieur de son volume ou de l'une de ses faces. Cette maille sera dite *réduite* si elle est basée sur les vecteurs de base les plus petits. Une maille *multiple* contient plusieurs nœuds et ses axes sont parallèles aux directions de symétrie. Elle permet, dans certains cas, de souligner la symétrie du cristal.

Par exemple, la maille du réseau cubique à faces centrées (cfc) est obtenue en plaçant un nœud au centre des six faces de la maille du réseau cubique primitif (Figure II-5a). La maille cubique est donc quadruple puisqu'elle contient quatre nœuds (Figure II-5b). La maille simple construite avec les vecteurs reliant un sommet aux centres des trois faces qui s'y croisent est un rhomboèdre (parallélépipède dont les faces sont des losanges).

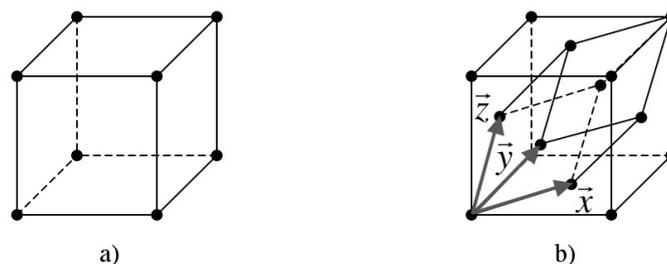
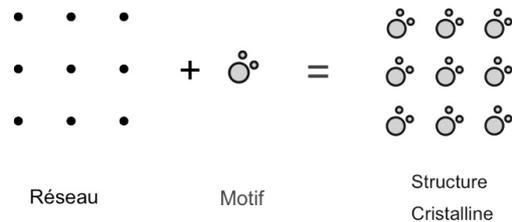


Figure II-5 : Réseau cubique à faces centrées

## II.2 STRUCTURES ATOMIQUES D'UN CRISTAL

La structure atomique d'un cristal est complètement déterminée par la connaissance de son réseau (forme et dimensions de la maille) et du motif présent aux nœuds (Figure II-6). Le motif le plus simple est un atome unique.



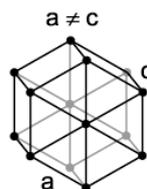
**Figure II-6 : Structure atomique d'un cristal**

De nombreux métaux ont un réseau cubique (maille élémentaire = cube de côté  $a$ ) dont les nœuds sont occupés par un atome seul. L'Aluminium ( $a=4,041\text{Å}$ ) ou le Cuivre ( $a=3,61\text{Å}$ ) possèdent un atome supplémentaire sur le milieu de chacune de leurs faces (Figure II-7a) tandis que pour le Chrome ( $a=2,91\text{Å}$ ) ou le Molybdène ( $a=3,147\text{Å}$ ), il se situe au milieu de la maille cubique (Figure II-7b).



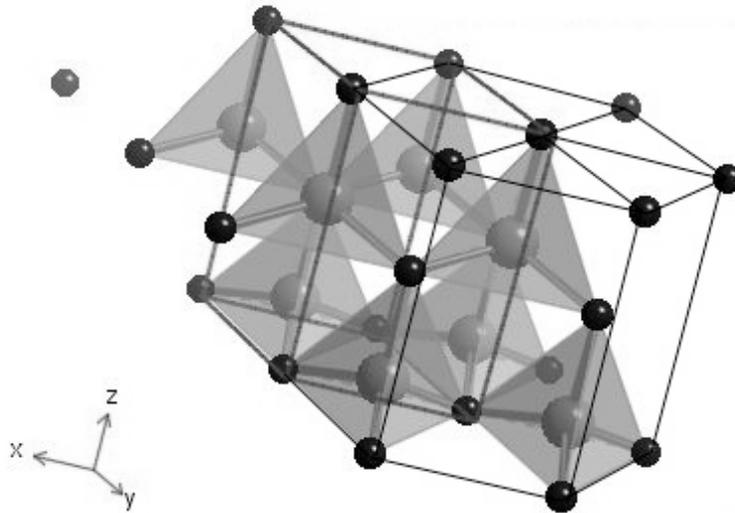
**Figure II-7 : Structure atomique cubique de certains métaux**

D'autres métaux comme le Titane ( $a=2,9508\text{Å}$  et  $c=4,6855\text{Å}$ ) ou le Ruthénium ( $a=2,7059\text{Å}$  et  $c=4,2815\text{Å}$ ) ont un réseau hexagonal compact. Les plans réticulaires sont normaux à l'axe  $z$ .



**Figure II-8 : Structure atomique hexagonale de certains métaux**

Les matériaux piézoélectriques comme l'AlN ou le ZnO possèdent aussi un réseau hexagonal compact, mais plus complexe appelée Wurtzite.



**Figure II-9 :** Structure atomique hexagonale Wurtzite de l'AlN et du ZnO

Sur la Figure II-9, les atomes d'Azote pour l'AlN et d'Oxygène pour le ZnO sont les plus petits et occupent les sommets de l'hexagone. Les plans d'atomes d'Aluminium et de Zinc ont aussi une maille hexagonale mais décalée. La maille élémentaire hexagonale n'est pas unique, grâce à la symétrie de la structure cristalline, une maille élémentaire trigonale possédant un atome d'Aluminium (d'oxygène) en son centre et des atomes d'Azote (de Zinc) aux sommets peut être considérée.

### II.3 SYMETRIES D'ORIENTATION DES CRISTAUX

Les propriétés physiques et chimiques d'un cristal dépendent de la nature des atomes qui constituent le motif, mais aussi de leur arrangement dans la maille élémentaire. Des cristaux présentant une composition chimique différente peuvent présenter un comportement semblable sous l'effet d'une même excitation physique. Ceci permet de définir des symétries ponctuelles sans tenir compte des espèces chimiques et de classer les cristaux suivant la forme de leur réseau.

La symétrie ponctuelle représente l'ensemble des opérations de symétrie qui laissent invariantes la morphologie et les propriétés physique d'un cristal. Les éléments de symétrie ponctuelle sont de deux types.

- Les opérations de symétrie directe, réduites aux axes de rotation directs, amènent une figure en coïncidence avec elle-même par une rotation d'un angle égal à  $\frac{2\pi}{n}$  autour d'un axe de rotation noté  $A_n$  avec :  $n = \{1,2,3,4,6\}$  dans les cristaux.
- Les opérations de symétrie inverse, ou roto-inversions, effectuent une rotation de  $\frac{2\pi}{n}$  autour d'un axe suivie d'une inversion par un point de l'axe de rotation. Elles sont notées  $\bar{A}_n$  avec :  $n = \{1,2,3,4,6\}$ .  $n=1$  correspond à une simple inversion. Lorsque  $n=2$ , l'opération est une rotation de  $\pi$  suivie d'une inversion par rapport à un plan perpendiculaire à l'axe  $\bar{A}_2$ . Elle correspond donc à une inversion par rapport à un plan miroir. Elle est le plus souvent notée  $m$ .

La forme et l'agencement des atomes de la maille élémentaire permettent de classer les cristaux suivant sept classes de symétrie ponctuelle. Comme deux réseaux différents peuvent présenter la même symétrie, le nombre de systèmes cristallins s'élève finalement à quatorze. Ces derniers s'appellent les réseaux de Bravais. En plus des sept systèmes primitifs, notés P, se rajoutent les réseaux centrés notés I, à une face centrée notés A, B ou C, et à faces centrées notés F. Les paramètres de chaque maille sont les distances **a**, **b**, **c** et les angles  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ .

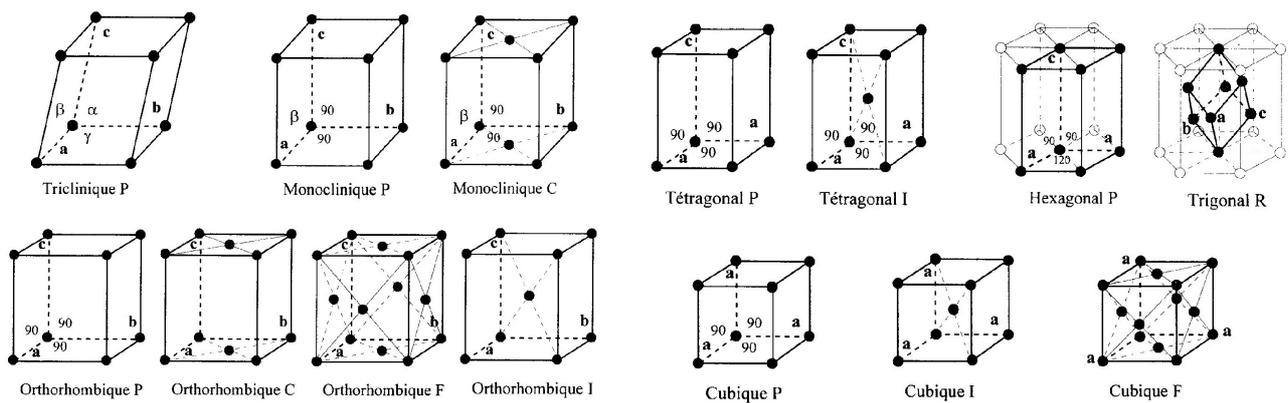


Figure II-10 : Les quatorze réseaux de Bravais

La structure de l'AlN ou du ZnO (Figure II- 9) appartient à la classe hexagonale de symétrie  $6mm$  (Figure II-10). Elle possède donc un axe de symétrie d'ordre 6 (sénaire) et deux familles de trois plans miroirs passant par l'axe  $A_6$ .

Les dimensions de la maille hexagonale sont :

- Pour l'AlN  $a=3,111\text{\AA}$  et  $c=4,978\text{\AA}$  soit  $c/a=1,600$
- Et pour le ZnO  $a=3,24\text{\AA}$  et  $c=5,19\text{\AA}$  soit  $c/a=1,602$

Dans les deux cas la valeur du rapport  $c/a$  est très proche de celle de la structure hexagonale compacte idéale (1,63). Les ions Azote ou Oxygène forment un assemblage compact dont la moitié du volume est occupée par les ions Aluminium ou Zinc. L'axe sénaire est polaire.

L'étude des symétries montre que plusieurs directions possédants les mêmes propriétés cristallines peuvent exister. Les propriétés physiques sont donc identiques dans ces directions. Un cristal possédant les mêmes caractéristiques physiques dans toutes les directions est dit isotrope. Tous les cristaux à maille cubique sont isotropes. Les autres systèmes ont une maille qui induit des propriétés physiques anisotropes. Néanmoins, le jeu des symétries permet de réduire l'impact de cette propriété pour certains cristaux. La rigidité mécanique, la permittivité ou le couplage piézoélectrique sont des paramètres physiques qui dépendent de la forme de la maille élémentaire et de la répartition des ions dans les cristaux ioniques. Ces grandeurs sont représentées par des tenseurs.

Un tenseur est un outil mathématique qui permet d'exprimer le caractère anisotrope d'un solide. Un tenseur d'ordre 0 est représenté par un scalaire, un tenseur d'ordre 1, par un vecteur et un tenseur d'ordre 2, par une matrice. Les tenseurs d'ordre plus élevés ne peuvent plus être représentés de cette manière. Ils peuvent être multipliés par un scalaire et additionnés s'ils sont de même ordre. Il existe des opérations propres aux tenseurs comme le produit tensoriel, le produit tensoriel contracté ou doublement contracté. Le produit d'un tenseur d'ordre  $n$  par un tenseur d'ordre  $p$  donne un tenseur d'ordre  $(n+p)$ , le produit tensoriel contracté une fois donne un tenseur d'ordre  $(n+p-2)$  et d'ordre  $(n+p-4)$  s'il est contracté deux fois.

Les tenseurs sont donc des outils très commodes pour représenter la déformation d'un solide soumis à une contrainte mécanique, le déplacement électrique induit par un champ électrique ou le couplage entre la déformation d'un solide piézoélectrique soumis à un champ électrique. Toute la théorie de la piézoélectricité est basée sur cet outil mathématique. Néanmoins, la symétrie des cristaux piézoélectriques permet de n'avoir à considérer que des tenseurs d'ordre 2.

### III MECANIQUE DES SOLIDES DEFORMABLES

Dans un cristal, une cause appliquée suivant une direction induit généralement un effet orienté dans une autre direction. Par exemple, les forces appliquées sur la surface d'un solide se répartissent dans tout son volume et le déforment de manières différentes suivant les directions. Si le milieu est homogène, il est possible d'établir les caractéristiques du volume élémentaire et d'en déduire le comportement macroscopique du solide. Ainsi, une théorie des solides déformables, utilisant les tenseurs, peut être formulée. Elle fait intervenir deux tenseurs de rang deux : les contraintes et les déformations, reliés par la loi de Hooke via le tenseur des rigidités élastiques.

#### III.1 CONTRAINTES

Soit un corps (C) sollicité par des forces extérieures et coupé en deux parties (A et B) par un plan qui détermine une surface (S). L'action de B sur A est représentée par une force élastique  $\vec{F}$  répartit sur (S).

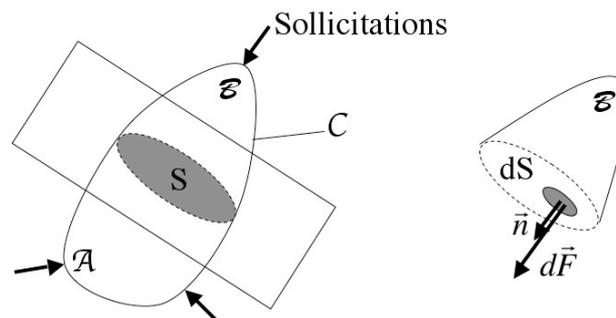


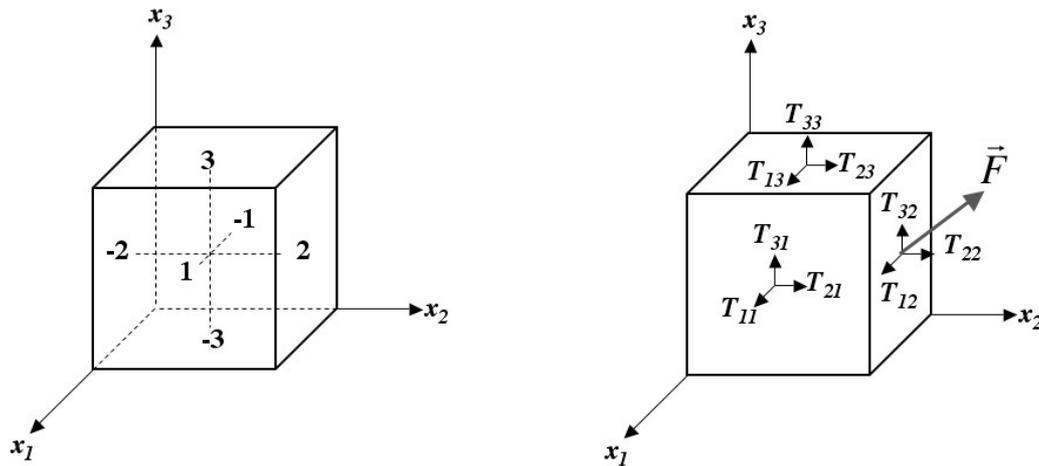
Figure II-11 : Corps soumis à une sollicitation

Sur chaque élément  $dS$  de  $S$  s'applique alors une quantité  $d\vec{F}$  et la contrainte  $\vec{T}$  est définie en chaque point de  $S$  par :

$$\vec{T} = \lim_{dS \rightarrow 0} \left( \frac{d\vec{F}}{dS} \right) \quad (\text{II.1})$$

Cette contrainte représente la superposition des forces de cohésion du solide (contraintes propres) et les sollicitations extérieures, si elles existent (contraintes de charge). Elle peut être projetée sur le repère défini par  $dS$  et sa normale  $\vec{n}$ . La composante suivant  $\vec{n}$  s'appelle la contrainte normale. Si elle est positive, c'est une tension et, si elle est négative, c'est une pression. La composante tangentielle au plan de  $dS$  s'appelle une cisssion.

Un cristal est un milieu homogène. Les forces élastiques se répartissent donc uniformément sur toute surface intérieure au solide. Pour définir les contraintes mécaniques, une méthode consiste à écrire les conditions d'équilibre sur un volume élémentaire  $V$  intérieur au solide soumis à des forces appliquées sur ses faces et à une densité de force  $f_i$  par unité de volume. Les faces sont numérotées de 1 à 3 en fonction de l'axe qui leur est normal.



**Figure II-12 : Numérotation des faces du volume élémentaire et orientation des contraintes**

La résultante  $\vec{F}$  des forces exercées sur le volume  $V$  est la somme des contraintes sur ses faces  $s_j$  et des forces exercées dans son volume suivant les directions  $x_i$ . À l'équilibre, les composantes  $F_i$  de  $\vec{F}$  s'écrivent :

$$F_i = \sum_{j=1}^{j=3} T_{ij} \cdot s_j + \int_V f_i dV = 0 \quad (\text{II.2})$$

L'état de contrainte est donc décrit par le tenseur symétrique  $T_{ij}$  et, en l'absence de tensions mécaniques internes et de couples extérieurs, il s'exprime comme le rapport d'une force sur une surface :

$$T_{ij} = \frac{F_i}{s_j} = T_{ji} \quad (\text{II.3})$$

La contrainte est donc équivalente à une pression et s'exprime en Pascal (Newton/m<sup>2</sup>). Les termes  $T_{ii}$  correspondent à des contraintes normales (tractions ou compressions) appliquées sur les deux faces opposées et les termes  $T_{ij}$  ( $i \neq j$ ), à des contraintes tangentielles (cisaillement).

À partir de la relation (II.2), il est possible d'exprimer, en fonction du tenseur des contraintes, les conditions d'équilibre statique et dynamique.

- En statique, l'équation d'équilibre s'écrit :

$$\sum \vec{F} = \vec{0} \Rightarrow \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0 \quad (\text{II.4})$$

- En dynamique, l'application du principe fondamental de la dynamique permet d'établir l'équation fondamentale de l'élastodynamique des milieux solides continus. Elle s'écrit pour un volume élémentaire :

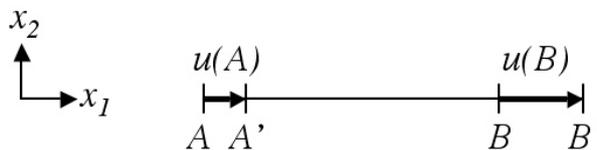
$$\boxed{\sum \vec{F} = m\vec{\gamma} \Rightarrow \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}} \quad (\text{II.5})$$

Où  $u_i$  représente de déplacement mécanique et  $\rho$  la masse volumique.

### III.2 DEFORMATIONS

Lorsqu'un solide est soumis à des forces extérieures, ses particules se déplacent les unes par rapport aux autres et créent une déformation macroscopique. Les contraintes propres du matériau tendent à s'opposer à ces forces, de manière à ramener le solide dans son état de repos. La déformation est dite *élastique* s'il reprend sa forme initiale, sinon elle est qualifiée de *plastique*.

Pour une déformation unidimensionnelle (Figure II-13), la déformation correspond à un allongement relatif et à une diminution des dimensions latérales. Dans le cas du segment  $[AB]$  l'allongement suivant l'axe  $x_1$  amène A en A' et B en B'.



**Figure II-13 : Allongement unidimensionnel**

La déformation  $S_{11}$  s'exprime :

$$S_{11} = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{[A'B'] - [AB]}{[AB]}$$

Sachant que :

$$[AA'] = u_1(A) \quad \text{et} \quad [BB'] = u_1(B)$$

Alors :

$$S_{11} = \frac{u_1(B) - u_1(A)}{[AB]}$$

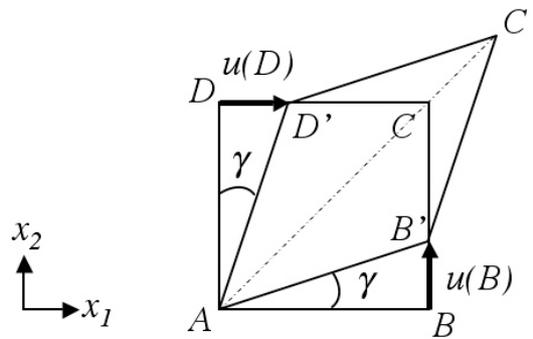
En petites déformations :

$$u_1(B) \approx u_1(A) + \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \cdot [AB]$$

Ainsi, :  $S_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}$  ou plus généralement :

$$S_{kk} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (\text{II.6})$$

Pour un cisaillement pur, le carré ABCD de la Figure II-14 se transforme en un losange AB'C'D' symétrique suivant la première bissectrice du plan.



**Figure II-14 : Cisaillement pur**

La tangente de l'angle  $\gamma$  vaut :

$$\tan(\gamma) = \frac{u(B)}{[AB]} = \frac{u(D)}{[AD]}$$

Pour les petites déformations :

$$\tan(\gamma) \approx \gamma \quad \text{et} \quad \begin{aligned} u(B) &\approx u_2(A) + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \cdot [AB] \\ u(D) &\approx u_1(A) + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \cdot [AD] \end{aligned}$$

Comme  $u_1(A) = u_2(A) = 0$ ,

$$\gamma \approx \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \quad \text{et} \quad \gamma \approx \frac{\partial u_1}{\partial x_2}$$

En prenant la moyenne, il vient :

$$\gamma = S_{12} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) = S_{21}$$

De manière générale, le tenseur des déformations s'écrit :

$$S_{kl} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) = S_{lk} \quad (\text{II.7})$$

La déformation est donc une grandeur sans unité. Elle est représentée par le tenseur symétrique  $S_{kl}$  dont les termes diagonaux  $S_{kk}$  représentent l'allongement relatif dans la direction  $x_k$  et dont les autres termes  $S_{kl}$  ( $k \neq l$ ) représentent la demi variation de l'angle droit en supposant un petit volume de matière cubique avant déformation.

### III.3 RELATION CONTRAINTES DEFORMATIONS : LOI DE HOOKE

La loi de Hooke (1635-1703) exprime le comportement des solides soumis à une déformation élastique de faible amplitude. Elle fut énoncée pour obtenir une théorie de l'allongement longitudinal des ressorts puis généralisée au solide anisotrope en trois dimensions. Elle met en évidence la linéarité (proportionnalité des contraintes et des déformations) et l'élasticité des solides soumis à de petites déformations.

La loi de Hooke généralisée s'écrit :

$$T_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 c_{ijkl} S_{kl}$$

Soit, avec la notation d'Einstein (sommation de 1 à 3 sur les indices muets) :

$$\boxed{T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl}} \quad (\text{II.8})$$

Les coefficients  $c_{ijkl}$  sont les composantes d'un tenseur de rang quatre appelé tenseur des rigidités élastiques. Un tenseur de rang quatre possède  $3^4=81$  composantes. Comme les tenseurs  $T_{ij}$  et  $S_{kl}$  sont symétriques, le tenseur des rigidités est aussi symétrique et certaines considérations thermodynamiques comme la relation de Maxwell (non explicitée ici) permettent de réduire le nombre de composantes indépendantes à 21.

La loi de Hooke peut donc s'écrire :

$$\begin{pmatrix} T_{11} \\ T_{22} \\ T_{33} \\ T_{23} \\ T_{13} \\ T_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{1111} & c_{1122} & c_{1133} & c_{1123} & c_{1113} & c_{1112} \\ c_{1122} & c_{2222} & c_{2233} & c_{2223} & c_{2213} & c_{2212} \\ c_{1133} & c_{2233} & c_{3333} & c_{3323} & c_{3313} & c_{3312} \\ c_{1123} & c_{2223} & c_{3323} & c_{2323} & c_{2313} & c_{2312} \\ c_{1113} & c_{2213} & c_{3313} & c_{2313} & c_{1313} & c_{1312} \\ c_{1112} & c_{2212} & c_{3312} & c_{2312} & c_{1312} & c_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} \\ S_{22} \\ S_{33} \\ 2S_{23} \\ 2S_{13} \\ 2S_{12} \end{pmatrix}$$

Ou en fonction des déplacements mécaniques :

$$\boxed{T_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}} \quad (\text{II.9})$$

Il est possible de simplifier cette écriture en adoptant la notation de 1 à 6, basée sur la norme ANSI/IEEE 176–1987, avec les axes de compression/traction notés de 1 à 3 et les axes de cisaillement notés de 4 à 6.

La correspondance est la suivante :

$$(11) \leftrightarrow 1 \quad (22) \leftrightarrow 2 \quad (33) \leftrightarrow 3$$

$$(23) \text{ ou } (32) \leftrightarrow 4 \quad (13) \text{ ou } (31) \leftrightarrow 5 \quad (12) \text{ ou } (21) \leftrightarrow 6$$

On obtient alors :

$$\begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{pmatrix}$$

$$\text{avec :} \quad S_1=S_{11} \quad S_2=S_{22} \quad S_3=S_{33} \quad S_4=2S_{23} \quad S_5=2S_{13} \quad S_6=2S_{12}$$

Cette notation est souvent utilisée dans la littérature pour les différentes composantes du tenseur des rigidités. Néanmoins, il est possible de rencontrer d'autres règles de contraction d'indice. De plus, pour les matériaux isotropes, les constantes d'élasticité sont souvent données sous la forme du module d'Young (E), du coefficient de Poisson ( $\nu$ ) et du module de cisaillement (G) ou des constantes de Lamé ( $\lambda$  et  $\mu$ ).

#### III.4 ÉLASTICITE DES MATERIAUX ISOTROPES ET DU SYSTEME HEXAGONAL

Les cristaux du système triclinique possèdent effectivement les 21 composantes indépendantes du tenseur des rigidités. À l'inverse, les solides isotropes du système cubique possèdent le plus haut degré de symétrie et leurs propriétés mécaniques peuvent être décrites avec seulement deux coefficients.

Dans les résonateurs BAW, les matériaux généralement utilisés sont soit isotropes (substrat ou métal des électrodes) soit du système hexagonal (AlN ou ZnO). Les symétries de leur maille élémentaire permettent de réduire le nombre de composantes indépendantes.

### III.4.1 MATERIAUX ISOTROPES

Les propriétés d'un matériau isotrope sont, par définition, identiques dans toutes les directions. Quelle que soit la face du volume élémentaire soumis à une contrainte, l'allongement relatif et la variation transversale des dimensions seront les mêmes. La déformation mécanique d'un solide isotrope peut donc être caractérisée par deux grandeurs élastiques.

- Le **module d'Young (E)** ou module d'élasticité longitudinale représente la proportionnalité entre la contrainte axiale et la déformation.

$$E_x = \frac{T_1}{S_1} \quad \text{avec } T_2 \text{ à } T_6 \text{ nulles}$$

$$E_y = \frac{T_2}{S_2} \quad \text{avec } T_1 \text{ à } T_6 \text{ nulles}$$

$$E_z = \frac{T_3}{S_3} \quad \text{avec } T_1 \text{ à } T_6 \text{ nulles}$$

Pour un matériau isotrope à maille cubique,  $E_x = E_y = E_z = E$ .

- Le **coefficient de Poisson (ν)** est le rapport entre la déformation longitudinale et les déformations transversales. Il représente la contraction des faces non contraintes d'un échantillon soumis à une force de traction.

$$\nu_{xy} = -\frac{S_1}{S_2} \quad \text{avec } T_2 \text{ à } T_6 \text{ nulles}$$

$$\nu_{yz} = -\frac{S_2}{S_3} \quad \text{avec } T_1 \text{ et } T_3 \text{ à } T_6 \text{ nulles}$$

$$\nu_{xz} = -\frac{S_1}{S_3} \quad \text{avec } T_1, T_2 \text{ et } T_4 \text{ à } T_6 \text{ nulles}$$

Pour un matériau isotrope à maille cubique,  $\nu_{xy} = \nu_{yz} = \nu_{xz} = \nu$ .

Ces deux paramètres représentent le comportement d'un matériau soumis à une contrainte axiale. Il est possible de rendre compte d'une sollicitation plus complexe en considérant le tenseur des rigidités. Pour un matériau isotrope, seulement deux composantes sont indépendantes et seuls les axes de traction/compression et les axes de cisaillement de la diagonale du tenseur sont non nuls.

Le tenseur des rigidités pour un solide isotrope s'écrit :

$$(c_{\alpha\beta}) = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \end{vmatrix}$$

$$\text{Avec : } c_{11} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad \text{et} \quad c_{12} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$$

Pour les matériaux isotropes, le module d'Young et le coefficient de Poisson sont les constantes les plus fréquemment données dans la littérature. Ces paramètres sont difficilement exploitables directement dans les outils de simulation puisque les matériaux piézoélectriques utilisés sont anisotropes. Il est donc préférable de toujours convertir ces valeurs et de définir le tenseur des rigidités.

### III.4.2 MATERIAUX DU SYSTEME HEXAGONAL 6MM

Les matériaux du système hexagonal 6mm sont anisotropes. Ils possèdent un axe de rotation d'ordre 6 (sénaire) orienté suivant la direction  $z$  et deux familles de trois plans miroirs tangents à l'axe sénaire, disposés tous les  $\frac{2\pi}{n}$  ( $n=1$  à 6). Une rotation du repère autour de l'axe  $z$  (direction 3) ne change donc pas les caractéristiques élastiques du matériau. Ainsi, les plans perpendiculaires à l'axe  $z$  ont des propriétés élastiques isotropes ( $c_{11} = c_{22}$ ) et tous les plans passant par cet axe sont équivalents ( $c_{13} = c_{23}$ ). Le tenseur des rigidités pour un solide de classe 6mm s'écrit alors :

$$(c_{\alpha\beta}) = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \end{vmatrix}$$

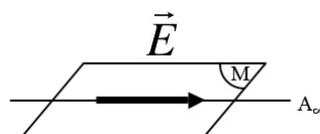
## IV COUPLAGE ELECTRIQUE MECANIQUE

Pour de faibles amplitudes de déplacements mécaniques, la déformation élastique et la contrainte sont liées par une relation linéaire (tensorielle). Au repos, les contraintes propres dans le solide s'équilibrent. Lorsqu'une force est appliquée sur sa surface, les contraintes de charge se superposent aux contraintes propres et le matériau se déforme. Dans un cristal ionique, les nœuds du réseau sont occupés par des motifs ayant une charge électrique non nulle. Au repos, l'agencement de ces ions dans la maille élémentaire s'effectue de manière à ce que la charge électrique totale soit nulle. Cependant, cette répartition spatiale peut ne pas être symétrique. La déformation liée à une contrainte déplace les ions de leur position de repos et crée donc dans ce cas un déséquilibre électrique qui se manifeste par l'apparition d'un champ électrique. Macroscopiquement, le cristal se polarise sous l'effet d'une contrainte mécanique. C'est l'effet piézoélectrique direct. À l'inverse, si l'on applique un champ électrique, le solide se déforme. C'est l'effet piézoélectrique inverse.

### IV.1 SOLIDE PIEZOELECTRIQUE

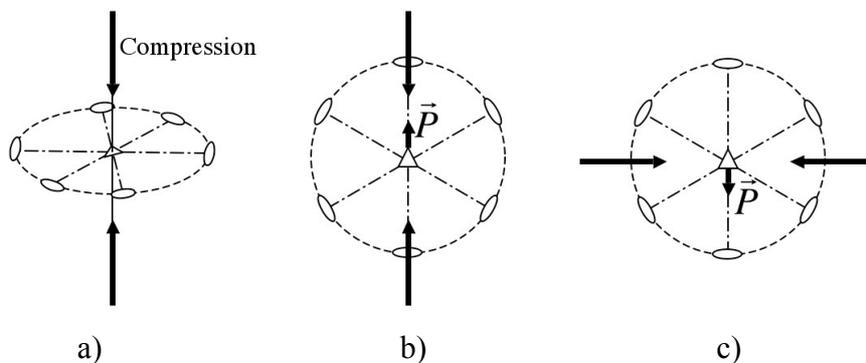
Un solide est donc piézoélectrique s'il se polarise électriquement sous l'action d'une contrainte mécanique et se déforme lorsqu'un champ électrique lui est appliqué. Ce phénomène physique n'est présent que dans les classes cristallines qui ne possèdent pas de centre de symétrie (Figure I-10). D'après le principe de Curie, « lorsque les causes d'un phénomène possèdent des éléments de symétrie, ces éléments de symétrie se retrouvent dans les effets (les effets pouvant être plus symétrique que les causes) ». Ainsi, l'application d'une contrainte (d'un champ électrique) suivant un axe particulier d'un matériau piézoélectrique crée un champ électrique (une déformation) si la symétrie du cristal est un sous-groupe de la symétrie du phénomène.

Un vecteur comme le champ électrique présente un axe de rotation infini  $A_\infty$  et une infinité de miroirs  $M$  passant par cet axe pour une direction donnée (Figure II-15). Le groupe de symétrie correspondant est donc  $A_\infty \infty M$ .



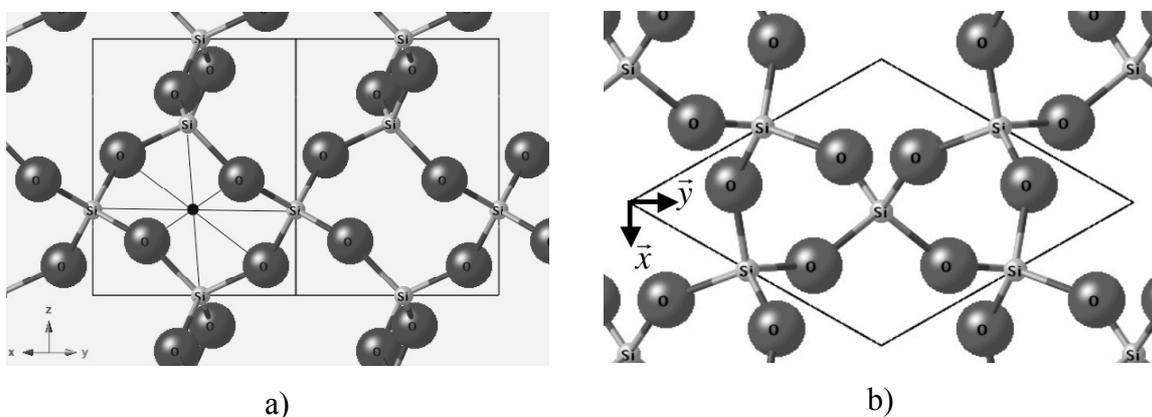
**Figure II-15 :** Symétrie du champ électrique

La direction suivant laquelle il faut appliquer une contrainte mécanique afin d'observer le phénomène piézoélectrique dans un cristal est déterminée par la symétrie de sa maille élémentaire. Par exemple, le quartz  $\alpha$  (classe 32) possède un axe d'ordre 3 (ternaire) suivant  $z$  et 3 axes d'ordre 2 (binaire) dans le plan  $xOy$  ( $A_33A_2$ ). L'application d'une contrainte suivant l'axe  $z$  (Figure II- 16a) n'entraîne pas de polarisation car la symétrie du cristal dans cette direction n'est pas un sous-groupe de celle du phénomène ( $A_\infty\infty M$ ). En effet, il ne possède pas de plan de symétrie tangent à l'axe ternaire. En revanche, l'application suivant un axe binaire (Figure II-16b) crée une polarisation car ( $A_20M$ ) est un sous-groupe de ( $A_\infty\infty M$ ). Idem pour une contrainte appliquée perpendiculairement à un des axes binaires et à l'axe ternaire ( $A_0M$ ) (Figure II-16c).



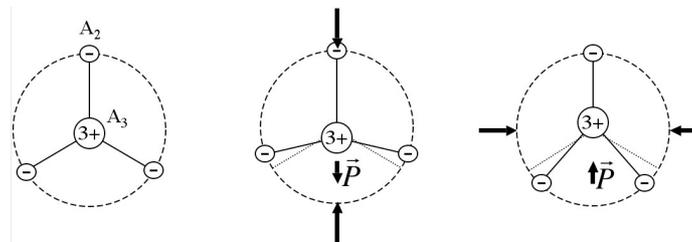
**Figure II-16 :** Symétrie d'orientation du Quartz

Ceci se vérifie en visualisant la répartition des charges dans la maille élémentaire suivant les différents axes (Figure II-17). La Figure II-17a montre que, suivant l'axe  $z$ , le quartz  $\alpha$  possède un centre de symétrie. Suivant les autres directions (Figure II-17b) il n'en possède pas.



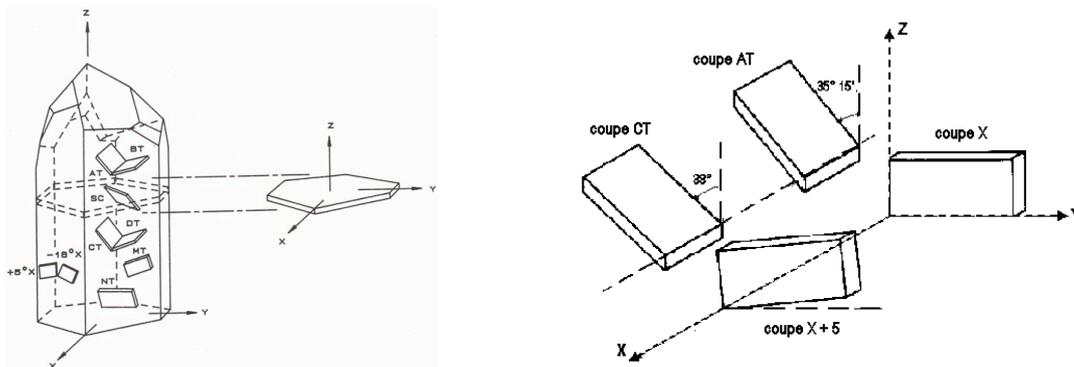
**Figure II-17 :** Structure cristalline du Quartz

Dans le cas plus simple d'un ensemble de trois dipôles (Figure II-18), disposés en étoile dans un plan et possédant la même symétrie que le quartz ( $A_3A_2$ ), la polarisation est évidente. L'application de la contrainte suivant  $A_3$  n'entraîne aucune polarisation alors que suivant  $A_2$  ou perpendiculairement à  $A_2$ , les barycentres des ions positifs (Si) et négatifs (O) ne coïncident plus.



**Figure II-18 :** Déformations dues au champ électrique

La piézoélectricité est donc un phénomène qui dépend totalement de la symétrie du cristal employé. Certains cristaux possèdent des axes privilégiés utilisés en fonction de l'application visée. Dans le cas du quartz, la direction  $z$  est appelée l'axe optique car elle ne possède aucune propriété piézoélectrique. La direction  $x$  s'appelle l'axe électrique et  $y$  l'axe mécanique. La coupe du cristal pour les lames des résonateurs est donc basée sur ces directions en fonction du mode de vibration souhaité (Figure II-19).



**Figure II-19 :** Définition de quelques coupes du Quartz

L'AlN et le ZnO ont une symétrie possédant un axe d'ordre 6 (sénaire) et deux familles de trois miroirs tangents à l'axe  $z$ . La symétrie d'orientation est donc  $A_63M'3M''$  (Figure II-20). Le  $\text{KNbO}_3$  possède un axe binaire et deux plans miroir suivant  $z$ . Il est donc de symétrie  $A_2M'M''$ . Pour ces deux classes, quelle que soit l'orientation, le matériau est piézoélectrique puisque chaque direction possède soit un plan miroir sans axe de rotation ( $x$  ou  $y$ ) soit un axe de rotation avec un miroir ( $z$ ). Dans les trois directions  $x, y, z$ , le système

hexagonal 6mm de l'AlN ou du ZnO et le système orthorhombique 2mm du KNbO<sub>3</sub> sont des sous-groupes du phénomène piézoélectrique. Le choix de l'axe piézoélectrique à privilégier pour des applications de résonateurs BAW est effectué en considérant le couplage électromécanique maximum.



**Figure II-20 :** Symétrie 6mm et structure wurtzite

Le phénomène piézoélectrique peut donc être vu comme un couplage du problème mécanique et du problème électrique. Il est donc possible de formuler une théorie basée sur la théorie des solides déformables et en y introduisant une partie électrique.

#### IV.2 MISE EN EQUATION DES MECANISMES PHYSIQUES

Le comportement des solides piézoélectriques peut être modélisé par l'introduction d'un terme tenant compte de l'aspect électrique du problème dans la loi de Hooke généralisée. Ce terme, appelé tenseur piézoélectrique, est nul pour un solide non-piézoélectrique. Il caractérise la linéarité entre la déformation élastique et le champ électrique dans toutes les directions du repère. Il peut être quantifié, comme suit, dans le cas unidimensionnel d'un cristal d'AlN. La structure hexagonale est constituée, suivant l'axe  $z$ , de plans d'atomes d'azote et d'aluminium alternés dont une rangée est représentée sur la Figure II-21.

Soient  $-q$  et  $+q$ , les charges effectives des ions azote et aluminium supposés reliés entre eux par des ressorts de constantes  $K_1$  et  $K_2$  modélisant les forces de cohésion entre atomes. La chaîne peut être divisée en mailles élémentaires de longueur  $(a)$  comportant deux dipôles de moments  $\frac{q}{2}(a-b)$  et  $-\frac{q}{2}b$  (un atome d'aluminium étant partagé par deux mailles et un atome d'azote étant distribué sur les deux dipôles). Le moment dipolaire de la maille est donc :  $p_0 = \frac{q}{2}(a-2b)$  et celui de  $n$  mailles  $P_0 = n\frac{q}{2}(a-2b)$ , le champ électrostatique généré par un ensemble de charge étant linéaire. Au repos, si  $b$  est différent de  $\frac{a}{2}$ ,  $P_0$  n'est pas nulle. Le corps présente alors une polarisation spontanée, il est dit polaire.

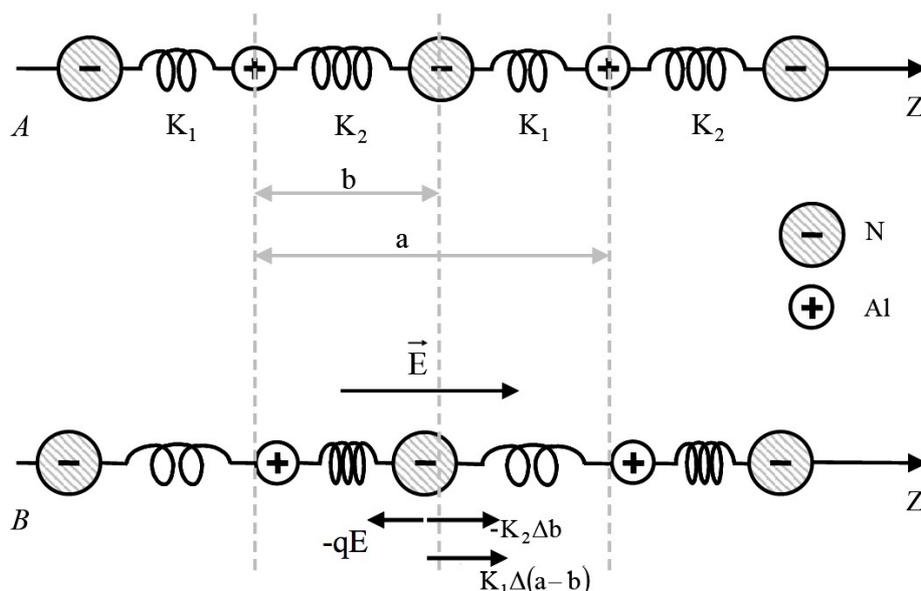


Figure II-21 : Piézoélectricité de l'AlN

Sous l'action d'une contrainte mécanique suivant l'alignement, les distances interatomiques varient et une polarisation est induite. C'est l'effet piézoélectrique direct.

$$P = \Delta P_0 = n \frac{q}{2} (\Delta a - 2\Delta b) \quad (\text{II.10})$$

À l'inverse, l'application d'un champ électrique  $\vec{E}$  suivant l'alignement provoque le déplacement des ions et une déformation globale de la chaîne. C'est l'effet piézoélectrique inverse. Dans ce cas, l'équilibre statique référencé sur l'atome d'azote s'écrit :

$$\sum \vec{F} = 0 \Rightarrow -q\vec{E} + K_1\Delta(a-b) - K_2\Delta b = 0$$

On en déduit :

$$\Delta b = -\frac{qE}{K_1 + K_2} + \frac{K_1}{K_1 + K_2} \Delta a \quad (\text{II.11})$$

En introduisant (II.11) dans (II.10), on obtient :

$$P = n \frac{q}{2} \left( \frac{K_2 - K_1}{K_2 + K_1} \Delta a + \frac{2qE}{K_2 + K_1} \right)$$

P peut alors s'écrire :  $P = eS + \chi_{ion} E$  avec :  $S = \frac{\Delta a}{a}$

Le premier terme est proportionnel à la déformation S et représente la constante piézoélectrique :

$$e = n \frac{q}{2} \frac{K_2 - K_1}{K_2 + K_1} a$$

Le deuxième terme de  $P$  est proportionnel au champ électrique et représente la polarisabilité

ionique du cristal :

$$\chi_{ion} = \frac{nq^2}{K_2 + K_1}$$

Le déplacement électrique, en tenant compte de la susceptibilité électronique  $\chi_e$ , s'écrit alors :

$$\boxed{D = eS + \varepsilon^S E} \quad (\text{II.12})$$

avec :  $\varepsilon^S = \varepsilon_0 + \chi_{ion} + \chi_e =$  permittivité à déformation constante

Pour exprimer la contrainte mécanique  $T$ , on considère une section perpendiculaire à l'axe sénnaire. Cet axe étant hélicoïdal, deux rangées voisines sont décalées d'une demi période  $\frac{a}{2}$  (Figure II-20). Par conséquent, un plan perpendiculaire à l'axe  $A_6$  contient un nombre égal de ressorts de raideur  $K_1$  et  $K_2$ .

$T$  s'écrit donc :  $T = \frac{N}{2} [K_1 \Delta(a-b) + K_2 \Delta b]$  avec  $N =$  nombre de rangées par unité de surface.

Comme  $N = n.a$ ,  $T$  s'écrit :

$$T = \frac{n.a}{2} [K_1 \Delta a + (K_2 - K_1) \Delta b] \quad (\text{II.13})$$

En introduisant (II.11) dans (II.13), on obtient :  $T = \frac{n.a}{2} \left( \frac{2K_2 K_1}{K_2 + K_1} \Delta a - q \frac{K_2 - K_1}{K_2 + K_1} E \right)$

En posant :  $c^E = n.a^2 \frac{K_2 K_1}{K_2 + K_1}$ ,  $T$  peut s'écrire :

$$\boxed{T = c^E S - eE} \quad (\text{II.14})$$

Les équations (II.12) et (II.14) sont les équations constitutives de la piézoélectricité. Elles permettent de rendre compte des phénomènes direct et inverse. Elles généralisent aux matériaux piézoélectriques les équations de l'électromagnétisme et celle de la mécanique. En général, elles sont présentées sous la forme d'un système qui couple les équations.

$$\boxed{\begin{cases} T = c^E S - eE \\ D = eS + \varepsilon^S E \end{cases}} \quad (\text{II.15})$$

En réalité, la constante piézoélectrique est une des composantes d'un tenseur d'ordre 3. Comme les tenseurs des rigidités et des permittivités, il possède une forme particulière en fonction de la symétrie de la maille élémentaire du cristal.

### IV.3 ÉCRITURE TENSORIELLE

La généralisation à trois dimensions du système d'équations (II.15) permet de définir le tenseur piézoélectrique.

$$\boxed{\begin{cases} T_{ij} = c_{ijkl}^E S_{kl} - e_{kij} E_k \\ D_j = e_{jkl} S_{kl} + \varepsilon_{jk}^S E_k \end{cases}} \quad (\text{II.16})$$

Le tenseur piézoélectrique est un tenseur d'ordre 3. Il s'exprime en Coulomb par mètre carré (C/m<sup>2</sup>) puisque la déformation est sans unité. Comme  $S$  et  $T$  sont symétriques, il est symétrique par rapport à ses deux derniers indices. Il ne possède donc que 18 composantes rangés dans un tableau de 3 lignes et 6 colonnes. Il est à noter que dans l'expression de la contrainte, ce tenseur est transposé.

Les conditions de symétries de la maille élémentaire du matériau imposent une invariance des composantes du tenseur piézoélectrique suivant certaines directions voire leur nullité. La forme du tenseur pour un cristal hexagonal de symétrie 6mm (AlN, ZnO ou PZT) est la suivante :

$$e_{i\alpha} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (\text{II.17})$$

Il est invariant dans toutes les directions autour de l'axe sénaire et ne possède que trois composantes indépendantes.

Le tableau de la Figure II-23 regroupe la forme des tenseurs des rigidités, des permittivités et des constantes piézoélectriques des cristaux appartenant aux différentes classes de symétrie ponctuelle. Les éléments sont disposés selon le modèle de la Figure II-22.

$c_{11}$	$c_{12}$	.	.	.	.		$e_{11}$	$e_{21}$	$e_{31}$
$c_{12}$	$c_{22}$	.	.	.	.		$e_{12}$	.	.
.	.	.	$c_{\alpha\beta}$	.	.		.	$e_{i\alpha}$	.
.	.	.	.	.	.		.	.	.
.	.	.	.	.	.		.	.	.
-----									
$e_{11}$	$e_{12}$	.	.	.	.		$\epsilon_{11}$	.	.
$e_{21}$	.	.	$e_{i\alpha}$	.	.		.	$\epsilon_{ij}$	.
$e_{31}$	.	.	.	.	.		.	.	.

Figure II-22 : Modèle du tableau de la Figure II-23

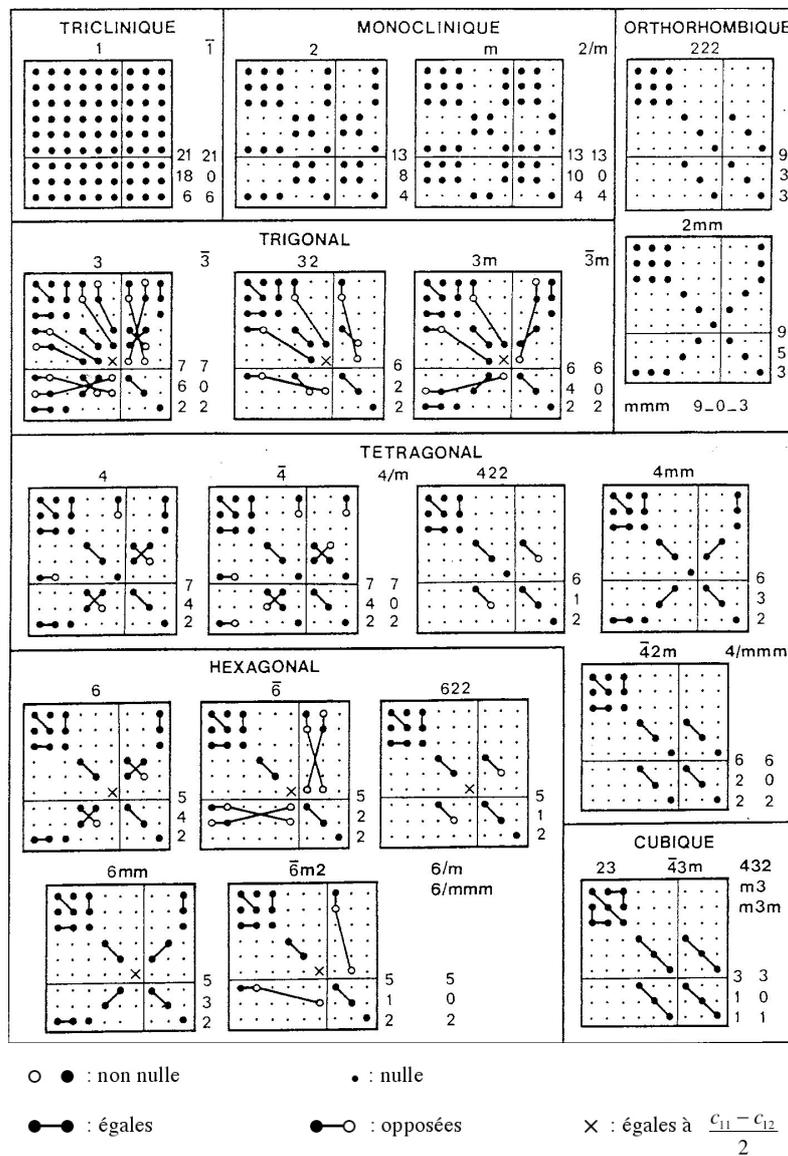


Figure II-23 : Tenseurs pour les différentes classes de cristaux

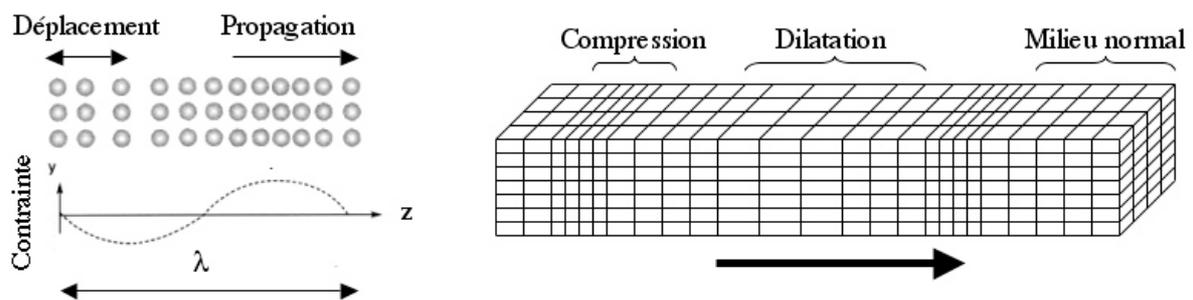
## V RESOLUTION EN ONDES PLANES : EQUATION DE CHRISTOFFEL

L'application d'un champ électrique sur un matériau piézoélectrique crée une déformation mécanique. Si cette excitation est variable, la réponse le sera aussi. Ainsi, des ondes acoustiques peuvent être générées par un signal électrique périodique. Leur propagation et leur polarisation dépendent alors des propriétés électromécaniques du matériau. La résolution du système d'équation (II.16) permet de déterminer la réponse du système et intègre déjà tous les éléments de symétrie du problème.

### V.1 ONDES PLANES ELASTIQUES DE VOLUME

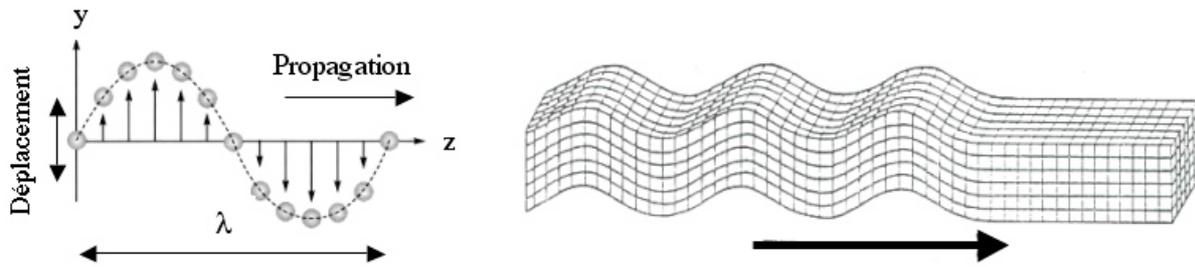
La propagation d'une onde acoustique dans un milieu matériel s'effectue de proche en proche par un déplacement de matière. Suivant une direction de propagation donnée, deux type d'ondes peuvent être identifiées.

Les ondes longitudinales ou ondes de compression (Figure II-24) possèdent une polarisation colinéaire à la direction de propagation. Les particules du milieu effectuent des va-et-vient autour de leur position de repos. Les plans parallèles contenant ces particules forment une succession de compressions et de dilatations et reproduisent à leur tour le mouvement du plan précédent. Comme leur cheminement est direct, ces ondes sont les plus rapides.



**Figure II-24 : Onde longitudinale ou onde de compression**

Les ondes transversales ou ondes de cisaillement (Figure II-25) possèdent une polarisation perpendiculaire à la direction de propagation. Les particules oscillent autour de leur position de repos en effectuant des allers et venus de part et d'autre de l'axe de propagation. Chaque point reproduit à son tour le mouvement du point précédent. Les plans contenant les particules glissent les uns par rapport aux autres en conservant leurs distances. Elles sont plus lentes qu'une onde longitudinale.



**Figure II-25 : Onde transversale ou onde de cisaillement**

Ces ondes existent dans les matériaux isotropes et, suivant des directions particulières, dans les matériaux anisotropes. En général, les ondes acoustiques sont des combinaisons linéaires de ces deux types d'ondes. Dans les matériaux piézoélectriques, une combinaison des trois ondes peut se propager : une onde quasi longitudinale, faisant un angle non nul avec la direction de propagation, et deux ondes transversales, une dite rapide et une un peu plus lente.

## V.2 APPROXIMATION QUASI STATIQUE

Dans les solides piézoélectriques, les ondes élastiques et électromagnétiques sont couplées. Pour traiter le problème de propagation, il faut donc résoudre à la fois les équations de Maxwell et l'équation de l'élastodynamique (II.5). Les solutions sont des ondes mixtes, c'est-à-dire des ondes élastiques accompagnées d'un champ électrique et des ondes électromagnétiques accompagnées d'une déformation mécanique. La vitesse du premier type d'ondes est environ  $10^5$  fois plus faible que celle des ondes électromagnétiques. Le champ électrique ne crée donc qu'un champ magnétique très faible et très lent. L'énergie électromagnétique est alors négligeable. L'équation de Maxwell-Faraday permet d'écrire :

$$\overline{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cong 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{E} = -\overline{grad} \Phi$$

Cette approximation quasi statique permet d'exprimer le champ électrique à partir d'un potentiel statique.

En notation tensorielle, cette équation devient :

$$\boxed{E_k = -\frac{\partial \Phi}{\partial x_k}} \quad (\text{II.18})$$

Pour le second type d'onde, l'énergie élastique est très faible. Le couplage des ondes élastiques et électromagnétiques est finalement assez faible pour pouvoir traiter leur propagation de manière indépendante. Ici, seule la propagation des ondes élastiques nous intéresse.

### V.3 ÉQUATION DE CHRISTOFFEL GENERALISEE

Pour la partie mécanique, il faut considérer l'équation de l'élastodynamique (II.5) rappelée ci-dessous.

$$\sum \vec{F} = m\vec{\gamma} \Rightarrow \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}$$

Pour la partie électrostatique, nous disposons de l'équation de Maxwell-Faraday (II.18) et de l'équation de Poisson (II.19) pour un milieu isolant.

$$\text{Div} \vec{D} = 0 \quad \text{soit} \quad \frac{\partial D_j}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{II.19})$$

Le couplage entre les deux domaines est effectué par les équations constitutives de la piézoélectricité (II.16) rappelée ci-dessous

$$\begin{cases} T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} - e_{kij} E_k \\ D_j = e_{jkl} S_{kl} + \epsilon_{jk} E_k \end{cases} \quad \text{et, d'après l'équation (II.7), on a : } S_{kl} = \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$$

En introduisant (II.18) dans (II.5), on obtient pour un milieu sans contraintes internes :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j \partial x_k} \quad (\text{II.20})$$

En introduisant (II.18) et (II.19) dans (II.16), on obtient :

$$0 = e_{jkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} - \epsilon_{jk} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j \partial x_k} \quad (\text{II.21})$$

Finalement, en substituant le potentiel de (II.21) dans (II.20), il vient :

$$\boxed{\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \left( c_{ijkl} + \frac{e_{kij} \cdot e_{jkl}}{\epsilon_{jk}} \right) \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}} \quad (\text{II.22})$$

Les constantes :  $\tilde{c}_{ijkl} = c_{ijkl} + \frac{e_{kij} \cdot e_{jkl}}{\epsilon_{jk}}$  s'appellent les constantes élastiques « durcies ». Elles permettent de rendre compte du couplage électrique-mécanique et généralisent l'équation de Christoffel aux matériaux piézoélectriques.

Cherchons une solution générale en ondes planes harmoniques, de fréquence angulaire  $\omega$  et se propageant dans la direction  $x_3$  (axe  $z$ ) à la vitesse  $v$ . Le déplacement mécanique s'écrit :

$$u_i = A_i e^{j(\omega t - kx_3)} \quad \text{avec : } k = \frac{\omega}{v}$$

Les fronts d'ondes sont infinis et d'amplitude constante suivant  $x_1$  et  $x_2$ . Tous les termes dérivés ( $\frac{\partial}{\partial x_1}$  et  $\frac{\partial}{\partial x_2}$ ) sont donc nuls. La relation (II.22) se réduit à :

$$\omega^2 \rho u_i = \tilde{c}_{i3k3} k^2 u_k$$

$$\text{Soit : } \tilde{c}_{i3k3} A_k - \rho v^2 A_i = 0 \quad (\text{II.23})$$

Sous forme matricielle avec indices contractés, l'équation (II.23) s'écrit :

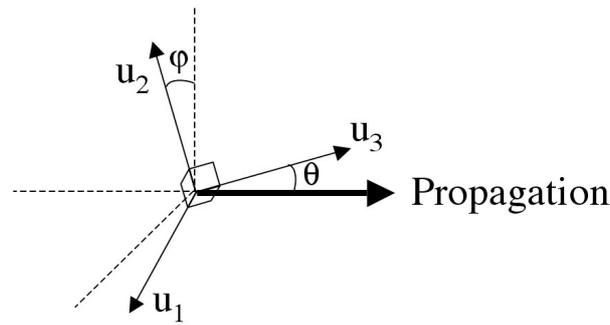
$$[\tilde{\Gamma}][A] = [0] \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} (\tilde{c}_{55} - \rho v^2) & \tilde{c}_{54} & \tilde{c}_{53} \\ \tilde{c}_{45} & (\tilde{c}_{44} - \rho v^2) & \tilde{c}_{43} \\ \tilde{c}_{35} & \tilde{c}_{34} & (\tilde{c}_{33} - \rho v^2) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = [0] \quad (\text{II.24})$$

Pour que ce système admette une solution non triviale, autre que  $A_1 = A_2 = A_3 = 0$ , il faut résoudre l'équation séculaire :

$$|\tilde{\Gamma}| = |\tilde{c}_{i3k3} - \rho v^2 \delta_{ik}| = 0 \quad (\text{II.25})$$

avec :  $\delta_{ik}$  = symbole de Kronecker

Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'équation (II.23) sont alors les vitesses de phase des ondes et leurs polarisations. De plus, comme le tenseur  $\tilde{c}_{i3k3}$  est symétrique, les valeurs propres sont réelles et les vecteurs propres orthogonaux. Ces ondes peuvent être déterminées quelle que soit la direction de propagation en généralisant ces équations à un vecteur normal quelconque (Figure II-26).



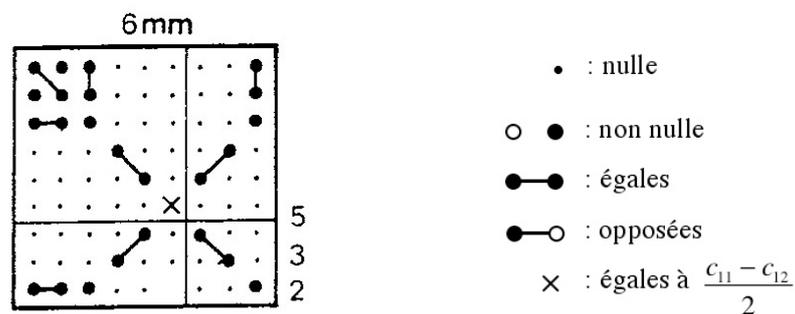
**Figure II-26 : Propagation dans un cristal anisotrope**

En conclusion, trois ondes planes dont les polarisations sont orthogonales peuvent se propager dans une même direction avec des vitesses différentes. Ici aussi, la symétrie du cristal utilisé est très importante car elle détermine la forme des tenseurs, le nombre de composantes indépendantes et les directions de couplage piézoélectrique. L'anisotropie du cristal fait qu'en général, les ondes planes générées ne sont pas normales à la direction de propagation. Celle dont la polarisation est la plus proche de l'axe de propagation est dite *quasi longitudinale* et les deux autres, *quasi transversales* (Figure II-26).

#### V.4 CAS DES MATERIAUX 6MM

##### V.4.1 PROPAGATION SUIVANT L'AXE Z

Dans le cas des matériaux piézoélectriques à maille hexagonale et à symétrie 6mm comme l'AlN ou le ZnO, les tenseurs des rigidités, des permittivités et des constantes piézoélectriques sont symétriques et ont la forme suivante :



**Figure II-27 : Tenseurs de la classe 6mm**

Le tenseur des rigidités ne possède que 12 composantes non nulles dont 5 sont indépendantes et celui des constantes piézoélectriques possède 5 composantes non nulles dont 3 indépendantes. Ceci permet de réduire le nombre de termes dans l'équation (II.24).

En effet, les termes du tenseur  $|\tilde{\Gamma}|$  se simplifient :

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{45} &= c_{45} + \frac{e_{25} \cdot e_{34}}{\epsilon_{32}} = 0 & \tilde{c}_{33} &= c_{33} + \frac{e_{33}^2}{\epsilon_{33}} \\ \tilde{c}_{35} &= c_{35} + \frac{e_{13} \cdot e_{35}}{\epsilon_{31}} = 0 & \tilde{c}_{44} &= c_{44} + \frac{e_{24} \cdot e_{34}}{\epsilon_{32}} = c_{44} \\ \tilde{c}_{34} &= c_{34} + \frac{e_{23} \cdot e_{34}}{\epsilon_{32}} = 0 & \tilde{c}_{55} &= c_{55} + \frac{e_{14} \cdot e_{34}}{\epsilon_{31}} = c_{55} \end{aligned}$$

On doit alors résoudre le système suivant :

$$[\tilde{\Gamma}][A] = [0] \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} (c_{55} - \rho v^2) & 0 & 0 \\ 0 & (c_{44} - \rho v^2) & 0 \\ 0 & 0 & (\tilde{c}_{33} - \rho v^2) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = [0] \quad (\text{II.26})$$

On voit directement que les solutions sont trois ondes orthogonales entre elles dont une seule est piézoélectrique.

- La première onde est piézoélectriquement couplée puisque sa vitesse dépend du coefficient piézoélectrique suivant la direction  $z$ . Elle est donnée par :

$$v_3 = \sqrt{\frac{\tilde{c}_{33}}{\rho}} = \sqrt{\frac{c_{33} + \frac{e_{33}^2}{\epsilon_{33}}}{\rho}}$$

Le vecteur propre correspondant est dirigé suivant l'axe de  $z$ ,  $\vec{A}(0,0,1)$ . La polarisation de l'onde est donc dirigée dans la direction de propagation, l'onde est donc longitudinale.

- Les deux autres ne sont pas piézoélectriquement couplées. Leurs vitesses sont égales puisque  $c_{44}=c_{55}$  pour un matériau hexagonal 6mm :

$$v_{1,2} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$$

Les vecteurs propres correspondants sont dirigés perpendiculairement à l'axe de  $z$   $\vec{A}(1,0,0)$  et  $\vec{A}(0,1,0)$ . La polarisation de l'onde est donc dirigée perpendiculairement à la direction de propagation, elles sont donc transversales.

L'expression de  $v_3$  permet de définir un paramètre très important pour les résonateurs BAW, le coefficient de couplage électromécanique  $k_t^2$ .

$$v_3 = \sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}} \cdot \sqrt{1 + \frac{e_{33}^2}{c_{33}\epsilon_{33}}} = \sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}} \cdot \sqrt{1 + k_t^2}$$

Dynamiquement, ce coefficient traduit l'aptitude d'un matériau piézoélectrique à transformer l'énergie électrique en énergie mécanique et vice-versa. Il est défini par :

$$k_t^2 = \frac{U_{em}^2}{U_m \cdot U_e}$$

avec :  $U_{em}$  = énergie d'interaction électromécanique

$U_m$  = énergie mécanique

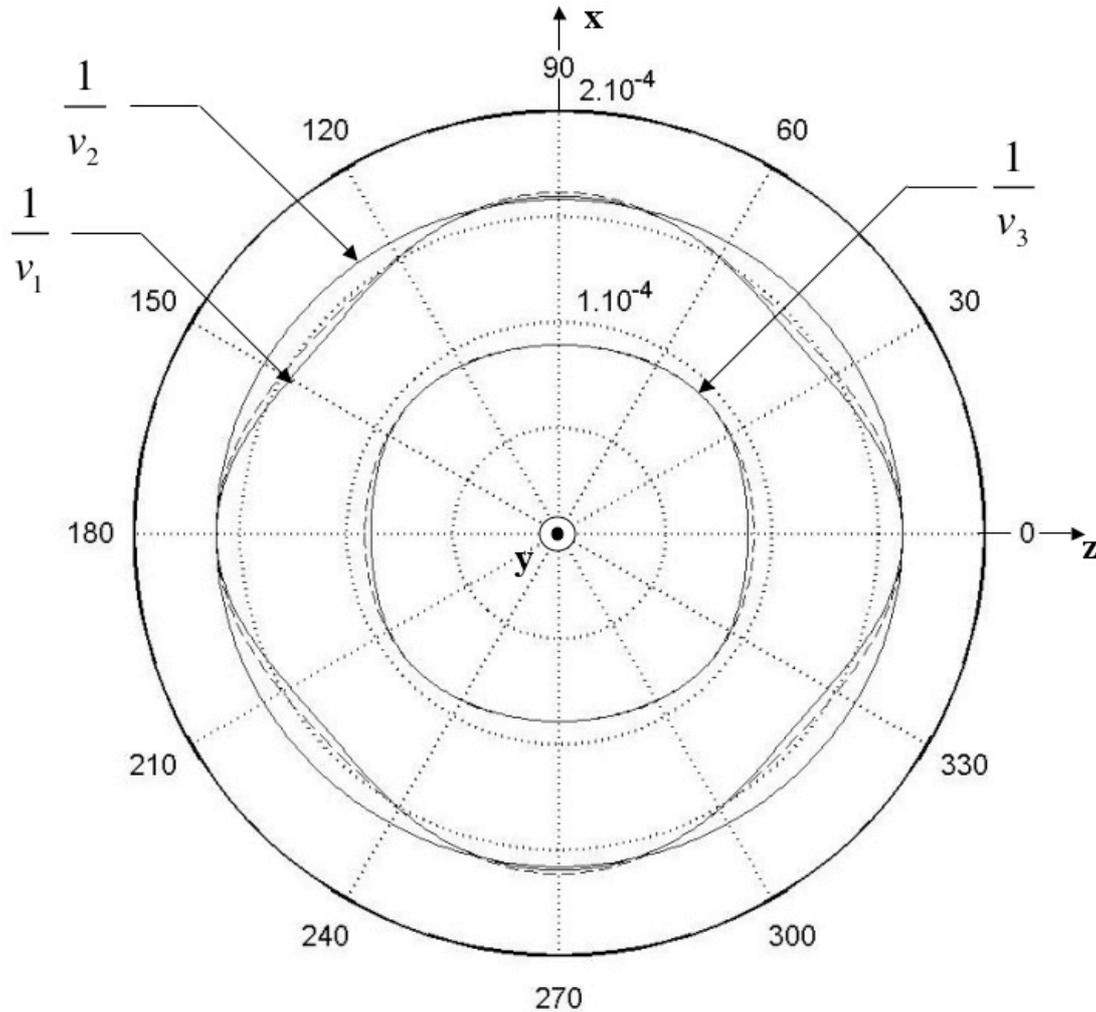
$U_e$  = énergie électrique

Ce coefficient représente la limite haute de conversion d'énergie dans un résonateur BAW. En effet, le coefficient de couplage électromécanique effectif  $k_{eff}^2$  tient compte de l'énergie acoustique présente dans les autres couches du résonateur et de l'énergie électrique globale fournie au résonateur. Ainsi, pour l'AlN, ce coefficient est de l'ordre de 6,5% et  $k_t^2 = 7\%$ . Un résonateur BAW utilisant de l'AlN ne pourra donc pas présenter un  $k_{eff}^2$  supérieur à 7%. Pour le ZnO,  $k_t^2 = 9\%$  et  $k_{eff}^2 = 7,8\%$ .

#### V.4.2 SURFACE DES LENTEURS

Le fait que ces trois ondes soient orthogonales entre elles reste valable quelle que soit la direction de propagation. Par contre si la direction de propagation change, c'est-à-dire si elle s'écarte de l'axe  $z$  (axe de symétrie d'ordre 6 pour les matériaux 6mm), les ondes transversales peuvent être piézoélectriquement couplées et l'onde longitudinale ne plus l'être. De plus, l'anisotropie des cristaux 6mm, dans les directions autres que l'axe sénéaire, va s'exprimer en transformant l'onde longitudinale en quasi longitudinale et les ondes transversales en quasi transversales. Ceci se visualise sur la Figure II-28.

Elle représente ce qu'on appelle la surface des lenteurs c'est-à-dire l'inverse des vitesses de phase en fonction de l'angle  $\theta$  (Figure II-26) entre la direction de propagation et l'axe  $z$ . Elle est formée par trois nappes, une propre à l'onde longitudinale de vitesse  $v_3$  et deux autres propres aux ondes transversales de vitesse  $v_1$  et  $v_2$  plus faibles. Les nappes en pointillés représentent les mêmes ondes mais sans tenir compte de la piézoélectricité.



**Figure II-28 :** Surface des lenteurs pour un cristal d'AlN

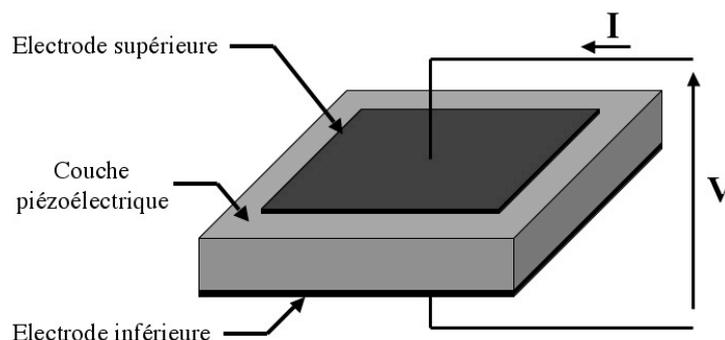
On remarque que, pour une propagation suivant l'axe  $z$ , l'onde longitudinale (la plus rapide) est piézoélectriquement couplée et que les ondes transversales ne le sont pas. L'écart entre la ligne en pointillés et la ligne pleine montre que le coefficient de couplage électromécanique est alors maximum. Lorsque l'on effectue une rotation de la direction de propagation autour de l'axe  $y$ , cet écart diminue jusqu'à devenir nul à partir de  $\theta=40^\circ$ . Le coefficient de couplage passe alors par un minimum. Dans le même temps, l'onde transversale de vitesse  $v_1$  devient piézoélectriquement couplée et sa vitesse n'est plus égale à

$v_2$ . Ceci vient de l'anisotropie de l'AlN en dehors de l'axe s enaire qui impose un angle non nul entre la direction de propagation et la polarisation des ondes (Figure II-26). L'onde longitudinale devient alors quasi longitudinale et les ondes transversales, quasi transversales. L'onde transversale de vitesse  $v_2$  ne devient pi zo electrique que si la rotation s'effectue autour de l'axe  $x$ .

Ce diagramme permet donc de d eterminer le type d'onde et la direction de propagation les plus ad equats pour l'application vis ee. Il peut aussi ˆtre vu comme la rotation des tenseurs pour une direction de propagation fix ee c'est- a-dire comme une d esorientation du cristal.

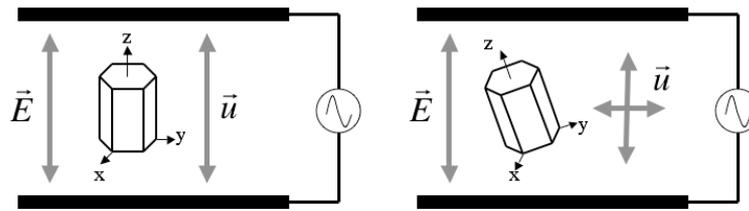
### V.4.3 RESONATEURS BAW

Le r esonateur BAW  el ementaire est constitu e d'une couche de mat eriel pi zo electrique entre deux  electrodes m etalliques (Figure II-29).



**Figure II-29 : R esonateur BAW  el ementaire**

L'application d'une tension  electrique variable ( $V$ ) produit un champ  electrique variable et normal aux plans des  electrodes. S'il existe un couplage pi zo electrique suivant l'axe du cristal colin eaire au champ  $\vec{E}$ , le mat eriel se d eforme et entre en vibration. Les applications vis ees pour les r esonateurs BAW se situent surtout   hautes fr equences. La condition de r esonance d ependant de l' epaisseur de la couche pi zo electrique, l'onde acoustique doit ˆtre longitudinale pour avoir la vitesse acoustique la plus  lev ee. La surface des lenteurs de l'AlN montre qu'une onde longitudinale pi zo electriquement coupl ee se propage suivant l'axe  $z$  et que le coefficient de couplage  electrom ecanique est maximal dans cette direction. Un champ  electrique appliqu e suivant  $z$  permet d'exciter cette onde. On fait donc cro tre l'AlN suivant son axe  $z$  pour obtenir un r esonateur fonctionnant sur son mode fondamental d' paisseur.



**Figure II-30 : Désorientation du cristal**

On comprend aisément qu'une désorientation du cristal dû à une mauvaise maîtrise des conditions de dépôt a un impact sur le coefficient de couplage électromécanique. En effet, une partie de l'énergie électrique sera perdue par couplage piézoélectrique avec l'onde transversale, cette onde ne participant pas à la résonance du mode fondamental d'épaisseur. De plus des modes transversaux peuvent être couplés et venir perturber la réponse électrique du résonateur. Ils sont considérés comme parasites.

## VI CONDITIONS AUX LIMITES

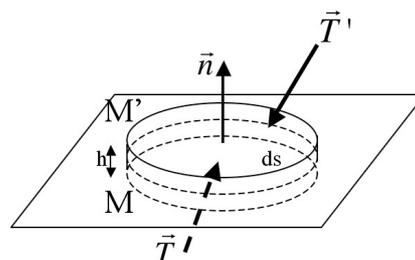
Dans un résonateur BAW, plusieurs matériaux sont utilisés sous forme de couches. Les ondes acoustiques vont donc rencontrer sur leur parcours les interfaces entre milieux ainsi que les limites du système. Les solutions des équations de propagation doivent satisfaire les conditions aux limites des grandeurs mécanique et électrique.

### VI.1 MECANIKES

Si l'on considère deux solides M et M' rigidement liés, le déplacement mécanique est continu à l'interface.

$$u_i = u_i'$$

La contrainte mécanique  $T$  est continue à l'interface. Considérons un cylindre de hauteur  $h$  contenant la frontière entre M et M' (Figure II-31).



**Figure II-31 : Conditions limites mécaniques**

L'équation de l'élastodynamique (II.5) s'écrit :

$$(\vec{T}' \cdot \vec{n} - \vec{T} \cdot \vec{n}) ds + \vec{f} \cdot h \cdot ds = \frac{\rho + \rho'}{2} h \cdot ds \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2}$$

Lorsque h tend vers zéro, cette condition devient :

$$\boxed{T_i = T'_i}$$

Si le milieu M' est de l'air :

$$\boxed{T_i = 0}$$

On comprend donc que l'interface matériau-air constitue un miroir acoustique sur lequel la totalité d'une onde acoustique se réfléchit. Dans les résonateurs BAW, deux miroirs disposés l'un en face de l'autre, constituent une cavité résonante dans laquelle l'énergie acoustique reste confinée. En exploitant les interférences constructives ou destructives des multiples réflexions des ondes stationnaires peuvent s'installer.

## VI.2 ÉLECTRIQUES

Les conditions aux limites électriques sont celles de l'électrostatique :

- Le potentiel et la composante tangentielle du champ électrique sont continus :

$$\boxed{E_t = E'_t} \quad \text{et} \quad \boxed{\Phi = \Phi'}$$

- La composante normale de l'induction électrique est discontinue si l'interface est chargée :

$$D_n - D'_n = \sigma$$

avec :  $\sigma$  = densité surfacique de charge (C/m<sup>2</sup>)

Si le milieu M' est un conducteur (électrode) chargé par  $\sigma$ , alors :

$$\boxed{D_n = \sigma}$$

- S'il existe un courant surfacique de densité  $J_n$ , la conservation de la charge impose :

$$J_n - J'_n = \frac{d\sigma}{dt}$$

## VII LES PERTES DANS LES RESONATEURS BAW

Les pertes présentes dans ce type de systèmes sont liées à plusieurs phénomènes physiques. Elles se manifestent sur la réponse électrique en limitant la surtension à la résonance et à l'anti-résonance. Elles sont quantifiées par les coefficients de qualité  $Q_s$  et  $Q_p$  qui représentent la vitesse de variation de phase aux fréquences de résonance et d'anti-résonance.

### VII.1 PERTES MECANQUES

Le modèle de la Figure II-21 fait intervenir des ressorts idéaux. En réalité, ils possèdent un amortissement qui modélise les limites élastiques des liaisons inter-atomiques dans un cristal. Le matériau présente une certaine viscosité qui a tendance à dissiper l'énergie mécanique et à atténuer les ondes élastiques qui s'y propagent. Un terme proportionnel à la viscosité et à la dépendance de la déformation en fonction du temps est donc introduit dans la loi de Hooke :

$$T = cS + \eta \frac{\partial S}{\partial t} \quad (\text{II.27})$$

avec :  $\eta$ =viscosité (Pa.s)       $c$ =rigidité (Pa)

$T$ =contrainte (Pa)       $S$ =déformation

En régime harmonique, le terme de viscosité introduit une partie imaginaire à la rigidité :

$$\bar{c} = c(1 + j\omega\tau) \quad \text{avec : } \tau = \frac{\eta}{c} \quad (\text{II.28})$$

$\tau$  s'exprime en seconde et représente le temps de relaxation mécanique. Cette grandeur est caractéristique de chaque matériau. Il est relié, au premier ordre, à l'atténuation  $\alpha$  d'une onde acoustique se propageant à la vitesse  $v_{acoustique}$  par la relation :

$$\alpha(\text{dB} / \text{m}) \approx 8,686 \frac{\omega^2 \tau}{2 \cdot v_{acoustique}} \quad (\text{II.29})$$

Il permet aussi de définir le coefficient de qualité mécanique :

$$Q_m = \frac{1}{\omega\tau}$$

## VII.2 PERTES ELECTRIQUES

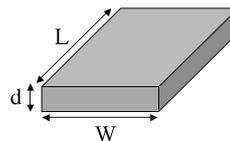
Un matériau piézoélectrique se comporte en dehors des fréquences de résonance et d'anti-résonance comme un diélectrique. Il possède donc un courant de fuite et un temps de relaxation diélectrique dus aux imperfections du milieu et caractérisés par une tangente de pertes électriques  $\tan \delta_e$ . Ce terme se rajoute à l'expression de la permittivité qui devient complexe :

$$\bar{\epsilon} = \epsilon(1 - j \tan \delta_e)$$

Les pertes par conduction dans les électrodes sont caractérisées par la résistance carrée  $R_{\square}$  du métal utilisé. Cette dernière représente la résistance d'un carré de métal d'épaisseur fixe ( $L=W$ ). La résistance de l'électrode est alors donnée par :

$$R = \frac{\rho L}{d W} = R_{\square} \frac{L}{W} \quad (\text{II.30})$$

avec :  $\rho$ =résistivité du métal ( $\Omega.m$ )



## VII.3 PERTES PIEZOELECTRIQUES

Les pertes diélectriques ne tiennent compte que des phénomènes mis en jeu directement par l'excitation électrique. L'énergie mécanique générée par cette excitation peut se reconvertir en énergie électrique par effet piézoélectrique. On observe alors une atténuation des ondes acoustiques et un couplage électromécanique moins important. Ces pertes sont qualifiées de piézoélectriques et rajoutent une partie imaginaire sur le coefficient de couplage piézoélectrique. Cependant, ce phénomène de « rétro conversion » est relativement lent et s'exprime très peu à hautes fréquences. Nous ne les prendrons donc pas en compte dans nos simulations.

Finalement, la dissipation d'énergie dans les résonateurs BAW est majoritairement liée aux pertes mécaniques.

On peut donc écrire :

$$Q_s = \frac{f_s}{\Delta f_{-3dB}} = Q_m$$

## VIII CONCLUSION

Le problème piézoélectrique est un couplage entre la mécanique et l'électromagnétisme. Sa mise en équation demande des connaissances en mécanique des solides élastiques et en électrostatique. Cependant, de manière à bien comprendre les phénomènes physiques mis en jeu, des notions supplémentaires sur la cristallographie sont nécessaires.

L'étude de la structure des matériaux employés est primordiale. Les cristaux sont des milieux ordonnés constitués d'un empilement de mailles élémentaires identiques. Une théorie formulée sur une maille élémentaire est alors valable en chaque nœud du réseau. La forme de cette maille et ses symétries nous renseignent sur le degré d'anisotropie du cristal. Ainsi, les matériaux de classe hexagonale 6mm, comme l'AlN et le ZnO, très employés dans les résonateurs BAW, sont mécaniquement isotropes suivant toutes directions obtenues par rotation d'un angle de  $\frac{\pi}{3}$  autour de l'axe  $z$ .

L'étude des symétries de la maille élémentaire permet aussi d'expliquer l'origine du phénomène piézoélectrique dans les cristaux ioniques. La déformation et l'absence de centre de symétrie créent un déséquilibre de charges dans la maille élémentaire lorsque le solide est soumis à une contrainte. Ce phénomène possède la symétrie des causes qui lui ont donné naissance. Ainsi, dans les matériaux 6mm, l'axe sénaire est polaire.

La quantification unidimensionnelle de la polarisation élémentaire et sa généralisation en trois dimensions grâce au formalisme des tenseurs a permis d'explicitier un couple d'équations constitutives du phénomène piézoélectrique.

L'approximation d'une propagation en ondes planes et le tracé des surfaces de lenteurs permettent de justifier les choix technologiques et les pré requis évoqués dans le premier chapitre pour les applications de résonateurs BAW.

- Un champ électrique appliqué suivant l'axe  $z$  dans un cristal d'AlN permet de coupler une onde longitudinale de vitesse élevée et de maximiser le coefficient de couplage.
- Les techniques de dépôts doivent être bien maîtrisées pour obtenir une orientation du cristal de manière à maximiser le coefficient de couplage et à éviter l'apparition de modes parasites.

Les conditions aux limites énoncées dans ce chapitre et la modélisation du comportement des matériaux acoustiques par la loi de Hooke et piézoélectriques par les équations constitutives de la piézoélectricité doivent donc permettre de simuler le comportement global d'un résonateur BAW.

On alors résoudre un problème différentiel à conditions limites. Ceci constitue une tâche assez compliquée qui nécessite certaines approximations. La première consiste à ne considérer le problème que dans une seule direction. Comme dans le cas de l'approximation en ondes planes, on considère une structure infinie dans les dimensions latérales ( $x$  et  $y$ ) et un déplacement mécanique longitudinal (axe  $z$ ). Sous certaines conditions, cette formulation se révèle suffisante pour modéliser correctement un résonateur BAW. Elle est présentée dans le chapitre III. La deuxième approximation, beaucoup moins restrictive, fait intervenir une technique numérique basée sur la notion de maillage géométrique de la structure et sur la recherche d'une solution dans un espace approché de la solution exacte. Elle présente l'avantage de résoudre le problème dans les trois dimensions et de pouvoir simuler des structures à géométrie complexes. Cette méthode fait l'objet du chapitre IV.

Ces techniques ne sont pas concurrentes. Elles possèdent chacune leurs avantages et leurs inconvénients. Elles trouvent toutes deux leur place dans le processus de conception d'un résonateur BAW. L'avantage des techniques 1D est de pouvoir effectuer des calculs rapides. Elles sont donc utilisées en première approche pour la définition des empilements de couches, des épaisseurs et des matériaux. Nous verrons dans le chapitre III que certains modèles 1D sont plus adaptés que d'autres pour une analyse donnée. La simulation 3D par la méthode des éléments finis constitue un complément nécessaire des techniques 1D pour analyser plus en détail le comportement des résonateurs BAW. Elle permet de prévoir l'apparition de modes parasites dans les dimensions latérales et d'étudier des solutions pour y remédier. La technique 3D est donc nécessaire pour optimiser les technologies utilisées dans les résonateurs BAW.

CHAPITRE III :  
MODELISATION 1D D'UN RESONATEUR BAW  
ET SYNTHESE DE FILTRES RF



## I INTRODUCTION

Un résonateur BAW peut être divisé en deux parties : les accès, constitués de lignes métalliques et de plans de masses déposés sur le substrat, et la partie active, où se trouvent le résonateur élémentaire et son support. Les accès peuvent être considérés d'un point de vue purement électrique puisqu'ils ne sont composés que de matériaux non-piézoélectriques. La résolution du problème piézoélectrique ne se situe alors que dans la partie active.

Dans un résonateur BAW, lorsque le rapport entre les dimensions latérales de la partie active et les épaisseurs des couches est assez élevé, l'approximation d'une propagation en ondes planes peut être considérée. De plus, dans un matériau piézoélectrique de la classe 6mm, trois ondes planes peuvent se propager suivant l'axe  $z$  et seule l'onde longitudinale est piézoélectriquement couplée. Si le cristal est bien orienté, l'application d'un champ électrique suivant l'axe  $z$  ne couple donc que l'onde longitudinale. Sous ces deux conditions, l'approximation d'une propagation unidimensionnelle (1D) peut être considérée. Toutes les grandeurs physiques ne dépendent alors que de l'axe  $z$  et les équations constitutives de la piézoélectricité et de l'acoustique se simplifient. Il est alors possible de déterminer la réponse en fréquence des résonateurs BAW, soumis à une excitation électrique, en résolvant l'équation de propagation du déplacement mécanique sur l'ensemble de la structure en fonction des conditions mécaniques, aux limites et aux interfaces, et des conditions électriques, sur les électrodes et dans la couche piézoélectrique. La formulation du problème reste commune à toute résolution, mais sa mise en forme permet d'adapter l'analyse à l'environnement de simulation et à la flexibilité recherchée.

Le modèle de Mason permet de déterminer la réponse en fréquence d'un résonateur BAW en modélisant l'ensemble de ses couches par leurs quadripôles équivalents. Il utilise le formalisme des lignes de transmissions en remplaçant la tension par la force appliquée sur la surface de chaque couche et le courant par la vitesse du déplacement mécanique. Le calcul de la structure est alors ramené à la multiplication des matrices de transferts de chaque quadripôle. De par son aspect « acoustique », ce modèle est surtout utilisé pour le calcul des miroirs de Bragg acoustiques employés, dans les résonateurs SMR, pour l'isolation du résonateur élémentaire vis-à-vis du substrat. Il permet de déterminer la bande passante et le nombre de couches nécessaires à une bonne isolation acoustique. La formulation de ce modèle possède quelques variantes comme le modèle KLM (d'après Krimholtz, Leedom and Matthaei).

Le modèle de la permittivité piézoélectrique est utilisé dans les simulateurs électromagnétiques pour définir un substrat « complexe » dont la permittivité dépend de la fréquence. Le comportement acoustique du résonateur est incorporé dans l'expression de la permittivité par un terme supplémentaire dépendant des caractéristiques mécaniques de l'ensemble des couches du résonateur et du coefficient de couplage électromécanique du matériau piézoélectrique. L'utilisation de ce modèle est particulièrement intéressante dans des simulateurs électromagnétiques 2D, pour la simulation de structures à géométrie complexes, par exemple pour des filtres à résonateurs BAW.

Ces deux modèles permettent de déterminer la réponse électrique d'un résonateur BAW en se basant sur son comportement acoustique. Cependant, il n'est pas toujours possible de connaître les caractéristiques mécaniques et électriques des matériaux employés (dispersion des valeurs en fonction de la qualité du dépôt). On utilise alors un modèle équivalent basé sur la mesure électrique du résonateur. Le modèle MBVD (Modified Butterworth Van-Dyke) est un circuit électrique équivalent composé d'éléments localisés et pour lequel le comportement acoustique du résonateur est représenté de manière globale par une branche motionnelle. Ce modèle permet d'effectuer des calculs rapides dans des logiciels circuits (ADS, Spice,...) pour synthétiser des réponses en fréquences complexes comme des filtres à résonateurs BAW.

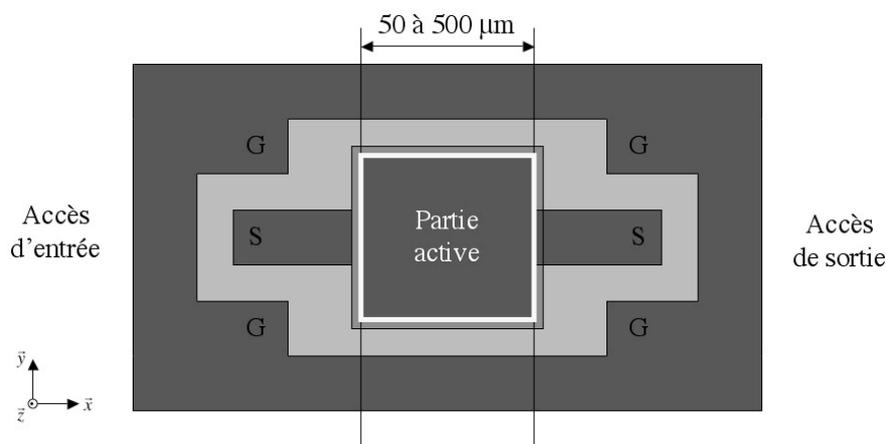
Au cours de cette thèse, tous ces modèles ont été programmés et, en fonction de l'application visée et du besoin de flexibilité, ils ont été utilisés. Le modèle de la permittivité piézoélectrique a été implémenté pour une utilisation dans le simulateur électromagnétique 3D EMXD développé au laboratoire Xlim. Le modèle MBVD nous a permis de développer une procédure de synthèse et d'optimisation de filtres à résonateurs BAW capable de déterminer les caractéristiques optimales de chaque résonateur pour répondre à un gabarit de filtre donné (UMTS, DCS). Ce chapitre présente tous ces outils de simulation 1D.

## II APPROXIMATION UNIDIMENSIONNELLE (1D)

L'analyse mathématique des structures BAW doit permettre de simuler leur comportement acoustique et électrique. L'étude de ce problème nécessite la résolution du problème piézoélectrique dans l'ensemble de la structure. Pour les matériaux non piézoélectriques, ce problème se réduit à sa partie purement acoustique. L'étude de la structure des résonateurs BAW permet de réduire, sous certaines conditions, la dimension du problème à résoudre. On se place alors dans l'approximation unidimensionnelle. Cette simplification permet de formuler des modèles 1D très utilisés pour leurs performances en termes de simplicité et de temps de calcul.

### II.1 PARTIE ACTIVE ET CONDITIONS D'APPLICATION DE L'APPROXIMATION 1D

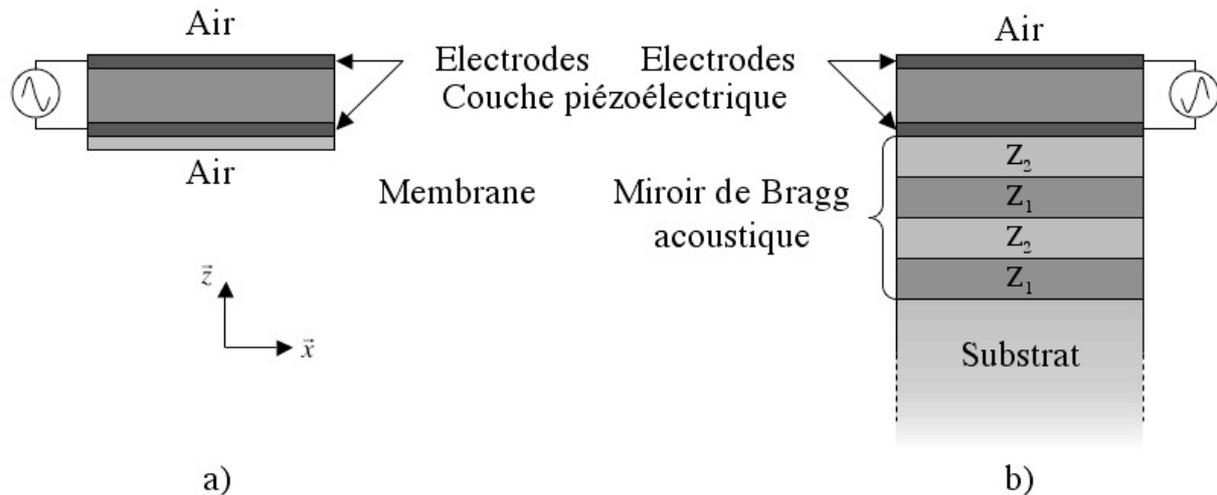
Un résonateur BAW peut être divisé en deux parties : les accès, composés des lignes métalliques d'excitation d'entrée et de sortie (S) et des plans de masse (G), et la partie active, constituée du résonateur élémentaire (électrodes + couche piézoélectrique) et du support (Figure III-1).



**Figure III-1 : Partie active et accès d'un résonateur BAW**

Dans les modèles unidimensionnels, les accès ne sont considérés que du point de vue électrique en termes de déphasage et de pertes métalliques. Ils sont par exemple modélisés par une matrice de transfert que l'on incorpore aux paramètres [S] calculés pour la partie active seule. Du point de vue piézoélectrique, on ne considère alors que la partie active puisqu'elle est le siège des oscillations mécaniques. Elle est délimitée par la surface en regard des électrodes et constituée de l'ensemble des couches du résonateur élémentaire et du support (Figure III-).

Dans le cas des résonateurs FBAR (Film Bulk Acoustic wave resonator), seule la membrane est à considérer (Figure III-2a). On a donc une couche de matériau supplémentaire sous le résonateur élémentaire. Pour les structures SMR (Solidly Mounted Resonator), le résonateur élémentaire est isolé du substrat par un ensemble de couches quart d'ondes dont l'impédance acoustique est alternativement forte et faible et qui constituent un miroir de Bragg acoustique. On retrouve alors ces couches dans la partie active, entre le résonateur élémentaire et le substrat (Figure III-2b).



**Figure III-2 : Vue en coupe de l'empilement de la partie active suivant l'axe  $z$  d'un résonateur FBAR (a) ou SMR (b)**

Les dimensions latérales ( $x$  et  $y$ ) de la partie active sont généralement comprises entre 50 et 500  $\mu\text{m}$ , et l'épaisseur des électrodes ou de la couche piézoélectrique suivant  $z$  dépasse rarement 5  $\mu\text{m}$ . Le rapport entre les dimensions latérales et les épaisseurs des couches est donc assez élevé pour considérer la partie active comme infinie dans les directions  $x$  et  $y$ . Ceci permet de justifier l'approximation d'une propagation en ondes planes suivant l'axe  $z$  et constitue la **première condition** nécessaire à la validité de l'approximation 1D.

De plus, l'étude de la surface des lenteurs au chapitre II nous a permis de montrer que, dans la direction de l'axe sinaire ( $x_3$  ou  $z$ ) d'un cristal piézoélectrique de symétrie 6mm, trois ondes planes orthogonales entre elles peuvent se propager : une onde longitudinale couplée et deux ondes transversales dont le couplage piézoélectrique est nul. Ainsi, l'application d'un champ électrique suivant l'axe sinaire permet de ne coupler que l'onde acoustique longitudinale. Néanmoins, nous avons aussi vu qu'une désorientation du cristal diminuait le coefficient de couplage de l'onde longitudinale et rendait les ondes transversales

piézoélectriquement couplées. La **deuxième condition** nécessaire à la validité de l'approximation unidimensionnelle est donc de se placer dans le cas d'une orientation de l'axe sénénaire normal aux plans des électrodes.

Sous ces deux conditions, un signal électrique variable appliqué entre les deux électrodes d'un résonateur BAW permet de ne coupler qu'une onde acoustique plane, longitudinale, se propageant suivant l'axe  $z$ . Cette onde, générée dans la couche piézoélectrique, se propage ensuite dans les autres couches de la structure.

## II.2 ÉQUATIONS 1D DANS UN MILIEU STRATIFIÉ

L'approximation 1D permet de réduire les dimensions du problème piézoélectrique dans la partie active. Les grandeurs physiques ne dépendent plus que de  $z$  et les équations constitutives se simplifient. Dans les couches de matériaux non-piézoélectriques, seul le problème de propagation du déplacement mécanique suivant  $z$  est à résoudre. Dans les couches de matériaux piézoélectriques, le problème électrique et le couplage électrique-mécanique sont à prendre en compte. Dans l'approximation 1D, la modélisation analytique du comportement de chaque couche est effectuée en explicitant les grandeurs acoustiques et électriques de surface. Mais, afin de caractériser le milieu de propagation, deux grandeurs caractéristiques doivent d'abord être définies : l'impédance caractéristique et l'impédance acoustique.

### II.2.1 IMPEDANCE CARACTERISTIQUE ET IMPEDANCE ACOUSTIQUE

L'impédance caractéristique  $Z_c$  d'un milieu élastique au repos s'exprime comme suit :

$$\boxed{Z_c = \rho v_0 = \sqrt{\rho c}} \quad \text{avec : } v_0 = \sqrt{\frac{c}{\rho}} \quad (\text{III.1})$$

En dynamique, un milieu élastique soumis à une onde acoustique longitudinale présente une succession de compressions et de dilatations (Figure II-24). L'impédance acoustique est alors définie par les acousticiens comme le rapport de la surpression locale  $p$  sur la vitesse particulaire  $v$ . Nous avons défini, au paragraphe III-1 du chapitre II, qu'une pression était une contrainte négative. Ainsi, en posant  $p = -T$ , l'impédance acoustique s'écrit :

$$Z_a(z) = \frac{p(z)}{v} = \frac{-T(z)}{v} \quad \text{avec : } v = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (\text{III.2})$$

### II.2.2 MODELISATION D'UNE COUCHE DE MATERIAU NON-PIEZOELECTRIQUE

Pour une couche de matériau non-piézoélectrique, la loi de Hooke s'écrit :

$$T = c \frac{\partial u}{\partial z} \quad (\text{III.3})$$

L'équation de l'élastodynamique (II.5), en régime harmonique et pour un milieu sans contraintes internes, devient :

$$\frac{\partial T}{\partial z} = -\rho \omega^2 u \quad (\text{III.4})$$

En multipliant (III.3) par  $\frac{\partial}{\partial z}$  et en considérant (III.4), on obtient:

$$-\rho \omega^2 u = c \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

Et, en posant :  $k = \frac{\omega}{v_0}$  avec :  $v_0 = \sqrt{\frac{c}{\rho}}$ , il vient :

$$\boxed{\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + k^2 u = 0} \quad (\text{III.5})$$

Une solution particulière de cette équation est celle de la somme d'une onde plane, d'amplitude  $A$ , se propageant suivant l'axe  $z$  et d'une autre, d'amplitude  $B$ , se propageant en sens inverse.

$$u(z,t) = [Ae^{-jkz} + Be^{jkz}] e^{j\omega t} \quad (\text{III.6})$$

où  $A$  et  $B$  sont des constantes à déterminer.

La contrainte s'exprime donc, en régime harmonique :

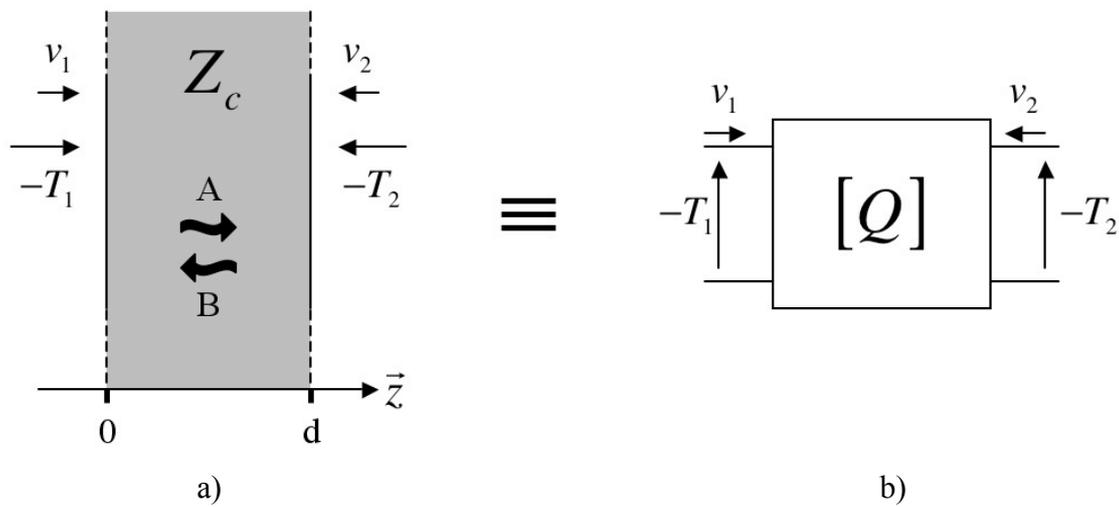
$$-T = c(jk)[Ae^{-jkz} - Be^{jkz}] = j\omega Z_c [Ae^{-jkz} - Be^{jkz}] \quad (\text{III.7})$$

Et la vitesse particulière :

$$v = j\omega [Ae^{-jkz} + Be^{jkz}] \quad (\text{III.8})$$

Pour une couche d'épaisseur finie  $d$  et d'impédance caractéristique  $Z_c$  (Figure III-3a), il est possible d'exprimer la contrainte  $T$  et la vitesse particulière  $v$  sur ses faces. En vue d'une modélisation ultérieure en matrice de transfert et d'une détermination de l'impédance acoustique  $(-T/v)$ , nous allons exprimer les grandeurs  $-T_1$  et  $v_1$ , c'est-à-dire les valeurs de la pression et de la vitesse particulière en « entrée » de la couche ( $z=0$ ), en fonction des valeurs en « sortie » ( $z=d$ ),  $-T_2$  et  $-v_2$ .

Soit une couche de matériau non-piézoélectrique d'épaisseur  $d$ , d'impédance caractéristique  $Z_c$  et dans laquelle se propagent une onde acoustique  $u(z)$ , d'amplitude  $A$  suivant l'axe  $z$  et d'amplitude  $B$ , en sens inverse (Figure III-3a).



**Figure III-3 : Couche de matériau non-piézoélectrique et quadripôle équivalent**

- En  $z=0$ , on a d'après (III.7) et (III.8) :

$$\begin{cases} -T_1 = j\omega Z_c (A - B) \\ v_1 = j\omega (A + B) \end{cases} \quad (\text{III.9})$$

- En  $z=d$ , on a :

$$\begin{cases} -T_2 = j\omega Z_c (Ae^{-jkd} - Be^{jkd}) \\ -v_2 = j\omega (Ae^{-jkd} + Be^{jkd}) \end{cases} \quad (\text{III.10})$$

Ce qui permet d'écrire :

$$\begin{cases} A = \left[ \frac{(-T_2)}{j\omega Z_c} + \frac{(-v_2)}{j\omega} \right] \frac{e^{jkd}}{2} \\ B = \left[ -\frac{(-T_2)}{j\omega Z_c} + \frac{(-v_2)}{j\omega} \right] \frac{e^{-jkd}}{2} \end{cases} \quad (\text{III.11})$$

En remplaçant A et B par leur valeur dans (III.9), on obtient :

$$\begin{cases} -T_1 = \frac{e^{jkd} + e^{-jkd}}{2}(-T_2) + jZ_c \frac{e^{jkd} - e^{-jkd}}{2j}(-v_2) \\ v_1 = \frac{j}{Z_c} \frac{e^{jkd} - e^{-jkd}}{2j}(-T_2) + \frac{e^{-jkd} + e^{jkd}}{2}(-v_2) \end{cases} \quad (\text{III.12})$$

Soit, sous forme d'une matrice de transfert :

$$\begin{bmatrix} -T_1 \\ v_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(kd) & jZ_c \sin(kd) \\ \frac{j \sin(kd)}{Z_c} & \cos(kd) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -T_2 \\ -v_2 \end{bmatrix} \quad (\text{III.13})$$

Cette matrice caractérise le quadripôle équivalent d'une couche de matériau non-piézoélectrique (Figure III-3b). La mise en série de plusieurs quadripôles permettra par la suite de modéliser le comportement acoustique d'un empilement de couches.

### II.2.3 MODELISATION D'UNE COUCHE DE MATERIAU PIEZOELECTRIQUE

Pour une couche de matériau piézoélectrique, les équations de Maxwell-Faraday (II.18) et de Poisson (II.19) s'écrivent :

$$E = -\frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad \text{et} \quad \frac{\partial D}{\partial z} = 0 \quad (\text{III.14})$$

Et les équations constitutives de la piézoélectricité (II.16) deviennent :

$$\begin{cases} T = c \frac{\partial u}{\partial z} - eE \\ D = e \frac{\partial u}{\partial z} + \epsilon E \end{cases} \quad (\text{III.15})$$

Ceci permet d'écrire l'équation de Christoffel généralisée (II.22), dans l'approximation 1D, de la manière suivante :

$$-\rho \omega^2 u = \left( c + \frac{e^2}{\epsilon} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad \text{soit :} \quad -\rho \omega^2 u = \tilde{c} \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (\text{III.16})$$

$\tilde{c}$  est appelée constante de rigidité durcie. Elle n'a pas de réalité physique, mais permet de rendre compte du couplage électrique-mécanique dans l'expression du problème acoustique d'une couche piézoélectrique.

En posant :  $k = \frac{\omega}{v_0}$  avec :  $v_0 = \sqrt{\frac{\tilde{c}}{\rho}}$ , l'équation (III.16) devient :

$$\boxed{\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + k^2 u = 0} \quad (\text{III.17})$$

Du point de vue acoustique, le problème de la piézoélectricité se réduit alors à la résolution de l'équation de propagation du déplacement mécanique (III.17) commune à toutes les couches de matériaux. Une couche de matériau piézoélectrique peut donc être considérée comme une couche acoustique particulière dont la rigidité et la vitesse acoustique dépendent d'un terme de couplage électrique-mécanique.

Une solution particulière de l'équation (III.17) est également la somme d'une onde plane, d'amplitude  $A$ , se propageant suivant l'axe  $z$  et d'une autre, d'amplitude  $B$ , se propageant en sens inverse.

$$u(z, t) = [Ae^{-jkz} + Be^{jkz}]e^{j\omega t} \quad (\text{III.18})$$

où  $A$  et  $B$  sont des constantes à déterminer.

Dans les résonateurs BAW, la couche piézoélectrique est excitée électriquement par l'application d'une différence de potentiel entre les électrodes (Figure III-4a et 4b). Les charges électriques injectées dans les électrodes se condensent par influence totale sur les faces de la couche piézoélectrique. Le mouvement des charges crée alors un courant et la différence de potentiel induit un champ électrique. Ce dernier crée une déformation mécanique par couplage électrique-mécanique.

Les équations constitutives de la piézoélectricité (III.15) dans l'approximation 1D peuvent s'écrire :

$$\begin{cases} T = \tilde{c} \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{e}{\varepsilon} D \\ E = \frac{D}{\varepsilon} - \frac{e}{\varepsilon} \frac{\partial u}{\partial z} \end{cases} \quad (\text{III.19})$$

Pour un matériau piézoélectrique, la contrainte possède donc un terme supplémentaire proportionnel au couplage électrique-mécanique.

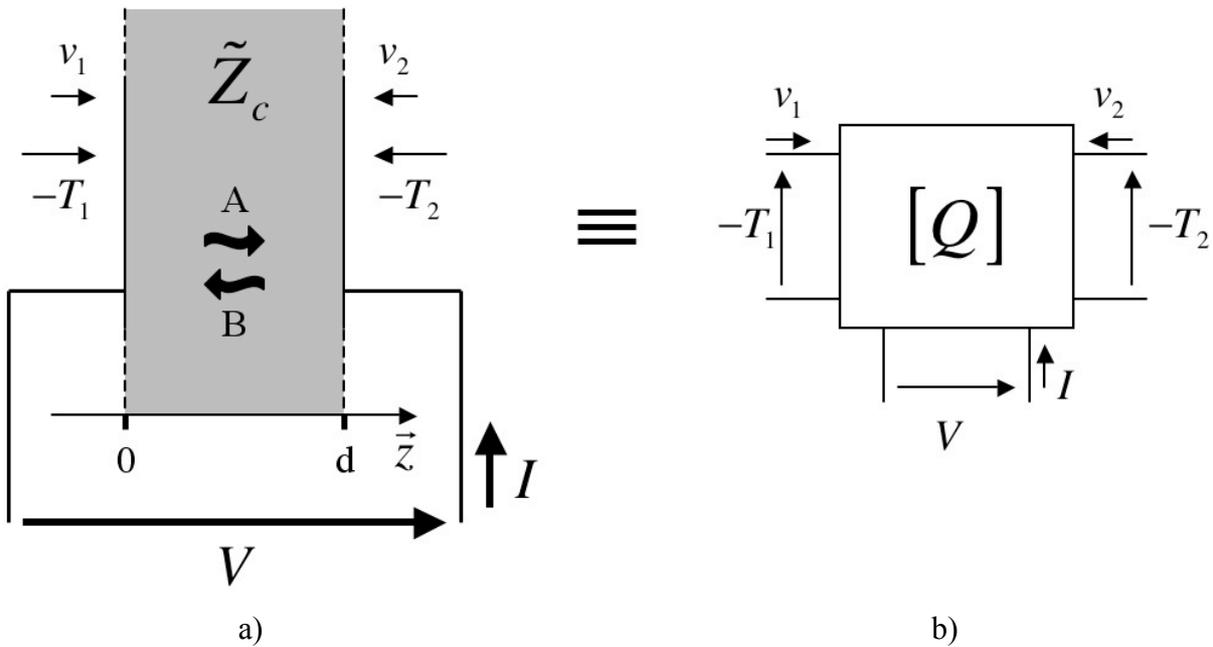
D'après (III.18), la contrainte s'exprime alors en régime harmonique :

$$-T = j\omega\tilde{Z}_c[Ae^{-jkz} - Be^{jkz}] + \frac{e}{\varepsilon}D \quad \text{avec : } \tilde{Z}_c = \rho v_0 \text{ et } v_0 = \sqrt{\frac{\tilde{c}}{\rho}} \quad (\text{III.20})$$

Et la vitesse particulière :

$$v = j\omega[Ae^{-jkz} + Be^{jkz}] \quad (\text{III.21})$$

Considérons d'abord le problème piézoélectrique du **point de vue acoustique**. On applique alors la même démarche que pour une couche de matériau non-piézoélectrique, mais en tenant compte du problème électrique. Soit une couche de matériau piézoélectrique d'épaisseur  $d$ , soumise à une tension  $V$  appliquée sur ses faces, d'impédance caractéristique  $\tilde{Z}_c$  et dans laquelle se propagent une onde acoustique  $u(z)$ , d'amplitude  $A$  suivant l'axe  $z$  et d'amplitude  $B$ , en sens inverse (Figure III-4a).



**Figure III-4 : Couche de matériau piézoélectrique et hexapôle équivalent**

- En  $z=0$ , on a d'après (III.7) et (III.8) :

$$\begin{cases} -T_1 = j\omega\tilde{Z}_c(A - B) + \frac{e}{\varepsilon}D \\ v_1 = j\omega(A + B) \end{cases} \quad (\text{III.22})$$

- En  $z=d$ , on a :

$$\begin{cases} -T_2 = j\omega\tilde{Z}_c (Ae^{-jkd} - Be^{jkd}) + \frac{e}{\varepsilon}D \\ -v_2 = j\omega(Ae^{-jkd} + Be^{jkd}) \end{cases} \quad (\text{III.23})$$

On a alors :

$$\begin{cases} A = \left[ \frac{(-T_2)}{j\omega\tilde{Z}_c} + \frac{(-v_2)}{j\omega} - \frac{e}{\varepsilon} \frac{D}{j\omega\tilde{Z}_c} \right] \frac{e^{jkd}}{2} \\ B = \left[ -\frac{(-T_2)}{j\omega\tilde{Z}_c} + \frac{(-v_2)}{j\omega} + \frac{e}{\varepsilon} \frac{D}{j\omega\tilde{Z}_c} \right] \frac{e^{-jkd}}{2} \end{cases} \quad (\text{III.24})$$

Et en remplaçant A et B par leur valeur dans (III.22), on obtient :

$$\begin{cases} -T_1 = \frac{e^{jkd} + e^{-jkd}}{2}(-T_2) + j\tilde{Z}_c \frac{e^{jkd} - e^{-jkd}}{2j}(-v_2) - \left( \frac{e^{jkd} + e^{-jkd}}{2} - 1 \right) \left( \frac{e}{\varepsilon}D \right) \\ v_1 = \frac{j}{\tilde{Z}_c} \frac{e^{jkd} - e^{-jkd}}{2j}(-T_2) + \frac{e^{-jkd} + e^{jkd}}{2}(-v_2) - \frac{j}{\tilde{Z}_c} \frac{e^{jkd} - e^{-jkd}}{2j} \left( \frac{e}{\varepsilon}D \right) \end{cases} \quad (\text{III.25})$$

Soit :

$$\begin{cases} -T_1 = \cos(kd)(-T_2) + j\tilde{Z}_c \sin(kd)(-v_2) + (\cos(kd) - 1) \left( -\frac{e}{\varepsilon}D \right) \\ v_1 = \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c}(-T_2) + \cos(kd)(-v_2) + \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} \left( -\frac{e}{\varepsilon}D \right) \end{cases} \quad (\text{III.26})$$

Du **point de vue électrique**, le problème piézoélectrique exprimé dans l'approximation quasi-statique 1D permet d'écrire que le champ électrique  $E$  dérive d'un potentiel  $\Phi$  (III.14) et que la tension  $V$  représente la différence de potentiel sur les faces de la couche piézoélectrique :

$$V = \Phi(d) - \Phi(0) = -\int_0^d E \cdot dz \quad (\text{III.27})$$

En remplaçant E par son expression issue de (III.19), la tension  $V$  s'écrit :

$$V = -d \frac{D}{\varepsilon} + \frac{e}{\varepsilon} [u(d) - u(0)] \quad \text{soit :} \quad V = -d \frac{D}{\varepsilon} - \frac{e}{\varepsilon} \left[ \frac{v_1 + v_2}{j\omega} \right] \quad (\text{III.28})$$

De plus, l'équation de conservation de la charge en régime harmonique s'écrit :

$$J_s + j\omega D = 0 \quad \text{avec :} \quad J_s = \text{densité de courants surfaciques} \quad (\text{III.29})$$

Le courant  $I$  total sur les faces de la couche piézoélectrique peut donc s'écrire :

$$I = \iint_S J_s dS = -j\omega SD \quad \text{soit :} \quad D = -\frac{I}{j\omega S} \quad (\text{III.30})$$

où  $S$  représente la surface en regard des électrodes.

En remplaçant  $D$  par son expression, l'équation (III.28) s'écrit :

$$\boxed{V = \frac{I}{jC_0\omega} - \frac{hC_0}{jC_0\omega} [v_1 + v_2]} \quad \text{avec :} \quad h = \frac{e}{\epsilon} \quad \text{et} \quad C_0 = \epsilon \frac{S}{d} \quad (\text{III.31})$$

On remarque alors que l'expression de la tension  $V$  est composée d'un terme purement électrique et d'un terme de couplage électrique-mécanique dépendant des valeurs de la vitesse du déplacement mécanique sur les faces de la couche piézoélectrique.

En remplaçant  $v_l$  par son expression issue de (III.26) et en identifiant le coefficient de couplage électromécanique :  $k_t^2 = \frac{e^2}{\epsilon\tilde{c}} = \frac{h^2\epsilon}{\tilde{c}}$ ,  $V$  s'écrit finalement :

$$V = \frac{I}{jC_0\omega} \left( 1 - k_t^2 \frac{\sin(kd)}{kd} \right) - \frac{hC_0}{jC_0\omega} \left[ \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} (-T_2) + (\cos(kd) - 1)(-v_2) \right] \quad (\text{III.32})$$

Cette expression combinée à (III.26) permet alors d'écrire la pseudo matrice de transfert équivalente à l'héxapôle de la Figure III-4b comme suit :

$$\begin{bmatrix} -T_1 \\ v_1 \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(kd) & j\tilde{Z}_c \sin(kd) & \frac{h}{j\omega S} (\cos(kd) - 1) \\ \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} & \cos(kd) & \frac{h}{j\omega S} \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} \\ -\frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} & -\frac{hC_0}{jC_0\omega} (\cos(kd) - 1) & \frac{1}{jC_0\omega} \left( 1 - k_t^2 \frac{\sin(kd)}{kd} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -T_2 \\ -v_2 \\ I \end{bmatrix} \quad (\text{III.33})$$

On peut remarquer que si le couplage électrique-mécanique est nul ( $e=0$ ), on retrouve la matrice de transfert (III.13) d'une couche de matériau non-piézoélectrique. Le rapport  $V/I$  représente alors l'impédance électrique de la capacité  $C_0$  formée par les électrodes et la couche de matériau piézoélectrique comme diélectrique. Un matériau piézoélectrique peut donc être utilisé seulement pour ses propriétés acoustiques tant qu'il n'est pas soumis à un champ électrique.

$$\begin{bmatrix} -T_1 \\ v_1 \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(kd) & jZ_c \sin(kd) & 0 \\ \frac{j \sin(kd)}{Z_c} & \cos(kd) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{jC_0 \omega} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -T_2 \\ -v_2 \\ I \end{bmatrix} \quad (\text{III.34})$$

#### II.2.4 CONDITIONS MECANIQUES AUX LIMITES ET AUX INTERFACES

Nous rappelons ici les conditions, exprimées dans le chapitre II, de continuité de la contrainte  $T$ , du déplacement mécanique  $u$  et de sa vitesse  $v$  dans l'approximation 1D.

Sur l'interface entre un milieu  $M$  et un milieu  $M'$ , les conditions mécaniques sont :

$$T = T' \quad , \quad u = u' \quad \text{et} \quad v = v' \quad (\text{III.35})$$

Si le milieu  $M'$  est de l'air, les conditions mécaniques sont :

$$T = 0 \quad , \quad u = u' \quad \text{et} \quad v = v' \quad (\text{III.36})$$

Une couche d'épaisseur très grande, comme le substrat des structures SMR, est considérée comme semi-infinie. Son impédance acoustique est alors égale à son impédance caractéristique  $Z_c$ .

Nous disposons maintenant des matrices de transferts équivalentes des couches de matériaux qui constituent un résonateur BAW et des conditions mécaniques aux interfaces et aux limites. Ces outils vont nous permettre de résoudre le problème piézoélectrique dans la partie active d'un résonateur. Les expressions des grandeurs acoustiques et électriques de surface sont le point de départ de tous les modèles unidimensionnels proposés jusqu'à maintenant. Leurs différences viennent surtout de leur mise en forme adaptée ou non à la solution recherchée. Pour déterminer le comportement acoustique d'un ensemble de couches, et notamment l'impédance acoustique ramenée ou le coefficient de réflexion acoustique, le modèle de Mason est particulièrement bien adapté. Au contraire, si l'on cherche à favoriser le point de vue électrique, le modèle de la permittivité piézoélectrique est plus intéressant.

### III MODELES UNIDIMENSIONNELS « ACOUSTIQUES »

#### III.1 LE MODELE DE MASON

Le modèle de Mason est basé sur la formulation 1D du problème de propagation acoustique et du problème piézoélectrique. Il est largement utilisé en basses fréquences pour l'étude des transducteurs et à hautes fréquences pour la modélisation des filtres SAW. Il permet de modéliser un résonateur BAW en considérant les matrices de transferts de chaque couche et en effectuant une analogie entre le couple tension-courant et le couple force-vitesse de déplacement. En identifiant les différents termes de la matrice de transfert avec des éléments électriques localisés, le modèle de Mason permet de déterminer la réponse en fréquence du résonateur.

##### III.1.1 COUCHE DE MATERIAU NON-PIEZOELECTRIQUE

Dans ce modèle, chaque couche de matériau non-piézoélectrique est caractérisée par sa matrice de transfert (III.13) exprimée en fonction de la force appliquée sur ses faces, c'est-à-dire en intégrant la contrainte sur toute la surface  $S$ . On a donc  $F = -S.T$  et on obtient la matrice de transfert suivante :

$$\begin{bmatrix} F_1 \\ v_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(kd) & jZ_c S \sin(kd) \\ \frac{j \sin(kd)}{Z_c S} & \cos(kd) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2 \\ -v_2 \end{bmatrix} \quad (\text{III.37})$$

Dans le modèle de Mason, une couche de matériau non piézoélectrique est représentée par le schéma électrique suivant :

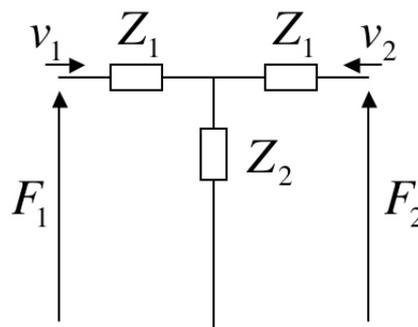


Figure III-5 : Modèle de Mason d'une couche de matériau non-piézoélectrique

Sa matrice de transfert s'écrit :

$$\begin{bmatrix} F_1 \\ v_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{Z_1}{Z_2} & 2Z_1 + \frac{Z_1^2}{Z_2} \\ \frac{1}{Z_2} & 1 + \frac{Z_1}{Z_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2 \\ -v_2 \end{bmatrix} \quad (III.38)$$

On identifie avec (III.37) :  $Z_2 = -j \frac{Z_c S}{\sin(kd)}$  et  $Z_1 = jZ_c S \tan\left(\frac{kd}{2}\right)$

### III.1.2 COUCHE DE MATERIAU PIEZOELECTRIQUE

Une couche de matériau piézoélectrique est caractérisée par sa matrice de transfert (III.33) exprimée en fonction de la force appliquée sur ses faces. Avec  $F = -S.T$ , on obtient la matrice de transfert suivante :

$$\begin{bmatrix} F_1 \\ v_1 \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(kd) & j\tilde{Z}_c S \sin(kd) & \frac{hC_0}{jC_0\omega} (\cos(kd) - 1) \\ \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c S} & \cos(kd) & \frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c S} \\ -\frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c S} & -\frac{hC_0}{jC_0\omega} (\cos(kd) - 1) & \frac{1}{jC_0\omega} \left(1 - k_t^2 \frac{\sin(kd)}{kd}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2 \\ -v_2 \\ I \end{bmatrix} \quad (III.39)$$

Dans le modèle de Mason, une couche de matériau piézoélectrique est représentée par le schéma électrique suivant :

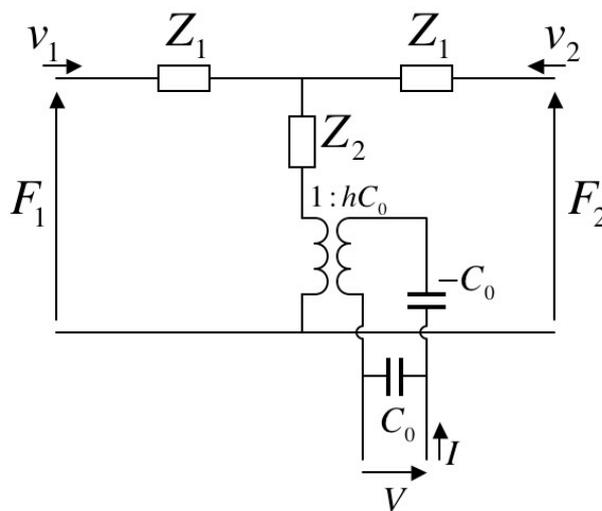


Figure III-6 : Modèle de Mason d'une couche de matériau piézoélectrique

Sa matrice de transfert s'écrit :

$$\begin{bmatrix} F_1 \\ v_1 \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{Z_1}{Z_2} & 2Z_1 + \frac{Z_1^2}{Z_2} & \frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{Z_1}{Z_2} \\ \frac{1}{Z_2} & 1 + \frac{Z_1}{Z_2} & \frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{1}{Z_2} \\ -\frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{1}{Z_2} & -\frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{Z_1}{Z_2} & \frac{1}{jC_0\omega} \left( 1 - \frac{h^2 C_0}{j\omega} \frac{1}{Z_2} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2 \\ -v_2 \\ I \end{bmatrix} \quad (\text{III.40})$$

$$\text{On identifie avec (III.39) : } Z_2 = -j \frac{Z_c S}{\sin(kd)} \quad \text{et} \quad Z_1 = jZ_c S \tan\left(\frac{kd}{2}\right)$$

Dans ce modèle, on retrouve la capacité statique  $C_0$  et le couplage électrique-mécanique, représenté par un transformateur de rapport :  $N = \frac{1}{hC_0}$ .

Le schéma équivalent d'une couche piézoélectrique est donc composé d'une partie acoustique (résistance  $Z_1$  et  $Z_2$ ), d'une partie électrique (capacité  $C_0$ ) et du couplage électrique-mécanique (transformateur de rapport  $N$ ). La distinction nette entre les parties acoustique et électrique est l'atout principal de ce modèle puisqu'il permet de mieux comprendre le problème piézoélectrique.

### III.1.3 MODELE DE MASON D'UN RESONATEUR SMR ET ETUDE DU MIROIR DE BRAGG

Le modèle de Mason est surtout intéressant pour son aspect acoustique. Il permet d'accéder aux grandeurs acoustiques comme la pression  $F$  et la vitesse du déplacement  $v$  qui permettent de déterminer l'impédance acoustique  $Z_a$ . Dans les structures SMR, l'isolation acoustique du résonateur élémentaire vis-à-vis du substrat est nécessaire pour confiner l'énergie mécanique dans le résonateur élémentaire de manière à maximiser le coefficient de couplage électromécanique effectif et le coefficient de qualité. Ceci s'effectue par un ensemble de couches qui constitue un miroir de Bragg. Ce dernier est composé d'une alternance de couches d'impédance caractéristique forte et faible, et dont les épaisseurs sont choisies de manière à ce qu'elles correspondent à un quart de la longueur d'onde acoustique ( $\lambda/4$ ) à la fréquence de résonance. Sa réponse en fréquence est fonction du nombre de couches et du rapport des impédances caractéristiques des matériaux employés. Le modèle de Mason permet d'étudier cette dépendance.

Le schéma équivalent du résonateur SMR de la Figure III-2b dans le modèle de Mason est représenté sur la Figure III-7. On reconnaît le résonateur élémentaire (électrodes + couche piézoélectrique). L'électrode supérieure possède une interface avec l'air. Son port d'entrée est donc « court-circuité » puisque la force exercée par l'air est nulle. Le substrat est considéré comme une couche semi-infinie représentée par son impédance caractéristique.

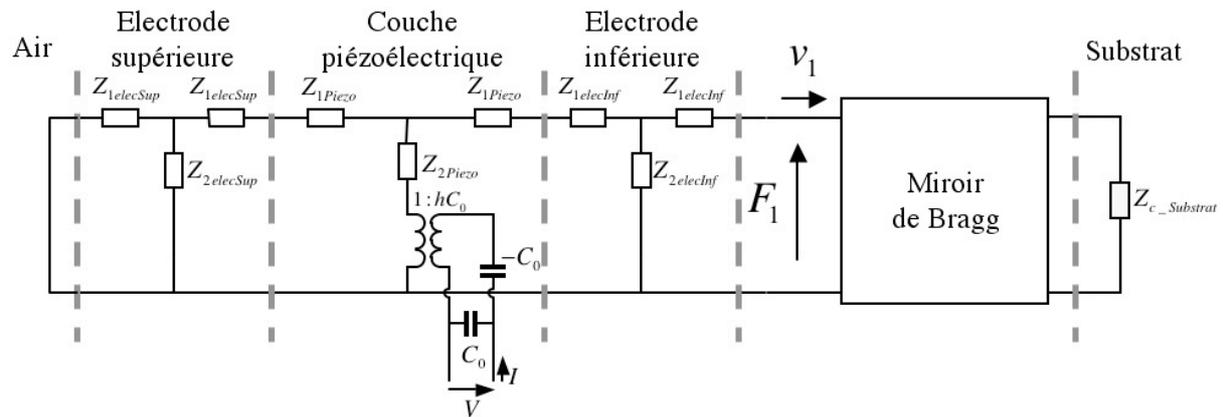


Figure III-7 : Modèle de Mason du résonateur SMR de la Figure III-2b

Le modèle de Mason du miroir de Bragg acoustique est représenté sur la Figure III-8.

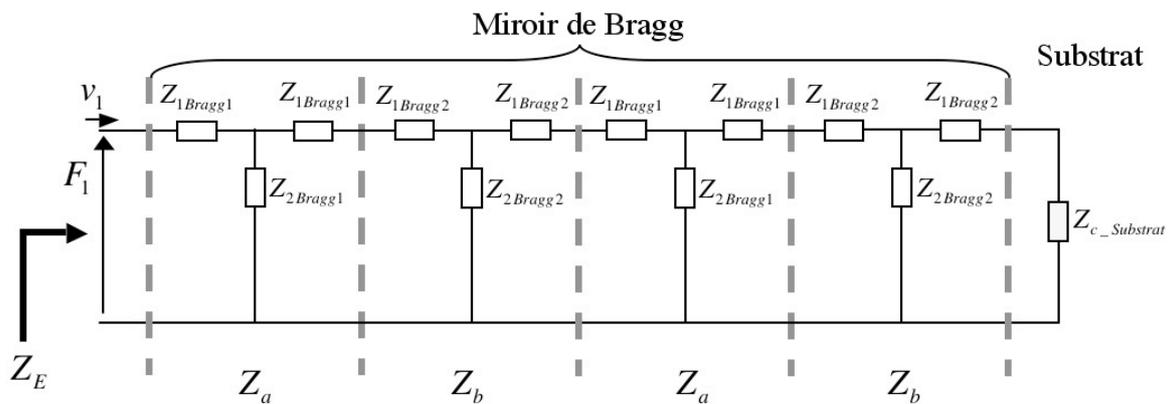


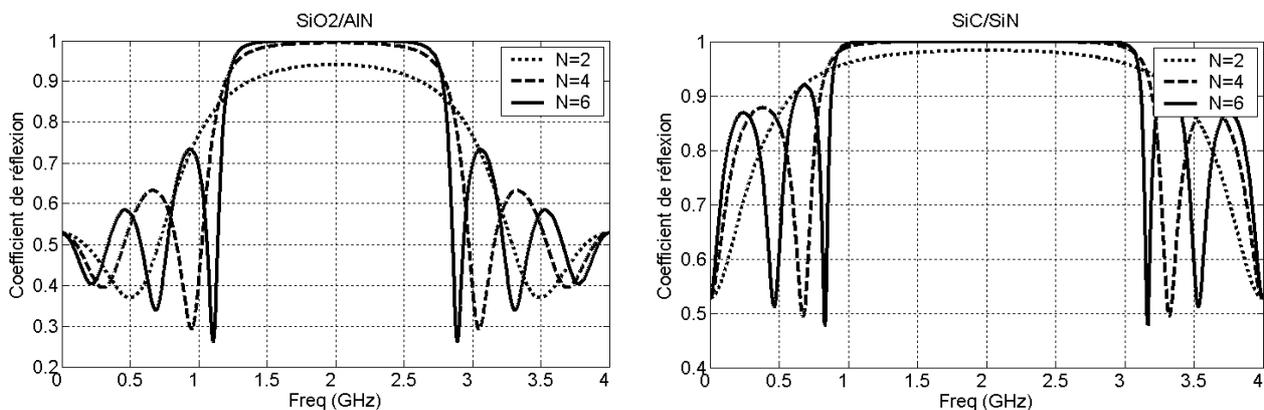
Figure III-8 : Modèle de Mason d'un miroir de Bragg

Dans ce modèle, la matrice de transfert du miroir de Bragg est calculée en multipliant les matrices de transfert de chaque couche et en considérant l'impédance caractéristique du substrat. L'expression des grandeurs acoustiques d'entrée ( $F_1$  et  $v_1$ ) du quadripôle équivalent permet de déterminer l'impédance acoustique d'entrée  $Z_E$ . Le coefficient de réflexion s'exprime alors comme :  $\Gamma = \frac{Z_C - Z_E}{Z_C + Z_E}$  où  $Z_C$  représente l'impédance caractéristique du matériau de l'électrode inférieure.

Sur la Figure III-9, nous avons tracé le coefficient de réflexion acoustique  $\Gamma$  d'un miroir de Bragg en fonction du nombre de couches (N) et pour différents couples de matériaux ( $Z_a/Z_b$ ). Ce coefficient est calculé en considérant un substrat de Silicium (Si) et des électrodes en Molybdène (Mo). Les épaisseurs  $d_a$  et  $d_b$  des couches d'impédance caractéristique  $Z_a$  et  $Z_b$  sont calculées à  $f_0=2\text{ GHz}$  grâce à la relation (III.41).

$$d = \frac{v_{\text{acoustique}}}{4f_0} \quad (\text{III.41})$$

On obtient, pour le couple  $\text{SiO}_2/\text{AlN}$ ,  $d_a = 0,725\ \mu\text{m}$  et  $d_b = 1,303\ \mu\text{m}$ . Pour le couple  $\text{SiC}/\text{SiN}$ ,  $d_a = 0,325\ \mu\text{m}$  et  $d_b = 1,237\ \mu\text{m}$ .



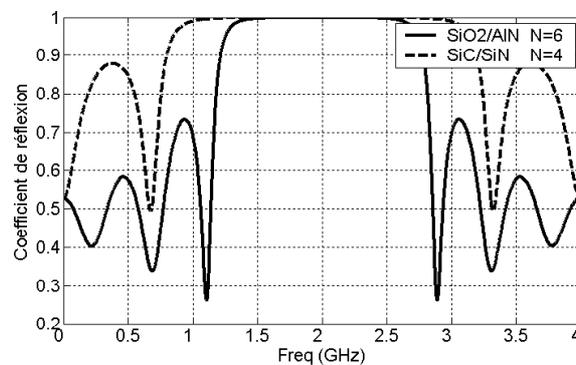
**Figure III-9 : Coefficient de réflexion acoustique d'un miroir de Bragg**

Le but du miroir ou réflecteur de Bragg est d'isoler acoustiquement le résonateur élémentaire et le substrat. Lorsque le coefficient de réflexion vaut 1, l'onde acoustique générée dans la couche piézoélectrique se réfléchit totalement et reste confinée dans le résonateur élémentaire. La qualité de l'isolation est donc déterminée par la largeur de la gamme de fréquence sur laquelle le coefficient de réflexion est proche de 1. On remarque sur la Figure III-9 que l'isolation dépend à la fois du nombre de couches et du couple de matériaux utilisés.

Les couches quart d'onde permettent une recombinaison destructive (par opposition de phase) des ondes réfléchies aux interfaces. Ainsi, l'onde transmise d'une couche à l'autre est de plus en plus atténuée. Plus le nombre de couche est élevé, plus l'énergie acoustique transmise au substrat est faible. On remarque aussi que l'augmentation du nombre de couche permet de faire varier la position des lobes secondaires en dehors de la bande passante. Ce

phénomène peut être mis à contribution en ajustant la position d'un « zéro de réflexion » sur une fréquence de résonance parasite que l'on cherche à atténuer. Enfin, l'atténuation hors bande explique l'intérêt du réflecteur de Bragg dans les structures SCF (Stacked Crystal Filter) mentionnées au chapitre I.

Le nombre de couches nécessaire à l'obtention d'une bonne isolation sur une large gamme de fréquence dépend aussi des matériaux et surtout du rapport de leur impédance acoustique. Dans le cas de la Figure III-10, le rapport  $Z(\text{SiO}_2)/Z(\text{AlN})$  est environ égal à 0,4 et, pour le couple  $\text{SiC}/\text{SiN}$ , ce rapport d'environ 0,8. Plus ce rapport est élevé, moins le nombre de couche est important.



**Figure III-10 : Coefficient de réflexion acoustique d'un miroir de Bragg**

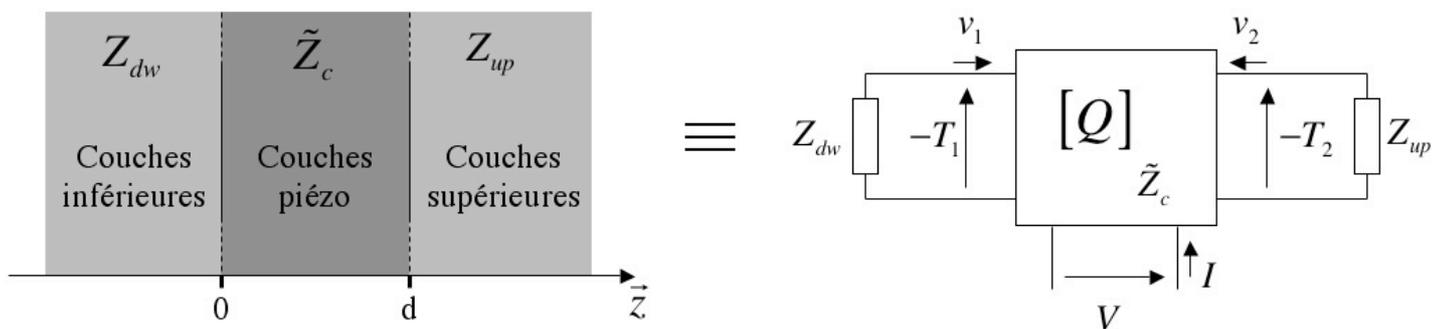
On peut voir sur la Figure III-10 que, pour une même plage de réflexion totale ( $\Gamma=1$ ), le nombre de couches nécessaires avec le couple  $\text{SiO}_2/\text{AlN}$  est plus important que pour le couple  $\text{SiC}/\text{SiN}$ . De plus, la bande passante est plus large. Ceci permet d'obtenir une grande flexibilité dans la conception de filtres à résonateurs BAW puisqu'un même miroir peut être utilisé pour des résonateurs fonctionnant à des fréquences différentes. Le choix des matériaux est donc primordial puisque le réflecteur de Bragg constitue le « socle » de toute structure SMR. Il s'effectue en tenant compte des paramètres acoustiques et des contraintes technologiques.

Le modèle de Mason est donc très utile lorsque l'analyse du comportement acoustique est nécessaire. Il dissocie clairement la partie mécanique de la partie électrique dans le problème piézoélectrique. La résolution analytique fait que ce modèle n'impose aucune restriction fréquentielle. Il permet donc de calculer la réponse en fréquence du résonateur en dehors de la résonance et notamment de prévoir l'apparition des harmoniques supérieures du mode fondamental.

### III.2 MODELE DE LA PERMITTIVITE PIEZOELECTRIQUE

La notion de permittivité piézoélectrique a été introduite par K.A. Ingebritsen en 1969 [40] pour exprimer les conditions aux limites électriques auxquelles doivent satisfaire les ondes élastiques, en particulier les ondes de surface, dans un matériau piézoélectrique. Cette formulation 1D du problème piézoélectrique permet de déterminer l'impédance électrique du résonateur BAW et d'inclure le comportement acoustique dans une grandeur électrique, la permittivité. Le résonateur est alors considéré comme une capacité particulière dont la permittivité du diélectrique (couche piézoélectrique) varie en fonction de la fréquence. Contrairement au modèle de Mason, ce modèle se place du point de vue électrique et considère le problème acoustique de manière secondaire. Il ne permet donc pas d'accéder aux grandeurs mécaniques. Son principal avantage est d'être intégrable dans des logiciels de simulation électromagnétique.

Considérons le résonateur SMR de la Figure III-2b. La couche piézoélectrique du résonateur élémentaire est représentée par l'hexapôle équivalent de la Figure III-4b. L'ensemble des couches supérieures peut être représenté par l'impédance acoustique ramenée ( $Z_{up}$ ) au port acoustique de sortie ( $z=d$ ) et l'ensemble des couches inférieures, par l'impédance acoustique ramenée ( $Z_{dw}$ ) au port acoustique d'entrée ( $z=0$ ). On obtient alors le schéma de la Figure III-11.



**Figure III-11 : Schéma équivalent d'un résonateur BAW dans le modèle de la permittivité piézoélectrique**

On cherche maintenant à déterminer le rapport  $V/I$  et donc l'impédance électrique du résonateur. Pour ce faire, nous considérons l'expression (III.31) de la tension  $V$  appliquée sur les faces de la couche piézoélectrique et l'expression (III.33) de la matrice de transfert  $[Q]$  d'une couche piézoélectrique, rappelées ci-après.

$$\boxed{V = \frac{I}{jC_0\omega} - \frac{hC_0}{jC_0\omega} [v_1 + v_2]} \quad \text{avec :} \quad h = \frac{e}{\varepsilon} \text{ et } C_0 = \varepsilon \frac{S}{d} \quad (\text{III.42})$$

$$\begin{bmatrix} -T_1 \\ v_1 \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(kd) & j\tilde{Z}_c \sin(kd) & \frac{h}{j\omega S} (\cos(kd) - 1) \\ \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} & \cos(kd) & \frac{h}{j\omega S} \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} \\ -\frac{hC_0}{jC_0\omega} \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} & -\frac{hC_0}{jC_0\omega} (\cos(kd) - 1) & \frac{1}{jC_0\omega} \left( 1 - k^2 \frac{\sin(kd)}{kd} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -T_2 \\ -v_2 \\ I \end{bmatrix} \quad (\text{III.43})$$

On peut alors écrire :  $Z_{dw} = \frac{T_1}{v_1}$  et  $Z_{up} = \frac{T_2}{v_2}$

Soit, d'après (III.43) :

$$Z_{dw} = - \frac{\cos(kd)(-T_2) + j\tilde{Z}_c \sin(kd)(-v_2) + (\cos(kd) - 1) \left( \frac{h}{j\omega S} I \right)}{\frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} (-T_2) + \cos(kd)(-v_2) + \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} \left( \frac{h}{j\omega S} I \right)} \quad (\text{III.44})$$

En introduisant  $Z_{up}$  et en posant  $z_{dw} = \frac{Z_{dw}}{\tilde{Z}_c}$  et  $z_{up} = \frac{Z_{up}}{\tilde{Z}_c}$  il vient :

$$\boxed{v_2 = \frac{h}{j\omega S \tilde{Z}_c} \frac{(jz_{dw} \sin(kd) + \cos(kd) - 1)}{(z_{up} + z_{dw}) \cos(kd) + j(z_{up} z_{dw} + 1) \sin(kd)} I} \quad (\text{III.45})$$

D'après (III.43), l'expression de  $v_1$  est la suivante :

$$v_1 = \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} (-T_2) + \cos(kd)(-v_2) + \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} \left( \frac{h}{j\omega S} I \right) \quad (\text{III.46})$$

En introduisant  $Z_{up}$  et en posant  $z_{up} = \frac{Z_{up}}{\tilde{Z}_c}$  il vient :

$$\boxed{v_1 = - \left( jz_{up} \sin(kd) + \cos(kd) \right) v_2 + \frac{j \sin(kd)}{\tilde{Z}_c} \left( \frac{h}{j\omega S} I \right)} \quad (\text{III.47})$$

En introduisant (III.45) et (III.47) dans (III.42) et en posant  $k_t^2 = \frac{e^2}{\epsilon \tilde{c}} = \frac{h^2 \epsilon}{\tilde{c}}$ , on obtient :

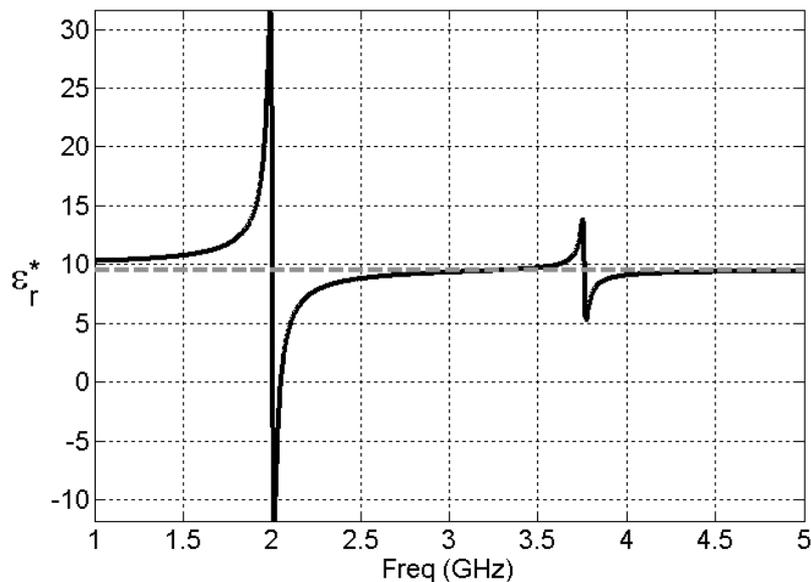
$$\frac{V}{I} = \frac{1}{jC_0 \omega} \left( 1 - k_t^2 \frac{2 \tan(kd)}{kd} \frac{(z_{up} + z_{dw}) \cos^2\left(\frac{kd}{2}\right) + j \sin(kd)}{(z_{up} + z_{dw}) \cos(kd) + j(z_{up} z_{dw} + 1) \sin(kd)} \right) \quad (\text{III.48})$$

On exprime alors la permittivité piézoélectrique relative comme :

$$\epsilon_r^* = \epsilon_r \left( 1 - k_t^2 \frac{2 \tan(kd)}{kd} \frac{(z_{up} + z_{dw}) \cos^2\left(\frac{kd}{2}\right) + j \sin(kd)}{(z_{up} + z_{dw}) \cos(kd) + j(z_{up} z_{dw} + 1) \sin(kd)} \right)^{-1} \quad (\text{III.49})$$

On remarque que le comportement acoustique du résonateur est représenté dans l'expression de la permittivité par un terme dépendant des paramètres mécaniques de chaque couche et de la fréquence ( $k = \frac{2\pi f}{v_{acoustique}}$ ).

Nous avons tracé sur la Figure III-12 la permittivité piézoélectrique, en fonction de la fréquence, d'un résonateur FBAR composé d'une couche de Nitrure d'Aluminium (AlN) d'épaisseur 1  $\mu\text{m}$ , d'électrodes en Molybdène (Mo) de 300 nm et d'une membrane de SiO<sub>2</sub> de 400nm.



**Figure III-12 : Tracé de la permittivité piézoélectrique**

La permittivité relative de l'AlN est de 9,5. On peut voir sur la courbe de la Figure III-12 que la permittivité piézoélectrique varie autour de cette valeur. Le comportement acoustique du résonateur BAW se retrouve dans les variations de cette permittivité. À 2 GHz, on observe une première singularité. Elle correspond à la résonance acoustique du mode fondamental ( $\lambda/2$ ). La deuxième singularité vers 3,7 GHz correspond au premier mode harmonique ( $3\lambda/2$ ).

Ce modèle est basé sur la même formulation analytique 1D que le modèle de Mason. Il permet donc lui aussi de calculer la réponse en fréquence du résonateur en dehors de la résonance et de prévoir l'apparition des harmoniques supérieurs du mode fondamental. Il ne permet cependant pas d'accéder aux grandeurs acoustiques comme la contrainte  $T$  ou la vitesse  $v$ .

Son principal avantage vient de sa formulation. Son écriture compacte du problème piézoélectrique permet la prise en compte du problème acoustique dans les outils de simulation électromagnétique. Le résonateur BAW y est considéré sous la forme d'un substrat particulier dont la permittivité dépend de la fréquence. Ceci permet d'étudier la réponse en fréquence en se plaçant du point de vue électrique. On peut alors tirer parti de l'analyse électromagnétique pour étudier l'impact des pertes métalliques dans les électrodes et les accès, identifier les couplages électrique éventuels entre résonateurs ou optimiser le couplage électrique entre le motif d'excitation et le résonateur.

Le seul outil commercial intégrant la notion de permittivité piézoélectrique s'appelle EM3DS [14]. Ce logiciel, développé par la société MEM Research, est basé sur une résolution des équations de Maxwell par la méthode de Diffraction-Résonance Transversale Généralisée (GTRD). Cette méthode peut être qualifiée de méthode des moments 3D (3D MoM) puisqu'elle prend en compte les courants électriques volumiques et utilise les fonctions de Green [41].

N'ayant pas à disposition ce logiciel, nous avons mis en oeuvre la notion de permittivité piézoélectrique dans l'outil de simulation EMXD développé au sein du laboratoire Xlim. Ce logiciel, basé sur une résolution des équations de Maxwell par la méthode des éléments finis, permet de considérer directement des matériaux dont la permittivité peut être complexe et variable en fonction de la fréquence. L'idée était aussi de pouvoir tirer parti de la paramétrisation en fréquence pour réduire le temps de calcul.

---

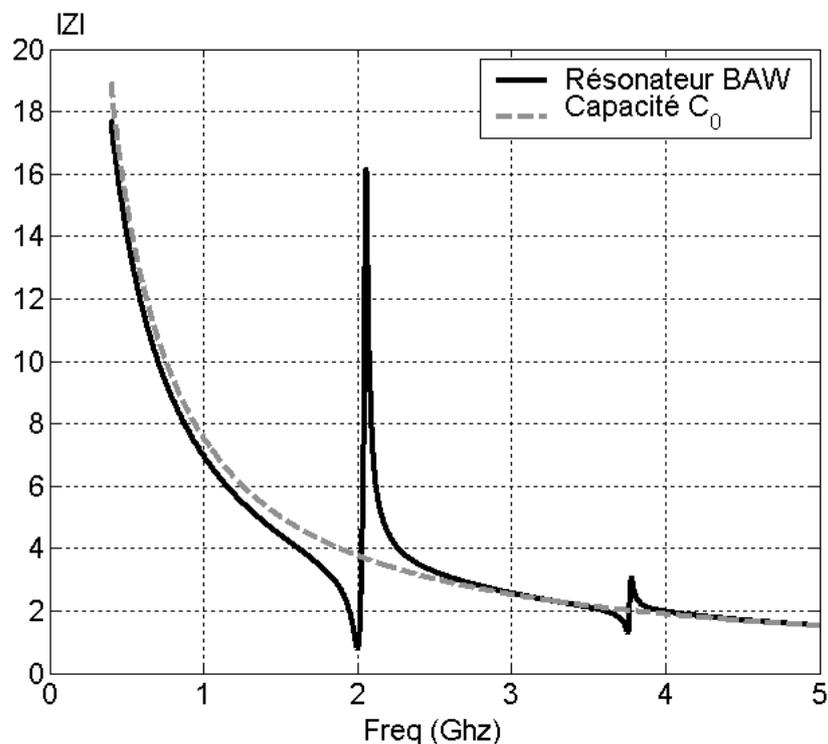
Malheureusement, la trop grande différence entre de dimensions latérales et les épaisseurs ne permettait pas d'obtenir, à ce moment de la thèse, un maillage correct et entraînait des problèmes de résolution dans la formulation en champ électrique et magnétique utilisée dans la méthode des éléments finis. Nous n'avons pas poussé plus loin nos investigations dans cette voie. Nous avons choisi de développer dans notre logiciel EMXD une formulation en déplacement mécanique et potentiel électrique, plus stable numériquement et permettant de résoudre directement le problème piézoélectrique en trois dimensions. Cette tâche sera présentée au Chapitre IV.

Les modèles unidimensionnels dits « acoustiques » (modèle de Mason ou permittivité piézoélectrique) sont réservés aux cas où l'on connaît les caractéristiques acoustiques des matériaux employés nécessaires au calcul des impédances acoustiques. Ils sont particulièrement bien adaptés pour étudier le comportement acoustique des résonateurs et aide à la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu. Néanmoins, il n'est pas toujours possible d'accéder aux valeurs des constantes acoustiques de chaque matériau, soit parce que les techniques de dépôt employées entraînent une trop grande dispersion des caractéristiques physiques des couches soit parce que le fabricant de résonateur ne les fournis pas à l'utilisateur. Une approche par modélisation de la réponse électrique du résonateur doit alors être envisagée. Autour de la résonance, il est possible de définir un schéma électrique équivalent composé d'éléments localisés. C'est le modèle MBVD (Modified Butterworth Van-Dyke).

#### IV LE MODELE MBVD (MODIFIED BUTTERWORTH VAN-DYKE)

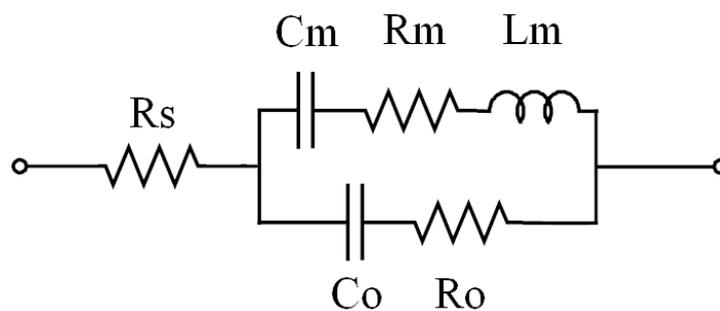
Le modèle MBVD (Modified Butterworth Van-Dyke) peut être qualifié de modèle « électrique ». Il est issu de la mesure des résonateurs et rend compte de leur comportement électrique. Il est composé d'éléments électriques localisés dont les valeurs dépendent de certains paramètres acoustiques « macroscopiques » comme le coefficient de couplage électromécanique effectif  $k_{eff}^2$ , les fréquences de résonance  $f_s$  (résonance série) et d'antirésonance  $f_p$  (résonance parallèle) ou les facteurs de qualité série  $Q_s$  et parallèle  $Q_p$ . Il est surtout utilisé lorsque les caractéristiques acoustiques des matériaux employés ne sont pas facilement accessibles. De plus, il est intégrable dans des logiciels circuits comme ADS ou SPICE, ce qui permet de synthétiser des réponses en fréquences complexes (filtres).

Nous avons tracé sur la Figure III-13 le module de l'impédance électrique d'une capacité  $C_0$  et d'un résonateur FBAR simulée par un modèle 1D. La capacité est composée d'un diélectrique de permittivité relative 9.5 (identique à l'AlN), d'épaisseur 1  $\mu\text{m}$  et de surface 500x500  $\mu\text{m}^2$ . Le résonateur est composé d'une couche de Nitrure d'Aluminium (AlN) d'épaisseur 1  $\mu\text{m}$ , d'électrodes en Molybdène (Mo) de 300 nm et d'une membrane de  $\text{SiO}_2$  de 400nm. Sa surface est également de 500x500  $\mu\text{m}^2$ .



**Figure III-13 : Module de l'impédance d'un résonateur FBAR**

On remarque sur la Figure III-13 que la réponse électrique du résonateur suit celle de la capacité, mais possède des singularités pour certaines fréquences. Ces dernières sont dues aux résonances acoustiques de la structure. On peut donc en déduire que le résonateur peut être modélisé électriquement par une capacité  $C_0$  à laquelle on ajoute, en parallèle, un élément  $Z_m$  appelé impédance motionnelle. Cet élément est composé d'un circuit RLC série dont la fréquence de résonance est la même que celle du résonateur. Ce circuit électrique équivalent est connu sous le nom de « **modèle BVD** » (Butterworth Van-Dyke). Le M dans le nom (Modified) fut rajouté en même temps que la résistance  $R_s$  pour tenir compte des pertes électriques dans les électrodes.

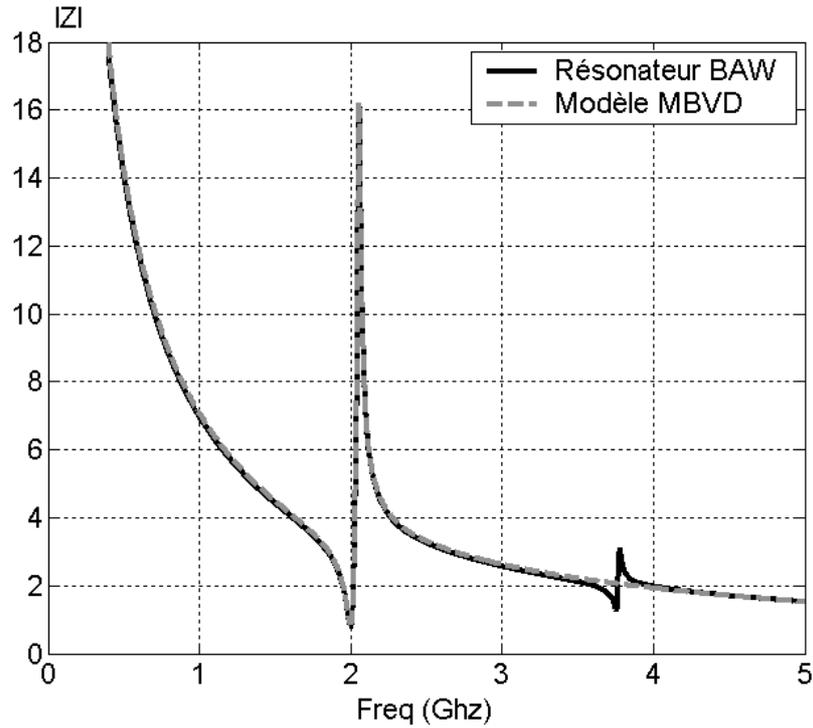


**Figure III-14 :** Modèle MBVD d'un résonateur BAW

Le schéma électrique du modèle MBVD (Figure III-14) d'un résonateur BAW est donc constitué des éléments suivants :

- $C_0$  représente la capacité statique formée par les électrodes et la couche piézoélectrique
- $R_0$  représente les pertes électriques par courant de fuite dans la couche piézoélectrique
- $R_m$  représente les pertes mécaniques sur l'ensemble de la structure
- $L_m$  et  $C_m$  traduisent le comportement acoustique du résonateur
- $R_s$  représente les pertes métalliques dans les électrodes

On peut voir sur le tracé de la Figure III-15 que la réponse du circuit équivalent MBVD correspond bien avec celle du résonateur simulé par un modèle 1D. Cependant, on peut remarquer que le premier harmonique n'est pas représenté. En effet, ce schéma électrique est uniquement valable autour de la résonance du mode fondamental. Pour tenir compte des modes harmoniques, il faudrait rajouter une impédance motionnelle pour chaque résonance.



**Figure III-15 : Module de l'impédance électrique d'un résonateur BAW, simulée et de son modèle MBVD**

L'impédance du modèle MBVD est la suivante :

$$Z_{MBVD} = R_s + \frac{\left( \frac{1}{jC_0\omega} + R_0 \right) \left( R_m + j \left( L_m\omega - \frac{1}{C_m\omega} \right) \right)}{\left( R_0 + R_m \right) + j \left( L_m\omega - \frac{C_m + C_0}{C_m C_0\omega} \right)} \quad (\text{III.50})$$

On peut en extraire la pulsation de résonance (série)  $\omega_s$  pour laquelle l'impédance est minimale et la pulsation d'antirésonance (résonance parallèle)  $\omega_p$  pour laquelle l'impédance est maximale.

Elles sont définies de la manière suivante :

$$L_m\omega_s - \frac{1}{C_m\omega_s} = 0 \Rightarrow \omega_s = \frac{1}{\sqrt{L_m C_m}} \quad (\text{III.51})$$

Et :

$$L_m\omega_p - \frac{C_m + C_0}{C_m C_0\omega_p} = 0 \Rightarrow \omega_p = \omega_r \sqrt{\frac{C_m + C_0}{C_0}} \quad (\text{III.52})$$

On définit alors le coefficient de couplage électromécanique effectif  $k_{eff}^2$  grâce à la relation suivante :

$$k_{eff}^2 = \frac{\pi^2}{4} \frac{f_p - f_s}{f_p} \quad (III.53)$$

Les pulsations de résonance et d'antirésonance ne dépendent que des valeurs de  $L_m$ ,  $C_m$  et  $C_o$ . Il est donc possible d'exprimer leur valeur en fonction des fréquences de résonance  $f_s$  et d'antirésonance  $f_p$ . Les autres éléments du modèle MBVD dépendent des paramètres technologiques du résonateur.

$$C_o = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{S}{d} \quad (III.54)$$

$$C_m = C_o \left[ \left( \frac{f_p}{f_s} \right)^2 - 1 \right] \quad (III.55)$$

$$L_m = \frac{1}{C_m (2\pi f_s)^2} \quad (III.56)$$

$$R_m = \frac{L_m 2\pi f_s}{Q_s} \quad (III.57)$$

$$R_o = \frac{1}{Q_p C_o 2\pi f_p} \quad (III.58)$$

$$R_s = R_{\square} \cdot 2S \quad (III.59)$$

Avec :

- $Q_s$  : facteur de qualité à la fréquence de résonance série
- $Q_p$  : facteur de qualité à la fréquence de résonance parallèle
- $\varepsilon_r$  : permittivité relative du matériau piézoélectrique
- $S$  : Surface en regard des électrodes
- $d$  : épaisseur de la couche piézoélectrique
- $R_{\square}$  : résistance carrée des électrodes

Par sa simplicité, ce modèle est très utilisé pour la modélisation des résonateurs BAW. Le calcul des éléments localisés est très rapide et ne nécessite pas de gros moyens informatiques. L'automatisation de leur détermination est même possible par ajustement paramétrique de courbes [42 et 43]. L'utilisation de ce modèle dans un logiciel circuit permet donc d'envisager la synthèse rapide de réponses en fréquence plus complexes (filtres).

## V APPLICATION DU MODELE MBVD A LA SYNTHÈSE DE FILTRE

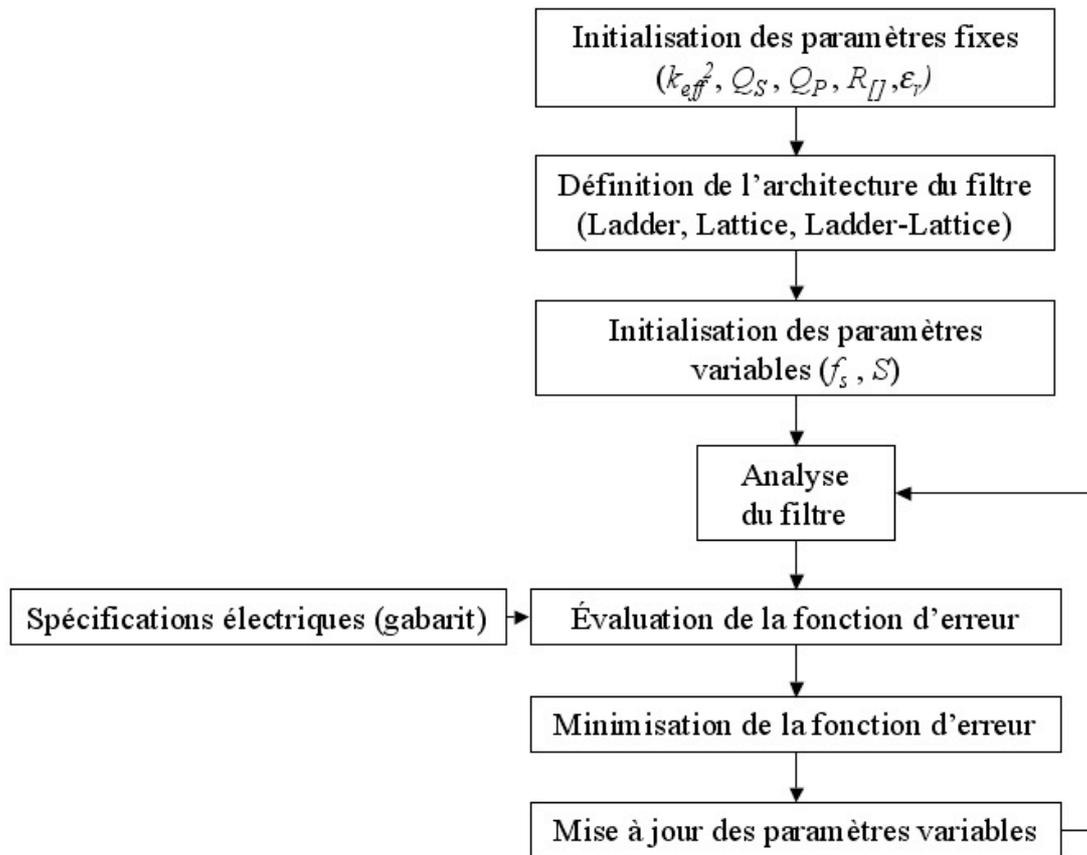
Dans le cadre de cette thèse, nous avons développé un programme d'optimisation de filtres à résonateurs BAW basé sur le modèle MBVD. La simplicité et le nombre réduit de données technologiques nécessaires à son calcul ont été déterminant dans le choix de ce modèle. Dans ce programme, chaque résonateur est représenté par son modèle électrique équivalent MBVD. La synthèse s'effectue en calculant l'impédance de chaque résonateur, en synthétisant la réponse globale du filtre et en la comparant avec un gabarit donné. L'optimisation de cette réponse permet d'extraire les paramètres topologiques de chaque résonateur et ainsi d'envisager sa fabrication.

### V.1 METHODOLOGIE

La synthèse de filtres basés sur des résonateurs électromagnétiques couplés débute généralement par la sélection d'une fonction de transfert qui satisfait les spécifications électriques. La classe des fonctions de transfert réalisables est alors bien connue (Butterworth, Chebyshev, pseudo-elliptique) et les caractéristiques des résonateurs et des éléments de couplage peuvent être déterminés de manière systématique.

L'implémentation d'une telle méthodologie pour des filtres à résonateurs BAW est d'une certaine façon impossible puisque la classe des fonctions de transfert réalisables est contrainte par la co-existence des modes de résonance et d'anti-résonance de chaque résonateur BAW. De plus, la technologie BAW elle-même limite la flexibilité des caractéristiques de filtrage, fixant par exemple à deux le nombre de résonateurs (chargés, non-chargés) ayant des fréquences de résonance et d'anti-résonance différentes. On peut néanmoins tirer parti de cette limitation puisque le nombre total de paramètres utilisables pour synthétiser le filtre est de cette façon réduit. Ceci justifie aussi le choix d'une méthode d'optimisation locale pour la synthèse des filtres à résonateurs BAW.

La méthodologie de synthèse proposée est décrite par l'organigramme de la Figure III-16.



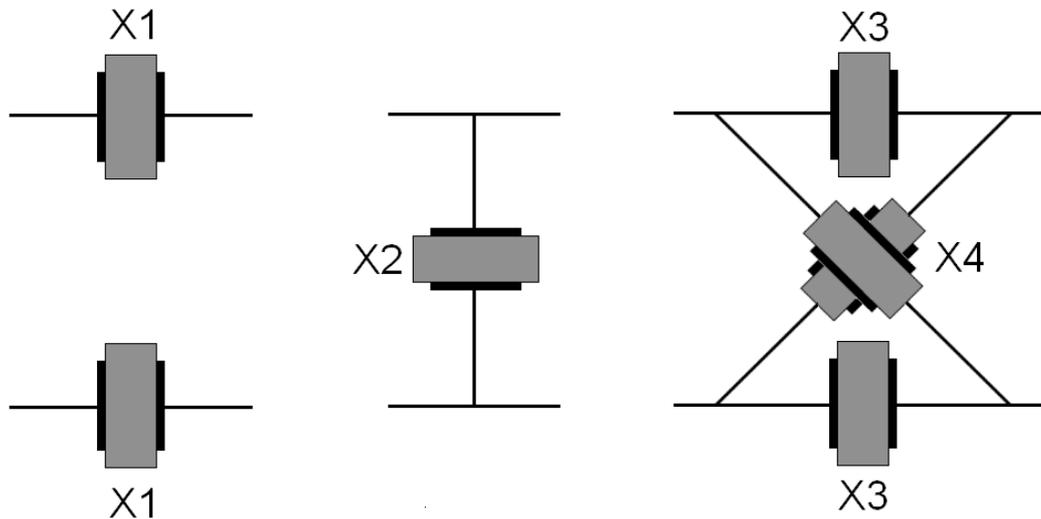
**Figure III-16 : Méthodologie de synthèse de filtre BAW**

La synthèse commence par l'initialisation des paramètres de chaque résonateur et par la définition de l'architecture du filtre. Les paramètres variables des résonateurs sont optimisés en minimisant une fonction d'erreur qui dépend des paramètres [S] du gabarit donné.

## V.2 DEFINITION DE L'ARCHITECTURE DU FILTRE

Le filtre en technologie BAW est fabriqué sur un même wafer. Tous les résonateurs possèdent donc la même épaisseur pour la couche piézoélectrique. Cette dernière fixe la fréquence de résonance. Pour synthétiser une réponse de filtre avec des résonateurs, il est nécessaire d'avoir au moins deux types de résonateur possédant des fréquences de résonance différentes. En technologie BAW, ce décalage est effectué en déposant une couche de métal ou d'oxyde sur la surface de l'électrode supérieure. Cette surépaisseur modifie les conditions de résonance acoustique. Elle agit comme une charge et permet de diminuer la fréquence de résonance.

En optimisant le décalage fréquentiel et le couplage électrique des résonateurs, il est possible de synthétiser des réponses en fréquence complexes répondant à un gabarit. Sur la Figure III-17, sont représentés les blocs élémentaires utilisés pour définir l'architecture du filtre BAW. Ces blocs permettent une synthèse de filtres différentiels symétriques.



**Figure III-17 : Blocs élémentaires pour la définition de l'architecture du filtre**

Les deux premiers blocs permettent de définir un filtre en échelle différentiel (Ladder) et le troisième bloc représente un filtre en treillis différentiel (Lattice). L'assemblage des trois permet d'envisager une architecture mixte échelle-treillis. Le décalage fréquentiel est appliqué sur les résonateurs montés en parallèle (X2 et X4 sur la Figure III-17). Le nombre de résonateurs et leur agencement sont définis avant la synthèse du filtre.

### V.3 SYNTHÈSE DU FILTRE

Les paramètres fixés au début de la synthèse sont :

- Le coefficient de couplage électromécanique effectif  $k_{eff}^2$
- Le coefficient de qualité série  $Q_s$
- Le coefficient de qualité parallèle  $Q_p$
- La résistance carrée des électrodes  $R_{\square}$
- La permittivité du matériau piézoélectrique  $\epsilon_r$

Les paramètres variables sont la fréquence de résonance  $f_s$  et la surface  $S$

La synthèse du filtre s'effectue en minimisant une fonction d'erreur. Cette fonction tient compte des spécifications électriques (gabarit du filtre) définies par les valeurs minimums ou maximums des paramètres  $[S]$ . Ces spécifications sont connues sur un ensemble d'intervalles de fréquence qui couvrent le spectre désiré.

Les paramètres variables sont optimisés de manière itérative en estimant une direction de minimisation (calcul du gradient). Les paramètres des résonateurs à optimiser sont contraints par des valeurs minimums et maximums dont certaines sont communes à tous les résonateurs.

#### V.4 CONSIDERATIONS LOGICIELLES

Ce logiciel de synthèse de filtre a été développé sous MATLAB. Cet outil de développement a été choisi pour son interopérabilité avec d'autres systèmes standards d'analyse.

##### V.4.1 PARAMETRES ET VARIABLES D'OPTIMISATION

Avant de lancer la synthèse du filtre, les paramètres fixes suivants doivent être spécifiés :

- Paramètres technologiques :  $k_{eff}^2$ ,  $Q_s$  et  $Q_p$  (valeurs distinctes pour les résonateurs séries et parallèles)
- Paramètres d'optimisation : Paramètres S du gabarit et plan de fréquence (fichier texte), nombre maximum d'itérations
- Architecture du filtre : disposition des blocs élémentaires (ladder série ou parallèle, lattice)

Les paramètres variables à optimiser sont :

- Center frequency ( $CF$ ) : fréquence de résonance ( $f_s$ ) fixée pour les résonateurs séries et initiale pour les résonateurs parallèles.
- Frequency shift ratio ( $FSR$ ) : décalage des fréquences de résonances des résonateurs séries et parallèles (fonction de l'épaisseur de surcharge)
- Size ratios ( $SR$ ) : rapport de taille d'électrodes entre résonateurs (proportionnel à  $S$ )

Pour chaque paramètre variable, une valeur nominale, maximale et minimale sont spécifiées.

### V.4.2 ANALYSE DU FILTRE

L'analyse du filtre est effectuée par une fonction qui récupère les paramètres variables, les paramètres technologiques fixés et l'arrangement des blocs élémentaires. Les éléments de chaque résonateur (chargés ou non) sont calculés grâce aux paramètres précédents et à partir des étapes suivantes :

1. Calcul de la fréquence de résonance parallèle initiale

$$f_p = \frac{CF}{1 - \frac{4}{\pi^2} k_{eff}^2}$$

2. Calcul de  $C_m$  et  $L_m$  initiaux

$$C_m = C_o \left[ \left( \frac{f_s}{f_p} \right)^2 - 1 \right] \quad \text{et} \quad L_m = \frac{1}{C_m (2\pi f_s)^2}$$

3. Si le résonateur n'est pas chargé (monté en série), ajustement à l'itération  $n+1$  de  $C_o$ ,  $C_m$  et  $L_m$  calculées à l'itération  $n$  et grâce aux rapports de taille optimisé ( $SR$ ).

$$C_o(n+1) = C_o(n) \cdot SR, \quad C_m(n+1) = C_m(n) \cdot SR, \quad L_m(n+1) = L_m(n) / SR$$

Si le résonateur est chargé (monté en parallèle), ajustement des valeurs grâce à  $SR$  et  $FSR$

$$C_o(n+1) = C_o(n) \cdot \frac{SR}{1 + FSR}, \quad C_m(n+1) = C_m(n) \cdot \frac{SR}{1 + FSR}, \quad L_m(n+1) = \frac{L_m(n)}{SR(1 + FSR)}$$

4. Calcul de  $f_s$  et  $f_p$

$$f_s = \frac{1}{2\pi \sqrt{L_m C_m}} \quad f_p = f_s \sqrt{1 + \frac{C_m}{C_o}}$$

5. Calcul des pertes

$$R_m = \frac{L_m 2\pi f_s}{Q_s} \quad R_o = \frac{1}{Q_p C_o 2\pi f_p} \quad R_s = f(R_o, S)$$

L'impédance de chaque bloc élémentaire est ensuite calculée en prenant en compte la valeur des éléments du modèle MBVD. La synthèse du filtre s'effectue en chaînant les blocs élémentaires et en extrayant les paramètres [S].

### V.4.3 FONCTION D'OPTIMISATION

La fonction d'optimisation est calculée en faisant la somme pondérée des erreurs pour chaque point de fréquence. L'erreur correspond à la différence entre la valeur calculée et le gabarit. Des poids différents peuvent être appliqués aux erreurs provenant du paramètre  $S_{21}$  dans la bande passante ou hors bande.

### V.4.4 OPTIMISATION MULTI-VARIABLES CONTRAINTE

Les paramètres variables sont optimisés dans une gamme de valeurs fixée. L'optimisation à plusieurs variables contraintes est effectuée grâce à la fonction interne MATLAB *fmincon* (optimization toolbox).

## V.5 EXEMPLE DE SYNTHÈSE D'UN FILTRE RÉPONDANT À LA NORME UMTS

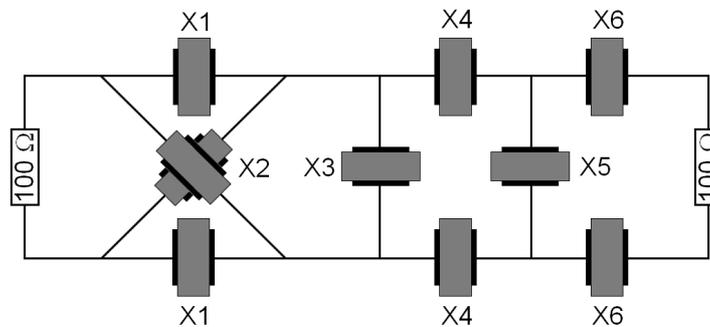
Prenons l'exemple du filtre dont le gabarit est défini dans le Tableau III-1. Ce filtre répond à la norme UMTS.

Contraintes	Bandes de fréquence (MHz)	Valeur maximum de $S_{21}$ (dB)	Valeur minimum de $S_{21}$ (dB)
C <sub>1</sub>	0,009 - 960	-51	-∞
C <sub>2</sub>	960 - 1000	-45	-∞
C <sub>3</sub>	1000 - 1400	-38	-∞
C <sub>4</sub>	1400 - 1844,9	-35	-∞
C <sub>5</sub>	1844,9 - 1879,9	-20	-∞
C <sub>6</sub>	1879,9 - 1884,5	-13	-∞
C <sub>7</sub>	1884,5 - 1900	-6	-∞
C <sub>8</sub>	1900 - 1919,6	0	-∞
C <sub>9</sub>	1919,6 - 1980	0	-3
C <sub>10</sub>	1980 - 2030	0	-∞
C <sub>11</sub>	2030 - 2110	-14	-∞
C <sub>12</sub>	2110 - 2170	-52	-∞
C <sub>13</sub>	2170 - 12750	-45	-∞

**Tableau III-1 : Gabarit de filtre pour la norme UMTS**

La contrainte C<sub>9</sub> définit une bande passante sur la gamme (1919,6 – 1980 MHz) avec une plage de garde à -3dB de 20MHz en entrée et de 50MHz en sortie. Le minimum de  $S_{21}$  autorisé est de -3 dB dans la bande. La particularité de la norme UMTS est de nécessiter une forte réjection en entrée et en sortie de bande. Le filtre doit donc avoir une forte sélectivité.

De plus, la réjection hors bande est assez importante. Ce filtre nécessite donc l'emploi d'une topologie en échelle pour sa sélectivité et d'une topologie en treillis pour son atténuation hors bande. Une architecture mixte échelle-treillis est donc utilisée. La synthèse est effectuée pour des résistances d'entrée et de sortie différentielle de  $100\ \Omega$  (Figure III-18).



**Figure III-18 : Architecture du filtre BAW UMTS**

Les valeurs initiales des paramètres variables sont :

- Nominale :  $CF = 1941\ \text{MHz}$ ,  $FSR = -3.06$  et  $SR = 0.5$
- Minimum :  $CF = 1938\ \text{MHz}$ ,  $FSR = -3.50$  et  $SR = 0.1$
- Maximum :  $CF = 2000\ \text{MHz}$ ,  $FSR = -3.05$  et  $SR = 2.0$

Les valeurs technologiques, issues de mesures sur des technologies standards, sont :

	Résonateurs séries	Résonateurs parallèles
$k_{eff}^2$ (%)	6.2	6.1
$Q_s$	500	500
$Q_p$	300	300

Les valeurs optimisées des éléments du modèle MBVD pour chaque résonateur sont les suivantes :

		X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>	X <sub>6</sub>
Variables optimisées	$f_s$ (MHz)	1954	1898	1954	1898	1954	1898
	$f_p$ (MHz)	2004	1946	2004	1946	2004	1946
	SR	0.459	0.415	0.759	0.721	1.276	0.994
Valeurs des éléments	$R_m$ ( $\Omega$ )	4.58	5.16	2.82	2.92	1.68	2.12
	$L_m$ (nH)	186.6	216.5	118.3	119	70.4	86.3
	$C_m$ (fF)	35	32	59	56	100	77
	$R_\theta$ ( $\Omega$ )	0.39	0.43	0.23	0.25	0.14	0.18
	$C_o$ (pF)	0.68	0.63	1.16	1.07	1.94	1.47
	$R_s$ ( $\Omega$ )	0.19	0.17	0.19	0.20	0.23	0.22

**Tableau III-2 : Valeurs optimisées du filtre BAW UMTS**

Les paramètres [S] correspondants sont tracés sur les Figure III-19 et III-20 .

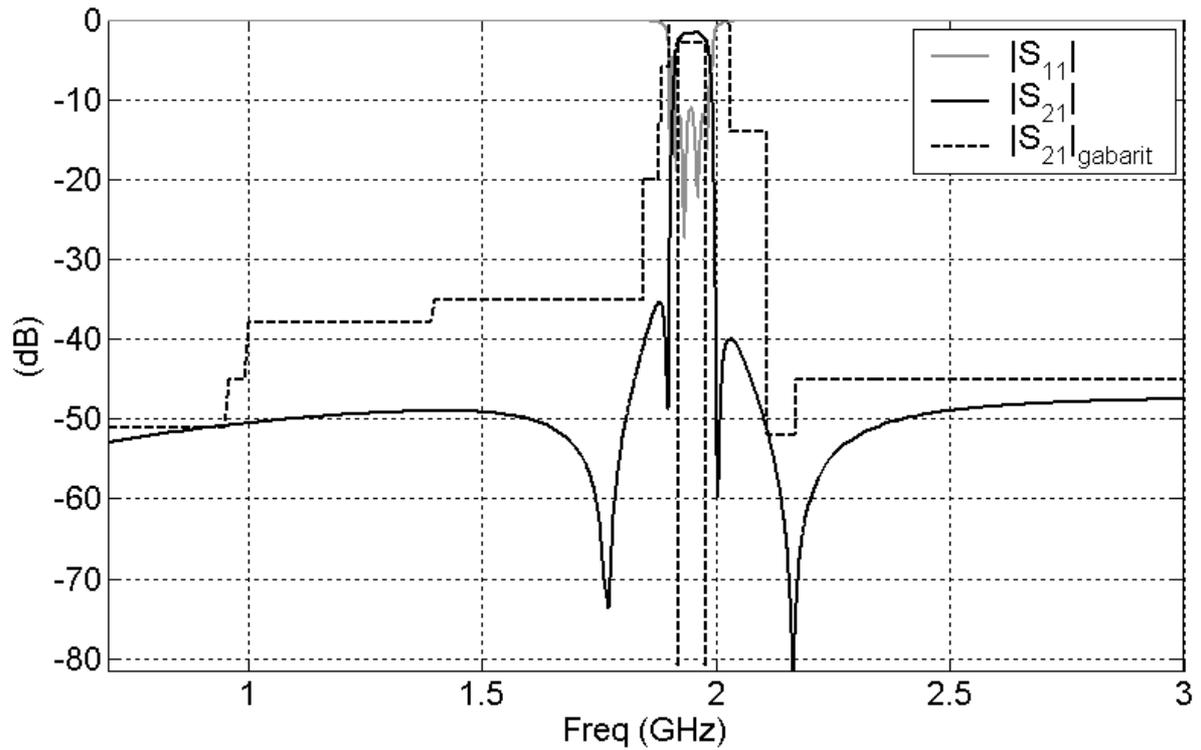


Figure III-19 : Synthèse du filtre BAW UMTS

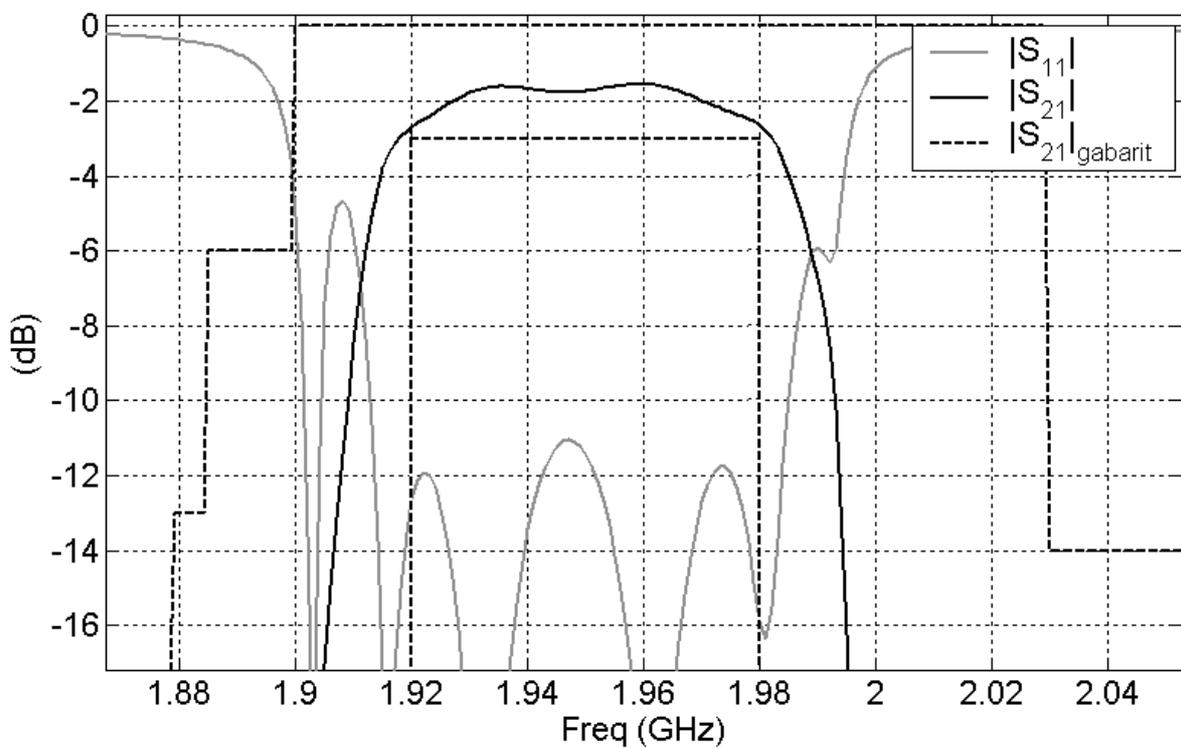


Figure III-20 : Bande passante du filtre BAW UMTS

On remarque que le filtre optimisé respecte bien le gabarit donné, que ce soit dans la bande passante (1920 – 1980 MHz) ou hors bande. Cependant, il reste encore une étape difficilement intégrable dans le modèle MBVD : la prise en compte des accès et des interconnexions. Les pistes métalliques qui relient les résonateurs entre eux ont des formes irrégulières et varient avec la disposition des résonateurs. Il est donc difficile d'évaluer correctement les pertes par conduction dans ces métallisations et d'en tenir compte dans le modèle. De plus, les couplages électriques qui peuvent exister et venir perturber la réponse en fréquence optimisée ne peuvent être pris en compte dans le modèle MBVD.

Le dessin des masques de fabrication permet de définir la géométrie des accès et des interconnexions. En introduisant ce dessin dans un outil de simulation électromagnétique 2D, il est possible de tenir compte de l'ensemble des pertes métalliques sur la totalité de la structure. Le logiciel Momentum nous permet d'aller encore plus loin et de simuler la partie électromagnétique en introduisant les éléments localisés de la branche motionnelle du modèle MBVD.

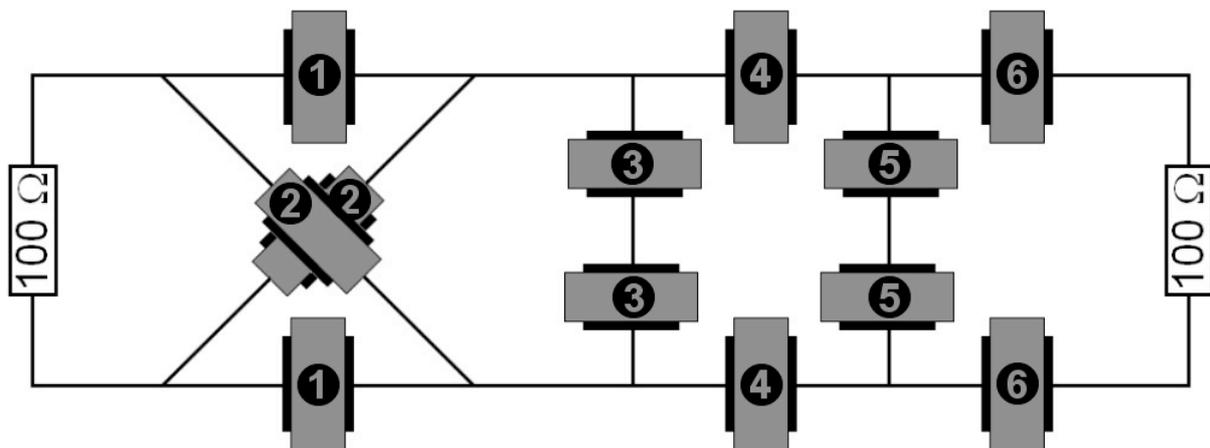


Figure III-21 : Schéma du filtre BAW UMTS sous ADS/Momentum

Nous avons représenté sur la Figure III-22 le masque de fabrication du filtre UMTS de la Figure III-21 et les éléments de la branche motionnelle du modèle MBVD obtenu grâce à notre outil d'optimisation. Les endroits les plus grisés correspondent à la superposition des électrodes. Les résonateurs montés en parallèles sont constitués de deux résonateurs identiques en série.

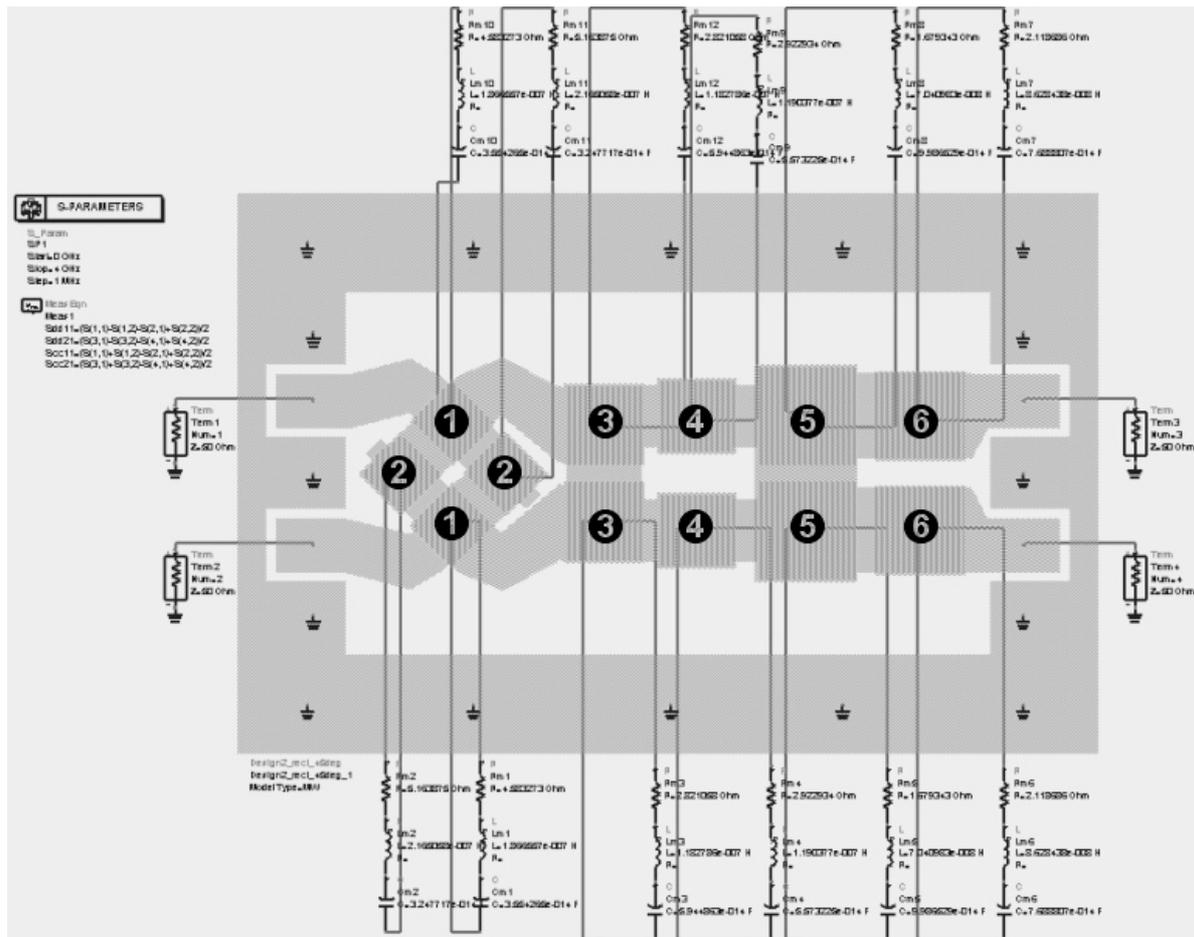


Figure III-22 : Cosimulation du filtre BAW UMTS sous ADS/Momentum

La simulation du filtre UMTS sous ADS nous donne la réponse des Figures III-23 et III-24.

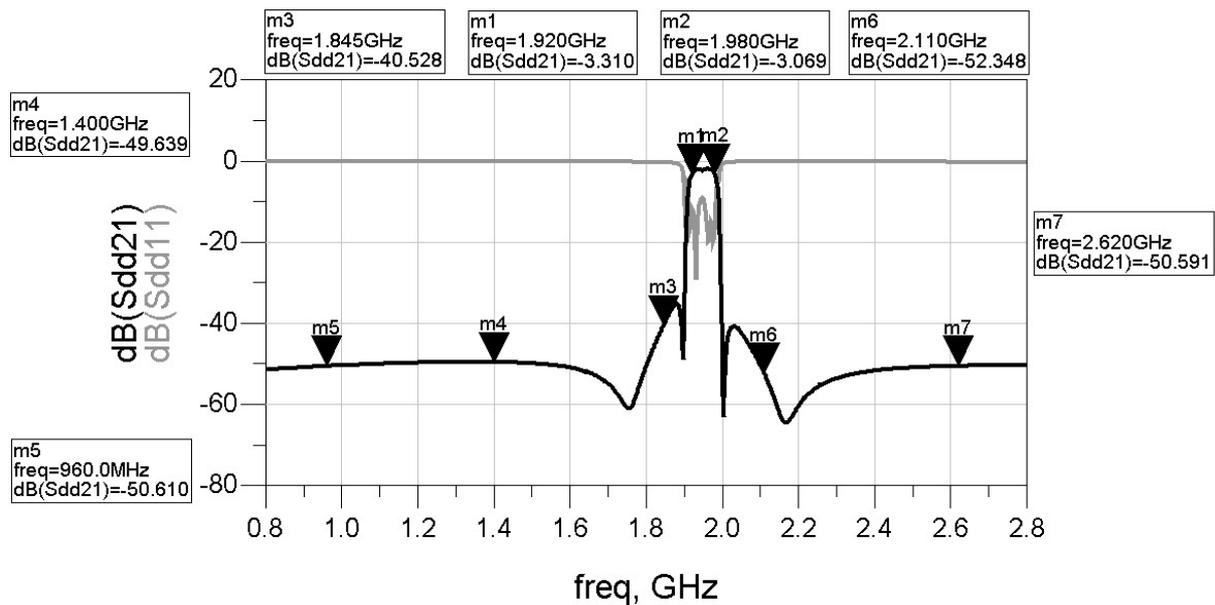
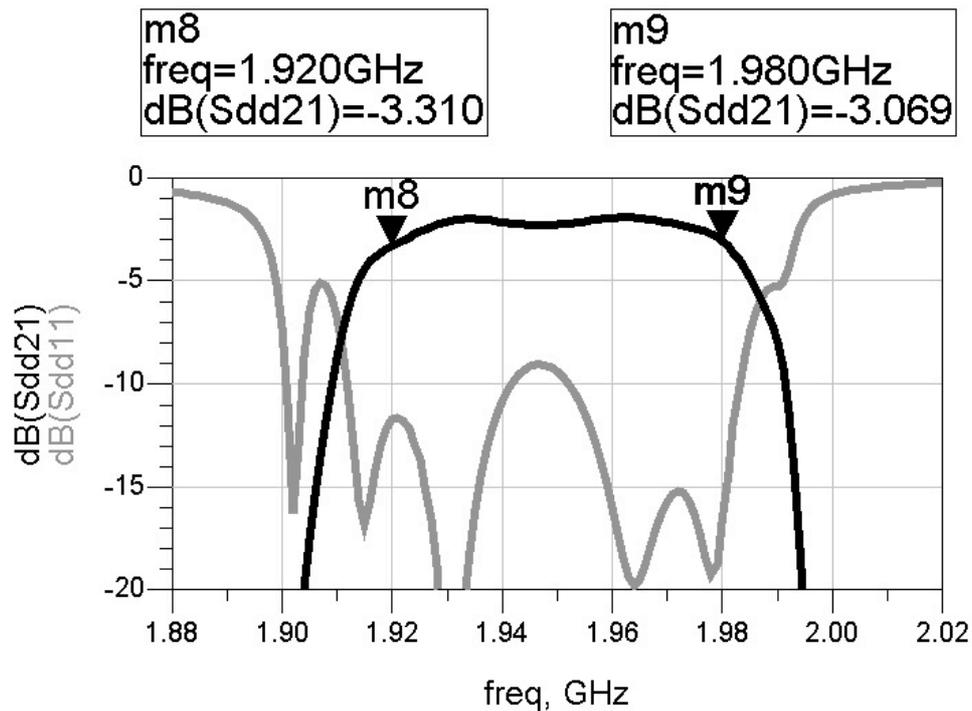


Figure III-23 : Réponse du filtre BAW UMTS sous ADS/Momentum



**Figure III-24 : Bande passante de la réponse du filtre BAW UMTS sous ADS/Momentum**

Les marqueurs indiquent que la réponse du filtre respecte bien le gabarit, mis à part en entrée et en sortie de bande passante, où elle est un peu en dessous de la valeur minimum ( $-3\text{dB}$ ). Ceci s'explique par le fait que nous ne pouvions pas prendre en compte, dans Momentum, la couche supplémentaire déposée sur les résonateurs chargés. Cette couche de métal diminue la résistance carrée des électrodes en augmentant l'épaisseur de métallisation. Nous avons donc considéré le cas le plus défavorable. En réalité, les pertes d'insertion dans la bande passante devraient être plus faibles.

La modélisation, dans le modèle MBVD, de la réponse électrique d'un résonateur BAW grâce à des éléments électriques localisés permet de développer des outils de synthèse performants. L'expression analytique de l'impédance électrique équivalente de chaque résonateur et la connaissance des paramètres technologiques rendent possible l'optimisation de la réponse de structures plus complexes. Le couplage de ce modèle à un logiciel de simulation électromagnétique (Momentum) permet finalement une simulation globale qui se rapproche au plus près de la réalité.



## VI CONCLUSION

Sous certaines conditions, la réduction à une dimension des problèmes de propagation acoustique et piézoélectrique peut être effectuée. L'expression des équations constitutives de la piézoélectricité et de propagation du déplacement mécanique suivant une seule direction ( $z$ ) permet de modéliser chaque couche de la partie active du résonateur par une matrice de transfert. Les conditions mécaniques et électriques exprimées dans l'approximation 1D permettent de raccorder ces matrices et d'envisager la résolution sur l'ensemble de la structure. Les modèles 1D qui découlent de cette formulation utilisent une mise en forme adaptée en fonction de la solution recherchée et de l'environnement de simulation. De plus, de par leur résolution analytique, ces modèles n'imposent aucune restriction fréquentielle. Ils permettent donc une analyse large bande des résonateurs BAW.

Le modèle de Mason est très utilisé pour l'analyse du comportement acoustique des résonateurs. Il dissocie clairement la partie mécanique de la partie électrique dans le problème piézoélectrique. Il est donc particulièrement bien adapté pour la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu. Il permet notamment d'étudier et de concevoir les miroirs de Bragg des structures SMR. Ces derniers possèdent une réponse en fréquence qui dépend des couples de matériaux et du nombre de couches qui les composent.

Le modèle de la permittivité piézoélectrique présente une formulation très compacte du problème acoustique. Il est destiné à être intégré dans les logiciels de simulation électromagnétique sous la forme d'un substrat particulier dont la permittivité possède un terme dépendant des propriétés acoustiques du résonateur. Ceci permet d'étudier la réponse en fréquence en se plaçant du point de vue électrique. La mise en oeuvre de ce modèle dans l'outil de simulation électromagnétique 3D (EMXD), développé au laboratoire Xlim, n'a pas permis d'obtenir de résultats concluants. À cette étape de la thèse, les outils de maillage et de résolution n'étaient pas aussi performants qu'à l'heure actuelle.

Ces modèles unidimensionnels dits « acoustiques » ne peuvent être employés que lorsque l'on connaît les caractéristiques mécaniques de tous les matériaux. Parfois, seule la réponse électrique est connue. On utilise alors un schéma électrique équivalent appelé modèle MBVD (Modified Butterworth Van-Dyke). Ce dernier est composé d'éléments localisés et n'est valable qu'autour de la résonance. Son principal avantage est sa simplicité puisqu'il ne considère le comportement acoustique que d'un point de vue « macroscopique ». Ainsi,

---

chaque élément localisé ne dépend que de quelques paramètres et peut être déterminé très rapidement. L'utilisation de ce modèle dans un logiciel circuit nous a permis de synthétiser des réponses de filtres à résonateurs BAW et de développer une procédure d'optimisation des paramètres technologiques par rapport à un gabarit donné. Le couplage de ce modèle avec un logiciel de simulation électromagnétique (Momentum) nous a permis d'aller plus loin dans l'analyse en dépassant les limites du modèle et en simulant l'ensemble de la structure.

Ces modèles unidimensionnels permettent d'effectuer l'analyse des résonateurs BAW de manière assez rigoureuse pour concevoir des structures complexes comme des filtres. Néanmoins, pour certaines applications, les conditions de validité de l'approximation 1D ne sont pas réunies. Les modèles 1D sont alors caducs car ils ne permettent pas de rendre compte de certains comportements acoustiques et électriques.

En effet, lorsque le rapport entre les dimensions latérales et les épaisseurs des couches de la partie active n'est pas assez important, des modes de vibration latérale (modes de plaque) peuvent apparaître. Ces modes sont piézoélectriquement couplés et détériorent la réponse électrique du résonateur. Ils peuvent éventuellement se propager aux autres résonateurs par couplage latéral et provoquer une réponse électrique parasite.

La simulation en trois dimensions est donc un moyen nécessaire pour prévoir le comportement des résonateurs BAW en dehors des conditions de validité de l'approximation unidimensionnelle. Nous avons donc implémenté la résolution du problème piézoélectrique dans notre outil de simulation éléments-finis EMXD. Ce travail fait l'objet du chapitre suivant.

**CHAPITRE IV :**  
**MODELISATION 3D DES RESONATEURS BAW**  
**PAR LA METHODE DES ELEMENTS FINIS**



## I INTRODUCTION

La piézoélectricité est un phénomène physique qui fait intervenir un couplage entre la déformation des solides élastiques, régis par l'équation de Hooke, et l'électromagnétisme, régis par les équations de Maxwell. Le problème piézoélectrique est donc modélisé par un système d'équations différentielles couplées par le biais du tenseur piézoélectrique (cf.chapitre II). Bien que le modèle physique du problème réel de la piézoélectricité nous fournisse les équations et les conditions aux limites, il est impossible d'en tirer une solution analytique sans faire d'approximations sur le comportement physique des structures ou sur leur nature géométrique(modèles 1D). Il est alors nécessaire de faire appel à une analyse numérique.

Les simulateurs commerciaux exploitant la méthode des éléments finis sont souvent mal adaptés pour l'analyse de dispositifs à couches minces piézoélectriques. Le nombre d'éléments et le type d'analyse sont souvent très restreints. Nous avons donc choisi de développer notre propre outil de simulation en utilisant la formulation générale, établie par Allik et Hughes en 1970 [44] pour des matériaux piézoélectriques linéaires, en déplacement mécanique et potentiel électrique. Cet outil doit permettre de modéliser des géométries de circuits complexes, de considérer des matériaux dont les propriétés ne sont pas uniformes et d'appliquer des conditions aux limites assez générales (Dirichlet, Neumann ou mixtes). Le choix de la méthode par éléments finis fut aussi motivé par l'expertise sur le développement d'outils de simulation électromagnétique basés sur cette technique numérique et sur les moyens informatiques que possède le laboratoire Xlim. La résolution du problème piézoélectrique a été mise en oeuvre dans le logiciel de simulation électromagnétique EMXD. Tout au long de cette tâche, les résultats de simulation obtenus grâce à ce logiciel ont été comparés avec ceux obtenus grâce au logiciel commercial ANSYS Multiphysics. Ceci nous a permis de nous guider et d'effectuer les choix techniques nécessaires au développement de notre outil.

Une fois le logiciel validé, nous l'avons utilisé pour analyser un résonateur FBAR. La réponse électrique obtenue nous a permis de mettre en évidence l'existence de modes parasites mécaniques électriquement couplés. Ces derniers détériorent la réponse du résonateur et rendent son utilisation pour des applications d'oscillateurs et de filtres plus

difficile. Notre outil de simulation 3D nous permet alors de déterminer leur origine, qu'elle soit physique ou non, et d'étudier des solutions pour éviter leur couplage.

Les systèmes RF sont très sensibles au bruit. Leurs performances en termes de sélectivité et de stabilité en fréquence en dépendent directement. La conception de résonateurs possédant une réponse exempte de modes parasites est donc nécessaire, notamment pour le développement d'oscillateurs à faible bruit de phase

Nous avons étudié deux solutions pour la suppression des modes parasites. La première solution, la plus fréquemment utilisée, utilise la technique d'apodisation. Cette dernière consiste à concevoir une électrode supérieure quadrilatérale, mais dont aucun côté n'est parallèle. Ceci permet de supprimer les conditions de résonance des modes transverses en évitant les interférences constructives qui créent l'onde stationnaire. Cependant, cette technique n'est parfois pas suffisante pour une structure donnée. Il faut donc envisager une autre solution.

La deuxième solution consiste à concevoir et à optimiser un anneau d'oxyde ou de métal que l'on dépose sur le bord de l'électrode supérieure du résonateur. Ce système permet de découpler les modes anharmoniques transverses du mode fondamental d'épaisseur en adaptant les conditions limites sur les bords de l'électrode supérieure. Cette technique nécessite une étape de fabrication supplémentaire et ne peut être utilisée dans des structures à plusieurs résonateurs.

De manière à compléter l'étude des résonateurs BAW à haute fréquence, nous avons simulé, grâce à EMXD, une structure SMR autour de 2 GHz. Nous avons alors comparé les résultats de simulation avec ceux issus de la mesure de ce dispositif fabriqué. Nous avons obtenu une bonne concordance au niveau de la réponse électrique entre la simulation et la mesure et nous avons pu observer que cette structure présente des modes parasites faiblement couplés. Le tracé des champs de déplacement mécanique grâce à EMXD nous a permis d'expliquer ce phénomène. La technique d'apodisation a été appliquée sur ce résonateur et a montré une réduction des modes parasites tant sur la structure simulée que sur la structure mesurée. Néanmoins, l'apodisation considérée pour la simulation est moins efficace que celle utilisée pour la structure mesurée.

## II LA METHODE DES ELEMENTS FINIS

La méthode des éléments finis trouve son origine dans l'analyse mécanique des structures. Le premier traitement numérique fut proposé en 1943 par Richard COURANT pour la résolution du problème de torsion. Elle a ensuite été appliquée à presque tous les domaines des sciences qui font appel à des modèles mathématiques basés sur des systèmes d'équations aux dérivées partielles possédant des conditions aux limites. Cette méthode repose sur des fondements mathématiques très anciens, qualifiés de principes variationnels ou principes de Hamilton, comme, par exemple en mécanique, le principe de Maupertuis ou principe de moindre action.

Malgré un coût de calcul important, la méthode des éléments finis a tendance à s'imposer dans le monde du calcul scientifique moderne. L'augmentation de la puissance des ordinateurs actuels favorise son expansion par rapport à des techniques de simulation plus rapides, mais qui reposent sur des approximations et des simplifications plus restrictives (méthode des différences finies ou méthode des moments). De plus, sa formulation mathématique (formulation variationnelle) très générale offre un cadre adéquat pour définir des solutions très irrégulières et lui confère une flexibilité permettant de traiter des problèmes qui impliquent des structures complexes utilisant des matériaux inhomogènes.

L'objectif de cette méthode est de fournir une solution « numérique » (approchée) lorsque aucune solution analytique ne peut être considérée sans approximation sur le comportement physique des structures. Pour ce faire, elle fait d'abord appel à une formulation variationnelle du système mathématique (formulation faible) qui fait intervenir la solution par le biais d'une intégrale sur un domaine. La décomposition de cette intégrale en une somme d'intégrales sur un ensemble de sous domaines (maillage) constitue le point de départ de la méthode des éléments finis. Ceci équivaut à remplacer l'espace de Hilbert  $V$ , de dimension infinie et sur lequel est posé la formulation variationnelle, par un sous-espace  $V_h$  de dimension finie. Plus  $V_h$  possède de sous domaines, plus il se rapproche du domaine  $V$  et plus la solution « numérique » est proche de la solution exacte.

Nous n'explicitons pas ici le détail de chaque étape de la méthode. Seuls les points sur lesquels nous nous sommes penchés pour comprendre les résultats incorrects obtenus au cours du développement sont détaillés. Ainsi, l'accent est mis sur la formulation variationnelle utilisée, la forme et le type des éléments et la méthode de résolution.

Les grandes lignes de la résolution d'un problème physique par la méthode des éléments finis sont :

1. L'analyse mathématique du problème de départ mis sous forme d'une équation ou d'un **système d'équations différentielles** à satisfaire en tout point d'un domaine  $\Omega$ , avec des conditions aux limites sur les bords  $\partial\Omega$ .
2. La construction de la **formulation variationnelle** et l'étude des propriétés de convergence, d'existence et d'unicité de la solution.
3. Le dessin de la structure et la création du **maillage** par division de  $\Omega$  en sous domaines (mailles).
4. La réécriture du problème sur un élément, c'est-à-dire la construction de l'espace de dimension finie et le choix des fonctions de base et d'interpolation. Un **élément fini** est donc constitué d'une maille munie d'un espace de dimension finie (une base).
5. L'**assemblage** des contributions de tous les éléments de la structure et la formulation du système à résoudre en tenant compte des conditions aux limites.
6. La **résolution** paramétrée en fréquence du problème discret.
7. La construction de la solution « numérique » à partir des valeurs trouvées sur chaque élément (**exploitation**).
8. La présentation des résultats (**post-traitement**).

L'analyse mathématique du problème de départ (**étape 1**) a été effectuée au chapitre II. Le problème piézoélectrique est considéré dans toute la structure, mais dans les matériaux qui ne possèdent pas de tenseur piézoélectrique la taille du problème est réduite en se ramenant à un cas purement acoustique ou électrique. Pour les **étapes 3 et 8**, de maillage et de présentation des résultats, nous utilisons le logiciel (Gmsh). Ce dernier est un générateur automatique de maillage éléments finis 3D (mailleur) possédant une interface graphique de dessin et de post-traitement.

La formulation variationnelle (**étape 2**) a nécessité une attention particulière. Nous allons donc l'explicitier dans ce qui suit. Le choix du type des éléments (**étape 4**) a aussi été un sujet de réflexion concernant la précision de la solution « numérique ». Les **étapes 5, 6 et 7** était déjà implantée dans EMXD et n'ont pas été modifiées. Néanmoins, la technique de paramétrisation en fréquence utilisée dans la résolution du problème mérite d'être expliquée.

## II.1 MODELISATION MATHÉMATIQUE ET FORMULATION VARIATIONNELLE

La modélisation mathématique d'un problème physique s'exprime sous la forme :

$$A(u) = f \quad (\text{IV.1})$$

où  $u$  représente les inconnues du problème,  $A$  un opérateur aux dérivées partielles et  $f$  les données du problème (conditions limites et excitations).

Pour étudier mathématiquement ce problème, on utilise une formulation variationnelle (formulation faible ou duale) du problème (IV.1) qui permet de réécrire les équations de départ sous une forme équivalente en utilisant le formalisme et les propriétés des distributions. On exprime alors toutes les opérations sur les distributions en fonction d'opérations sur les intégrales prises contre des fonctions tests (fonctions indéfiniment dérivables et à support compact). La solution  $u$  peut donc être très irrégulière, mais doit être intégrable. L'idée principale de la formulation variationnelle est de montrer l'existence et l'unicité de la solution. En analyse fonctionnelle, le théorème de Lax-Milgram nous assure de l'existence et de l'unicité de  $u$  si l'espace  $V$  dans lequel on cherche la solution et dans lequel on prend les fonctions tests est un espace de Hilbert.

Sous ces conditions, le problème (IV.1) s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V, \text{ satisfaisant les conditions limites et telle que :} \\ a(u, v) = l(v) \quad , \quad \forall v \in V \end{cases} \quad (\text{IV.2})$$

où  $V$  est l'espace de Hilbert des fonctions admissibles,  $a(.,.)$  la forme bilinéaire associée à l'opérateur  $A$  et  $l(.)$  la forme linéaire associée à  $f$ .

La méthode des éléments finis consiste alors à construire un espace d'approximation interne du problème (IV.2) en remplaçant l'espace de Hilbert  $V$  de dimension infinie par un sous espace  $V_h$  de dimension finie et dont la définition est basée sur la notion géométrique de maillage du domaine  $\Omega$ .

On cherche alors la solution approchée du problème :

$$\begin{cases} \text{Trouver } u_h \in V_h, \text{ satisfaisant les conditions limites et telle que :} \\ a(u_h, v_h) = l(v_h) \quad , \quad \forall v_h \in V_h \end{cases} \quad (\text{IV.3})$$

La formulation variationnelle est donc le point de départ d'une résolution par la méthode des éléments finis. Elle joue un rôle prépondérant dans la validité de la solution recherchée. L'approximation interne est aussi très importante. En effet, plus la dimension de l'espace  $V_h$  sera grande, plus il se rapprochera de l'espace  $V$  et plus la solution se rapprochera de la solution exacte.

Au départ, le logiciel EMXD a été développé pour la résolution de problèmes électromagnétiques. Il adoptait alors une formulation variationnelle en champ électrique ou magnétique. Nous avons donc cherché dans un premier temps à adapter cette formulation au problème piézoélectrique.

### II.1.1 FORMULATION EN CHAMP ELECTRIQUE ET DEPLACEMENT MECANIQUE

La formulation variationnelle en champ électrique  $E$  permet de résoudre les équations de Maxwell qui régissent les phénomènes électromagnétiques. Le champ électrique et magnétique étant couplés, il est possible de déterminer les valeurs de  $H$  en fonction des valeurs de  $E$  calculées. Les équations de Maxwell en régime harmonique sont :

$$\mathit{rot}E = -j\omega\mu H \quad , \quad \mathit{rot}H = j\omega D + J \quad , \quad \mathit{Div}D = \rho_E \quad (IV.4)$$

où  $\mu$  est le tenseur de perméabilité,  $D$  le vecteur déplacement électrique,  $J$  le vecteur densité de courant et  $\rho_E$  la densité de charges électriques. Les grandeurs tensorielles sont notées en caractères gras,  $\bar{\otimes}$  et  $\overline{\otimes}$  représentent le produit tensoriel contracté une ou deux fois (cf. Annexe I).

La formulation en champ électrique  $E$  s'écrit en fonction de  $D$  comme :

$$\mathit{rot}(\mu^{-1} \bar{\otimes} \mathit{rot}E) - \omega^2 D = -j\omega J \quad (IV.5)$$

L'équation de l'élastodynamique (II.5) s'écrit en régime harmonique :

$$-\mathit{Div}T - \rho\omega^2 u = f \quad (IV.6)$$

Les équations constitutives de la piézoélectricité (II.16) s'écrivent :

$$\begin{cases} T = c \overline{\otimes} S(u) - E \overline{\otimes} e \\ D = e \overline{\otimes} S(u) + \varepsilon \overline{\otimes} E \end{cases} \quad (IV.7)$$

Avec le tenseur de déformation  $\mathbf{S}(\mathbf{u})$  qui s'exprime sous la forme :

$$\mathbf{S}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\mathbf{grad} \mathbf{u} + \mathbf{grad}^T \mathbf{u}) \quad \text{où : } \mathbf{grad}^T \text{ est le gradient transposé} \quad (\text{IV.8})$$

Les équations couplées à résoudre sont donc :

$$\begin{cases} \mathbf{rot}(\boldsymbol{\mu}^{-1} \bar{\otimes} \mathbf{rot} \mathbf{E}) - \omega^2 (\bar{\mathbf{e}} \bar{\otimes} \mathbf{S}(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\varepsilon} \bar{\otimes} \mathbf{E}) = -j\omega \mathbf{J} \\ -\text{Div}(\bar{\mathbf{c}} \bar{\otimes} \mathbf{S}(\mathbf{u}) - \mathbf{E} \bar{\otimes} \bar{\mathbf{e}}) - \rho \omega^2 \mathbf{u} = \mathbf{f} \end{cases} \quad (\text{IV.9})$$

L'écriture variationnelle du problème consiste à l'exprimer dans le cadre mathématique des distributions en l'appliquant contre des fonctions tests. Pour le calcul de la divergence de la contrainte  $\mathbf{T}$ , on utilise des fonctions tests de type déplacement  $\mathbf{V}$ . Pour le champ électrique  $\mathbf{E}$ , elles sont de type champ  $\Phi$ . On obtient alors :

$$\begin{cases} \left[ \int_{\Omega} \mathbf{rot} \Phi \bar{\otimes} \boldsymbol{\mu}^{-1} \bar{\otimes} \mathbf{rot} \mathbf{E} - \omega^2 \int_{\Omega} \Phi \bar{\otimes} \boldsymbol{\varepsilon} \bar{\otimes} \mathbf{E} \right] - \omega^2 \int_{\Omega} \Phi \bar{\otimes} \bar{\mathbf{e}} \bar{\otimes} \mathbf{S}(\mathbf{u}) = -j\omega \int_{\partial\Omega} \mathbf{J} \bar{\otimes} \Phi \\ -\omega^2 \int_{\Omega} \mathbf{V} \bar{\otimes} \rho \mathbf{u} + \left[ \omega^2 \int_{\Omega} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \bar{\otimes} \bar{\mathbf{c}} \bar{\otimes} \mathbf{S}(\mathbf{u}) - \omega^2 \int_{\Omega} \mathbf{E} \bar{\otimes} \bar{\mathbf{e}} \bar{\otimes} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \right] = \int_{\partial\Omega} \mathbf{f} \bar{\otimes} \mathbf{V} \end{cases} \quad (\text{IV.10})$$

Lorsque le maillage du domaine  $\Omega$  est effectué, ce problème peut se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} A_{E \times E} - \omega^2 B_{E \times E} & -\omega^2 C_{E \times M} \\ -\omega^2 C'_{M \times E} & \omega^2 A'_{M \times M} - \omega^4 B'_{M \times M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_{E \times 1} \\ X_{M \times 1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -j\omega J_{E \times 1} \\ f_{M \times 1} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.11})$$

Cette formulation a été programmée dans EMXD. Néanmoins, aucun résultat correct n'a pu être obtenu à cause de l'instabilité numérique qu'elle engendre. En effet, lorsque la longueur d'onde électrique  $\lambda_E$  devient trop grande par rapport aux dimensions moyennes des arêtes des éléments  $L$ , on perd l'information de propagation. Si l'on exprime le premier terme de la matrice (IV.11) sur un élément, on a :

$$\boldsymbol{\mu}^{-1} K_{E \times E}^A L - \omega^2 K_{E \times E}^B L^3 = \boldsymbol{\mu}^{-1} L \left( K_{E \times E}^A - \left( 2\pi \frac{L}{\lambda_E} \right)^2 K_{E \times E}^B \right) \quad (\text{IV.12})$$

On remarque que le rapport  $L/\lambda_E$  joue un rôle très important. S'il tend vers 0, le terme qui correspond à la représentation de la relation :  $\text{Div} \mathbf{D} = \rho_E$  est perdu.

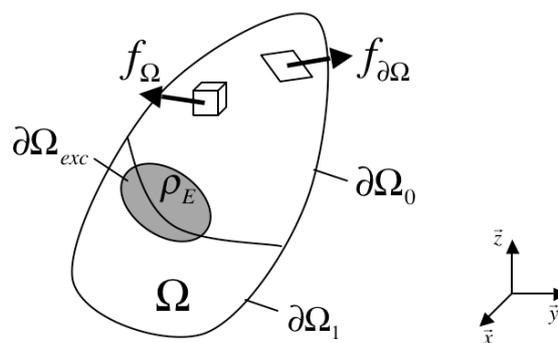
Face à ce problème, nous avons choisi d'utiliser une autre formulation variationnelle du problème exprimé dans l'approximation quasi-statique. Cette formulation en « potentiel électrique et déplacement mécanique » est classiquement utilisée dans les logiciels commerciaux pour résoudre le problème de la piézoélectricité tridimensionnelle en basse fréquence (capteurs, transducteurs). L'inconvénient de cette méthode est qu'elle ne permet pas de simuler d'éventuels effets de propagation du champ électrique et de tenir compte des propriétés magnétiques de certains matériaux. Sous ces conditions, la formulation en champ pourra éventuellement trouver son utilité.

### II.1.2 FORMULATION EN POTENTIEL ELECTRIQUE ET DEPLACEMENT MECANIQUE

Dans la formulation en potentiel électrique et déplacement mécanique, on considère le champ électrique statique. Il dérive alors d'un potentiel scalaire  $\varphi$ . On ne considère alors les équations de Maxwell que du point de vue électrostatique. Ceci réduit considérablement la dimension du calcul, mais constitue aussi une approximation supplémentaire. Le champ électrique et le déplacement électrique vérifient les relations suivantes :

$$\mathbf{E} = -\mathbf{grad} \varphi \quad \text{et} \quad \text{Div} \mathbf{D} = \rho_E \quad (\text{IV.13})$$

Considérons un domaine  $\Omega$  (Figure IV-1) occupé par une structure piézoélectrique, soumis à l'action de forces de volume de densité  $f_\Omega$  et de forces de surface de densité  $f_{\partial\Omega}$  s'exerçant sur la partie  $\partial\Omega_0$  de la frontière  $\partial\Omega$ . On définit aussi une partie  $\partial\Omega_1$  de la frontière  $\partial\Omega$  vérifiant  $\partial\Omega = \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1$  et sur laquelle il est possible d'imposer une valeur de déplacement mécanique. De plus, le milieu est soumis à des charges électriques de densité  $\rho_E$  s'appliquant sur la partie  $\partial\Omega_{exc}$  de  $\partial\Omega$ .



**Figure IV-1 : Présentation du problème piézoélectrique**

L'équation de l'élastodynamique (II.5) s'écrit alors en régime harmonique :

$$-Div\mathbf{T} - \rho\omega^2\mathbf{u} = \mathbf{f}_\Omega + \mathbf{f}_{\partial\Omega_0} \quad (\text{IV.14})$$

Les équations constitutives de la piézoélectricité (II.16) s'écrivent :

$$\begin{cases} \mathbf{T} = \overline{\overline{\mathbf{c}}}\overline{\mathbf{S}}(\mathbf{u}) - \overline{\mathbf{E}}\overline{\mathbf{e}} \\ \mathbf{D} = \overline{\overline{\mathbf{e}}}\overline{\mathbf{S}}(\mathbf{u}) + \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}\overline{\mathbf{E}} \end{cases} \quad (\text{IV.15})$$

Avec le tenseur de déformation  $\mathbf{S}(\mathbf{u})$  qui s'exprime sous la forme :

$$\mathbf{S}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\mathbf{grad}\mathbf{u} + \mathbf{grad}^T\mathbf{u}) \quad (\text{IV.16})$$

Les équations couplées à résoudre sont donc :

$$\begin{cases} -Div\mathbf{T} - \rho\omega^2\mathbf{u} = \mathbf{f}_\Omega + \mathbf{f}_{\partial\Omega_0} \\ Div\mathbf{D} = \rho_E \end{cases} \quad (\text{IV.17})$$

Comme la déformation  $\mathbf{S}$  et le champ électrique  $\mathbf{E}$  sont exprimés en fonction d'opérations sur l'opérateur gradient (IV.11 et IV.16) et comme l'opérateur gradient est le dual de l'opérateur divergence, on calcule la divergence du tenseur de contrainte  $\mathbf{T}$  en utilisant des fonctions tests de type déplacement mécanique  $\mathbf{V}$  et la divergence du champ de déplacement électrique  $\mathbf{D}$ , en utilisant des fonctions tests de type potentiel électrique  $\Phi$ . On écrit alors :

$$\langle Div\mathbf{T}, \mathbf{V} \rangle = -\int_\Omega \overline{\overline{\mathbf{T}}}\overline{\mathbf{S}}(\mathbf{V}) \quad \text{et} \quad \langle Div\mathbf{D}, \Phi \rangle = \int_\Omega \overline{\mathbf{D}}\overline{\mathbf{E}}(\Phi) \quad (\text{IV.18})$$

L'écriture variationnelle du système (IV.17) est alors :

$$\begin{cases} \int_\Omega \overline{\overline{\mathbf{T}}}\overline{\mathbf{S}}(\mathbf{V}) - \rho\omega^2 \int_\Omega \overline{\mathbf{u}}\overline{\mathbf{V}} = \int_\Omega \overline{\mathbf{f}}_\Omega \overline{\mathbf{V}} + \int_{\partial\Omega_0} \overline{\mathbf{f}}_{\partial\Omega_0} \overline{\mathbf{V}} \\ \int_\Omega \overline{\mathbf{D}}\overline{\mathbf{E}}(\Phi) = \int_{\partial\Omega_{exc}} \rho_E \cdot \Phi \end{cases} \quad (\text{IV.19})$$

En remplaçant  $\mathbf{T}$  et  $\mathbf{D}$  par les équations constitutives (IV.15), on obtient finalement :

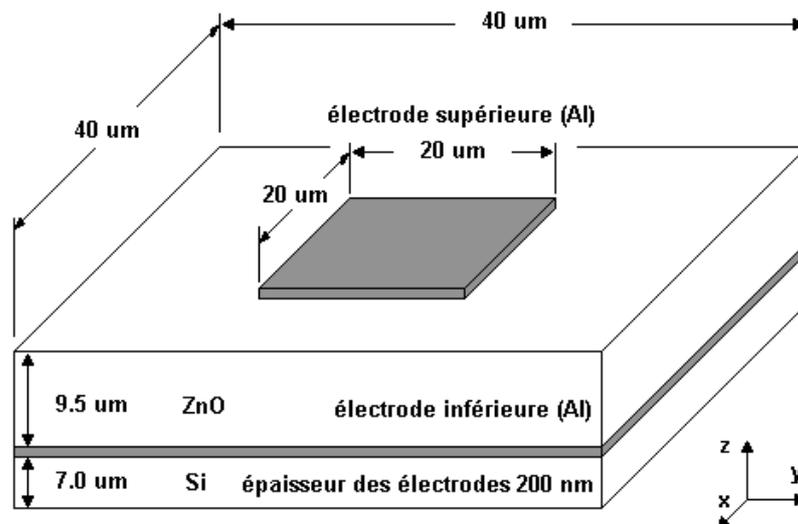
$$\begin{cases} \int_\Omega \overline{\mathbf{S}}(\mathbf{V})\overline{\overline{\mathbf{c}}}\overline{\overline{\mathbf{S}}}(\mathbf{u}) - \int_\Omega \overline{\mathbf{E}}(\Phi)\overline{\mathbf{e}}\overline{\overline{\mathbf{S}}}(\mathbf{V}) - \rho\omega^2 \int_\Omega \overline{\mathbf{u}}\overline{\mathbf{V}} = \int_\Omega \overline{\mathbf{f}}_\Omega \overline{\mathbf{V}} + \int_{\partial\Omega_0} \overline{\mathbf{f}}_{\partial\Omega_0} \overline{\mathbf{V}} \\ -\int_\Omega \overline{\mathbf{E}}(\Phi)\overline{\mathbf{e}}\overline{\overline{\mathbf{S}}}(\mathbf{u}) - \int_\Omega \overline{\mathbf{E}}(\Phi)\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}\overline{\mathbf{E}}(\Phi) = \int_{\partial\Omega_{exc}} \rho_E \cdot \Phi \end{cases} \quad (\text{IV.20})$$

Le problème que nous cherchons à résoudre doit nous permettre de trouver une solution à la forme variationnelle (IV.20). Nous cherchons donc un champ de déplacement mécanique (grandeur vectorielle) et un potentiel électrique (grandeur scalaire). Cette solution doit être « physique », c'est-à-dire continue sur l'ensemble de la structure et d'énergie finie. Elle doit donc appartenir à l'espace des fonctions continues  $C^0$  et de carré intégrable  $L^2$ . L'espace de Hilbert  $H^1$  présente ces deux propriétés. La formulation variationnelle (IV.20) possède alors une solution unique si l'on choisit aussi les fonctions tests dans  $H^1$ . Nous avons donc choisi (comme la majorité des autres logiciels éléments finis) d'utiliser des fonctions polynômes de Lagrange.

Un élément fini est une forme géométrique qui possède une base (espace de dimension finie). La forme géométrique permet de diviser spatialement la structure à analyser et l'espace de dimension finie sert à réduire la dimension du problème. Dans notre cas, les éléments finis sont d'ordre 2 puisqu'ils possèdent une base composée de polynômes de Lagrange de degré 2. On parle alors d'éléments de Lagrange d'ordre 2 ou d'éléments  $P_2$ .

## II.2 CHOIX DU TYPE D'ELEMENT

La formulation variationnelle (IV.20) a été implémentée dans le logiciel EMXD. Elle a été validée en analysant la structure de la Figure IV-2 et en comparant les résultats avec ceux obtenus grâce au logiciel commercial ANSYS Multiphysics (Figure IV-4).



**Figure IV-2 :** Validation d'EMXD grâce à l'analyse d'un résonateur FBAR

La structure de la Figure IV-2 est un résonateur FBAR constitué d'une couche d'Oxyde de Zinc (ZnO) de 9,5  $\mu\text{m}$  d'épaisseur, de deux électrodes en Aluminium (Al) de 200 nm et d'une membrane en Silicium (Si) de 7  $\mu\text{m}$ . Les bords de la structure sont naturellement libres, un potentiel constant est appliqué sur la surface de l'électrode supérieure et l'électrode inférieure est portée à la masse (0V). Dans le logiciel ANSYS Multiphysics, l'excitation électrique impose un potentiel de 1V sur l'électrode supérieure. Dans notre logiciel EMXD, nous utilisons la notion d'accès localisé.

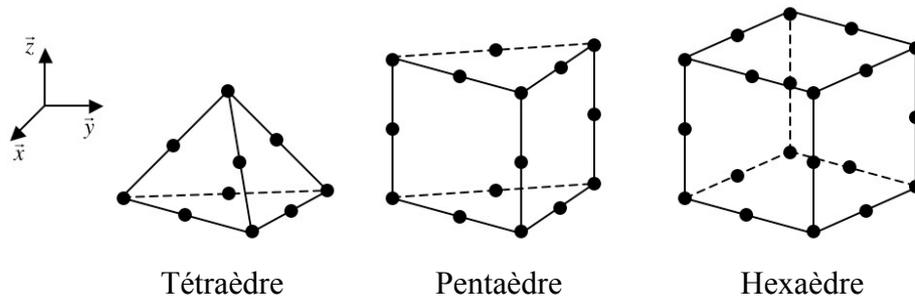
Ce type d'excitation est particulièrement pratique pour réaliser la connexion d'un système étudié par la méthode des éléments finis avec un circuit extérieur. Il permet de décrire la relation entre l'expression tension-courant et la valeur du champ électrique (relation entre l'impédance électrique et les paramètres S). Pour cela, on représente l'accès par un conducteur linéique parcouru par un courant constant  $I_0$  et possédant une différence de potentiel  $V_0$  à ses bornes. Ces grandeurs électriques vérifient les relations :

$$\begin{cases} R_0 I_0 = V_0 \\ \frac{1}{2} V_0 I_0 = 1 \end{cases} \quad (\text{IV.21})$$

où  $R_0$  représente l'impédance de normalisation (généralement :  $R_0=50\Omega$ )

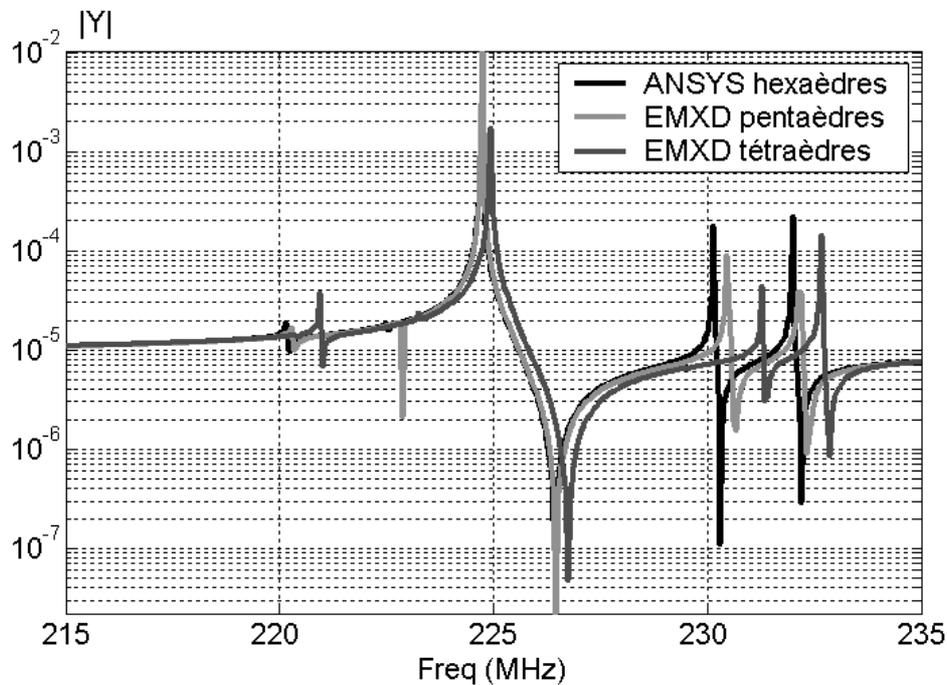
En utilisant l'équation de conservation de la charge :  $\text{Div}\mathbf{J} + j\omega\rho_E = 0$ , on exprime directement  $\rho_E$  en fonction de l'excitation électrique  $I_0$  dans la formulation variationnelle (IV.20). L'interfaçage avec un circuit extérieur est donc facilité.

L'étape de maillage de la structure consiste à recouvrir, le plus fidèlement possible, le domaine à l'aide de formes géométriques élémentaires (Figure IV-3). Ces dernières peuvent être des tétraèdres (quatre faces triangulaires), des pentaèdres (deux faces triangulaires et trois faces quadrilatérales) ou des hexaèdres (six faces quadrilatérales). De manière à pouvoir comparer les résultats obtenus, grâce aux deux logiciels ANSYS et EMXD, nous avons utilisé la même taille d'arête et le même ordre pour les éléments du maillage. Cependant, la forme géométrique était différente. En effet, EMXD ne permettait que de considérer des éléments finis tétraédriques d'ordre 2. Pour des structures faisant intervenir des couches minces, nous avons remarqué que le choix de la forme des éléments avait son importance.



**Figure IV-3 : Éléments finis d'ordre 2**

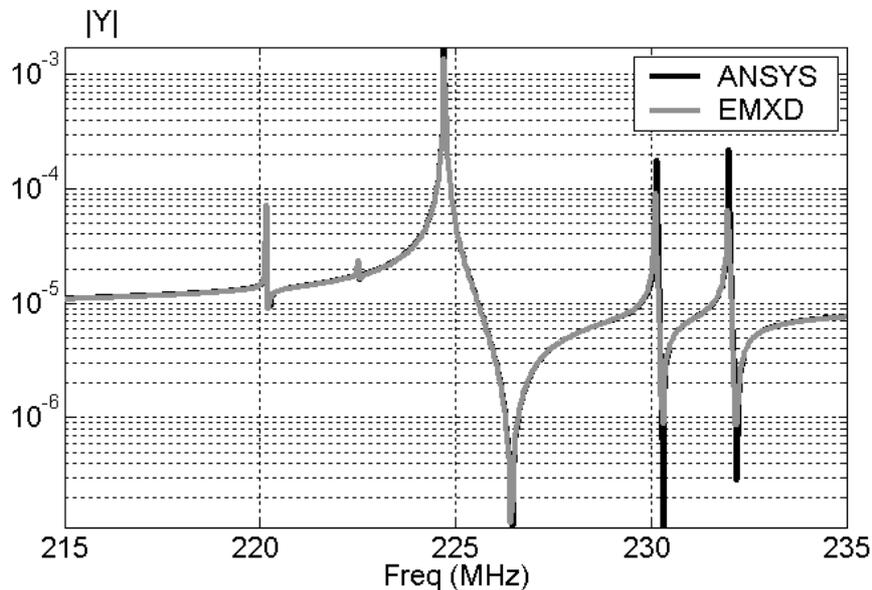
Nous avons tracé sur la Figure IV-4 les réponses électriques du résonateur BAW de la Figure IV-2 obtenues avec des hexaèdres piézoélectriques dans ANSYS (SOLID226) et des tétraèdres puis des pentaèdres dans EMXD.



**Figure IV-4 : Réponses du résonateur BAW de la Figure IV-2**

On peut voir que, pour le mode fondamental ( $\sim 225$  MHz), la réponse de notre logiciel coïncide avec celle d'ANSYS. Cependant, on remarque qu'il existe un décalage fréquentiel pour les autres modes. La diminution de la taille de la maille ne nous a pas permis de palier ce problème. Nous avons alors développé et utilisé des éléments finis pentaédriques. Ils nous ont permis de réduire le décalage mais pas de le supprimer. Finalement, nous avons choisi d'implanter les hexaèdres dans notre outil de simulation.

Sur la Figure IV-5, on remarque que les réponses obtenues avec les deux logiciels ANSYS et EMXD coïncident parfaitement pour un même maillage utilisant des hexaèdres d'ordre 2.



**Figure IV-5 : Réponses du résonateur BAW de la Figure IV-2**

L'explication du décalage fréquentiel sur les modes supérieurs vient du fait que les arêtes d'un tétraèdre ne sont pas orthogonales aux sommets. Dans un pentaèdre, seules les arêtes des faces quadrilatérales sont orthogonales, alors que dans un hexaèdre, elles le sont toutes. Ceci a un impact sur la réponse de la structure puisque l'utilisation des tétraèdres ajoute une certaine anisotropie à l'expression tensorielle des caractéristiques mécaniques des matériaux. De plus, l'utilisation d'hexaèdres permet d'obtenir un maillage bien plus simple et plus régulier pour des structures constituées de couches dont les dimensions latérales sont très grandes devant les épaisseurs.

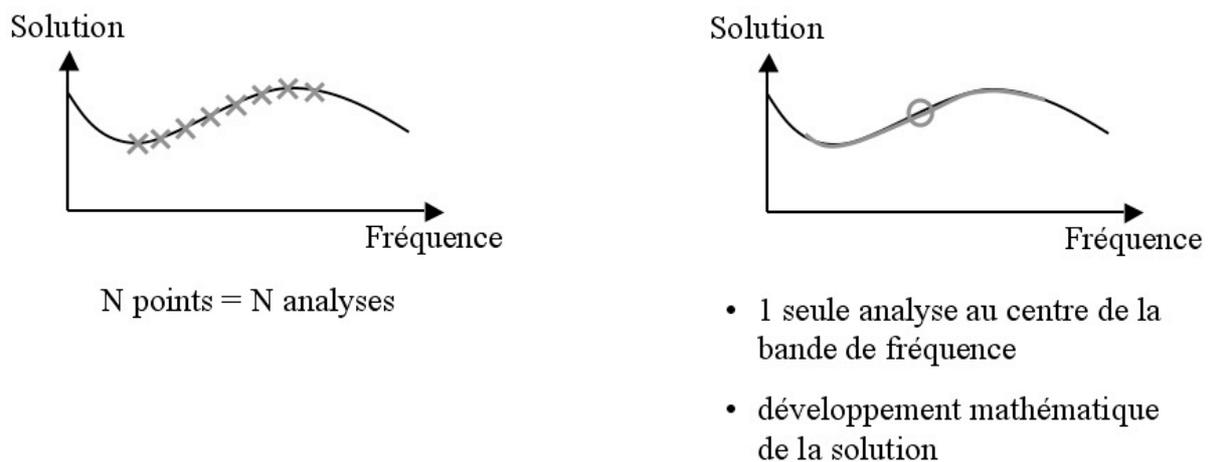
Nous avons donc réussi à obtenir des résultats qui coïncident avec ceux d'ANSYS. Ceci nous a permis de valider notre outil de simulation 3D pour la résolution du problème piézoélectrique. Cependant, la résolution avec EMXD est bien plus rapide grâce à la technique de paramétrisation en fréquence. Pour l'analyse de la structure de la Figure IV-2 et pour la même configuration matérielle, le temps de calcul nécessaire au logiciel ANSYS est de 33 secondes par point de fréquence (soit 3h40 pour 400 points) et de 1 minute 14 secondes pour EMXD pour 400 points. Le rapport de l'ordre de 250 sur le temps de calcul montre que la technique de paramétrisation en fréquence mérite quelques précisions.

### II.3 PARAMETRISATION EN FREQUENCE [45]

Le problème (IV.20) peut se mettre sous la forme générale du système linéaire suivant :

$$A(f)X = B(f) \quad \text{avec : } f \in [f_{\min}, f_{\max}] \quad \text{et} \quad f_0 = \frac{f_{\max} - f_{\min}}{2} \quad (\text{IV.22})$$

L'approche classique consiste à résoudre ce système pour chaque point de fréquence. Le temps nécessaire à l'inversion de la matrice  $A$  est donc multiplié par le nombre de points demandés. La méthode de la paramétrisation en fréquence permet de n'effectuer cette factorisation qu'une seule fois pour la valeur centrale  $f_0$  de la bande de fréquence considérée. La solution est ensuite développée en série de Taylor puis approchée grâce à son expression en approximant de Padé (Figure IV-6).



**Figure IV-6 : Résolution par une approche classique et par la technique de la paramétrisation en fréquence**

Le principe mathématique sur lequel est basée la paramétrisation en fréquence fait intervenir les dérivées d'ordre élevé de la solution (HODM : High Order Derivative Method). Ces dérivées sont obtenues par dérivations successives du système (IV.22). En effet, on peut écrire (le chiffre entre parenthèse représente l'ordre de la dérivée) :

$$A^{(1)}X + AX^{(1)} = B^{(1)} \quad \text{soit} \quad AX^{(1)} = B^{(1)} - A^{(1)}X \quad (\text{IV.23})$$

De manière générale :

$$\boxed{AX^{(n)} = B^{(n)} - \sum_{i=1}^n C_n^i A^{(i)} X^{(n-i)}} \quad (\text{IV.24})$$

L'approche classique consisterait à construire la série de Taylor de la solution  $X$  grâce au calcul de ses dérivées successives. Or,  $X$  peut présenter des singularités (pôles) pour lesquelles la série de Taylor ne converge pas. On utilise donc un développement en approximant de Padé. La solution  $X$  se présente alors sous la forme d'un quotient de polynômes en  $f$  où les fréquences de résonances  $f_r$  sont les racines de  $Q(f)$  et les vecteurs propres  $\phi_r$  correspondants sont les valeurs de  $P(f)$  à ces fréquences. Le rayon de convergence du développement de Padé est limité par la distance entre la fréquence centrale et le premier pôle non inclus dans  $Q(f)$ .

$$X(f) = \frac{P(f)}{Q(f)} = \frac{\sum_{k=0}^m a_k f^k}{1 + \sum_{k=0}^n b_k f^k} \quad (\text{IV.25})$$

Le déroulement de cette méthode est le suivant :

- Résolution du système à  $f_0$ .
- Calcul des dérivées d'ordre élevés de  $A$ .
- Calcul en oscillations libres  $A(f_r) \cdot \phi_r = 0$  pour déterminer la base modale  $(f_r, \phi_r)$ .
- Calcul de l'excitation  $B$  et projection sur la base modale.
- Calcul de  $X(f)$ .

L'intérêt de cette méthode est de fournir, avec une seule factorisation de matrice, une solution précise et convergente même en présence de singularité. Cette solution a l'avantage de pouvoir être réutilisée pour n'importe quelle excitation et pour n'importe quel intervalle de fréquence inclus dans l'intervalle du calcul de départ.

En conclusion, nous avons développé un outil de simulation numérique capable d'analyser des structures faisant intervenir des matériaux piézoélectriques. La modélisation du problème utilise une formulation variationnelle en potentiel électrique et déplacement mécanique. L'emploi d'une technique particulière de paramétrisation en fréquence pour la résolution nous permet d'obtenir des temps de calcul bien plus courts qu'avec un logiciel commercial comme ANSYS Multiphysics. Cet outil a été mis à profit pour étudier le comportement électrique des résonateurs BAW.

### III ANALYSE D'UN RESONATEUR SUSPENDU (FBAR)

Nous avons appliqué la méthode des éléments finis, grâce à notre outil de simulation 3D EMXD, à l'analyse du résonateur suspendu de la Figure IV-7. Cette structure est issue de la littérature [46]. La détermination de sa réponse électrique avec EMXD et la comparaison avec les résultats déjà publiés nous ont permis de valider notre outil de simulation et de mettre en évidence ce que les modèles 1D négligent c'est-à-dire le déplacement mécanique dans les dimensions latérales et surtout l'apparition de modes parasites dans une structure de dimensions finies.

#### III.1 DESCRIPTION DE LA STRUCTURE

La structure du résonateur suspendu de la figure suivante est similaire à celle de la Figure IV-2, hormis les dimensions latérales.

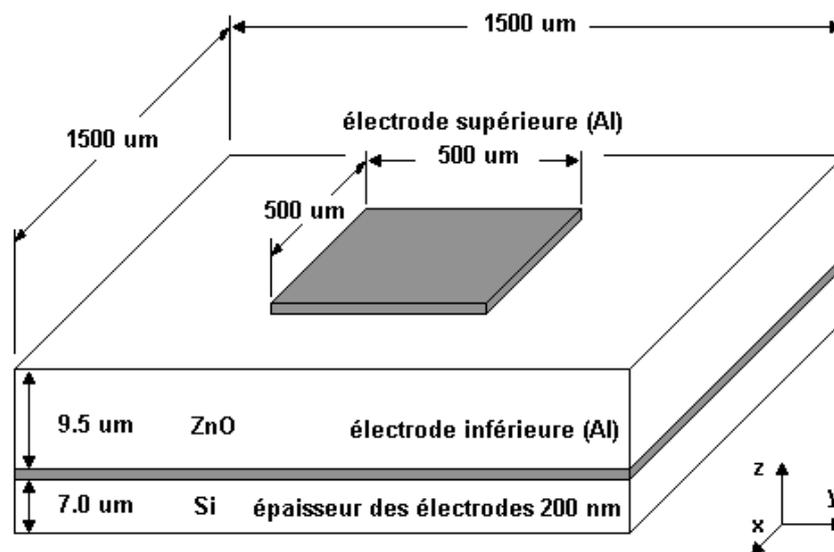


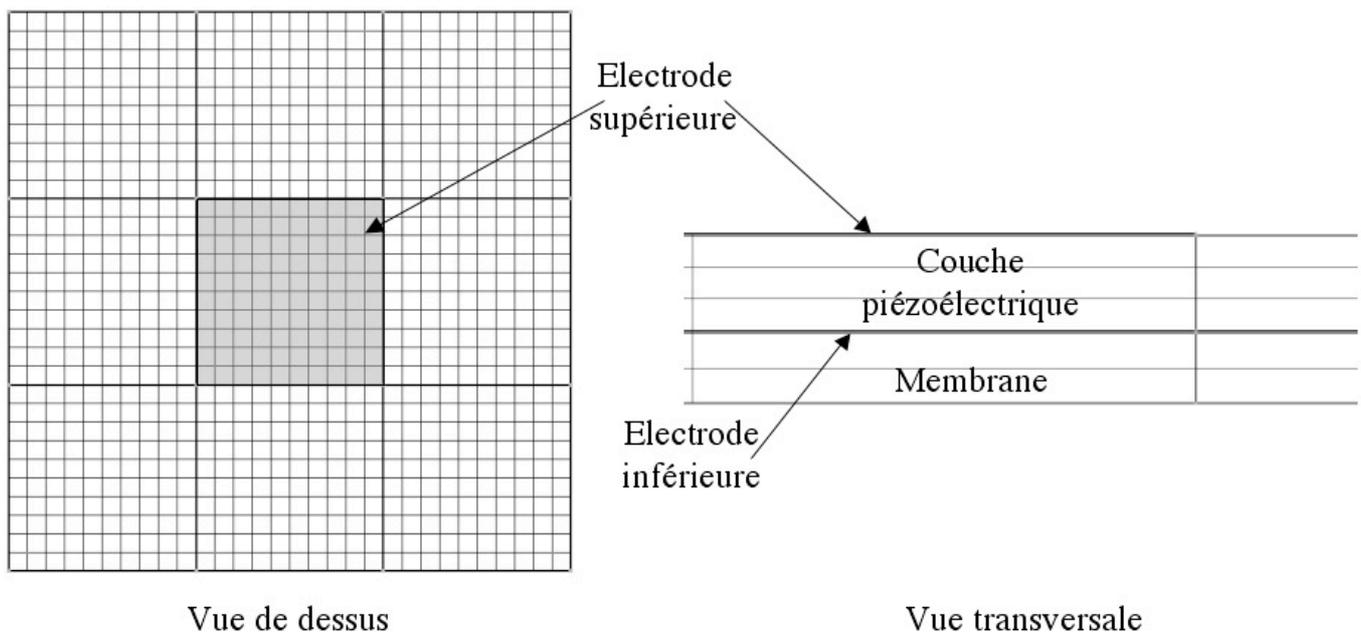
Figure IV-7 : Résonateur FBAR modélisé

Nous rappelons ci-après ces caractéristiques. Le résonateur élémentaire est composé d'une couche d'Oxyde de Zinc (ZnO) de 9,5 µm d'épaisseur et de deux électrodes en Aluminium (Al) de 200 nm. Il est déposé sur une membrane en Silicium (Si) de 7 µm. L'électrode supérieure est un carré de 500 µm de côté et les autres couches sont des carrés de 1500 µm de côté. On retrouve la partie active, définie pour les modèles 1D, sous la surface de l'électrode supérieure.

Les conditions limites sont :

- Sur les bords de la structure, le déplacement mécanique est nul ( $u_x=u_y=u_z=0$ ).
- Sur les électrodes, un potentiel constant est appliqué. Dans la publication de référence [46], l'excitation électrique impose un potentiel de 1V sur l'électrode supérieure et un potentiel de 0V sur l'électrode inférieure. Dans notre logiciel EMXD, nous utilisons un accès localisé placé entre les deux électrodes et dont la référence de potentiel (0V) est prise sur l'électrode inférieure.

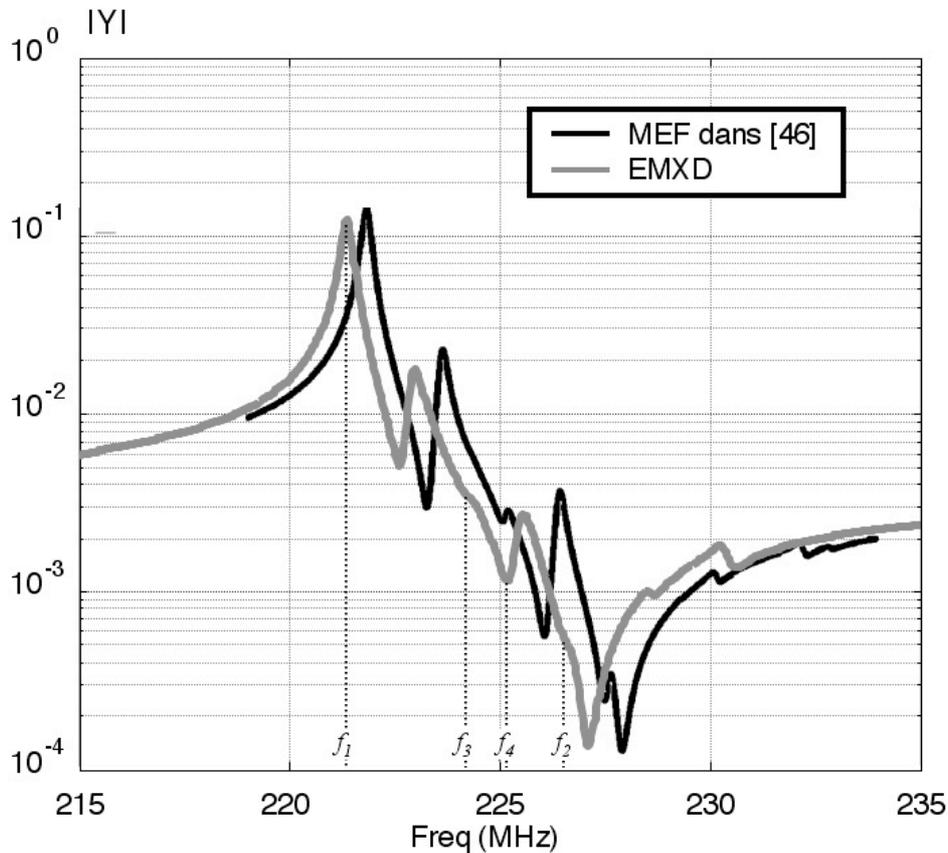
Le maillage de la structure doit être relativement fin suivant l'épaisseur pour représenter correctement le déplacement mécanique du mode fondamental qui s'installe en  $\lambda_L/2$  ( $\lambda_L$ =longueur d'onde longitudinale) et celui du premier mode harmonique qui s'installe en  $3\lambda_L/2$ . Nous avons donc choisi de mailler par trois éléments l'épaisseur de la couche piézoélectrique et par deux, celle de la membrane. Les électrodes ne sont maillées que par une couche d'éléments puisqu'elles sont constituées de matériaux assez durs. Dans les dimensions latérales, nous faisons l'hypothèse qu'une maille de 50  $\mu\text{m}$ , soit un total de 10x10 mailles sur l'électrode supérieure (Figure IV-8), est suffisante pour représenter les modes latéraux.



**Figure IV-8 : Maillage du résonateur FBAR modélisé**

### III.2 ANALYSE DE LA REPOSE ELECTRIQUE

L'analyse de la structure nous a fourni la réponse en fréquence de la Figure IV-9.



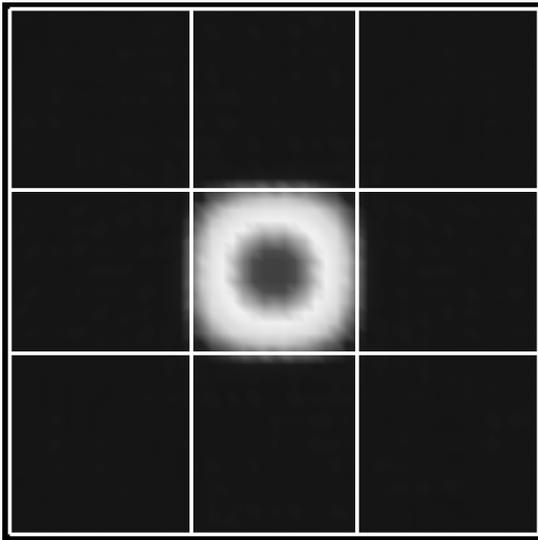
**Figure IV-9 : Réponse électrique du résonateur FBAR modélisé**

On retrouve bien l'allure de la réponse publiée dans [46]. Les différences notables sur les niveaux d'admittance et sur le décalage fréquentiel viennent du fait que nous n'avons pas utilisé exactement les mêmes caractéristiques mécaniques et électriques de matériaux. En effet, ces derniers n'étant pas donnés dans la publication [46], nous avons dû utiliser des valeurs issues de la littérature. Le décalage fréquentiel vient des constantes de rigidité et les différences de niveaux, des pertes mécaniques considérées.

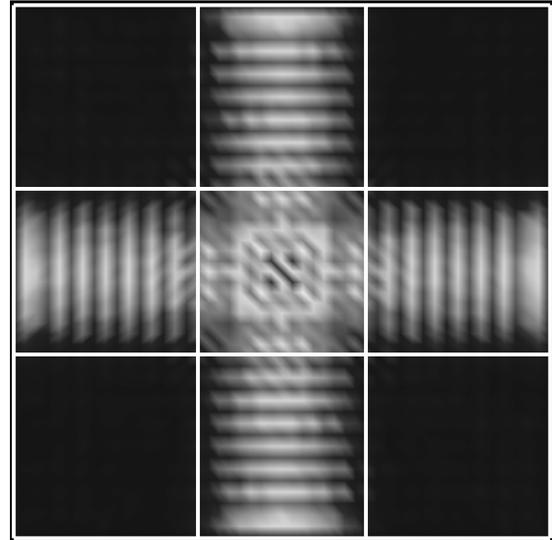
En plus de la résonance et de l'antirésonance du mode fondamental, cette réponse électrique présente certaines singularités. Que ce soit pour des applications d'oscillateurs ou de filtres, ces dernières rendent difficile l'utilisation du résonateur. Elles correspondent à des modes qui seront considérés comme parasites. Certains modes présentent une réalité physique et d'autres, non. Il est donc nécessaire d'identifier leur origine physique pour les supprimer de la réponse électrique.

### III.3 VISUALISATION ET ANALYSE DES MODES PARASITES

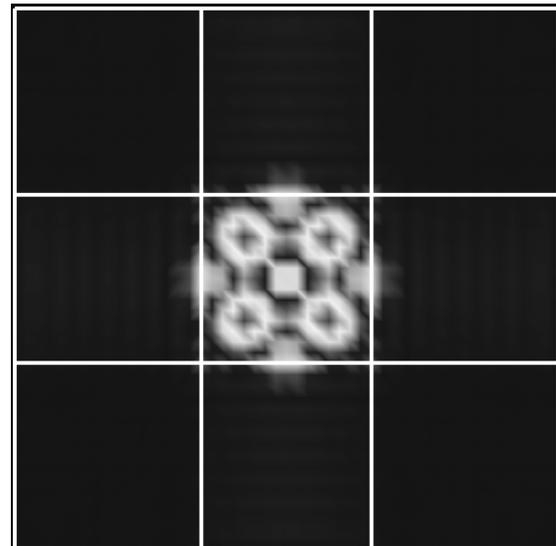
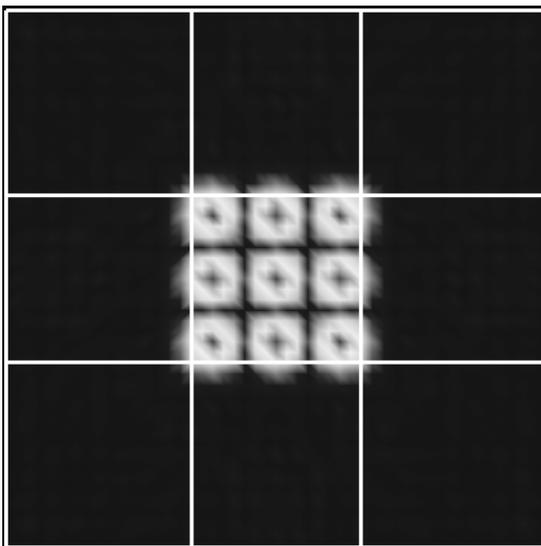
De manière à identifier la provenance des modes parasites présents sur la réponse électrique du résonateur, nous avons observé le déplacement mécanique sur l'ensemble de la structure aux fréquences présentant une singularité. Nous avons pu identifier trois types de modes différents représentés sur la Figure IV-10. Nous avons représenté le déplacement mécanique à la surface du résonateur, au niveau de l'électrode supérieure.



Mode d'épaisseur  $TE_{10}$  ( $f_1=221.38MHz$ )



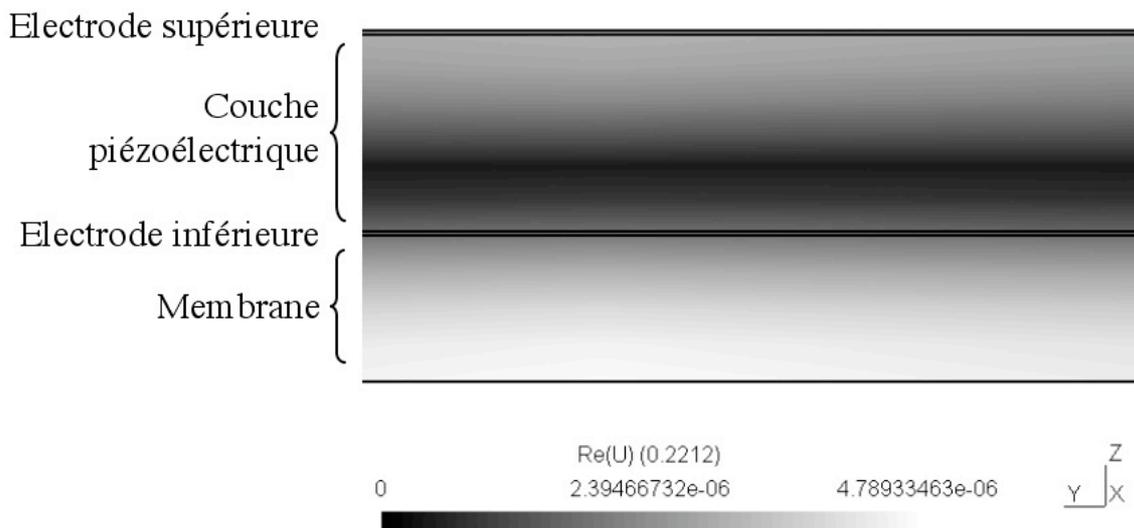
Mode de cavité ( $f_2=226.6MHz$ )



Modes de plaque  $TE_{14}$  et  $TE_{12}$  ( $f_3=224.32MHz$  et  $f_4=225.2MHz$ )

**Figure IV-10 :** Vue de dessus des différents types de modes présents sur la réponse électrique du résonateur FBAR modélisé

Le premier mode est le mode d'épaisseur  $TE_{10}$  (Thickness Extensional Mode). Le premier indice ( $m=1$ ) représente le fait qu'il s'installe en  $\lambda_L/2$  sur l'épaisseur de la structure (Figure IV-11). Il correspond au mode fondamental que nous cherchons à favoriser car il permet d'obtenir un coefficient de couplage électromécanique effectif maximum. Suivant les dimensions latérales, ce mode s'installe sous l'électrode supérieure par couplage électrique-mécanique. Cependant, il doit aussi satisfaire les conditions de continuité du déplacement mécanique sur les bords de l'électrode, là où le champ électrique présente une discontinuité. Au milieu de l'électrode supérieure, ce mode est donc quasi-longitudinal et plus on se rapproche du bord de la partie active, plus sa composante transversale devient importante. Physiquement, on peut dire que la partie non métallisée du résonateur agit comme une charge sur les bords de l'électrode et entrave son déplacement suivant  $z$ . Le mode  $TE_{10}$  est donc la somme d'une composante acoustique longitudinale issue du couplage **direct** avec le champ électrique et d'une composante transversale **induite** par la conversion de modes sur les bords de l'électrode.

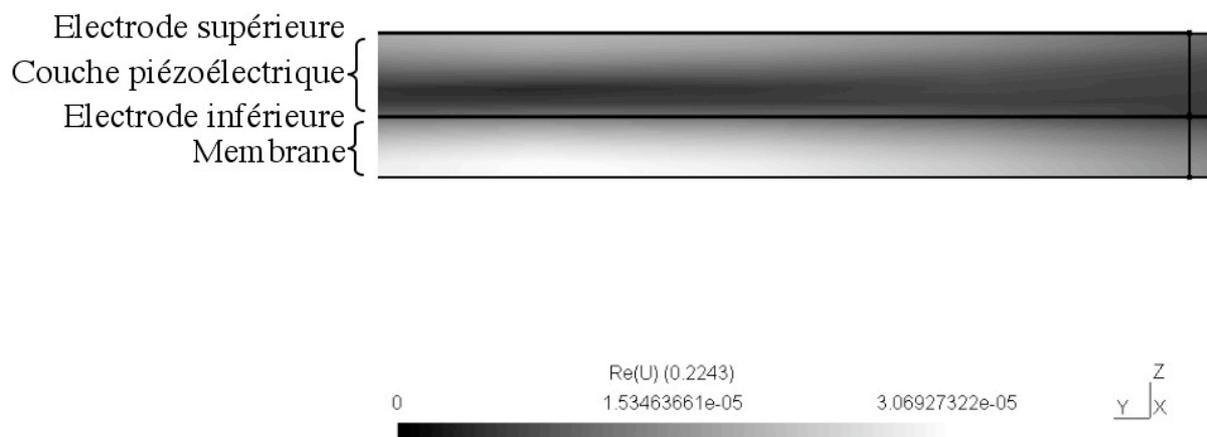


**Figure IV-11 :** Mode  $TE_{10}$  suivant l'épaisseur du résonateur dans la zone active

Le deuxième mode est un mode de « cavité ». Il n'a pas de réalité physique puisqu'il est dû au calcul. En effet, la troncature du domaine d'étude lors de la simulation par la méthode des éléments finis et l'application de conditions limites fortes (composante normale du déplacement mécanique nulle) entraînent l'apparition d'une onde stationnaire sur toute la largeur de la structure. Ces modes sont facilement identifiables puisque leurs fréquences de résonance varient lorsque l'on change les dimensions latérales du résonateur.

Pour les éviter, nous pouvons utiliser des conditions aux limites absorbantes sur les bords de la structure ou considérer des couches acoustiques PML (Perfectly Matched Layers). Ces dernières sont en cours de développement au LPMO de Besançon.

Les deux modes représentés en bas de la Figure IV-10, font partie des modes de « plaques » notés  $TE_{mn}$ . Ce sont des modes anharmoniques du mode  $TE_{10}$  c'est-à-dire qu'ils possèdent une résonance en  $m \frac{\lambda_L}{2}$  suivant l'épaisseur (Figure IV-12) et en  $n \frac{\lambda_T}{2}$  ( $\lambda_T$ =longueur d'onde transverse) dans les dimensions latérales (Figure IV-19). Ils s'installent latéralement, par réflexion sur les bords de l'électrode, comme une onde stationnaire transverse. Ces ondes transversales correspondent à des ondes de Lamb pour les résonateurs FBAR et à des ondes de Rayleigh dans les structures SMR. Ici aussi, il faut bien distinguer l'aspect « direct » du déplacement mécanique, suivant l'épaisseur, provenant du couplage électrique-mécanique et l'aspect « induit » du mode de Lamb qui s'installe par réflexion sur les bords de l'électrode supérieure.



**Figure IV-12 : Mode  $TE_{1n}$  suivant l'épaisseur du résonateur au bord de l'électrode supérieure**

Ces modes ne peuvent être que des harmoniques impairs du mode  $TE_{10}$  car la charge électrique totale de l'électrode supérieure pour des harmoniques pairs est nulle. Ils ne sont donc pas couplés par une excitation électrique. Ils possèdent une origine physique due à la discontinuité sur les bords de l'électrode supérieure. C'est donc du côté de la forme de cette dernière qu'il faut chercher des solutions pour supprimer leur impact sur la qualité de la réponse électrique du résonateur.

## IV OPTIMISATION DE LA QUALITE DE LA REPONSE ELECTRIQUE

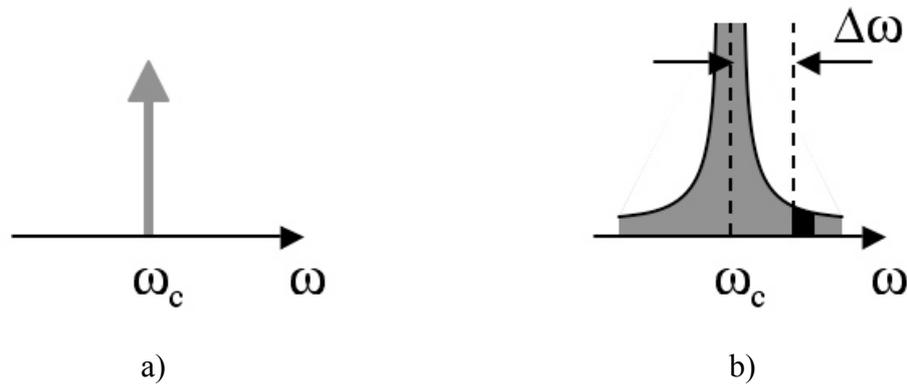
La qualité de la réponse électrique du résonateur joue un rôle prépondérant sur les performances finales des systèmes qui les utilisent. Un bon coefficient de couplage électromécanique effectif  $k_{eff}^2$ , un fort coefficient de qualité  $Q$  (pertes minimum) et l'absence de modes parasites sont les caractéristiques idéales pour concevoir un système performant. En effet, le coefficient de couplage  $k_{eff}^2$  fixe directement la bande passante des filtres passe bande à résonateurs BAW, le coefficient de qualité  $Q$  influence la sélectivité des oscillateurs et des filtres et les modes parasites introduisent des ondulations sur la phase du résonateur. Enfin, le niveau des pertes d'insertions dépend de tous ces paramètres à la fois. L'utilisation des résonateurs BAW pour des oscillateurs à faible bruit de phase est donc, par certains aspects, un défi. Notre outil de simulation va nous permettre d'ébaucher quelques solutions pour étudier la suppression des modes parasites de la réponse électrique.

### IV.1 OSCILLATEUR ET BRUIT DE PHASE

Le fonctionnement à des fréquences relativement élevées des résonateurs BAW permet d'envisager leur utilisation dans des circuits d'oscillateurs (Figure I-17). Ils doivent permettre de s'affranchir du circuit de multiplication de fréquence qui dégrade les performances de ces derniers en termes de consommation électrique et de bruit de phase. Cependant, pour que cela soit possible, il est nécessaire de développer un résonateur BAW à fort coefficient de qualité et exempt de modes parasites.

#### IV.1.1 BRUIT DE PHASE

Comme tout système analogique, les oscillateurs sont sensibles au bruit. Ce dernier provient soit des organes internes du circuit, soit du milieu extérieur (alimentation) et se manifeste par une variation de la fréquence ou de l'amplitude du signal de sortie. Généralement, la modulation d'amplitude est négligeable par rapport à la déviation en fréquence. Cette variation est appelée « bruit de phase » car elle peut être représentée par un terme de phase dans l'expression du signal de sortie. L'effet de cette perturbation est l'élargissement de la raie spectrale de l'oscillateur. Pour un signal sinusoïdal périodique, on peut écrire :  $x(t) = A \cos[\omega_c t + \phi_n(t)]$  où  $\phi_n(t)$  représente la fonction de répartition du bruit aléatoire sur une période. Le spectre de  $\phi_n(t)$  est donc translaté autour de  $\omega_c$  (Figure IV-13b).

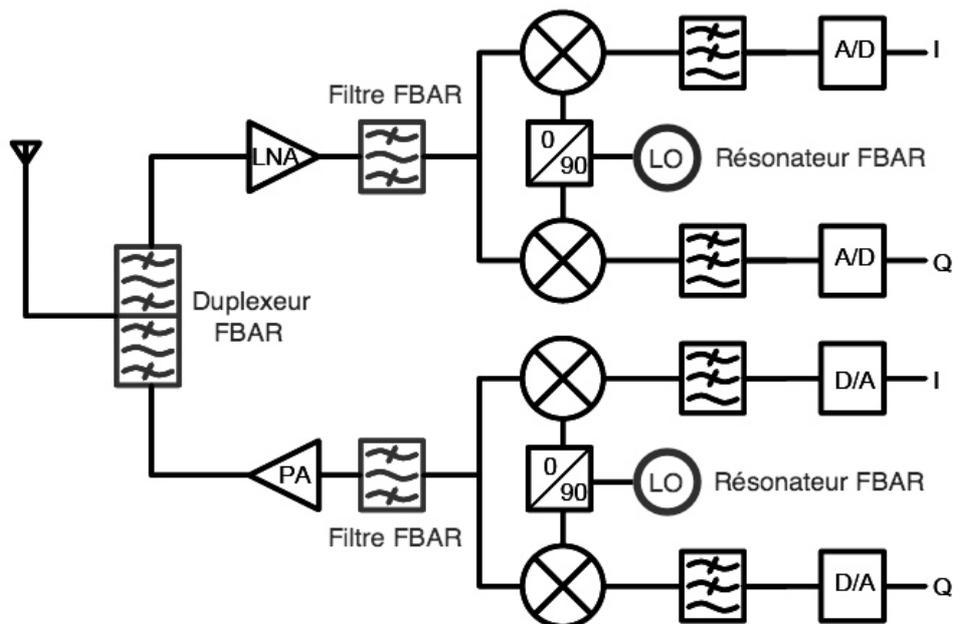


**Figure IV-13 :** Spectre du signal de sortie d'un oscillateur idéal et d'un oscillateur soumis au bruit de phase

Pour quantifier ce bruit, on considère une bande unitaire (1 Hz), à un offset  $\Delta\omega$  de  $\omega_c$ , sur laquelle on calcule la puissance du bruit normalisée par rapport à la puissance moyenne de la porteuse  $\omega_c$ .

#### IV.1.2 IMPACT DU BRUIT DE PHASE DANS LES CIRCUITS RF

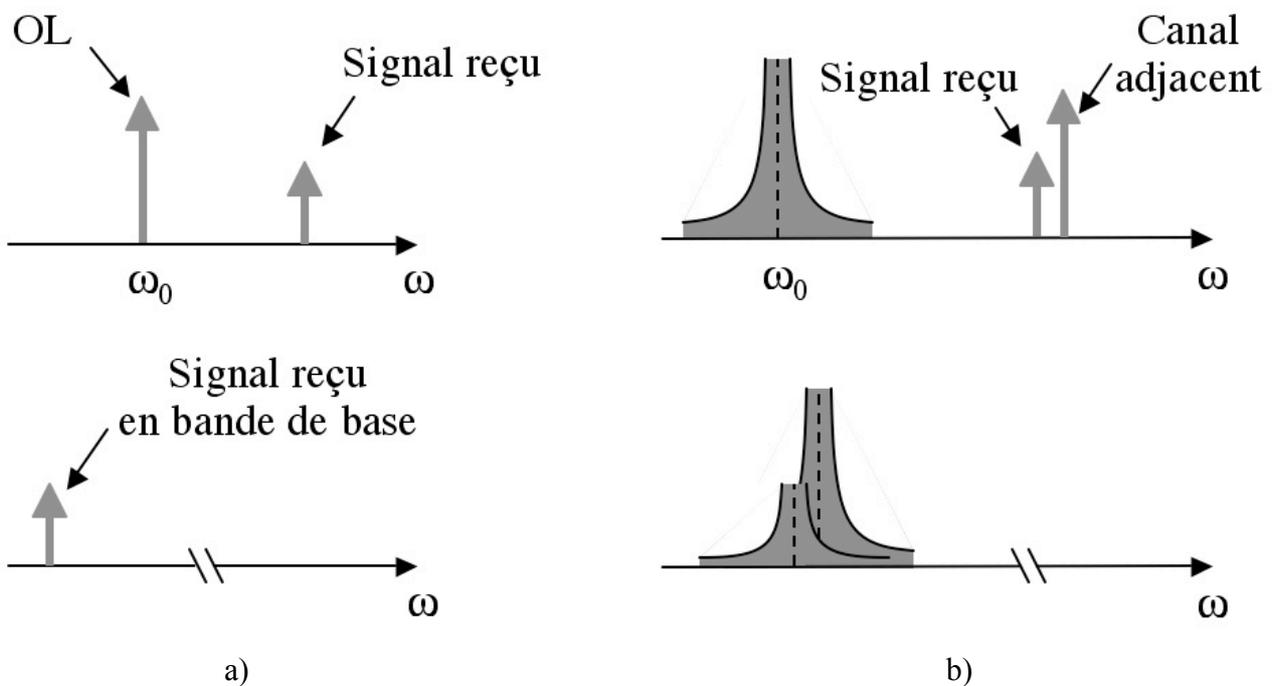
Pour bien comprendre l'impact du bruit de phase dans les circuits RF, considérons le schéma de l'émetteur-récepteur de la Figure IV-14.



**Figure IV-14 :** Émetteur-récepteur à conversion directe

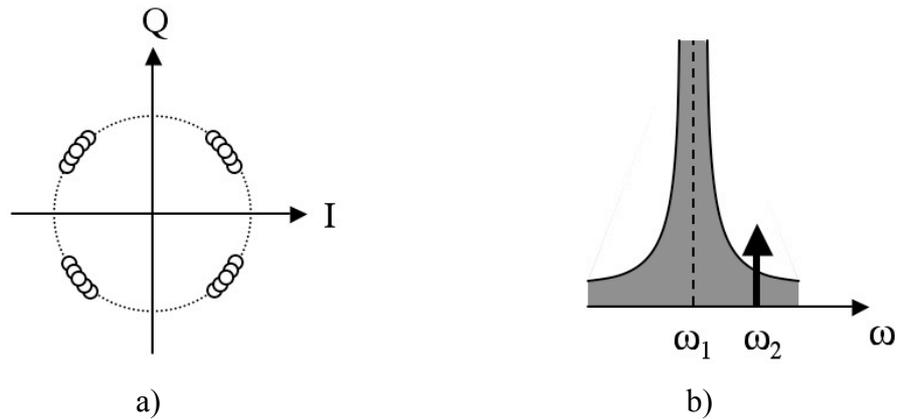
L'oscillateur local délivre le signal de la porteuse en émission et en réception, il transpose le signal reçu en bande de base. Le bruit de phase agit donc directement sur la conversion fréquentielle des signaux émis et reçus.

Dans le cas d'une réception idéale, on peut voir (Figure IV-15a) que le signal est translaté en bande de base par mixage avec le signal de l'oscillateur local et sans déformation de spectre. Lorsque l'OL présente un bruit de phase, le spectre translaté devient aussi bruité (Figure IV-15b). De plus, le signal reçu est souvent accompagné par des canaux adjacents (signal bloqueur). Le résultat de la conversion en bande de base est alors un chevauchement des spectres par « mixage réciproque ». On observe donc une dégradation de la qualité du signal recherché.



**Figure IV-15 : Conversion en bande de base en réception idéale et avec bruit de phase**

Le bruit de phase de l'oscillateur local a aussi un impact négatif sur les informations transmises en modulation de phase. Par exemple, la conversion en bande de base d'un signal modulé en QPSK (Quadrature Phase Shift Keying) par un oscillateur local bruité donne la constellation de la Figure IV-16a. Le taux d'erreurs binaires est alors plus élevé. En transmission (Figure IV-16b), le bruit de phase du signal ( $\omega_1$ ) d'un émetteur proche peut « noyer » le signal d'un émetteur lointain ( $\omega_2$ ).



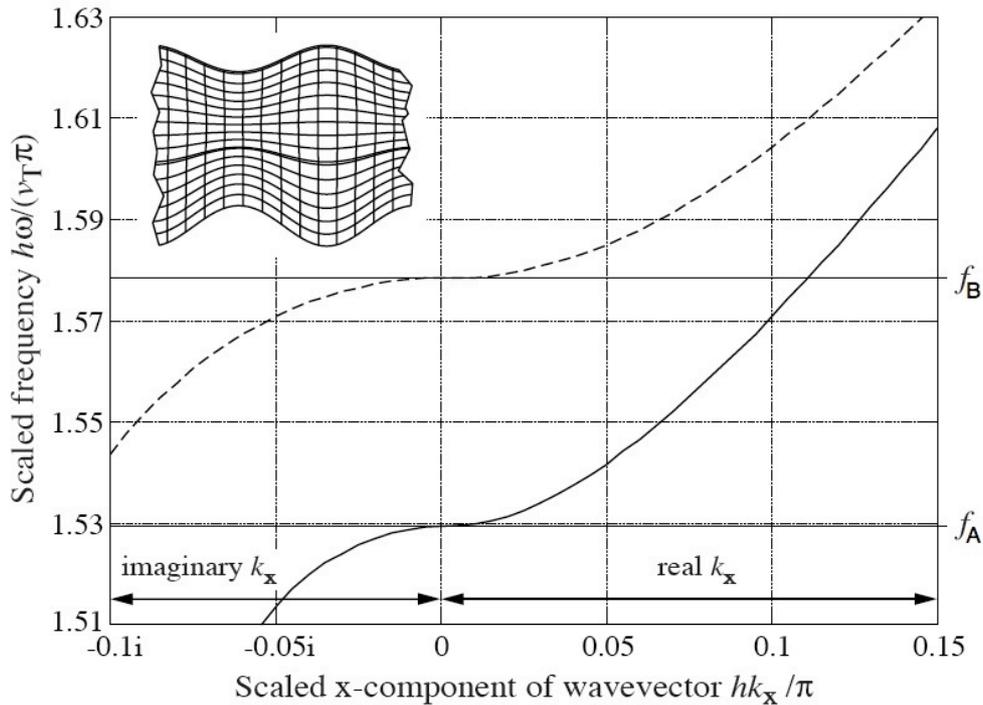
**Figure IV-16 : Conversion en bande de base en réception QPSK et impact du bruit de phase en émission**

On voit donc que le bruit de phase dégrade énormément les performances des systèmes RF. Il est donc nécessaire de concevoir des résonateurs BAW possédant un fort coefficient de qualité et une réponse électrique sans modes parasites.

## IV.2 OPTIMISATION DU COEFFICIENT DE QUALITE $Q$

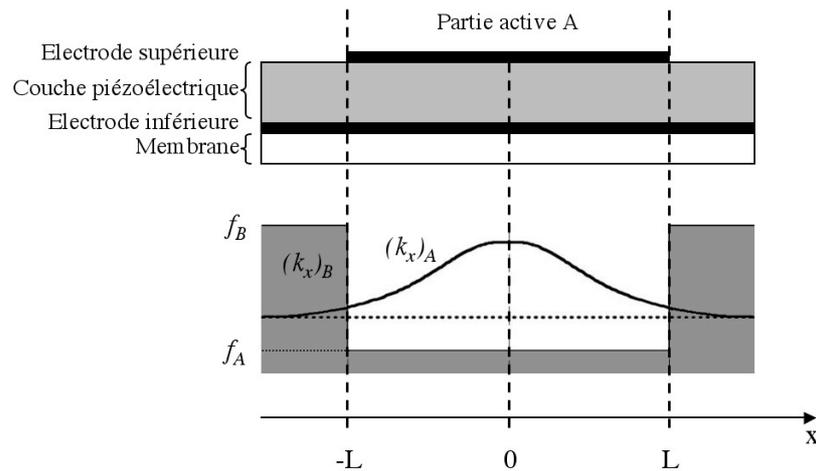
Pour minimiser les pertes et obtenir une valeur de coefficient de qualité  $Q$  la plus élevée possible, il est nécessaire de confiner l'énergie mécanique dans la partie active du résonateur (Figure IV-7). De cette manière, le déplacement mécanique contribuera au champ électrique total sous l'électrode supérieure et donc à la charge électrique totale du résonateur. Toute l'énergie qui s'échappe de la partie active est perdue et peut même perturber les résonateurs voisins. Il faut donc limiter cette « fuite » en se plaçant dans des conditions particulières.

Considérons la structure de la Figure IV-7. Elle est constituée d'une partie active A délimitée par l'électrode supérieure et d'une partie passive B. La partie A peut être considérée comme « mécaniquement chargée » par l'électrode de 200 nm d'épaisseur. Il est possible de tracer la courbe de dispersion fréquentielle de la composante transversale du mode  $TE_1$  pour les deux parties A et B (Figure IV-17) [47]. La courbe en trait plein représente la constante de propagation  $k_x$  dans la partie active A et celle en pointillés, dans la partie passive B. Lorsque  $k_x$  est imaginaire, le mode est évanescent. En dessous d'une certaine fréquence, le mode ne peut donc pas se propager dans les dimensions latérales. Le déplacement mécanique diminue alors de manière exponentielle. Cette fréquence représente la fréquence de coupure du mode.



**Figure IV-17 :** Courbe de dispersion de la composante transversale  $k_x$  du mode  $TE_{10}$  dans les régions A et B. La fréquence et  $k_x$  sont normalisés par rapport à l'épaisseur de la couche de ZnO ( $h=9,5\mu\text{m}$ ) et à la vitesse acoustique suivant x ( $v_T=2747\text{m/s}$ ).

Sur la Figure IV-17, on peut lire les fréquences de coupures  $f_A$  et  $f_B$  du mode  $TE_{10}$  dans les régions A et B. On remarque alors que, si la fréquence de résonance  $f_r$  du résonateur est comprise entre  $f_A$  et  $f_B$ , le mode  $TE_{10}$  est propagatif dans la partie active A ( $k_x$  réel) et évanescents dans la partie passive B ( $k_x$  imaginaire). On observe alors le phénomène de confinement de l'énergie mécanique sous l'électrode supérieure. Si  $f_r$  est supérieure à  $f_B$ , l'énergie peut se propager en dehors de la partie active. Nous avons représenté sur la Figure IV-18 le profil du déplacement mécanique suivant x sur l'ensemble du résonateur. La partie grisée représente les valeurs de constantes de propagation imaginaires. On reconnaît la forme du mode  $TE_{10}$  de la Figure IV-10. Dans la partie active A, la constante de propagation  $(k_x)_A$  est réelle. On a donc un déplacement mécanique sinusoïdal. Dans la partie passive B,  $(k_x)_B$  est imaginaire et le déplacement est exponentiel. L'inconvénient de ce confinement d'énergie est l'apparition des modes anharmoniques du mode  $TE_{10}$ .

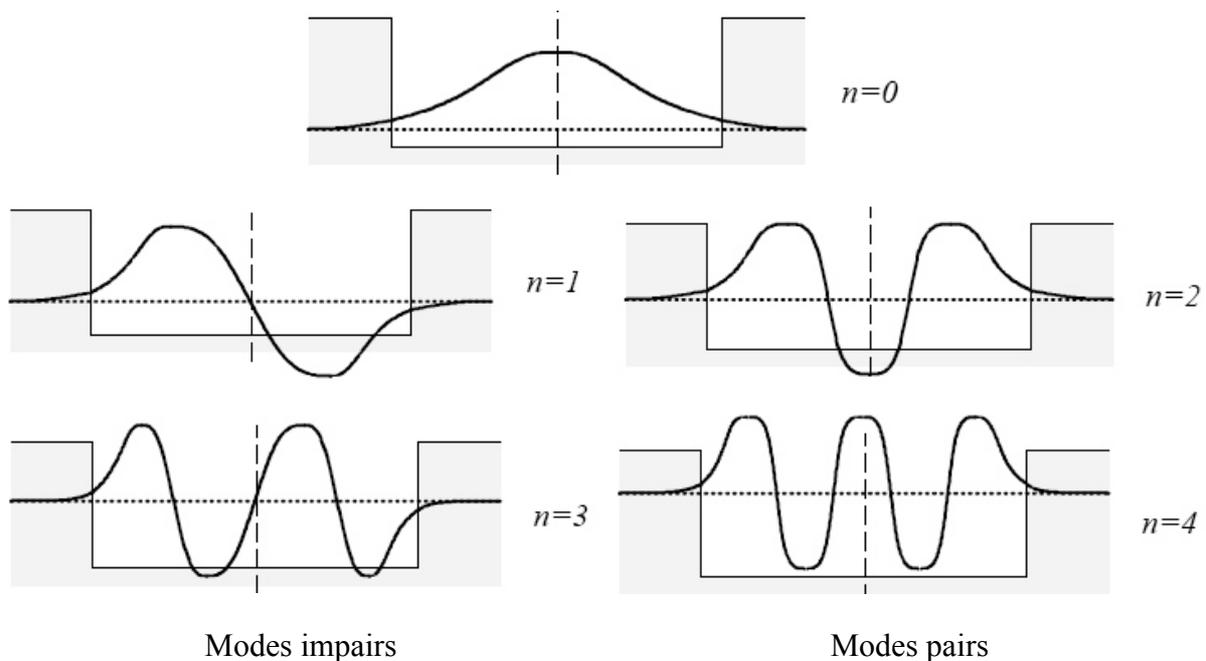


**Figure IV-18 : Profil du déplacement mécanique sur l'ensemble du résonateur**

En effet, comme il a été montré dans [6], si l'on effectue le raccordement modal ( $u_x$  et  $du_x/dx$  continues) au bord de l'électrode supérieure ( $x=\pm L$ ), entre le déplacement sinusoïdal dans la partie active A et le déplacement exponentiel dans la partie passive B, on peut écrire la condition de résonance suivante:

$$(k_x)_B = (k_x)_A \tan[(k_x)_A L] \tag{IV.26}$$

Les profils de déplacement mécanique  $u_{x,n}$  des modes  $TE_{1n}$  sont alors les suivants :



**Figure IV-19 : Profil de déplacement mécanique  $u_{x,n}$  des modes  $TE_{1n}$**

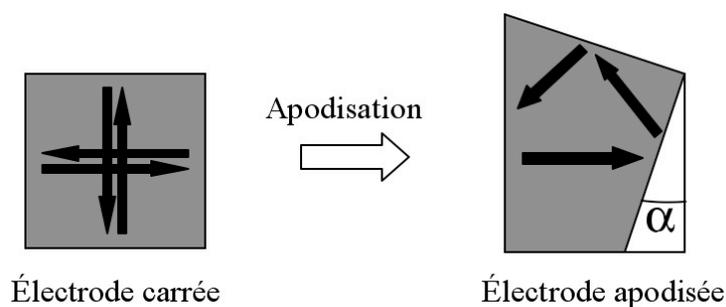
On remarque alors que, comme la charge électrique totale est intégrée sur toute la surface de l'électrode supérieure, seuls les modes symétriques ( $n$  pairs) ont une charge totale non nulle. Ceci permet aussi de montrer qu'il existe plusieurs modes capables de se coupler avec l'excitation électrique. On retrouve d'ailleurs les modes de plaque de la Figure IV-10.

Le but est donc maintenant de supprimer ces modes parasites de la réponse électrique soit en supprimant leur origine physique (Solution n°1), soit en évitant leur couplage (Solution n°2).

### IV.3 SOLUTION N°1 : ÉLECTRODE SUPERIEURE APODISEE

La technique d'apodisation est bien connue des acousticiens. Une pièce qui possède deux murs parallèles favorise le phénomène de réverbération et constitue un foyer potentiel de résonances acoustiques. Pour « casser » ces résonances, l'architecture des salles de spectacles n'est pas symétrique et ne possède pas de murs parallèles.

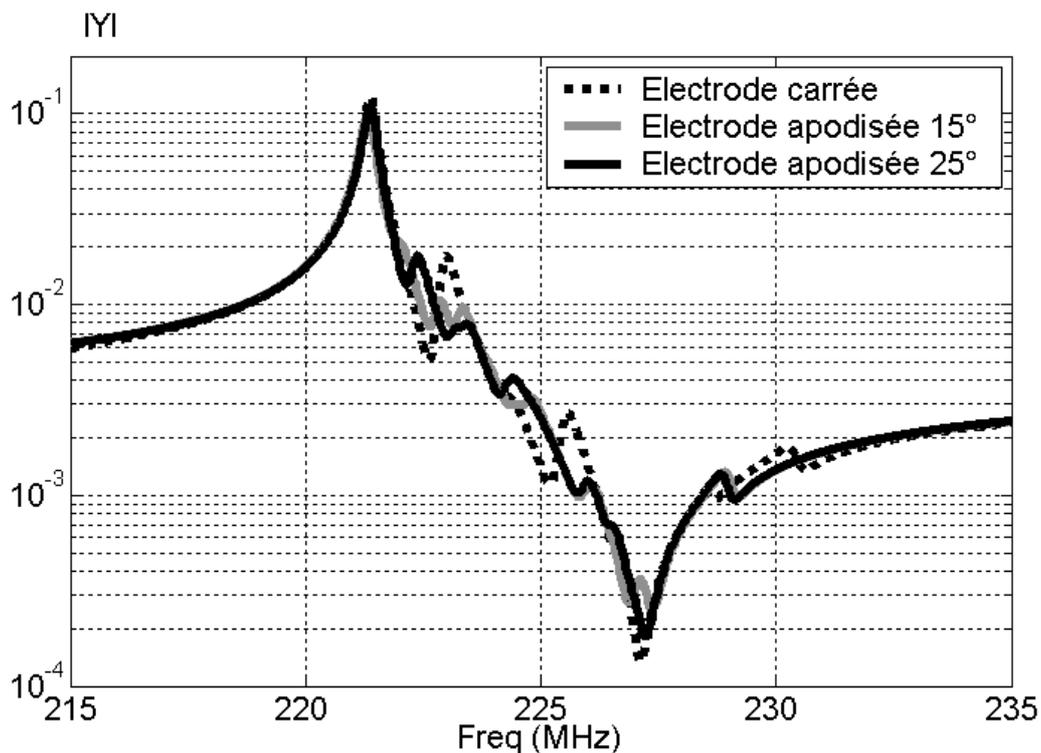
À l'échelle du résonateur BAW, l'apparition des modes de plaques est due à l'interférence constructive des ondes de Lamb qui se réfléchissent sur les bords de l'électrode supérieure et qui créent une onde stationnaire. En « cassant » les symétries de l'électrode supérieure, on s'attaque directement aux fondements même de ces modes. La technique d'apodisation (littéralement « couper les pieds ») permet donc de supprimer les modes parasites de la réponse électrique.



**Figure IV-20 : Apodisation d'une électrode carrée**

La démarche appliquée consiste à définir une électrode supérieure asymétrique et ne possédant aucun côté parallèle. Elle prend alors la forme d'un polygone irrégulier à quatre côtés ou plus. Dans le cas de la structure de la Figure IV-7, nous avons étudié l'impact d'une apodisation à quatre côtés.

La règle que nous avons appliquée consiste à « couper » une partie de l'électrode supérieure suivant un angle  $\alpha$  et à la « coller » sur un autre côté. Ceci permet d'obtenir une électrode asymétrique, où aucun côté n'est parallèle, mais qui possède la même surface que l'électrode carrée de départ (Figure IV-20). Nous avons appliqué cette technique à la structure de la Figure IV-7 pour différentes valeurs de  $\alpha$ . L'analyse 3D, grâce à notre outil de simulation EMXD, nous a permis d'obtenir les réponses électriques tracées sur la Figure IV-21.

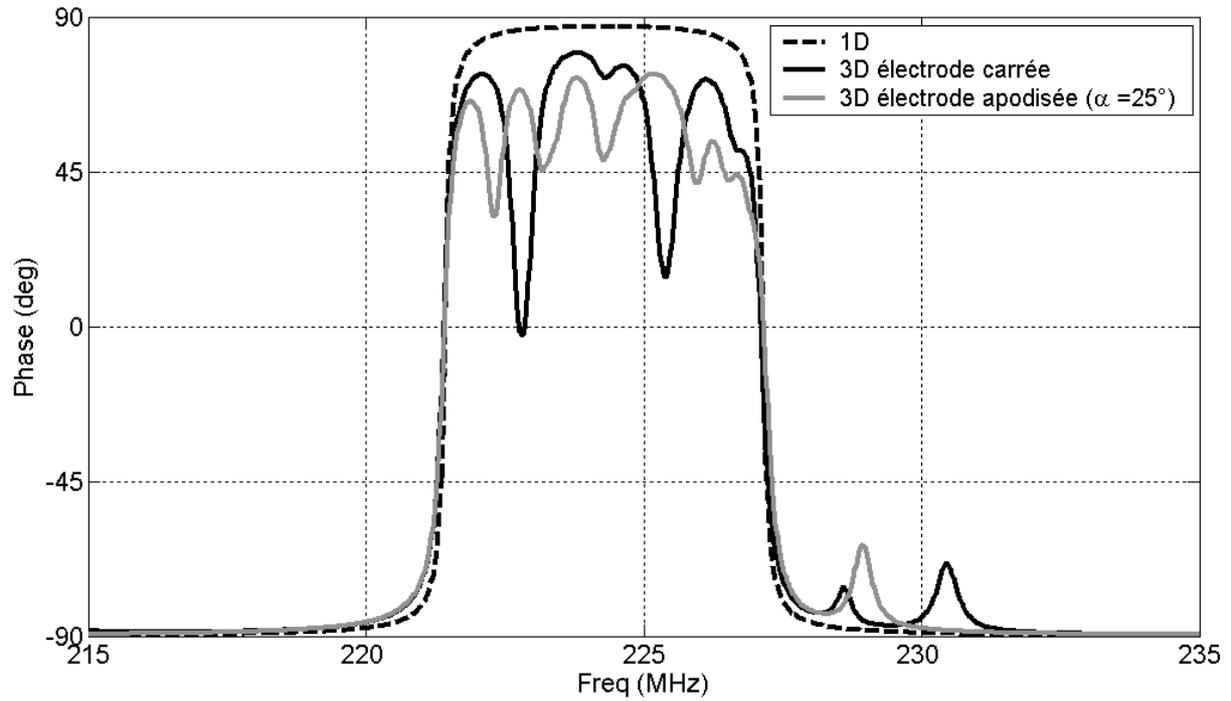


**Figure IV-21 :** Réponses électriques du résonateur apodisé pour plusieurs valeurs de  $\alpha$

On remarque que pour cette structure, la pureté spectrale de la réponse électrique dépend de l'angle d'apodisation. L'amplitude des modes parasites diminue avec l'augmentation de  $\alpha$ . Cependant, au-delà de  $25^\circ$ , cette tendance s'inverse. Nous avons donc défini un critère  $\chi$  représentant l'écart relatif entre la phase  $\varphi_{3D}$  de la réponse électrique simulée en 3D et celle obtenue en 1D,  $\varphi_{1D}$  (cas idéal sans modes parasites) (Figure IV-22).

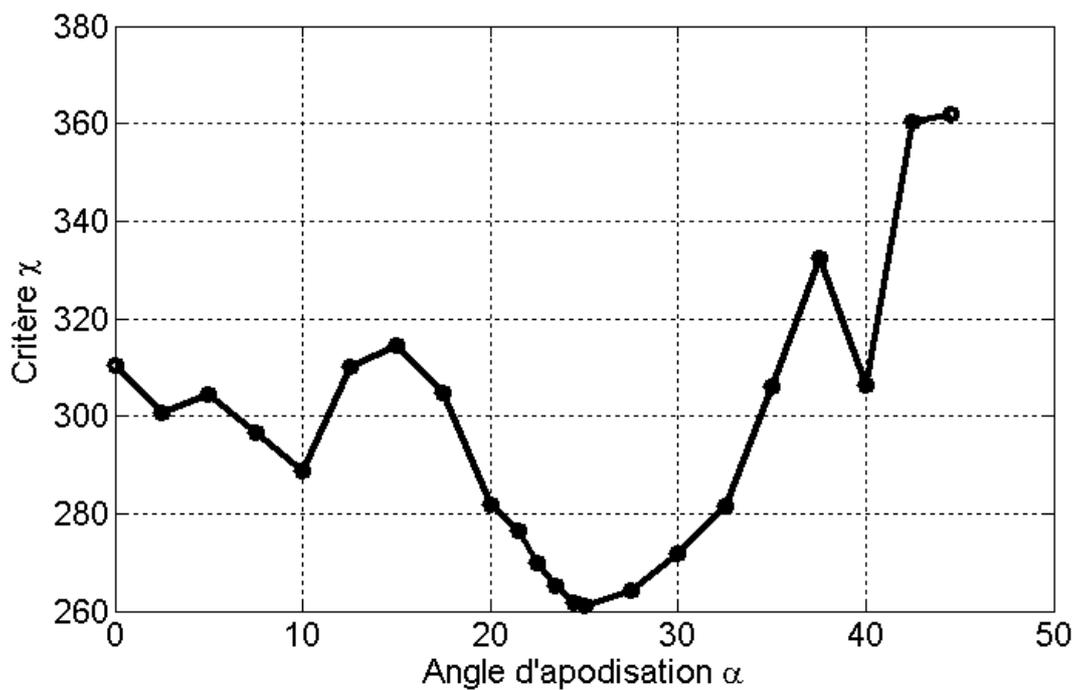
$$\chi = \frac{1}{nb\_freq} \sum_{n=0}^{nb\_freq} [\varphi_{1D}(n) - \varphi_{3D}(n)]^2 \quad (IV.27)$$

avec :  $nb\_freq$  = nombre de points de fréquence



**Figure IV-22 :** Phase 1D et 3D du résonateur à électrode supérieure carrée et 3D du résonateur apodisé ( $\alpha=25^\circ$ )

Sur la Figure IV-23, nous avons tracé le critère  $\chi$  en fonction de l'angle d'apodisation  $\alpha$ .

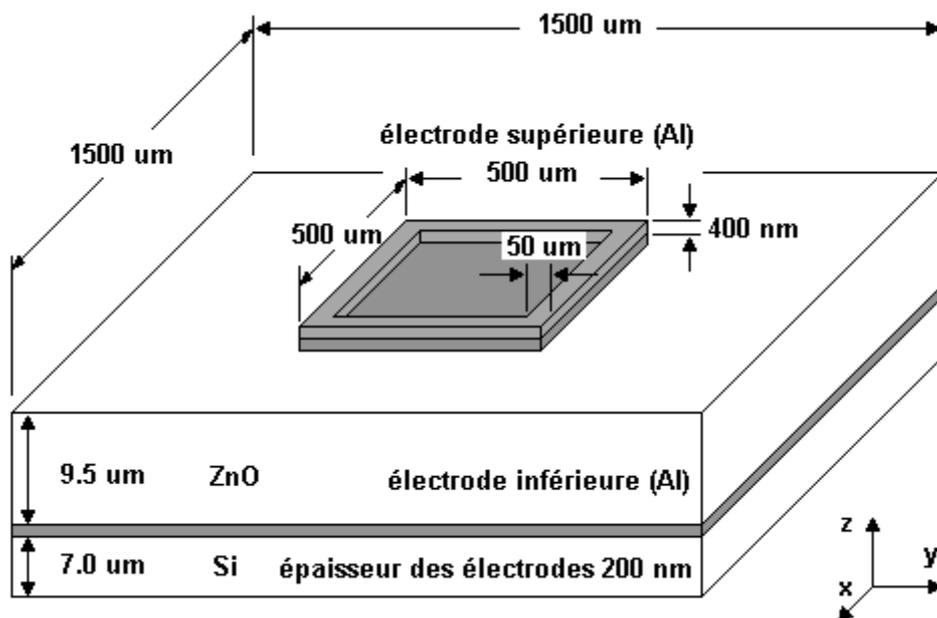


**Figure IV-23 :** Critère d'apodisation  $\chi$  en fonction de l'angle d'apodisation  $\alpha$

On remarque que le critère  $\chi$  passe par un minimum pour un angle d'apodisation  $\alpha$  de  $25^\circ$ . On ne pourra donc pas obtenir une meilleure pureté spectrale que celle obtenue pour cette valeur. Ceci nous permet de dire que la règle d'apodisation que nous avons utilisée n'est pas optimale pour cette structure puisque l'amplitude des modes parasites reste encore significative. Il faut donc étudier d'autres règles (électrode à 5, 6 ou 7 côtés) ou d'autres solutions pour améliorer la pureté spectrale. Seul un outil de simulation 3D, comme EMXD, permet d'effectuer cette tâche.

#### IV.4 SOLUTION N°2 : ÉLECTRODE SUPÉRIEURE CHARGÉE SUR LES BORDS

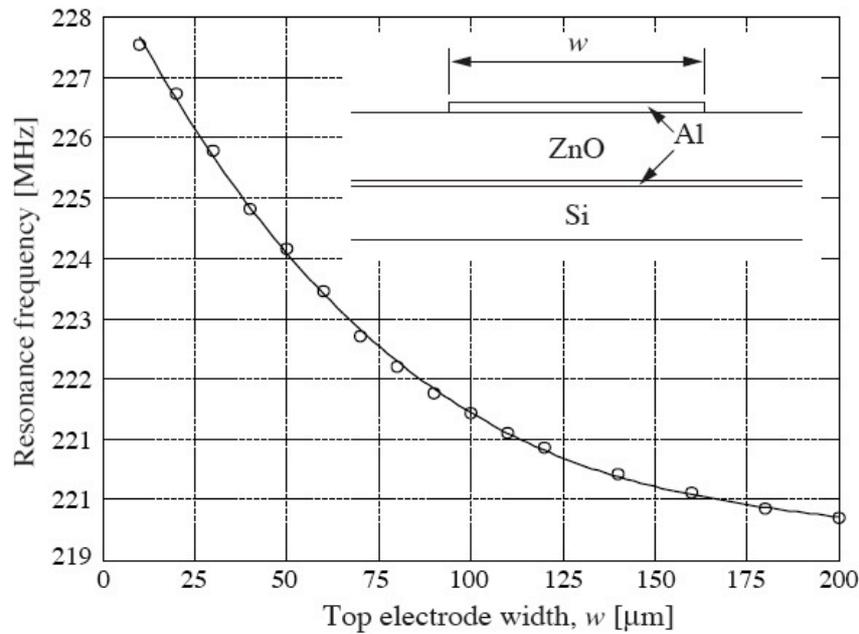
La deuxième solution pour obtenir une réponse électrique sans modes parasites est de concevoir le résonateur de manière à ce qu'un seul mode puisse se coupler avec l'excitation électrique. Pour ce faire, on utilise la structure de la Figure IV-24.



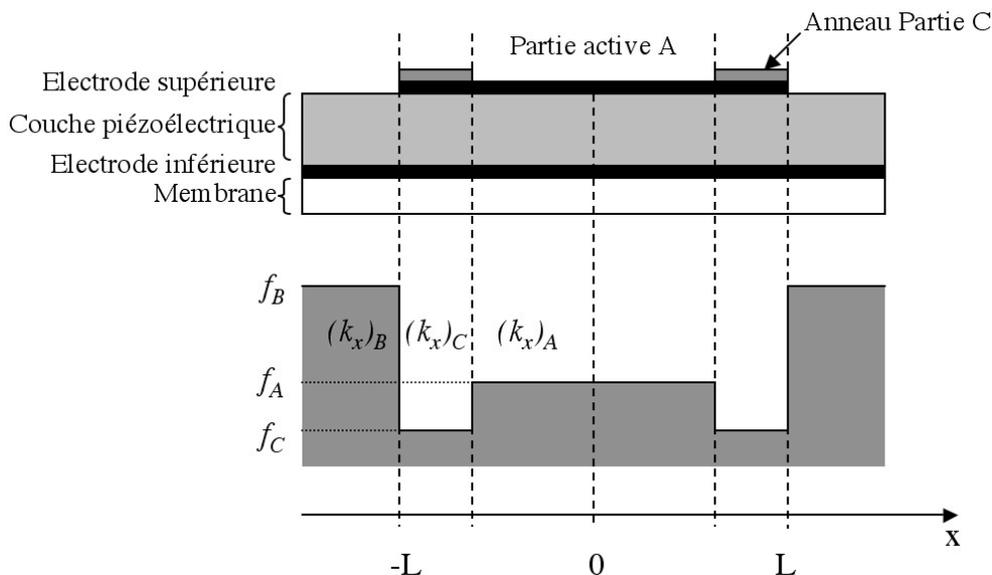
**Figure IV-24 :** Résonateur FBAR à électrode supérieure chargée sur les bords

Cette structure diffère de celle de la Figure IV-7 par l'anneau déposé sur le pourtour de l'électrode supérieure. Cette surépaisseur (partie C) en Aluminium (Al) mesure  $50\ \mu\text{m}$  de large et  $400\ \text{nm}$  d'épaisseur. Elle possède une fréquence de coupure  $f_C$  du mode  $\text{TE}_{10}$  inférieure à celle de la partie active (partie A) et permet d'obtenir un découplage des modes anharmoniques.

L'équation (IV.26) montre que la condition de résonance, et donc la fréquence  $f_r$ , varie aussi avec la largeur de l'électrode  $w$ . Nous avons représenté sur la Figure IV-25 la courbe d'évolution de la fréquence de résonance du résonateur FBAR de la Figure IV-7 en fonction de la largeur de l'électrode supérieure  $w$ . Cependant, l'épaisseur de cette dernière est ici de 600 nm.



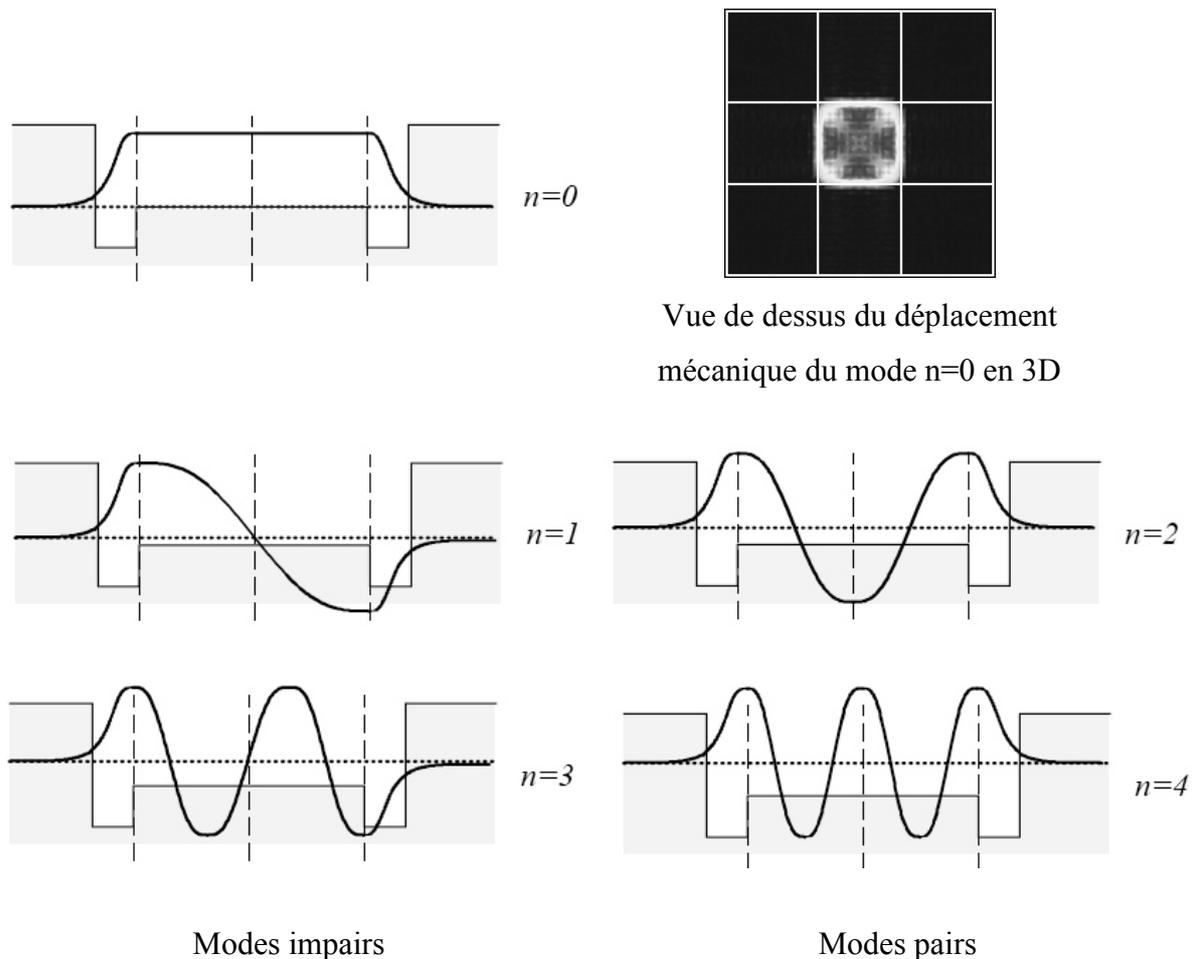
**Figure IV-25 :** Évolution de la fréquence de résonance en fonction de la largeur de l'électrode supérieure  $w$



**Figure IV-26 :** Diagramme de dispersion du mode  $TE_1$

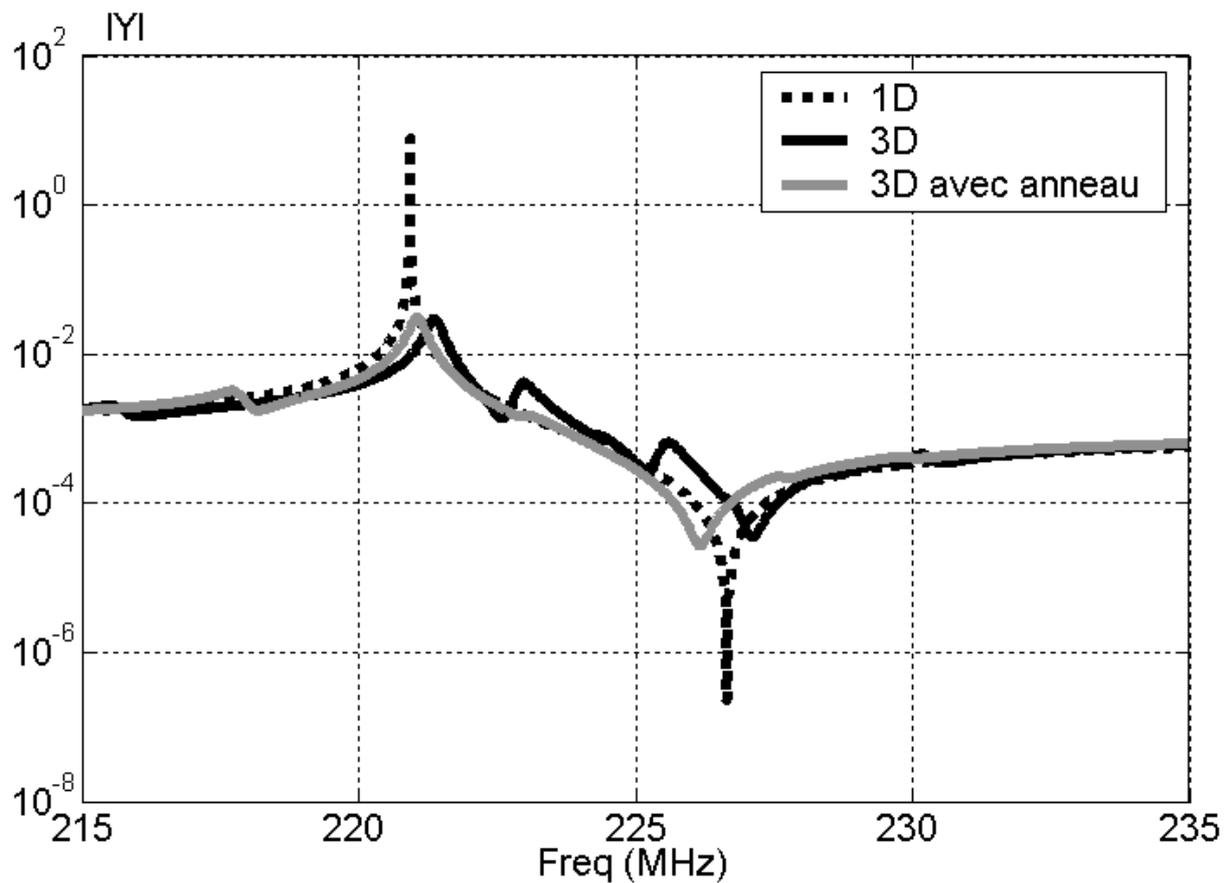
Pour une même largeur  $w$ , la fréquence de résonance du mode  $TE_{10}$  avec une électrode supérieure de 600 nm d'épaisseur ( $f_{r(600nm)}$ ) est plus basse que celle obtenue pour une électrode de 200 nm ( $f_{r(200nm)}$ ). Cependant, la valeur de  $f_{r(600nm)}$  augmente lorsque  $w$  diminue. Il est donc possible, en optimisant la largeur  $w$ , d'obtenir la même fréquence de résonance avec des fréquences de coupures différentes. Le diagramme de dispersion pour la structure de la Figure IV-24 est représenté sur la Figure IV-26.

En choisissant la fréquence de résonance entre les fréquences de coupure de la partie active A et de la surépaisseur (partie C), c'est-à-dire entre  $f_A$  et  $f_C$ , le premier mode ( $n=0$ ) permet d'obtenir un déplacement mécanique constant sur presque toute la surface de l'électrode. Les autres modes, qu'ils soient pairs ou impairs, sont des multiples de la longueur d'onde transverse. Ils ne sont donc pas couplés (Figure IV-27).



**Figure IV-27 :** Profil du déplacement mécanique  $u_{x,n}$  des modes anharmoniques de  $TE_1$

L'analyse 3D du résonateur chargé par un anneau grâce à notre logiciel EMXD est tracée sur la Figure IV-28 avec les réponses électriques 1D et 3D du résonateur non chargé.



**Figure IV-28 : Réponse électrique du résonateur chargé par un anneau**

On obtient bien une réponse électrique exempte de modes parasites. De plus le déplacement mécanique quasi constant sur toute la surface de l'électrode supérieure confère au résonateur un comportement quasi 1D.

Cette solution est intéressante pour les applications d'oscillateurs où un seul résonateur BAW est utilisé comme référence de fréquence. Cependant, pour des applications de filtrage, où plusieurs résonateurs sont nécessaires et où le décalage des fréquences de résonance entre résonateurs est effectué par dépôt d'une couche de charge, la technique d'apodisation est plus adaptée.

## V ANALYSE D'UN RESONATEUR SMR

Comme pour la structure FBAR précédente, nous avons appliqué la méthode des éléments finis à l'analyse de la structure SMR (Solidly Mounted Resonator) de la Figure IV-29. Nous avons alors comparé les résultats de la simulation 3D obtenus grâce à notre outil EMXD et les mesures que nous avons effectuées sur les dispositifs fabriqués par le CEA-LETI.

### V.1 DESCRIPTION DE LA STRUCTURE

La structure du résonateur SMR est représentée sur la Figure IV-29.

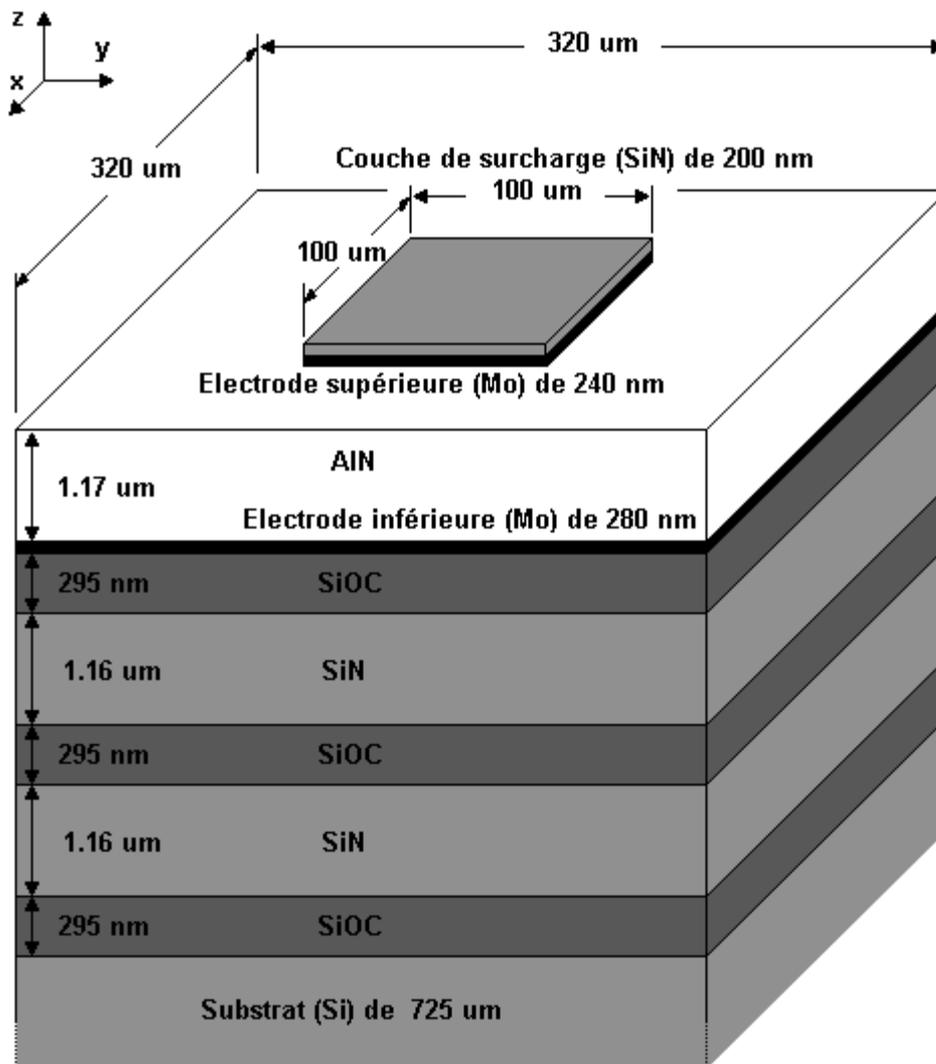
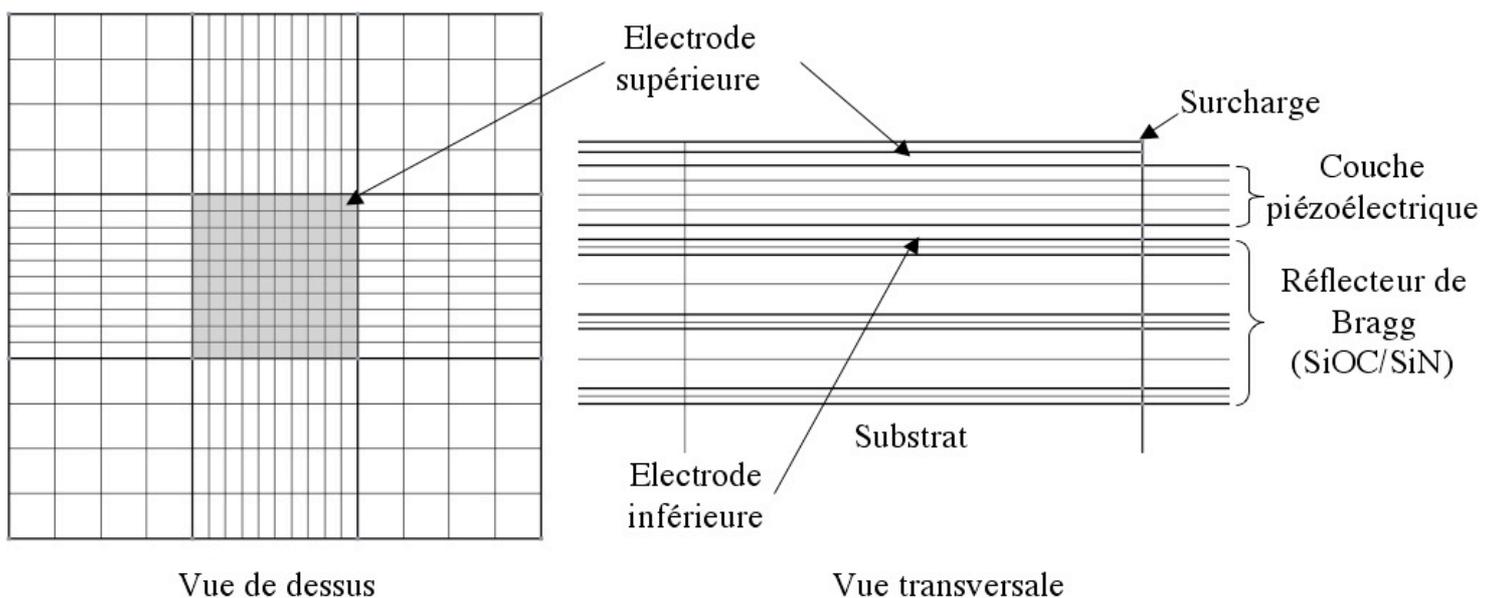


Figure IV-29 : Résonateur SMR

Le **résonateur élémentaire** est composé d'une couche de Nitrure d'Aluminium (AlN) de  $1,17\mu\text{m}$  d'épaisseur, d'une couche de surcharge de Nitrure de Silicium (SiN) de  $200\text{nm}$  et de deux électrodes en Molybdène (Mo) de  $240\text{nm}$  pour l'électrode supérieure et de  $280\text{nm}$  pour l'électrode inférieure. Le **réflecteur de Bragg** est composé d'une alternance de 5 couches de Carbure de Silicium (SiOC) de  $295\text{nm}$  et de Nitrure de Silicium (SiN) de  $1,16\mu\text{m}$ . Enfin, le résonateur élémentaire et le réflecteur de Bragg sont déposés sur un substrat de Silicium (Si) de  $725\mu\text{m}$ . L'électrode supérieure est un carré de  $100\mu\text{m}$  de côté et les autres couches sont des carrés de  $320\mu\text{m}$  de côté.

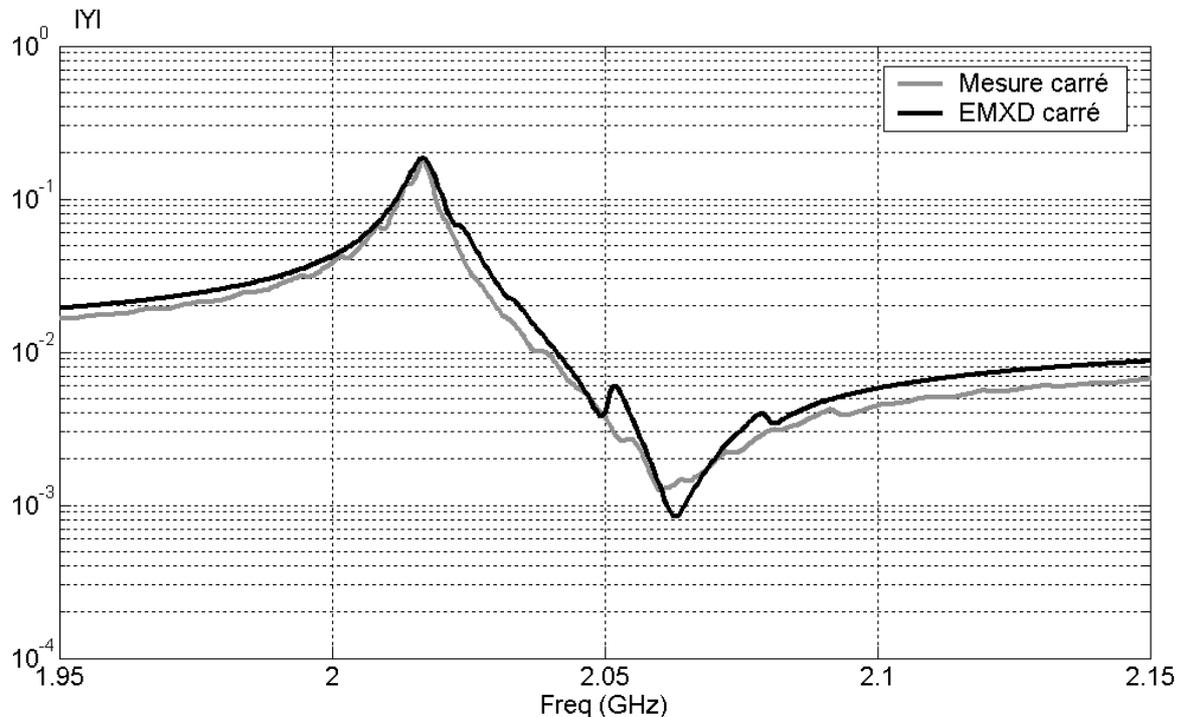
Pour la simulation, nous imposons un déplacement mécanique nul sur les bords de la structure et un potentiel électrique constant sur les électrodes. En considérant les pertes acoustiques dans les couches du réflecteur de Bragg et dans le substrat, l'épaisseur de ce dernier peut être ramenée à  $50\mu\text{m}$ . Le maillage est représenté sur la Figure IV-30. Dans les dimensions latérales, nous avons choisi une maille de  $10\mu\text{m}$  sur l'électrode supérieure et une maille de  $25\mu\text{m}$  dans la partie non métallisée. Suivant l'épaisseur, les électrodes sont maillées grâce à une seule couche d'éléments (éléments d'ordre 2), la couche piézoélectrique et le substrat sont divisés en quatre et chaque couche du réflecteur de Bragg est divisée en deux.



**Figure IV-30 : Maillage du Résonateur SMR simulé**

## V.2 ANALYSE DE LA REPONSE ELECTRIQUE

La simulation et la mesure de la structure SMR de la Figure IV-29, nous fournissent les réponses représentées sur la Figure IV-31.



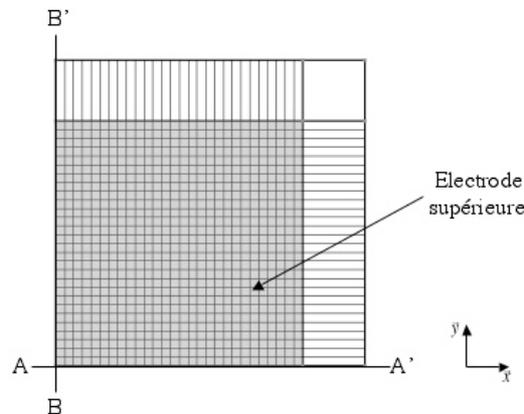
**Figure IV-31 : Réponses électriques du résonateur SMR simulé et mesuré**

Par la simulation, nous retrouvons bien l'allure de la réponse mesurée. Les fréquences de résonances et d'antirésonances étaient, au départ, décalées d'une dizaine de Mégahertz. Nous avons donc effectué une nouvelle simulation en considérant une couche de charge de 205nm au lieu de 200nm, une épaisseur d'électrode supérieure de 245nm (240nm initialement) et une couche piézoélectrique de 1,175 $\mu$ m au lieu de 1,170 $\mu$ m. Cette variation de 5nm, imposé sur seulement 3 couches de l'empilement, rentre dans les tolérances de fabrication que l'on rencontre typiquement pour cette technologie. Les pertes considérées pour la simulation sont ajustées de manière à faire correspondre les niveaux d'impédances.

On remarque que ce résonateur présente des modes parasites peu couplés. En effet, la rigidité élevée de l'électrode supérieure fait que les ondes latérales (ondes de Rayleigh dans le cas du SMR) ont une longueur d'onde très petite devant la largeur de l'électrode. La représentation du déplacement mécanique de ces modes nécessite donc un maillage très fin sur la largeur de l'électrode supérieure.

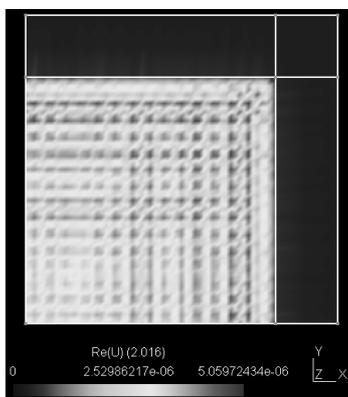
### V.3 VISUALISATION ET ANALYSE DES MODES PARASITES

Pour garder un temps de calcul acceptable, nous n'avons considéré qu'un quart de la structure et imposé des conditions de composante normale nulle du déplacement mécanique sur les plans de symétrie ( $u_y=0$  suivant AA' et  $u_x=0$  suivant BB'). Nous avons aussi réduit les dimensions latérales à  $125\mu\text{m}$  au lieu de  $320\mu\text{m}$ . La taille de la maille sur l'électrode est alors de  $1,75\mu\text{m}$  et de  $10\mu\text{m}$  pour la partie non métallisée. Ce maillage est représenté sur la Figure IV-32. Suivant l'épaisseur, le maillage reste identique à la Figure IV-30.

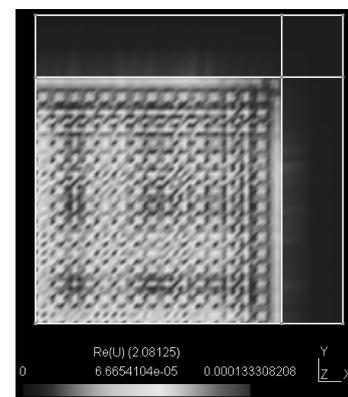


**Figure IV-32 : Maillage du résonateur SMR pour la représentation des modes**

Le tracé du déplacement mécanique montre bien une onde transversale stationnaire dont la longueur d'onde est petite devant la largeur de l'électrode supérieure. Néanmoins, pour certaines fréquences (Figure IV-33), on observe une recombinaison de cette onde et l'apparition d'une onde stationnaire de fréquence plus basse correspondant à un mode  $TE_{1n}$ .



Mode  $TE_{10}$  (2,016GHz)

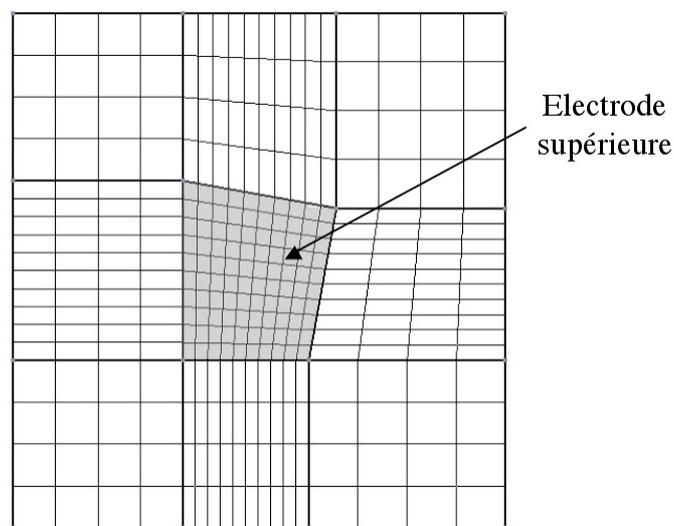


Mode  $TE_{18}$  (2,08125GHz)

**Figure IV-33 : Vue de dessus des modes  $TE_{10}$  et  $TE_{18}$  du résonateur SMR**

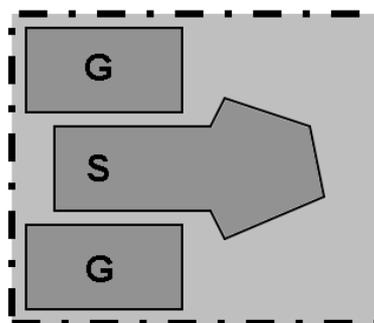
Comme ces modes résultent de la superposition de deux ondes stationnaires, la charge électrique totale sur la surface de l'électrode supérieure est plus faible que pour le résonateur FBAR. Ces modes sont donc moins couplés et déforment peu la réponse électrique.

Toutefois, de manière à améliorer sa pureté spectrale, nous avons appliqué la technique d'apodisation à ce résonateur. Ne connaissant pas la règle utilisée par le CEA-LETI pour la conception de ses résonateurs apodisés, nous avons appliqué la solution de la Figure IV-20 au résonateur de la Figure IV-29. Le maillage latéral de ce résonateur apodisé avec un angle de  $10^\circ$  est représenté sur la Figure IV-34.



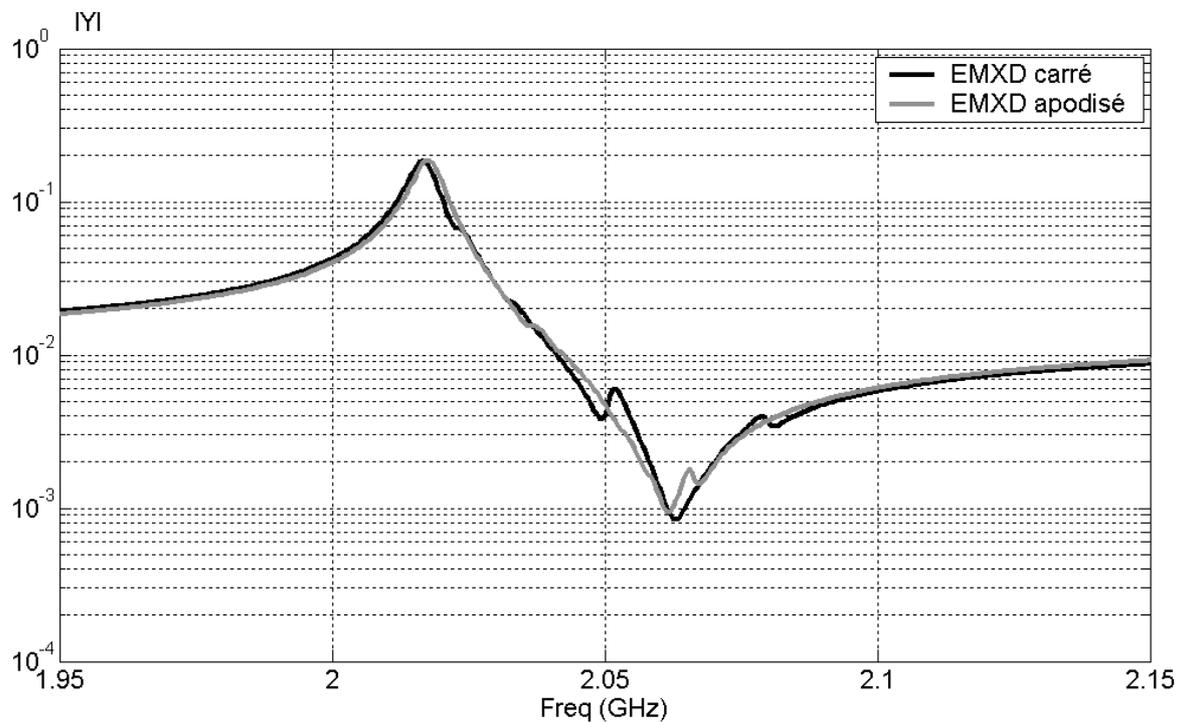
**Figure IV-34 :** Maillage latéral du résonateur SMR apodisé

Le dessin de la structure fabriquée par le CEA-LETI est représenté sur la Figure IV-35. Le résonateur apodisé possède une électrode supérieure asymétrique à six côtés dont les dimensions ne nous ont pas été fournies. Sa surface est de  $10000\mu\text{m}^2$ .



**Figure IV-35 :** Dessin de la structure fournie par le CEA-LETI

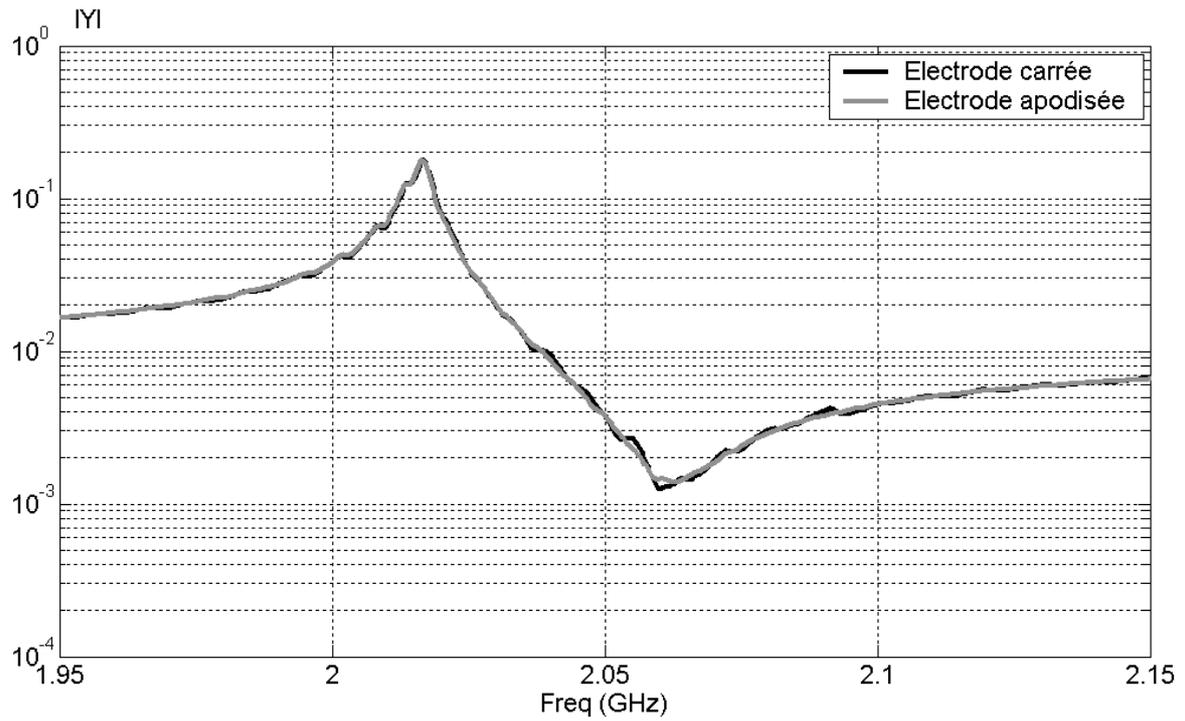
Nous avons tracé sur la Figure IV-36, la réponse électrique simulée de notre résonateur SMR apodisé ( $\alpha=10^\circ$ ).



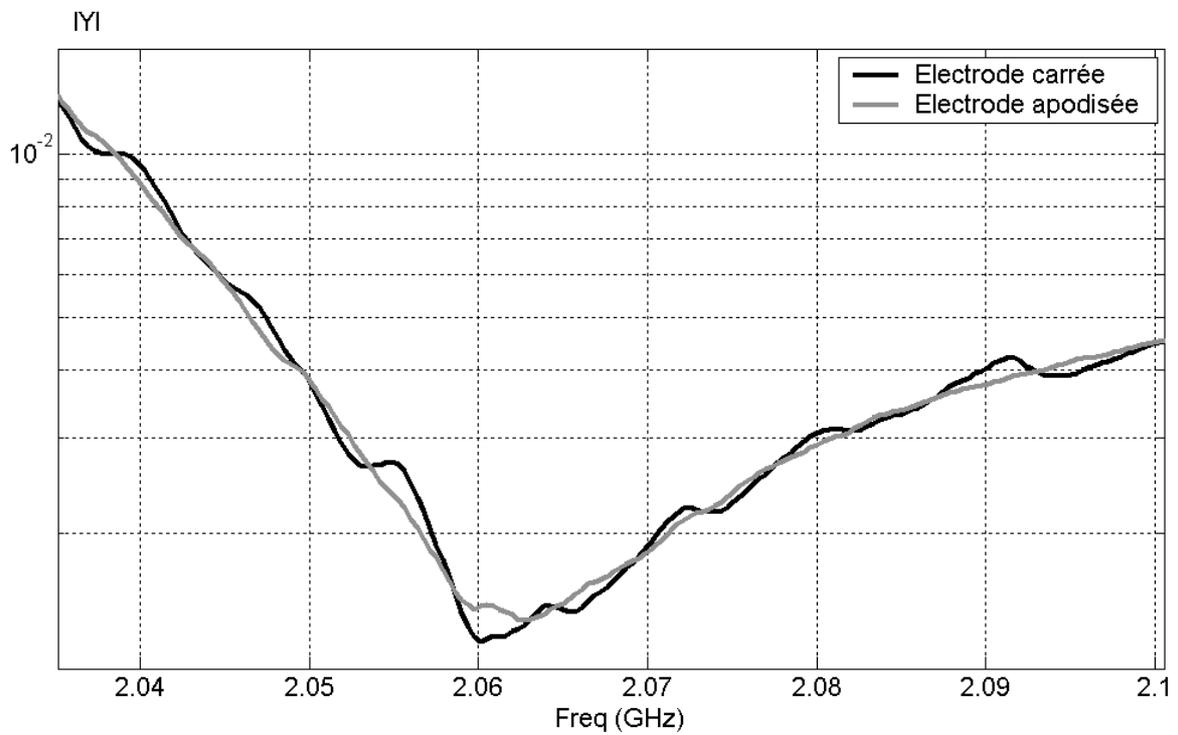
**Figure IV-36 :** Réponses électriques du résonateur SMR carré et apodisé ( $\alpha=10^\circ$ ) simulé

On remarque, sur la Figure IV-36, que la technique d'apodisation permet de réduire le couplage des modes parasites, mais certains restent présents. L'étude de l'angle d'apodisation montre que la pureté spectrale maximum est atteinte pour un angle de  $10^\circ$ . On remarque sur la Figure IV-36, que cet optimum ne permet pas de supprimer tous les modes parasites.

Nous avons tracé sur les Figures IV-37 et IV-38, la réponse électrique mesurée des résonateurs SMR à électrode carrée et apodisée fabriqués par le CEA-LETI. On remarque que tous les modes parasites sont supprimés de la réponse électrique. En conclusion, nous pouvons dire que la règle d'apodisation appliquée par le CEA-LETI est plus efficace, pour cette structure, par rapport à celle que nous avons simulé. Ceci montre aussi que la définition d'une règle d'apodisation est assez complexe à mettre en place. Il n'est pas possible de dire, à priori et quel que soit l'empilement, quelle forme doit avoir l'électrode supérieure pour obtenir un résonateur exempt de modes parasites. Il est donc nécessaire de pouvoir simuler rapidement et précisément les structures BAW, pour prévoir la présence de modes parasites et pour étudier des solutions pour les supprimer. Seul un outil 3D comme EMXD en est capable.



**Figure IV-37 :** Mesures des réponses électriques du résonateur SMR à électrode carrée et apodisée (CEA-LETI)



**Figure IV-38 :** Zoom sur les réponses électriques mesurées du résonateur SMR à électrode carrée et apodisée (CEA-LETI)

## VI CONCLUSION

La méthode des éléments finis est une technique numérique particulièrement bien adaptée pour l'analyse de structures à géométries complexes. Elle permet de considérer des matériaux inhomogènes dont les caractéristiques physiques peuvent dépendre de la fréquence. Ses fondements mathématiques, basés sur une formulation variationnelle du problème, permettent de se placer dans le cas le plus général possible et de trouver une solution du problème qui peut être très irrégulière.

Le développement de notre outil de simulation 3D nous a montré que la formulation variationnelle en champ que nous avons choisi au départ n'était pas adaptée à la résolution du problème piézoélectrique. En effet, le caractère quasi-statique du champ électrique induisait une instabilité numérique dans la résolution. L'implémentation d'une formulation en potentiel électrique et déplacement mécanique nous a permis de palier ce problème. Le choix des éléments finis c'est-à-dire le choix de la forme de la maille et de l'expression des fonctions de base (polynômes de Lagrange) s'est aussi révélé prépondérant. Pour des éléments d'ordre 2, la précision de la solution numérique dépend directement de l'orthogonalité des arêtes au sommets de l'élément. Nous avons mis en évidence que les tétraèdres et pentaèdres d'ordre 2 induisent une anisotropie supplémentaire dans les caractéristiques des matériaux et donc une solution moins précise.

Nous avons ensuite appliqué notre outil de simulation à l'analyse d'un résonateur FBAR. Nous avons pu observer une réponse électrique présentant des singularités entre la fréquence de résonance et d'anti-résonance. Nous avons alors cherché l'origine physique de ces singularités. Le tracé du déplacement mécanique a permis de différencier les singularités correspondant à des modes acoustiques et celles issues de la troncature du domaine d'étude nécessaire pour l'application de la méthode des éléments finis. Ces modes de « calcul » peuvent être évités par l'utilisation de conditions particulières sur les bords du domaine d'étude. Celles-ci sont en cours de développement au LPMO de Besançon. Les modes acoustiques responsables de la détérioration de la réponse électrique sont considérés comme parasites. En effet, ils diminuent considérablement les performances des systèmes RF lorsqu'ils sont utilisés comme référence de fréquence (oscillateur) ou comme élément de base d'un système plus complexe (filtre). Nous avons donc étudié grâce à notre outil de simulation 3D plusieurs solutions pour supprimer l'influence de ces modes sur la réponse électrique.

La première solution fait appel à la technique d'apodisation. Cette dernière consiste à casser les symétries de l'électrode supérieure de manière à éviter les interférences constructives des ondes transverses. Ces dernières, en se recombinaient, sont responsables de l'apparition d'une onde stationnaire. Si la charge électrique totale due à ces modes n'est pas nulle, ils se retrouvent sur la réponse électrique. Il n'existe pas actuellement de règle d'apodisation valable quelle que soit la structure. Il est donc nécessaire d'utiliser un outil de simulation performant capable de simuler des structures asymétriques. C'est le cas de notre outil EMXD.

La deuxième solution consiste à concevoir une forme d'électrode supérieure particulière qui permet d'éviter le couplage des modes parasites. L'ajout d'un anneau d'oxyde ou de métal sur le pourtour de l'électrode supérieure entraîne le résonateur vers un fonctionnement 1D, où le déplacement mécanique est quasi-constant sur toute la surface de la partie active. L'optimisation des dimensions de l'anneau est une procédure assez complexe qui est facilitée par l'emploi de notre logiciel de simulation 3D éléments finis.

La flexibilité de la méthode des éléments finis et la capacité de calcul toujours grandissante des ordinateurs actuels laissent entrevoir un très bel avenir à EMXD. Ce logiciel permet déjà d'analyser n'importe quelle forme d'électrode, quel que soit l'empilement. Il constitue donc un excellent outil pour le développement de solutions innovantes pour la suppression des modes parasites. Il permet aussi de simuler des structures à plusieurs résonateurs. On peut donc imaginer pouvoir tirer parti d'éventuels couplages acoustiques ou électriques entre résonateurs pour synthétiser des réponses de filtre complexes. Enfin, la montée en fréquence nécessitera peut-être un jour l'utilisation de la formulation variationnelle en champ électrique.



# CONCLUSION GENERALE

Ce travail de thèse portait sur l'étude, la conception et la réalisation de résonateurs piézoélectriques pour des applications hautes fréquences. Il s'est articulé autour de trois grandes problématiques :

- Comment **modéliser** fidèlement le comportement d'une structure utilisant un couplage piézoélectrique ?
- De quels **outils** disposons nous ou avons-nous besoin pour résoudre le problème mathématique qui en découle ?
- Quelle **interprétation** physique pouvons-nous faire de la solution ?

Dans le premier chapitre de ce mémoire, nous avons décrit quel intérêt possède un résonateur à ondes acoustiques de volume (BAW) par rapport aux technologies préexistantes. L'état de l'art des résonateurs piézoélectriques montre que la montée en fréquence, le besoin en puissance et la densité d'intégration de plus en plus poussée dans les systèmes de télécommunications portatifs posent certains problèmes aux technologies SAW (Surface Acoustic Wave) et céramique. L'avancée technologique apportée par la maîtrise des techniques de dépôts en couche mince a permis de rendre compétitif la technologie BAW. Ainsi, plusieurs équipementiers du secteur de la téléphonie mobile se sont déjà lancés sur ce marché. La faisabilité de fonctions très complexes, comme une chaîne de réception RF complètement intégrée, a déjà été démontrée [39]. À l'heure actuelle, le besoin se situe au niveau des outils de simulation. Il est nécessaire de disposer d'outils performants et fiables pour aider à la conception de structures complexes basées sur la technologie BAW. Ce travail de thèse a donc été mené dans cet objectif.

Le deuxième chapitre de ce mémoire pose donc la question de la modélisation des problèmes physiques mis en jeu dans les structures BAW. La structure cristalline des matériaux piézoélectriques et notamment les éléments de symétrie permettent d'expliquer l'origine des phénomènes physiques. Leur modélisation mathématique en découle directement. Ainsi, le comportement anisotropique de certains cristaux impose l'emploi de

tenseurs et le couplage électrique-mécanique présent dans les matériaux piézoélectriques se traduit par un terme supplémentaire dans la loi de Hooke. L'écriture mathématique du problème à résoudre et les approximations effectuées sur le comportement physique de la structure sont primordiales pour une simulation fiable.

Le troisième chapitre est consacré à la modélisation unidimensionnelle d'un résonateur BAW. L'approximation d'une propagation en ondes planes longitudinales peut être effectuée sous certaines conditions. Encore une fois, les éléments de symétries de certains cristaux, comme le Nitrure d'Aluminium (AlN) ou l'Oxyde de Zinc (ZnO) de classe 6mm, jouent un rôle prépondérant dans le comportement du résonateur. Les modèles 1D qui en découlent sont très intéressants car ils sont simples à mettre en œuvre, ils permettent d'effectuer des calculs très rapides et peuvent être intégrés à d'autres outils de simulation. Le modèle de Mason est particulièrement bien adapté lorsque l'on cherche à analyser le comportement acoustique d'un résonateur soumis à une excitation électrique. Le modèle de la permittivité piézoélectrique peut être intégré à un outil de simulation électromagnétique 2D pour rendre compte de l'impact du comportement acoustique du résonateur sur sa réponse électrique. Le modèle MBVD modélise directement le comportement électrique du résonateur par des éléments localisés dont les valeurs dépendent des fréquences de résonances et du coefficient de couplage électromécanique. Nous avons utilisé ce modèle pour développer une procédure d'optimisation de filtres à résonateurs BAW. Bien que les modèles 1D soient suffisants pour synthétiser des réponses de filtres, ils ne permettent pas de simuler d'éventuels couplages entre résonateurs. De plus, les dimensions finies des électrodes dans les structures réelles introduisent des conditions que les modèles 1D ne considèrent pas. Nous avons donc choisi de développer notre propre outil de simulation 3D basé sur le logiciel EMXD.

Le quatrième chapitre expose le développement de notre outil de simulation basé sur la méthode des éléments finis. Cette technique permet de résoudre en trois dimensions les problèmes physiques mis en jeu dans les résonateurs BAW sans approximation sur leur comportement physique. Elle est basée sur la notion de maillage de la structure par une forme géométrique simple, sur l'écriture variationnelle (faible) du problème et sur l'approximation interne de son espace de solutions. Cette technique est employée dans la majeure partie des logiciels de calculs scientifiques actuels. Dans un premier temps, nous avons cherché à adapter la formulation variationnelle en champ électrique déjà présente dans EMXD. Nous avons montré qu'elle n'était pas adaptée à l'analyse des résonateurs BAW. Nous avons alors choisi d'implémenter une formulation en déplacement mécanique et en potentiel électrique.

La comparaison de notre outil de simulation avec un logiciel du commerce (ANSYS Multiphysics) nous a permis de valider notre démarche et les résultats obtenus. Néanmoins, la technique de paramétrisation en fréquence et l'utilisation d'un solveur multifrontal ultra parallèle sur le cluster de calcul de l'équipe MINACOM nous permettent d'obtenir des temps de calcul réduits. L'analyse des résonateurs BAW nous a permis de mettre en évidence l'existence de modes parasites, que ce soit à basse fréquence (230MHz) ou à haute fréquence (2GHz) et pour des structures FBAR ou SMR. Le tracé de ces modes nous a permis d'étudier plusieurs solutions pour éviter ou atténuer leurs couplages. La solution mettant en œuvre la technique d'apodisation s'est révélée assez complexe, puisqu'une règle donnée ne permet d'atteindre une pureté spectrale optimale que pour certains empilements. Seule une étude poussée grâce à un outil de simulation 3D peut déterminer son domaine de validité. Notre logiciel éléments finis EMXD en est tout à fait capable.

La continuité de ce travail serait de définir une procédure complète et fiable de conception d'un résonateur BAW, depuis le choix des matériaux, de l'épaisseur des couches jusqu'à la forme des électrodes et du motif d'excitation. Ceci doit être effectué en couplant les outils de simulations 1D et 3D, de manière à optimiser le temps de développement en fonction de l'application visée. Par exemple, pour un filtre à résonateurs SMR, on utiliserait d'abord le modèle de Mason pour définir les épaisseurs des couches du résonateur élémentaire pour satisfaire le cahier des charges en termes de fréquences de résonances et de coefficient de couplage électromécanique. Il permettrait ensuite de concevoir un réflecteur de Bragg dont le coefficient de réflexion sera égal à 1 sur toute la gamme de fréquence du filtre. Une fois l'empilement définit, on effectuerait une étude en 2D pour tracer les courbes de dispersions des modes latéraux. En fonction des résultats, on ajusterait les propriétés de l'empilement de manière à obtenir un confinement de l'énergie sous l'électrode supérieure pour maximiser le coefficient de qualité. On effectuerait enfin une simulation 3D pour déterminer la réponse électrique du résonateur. Si cette dernière présentait des modes parasites, on utiliserait l'outil 3D pour définir une règle d'apodisation en fonction de la taille de l'électrode. On pourrait alors modéliser le résonateur grâce au modèle MBVD et l'introduire dans un logiciel de simulation électromagnétique 2D pour prendre en compte les pertes électriques dans les électrodes et les interconnexions. L'application d'une procédure d'optimisation permettrait d'obtenir la surface de chaque résonateur. On appliquerait alors la règle d'apodisation déterminée précédemment et on dessinerait finalement le masque de fabrication. À plus long terme, on pourrait envisager de n'utiliser que l'outil 3D pour effectuer toutes ces étapes et

ainsi synthétiser des réponses de filtres directement en 3D. Ceci permettrait d'aller encore plus loin, en simulant d'éventuels couplages électriques ou acoustiques entre résonateurs et permettrait d'optimiser le couplage du motif d'excitation.

Au-delà de ce travail, il serait intéressant d'implémenter un calcul statique des structures que l'on pourrait chaîner avec un calcul dynamique pour effectuer des analyses précontraintes. L'application d'une tension électrique statique sur une structure piézoélectrique permet de la polariser et de modifier ses propriétés mécaniques. On pourrait ainsi envisager la simulation et le développement de dispositifs dont les fréquences de fonctionnement varieraient avec la tension de polarisation. Les circuits agiles en fréquences font l'objet, à l'heure actuelle, de nombreux axes de recherches.

# ANNEXE I : CALCUL TENSORIEL

Le but de cette annexe est de rappeler les notions de base du calcul tensoriel utilisées en mécanique des milieux continus. On se place dans l'espace euclidien  $E_3$  et toutes les bases sont supposées orthonormées directes.

Les tenseurs sont des vecteurs de dimension quelconque que l'on classe en plusieurs catégories. Leur notation fait intervenir plusieurs indices en fonction de l'ordre.

- Un tenseur d'**ordre 0** est un **scalaire**. Il est noté  $T$ .
- Un tenseur d'**ordre 1** est un **vecteur**. Il est noté  $T_i$  ou  $\overline{T}$
- Un tenseur d'**ordre 2** est un **vecteur**. Il est noté  $T_{ij}$  ou  $\overline{\overline{T}}$  et on le représente en général par sa matrice.
- Un tenseur d'**ordre 3** est un **cube**. Il est noté  $T_{ijk}$  ou  $\overline{\overline{\overline{T}}}$
- Les tenseurs d'ordre  $n > 3$  ne peuvent être représentés dans l'espace à trois dimensions. Ils utilisent une notation à  $n-1$  indices.

Les opérations que l'on effectue sur les tenseurs sont de deux types : des produits tensoriels ou des contractions entre tenseurs. Elles permettent de construire un tenseur à partir de deux autres tenseurs. Le produit permet de construire un tenseur du même ordre ou d'un ordre supérieur et la contraction, de construire un tenseur d'ordre inférieur ou égal.

- Produit tensoriel :

Le produit tensoriel est noté  $\otimes$ , sauf pour le produit vectoriel noté  $\wedge$ .

- Le produit vectoriel permet de construire un vecteur à l'aide de deux autres vecteurs :

$$\overline{C} = \overline{A} \wedge \overline{B}$$

- Le produit tensoriel de deux vecteurs permet de construire un tenseur d'ordre 2 :

$$\overline{\overline{C}} = \overline{A} \otimes \overline{B} \quad \text{ou} \quad C_{ij} = A_i B_j$$

- Le produit tensoriel d'un tenseur d'ordre 2 et d'un vecteur donne un tenseur d'ordre 3 :

$$\overline{\overline{\overline{C}}} = \overline{\overline{A}} \otimes \overline{B} \quad \text{ou} \quad C_{ijk} = A_{ij} B_k$$

- Contraction tensorielle :

La contraction de deux tenseurs permet de construire un autre tenseur d'ordre inférieur ou égal. Le produit tensoriel contracté une fois est noté  $\bar{\otimes}$  ou avec un point ( . ) et contracté deux fois,  $\equiv$  ou avec deux points ( : ).

- La contraction d'ordre 1 de deux vecteurs ou produit scalaire donne un scalaire:

$$C = \bar{A} \bar{\otimes} \bar{B} = \bar{A} \cdot \bar{B} \quad \text{ou} \quad C = A_i B_i$$

Où l'on utilise la convention d'Einstein de sommation des indices répétés :

$$C = A_i B_i = \sum_{i=1}^3 A_i B_i$$

- La contraction d'ordre 1 d'un tenseur d'ordre 2 avec un vecteur donne un vecteur :

$$\bar{C} = \bar{A} \bar{\otimes} \bar{B} \quad \text{ou} \quad C_i = A_{ij} B_j$$

- La contraction d'ordre 1 d'un tenseur d'ordre 3 avec un vecteur donne un tenseur d'ordre 2 :

$$\bar{C} = \bar{A} \bar{\otimes} \bar{B} \quad \text{ou} \quad C_{ij} = A_{ijk} B_k$$

- La double contraction de deux tenseurs d'ordre 2 donne un scalaire :

$$C = \bar{A} \bar{\otimes} \bar{B} = \bar{A} : \bar{B} \quad \text{ou} \quad C = A_{ij} B_{ji}$$

Où il y a double sommation sur les indices répétés  $i$  et  $j$  :

$$C = A_{ij} B_{ji} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 A_{ij} B_{ji}$$

- La double contraction entre un tenseur d'ordre 4 et un tenseur d'ordre 2 donne un tenseur d'ordre 2 :

$$\bar{C} = \bar{A} \bar{\otimes} \bar{B} \quad \text{ou} \quad C_{ij} = A_{ijkl} B_{kl}$$

- Opérateurs différentiels :

Les opérateurs différentiels sont le gradient, la divergence et le rotationnel. Ils permettent de relier des champs scalaires avec des champs vectoriels ou des champs vectoriels avec des champs tensoriels.

- Relations entre champs scalaires et champs vectoriels :

Le gradient d'une fonction scalaire  $f(x,y,z)$  est le vecteur  $\overrightarrow{grad} f$  de composantes (on note avec une virgule la dérivée partielle d'une fonction de plusieurs variables par rapport à une des variables) :

$$\overrightarrow{grad} f = \begin{pmatrix} f_{,x} = \frac{\partial f}{\partial x} \\ f_{,y} = \frac{\partial f}{\partial y} \\ f_{,z} = \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix}$$

La divergence d'un vecteur  $\vec{v}$  de composantes  $(v_x, v_y, v_z)$  est le scalaire défini par :

$$Div \vec{v} = v_{x,x} + v_{y,y} + v_{z,z} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

L'opérateur  $-Div$  est l'opérateur transposé de l'opérateur gradient. On peut résumer cette propriété à l'aide du schéma suivant :

$$\begin{array}{ccccc} & V & \langle \cdot, \cdot \rangle_2 & W & \\ \overrightarrow{grad} & \uparrow & & \downarrow & -Div \\ & S & \langle \cdot, \cdot \rangle_1 & T & \end{array}$$

Dans ce schéma, les espaces vectoriels  $S$  et  $T$  sont des espaces de fonctions scalaires, et les espaces  $V$  et  $W$  sont des espaces de fonctions vectorielles, en dualité pour une forme bilinéaire notée entre crochets avec un indice. La forme d'indice 1 qui met  $S$  et  $T$  en dualité est le simple produit de deux scalaires. La forme d'indice 2 qui met  $V$  et  $W$  en dualité est le produit scalaire de deux vecteurs (contraction d'ordre 1). Ainsi, on s'aperçoit que l'opérateur gradient agit sur un scalaire de  $S$  pour le transformer en un vecteur de  $V$ . Ce dernier est en dualité avec un vecteur de  $W$  qui peut être transformé en un scalaire de  $T$  par l'opérateur  $-Div$ .

La première formule de Green permet de relier ces deux opérateurs et s'exprime sous la forme suivante :

$$Div(f\vec{v}) = f Div \vec{v} + \vec{v} \cdot \overrightarrow{grad} f$$

- Relations entre champs vectoriels et champs tensoriels :

Par définition, l'opérateur tenseur gradient d'un vecteur  $\vec{v}$  de composantes  $(v_x, v_y, v_z)$  est le tenseur noté  $\overline{\overline{grad \vec{v}}}$  et représenté par sa matrice :

$$\overline{\overline{grad \vec{v}}} = \begin{bmatrix} v_{x,x} & v_{x,y} & v_{x,z} \\ v_{y,x} & v_{y,y} & v_{y,z} \\ v_{z,x} & v_{z,y} & v_{z,z} \end{bmatrix}$$

Définissons maintenant l'opérateur divergence d'un tenseur. Soit  $\overline{\overline{T}}$  un tenseur d'ordre 2 représenté par sa matrice :

$$\overline{\overline{T}} = \begin{bmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{yx} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zx} & T_{zy} & T_{zz} \end{bmatrix}$$

Le vecteur divergence du tenseur  $\overline{\overline{T}}$  est défini par ses trois composantes :

$$\overline{\overline{Div T}} = \begin{bmatrix} T_{xx,x} + T_{xy,y} + T_{xz,z} \\ T_{yx,x} + T_{yy,y} + T_{yz,z} \\ T_{zx,x} + T_{zy,y} + T_{zz,z} \end{bmatrix} = T_{ij,j}$$

On retrouve pour ces deux opérateurs des propriétés analogues aux précédentes. L'opérateur  $\overline{\overline{-Div}}$  est l'opérateur transposé de l'opérateur  $\overline{\overline{grad}}$  et on peut résumer cette propriété à l'aide du schéma suivant :

$$\begin{array}{ccccc} & V & \langle \cdot, \cdot \rangle_2 & W & \\ \overline{\overline{grad}} & \uparrow & & \downarrow & \overline{\overline{-Div}} \\ & S & \langle \cdot, \cdot \rangle_1 & T & \end{array}$$

Cette fois, les espaces vectoriels  $S$  et  $T$  sont des espaces de fonctions vectorielles, et les espaces  $V$  et  $W$  sont des espaces de fonctions tensorielles, en dualité pour une forme bilinéaire notée entre crochets avec un indice. La forme d'indice 1 qui met  $S$  et  $T$  en dualité est le produit scalaire de deux vecteurs. La forme d'indice 2 qui met  $V$  et  $W$  en dualité est le produit doublement contracté de deux tenseurs. Ainsi, on s'aperçoit que l'opérateur gradient agit sur un vecteur de  $S$  pour le transformer en un tenseur de  $V$ . Ce dernier est en dualité avec un tenseur de  $W$  qui peut être transformé en un vecteur de  $T$  par l'opérateur  $\overline{\overline{-Div}}$ .

La seconde formule de Green permet de relier ces deux opérateurs et s'exprime sous la forme suivante :

$$\text{Div}(\vec{v} \cdot \overline{\overline{T}}) = \vec{v} \cdot \overline{\overline{\text{Div} T}} + \overline{\overline{T}} \cdot \text{grad} \vec{v}$$

- Relations entre champs vectoriels :

Par définition, l'opérateur tenseur rotationnel d'un vecteur  $\vec{v}$  de composantes  $(v_x, v_y, v_z)$  est le tenseur noté  $\overline{\overline{\text{rot} \vec{v}}}$  et défini par :

$$\overline{\overline{\text{rot} \vec{v}}} = \overline{\overline{\text{grad} \vec{v}}} - \overline{\overline{\text{grad} \vec{v}}}^T$$

Où  $\overline{\overline{\text{grad} \vec{v}}}^T$  représente le tenseur gradient transposé du vecteur  $\vec{v}$ .

Le tenseur rotationnel est antisymétrique et est représenté par sa matrice :

$$\overline{\overline{\text{rot} \vec{v}}} = \begin{bmatrix} 0 & v_{x,y} - v_{y,x} & v_{x,z} - v_{z,x} \\ v_{y,x} - v_{x,y} & 0 & v_{y,z} - v_{z,y} \\ v_{z,x} - v_{x,z} & v_{z,y} - v_{y,z} & 0 \end{bmatrix}$$

En pratique, on utilise toujours en mécanique la moitié de ce tenseur représentée comme suit :

$$\overline{\overline{\Omega}} = \frac{1}{2} \overline{\overline{\text{rot} \vec{v}}} = \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{xy} & \Omega_{xz} \\ \Omega_{yx} & 0 & \Omega_{yz} \\ \Omega_{zx} & \Omega_{zy} & 0 \end{bmatrix}$$

Dans laquelle on a utilisé les notations :  $\Omega_{ij} = -\Omega_{ji}$  et  $\Omega_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} - v_{j,i})$ .

Au tenseur rotationnel  $\overline{\overline{\Omega}}$ , on associe le vecteur rotationnel  $\vec{\omega} = \overline{\overline{\text{rot} \vec{v}}}$  de composantes  $(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$  telles que :

$$\omega_x = -\Omega_{yz}, \omega_y = -\Omega_{zx} \text{ et } \omega_z = -\Omega_{xy}$$

On admet alors les propriétés suivantes :

$$\overline{\overline{\Omega}} \cdot \vec{x} = \vec{\omega} \wedge \vec{x}, \quad \forall \vec{x}$$

$$\text{Div}(\overline{\overline{\text{rot} \vec{v}}}) = 0 \quad \text{et} \quad \overline{\overline{\text{rot}(\text{grad} f)}} = \vec{0}$$



## ANNEXE II : ELEMENTS FINIS $P_2$ EN DIMENSION $N=1$

Pour simplifier la présentation, nous présentons les éléments finis  $P_2$  en une dimension de l'espace. Nous choisissons le domaine  $\Omega = ]0,1[$ . En dimension 1, un maillage est constitué d'une collection de points  $(x_j)_{0 \leq j \leq n+1}$ , appelés aussi sommets, tels que :

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n < x_{n+1} = 1$$

La méthode des éléments finis  $P_2$  (ensemble des polynômes de degré 2 à coefficients réels d'une variable réelle) repose sur l'espace discret :

$$V_h = \left\{ v \in C([0,1]) \text{ tel que } v|_{[x_j, x_{j+1}]} \in P_2 \text{ pour tout } 0 \leq j \leq n \right\}$$

Et sur son sous-espace

$$V_{0h} = \left\{ v \in V_h \text{ tel que } v(0)=v(1)=0 \right\}$$

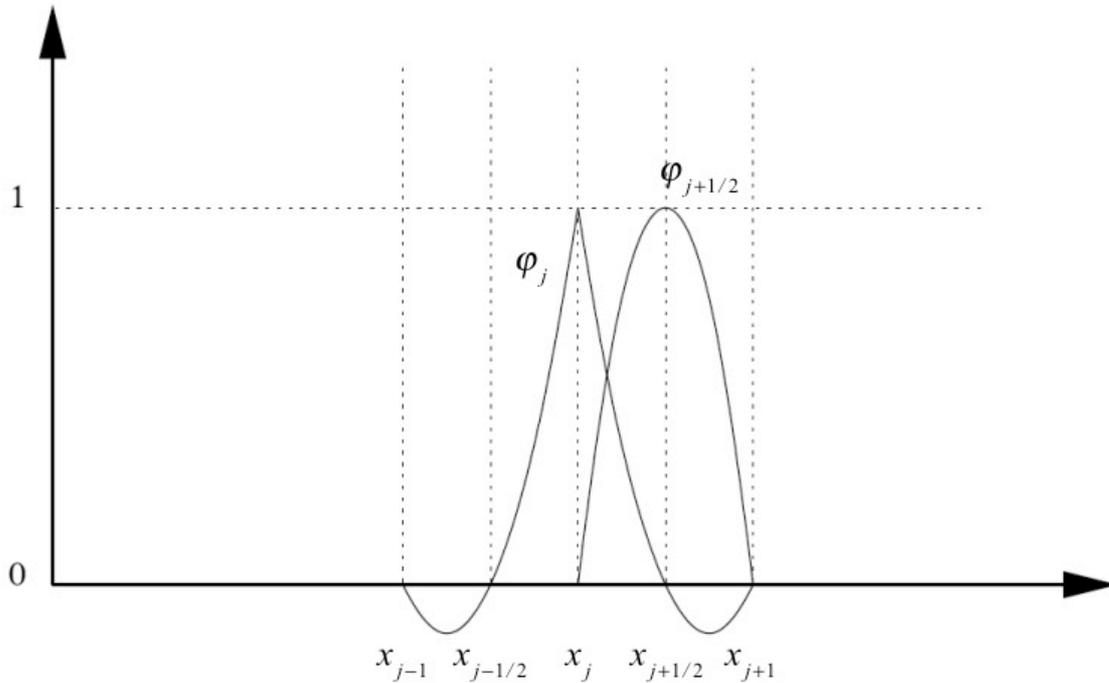
La méthode des éléments finis  $P_2$  est alors la méthode d'approximation interne appliquée aux espaces  $V_h$  et  $V_{0h}$ . Ces espaces, appelés « espaces d'éléments finis  $P_2$  » ou « espaces d'**éléments finis de Lagrange** d'ordre 2 », sont composés de fonctions continues paraboliques par morceaux. On peut les représenter à l'aide de fonctions de base très simples.

Introduisons tout d'abord les points milieux des segments  $[x_j, x_{j+1}]$  définie par :

$$x_{j+1/2} = \frac{1}{2}(x_j + x_{j+1}) \text{ avec } 0 \leq j \leq n$$

On considère aussi deux fonctions mères :

$$\phi(x) = \begin{cases} (1+x)(1+2x) & \text{si } -1 \leq x \leq 0 \\ (1-x)(1-2x) & \text{si } 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{si } |x| > 1 \end{cases} \quad \text{et} \quad \varphi(x) = \begin{cases} 1-4x^2 & \text{si } |x| \leq \frac{1}{2} \\ 0 & \text{si } |x| > \frac{1}{2} \end{cases}$$



**Figure A1-1 : Fonction de base des éléments finis  $P_2$**

On définit alors les fonctions de base  $(\varphi_j)_{0 \leq j \leq n+1}$  et  $(\varphi_{j+1/2})_{0 \leq j \leq n}$  par :

$$\varphi_j(x) = \begin{cases} \phi\left(\frac{x-x_j}{x_j-x_{j-1}}\right) & \text{si } x \leq x_j \\ \phi\left(\frac{x-x_j}{x_{j+1}-x_j}\right) & \text{si } x \geq x_j \end{cases} \quad \text{et} \quad \varphi_{j+1/2}(x) = \phi\left(\frac{x-x_{j+1/2}}{x_{j+1}-x_j}\right)$$

Dans le cas particulier d'un maillage uniforme ( $h$ =taille de maille constante), ces formules se simplifient en :

$$\varphi_j(x) = \phi\left(\frac{x-x_j}{h}\right) \quad \text{et} \quad \varphi_{j+1/2}(x) = \phi\left(\frac{x-x_{j+1/2}}{h}\right)$$

Ces fonctions sont représentées sur la Figure A1-1. On rappelle qu'un élément fini est une forme géométrique munie d'un espace de dimension finie (base engendrée par les fonctions de base).

# BIBLIOGRAPHIE

**[1] P. HOOIJMANS**

« Architecture for mobile RF convergence and future RF transparency »  
RF Design, February 2006, pp. 18-24

**[2] J.F. HELIE**

« Les systèmes nomades ont leur récepteur RF pour la DVB »  
Électronique n°155, Février 2005 ,pp. 46-47

**[3] W. MUELLER**

« A Brief Overview of FBAR Technology »  
Agilent technologies White Paper, July 20, 2001

**[4] R.M. WHITE and F.W. VOLTMER**

« Direct Piezoelectric Coupling to Surface Elastic Waves »  
Applied Physics Letters, Vol. 7, No. 12, 15 Dec 1965, pp. 314-316

**[5] D.M. LI, F. PAN, J.B. NIU and M. LIU**

« Ion Bombardment–Induced High Orientation of Al/Ti Films for Surface Acoustic Wave Device Applications »  
Journal of Electronic Materials, Vol. 34, No. 7, 2005, pp. 1053-1058

**[6] J. KAITILA, M. YLILAMMI, JUHA ELLÄ and R. AIGNER**

« Spurious Resonance Free Bulk Acoustic Wave Resonators »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 2003, pp. 84-87

**[7] K.M. LAKIN**

« Modeling of thin film resonators and filters »  
IEEE MTT-S Digest, 1992, pp. 149-152

- [8] **K.M. LAKIN, G.R. KLINE and K.T. McCARRON**  
« High-Q Microwave Acoustic Resonators and Filters »  
IEEE-Microwave Symposium Digest, Vol. 3, 1993, pp. 1517-1520
- [9] **D. GACHON, et al.**  
« High Overtone Bulk Acoustic Resonators Based on Thinning Single-crystal Piezoelectric Layers »  
EFTF/IEEE Frequency Control Symposium, 2007, pp. 1143-1146
- [10] **K.M. LAKIN, K.T. McCARRON and R.E. ROSE**  
« Solidly Mounted Resonators and Filters »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 1995, pp. 905-908
- [11] **N.-H. HUYNH, et al.**  
« Ultra small PCS Duplexer in Plastic Package using Bulk Acoustic Wave (BAW) Filter Technology »  
EuMW 2004, pp. 393-396
- [12] **K.M. LAKIN, et al.**  
« Bulk Acoustic Wave Resonators And Filters For Applications Above 2 GHz »  
IEEE MTT-S Digest, 2002, pp. 1487-1490
- [13] **R. LANZ AND P. MURALT**  
« Solidly Mounted BAW filters for 8 GHz based on AlN Thin Films »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 2003, pp. 178-181
- [14] **M. FARINA and T. ROZZI**  
« Electromagnetic Modeling of Thin-Film Bulk Acoustic Resonators »  
IEEE MTT Transactions on, Vol. 52, No. 11, November 2004, pp. 2496-2502
- [15] **J.D. LARSON III, S.R. GILBERT and B. XU**  
« PZT Material Properties at UHF and Microwave Frequencies Derived from FBAR Measurements »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 2004, pp. 173-177

**[16] R. LANZ**

« Piezoelectric thin films for bulk acoustic wave resonator applications: from processing to microwave filters »

Thèse de doctorat de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 2004

**[17] J.B. LEE, J.P. JUNG, M.H. LEE, J.S. PARK**

« Effects of bottom electrodes on the orientation of AlN films and the frequency responses of resonators in AlN-based FBARs »

Thin Solid Films, 447-448, 2004, pp. 610-614

**[18] T. YOKOYAMA, et al.**

« New Electrode Material for Low-loss and High-Q FBAR Filters »

IEEE Ultrasonics Symposium, 2004, pp. 429-432

**[19] T. KAMOHARA, M. AKIYAMA, N. UENO, K. NONAKA, H. TATEYAMA**

« Growth of highly c-axis-oriented aluminum nitride thin films on molybdenum electrodes using aluminum nitride interlayers »

Journal of Crystal Growth, 275, 2005, pp. 383-388

**[20] NSM**

(<http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/SiC/index.html>)

**[21] B.A. AULD**

« Acoustic Field and Wavec in Solids »

Vol. I, Wiley-Interscience Publication, 1973

**[22] ONDACORP**

(<http://www.ondacorp.com/tables/Solids.pdf>)

**[23] VIRGINIA SEMICONDUCTOR ([www.virginiasemi.com](http://www.virginiasemi.com))**

« The General Properties of Si, Ge, SiGe, SiO<sub>2</sub> and Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> »

June 2002

- [24] **R.S. NAIK, et al.**  
« Measurements of the bulk, C-axis electromechanical coupling constant as a function of AlN film quality »  
IEEE-UFFC Transactions on, Vol. 47, No. 1, Jan 2000, pp. 292-296
- [25] **J. BJURSTRÖM, et al.**  
« Dependence of the Electromechanical Coupling on the Degree of Orientation of c-textured Thin AlN Films »  
IEEE UFFC Transactions on, Vol. 51, Issue 10, 2004, pp. 1347-1353
- [26] **B.P. OTIS and J.M. RABAEY**  
« A 300 $\mu$ W 1.9GHz CMOS Oscillator Utilizing Micromachined Resonators »  
IEEE J. Solid State Circuits, Vol. 38, No. 7, July 2003, pp. 1271–1274.
- [27] **M. AISSI, et al.**  
« A 5 GHz above-IC FBAR Low Phase Noise Balanced Oscillator »  
IEEE RFIC Symposium, 2006
- [28] **B.P. OTIS, Y.H. CHEE, R. LU, N.M. PLETCHER and J.M. RABAEY**  
« An Ultra-Low Power MEMS-Based Two-Channel Transceiver for Wireless Sensor Networks »  
IEEE VLSI Circuits Symposium Digest, 2004, pp. 20-23
- [29] **D. FELD, K. WANG, P. BRADLEY, A. BARFKNECHT, B. LY and R. RUBY**  
« A High Performance 3.0 mm x 3.0 mm x 1.1 mm FBAR Full Band Tx Filter for U.S. PCS Handsets »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 2002, pp. 913-918
- [30] **ACPF-7001** Agilent Datasheet, 15 May 2002
- [31] **M.A. DUBOIS, C. BILLARD, C. MULLER, G. PARAT and P. VINCENT**  
« Integration of High-Q BAW Resonators and Filters Above IC »  
ISSCC, 2005, pp. 392-393

- [32] **J.F. CARPENTIER, et al.**  
« A SiGe:C BiCMOS WCDMA Zero-IF RF Front-End Using an Above-IC BAW Filter »  
ISSCC, 2005, pp. 394-395
- [33] **K.M. LAKIN, J. BELSICK, J.F. McDONALD and K.T. McCARRON**  
« High Performance Stacked Crystal Filters For GPS »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 2001, pp. 833-838
- [34] **K.M. LAKIN**  
« Thin Film Resonator Technology »  
IEEE UFFC Transactions on, Vol. 52, No. 5, May 2005, pp. 707-716
- [35] **G.G. FATTINGER, J. KAITILA, R. AIGNER and W. NESSLER**  
« Single-to-balanced Filters for Mobile Phones using Coupled Resonator BAW Technology »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 2004, pp. 416-419
- [36] **L. ELBRECHT, R. AIGNER, C.-I. LIN, H.-J. TIMME**  
« Integration of Bulk Acoustic Wave Filters: Concepts and Trends »  
IEEE MTT-S Digest, 2004. pp. 395-398
- [37] **H. SATOH, H. SUZUKI, C. TAKAHASHI, C. NARAHARA and Y. EBATA**  
« A 400Mhz One-Chip Oscillator Using An Air-Gap Type Thin Film Resonator »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 1987, pp. 363-368
- [38] **M. AISSI**  
« Conception de circuits WLAN 5 Ghz à resonateurs BAW-FBAR intégrés : oscillateurs et amplificateurs filtrants »  
Thèse de doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, 2006
- [39] **P. ANCEY**  
« BAW & MEMS above silicon for RF applications »  
RFIC 2005 – Workshop “Advanced technologies for next generation of RFIC”

- [40] **K.A. INGEBRIGTSEN**  
« Surface Waves in Piezoelectrics »  
Journal Of Applied Physics, Vol. 40, No. 7, June 1969, pp. 2681-2686
- [41] **MEM RESEARCH**  
« An EM Simulator for MEMS and Real Life MMICs »  
Microwave Journal, May 2002, Horizon House Publication
- [42] **J. BJURSTRÖM, L. VESTLING, J. OLSSON and I. KATARDJIEV**  
« An accurate direct extraction technique for the MBVD resonator model »  
EuMW 2004, pp. 1241-1244
- [43] **J.D. LARSON III, P.D. BRADLEY, S. WARTENBERG and R.C. RUBY**  
« Modified Butterworth-Van Dyke Circuit for FBAR Resonators and Automated Measurement System »  
IEEE Ultrasonics Symposium, 2000, pp. 863-868
- [44] **H. ALLIK and T.J.R. HUGUES**  
« Finite Element Method for Piezoelectric Vibration »  
International J. for Numerical Methods in Engineering, Vol. 2, 1970, pp. 151-157
- [45] **B. THON, et al.**  
« Coupled Padé Approximation-Finite Element Method Applied to Microwave Device Design »  
IEEE MTT-S IMS Digest , Vol. 3, 2002, pp. 1889-1892
- [46] **T. MAKKONEN, A. HOLAPPA, J. ELLA, and M. M. SALOMAA,**  
« Finite Element Simulations of Thin Film Composite BAW Resonators »  
IEEE UFFC, Vol. 48 , Issue 5, September 2001, pp. 1241 – 1258
- [47] **T MAKKONEN**  
« Numerical simulations of microacoustic resonators and filters »  
Doctoral dissertation of Helsinki University of Technology, 2005