

文章编号: 1001-3806(2016)06-0791-05

GaN基微腔传感器悬空隔膜的力电转换的 ANSYS 研究

朱彦旭¹, 杜志娟¹, 刘飞飞¹, 于宁¹, 王岳华¹, 宋会会¹, 王红航²

(1. 北京工业大学 北京光电子技术实验室, 北京 100124; 2. 电子科技大学 中山学院 电子薄膜与集成器件国家重点实验室, 中山 528400)

摘要: 为了深入研究氮化镓薄膜的压电效应和机械特性, 基于气体直接吸收红外辐射的原理, 将基于氮化镓悬空隔膜的充气微腔红外传感器项目作为背景, 以氮化镓/铝镓氮薄膜作为敏感单元, 在材料力学以及压电效应方面, 采用有限元分析软件 ANSYS 14.0 进行了理论分析和验证, 取得了薄膜形状、厚度和面积等尺寸与压电薄膜输出电压以及薄膜灵敏度的逻辑关系数据, 验证了薄膜力-电信号转换机制可行性。结果表明, GaN 薄膜材料具有良好的压电特性以及线性度, 有助于对探测器输出信号进行准确的预测, 并进行温度补偿, 突出 GaN 材料在应用中的优势。此研究对设计性能好、灵敏度高的微腔红外传感器是有帮助的。

关键词: 薄膜; 输出电压; ANSYS 14.0; 机械应力; 压电效应**中图分类号:** O484.4⁺¹; TP212.1⁺⁴**文献标志码:** A**doi:** 10.7510/jgjs.issn.1001-3806.2016.06.004

ANSYS analysis of force-electric conversion of floating diaphragm for GaN-based micro-cavity sensors

ZHU Yanxu¹, DU Zhijuan¹, LIU Feifei¹, YU Ning¹, WANG Yuehua¹, SONG Huihui¹, WANG Honghang²

(1. Beijing Optoelectronic Technology Laboratory, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China; 2. State Key Laboratory of Electronic Thin Films and Integrated Devices, Zhongshan Institute, University of Electronic Science and Technology of China, Zhongshan 528400, China)

Abstract: In order to figure out piezoelectric effect and mechanical properties of GaN film, a physics-based model was proposed in this study. Based on the theory that gas absorbed infrared directly, micro-cavity infrared sensor with GaN/AlGaIn floating membrane was put as background and AlGaIn/GaN floating membrane was put as sensitive element. After theoretical analysis and experimental verification of materials mechanics and piezoelectric effect by using finite element analysis software ANSYS 14.0, datas of the logical relationship between output voltage, membrane sensitivity and shapes, thickness, area were gotten, and the feasibility of membrane force-electric signal conversion mechanism was verified. The results show that GaN film has good piezoelectric performance and linearity which make a good contribution to forecast the sensor output signal accurately and make temperature compensation. The proposed model is useful to make a theoretical foundation for better design of micro cavity infrared sensor with good performance and high sensitivity.

Key words: thin films; output voltage; ANSYS 14.0; mechanical force; piezoelectric effect

引言

由于氮化镓(GaN)材料禁带宽度大、化学稳定性好、电子饱和速度高、介电常数小、耐高温、耐腐蚀^[1-2]

等优点,具有优良的压电、耐高温特性和广泛的应用前景^[3-5],使其成为高频、高功率电子器件的研究热点^[6],但至今仍然鲜有人用 ANSYS 对 GaN 材料进行系统的模拟分析研究^[3-10]。例如 LIN 等人^[8]用 ANSYS 对压电陶瓷进行了压电分析。LOU 等人^[9]用 ANSYS7.0 分析压电材料锆钛酸铅陶瓷在压电薄膜微传感器中应用。JIANG 等人^[4]以 α 相石英晶片和 PZT-5 压电陶瓷为例,对它们的多次压电效应进行分析及验证。SUO 等人^[10]则对微机械超生波传感器中薄膜的机械特性进行了系统的分析。因此,对 GaN 材料的研究迫在眉睫。

与其它常用压电材料相比,GaN 材料有很多优点,例如与标准的高电子迁移率晶体管(high electron mo-

基金项目:国家科技支撑计划资助项目(2011BAE01B14);北京市15青年拔尖基金资助项目(311000543115501);中山市科技计划资助项目(2014A2FC305);科研基地建设基金资助项目(PXM2014-014204-500008)

作者简介:朱彦旭(1977-),男,博士,副教授,主要研究方向为高亮度半导体发光二极管、激光器、太阳能电池等半导体光电子器件的研制。

E-mail: zhuyx@bjut.edu.cn

收稿日期:2015-10-08;收到修改稿日期:2015-11-26

bility transistor, HEMT) 技术有很好的兼容性; GaN 材料的压电特性、材料参量(如压电系数、弹性常数、介电常数)等不会随着温度或者尺寸的变化而发生变化^[3,11]; 由于 GaN/AlGaIn 有很强的自发极化和压电极化现象,其力-电转换灵敏度比其它材料高一个数量级以上。基于以上优点,部分研究人员对 GaN HEMT 感应机械信号的原理进行了验证^[12-14], 开创性地将 GaN HEMT 场效应管与 GaN/AlGaIn 悬空隔膜结合,制备出高灵敏度 GaN 基新型室温红外微腔传感器,研究探测器的力电转换机制。

关于机械应力对压电薄膜压电极化的影响,国内鲜有报道,针对 GaN 材料力-电转换机制进行有限元模拟分析,为了更好地模拟压电极化产生电压的实际情况,采用有限元法建立 3 维模型,首先对 GaN 薄膜作为力-电转换敏感单元进行理论计算,推导薄膜机械应力分别与压电极化与机械应力的关系,并且分析 GaN 薄膜电压分布的影响因素。然后利用 ANSYS 建立 3 种相同规格薄膜模型,对其机械力学和压电极化进行模拟,改变结构参量并统计模拟结果,得出 GaN 材料具有良好的线性度,确定理论分析和模拟结果的一致性,验证 GaN 材料在应用方面的优越性。

1 基本原理

1.1 ANSYS 压电分析介绍

以 GaN 为核心模拟压电效应、耦合电压分布以实现探测器的信号转换。压电分析实际上是结构-电场耦合场分析^[11], 主要分为两种:顺序耦合和直接耦合分析。直接耦合法仅通过一次求解就能得到耦合场分析结果。由于压电耦合中结构与电场的相互作用是高度非线性的^[15], 所以本文中采用直接耦合法。进行压电耦合的分析单元有 solid5, plane13 和 solid98 单元, 其中 volt 自由度的力标注为 AMPS。由于 solid5 单元具有 8 个节点,每个节点有 6 个自由度,更适合压电薄膜微传感器模型单元划分^[8], 所以采用 solid5 单元进行分析,直接耦合表面电压^[16]。

1.2 GaN 薄膜的理论分析与计算

1.2.1 压电材料压力-应变关系 假设气体处于理想情形,由于气腔尺寸小,气体吸收红外辐射升温导致气腔大小发生的变化可以忽略,由 $pV = nrT$ (p 为压力, V 为体积, n 为物质的量, r 为常数, T 为热力学温度) 推断: $\Delta p = \left(\frac{p_0}{T_0}\right)\Delta T$, 其中, p_0 和 T_0 分别为大气压强和室温,所以当温度升高 1℃ 时,理想估算引起的压强变化约为 333Pa,且压强和温度变化之间为线性关系。

平膜的力-电转换公式^[17]见下式:

$$p = 5.33 \frac{E}{(1-\nu^2)} \frac{h^2 w_0}{R^2 h} + 2.83 \frac{E}{(1-\nu^2)} \frac{h^2 w_0^2}{R^2 h} \quad (1)$$

式中, w_0 为中心形变量, h 为膜厚, E 为弹性模量, ν 为泊松比, R 是膜片半径。可以看出,当 $w_0/h \ll 1$ 时, w_0/h 的一次方项起主要作用,压力形变关系近似为线性关系;当 $w_0/h \gg 1$ 时, w_0/h 的二次方起主要作用,所以压力形变关系为非线性关系。根据本模型的尺寸理论分析,压力形变可近似为线性关系。

机械应力在薄膜厚度方向产生的形变见下式:

$$w = 0.00032 \frac{pa^4}{D} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a}\right) \left(1 - \cos \frac{2\pi y}{a}\right) \quad (2)$$

式中, D 为电位移, a 为边长。最大挠度发生在膜中心处 ($x = y = a/2$), 即方形薄膜中心形变见下式:

$$w_{\max} = 0.00128 \frac{pa^4}{D} \quad (3)$$

薄膜灵敏度为:

$$S = 0.01536 \frac{(1-\nu^2)a^4}{Eh^3} \quad (4)$$

固有频率为:

$$f = \frac{5.7296h}{a^2} \sqrt{\frac{E}{\rho(1-\nu^2)}} \quad (5)$$

式中, ρ 为材料密度。可见,薄膜的灵敏度与边长 a^4 成正比,与厚度成反比;而薄膜振动最低固有频率与边长 a 成反比,与厚度成正比。所以在设计薄膜尺寸时,应该权衡灵敏度以及最低固有频率,保证红外探测器工作稳定。

1.2.2 悬空隔膜有限元模型 以正压电效应^[3]作为研究模型,压电晶体作为压电振子,为了计算方便,根据不同的应用状态和测试条件,选择不同的电学边界条件及机械边界条件,即选用不同的自变量和因变量表述压电方程。分析薄膜的压电效应模型,边界条件为机械自由和电学断路状态,可以确定分析条件为第 1 类压电方程^[3]见下:

$$S_i = S_{E,ij} T_j + d_{ni} E_n \quad (6)$$

$$D_m = d_{mj} T_j + \epsilon_{T,mn} E_n \quad (7)$$

式中,应力 T_j 和电场强度 E_n 作为自变量,应变 S 和电位移 D 为因变量, $S_{E,ij}$ 是恒电场弹性柔顺常数矩阵元, $\epsilon_{T,mn}$ 是恒应力介电常数矩阵元, d_{ni} 是压电应变常数转置矩阵元, d_{mj} 是压电应变常数矩阵元。压电效应在薄膜中通常表示为压电体在机械压力作用下产生电荷。模拟使用仿真结果电势分布取代电位移来表征压电极化。

2 GaN 悬空薄膜的设计

GaN 材料参量如下:密度为 $5320\text{kg}/\text{cm}^3$, 杨氏模量为 $8.55 \times 10^{10}\text{N}/\text{m}^2$, 泊松比为 0.25, 所需压电材料参量见表 1。

Table 1 Material parameters of wurtzite GaN

elastic stiffness coefficient/GPa	piezoelectric constant/ $(\text{C} \cdot \text{m}^{-2})$	permittivity constant
$C_{11} = 390$	$e_{15} = -0.30$	$\epsilon_{11} = 10$
$C_{12} = 145$	$e_{31} = -0.33$	
$C_{13} = 106$	$e_{33} = 0.65$	$\epsilon_{33} = 5.5$
$C_{33} = 398$		

分别建立同一种规格、不同形状的 3 种薄膜,如图 1 所示。A 为半径是 $200\mu\text{m}$ 的圆形薄膜,其厚度为 $2.5\mu\text{m}$;B 为边长 $2a = 400\mu\text{m}$ 的正方形薄膜;C 为短边长 $2a = 400\mu\text{m}$ 、长边长为 $3a = 600\mu\text{m}$ 的矩形薄膜。

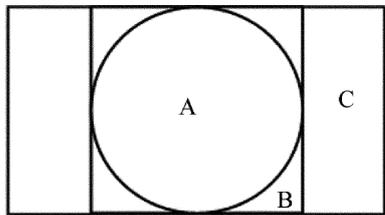


Fig. 1 Three kinds of membrane with basic shapes

根据图 1 建立模型,分析薄膜中心形变量和最大应力分别与机械应力的关系,结果如图 2 所示。由图 2 可以看出,正如理论解析结果,薄膜中心形变量和最大应力分布分别与机械应力之间为正比关系。纵向对比会发现矩形薄膜的斜率最大,对力灵敏度最大。结

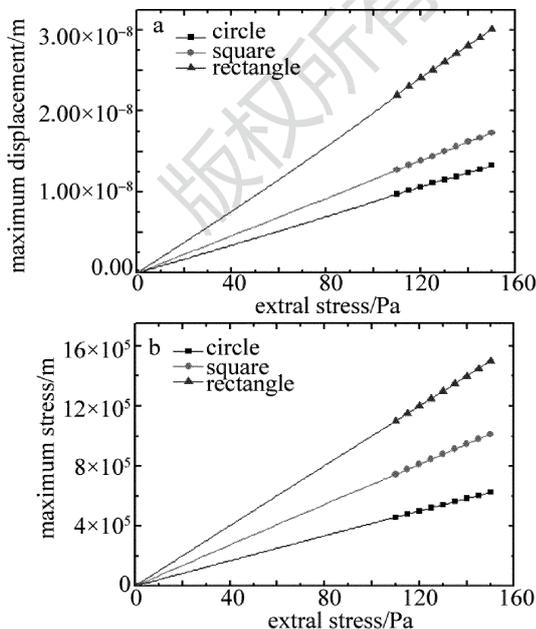


Fig. 2 a—relationship between maximum stress on the membrane and mechanical extral stress b—relationship between maximum displacement and mechanical extral stress

论正如参考文献[11]中所示,对于同种规格薄膜的微传感器,矩形膜片的性能优于圆形膜片。有研究表明^[17],方形膜片在边缘中点处的应力约为圆形的 1.6 倍,而长方形膜片在边缘中点处则约为圆膜片的 2 倍^[18]。故在同样载荷作用下,矩形膜片的灵敏度比圆形膜片的高。

3 压电薄膜传感器的有限元分析

分析步骤如下:(1)首先在 ANSYS 工作界面,定义 GaN 薄膜材料参量(压电常数、弹性常数、介电常数、密度、泊松比),压电分析中因为杨氏模量定义属于各向同性材料参量,而弹性常数矩阵为各向异性材料参量,两者相互矛盾,所以不能同时定义,否则计算结果出错;(2)定义分析类型,由于 solid5 单元更适用于压电薄膜微传感器模型单元划分^[3],因此这里采用 solid5 单元进行压电耦合分析;(3)分别建立同种规格正方形、长方形、圆形薄膜模型;(4)在有限元分析计算时,关键的工作是将模型在求解之前进行网格划分以便于计算:网格划分对于 3 维模型来说有很大的难度,划分不合理严重影响到计算精度,所以模拟是采用扫描式网格划分;扫描划分的单元组成主要是楔形和六面体单元,划分的同时照顾到模型的对称性,得到的单元也有一定的对称性;(5)对 GaN 薄膜施加约束,其物理意义在于:在实际模型中薄膜作为微腔传感器的核心,腔内气体对其施加机械力的同时边界被腔壁固定;(6)因为气体产生的压强在气腔内均匀分布,对薄膜产生的机械应力是均匀分布的,因而对薄膜施加均匀应力,求解;(7)查看其电势分布,以电势分布表示压电极化大小。

作为探测器力-电敏感单元,薄膜在机械应力的作用下,压电极化,在表面产生电势分布,以 GaN 产生的电势以及 AlGaIn 电势分布的不同产生 2 维电子气,作为 HEMT 输入信号由于矩形薄膜对力灵敏度最大,因此以矩形薄膜为例。

对于同种规格模型,压强为 110Pa 时,方形薄膜产生 0.042V 的电势,圆形薄膜产生 0.036V 的电势,矩形薄膜产生 0.057V 的电势,可见矩形薄膜在同种条件下产生的电势最大,同样说明矩形薄膜对力更加敏感。由图 3、图 4 可以观察薄膜的形变,电压以及应力分布云图,与理论推导一致,薄膜最大形变发生在薄膜中心(如图 3a 中深色区域所示),而最大分布应力发生在薄膜边界处(如图 4a 中云图深色区域所示)。由图 4b 中薄膜电势分布与图 3a 形变图进行分析对比可以发现,最大形变处即产生的最大电势处,模拟结果与理论预测是一致的,可将 HEMT 放在电势分布最

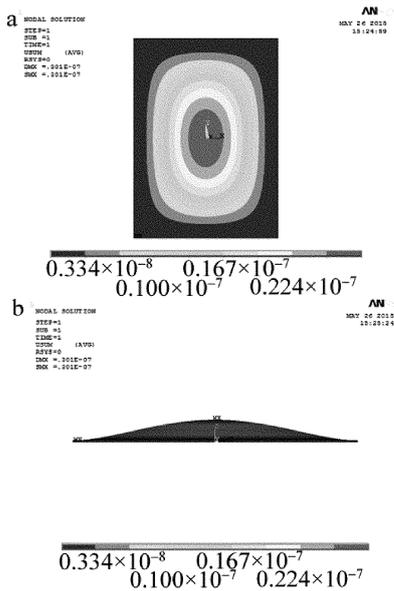


Fig. 3 View of displacement mapping
a—front b—side

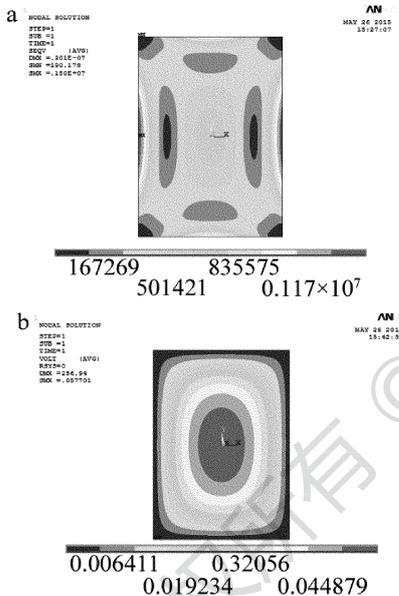


Fig. 4 a—mises stress contour plot of rectangle membrane b—displacement vector sum contour plot of rectangle membrane

大处,与 HEMT 耦合实现力学信号转化为电学信号输出。

为进一步研究外力与产生的电压之间的关系,用 ANSYS 深入模拟分析,可得出结果,见图 5,压电效应

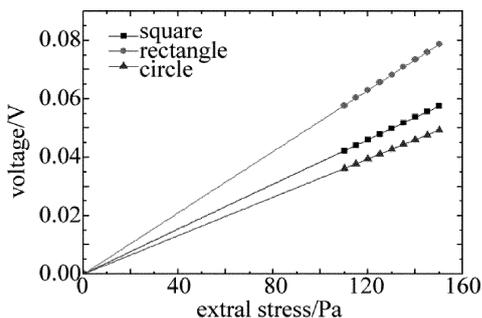


Fig. 5 Relationship between output voltage and external stress with different shapes

中极化方向外力与感生电压存在严格的线性关系,正是这种特性更有利于 GaN 压电薄膜在实际中的应用。

由图 5 中 3 条曲线纵向对比,综合薄膜力学模拟曲线可以知道,在同样规格下矩形薄膜为弹性敏感单元最佳图形且与理论推导一致。为进一步确定薄膜电势分布与薄膜尺寸之间的线性度,用 ANSYS 14.0 做进一步模拟,结果如图 6 所示。

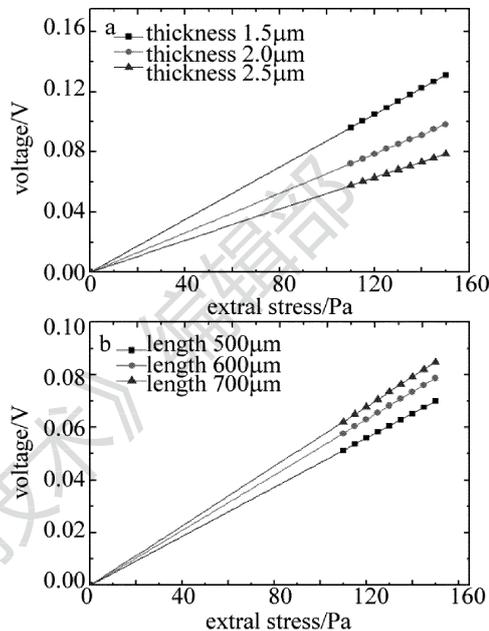


Fig. 6 Relationship between voltage and external stress of rectangle membrane
a—with different thickness b—with different area

从图 6 中分析可知,根据单支曲线看,在不同厚度以及不同面积的薄膜下,电势分布与外部机械应力时间遵守严格的线性增加关系;纵向对比,发现在同样应力条件下,薄膜越薄,面积越大,曲线的斜率越大,即对应力的灵敏度越大。虽然改变薄膜的厚度以及面积均能产生压电效应输出电压,但是根据灵敏度公式(4)式的推导可以发现,改变薄膜的面积产生的变化相对改变薄膜厚度变化率比较大。由此可以说明,想要通过增大薄膜面积以及减小薄膜厚度来提高薄膜对应力的灵敏度时,同样条件下增大薄膜面积对灵敏度的提高贡献更大,并且薄膜厚度减小到一定程度时继续降低的难度很大。但是为了研究薄膜尺寸如长方体薄膜的长边长以及薄膜厚度对电势分布具体影响,为实验工艺设计提供参考依据,进一步模拟的结果见图 7。

综合图 7 所示,薄膜短边长为 $400\mu\text{m}$ 以及厚度固定为 $2.5\mu\text{m}$ 时,薄膜的输出电压与长方形长边长 b 的关系曲线如图 7a 所示;薄膜长边长固定为 $600\mu\text{m}$ 、短边长为 $400\mu\text{m}$ 时输出电压与薄膜厚度之间的关系曲线如图 7b 所示。从模拟结果可以看出,薄膜输出电压随长边长的增加而增加,随薄膜厚度的增大而减小,并且随着厚度和薄膜长边长的增加,曲线斜率逐渐变

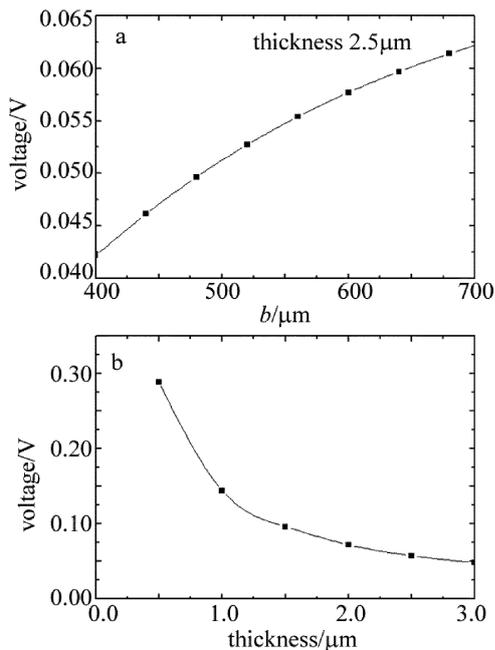


Fig. 7 a—relationship between voltage and length of rectangle membrane
b—relationship between voltage and thickness of rectangle membrane

小,薄膜中心形变量仅与薄膜边长或者半径成正比,因而设计薄膜参量需综合考虑边长和半径对实验结果的影响。

4 结论

对以 GaN 基薄膜为微动元,根据红外探测器的力-电转换机制建立有限元模型进行有限元分析,施加 110Pa 的机械应力情况下,会产生 0.057V 的电压信号输出和 $0.22 \times 10^{-7}m$ 的形变量,最大内部分布应力为 1.5×10^6Pa 。分析了薄膜尺寸对薄膜灵敏度和固有频率影响,需要综合两者选择最优的边长和厚度。研究表明:薄膜最大位移和薄膜内部最大应力分别与施加的机械应力成线性关系,压电效应产生的电压与外加机械应力之间也同样是线性关系。正因为这种良好的线性关系,以及材料特性不会随着温度以及尺寸变化发生明显的变化,可以在不同温度下进行精确的参量补偿,并且对 HEMT 输出电流进行准确预测。所以 GaN 薄膜比其它压电材料有更好的应用前景,有利于其在红外探测器中的应用。通过用 ANSYS 软件对薄膜进行理论分析及模拟,将气体吸收红外线受到的力转化为电信号输出,以 GaN 薄膜的压电效应作为基础输出电压,验证了探测器的将光转化成电信号的机理,为改善探测器的新结构提供新的思路。

参 考 文 献

[1] CHEN S H, DAI Y T, XIAO X, *et al.* Investigation on laser polishing

of GaN film using deep ultraviolet laser[J]. *Laser Technology*, 2012, 36(1):13-16 (in Chinese).

[2] LIU X X, HUANG R, YAO G, *et al.* Numerical simulation of the temperature field of laser butt welding of titanium alloy sheet[J]. *Laser Technology*, 2013, 37(5):700-703 (in Chinese).

[3] SHAO H M, ZHANG S L, XIE S, *et al.* Research of AlGaIn/GaN PIN solar-blind ultraviolet photodetector with back-illumination[J]. *Journal of Optoelectronics · Laser*, 2011, 22(7):984-986 (in Chinese).

[4] JIANG L. The simulation research of theory model of multi-piezoelectric effect on piezoelectric material[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2007:16-22 (in Chinese).

[5] BAI W. Effect of different templates on structure evolution and large strain response under a low electric field in <001>-textured lead-free BNT-based piezoelectric ceramics[J]. *Journal of the European Ceramic Society*, 2015, 35(9):2489-2499.

[6] TAO H F, YANG Z X, SONG Y G, *et al.* The research of laser treatment of GaN thin film[J]. *Laser Technology*, 2005, 29(6):652-656 (in Chinese).

[7] KUROKAWA F, MORI A, TSUJIURA Y, *et al.* Compositional dependence of $Ba(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O_3-(Ba_{0.7}Ca_{0.3})TiO_3$ piezoelectric thin films prepared by combinatorial sputtering[J]. *Thin Solid Films*, 2015, 588:34-38.

[8] LIN L. ANSYS finite element analysis of piezoelectric ceramic materials based on ANSYS[J]. *Science & Technology Information*, 2009, 36:39-40 (in Chinese).

[9] LOU L F, YANG Y T, ZHANG J Q, *et al.* Application of ansys to the piezoelectric analysis of PZT piezoelectric thin film microsensor[J]. *Mechanical Science and Technology*, 2005, 24(7):875-878 (in Chinese).

[10] SUO X D. Simulation and deformation analysis of CMUT diaphragm[D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2013:19-37 (in Chinese).

[11] ZHANG J. On the piezoelectric potential of gallium nitride nanotubes[J]. *Nano Energy*, 2015, 12:322-330.

[12] KANG B S, KIM S, REN F, *et al.* Pressure-induced changes in the conductivity of AlGaIn/GaN high-electron-mobility-transistor membranes[J]. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(14):2962-2964.

[13] KANG B S, KIM J, JANG S, *et al.* Capacitance pressure sensor based on GaN high-electron-mobility transistor-on-Si membrane[J]. *Applied Physics Letters*, 2005, 86(25):253502.

[14] EICKHOFF M, AMBACHER O. Piezoresistivity of $Al_xGa_{1-x}N$ layers and $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ heterostructures[J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 90(7):3383-3386.

[15] MULLER A. GaN membrane metal-semiconductor-metal ultraviolet photodetector[J]. *Applied Optics*, 2008, 47(10):1453-1459.

[16] MIAO J, ZHU R G. The finite element of twin piezoelectric micro cantilever based on ansys[J]. *Piezoelectrics & Acousto-optics*, 2011, 33(4):557-565 (in Chinese).

[17] LI L, SHEN G D, ZOU D S, *et al.* Principle and design of an ir detectors for a novel room temperature MEMS[J]. *Opto-Electronic Engineering*, 2004, 31(2):34-43 (in Chinese).

[18] LI L J. Design and fabrication of micromechanical membrane[J]. *Microfabrication Technology Journal of Electron Devices*, 1999, 22(3):177-181 (in Chinese).