

MA-530-85-1

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

جامعة سعد دحلب البليدة 1

UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA 1



كلية العلوم – دائرة الفيزياء

Faculté des Sciences

Département de Physique

MEMOIRE DE PROJET DE FIN D'ETUDES POUR L'OBTENTION DU
DIPLOME DE :

MASTER EN PHYSIQUE

Option : Physique Appliquée aux Microsystèmes

THÈME :

Suppression par Cristaux Phononiques (PnC) des Modes d'Ondes
Acoustiques Parasites dans les Structures à Onde de Substrat «BAW»

Présenté par :

DAHMANI Mohamed

&

MOKHTARI Hassina

Le jury est composé de :

A. AMRANE

A. HASSEIN-BEY

R. SERHANE

MAA, Université Blida 1

MCB, Université Blida 1

MRB, C.D.T.A., Alger

Président

Examinateur

Promoteur

Promotion : 2015 /2016

ملخص

في هذا العمل، تمت دراسة خواص عاكسات براج (Bragg) (شريط التردد الممنوع) قصد استعمالها في هيكل هزاز الموجات الميكانيكية (BAW) ذات الترددات العالية (HF)، بغرض إيقاف الموجات المستقرة الجانبية (TE1)، التي تنشأ على الاستجابة الكهروميكانيكية للهاز (BAW). عاكسات براج هي بنية دورية قمنا بتثبيتها على القطب العلوي للهاز (BAW). الدراسة تمت بواسطة المحاكاة المعتمد على طريقة العناصر المحدودة (FEM) بواسطة البرنامج (Multiphysics) (Comsol)

نتائج المحاكاة بينت أن سبب ظهور شريط التردد الممنوع هو وجود هياكل دورية على القطب العلوي للهاز (BAW) ويمكن تعديل هذا الشريط من خلال تغيير الأبعاد الهندسية للشبكة الدورية، حيث أن طول الدور $12.68 \mu\text{m}$ ، ارتفاع الدور $0,1 \mu\text{m}$ ، المسافة بين الهياكل الدورية $w=p/2$ لإيقاف انتشار الموجات الجانبية. فعالية عاكسات براج ظهرت في الإجابة الكهربائية للهاز (BAW)، حيث قامت بإلغاء الإصداء المشوشة.

الكلمات الدلالية: هزاز (BAW)، عاكسات براج، الكهروضغطية، موجة Lamb، المحاكاة (FEM).

Résumé

Dans ce travail, les propriétés des réflecteurs de Bragg (bande interdite fréquentielle) ont été étudiées pour les applications de résonateur à onde acoustique de volume (BAW) a hautes fréquences afin d'interdire la propagation latérale du mode de Lamb parasite TE_1 . Les réflecteurs de Bragg sont sous la forme de structure périodique sont déposés sur l'électrode supérieure du résonateur. L'étude est faite par simulation de la Méthode des Eléments Finis Comsol Multiphysiques.

Les résultats montrent la caractérisation d'une bande interdite fréquentielle par l'ajout des réflecteurs de Bragg. Cette bande interdite peut être réajustée en jouant sur les paramètres géométriques du réseau. A condition que la période de réseau et la hauteur sont réglées respectivement à $12.68 \mu\text{m}$, et $0.1 \mu\text{m}$, la distance entre les structures périodiques est $w=p/2$ afin d'éliminer les ondes acoustiques latérales parasites. La réponse du résonateur est ainsi améliorée en supprimant les parasites due à la propagation des ondes transversales le long de la structure, cette amélioration est jugée sur la base de la diminution de l'énergie dissipée à la fréquence de résonance et à l'antirésonance simultanément

Mots clés : FBAR, Réflecteur de Bragg, Piézoélectricité, Onde de Lamb, Simulation MEF.

Abstract

In this work, Bragg reflectors properties (frequency band gap) were studied for the acoustic wave resonator applications (BAW) working in high frequency. In order to prevent the lateral propagation of the parasite Lamb mode TE_1 . The Bragg reflectors are periodic structures which are deposited on the upper electrode of the resonator. The study is performed by the Finite Element Method simulation using Comsol Multiphysics.

The results show the appearance of a frequency band gap by adding Bragg reflectors. This band gap can be adjusted by varying the geometric parameters of the reflectors, provided that the grating period and height are respectively set to $12.6 \mu\text{m}$ and $0.1 \mu\text{m}$, and the distance between the periodic structures is set to $w=p/2$. These choice permits to remove all lateral parasitic modes. The electrical response (the amplitude of the electrical admittance of the FBAR resonator) confirms the elimination of the parasitic resonances.

Keywords: FBAR, Bragg reflector, Piezoelectricity, Lamb wave, FEM simulation.

Remerciements

Avant de présenter notre travail, nous tenons à exprimer toute notre gratitude et notre reconnaissance envers Dieu et puis à nos Parents respectifs, qui ont mis tous leurs moyens pour qu'on puisse aujourd'hui arriver à cette étape dans nos études. Et aussi pour tout le soutien matériel et moral qu'ils nous ont apporté depuis toujours. C'est grâce à eux que nous en sommes là aujourd'hui.

Nous adressons nos sincères remerciements notre promoteur Dr. Rafik Serhane, Maître de recherche au sein de l'équipe MEMS & Sensors au CDTA Baba Hassene Alger, qui nous a dirigé tout au long de ce travail, ainsi que les éléments de l'équipe MEMS & Sensors de la division microélectronique et nanoélectronique DMN du CDTA. Nos vifs remerciements vont aussi à l'équipe de Physique Appliquées aux MEMS et NEMS sous la direction du Dr. Abdelkader Hassein-Bey du laboratoire FUNDAPL au niveau de l'USDB1.

Un grand remerciement est adressé également à toute l'équipe pédagogique du département de Physique de la Faculté des Sciences de L'USDB 1 Blida. Plus particulièrement au responsable de la formation Master de Physique Appliquée aux microsystemes Dr. Abdelkader Hassein-Bey pour la formation de qualité qui nous a assuré.

Nous remercions vont également à tous ceux qui ont, à un moment ou à un autre, de près ou de loin, participé à ce travail.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE.....	8
CHAPITRE (I) :	
GENERALITES ET ETAT DE L'ART SUR LA PIEZOELECTRICITE, LES RESONATEURS PIEZOELECTRIQUES ET LES CRISTAUX PHONONIQUES	10
Introduction	11
I. La Piézo-électricité.....	11
I.1. Historique.....	11
I.2. Définition	11
I.3. Symétrie cristalline et piézoélectricité.....	12
I.4. Domaines d'application de l'effet piézoélectrique.....	13
I.5. Les matériaux piézoélectriques	14
I.5.1. Les polymères piézoélectriques.....	14
I.5.2. Les céramiques piézoélectriques	14
I.5.3. Les cristaux piézoélectriques.....	15
I.6. L'oxyde de Zinc «ZnO».....	15
I.6.1. Structure cristalline du ZnO	16
I.6.2. Origine de la piézoélectricité dans le ZnO.....	17
I.7. Les Résonateurs Piézoélectriques.....	20
I.7.1. Les filtres et les résonateurs à ondes acoustiques de surface (SAW).....	20
I.7.2. Les filtres et les résonateurs à ondes acoustiques de volume (BAW).....	20
I.7.3. Principe de fonctionnement des BAWs.....	20
I.7.4. La technologie BAW à membrane isolée (FBAR).....	21
I.7.4.1.1. FBAR à membrane suspendue par micro-usinage de la face arrière.....	21
I.7.4.1.2. FBAR à gap d'air (AGR).....	21
I.7.4.2. La technologie BAW à réflecteurs de Bragg (SMR)	22
I.7.4.3. La technologie BAW à cavité résonante (HBAR)	22
I.8. Les Cristaux Phononiques	23
I.8.1. Historique.....	23
I.8.2. Les milieux périodiques	24
I.8.3. Ondes acoustiques.....	26
I.8.3.1. Ondes dans les milieux périodiques.....	29
I.8.4. Cristaux Phononiques.....	30
I.8.4.1. Structures de bande et bande interdite phononique.....	30
Conclusion.....	32
CHAPITRE (II) :	
PROCEDURE DE SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS D'UN RESONATEUR 'FBAR' BIDIMENSIONNEL.....	34
Introduction	35
II. Description du Logiciel Comsol Multi-physiques.....	35
II.1. Définition du logiciel	35
II.2. La Méthode des Eléments Finis	35
II.3. Modélisation par choix de la physique.....	36
II.4. Simulation 2D d'un FBAR (Étude harmonique).....	37
II.4.1. Procédure de simulation du FBAR par Comsol.....	37
II.4.1.1. Choix de la dimension de l'espace de simulation	38
II.4.1.2. Choix de la physique.....	38
II.4.1.3. Paramètres géométriques du modèle.....	38
II.4.1.4. La Géométrie de la Structure de FBAR.....	39
II.4.1.5. Définition du PML "Perfectly Matched Layer".....	40
II.4.1.6. Matériaux constituant la structure	40

i) Le Molybdène (Mo)	41
ii) L'oxyde de Zinc (ZnO).....	41
II.4.1.7. Les Conditions aux limites	42
II.4.1.7.1. Matériaux piézoélectrique	42
II.4.1.7.2. Matériau linéaire élastique	43
II.4.1.7.3. Conditions aux limites électriques (<i>Ground, Terminal</i>)	44
II.4.1.7.4. Conditions aux limites mécaniques (<i>Fixed Constraint</i>).....	45
II.4.1.8. Maillage de la structure.....	45
II.4.1.9. Délimitation de l'intervalle fréquentiel de l'étude	46
II.5. Traitement des résultats	46
II.5.1. La réponse électrique de résonateur FBAR	47
II.5.1.1. Définition de l'admittance électrique.....	47
II.5.1.2. Admittance électrique du résonateur FBAR.....	47
II.5.2. Facteur de qualité de résonateur FBAR.....	48
II.5.3. La réponse mécanique.....	50
Conclusion.....	51
CHAPITRE (III) :	
ETUDE DE LA REPOSE ELECTROMECHANIQUE DU RESONATEUR "FBAR" EN ABSENCE ET EN PRESENCE DES CRISTAUX PHONONIQUES.....	53
Introduction	54
III. Définition de l'onde de Lamb.....	54
III.1. Les modes de Lamb dans une structure FBAR	54
III.3. Influence de la longueur de la structure sur les modes parasites et sur le coefficient de couplage électromécanique.....	59
III.4. Effet de l'épaisseur des électrodes sur la réponse électrique	60
III.5. La réponse mécanique du résonateur FBAR.....	61
III.6. Les modes de vibration mécanique aux fréquences remarquables	61
III.6.1. Le déplacement mécanique uz	63
III.7. La courbe de dispersion	65
III.8. La structure FBAR avec les réflecteurs de Bragg	67
III.9.1. Optimisation de la période p	67
III.10. L'effet du réseau phononique sur la réponse mécanique	69
III.11. La courbe de dispersion sous de la structure avec réflecteurs de Bragg	71
III.11.1. La phase de l'admittance électrique.....	73
III.11.2. La diminution de la dissipation énergétique totale par les CPs	74
III.11.3. Amélioration de facteur de qualité par les PnC.....	75
III.12. Etude Modale de la structure FBAR bidimensionnelle	76
III.12.1. Géométrie.....	77
III.12.2. Conditions aux limites.....	77
III.12.3. Courbes de dispersion.....	78
III.12.3. Structure FBAR avec réflecteurs de Bragg.....	79
III.12.4. Courbe de dispersion de la structure avec réflecteurs de Bragg.....	79
Conclusion.....	80
CONCLUSION GENERALE EST PERSPECTIVE:.....	81
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	83
ANNEXE (A).....	87
ANNEXE (B).....	90
ANNEXE (C).....	92
ANNEXE (D).....	93

INTRODUCTION GENERALE

Les applications basées sur les technologies micro-électroniques sur silicium sont devenues nombreuses : téléphonie mobile, micro-ordinateurs, biologie, télécommunication, spatial et médical...etc. Les systèmes micro-électro-mécaniques (MEMS) ont permis l'intégration des parties mécaniques pour réaliser des fonctions de capteurs et d'actionneurs sur une même puce avec l'électronique.

Les premières réalisations technologiques des actionneurs par exemple utilisent l'effet électrostatique ou thermique, et les premiers capteurs sont de type capacitif. Ces types d'actionneurs sont massivement utilisés, mais présentent des limitations. Beaucoup d'études portent sur l'utilisation d'autres matériaux actifs, tels que les matériaux piézoélectriques qui sont très promoteurs du fait de la réciprocité de l'effet piézoélectrique qu'ils présentent.

Les résonateurs piézoélectriques à onde acoustique de volume pour les applications de la télécommunication nécessitent une augmentation de la fréquence de travail, ceci à une relation directe avec la miniaturisation des dimensions du résonateur, plus précisément, l'épaisseur du matériau piézoélectrique. Typiquement, pour une fréquence d'antirésonance d'un résonateur de 1.637 GHz, l'épaisseur de l'élément piézoélectrique est de 1.52 μm . Les technologies de filtrages des signaux radio fréquences RF en télécommunication utilisent les résonateurs à ondes acoustiques de volume BAW (pour *Bulk Acoustic Wave*) et à ondes de surface SAW (pour *Surface Acoustic Wave*). Les matériaux piézoélectriques qui ont suscité l'intérêt de plusieurs recherches ces dix dernières années sont : le PZT, l'AlN et le ZnO.

L'un des problèmes majeurs que rencontrent les technologies BAW est l'apparition des modes parasites sur la réponse électrique, ceci est dû à l'établissement d'ondes acoustiques stationnaires latérales à cause de l'encastrement de la structure à leurs périphéries. Ces modes parasites vont s'ajouter au mode d'excitation principal (Mode épaisseur) pour contribuer à la dégradation des performances électriques des résonateurs.

Dans ce mémoire, nous allons présenter l'utilisation des réflecteurs de Bragg (réseau périodique placé sur l'électrode supérieure de la structure FBAR dit aussi : *crystal phononique*) afin d'interdire la propagation du mode de Lamb TE_1 considéré comme un parasite. L'étude présentée ici est effectuée par la «méthode des éléments finis» (FEM, pour ; *Finite Element Method*) en utilisant le logiciel Comsol

Multiphysics (Version 4.3), en se basant sur la résolution numérique des équations différentielles décrivant les phénomènes électriques et mécaniques se manifestant dans la structure FBAR. La structure est une plaque de ZnO prise en *sandwich* entre deux électrodes en Molybdène. Pour déduire les réponses électrique et mécanique de la structure FBAR, nous effectuons une étude harmonique, nous étudierons la réponse électromécanique du résonateur FBAR en absence et en présence des cristaux phononiques.

Dans le chapitre (I), nous présentons l'état de l'art sur le phénomène de la piézoélectricité, les résonateurs piézoélectriques et les cristaux phononiques. Nous montrons aussi des généralités sur les matériaux piézoélectriques, plus particulièrement sur l'oxyde de zinc (ZnO). Nous exposons les différentes architectures de résonateurs BAWs, à savoir : FBAR, SMR et HBAR.

Le chapitre (II) est réservé à la procédure et aux étapes de simulation du composant FBAR. Nous présentons la simulation de la réponse électromécanique du résonateur en 2D par éléments finis. Nous effectuons une étude harmonique de la structure en déterminant la réponse électrique et la réponse mécanique, ainsi que le facteur de qualité du résonateur FBAR.

Dans le chapitre (III), nous présentons la simulation numérique du résonateur piézoélectrique BAW dans son approximation bidimensionnelle et l'utilisation des structures périodiques, sous forme des réflecteurs de Bragg, sur l'électrode supérieure du FBAR pour interdire la propagation du mode de Lamb TE_1 . Le travail vise à montrer que les résonances parasites peuvent être éliminées par les réflecteurs de Bragg. Cette périodicité est choisie de telle sorte que la bande fréquentielle interdite créée par ces réflecteurs coïncide avec la gamme de fréquence d'apparition des modes de Lamb parasites.

CHAPITRE (I) :

**GENERALITES ET ETAT DE L'ART SUR LA
PIEZOELECTRICITE, LES RESONATEURS
PIEZOELECTRIQUES ET LES CRISTAUX
PHONONIQUES**

Introduction

Afin de comprendre et trouver une solution à la problématique posée dans ce mémoire, nous procéderons à la définition de trois concepts principaux (les matériaux piézoélectrique (PZE), les résonateur à onde acoustique de volume (BAW), et les cristaux phononiques (CP)). Le sujet traité est l'interconnexion de ces trois fondamentaux.

Le premier étant le matériau PZE, qui regroupe un ensemble de propriétés très intéressantes, ce dernier est le matériaux essentiel dans ce sujet . On présentera par la suite des informations sur les BAW, si l'élément qui pose le problème, la réponse électromécanique des BAW fera l'objectif d'étude. Nous présentons aussi quelques notions touchant les cristaux phononique (CP), qui représente la clé essentielle pour la résolution de la problématique.

I. La Piézo-électricité

I.1. Historique

La piézoélectricité est la capacité de certains matériaux (cristaux, céramiques, polymères ou composites) de pouvoir transformer une partie de l'énergie mécanique en une énergie électrique et vice-versa [1]. La Piézoélectricité a été observée pour la première fois par l'Abbé René Just Haüy en 1817, mais sa découverte a été attribuée à Pierre et Jacques Curie, qui ont été les premiers à l'étudier en 1880. La première application industrielle est apparue en 1916-1917 avec le transducteur piézoélectrique réalisé par Paul Langevin [1].

I.2. Définition

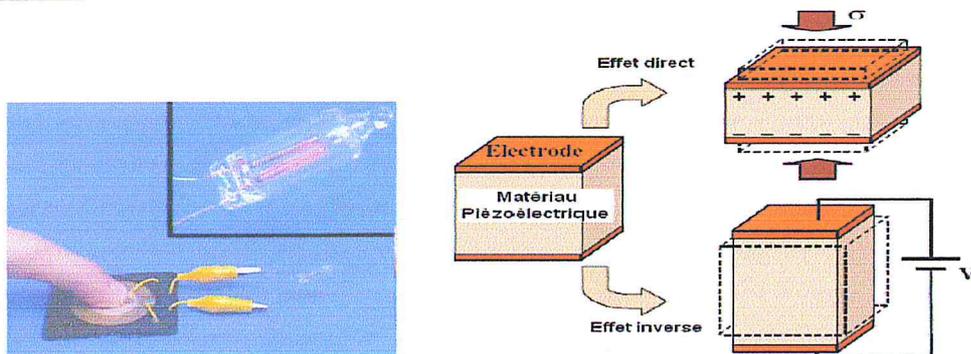


Figure (I.1) : L'effet Piézoélectrique direct et inverse dans un matériau piézoélectrique [1].

On distingue deux effets piézoélectriques, l'effet direct et l'effet inverse. L'effet direct se traduit par l'apparition d'un champ électrique lorsque le matériau est soumis à une contrainte mécanique externe [1]. L'effet inverse correspond à l'apparition d'une déformation mécanique du matériau lorsqu'on le soumet à un champ électrique externe. Ces phénomènes sont illustrés dans la figure (I.1).

I.3. Symétrie cristalline et piézoélectricité

L'origine de l'effet piézoélectrique est liée à la structure et la symétrie cristallines des matériaux. A l'échelle de la maille cristalline, la piézoélectricité se manifeste par l'apparition d'une polarisation électrique dans la maille cristalline, résultant de la séparation des centres de gravité des charges positives et négatives. Pour qu'un cristal soit piézoélectrique, il doit être non centro-symétrique, c'est-à-dire que les barycentres des charges positives et négatives ne coïncident pas dans la maille (Figure (I.2)) [1] sus l'application de la contrainte mécanique.

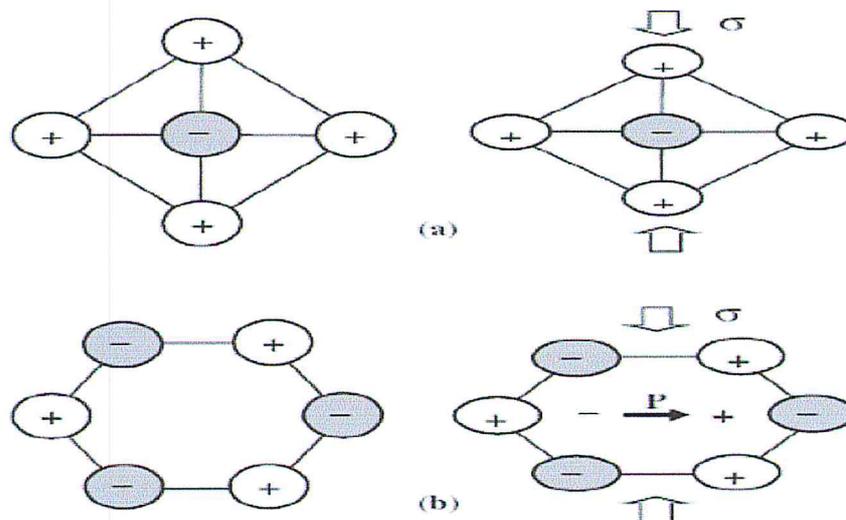


Figure (I.2) : Origine de la piézoélectricité, (a) Corps centro-symétrique (Non piézoélectrique) et (b) Corps non centro-symétrique (Piézoélectrique) [1].

Sur les 32 classes de symétrie cristallines qui existent dans la nature, (Figure (I.3)), 21 classes sont dépourvues de centre de symétrie. Parmi celles-ci, 20 sont piézoélectriques, dans ces 20 classes, 10 présentent une polarisation spontanée en l'absence du champ électrique externe, elles possèdent une polarisation naturelle selon au moins une direction; elles sont dites piézoélectriques ou polaires [1]. En fin, les cristaux ferroélectriques forment un sous-groupe des matériaux piézoélectriques, ils ont

la particularité de se polariser selon deux axes ou plus. Chaque direction étant équiprobable.

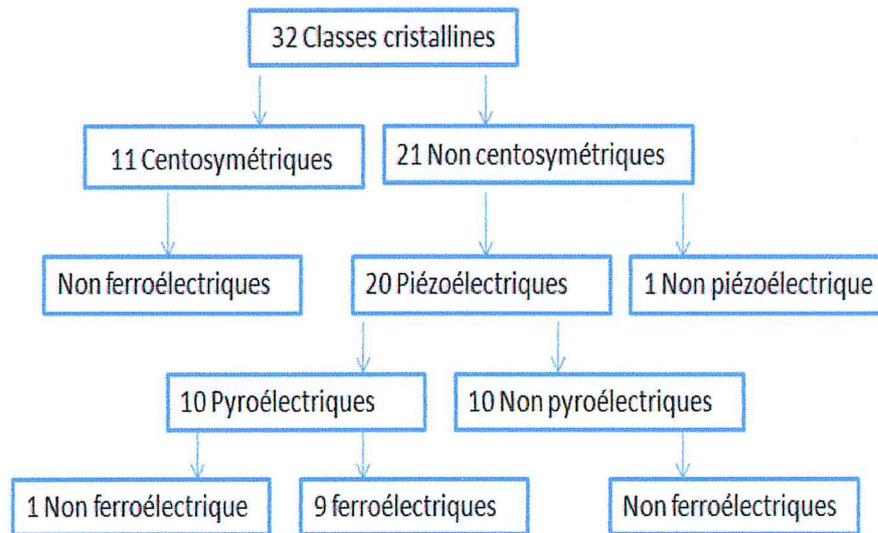


Figure (I.3) : Organigramme des différentes classes de symétrie cristalline.

I.4. Domaines d'application de l'effet piézoélectrique

Il est possible de distinguer trois grands domaines d'application de l'effet piézoélectrique selon le mode d'excitation de l'effet piézoélectrique (direct et/ou inverse) [2, 3].

Tableau (I. 1): Domaines d'application de la piézoélectricité selon l'effet utilisé [2, 3].

Applications basées sur l'effet direct	Applications basées sur l'effet inverse	Applications basées sur les deux effets
<ul style="list-style-type: none"> - Microphone - Hydrophone - Capteur de choc - Accéléromètres - Bouton poussoir - Allumage - Capteur de pression ou de contraintes 	<ul style="list-style-type: none"> - Haut-parleur - Buzzer - sonar - Nébuliseur - Nettoyage par ultrasons - Relais - Micro positionnement - Ajustement laser - Imprimante à jet d'encre - Dispositifs acousto-optiques - Pompe piézoélectriques 	<ul style="list-style-type: none"> - Transducteur d'ultrasons pour diagnostic (échographie) - CND par ultrasons - Détecteur de proximité ou de présence - Mesure de distances ou de débits - Gyroscope - Filtres fréquentiels (onde volumiques SAW) - Lignes à retard - Transformateur Piézoélectrique

I.5. Matériaux piézoélectriques

Les matériaux piézoélectriques peuvent être regroupés en trois classes principales [4].

- Les polymères piézoélectriques
- Les céramiques piézoélectriques
- Les cristaux piézoélectriques

I.5.1. Polymères piézoélectriques

Lors de l'application d'un champ électrique externe sur un polymère piézoélectrique, les chaînes de polymère peuvent s'orienter en donnant lieu à une déformation mécanique. Les polymères tels que le Poly-Vinyl-DiFluoridène ou PVDF et le P(VDF-TrFE) partiellement cristallisés permettent d'obtenir des matériaux plus compliants, mécaniquement adaptés aux grandes déformations pour les applications de l'acoustique sous-marine en réception ainsi que l'imagerie médicale en mode émission/réception. Le PVDF est le représentant le plus connu des polymères.

I.5.2. Céramiques piézoélectrique

Les céramiques piézoélectriques se sont vite imposées par leur fort coefficient de couplage électromécanique. La famille des céramiques comporte de nombreux éléments, citons entre autres, les Titanates de Baryum qui sont les ancêtres des céramiques actuelles, les Titanates de Plomb ou les métas-Nimbâtes de Plomb utilisés pour l'imagerie haute résolution. Les Zircons Titanates de Plomb (PZT) sont ensuite apparus en 1954 [5], elles constituent maintenant la première grande source de structure Pérovskite ferroélectrique.

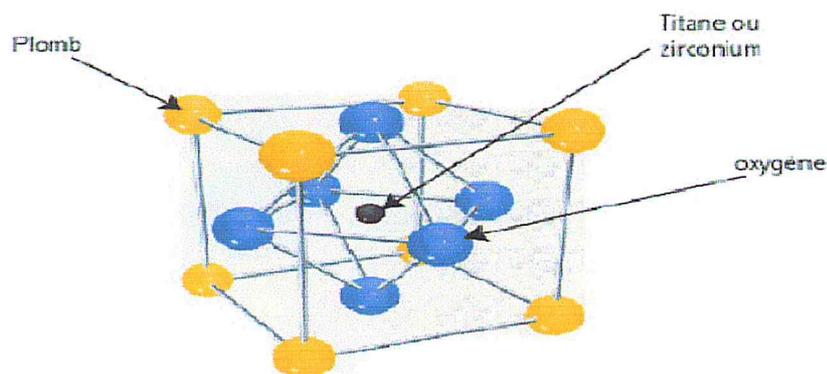


Figure (I.4) : Structure de la maille Pérovskite de type ABO₃.

La formule générale d'une structure Pérovskite est ABO_3 , où la valence des cations A est comprise entre +1 et +3 et la valence des cations B entre +3 et +6. Dans le cas d'une symétrie cubique, les cations A sont situés aux sommets du cube, les cations B au milieu du cube et les atomes d'oxygène (anions) au centre des faces. La structure Pérovskite est ainsi constituée d'un réseau d'octaèdres BO_6 reliés entre eux par les sommets et entourés par les cations A. Voir (Figure (I.4)).

I.5.3. Cristaux piézoélectriques

Le quartz (SiO_2) est le plus connu des cristaux piézoélectriques, malheureusement il a des propriétés peu intéressantes pour les applications telles que les générateurs ultrasonores. Leurs principaux défauts sont : sa permittivité diélectrique ϵ_r et ses constantes piézoélectriques relativement faibles, ainsi que son coefficient de couplage électromécanique. On cite également les matériaux piézoélectriques cristallins tels que l'oxyde de zinc (ZnO), le nitrure d'Aluminium (AlN), ...etc. Qui ont des propriétés très intéressantes.

I.6. Oxyde de Zinc «ZnO»

L'oxyde de Zinc (ZnO) est connu dans la nature sous le nom de «Zincite» (Figure (I.5)). Sa couleur varie suivant les impuretés qu'il contient et son écart à sa stœchiométrie. Le ZnO peut également être synthétisé de manière artificielle sous forme massive avec une très grande pureté ou avec dopage.

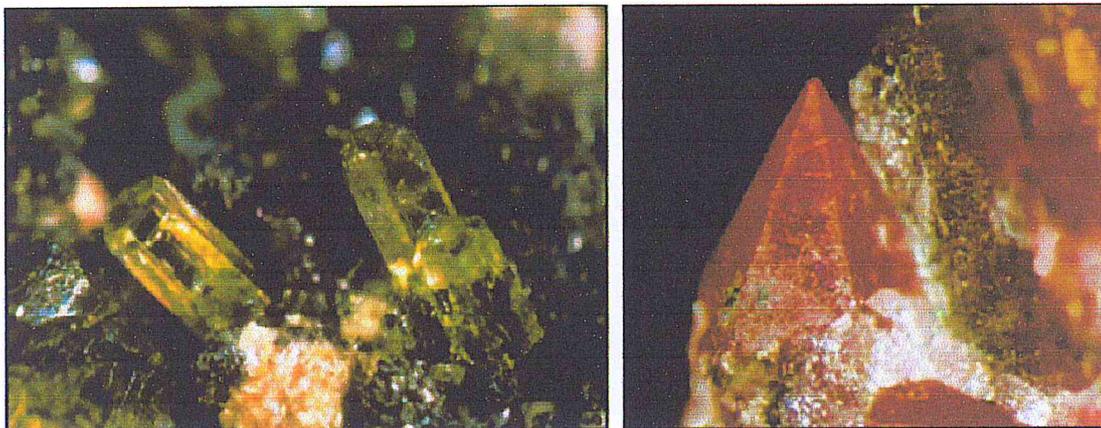


Figure (I.5) : Oxyde de Zinc (ZnO) massif, sous sa forme naturelle [6].

Dès les années 1920 et grâce à ses propriétés piézoélectriques [7], le ZnO est devenu très utilisé en tant que transducteur ultrasonore dans les récepteurs des premiers radios sans fil. Le ZnO a été étudié de manière intense depuis le début des années 1950. En raison de ses propriétés remarquables en couches minces, il continue aujourd'hui à être intéressant dans les applications de résonateurs fonctionnant en hautes fréquences.

I.6.1. Structure cristalline du ZnO

La structure d'un cristal est déterminée complètement si l'on connaît son réseau cristallin et son motif. Le réseau cristallin est constitué d'un empilement de mailles élémentaires. Aux sommets de chaque maille se situent les nœuds du réseau. C'est le groupement d'atomes caractéristique d'un cristal donné ou son motif. L'oxyde de Zinc se cristallise dans le système hexagonal de la symétrie «6mm».

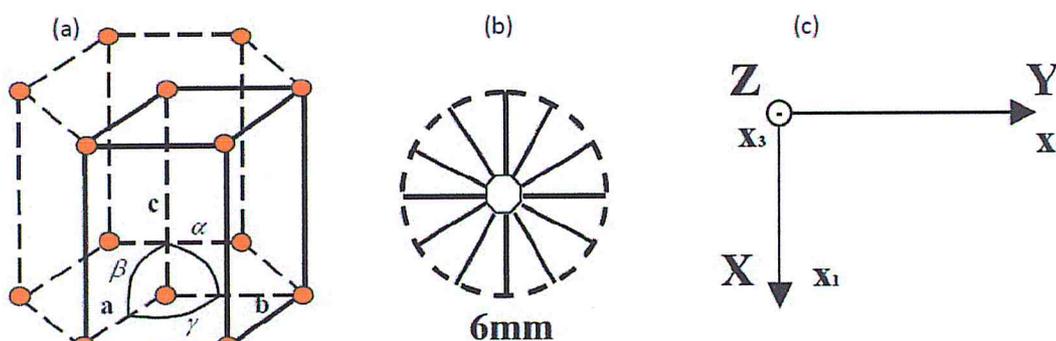


Figure (I.6) : Classe de symétrie «6mm» du système hexagonal.

La structure (maille) hexagonale (Figure (I.6)) contient trois (3) mailles élémentaires. Elle est construite par deux (2) rotations d'un angle 60° du parallélépipède élémentaire. Chaque maille élémentaire a pour caractéristiques $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ et $a = b \neq c$. Le système hexagonal contient sept (7) classes de symétrie cristalline [6]. La symétrie «6mm» signifie que le cristal (c'est le cas du ZnO) possède un axe de rotation direct d'ordre 6 (ou A_6), c'est-à-dire qu'une rotation d'angle $2\pi/n$ ($n=6$) autour de cet axe ramène le cristal dans une position indiscernable de celle du départ. La notation «mm» indique qu'il y a deux familles de miroirs qui complètent la symétrie du cristal. La (Figure (I.6.a et I.6.b)) montre la place qu'occupent les atomes d'Oxygène et de Zinc dans la structure cristalline du ZnO. C'est la structure Wurtzite réelle, ici : $a = b = 3,2495 \text{ \AA}$ et $c = 5,2069 \text{ \AA}$ ($c/a = 1,6022$) [8].

La structure Wurtzite possède une maille hexagonale avec deux paramètres de réseau \vec{a} et \vec{c} , dont le rapport théorique est $c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$. Elle appartient au groupe d'espace $P6_3mc$. Une représentation schématique de cette maille est donnée dans la figure (I.7.a). La structure est formée de deux mailles hexagonales compactes, comportant chacune un seul type d'atome (ZnO), décalées l'une par rapport à l'autre suivant la direction de l'axe \vec{c} , d'une distance d qui est la longueur de la liaison Zn-O parallèle à l'axe \vec{c} (Figure (I.7.c)).

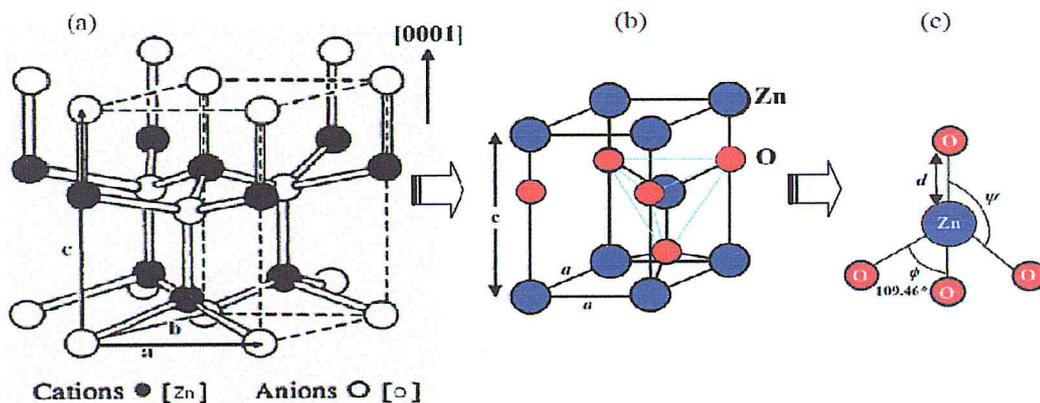


Figure (I.7) : a)- Structure de type Wurtzite du ZnO, b)- Maille élémentaire, c)-Structure tétraédrique du ZnO.

I.6.2. Origine de la piézoélectricité dans le ZnO

Le ZnO est un composé binaire situé entre les cristaux ioniques et les cristaux covalents. Il fait partie des matériaux piézoélectriques, mais il est non-ferroélectrique (Figure(I.7)). Sa structure hexagonale de type Wurtzite est formée d'un anion entouré de quatre (4) cations situés aux sommets d'un tétraèdre et vice-versa (Figure (I.7.c)). Dans le cas d'une structure idéale, la longueur d de la liaison Zn-O est $d=uc$, avec $u=3/8=0,375$. Les angles du tétraèdre sont : $\phi=\psi=109,46^\circ$ [9]. Dans le cas d'un cristal réel, cette structure s'écarte de l'arrangement idéal par un changement simultané du rapport c/a , du paramètre u et un changement des angles ϕ et ψ . En effet, il existe un lien entre le rapport c/a et le paramètre u de telle sorte que si le rapport c/a diminue, le paramètre u augmente afin que les distances tétraédriques restent inchangées lors de la distorsion des angles du tétraèdre. Cette distorsion est due aux fortes interactions polaires des plans de Zinc avec ceux de l'Oxygène.

La coordination tétraédrique est typique de la liaison covalente sp^3 . Ce matériau a aussi un caractère ionique appréciable (liaison Zn-O). Du fait que les centres de masse des anions et des cations ne coïncident pas (car la structure Wurtzite est non centrosymétrique), le ZnO est polaire, c'est-à-dire qu'il possède une polarisation microscopique non nulle selon l'axe \vec{c} même en absence de déformation. Sa polarisation spontanée est de l'ordre de $-0,05 \text{ C.m}^{-2}$ [10]. A cette polarisation spontanée s'ajoute une polarisation piézoélectrique si le matériau est soumis à des contraintes externes.

Dans la structure tétraédrique de la figure (I.8), l'atome Zn possède quatre (4) atomes d'Oxygène comme plus proches voisins. Un atome d'Oxygène est situé au-dessus du Zn formant une liaison parallèle à la direction de l'axe \vec{c} , trois (3) atomes d'Oxygène sont situés au-dessous (base de tétraèdre). Les quatre liaisons (Zn-O) sont très rigides (hybridation sp^3). De ce fait, une contrainte mécanique compressive parallèle à l'axe \vec{c} provoque un écartement des trois (3) atomes O de la base triangulaire (Figure (I.8.a)). Le matériau se déforme ainsi par le changement des angles (O-Zn-O) du tétraèdre [11]. L'atome Zn a tendance à se déplacer vers les atomes d'Oxygène basaux. La base de la pyramide devient par conséquent positivement chargée. Pour sa part, une contrainte de traction appliquée parallèlement à l'axe \vec{c} fait prolonger les atomes O basaux et induit une polarisation opposée (Figure(I.8.b)). Le même mécanisme apparaît lors de la sollicitation du matériau par un champ électrique E selon la direction (Oz). Ces deux mécanismes couplés sont régis par les deux lois d'état du solide piézoélectrique données comme suit

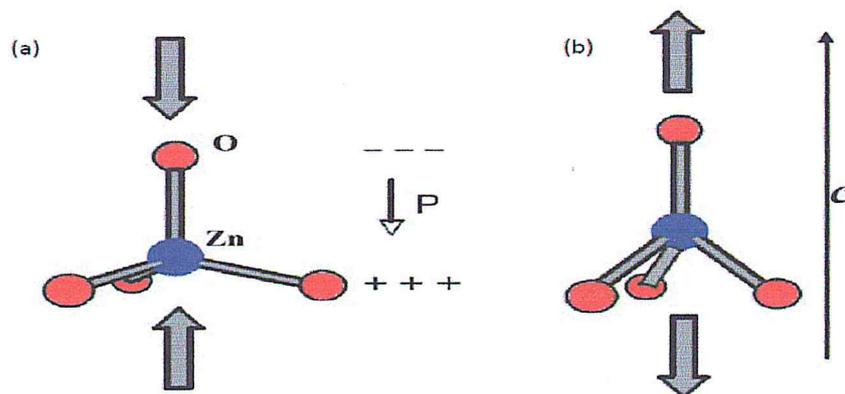


Figure (I.8) : Coordonnées tétraédriques des atomes Zn et O sous l'application d'une contrainte mécanique externe ; a)- Compression et b)- Traction.

$$T_{ij} = C_{ijkl}^E S_{kl} - e_{kij} E_k \quad (I.1)$$

$$D_j = e_{jkl} S_{kl} - \varepsilon_{jk}^S E_k, \quad (I.2)$$

T_{ij} présente les éléments du tenseur des contraintes, S_{kl} sont les éléments du tenseur de déformation, C_{ijkl}^E les constantes d'élasticité à champ électrique constant, e_{kij} les éléments du tenseur piézo-électrique, E_k les composantes du champ électrique appliqué, D_j étant le déplacement (Induction) électrique et ε_{jk}^S la permittivité diélectrique à déformation constante.

L'oxyde de Zinc présente une piézoélectricité directionnelle, principalement selon l'axe cristallographique [0001]. En raison de sa stabilité chimique lorsqu'il se présente sous forme de film et en raison de son facteur de couplage électromécanique ($K_{eff}^2 \sim 9\%$), le ZnO est devenu l'un des matériaux les plus attractifs pour les dispositifs à couches minces. Quelques-unes de ses propriétés physiques se présentent comme suit [12, 13]:

Tenseur piézoélectrique:

$$e_{ijk} = \begin{bmatrix} 000 & 000 & 0000 & 00 & -0.48 & 0 \\ 000 & 000 & 0000 & -0.48 & 00 & 0 \\ -0.573 & -0.573 & 1.321 & 00 & 00 & 0 \end{bmatrix} (C/m^2).$$

Tenseur de permittivité diélectrique relative :

$$\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} 7.57 & 000 & 000 \\ 000 & 7.57 & 000 \\ 000 & 000 & 9.03 \end{bmatrix}.$$

Densité volumique $\rho = 5665 \text{ kg/m}^3$.

Tenseur d'élasticité :

$$c_{ijkl} = \begin{bmatrix} 209,6 & 120,5 & 104,6 & 00,0 & 00,0 & 00,00 \\ 120,5 & 209,6 & 104,6 & 00,0 & 00,0 & 00,00 \\ 104,6 & 104,6 & 210,6 & 00,0 & 00,0 & 00,00 \\ 000,0 & 000,0 & 000,0 & 42,3 & 00,0 & 00,00 \\ 000,0 & 000,0 & 000,0 & 00,0 & 42,3 & 00,00 \\ 000,0 & 000,0 & 000,0 & 00,0 & 00,0 & 44,55 \end{bmatrix} (\text{GPa})$$

I.7. Résonateurs Piézoélectriques

I.7.1. Les filtres et les résonateurs à ondes acoustiques de surface (SAW)

Les composants SAW (*Surface Acoustic Wave*) sont des transducteurs dont l'entrée et la sortie sont constituées d'électrodes métalliques, en forme de peigne interdigité (IDT) (doigts entrelacés), déposées sur un matériau piézoélectrique. Lors de l'application d'un champ électrique sur ces électrodes, on excite les ondes acoustiques de surface. Pour une fréquence donnée, l'onde acoustique de surface est créée par une perturbation acoustique constructive sur ces peignes. La demi-longueur d'onde est fixée par la distance entre deux bandes métalliques consécutives qui est la périodicité du système d'électrodes (Figure (I.9)). Ainsi, la fréquence est inversement proportionnelle à cette dimension latérale.

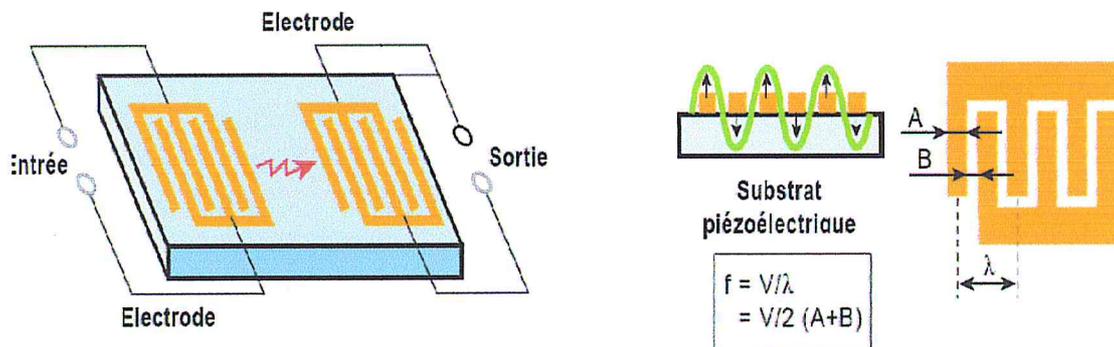


Figure (I.9) : Structure de base d'un filtre SAW.

I.7.2. Les filtres et les résonateurs à ondes acoustiques de volume (BAW)

À l'inverse du cas des SAWs limités en fréquence de fonctionnement à cause du procédé lithographique, le principe de fonctionnement des BAWs fait que ces derniers ne connaissent pas cette limitation en fréquence. La fréquence du résonateur BAW est principalement conditionnée par l'épaisseur de la couche piézoélectrique utilisée.

I.7.3. Principe de fonctionnement des BAWs

La structure de base d'un résonateur BAW est une capacité MIM (Métal/Isolant/Métal). Constitué d'un matériau piézoélectrique, l'isolant est pris en sandwich entre deux électrodes métalliques de faible épaisseur. L'application d'un potentiel électrique sur l'une des électrodes (tandis que l'autre est liée à la masse) crée un champ électrique dans le matériau piézoélectrique et conduit à l'apparition d'une

déformation mécanique par effet Lippman [14], c'est le phénomène de piézoélectricité inverse. L'onde acoustique ainsi générée se propage dans le matériau avec une vitesse V dépendante des propriétés élastiques du milieu et de la direction de propagation. La résonance aura lieu suite à la construction d'une onde stationnaire dépendant des dimensions caractéristiques, telles que la longueur de propagation de l'onde acoustique soit n fois (n est un entier) la demi-longueur d'onde λ .

Les résonateurs BAWs peuvent être classés selon leur architecture en trois (3) familles suivantes :

I.7.4. La technologie BAW à membrane isolée (FBAR)

Avec deux architectures possibles :

I.7.4.1.1. FBAR à membrane suspendue par micro-usinage de la face arrière

Afin de pouvoir confiner l'énergie acoustique dans la partie active du résonateur, une forte isolation acoustique est nécessaire. Réalisée par micro-usinage de la face arrière du Silicium, le résonateur FBAR à membrane suspendue est la première architecture proposée à cet effet [15, 16].

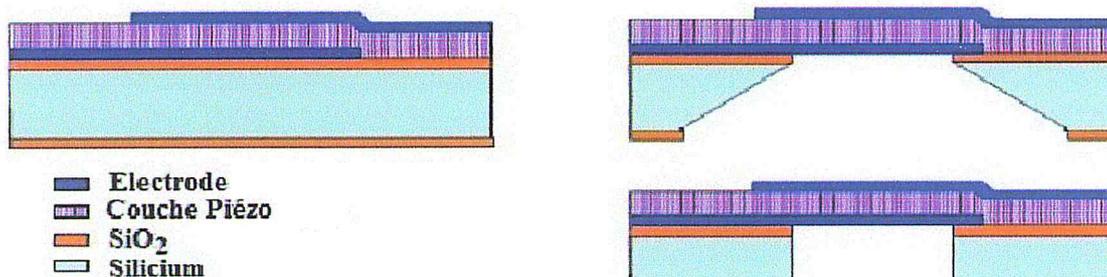


Figure (I.10) : Usinage volumique pour la libération de la membrane [15, 16].

La figure (I.10) illustre le principe de l'isolation acoustique de la structure FBAR par procédé de libération de la membrane. La gravure arrière du substrat en Silicium peut être effectuée selon deux procédés possibles ; (i) par une gravure chimique anisotrope, généralement par une solution KOH, engendrant l'apparition des plans cristallins (111) inclinés de $54,74^\circ$ par rapport à l'horizontale [17], (ii) par une gravure physique profonde, en utilisant le procédé DRIE (*Deep Reactive Ion Etching*) de Bosch [18].

I.7.4.1.2. FBAR à gap d'air (AGR)

Les *FBARs* à membrane suspendue ont été progressivement remplacés par les *AGRs* (*Air Gap Resonators*). Ces derniers sont réalisés par une nouvelle technologie

dite de micro-usinage de surface (Figure (I.11)). Il s'agit ici d'utiliser une couche sacrificielle (généralement du SiO_2 [19, 20] entre le substrat et la partie active du résonateur, ensuite de la graver (la dernière étape de fabrication) avec un procédé chimique afin de réaliser une cavité d'air sous le résonateur pour l'isolation acoustique[21].

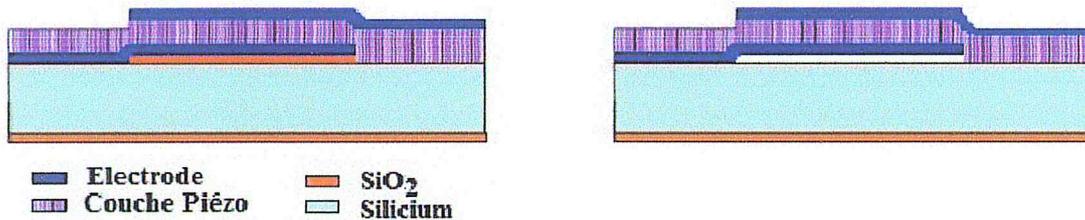


Figure (I.11) : Structure AGR réalisée par micro-usinage de surface [21].

I.7.4.2. La technologie BAW à réflecteurs de Bragg (SMR)

Contrairement à la structure FBAR où le résonateur est suspendu sur une membrane, la structure SMR (*Solidly Mounted Resonator*) est une architecture nouvelle des résonateurs BAWs basée sur des réflecteurs de Bragg acoustiques fortement liés au substrat (Figure (I.12)). L'isolation est assurée par l'établissement d'ondes réfléchies, en phase avec les ondes incidentes [22].

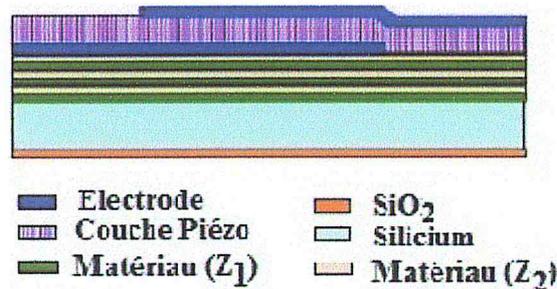


Figure (I.12) : Structure SMR, résonateur BAW avec réflecteurs de Bragg [22].

La méthode consiste à réaliser, sous la partie active du résonateur, une succession de deux couches quart d'onde (d'épaisseur $\lambda/4$) alternées, formées respectivement de deux matériaux ayant des impédances acoustiques (Z_1 et Z_2) très différentes (exemple : empilement AlN/SiO_2 ..[23], ou l'empilement SiO_2/W ..[21, 22]).

I.7.4.3. La technologie BAW à cavité résonante (HBAR)

La troisième architecture est celle à BAW avec cavité résonante ou HBAR (*High Overtone Bulk Acoustic Resonator*). Comme pour les FBAR, la partie active du résonateur est montée sur un substrat épais constitué d'un matériau ayant un fort facteur

de qualité, tel que le Saphir ou le LiNbO_3 . Ce substrat présente la cavité résonante dans laquelle va s'établir un système d'ondes stationnaires (Figure (I.13)).

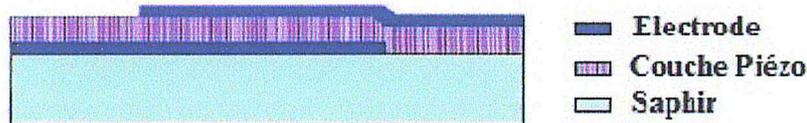


Figure (I.13) : Structure HBAR, résonateur BAW avec cavité résonante.

I.8. Les Cristaux Phononiques

I.8.1. Historique

Les premiers travaux concernant la propagation des ondes élastiques dans les structures périodiques remontent à l'étude de Fahmy-Adler [24] en 1972 qui a établi un formalisme pour décrire la propagation des ondes de surface dans les systèmes multicouches. Il s'agit d'un système 1D, on ne parle pas encore des cristaux phononiques. Les premiers travaux théoriques sur les cristaux bidimensionnels ont été effectués en 1987 par Lakhtaki [25]. Il étudia les coefficients de réflexion et de transmission des ondes élastiques sur un réseau de cylindre pour les basses fréquences. A partir de 1990 [26] J. Liu introduit le concept de phonon dans les réseaux périodiques en étudiant expérimentalement la propagation d'une onde sonore dans un fluide contenant des sphères solides. Par la suite, J. Liu [27] et X. Jing [28, 29] mènent une étude théorique afin d'établir, pour la première fois, le diagramme de dispersion d'une onde acoustique dans un fluide et faire le lien avec les bandes interdites mesurées. Des travaux similaires ont été menés en 1991 [30] dans les phases liquides en étudiant l'atténuation des ondes élastiques dans des liquides non homogènes.

Les premiers travaux sur Silicium ont été menés par Dutcher [31] en 1992 qui a mis en évidence l'existence d'une bande interdite due au mode de résonance du substrat. C'est en 1993 [32] que la similarité des ondes élastiques, optiques et électroniques a été explicitée et les premiers diagrammes de dispersion [33-36] de cristaux phononiques en tant que tels ont été explicitement étudiés. Cette période correspond à la naissance de la thématique des cristaux phononiques comme nous la connaissons actuellement, à partir de là le nombre d'articles sur le sujet a augmenté exponentiellement [37].

I.8.2. Les milieux périodiques

Il existe des milieux qui présentent une périodicité de leurs propriétés physiques selon une, deux ou trois dimensions comme illustré par la figure (I.14). D'un point de vue pratique, les structures à une dimension (1D) sont constituées de couches empilées les unes sur les autres suivant une alternance périodique de deux matériaux (Figure (I.14.a)).

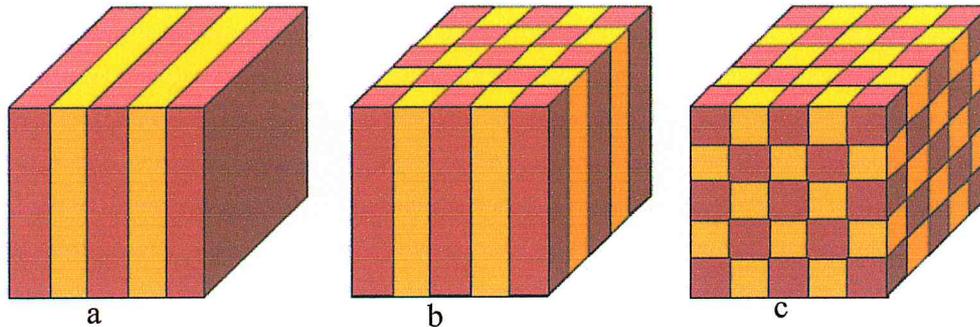


Figure (I.14) : Illustration des réseaux ayant une périodicité à : (a) une dimension, (b) à deux dimensions et (c) à trois dimensions.

Les structures présentant une périodicité suivant deux dimensions sont caractérisées par des motifs périodiques dans un plan et sont considérés invariants et illimités selon la dimension perpendiculaire au plan de la périodicité (Figure (I.14.b)). Les structures sont composées généralement de réseaux de cylindres (ou de piliers) dans l'air. Les réseaux d'inclusions ou de trous percés dans la matière sont aussi des cas de structures 2D, quand l'épaisseur est finie (plaque ou membrane), on parle de structure quasi-2D. Enfin, les structures à trois dimensions (Figure (I.14.c)) peuvent être produites concrètement par des sphères empilées les unes sur les autres ou des arrangements périodiques de cylindres selon plusieurs directions.

A titre d'exemple, dans le domaine optique, les structures 1D sont constituées de multicouches diélectriques. Lord Rayleigh [38] en 1887 a été le premier à étudier théoriquement la propagation de la lumière dans les structures périodiques 1D. Ce type de structure peut être ramené à un agencement constitué de couches diélectriques périodiques ayant des indices de réfraction différents. Il s'agit typiquement d'un agencement de couches alternées de haut et bas indices de réfraction avec un contraste suffisant. Il émit ainsi l'hypothèse que l'effet de bande interdite dans ces systèmes permettrait d'obtenir des miroirs à forts coefficients de réflexion, les miroirs dits «de Bragg». Car c'est en 1913 que W.G. Bragg confirma ses travaux en utilisant les rayons-

X sur un cristal. Il remarqua des pics intenses de réflexions suivant le choix spécifique de l'angle d'incidence et la longueur d'onde des rayons incidents. La périodicité de la maille cristalline permettait en effet une réflexion très proche de l'unité, à hauteur de 99.9 %, des rayons incidents. Ces expériences constituent les premiers travaux de la mise en évidence des bandes interdites.

L'engouement pour les milieux périodiques artificiels à trois dimensions commence en 1987, suite aux travaux de Yablonovitch [39] et John [40]. Ils proposent des réseaux 3D présentant des bandes interdites complètes et qui ont la particularité d'être indépendantes de l'angle d'incidence de l'onde électromagnétique. Cependant, pour un accord aux fréquences optiques, les réseaux doivent présenter des paramètres de réseaux inférieurs au micron, leur fabrication s'est révélée du point de vue technologique difficilement réalisable en 3D. Une attention particulière s'est alors portée sur les réseaux bidimensionnels qui présentent l'avantage d'être réalisés plus facilement en utilisant les techniques de fabrication standard déjà développées dans l'industrie de la microélectronique.

Les réseaux 2D ou quasi-2D demeurent intéressants dans le sens où ils présentent de manière similaire aux réseaux 3D des bandes interdites complètes, c'est-à-dire des bandes interdites indépendantes de la direction de propagation et de la polarisation de l'onde. Notons cependant que l'obtention des bandes interdites complètes dans les structures 2D est plus difficile que dans les structures 3D. Pour pallier à cette difficulté, on peut étudier séparément les polarisations des ondes afin de déterminer des structures présentant des bandes interdites partielles (pour une seule polarisation) mais toujours pour toutes les directions de propagation (dans le plan).

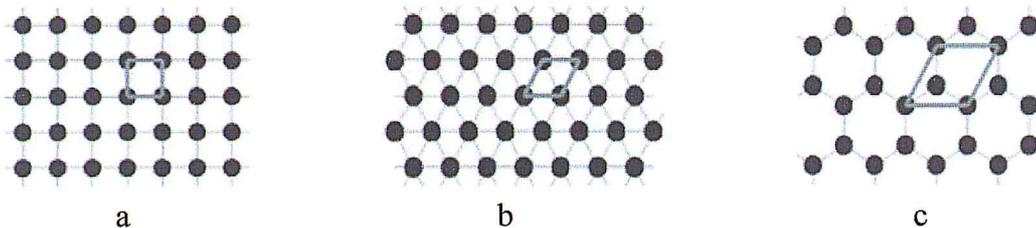


Figure (I.15) : Illustration des réseaux :(a) carrés, (b) hexagonal ou triangulaire et hexagonal, (c) structure en nid d'abeille; le motif des deux premiers réseaux (a) et (b) ne comporte qu'un seul atome, le motif du troisième (c) est formé de deux atomes

Pour classer les différents réseaux dans le plan, on définit deux vecteurs \vec{a}_1 et \vec{a}_2 que l'on peut caractériser par leurs normes et par l'angle qui les sépare. Le caractère périodique du réseau limite le nombre de combinaisons possibles pour ces trois paramètres. Ainsi, il existe 5 types de mailles compatibles avec la structuration d'un réseau 2D. Chacune de ces mailles correspond à un type de réseau dit «réseau de Bravais» [41] : le parallélogramme (réseau oblique), le rectangle (réseau rectangulaire), le losange (réseau rectangulaire centré), le carré (réseau carré) et le cas particulier du losange doté d'un angle égal à $2\pi/3$ (réseau hexagonal ou triangulaire). Notons le cas du réseau rectangulaire centré qui n'est pas primitif (il contient 2 nœuds par maille). Cependant, il constitue une représentation pratique de la maille losange et rappelle qu'il présente la même symétrie ponctuelle que le réseau rectangulaire. On dit que ces deux réseaux appartiennent au même système cristallin. Ainsi, il n'existe que quatre «systèmes cristallins» plans qui se distinguent les uns des autres par leur symétrie ponctuelle [41]. A l'exception du système rectangulaire qui accepte deux types de mailles : primitive et centrée, les autres systèmes ne présentent que la maille primitive. Un cristal est défini par l'adjonction d'un motif au réseau. Un exemple de réseau 2D qui présente un intérêt particulier dans le domaine des systèmes phononiques est représenté par la structure en nid d'abeille ou «*honeycomb*», (Figure (I.15)). Il est constitué d'un réseau hexagonal doté d'un motif à deux atomes par maille.

Les mailles représentées ici constituent le réseau direct. Ce réseau est caractérisé par des vecteurs de translations élémentaires \vec{a}_i : les vecteurs de base du réseau direct. Le réseau est invariant pour toute translation correspondant à un vecteur du réseau direct. Le réseau dit réciproque est constitué des vecteurs de base \vec{b}_i , définis par $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$, avec δ_{ij} le symbole de Kronecker. La notion de réseau réciproque est essentielle à la description des cristaux phononiques et photoniques, plus particulièrement dans le cadre de l'étude des bandes interdites.

I.8.3. Ondes acoustiques

La propagation d'une onde acoustique se traduit par une variation temporelle d'une série de déformations dans le milieu support de la propagation. Ce comportement vibratoire est dû aux forces d'inertie et celles de rappel élastique qui concourent entre

elles en agissant sur les particules du milieu. Ainsi, les caractéristiques d'une onde acoustique dépendent des propriétés élastiques et de la densité du support matériel dans lequel elle se propage.

Sachant qu'un matériau adopte un comportement élastique spécifique suivant la direction des déformations qu'il subit par rapport à son orientation et sa structure cristallographiques, les propriétés de l'onde seront déterminées par sa direction de propagation et sa polarisation. Dans un milieu homogène isotrope par exemple, si l'onde élastique se propage sans rencontrer d'obstacle, elle garde ses propriétés physiques tout au long de son parcours. Autrement dit, si les dimensions de ce milieu sont supposées infinies dans toutes les directions de l'espace, comparées aux distances parcourues par le déplacement de l'onde, celle-ci pourra alors se propager dans le volume du milieu. Ses propriétés physiques ne dépendront que de sa polarisation quelle que soit la direction de propagation. On parle alors d'une onde de volume. Dans le cas des milieux solides isotropes, la vitesse des ondes à polarisation longitudinale est supérieure à celle des ondes à polarisation transverse.

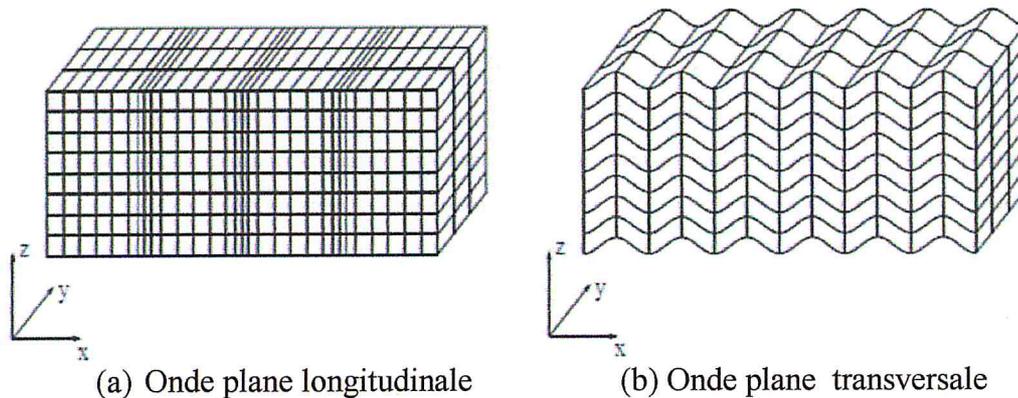


Figure (I.16) : Polarisation des ondes.

Les ondes acoustiques/élastiques peuvent aussi se propager le long d'une surface libre délimitant un milieu élastique. On parle alors d'onde acoustique de surface (*Surface Acoustic Wave (SAW)*). Lord Rayleigh [42] était le premier à mettre en évidence l'existence des ondes de surface en 1885. Il remarqua alors que les ondes issues des tremblements de terre peuvent aussi se propager parallèlement à la surface de la terre sous forme d'ondes localisées en surface avec une profondeur de pénétration de l'ordre d'une longueur d'onde. Ces ondes de surface se caractérisent par une décroissance exponentielle de leurs champs de déplacement depuis la surface vers la profondeur. Elles ont une polarisation elliptique qui résulte de la superposition d'un

mode longitudinal et d'un mode transverse, déphasés d'un quart de longueur d'onde (polarisation elliptique). L'intérêt porté aux ondes acoustiques de surface, connues aussi sous le nom d'ondes de Rayleigh, s'est accru à partir des années soixante et soixante-dix pour la fabrication de dispositifs à ondes de surface. Ainsi, de multiples applications qui concernent les domaines de télécommunication, les radars, le filtrage, les capteurs [43]... etc. Ont pu voir le jour.

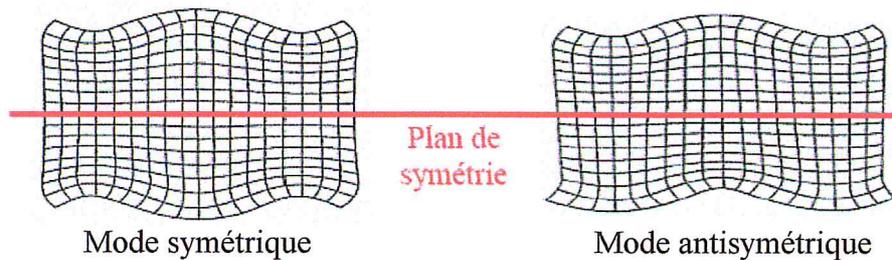


Figure (I.17) : Modes de Lamb symétrique et antisymétrique dans une plaque d'épaisseur finie [44].

Finalement, le comportement des ondes acoustiques change au voisinage des frontières du milieu dans lequel elles se propagent, surtout lorsque les dimensions de celui-ci deviennent proches de la longueur d'onde. En 1916, Horace Lamb a exploré les propriétés des ondes élastiques dans une plaque isotrope à frontières libres. Une plaque solide se comporte comme un guide d'ondes élastiques dans les directions parallèles à ses surfaces libres. Les ondes guidées au niveau de la plaque sont la résultante d'un couplage entre les ondes de surface, guidées sur chaque côté de la plaque quand la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la plaque en question [44]. Le caractère dispersif de ces ondes dans la plaque, appelées ondes de Lamb, est très complexe, mais nous pouvons en gros distinguer entre deux catégories de modes. D'abord, les modes ayant une distribution de champ de déplacement symétrique, puis ceux avec une distribution antisymétrique par rapport au plan parallèle aux surfaces libres de la plaque et coupant celle-ci au milieu (Figure (I.17)). Les modes symétriques ont un champ de déplacement longitudinal dominant, alors que les antisymétriques ont une polarisation transverse dominante.

La plupart des études menées sur les CP se sont intéressées aux interactions des ondes de volume, de surface ou de Lamb avec la périodicité des structures phononiques, ceci en fabriquant des structures infinies, semi infinies ou sous forme de plaques à épaisseur finie.

I.8.3.1. Ondes dans les milieux périodiques

La propagation d'une onde est décrite mathématiquement par une équation (ou un système d'équations couplées) nommée à propos : «l'équation d'onde». Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles du second ordre, dont la forme dépend de la nature des ondes considérées.

$$\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial t^2} = 0, \quad (\text{I.3})$$

$f(x,t)$: la fonction d'onde, V : la vitesse de propagation de l'onde et t : le temps.

Le matériau dans lequel se propage l'onde est décrit quant à lui par ses propriétés physiques (Sa permittivité diélectrique, sa densité, son élasticité...etc.). Selon le problème traité, les propriétés physiques sont représentées mathématiquement par des scalaires ou des tenseurs suivant que le matériau est isotrope ou anisotrope. Par exemple pour un matériau photonique, la permittivité varie périodiquement avec les coordonnées de l'espace, telle que :

$$\vec{\varepsilon}_r(\vec{r}) = \vec{\varepsilon}_r(\vec{r} + m \cdot \vec{a}_1 + n \cdot \vec{a}_2 + p \cdot \vec{a}_3), \quad (\text{I.4})$$

avec \vec{r} : le vecteur position ; m, n et p trois entiers et $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ les vecteurs de base de la maille cristalline du réseau.

Les travaux du mathématicien Gaston Floquet en 1883 ont permis d'établir l'existence d'une solution des systèmes d'équations différentielles à coefficients périodiques qui présentent une périodicité de seconde espèce, à savoir : la solution évaluée en deux points séparés l'un de l'autre d'une distance égale au pas du réseau est identique à un déphasage près (de type $e^{i\theta}$). Cette solution peut ne pas être unique (cas du système dégénéré).

Ces travaux sont repris par Félix Bloch en 1928 qui démontra que la fonction d'onde d'un électron dans un potentiel périodique présente une périodicité de la seconde espèce selon la terminologie de Floquet. L'opérateur de translation et l'Hamiltonien ont une base commune (ils commutent), les solutions de l'Hamiltonien après translation diffèrent d'un facteur de phase. Ce résultat se généralise aux problèmes de propagation pour des ondes de nature différente, l'Hamiltonien étant remplacé par un opérateur de propagation.

De ces travaux découlent le théorème de Bloch-Floquet pour les ondes dans les milieux périodiques, qui stipule qu'une fonction propre de l'opérateur de propagation est décrite comme le produit d'une onde plane de vecteur d'onde k et d'une fonction

périodique de même période que celle du réseau. Ou, de façon équivalente, par la superposition linéaire d'une infinité d'ondes planes de même pulsation mais de vecteurs d'ondes espacés les uns des autres par un vecteur du réseau réciproque.

I.8.4. Cristaux Phononiques

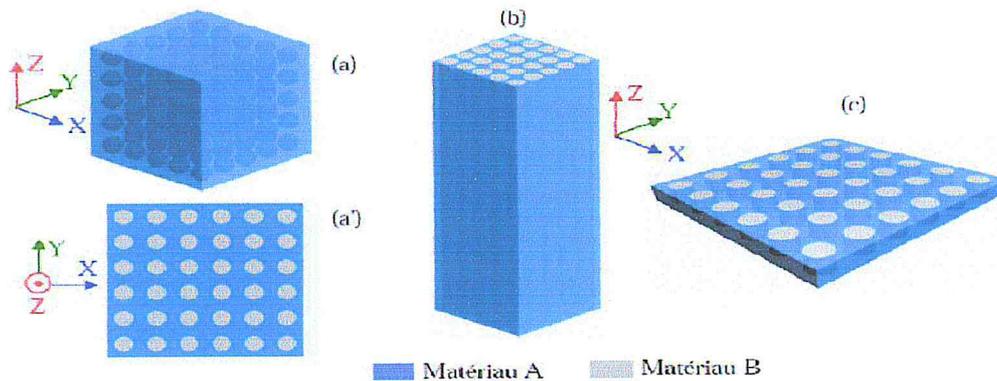


Figure (I.18) : Cristaux phononiques constitués de répétition périodique d'inclusions de matériau B dans une matrice en matériau A. (a) CP tridimensionnel pour ondes de volume, (a') CP bidimensionnel, (b) CP à ondes de surface et (c) CP à ondes de Lamb.

Un cristal phononique (CP) est une structure périodique de matériaux ayant des propriétés élastiques différentes. La figure (I.18) montre quelques exemples de CP tridimensionnels (3D) ou bidimensionnels (2D) qui ont fait l'objet de la plupart des études menées pendant ces 20 dernières années.

I.8.4.1. Structures de bande et bande interdite phononique

Dans les études qui traitent de la propagation des ondes dans un milieu quelconque, l'objectif est de cerner le comportement de celles-ci en termes de relation entre la fréquence et le vecteur d'onde en fonction des autres paramètres liés au milieu de la propagation. Cette relation est appelée relation de dispersion. Dans un milieu élastique homogène, par exemple, cette relation peut être simple et linéaire $\omega(k) = k \cdot V$, k est le module de vecteur d'onde et V représentant la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu, elle dépend directement des propriétés élastiques et de la densité de ce dernier; dans ce cas, nous ne sommes pas en présence de dispersion de l'onde. Cette dernière a lieu quand la relation entre la fréquence et le vecteur d'onde devient plus complexe, où la vitesse de phase et celle de groupe peuvent être distinguées.

Afin de comprendre les comportements des ondes élastiques/acoustiques dans les milieux périodiques, les chercheurs se sont depuis toujours intéressés à calculer les relations de dispersion, qu'ils représentent sous forme de courbes reliant la fréquence au vecteur d'onde suivant différentes directions de propagation. Cette forme de visualisation du comportement dispersif est appelée **structure de bandes phononiques**. En effet, en exploitant la périodicité élastique du CP, le théorème de Bloch précise que chaque onde solution qui se propage dans le CP, est le produit d'une onde plane et une fonction périodique. Le calcul de la structure de bande se limite donc à une zone réduite de l'espace des vecteurs d'onde : une cellule de périodicité appelée **zone de Brillouin** comme dans le cas des états d'énergies électroniques dans une structure cristalline périodique d'un matériau. Ainsi, la structure de bandes phononique présente les différents modes de propagation possibles des ondes élastiques qui diffusent dans le CP.

La principale propriété remarquable qu'offrent les CP est la possibilité de création de bandes interdites au niveau de la structure de bande. Une bande interdite se présente dans ce cas sous forme d'un intervalle de fréquences où aucun lien n'est défini entre la fréquence et le vecteur d'onde. La figure (I.19) présente un exemple [45] de structure de bande phononique pour un CP bidimensionnel à ondes de Lamb (semblable à celui de la figure (I.19.c) constitué d'un arrangement carré périodique d'inclusions cylindriques en or dans une plaque d'époxy d'épaisseur $e=0.25a$, a étant la périodicité de la structure. Cette structure de bande est calculée puis représentée suivant les trois directions de propagation ΓX , XM et $M\Gamma$, axes principaux de symétrie de la première zone de Brillouin, déterminés par le vecteur d'onde \vec{k} .

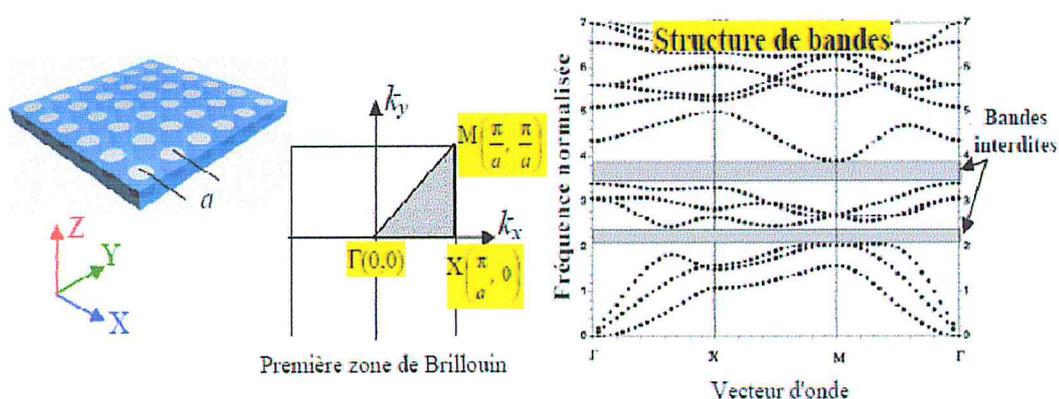


Figure (I.19): Exemple de structure de bandes sur les axes principaux de symétrie de la première zone de Brillouin pour un CP à ondes de Lamb [45].

Les premières études menées sur les systèmes phononiques ont permis de mettre en évidence le mécanisme responsable de la création des bandes interdites, à savoir la diffusion de Bragg. Tamura *et al.* [46] étaient parmi les premiers à étudier en détail le mécanisme de réflexion de Bragg dans un CP unidimensionnel. Ils ont ainsi montré la possibilité d'avoir un CP se comportant comme une barrière pour les modes longitudinaux et transverses dans des intervalles de fréquences bien déterminés dans toute la première zone irréductible de Brillouin. De plus, ils ont mis en évidence une forte atténuation des ondes à ces intervalles lors de leur transmission dans le CP. Par la suite, d'innombrables travaux se sont attelés à étudier l'ouverture de bandes interdites par le mécanisme de Bragg dans différents systèmes phononiques, tout en explorant l'influence des paramètres géométriques et physiques sur le comportement de ces bandes prohibant toute propagation [46, 47]. Ainsi, et de manière générale, il est bien établi que ce type de bandes interdites dépend fortement de la périodicité et de la symétrie du CP.

En outre, les ondes ayant leur fréquence dans la bande interdite ont une longueur d'onde de l'ordre de la périodicité de la structure phononique. Enfin, le CP adopte le même comportement dispersif indépendamment de sa périodicité, et les fréquences d'ouverture des bandes interdites sont inversement proportionnelles à la périodicité de la structure phononique. Cependant, et dans certains CP spécifiques, la création de la bande interdite peut être causée par un tout autre mécanisme qui a été mis en évidence par Liu *et al.* [48] en 2000, à savoir le mécanisme de «la résonance locale». Ces systèmes périodiques sont dans ce cas appelés cristaux phononiques à résonance locale (CPRL).

Conclusion

Le fonctionnement des résonateurs et des filtres acoustiques BAWs est basé principalement sur l'effet piézoélectrique inverse où la résonance mécanique est issue d'une excitation par champ électrique externe, nous avons présenté dans ce chapitre le phénomène de la piézoélectricité générée dans le matériau ZnO choisi comme composante active du dispositif BAW. On a également présenté les différents architectes des résonateurs BAWs, dans la suite de notre travail nous allons nous intéresser à la structure FBAR. Nous avons aussi présenté un aperçu sur les cristaux phononiques CPs afin de pouvoir les utiliser dans les FBAR pour éliminer les modes

d'onde acoustiques parasites dans ces derniers (ces ondes ont pour effet la dégradation des performances électriques de ces types de résonateurs), nous allons proposer ensuite l'utilisation des CPs pour empêcher la propagation des ondes stationnaires transversales parasites.

CHAPITRE (II) :

**PROCEDURE DE SIMULATION PAR
ELEMENTS FINIS D'UN RESONATEUR
'FBAR' BIDIMENSIONNEL**

Introduction

Nous décrivons dans ce deuxième chapitre la procédure de simulation par le logiciel Comsol multi-physique du composant micro système FBAR pour (*Film Bulk Acoustic Resonator*). Afin de déterminer la réponse électrique et mécanique de la structure FBAR étudiée, nous effectuons une étude harmonique en se basant sur la Méthode des Eléments Finis (MEF).

Les outils de simulation par MEF sont plus que nécessaires car ils permettent la prévision des valeurs de certains paramètres technologiques avant même de passer à l'expérience et à la réalisation du composant. La simulation permet, en outre, un gain considérable en temps et en coût du matériel, tout en réduisant le risque d'erreur.

II. Description du Logiciel Comsol Multi-physiques

II.1. Définition du logiciel

Comsol Multi-physiques est un logiciel permettant de résoudre les systèmes d'équations différentielles, décrivant un ou plusieurs phénomènes physiques couplés ou découplés, par la méthode des éléments finis. Avec une bonne adaptation de maillage, on peut contrôler l'erreur par l'utilisation des différents solveurs numériques [49]. On peut ainsi modéliser des phénomènes multi-physiques tels que la déformation élastique des matériaux, l'écoulement des fluides ou encore l'électrostatique...etc. Le type d'analyse peut être choisi en fréquences propres, harmoniques ou même transitoires. Les méthodes numériques avancées permettent de résoudre des problèmes avec des physiques "simples" ou d'étudier des phénomènes multi-physiques "couplés". Comsol *Multiphysics* possède plus de 25 modules ; électrique, mécanique, fluide et chimique...etc. Le temps nécessaire aux simulations (allant de quelques minutes jusqu'à plusieurs heures) est très variable, il est fonction de la puissance de la machine de calcul et selon la dimension; 1D, 2D, 3D, ainsi que le type de maillage.

II.2. La Méthode des Eléments Finis

La méthode des éléments finis a été introduite en 1956 par Turner [49]. L'objectif était de trouver des solutions approximatives aux problèmes qui sont difficiles à résoudre analytiquement et ayant des domaines complexes soumis à des conditions aux limites. Le principe de la méthode MEF est basé sur la décomposition du domaine de la structure (3D, 2D, 1D), à l'aide des «fonctions de forme des éléments

finis», en un nombre fini de sous-domaines de faibles dimensions devant la longueur d'onde d'intérêt nommés «éléments» (de forme tétraédrique, prismatique, hexaédrique ou pyramidale) [50], ces éléments sont en continuité sur les limites entre eux. Chaque élément du réseau est connecté à un autre élément voisin par les nœuds communs. Cette situation est représentée dans la figure (II.1). La modélisation par des éléments finis consiste à résoudre l'équation de la dynamique, de la piézoélectricité ou autre, sur de petits éléments. Dans chaque élément, les solutions recherchées sont développées sur un ensemble de fonctions de base. D'un point de vue numérique, la solution approximative systématique de chaque élément est construite par l'application des méthodes variationnelles [51].

Le choix des fonctions de base est dicté par le nombre de degrés de liberté. La projection des équations différentielles sur les fonctions de base, dans chacun des éléments finis, ramène le problème à un système d'équations linéaires. Concernant, les interfaces hétérogènes, les conditions aux limites assurent l'assemblage des matrices élémentaires en une matrice globale du système complet. Les différents types d'éléments finis qui sont disponibles dans Comsol sont éléments finis de Lagrange et éléments finis nodaux iso-paramétriques.

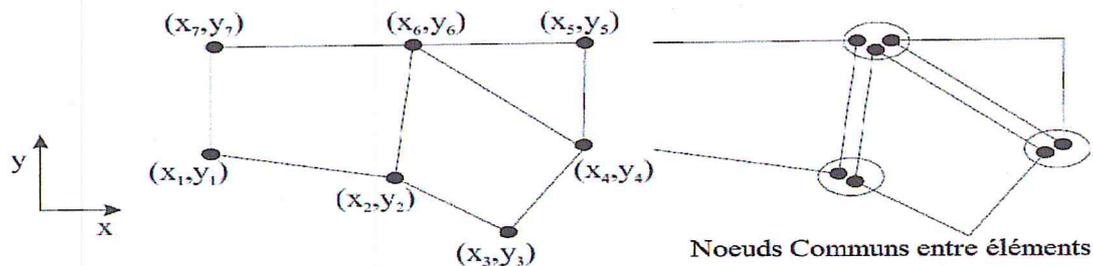


Figure (II.1) : Décomposition du domaine en éléments.

II.3. Modélisation par choix de la physique

Les phénomènes physiques sont décrits par des équations différentielles. Comsol Multi-physiques possède un ensemble de modèles pour les équations différentielles partielles (EDP) classiques: équation de Laplace, équation de Poisson, équation d'onde, équation de Helmholtz, équation de la chaleur et équation de type convection-diffusion...etc. On peut aussi introduire nos propres équations différentielles afin de les résoudre par Comsol.

II.4. Simulation 2D d'un FBAR (Etude harmonique)

Nous considérons la structure FBAR bidimensionnelle de dimensions $126.8 \times 1,72 \mu\text{m}^2$, l'excitation de l'effet piézoélectrique est effectuée par l'application d'un champ électrique externe sur une des électrodes. Nous effectuons une étude harmonique de la réponse électromécanique de la structure, et en balayant la fréquence d'excitation dans un domaine bien déterminé. Cependant, le résonateur FBAR présente des dimensions latérales finies, avec les conditions électriques décrites précédemment et des conditions d'encastrement mécaniques. Pour cela, on effectue une simulation numérique par MEF. L'objectif étant la génération d'ondes acoustiques de volume (dans la direction de l'épaisseur) qui représentent le mode de fonctionnement normal de la structure FBAR. On s'intéresse ensuite à l'influence des modes parasites créés par la propagation des modes latéraux dans la direction de la longueur du FBAR.

II.4.1. Procédure de simulation du FBAR par Comsol

Les différentes étapes que nous allons suivre pour la simulation du résonateur piézoélectrique par la méthode des éléments finis sont listées comme suit :

- 1 Choix de la dimension de l'espace de simulation.
- 2 Sélection de la physique décrivant le phénomène à étudier.
- 3 Choix du type d'analyse à effectuer.
- 4 Définition des paramètres géométriques du modèle.
- 5 Conception géométrique de la structure FBAR.
- 6 Définition de la région *PML* "*Perfectly Matched Layer*".
- 7 Affectation des matériaux aux différentes régions du résonateur.
- 8 Application des conditions aux limites (électriques et mécaniques) sur les différentes régions, frontières ou interfaces.
- 9 On adopte le maillage adéquat avec la structure FBAR.
- 10 Délimitation de l'intervalle fréquentiel de l'étude.
- 11 Lancement du calcul.
- 12 Exploitation des résultats.

Ces étapes sont complètement détaillées dans l'annexe (A)

II.4.1.1. Choix de la dimension de l'espace de simulation

La première étape consiste à choisir la dimension de l'espace de simulation. Dans notre étude, nous nous limitons au cas bidimensionnel (2D) afin de ne considérer que les deux modes : longitudinal et transversal de la propagation des ondes acoustiques dans la structure.

II.4.1.2. Choix de la physique

Dans la bibliothèque des physiques prédéfinies dans Comsol, on peut simuler plusieurs phénomènes physiques tels que l'électrostatique, l'électromagnétisme, la diffusion de la chaleur, la déformation mécanique, l'effet piézoélectrique...etc.

La majorité des dispositifs MEMS utilisent un ou plusieurs phénomènes pour traduire une grandeur physique d'entrée en une grandeur électrique de sortie ou inversement. Les résonateurs à ondes acoustiques de volume FBAR se basent principalement sur l'effet piézoélectrique direct ou inverse par le biais d'un couplage électromécanique. On choisit dans cette simulation la physique "*Piezoelectric Devices (Pzd)*" afin de l'en tenir en compte.

Dans l'outil Comsol, le "couplage électromécanique" d'un dispositif piézoélectrique est décrit par deux équations différentielles décrivant respectivement le principe fondamental de la dynamique (Equation (II.1)) et l'équation de Maxwell-Gauss (Equation (II.2)), soient :

$$-\rho\omega^2 U e^{-ti\theta} - \nabla\sigma = F_v e^{i\varphi} \quad (\text{II.1})$$

$$\nabla \cdot D = \rho_v, \quad (\text{II.2})$$

ρ est la masse volumique, $\nabla\sigma$ sont les contraintes internes, $F_v e^{i\varphi}$ la force mécanique externe provenant de l'excitation électrique, D représente le déplacement électrique, ρ_v la densité de charge électrique, ω la pulsation angulaire et U l'amplitude du déplacement mécanique.

II.4.1.3. Paramètres géométriques du modèle

Il est très utile de paramétrer dans un tableau les variables du modèle et les utiliser ensuite dans les différentes étapes de simulation, il suffit ensuite de changer dans le tableau la valeur correspondante à la variable qu'on veut modifier et il sera

tenu en compte automatiquement dans tout le modèle. Dans cette simulation, les valeurs des paramètres géométriques sont listées dans le tableau (II.1).

Tableau (II.1): Les paramètres géométriques du modèle.

Name	Expression	Value	Description
N_g	10	10	Nombre de périodes (<i>Gratings</i> = PnC)
N_{pml}	$N_g + 2 * N_{pml}$	2	Longueur du <i>PML</i> par unité de période
N		14	Nombre de périodes (<i>Structure</i> + <i>PML</i>)
P	$12.68e^{-6}$ [m]	12.6E-6	La période
L	$N * P$	176.4E-4	Longueur totale du <i>FBAR</i>
hp	$1.52e^{-6}$ [m]	1.52E-6	Epaisseur de la couche piézoélectrique
hg	$0.1e^{-6}$ [m]	1E-7	Epaisseur des <i>PnC</i>
<i>PML</i>	$N_{pml} * p$	25.2E-6	Longueur de la région <i>PML</i>
he	$0.1e^{-6}$ [m]	1E-7	Epaisseur des électrodes

II.4.1.4. Géométrie de la Structure de FBAR

Comsol *Multiphysics* propose des outils de conception géométrique en (1D, 2D et 3D). Les opérations géométriques sont toujours organisées selon une séquence dans l'arborescence du modèle. La géométrie de notre structure FBAR est constituée de trois couches superposées, chacune d'elle est délimitée par un rectangle (*box*). Les paramètres géométriques de chaque rectangle (à savoir; sa longueur, sa largeur et la position de son origine) sont listées dans les (tableaux (II.2), (II.3) et(II.4)), respectives aux régions définissant ; l'électrode inférieur, la couche piézoélectrique et l'électrode supérieur, soient.

Tableau (II.2): Région définissant la couche piézoélectrique.

Name	Value
<i>Position</i>	{0, 0}
<i>Layer names</i>	<i>Layer 1</i>
<i>Layers</i>	<i>PML</i>
<i>Width</i>	<i>L</i>
<i>Height</i>	<i>hg</i>

Tableau (II.3) : Région définissant l'électrode

Name	Value
<i>Position</i>	{0, <i>he</i> }
<i>Layers</i>	<i>PML</i>
<i>Width</i>	<i>L</i>
<i>Height</i>	<i>Hp</i>
<i>Size</i>	{ <i>L</i> , <i>hp</i> }

Tableau (II.4): Région définissant l'électrode supérieur

Name	Value
<i>Position</i>	{ <i>he</i> + <i>hp</i> }
<i>Layer names</i>	<i>Layer 1</i>
<i>Layers</i>	<i>PML</i>
<i>Width</i>	<i>L</i>
<i>Height</i>	<i>hg</i>

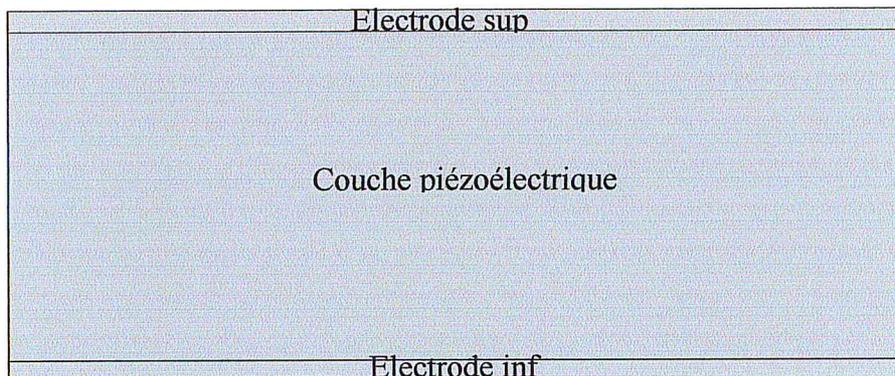
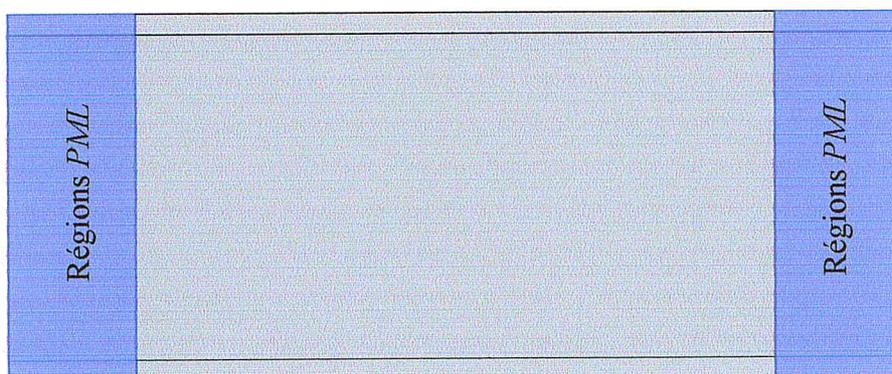


Figure (II.2) : Structure FBAR 2D

II.4.1.5. Définition du *PML* "*Perfectly Matched Layer*"

La notion *PML* a été introduite pour la première fois par Bérenger en 1994 pour les ondes électromagnétiques [52]. Le *PML* est un domaine qu'on l'introduit afin de traiter les problèmes de propagation d'ondes acoustiques dans un milieu fini telle que la structure FBAR réelle (Figure (II.3)).

Figure (II.3) : Domaines définissant les régions *PML*.Tableau (II.5): Domaines définissant les régions *PML*.

<i>Geometric entity level</i>	<i>Domain</i>
<i>Selection</i>	<i>Domains 1–3, 17–19</i>

II.4.1.6. Matériaux constituant la structure

Les paramètres physiques des matériaux, tels que le module d'Young, la densité volumique, la permittivité diélectrique, le tenseur d'élasticité et le tenseur piézoélectrique...etc, sont des caractéristiques propres à chaque matériau. Ces constantes sont définies dans chaque domaine de la structure FBAR. Pour chaque matériau choisie, il faut un minimum de paramètres physiques à définir pour que le calcul puisse être lancé.

i) Le Molybdène (Mo)

Le Molybdène est un matériau métallique (conducteur), on l'utilise pour la réalisation des électrodes inférieure et supérieure de la structure FBAR (Figure (II.4)). Les paramètres physiques du Molybdène (Mo) sont obtenus à partir de la bibliothèque du matériau prédéfinie dans Comsol.

Tableau (II.6): Domaines du matériau (Mo).

<i>Geometric entity level</i>	<i>Domain</i>
<i>Selection</i>	<i>Domains 1, 3-4, 6-7, 9</i>

Tableau (II.8): Les propriétés du Molybdène.

<i>Proprety</i>	<i>Value</i>
<i>Young's modulus</i>	151.9e+09[pa]
<i>Poisson's ratio</i>	0.385
<i>Density</i>	10100[kg/m ³]
<i>Elasticity matrix</i>	{{4.6000e+011, 1.7600e+011, 0, 4.6000e+011, 0, 1.1000e+011}, {1.7600e+011, 1.7600e+011, 0, 1.7600e+011, 4.6000e+011, 0}, {0, 0, 0, 0, 0, 0}, {4.6000e+011, 1.7600e+011, 0, 0, 0, 0, 1.1000e+011}, {0, 4.6000e+011, 0, 0, 0, 0}, {1.1000e+011, 0, 0, 1.1000e+011, 0, 1.1000e+011}}[pa]

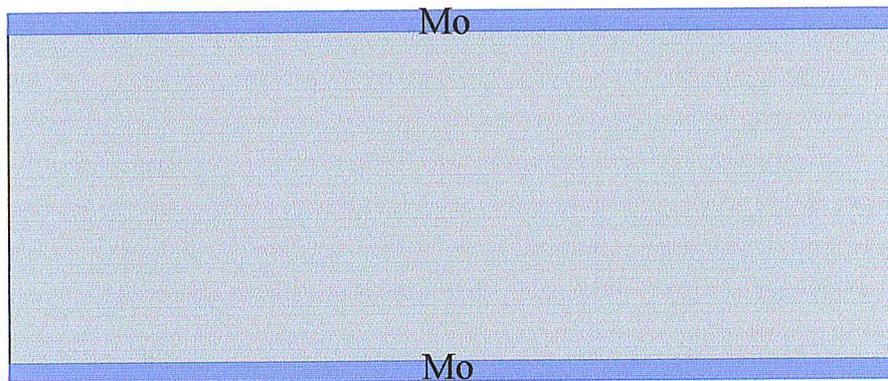


Figure (II.4) : Affectation du matériau Molybdène aux électrodes.

ii) L'oxyde de Zinc (ZnO)

Le ZnO est un matériau piézoélectrique (et diélectrique), très intéressant pour la construction de la couche active (Tableau (II.8)) de la structure FBAR (Figure (II.5)). A partir de la bibliothèque des matériaux, les constantes physiques du ZnO sont listées dans le Tableau (II.7).

Tableau (II.8): Domaine du matériau ZnO sur le FBAR.

<i>Geometric entity level</i>	<i>Domain</i>
<i>Selection</i>	<i>Domains 2, 5, 8</i>

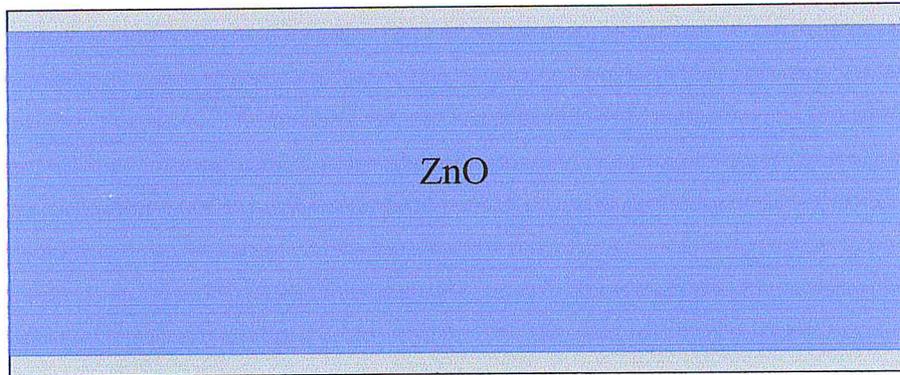


Figure (II.5) : Affectation du ZnO à la région active.

Tableau (II.9): Propriétés physiques du ZnO.

Proprety	Value
Density	5680[kg/m ³]
Elasticity matrix	{2.09714e+011, 1.2114e+011, 2.09714e+011, 1.05359e+011, 1.05359e+011, 2.11194e+011, 0, 0, 0, 4.23729e+010, 0, 0, 0, 0, 4.23729e+010, 0, 0, 0, 0, 4.42478e+010}[pa]
Loos factor elasticityE	{{0.333e-3, 0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0.333e-3, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0.333e-3, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0.333e-3, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0.333e-3, 0}, {0, 0, 0, 0, 0, 0.333e-3}}
Relative permittivity	{9.16, 9.16, 12.64}

II.4.1.7. Conditions aux limites

Afin de pouvoir résoudre les équations différentielles décrivant le phénomène piézoélectrique il est nécessaire de définir les différentes conditions d'encastrement réelles de la structure et les conditions d'excitation électrique, représentant respectivement les conditions aux limites mécaniques et électriques. Ces conditions aux limites sont données comme suit :

II.4.1.7.1. Matériaux piézoélectrique

La couche piézoélectrique est l'élément moteur des résonateurs BAW. Elle est définie par le matériau ZnO dans la figure (II.5). Les lois qui décrivent le comportement électromécanique sont données dans les équations ((II.3), (II.4)) représentant respectivement les définitions du champ électrique (dérivant du potentiel électrique) et la déformation mécanique, ainsi que les deux lois d'état (relation (II.5) et (II.6)) du solide piézoélectrique :

$$D_j = e_{jkl}S_{kl} - \varepsilon_{jk}^S E_k \quad (\text{II.3})$$

$$T_{ij} = c_{ijkl}^E S_{kl} - e_{kij} E_k \quad (\text{II.4})$$

$$S_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (\text{II.5})$$

$$E_k = - \frac{\partial U}{\partial x_k} \quad (\text{II.6})$$

T_{ij} sont les composantes du tenseur de contraint mécanique, S_{kl} les éléments du tenseur de déformation, c_{ijkl}^E les constantes d'élasticité à champ électrique constant et e_{jkl} les éléments du tenseur piézo-électrique, E_k sont des composantes du champ électrique, U le potentiel électrique, ε_{jk}^S sont les composantes du tenseur de la permittivité diélectrique à déformation constante, D_j étant les composantes de déplacement (Induction) électrique et u_k sont les composantes de déplacement mécanique.

II.4.1.7.2. *Matériau linéaire élastique*

Dans un matériau élastique, si on applique une force mécanique extérieure, il est susceptible de se déformer et lorsque les contraintes extérieures sont supprimées il reprend sa forme de départ. Cette propriété est choisie dans la région concernée en choisissant "**Linear Elastic Material**" dans les régions contenant du Molybdène (Figure (II.6)).

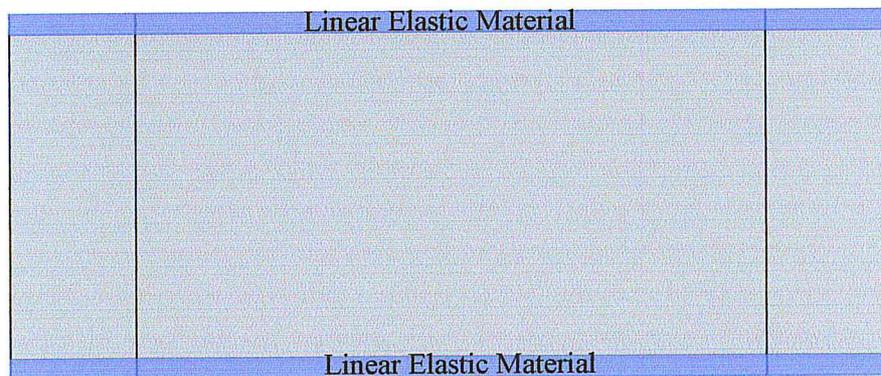


Figure (II.6) : Définition des régions élastiques.

Tableau (II.10): Régions contenant les matériaux élastiques.

<i>Geometric entity level</i>	<i>Domain</i>
<i>Selection</i>	<i>Domains 1, 3-4, 6-7, 9</i>

L'équation (II.5) et la loi de Hook (Relation (II.7)) décrivent le comportement des régions élastiques dans la structure FBAR.

$$T_{ij} = C_{ijkl}^E S_{kl} \quad (\text{II.7})$$

II.4.1.7.3. Conditions aux limites électriques (*Ground, Terminal*)

Les conditions aux limites électriques sont dues au fait que les deux électrodes sont reliées à un générateur de potentiel électrique externe. L'électrode inférieure est reliée à la masse $V=0$ Volt, tandis que l'électrode supérieure est liée au potentiel $V=1$ Volt. Les deux potentiels sont appliqués sur les nœuds du maillage appartenant aux interfaces respectives (électrodes sup ou inf /couche piézoélectrique, (Figure (II.7))).

Tableau (II.11): L'électrode reliée à la masse.

<i>Geometric entity level</i>	<i>Boundary</i>
<i>Selection</i>	<i>Boundary 11</i>

Tableau (II.12): L'électrode supérieure reliée au potentiel $V=1$ Volt.

<i>Geometric entity level</i>	<i>Boundary</i>
<i>Selection</i>	<i>Boundary 13</i>

La charge électrique est calculée dans ce modèle en utilisant l'équation (II.8) définissant la loi de Gauss dans un diélectrique:

$$\oint E ds = Q \quad (\text{II.8})$$

E est le champ électrique, ds l'élément de surface et Q la densité de charges électriques.

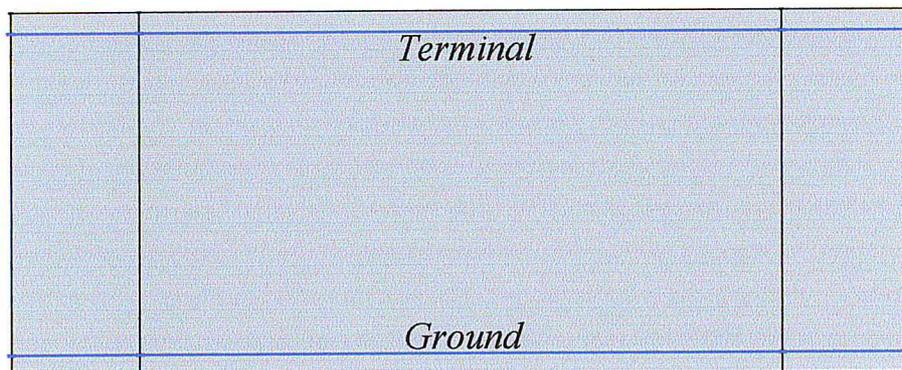


Figure (II.7) : Définition des conditions aux limites électriques.

II.4.1.7.4. Conditions aux limites mécaniques (*Fixed Constraint*)

Pour les conditions aux limites mécaniques, la structure FBAR est supposée fixée (Figure (II.8)) sur ses deux extrémités latérales (conditions du baffle rigide).

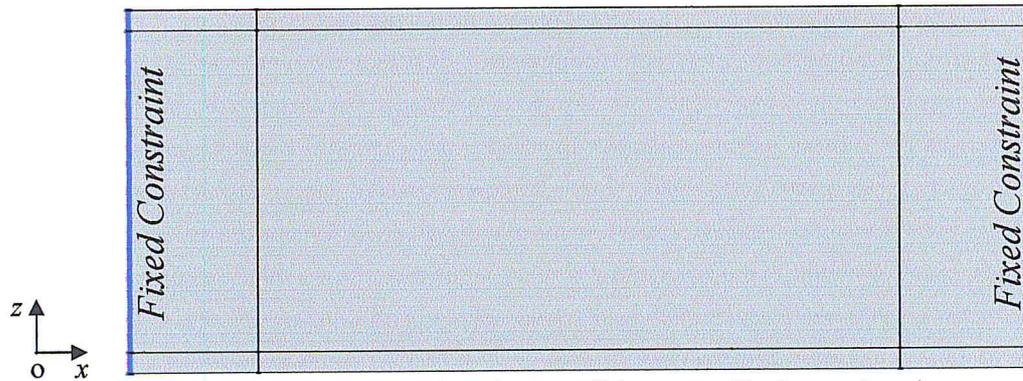


Figure (II.8) : Définition des conditions aux limites mécaniques.

Tableau (II.13): Les frontières encastées dans la structure FBAR.

<i>Geometric entity level</i>	<i>Boundary</i>
<i>Selection</i>	<i>Boundaries 1, 3, 5, 72-74</i>

Les deux équations ((II.9) et (II.10)) représentent les composantes selon x et selon z du déplacement mécanique (nulle) au niveau des extrémités latérales (Encastées) de la structure.

$$u_x = 0 \quad (\text{II.9})$$

$$u_z = 0, \quad (\text{II.10})$$

u_x est la composante du déplacement mécanique suivant l'axe ox et u_z est la composante du déplacement mécanique suivant l'axe oz .

II.4.1.8. Maillage de la structure

Le maillage est un découpage du domaine global en un nombre fini de sous domaines. Comsol *Multiphysics* propose plusieurs méthodes pour le maillage, dont le maillage tétraédrique libre, extrudé, couche limite...etc [54]. Le choix du maillage dépend de la nature de la structure, de la géométrie, des conditions aux limites et aussi de la physique, dans notre cas le maillage dépend principalement de la longueur d'onde de l'onde mécanique se propageant dans la structure.

Le maillage de la structure est une étape très critique dans la simulation, la nature de l'élément du maillage doit être très fine afin d'assurer la convergence de la

solution obtenue par MEF vers la solution exacte et augmenter la précision du calcul sur la réponse électromécanique du résonateur FBAR

Tableau (II.14): Caractéristique de maillage de la structure FBAR.

<i>Property</i>	<i>Value</i>	<i>Name</i>	<i>Value</i>
<i>Minimum element quality</i>	0.001224	<i>Maximum element size</i>	1.18E-5
<i>Average element quality</i>	0.1839	<i>Minimum element size</i>	5.29E-8
<i>Quadrilateral elements</i>	2010	<i>Resolution of curvature</i>	0.3
<i>Edge elements</i>	686	<i>Maximum element growth rate</i>	1.3
<i>Vertex elements</i>	56		

. Le maillage adéquat de la structure du résonateur piézoélectrique FBAR doit être formé des éléments rectangulaires (Figure (II.9)). Un bon maillage de la structure correspond à un découpage de telle sorte que les dimensions d'un élément de maillage soit dix fois plus petites que la longueur d'onde (10 éléments par longueur d'onde), soit de dimension ($dz = \lambda_L/10$ et $dx = \lambda_T/10$) λ_L et λ_T sont les longueurs d'onde des ondes longitudinale et transversale respectivement.

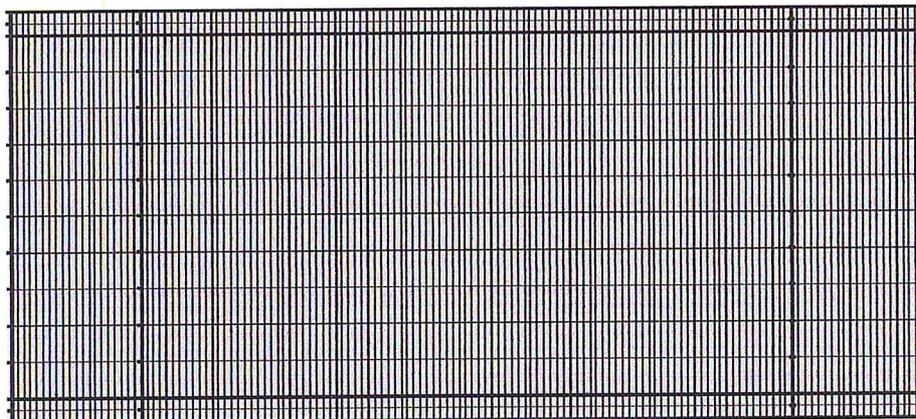


Figure (II.9) : Maillage de la structure.

II.4.1.9. Délimitation de l'intervalle fréquentiel de l'étude

Dans cette simulation l'analyse est harmonique, elle est effectuée dans le domaine fréquentiel allant de 1.50 GHz à 1.85 GHz. Le pas de balayage fréquentiel est de 1 MHz, soit un nombre de points de 350.

II.5. Traitement des résultats

Les principaux paramètres issus de la simulation de la piézoélectricité sont la charge électrique (Q) et la contrainte mécanique (T_{ij}). Tous les autres paramètres

découlent de ces derniers. L'objectif de notre étude est de déterminer l'admittance électrique d'entrée du résonateur FBAR, et le facteur de qualité, ainsi que le champ de déplacement mécanique dans la structure aux fréquences remarquables de la réponse électrique. L'admittance électrique du résonateur est liée à la charge électrique par la relation suivante :

$$Y = -\frac{j2\pi fQ}{v} \quad (\text{II.11})$$

II.5.1. Réponse électrique de résonateur FBAR

II.5.1.1. Définition de l'admittance électrique

L'admittance électrique notée "Y" (exprimée en "Siemens" (S) ou Ω^{-1}) est l'inverse de l'impédance électrique Z :

$$Y = \frac{1}{Z} \quad (\text{II.12})$$

L'admittance électrique est complexe, sa partie réelle représente la conductance (G) et sa partie imaginaire est la susceptance (B), d'où :

$$Y = G + jB \quad (\text{II.13})$$

II.5.1.2. Admittance électrique du résonateur FBAR

La figure (II.10) montre la courbe de l'amplitude de l'admittance électrique d'entrée du résonateur FBAR (sans effet des cristaux phononiques) en fonction de la fréquence de l'excitation électrique.

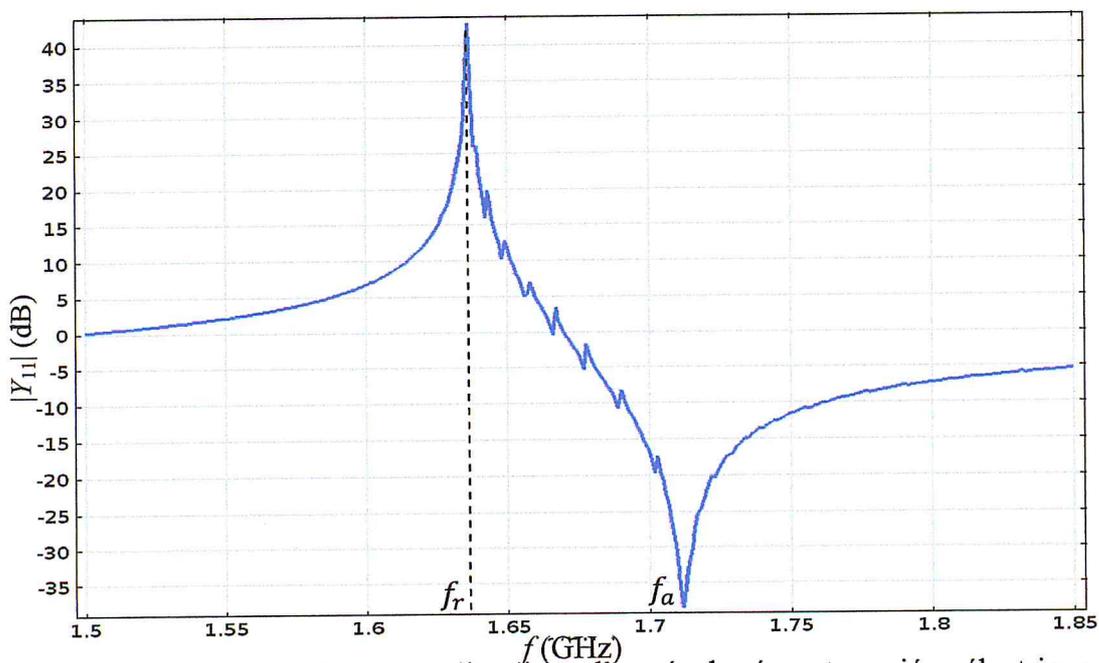


Figure (II.10) : Admittance électrique d'entrée du résonateur piézo-électrique.

Dans cette figure, on montre l'apparition d'une fréquence d'antirésonance électrique $f_a=1.712$ GHz correspondant à une admittance minimale le résonateur se comporte à cette fréquence comme un circuit ouvert. Le pic d'intensité maximale est situé à la fréquence de résonance $f_r=1.637$ GHz, le résonateur ici se comporte comme un court-circuit d'autres pics avec des amplitudes réduites sont apparus sur la courbe de l'admittance le résonateur ici se comporte comme un court circuit, ces pics sont des parasites dus au phénomène d'établissement d'ondes stationnaires latérales issus de la propagation des ondes acoustiques transversales le long de la structure. Ces pics parasites contribuent à la dégradation du résonateur et à la diminution du facteur de qualité ainsi qu'à la réduction de la constante de couplage électromécanique total du résonateur.

II.5.2. Facteur de qualité de résonateur FBAR

Afin de caractériser les pertes de l'énergie totale du FBAR, on introduit la notion du facteur de qualité Q [55], il est défini par une dérivée de la phase $\varphi(Y)$ de l'admittance électrique d'entrée en une fréquence f selon la relation (II.14).

$$Q = \frac{f}{2} \frac{\partial \varphi(Y)}{\partial f} \quad (\text{II.14})$$

Q est le facteur de qualité à la fréquence f . A la résonance et à l'antirésonance, les facteurs de qualité respectifs sont donnés comme suit :

$$Q_r = \left. \frac{f_r}{2} \frac{\partial \varphi(Y)}{\partial f} \right|_{f=f_r} \quad \text{et} \quad Q_a = \left. \frac{f_a}{2} \frac{\partial \varphi(Y)}{\partial f} \right|_{f=f_a} \quad (\text{II.15})$$

Selon l'origine de la dissipation énergétique, il existe différents types de facteur de qualité. On cite ici le facteur de qualité:

□ **Electrique**, dues à la résistivité électrique des matériaux constituant les deux électrodes de FBAR, et qui engendre des pertes par effet joule lors de passage du courant électrique.

□ **Diélectrique**, dues à la permittivité diélectrique complexe (relation II.16) de la région piézoélectrique (considérée isolante) du résonateur.

$$\varepsilon = \varepsilon' - j\varepsilon'' \quad (\text{II.16})$$

ε' et ε'' représentent respectivement les permittivités diélectriques réelle et imaginaire.

□ **Mécanique**, une conséquence de la propagation des ondes acoustiques avec résistance dans les régions élastique de la structure. On introduit les pertes mécaniques en utilisant des constantes d'élasticité complexes selon la relation (II.17).

$$c = c' + jc'' \quad (\text{II.17})$$

c' et c'' sont les parties réelle et imaginaire de la constantes d'élasticités c_{33}^D respectivement.

Dans cette simulation on néglige les pertes électriques dans les parties métalliques du résonateur, Les pertes diélectriques sont considérées uniquement dans la région piézoélectrique en introduisant des constantes de permittivité relative complexes telles que:

$$\varepsilon_{ij}^S = (1 - j\mu_{\varepsilon_{ij}}^S) \varepsilon_{ij}^S, \quad (\text{II.18})$$

telle que $\mu_{\varepsilon_{ij}}^S$ représente la constante des pertes diélectriques, dans notre cas il vaut 0.01 (1 %). De même, les pertes mécaniques sont également introduites dans le modèle (dans les parties élastiques) en considérant des constates élastiques complexes telles que:

$$C_{ijkl}^E = (1 + j\mu_{C_{ijkl}}^E) C_{ijkl}^E, \quad (\text{II.19})$$

où $\mu_{C_{ijkl}}^E$ représente le facteur d'atténuation des ondes mécaniques, dans notre cas il vaut $0.33 \cdot 10^{-3}$ dans le ZnO et $2 \cdot 10^{-3}$ dans le Molybdène.

Le facteur de qualité total peut être exprimé par :

$$\frac{1}{Q_{tot}} = \frac{1}{Q_{elec}} + \frac{1}{Q_{diele}} + \frac{1}{Q_{mec}} \quad (\text{II.20})$$

La figure (II.11) montre la courbe du facteur de qualité du résonateur FBAR en fonction de la fréquence, dans cette figure, on montre l'apparition de plusieurs pics de résonances parasites, dont l'amplitude augmente en fonction de la fréquence (en allant de f_r à f_a), le pic de plus grande valeur du facteur de qualité a lieu au voisinage de la fréquence de l'antirésonance. Les couples (f_i, Q_i) relatifs à ces pics sont listé comme suit : $(f_1=1.6702 \text{ GHz}, Q_1=2300)$ $(f_2=1.6809 \text{ GHz}, Q_2=2400)$ $(f_3=1.712 \text{ GHz}, Q_3=2600)$ $(f_4=1.729 \text{ GHz}, Q_4=3400)$ $(f_5=1.738 \text{ GHz}, Q_5=3700)$. Ces pics ont pour effet de dégrader les performances du résonateur FBAR.

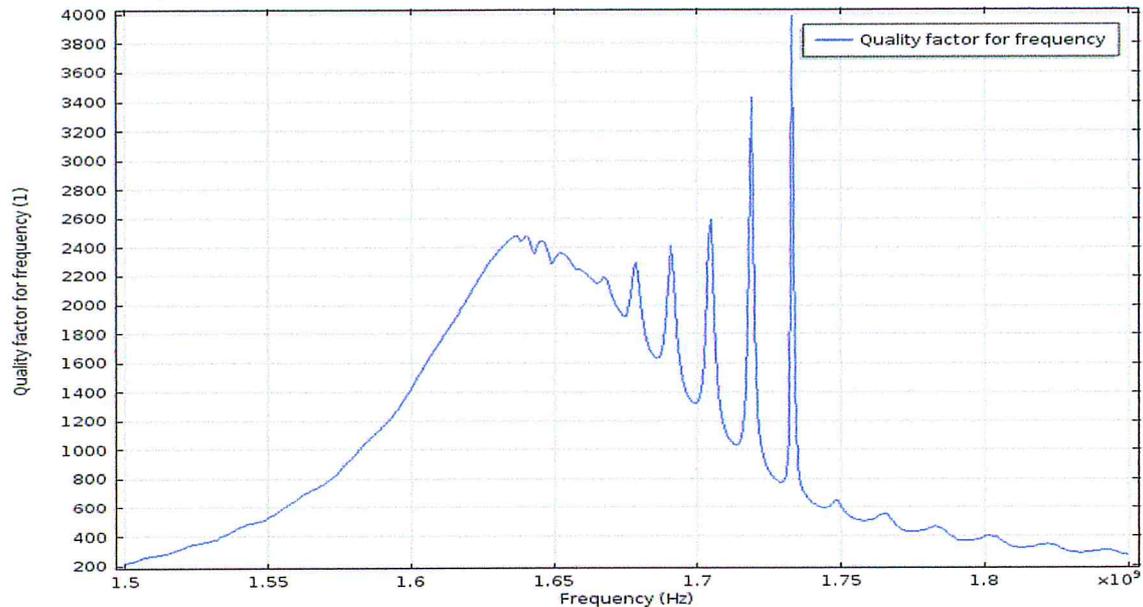


Figure (II.11) : Facteur de qualité total du résonateur FBAR.

II.5.3. Réponse mécanique

La figure (II.12) montre la réponse mécanique (champ de déplacement mécanique) dans la structure FBAR lors de l'excitation par un champ électrique extérieure, et ce pour deux fréquences; à la résonance et à l'antirésonance du mode fondamental de vibration en épaisseur.

La figure (II.12.a) représente le champ de déplacement mécanique de la structure FBAR à la fréquence de résonance du mode épaisseur (le mode fondamental), la figure (II.12.b) représente le champ de déplacement mécanique à l'antirésonance, où on observe l'apparition de résonances localisées le long de la structure, les deux figure de champ de déplacement montre un profil de vibration symétrique par rapport au plan médiateur passant par $z=0.86 \mu\text{m}$ justifiant la vibration en mode épaisseur symétrique de la structure.

A la résonance un seul ventre de vibration apparait sur la structure (Figure (II.12.a), à gauche) tandis qu'à l'antirésonance on est en présence de (9) ventres parasites en plus du mode fondamental de vibration en épaisseur (Figure (II.12.b), à gauche), dans la structure.

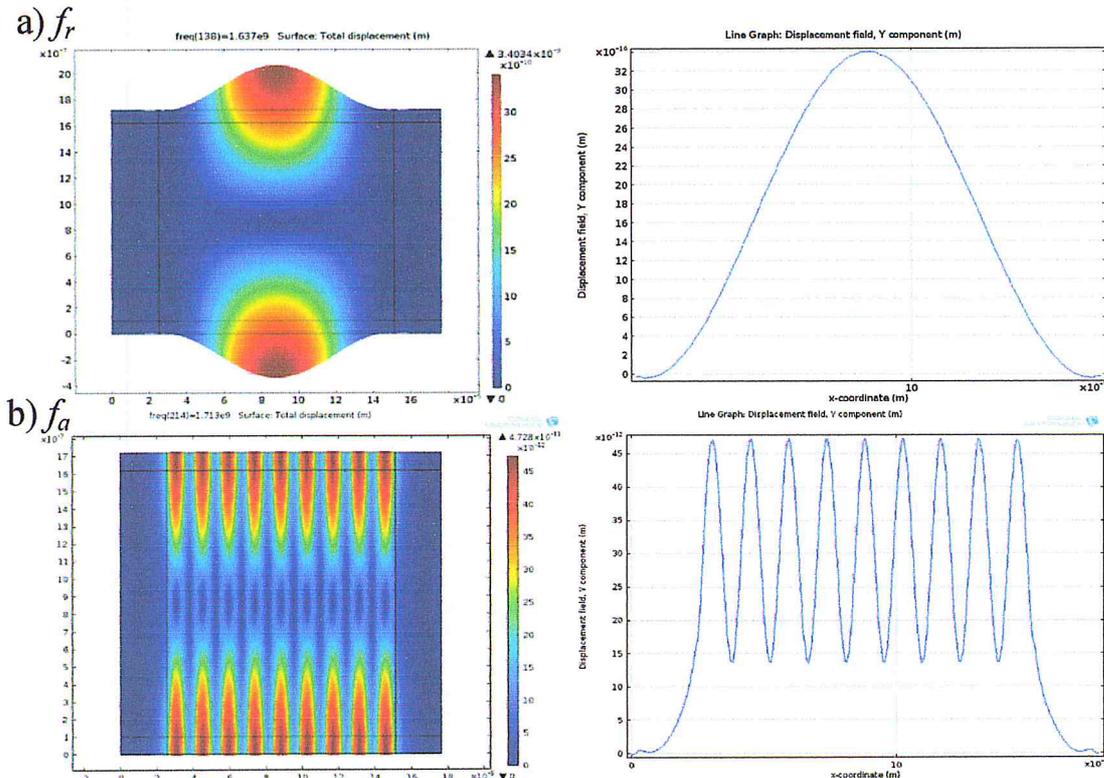


Figure (II.12): (à gauche)-Les deux modes de vibration de la structure à la résonance et à l'antirésonance et (à droite)-Le déplacement mécanique $u_z(x)$ à la surface libre de l'électrode supérieure, a) à la résonance et b) à l'antirésonance.

Conclusion

La méthode des éléments finis est devenue un outil incontournable pour décrire les phénomènes complexes soumis à des situations compliquées de conditions aux limites telle que la simulation du comportement électromécanique des FBARs. Nous avons présenté dans ce chapitre les étapes de conception et de la modélisation d'une structure FBAR 2D en utilisant l'outil Comsol Multi-physique, cette simulation nous a permis de reproduire fidèlement le comportement réel de la structure FBAR en imposant des conditions aux limites ressemblant à celles utilisées dans la réalité.

La réponse électromécanique de la structure FBAR simulée semble être perturbée par des pics parasites dans la gamme de son excitation (entre la fréquence de résonance et la fréquence de l'antirésonance). Ces perturbations apparaissent comme des résonances localisées sur la structure (champ de déplacement mécanique) et elles sont traduites par des pics qui s'ajoutent à la réponse électrique du modèle unidimensionnel de Masson [56]. Ces pics parasites sur la courbe de l'admittance électrique sont dus à l'établissement d'ondes stationnaires latérales le long de la structure, qui viennent

perturber l'excitation du mode épaisseur. La courbe représentative du facteur de qualité nous a renseignés sur les performances et sur le rendement de notre résonateur.

Dans le chapitre qui suit, nous allons proposer une méthode d'élimination de ces parasites par l'utilisation des électrodes structurées régulièrement (sous forme d'un cristal phononique) afin de bloquer la propagation du mode latéral responsable de ces parasites.

CHAPITRE (III) :

**ETUDE DE LA REPONSE
ELECTROMECHANIQUE DU RESONATEUR
"FBAR" EN ABSENCE ET EN PRESENCE
DES CRISTAUX PHONONIQUES**

Introduction

L'un des problèmes majeur dans les technologies BAWs est l'apparition des résonances parasites indésirables sur la réponse électrique (impédance électrique d'entrée) du résonateur. Ces pics parasites sont dus principalement à l'établissement d'ondes stationnaires issues de la propagation des modes latéraux de Lamb. Ces pics sont souvent des parasites et contribuent à la dégradation des performances électriques des résonateurs [57].

Plusieurs solutions sont imaginées et proposées dans la littérature, parmi lesquelles on cite; l'*apodization* qui consiste à donner une région actives du résonateur avec des périphéries non parallèles [58, 59] une deuxième solution est l'utilisation des périphéries latérales absorbantes [60, 61] qui ne laissent exciter que le mode électrique principale généré par la vibration acoustique du mode épaisseur. Nous proposons dans ce chapitre l'utilisation des structures périodiques sous forme de réflecteurs de Bragg pour interdire la propagation du mode acoustique latéral de Lamb (parasite). Le réseau périodique de géométrie bien déterminée est déposé sur l'électrode supérieure de la structure.

Le but de l'utilisation des cristaux phononiques est la création d'une bande fréquentielle où on interdit un ou plusieurs modes de vibration, cette gamme de fréquences est fortement liée aux dimensions (la longueur et la hauteur et à la périodicité) des réflecteurs de Bragg. Ces paramètres géométriques sont choisis de telle sorte que la bande fréquentielle interdite créée par ces réflecteurs coïncide avec la gamme de fréquence d'apparition des modes de Lamb parasites. Toute en gardant le mode de vibration en épaisseur.

III. Définition de l'onde de Lamb

Lorsque une onde acoustique se propage dans une structure sous forme de plaque (Figure (III.1)), des modes d'onde appelés "modes de Lamb " apparaissent, ces derniers sont générés par le couplage entre les ondes de surface qui se propagent sur chaque côté libre de la plaque. Ce couplage aurait lieu lorsque la longueur de l'onde surface devient du même ordre que l'épaisseur de la plaque [62]. Le caractère de l'onde de Lamb dans une plaque est dispersif

III.1. Modes de Lamb dans une structure FBAR

Il existe trois modes symétriques de Lamb (TS_0 , TS_2 et TE_1) (Figure (III.1)) qui peuvent apparaître dans la structure du résonateur FBAR lors de l'excitation extérieure par champ électrique externe. Ceci est dû au type d'excitation utilisée où la charge électrique appliquée est uniformément répartie sur la surface de l'électrode. De ce fait, le champ électrique est uniforme dans la couche piézoélectrique et par conséquent, les modes antisymétriques bien qu'il existe dans toute structure sous forme de plaque, ils ne peuvent pas être générés piézoélectriquement dans le cas des FBAR [63].

Le mode noté (TS_0) représente le mode symétrique d'ordre 0, il apparaît depuis les très basses fréquences ($f=0$ Hz). Il présente un cisaillement en épaisseur d'ordre 0 (déplacement mécanique horizontal) (Figure (III.1)).

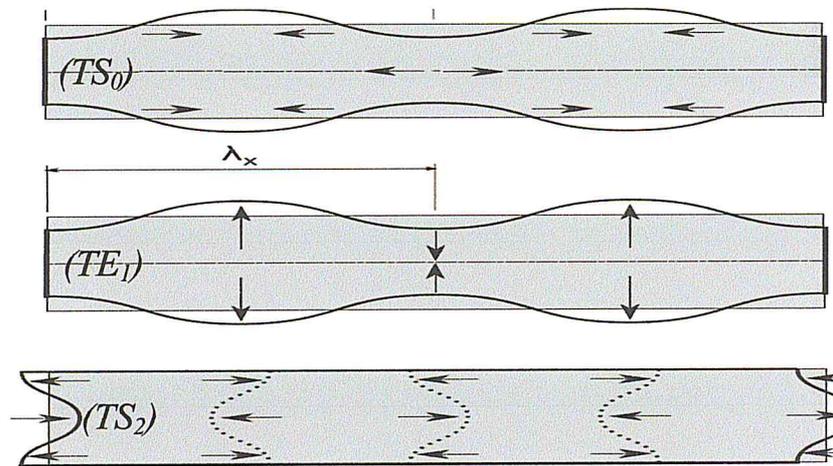


Figure (III.1) : Trois modes symétriques de Lamb TS_0 , TS_2 et TE_1 dans les structures FBAR [63].

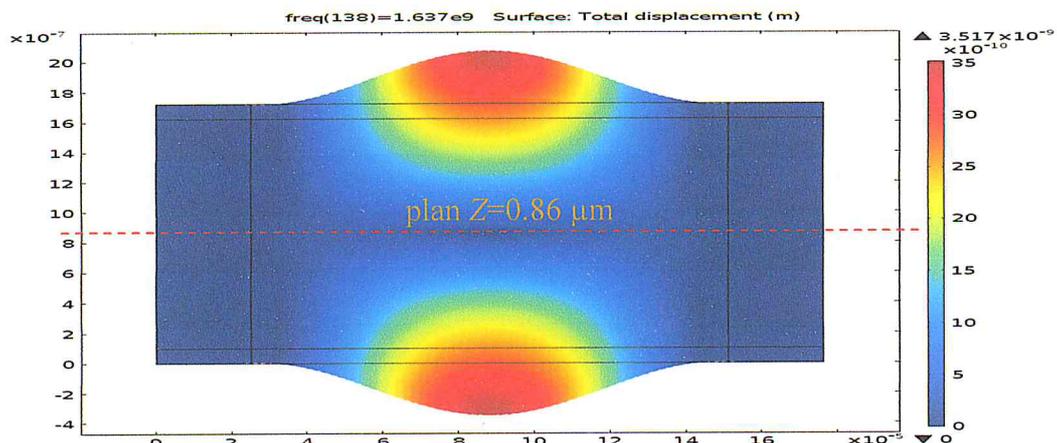


Figure (III.2) : Mode de Lamb (TE_1) symétrique (par rapport au plan $z=0.86 \mu\text{m}$), exposant à la fréquence de résonance.

Le mode note (TS_2) correspond à un cisaillement en épaisseur d'ordre 2 (TS pour *Thickness Shear mode*).

Le troisième mode indexée par (TE_1) pour (*Thickness Extensionnel mode*) est un mode d'extension en épaisseur d'ordre 1. Le mode (TE_1) dans les deux cas de dispersion (type 1 ou type 2) présente une fréquence à ($k_x=0$) qui coïncide avec la fréquence de résonance f_r de la structure FBAR [67].

III.2. L'effet de mode parasite sur la réponse électrique

La figure (III.3) montre la variation de l'amplitude de l'admittance électrique (en décibel) en fonction de la fréquence de l'excitation électrique.

Les résonances parasites sur la figure (III.3) sont apparues après la fréquence de résonance du mode fondamental, donc on peut dire que la dispersion est de type (1). Ces résonances ont une polarité inversée par rapport au mode épaisseur fondamental.

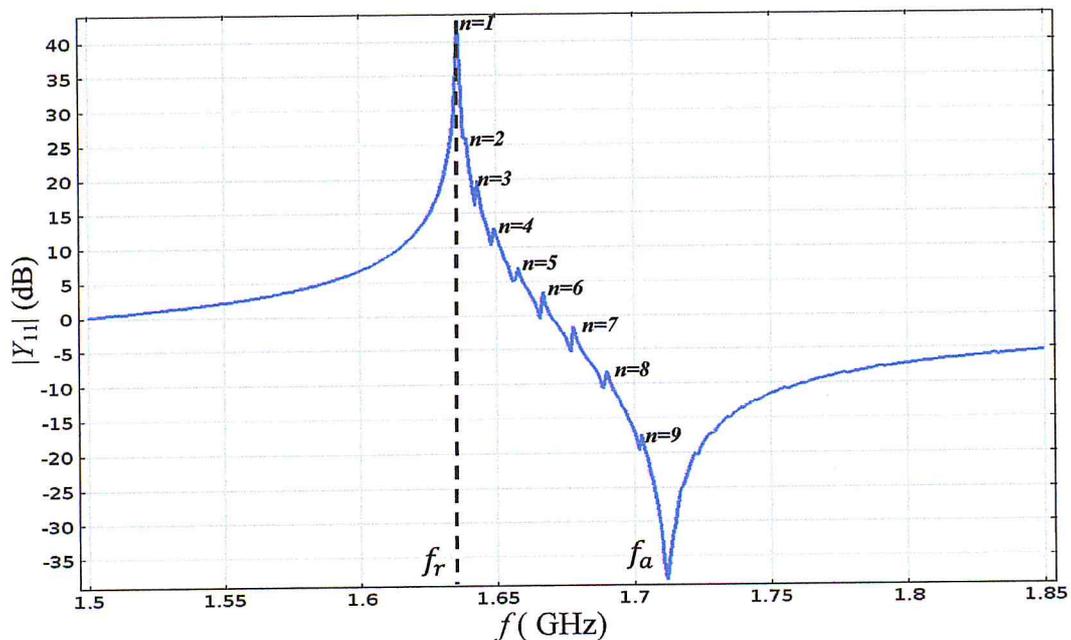


Figure (III.3) : L'amplitude de l'admittance électrique d'entrée de la structure Mo/ZnO/Mo.

Le tableau (III.1) récapitule les valeurs des fréquences des résonances et des antirésonances de tous les pics figurant dans l'admittance. On remarque que le nombre de mode augmente avec la fréquence de l'excitation électrique, l'écart entre la fréquence de résonance et la fréquence de l'antirésonance de chaque mode parasite ($f_r - f_a$) reste presque constant à 0.001 GHz, par contre l'écart pour le mode épaisseur fondamental est

$(f_a - f_r) = 0.76$ GHz. A partir des fréquences (f_r , et f_a) du mode fondamental on peut calculer par le biais de la relation (III.3) la valeur de coefficient de couplage électromécanique du matériau ZnO pour l'épaisseur $h_p=1.52$ μm , après le calcul on obtient $K^2_{eff} = 0.1123$, soit (11.23 %) de l'énergie électrique est transformé en énergie mécanique.

Tableau (III. 1): Les fréquences de résonance et de l'antirésonance de mode épaisseur fondamental et des modes transverses parasites.

	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$	$n=7$	$n=8$	$n=9$
$f_r(\text{GHz})$	1.637	1.639	1.643	1.65	1.658	1.667	1.678	1.69	1.704
$f_a(\text{GHz})$	1.712	1.638	1.642	1.648	1.656	1.666	1.677	1.689	1.702

Le tableau (III. 2) donne les valeurs des amplitudes de l'admittance électrique relatives aux fréquences de résonance et d'antirésonance listés dans le tableau précédent. L'amplitude de l'admittance à la fréquence de résonance de mode fondamental est très grande par rapport l'amplitude à la fréquence de l'antirésonance ($(|Y|_{f_r} - |Y|_{f_a}) = |Y|(n_1) = 2.385(S)$), par contre la variation ($(|Y|_{f_r} - |Y|_{f_a})$) pour les mode parasite elle est très faible, par exemple l'amplitude du deuxième mode ($n=2$) $|Y|(n_2)=0.03(S)$, et l'amplitude du neuvième mode ($n=9$) $|Y|(n_9)=0.0021(S)$. Ceci montre que le facteur de qualité des modes parasites est largement inférieur au facteur de qualité du mode épaisseur.

Le nombre de pics parasites est donné par le nombre de ventres qui peuvent être établis suivent la direction latérale dans la gamme de fréquence où l'étude est effectuée.

Tableau (III. 2): L'amplitude de l'admittance électrique la fréquence de résonance et de l'antirésonance pour tous les modes.

	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$	$n=7$	$n=8$	$n=9$	$n=10$
$ Y (f_r)(S)$	2.385	0.34	0.16	0.07	0.04	0.022	0.014	0.006	0.003	0.002
$ Y (f_a)(S)$	0.0003	0.31	0.1	0.05	0.023	0.013	0.007	0.004	0.0009	0.0007

La courbe de la figure (III.3) se caractérise par deux fréquences intéressantes La fréquence de résonance et de l'antirésonance du mode fondamental, ces deux fréquences permettent d'étudier le comportement électrique de résonateur FBAR. L'origine de ces fréquences est totalement différent, telle que:

La fréquence de l'antirésonance électrique du mode épaisseur fondamental a une origine purement acoustiques [64, 65], car elle dépend principalement de la géométrie de la structure, plus précisément de l'épaisseur de la couche piézoélectrique (Figure (III.4)) telle que:

$$f_a = \frac{v_p}{2d} \quad (III.1) \quad \text{et} \quad d = \frac{\lambda}{2}, \quad (III.2)$$

d est l'épaisseur de la couche piézoélectrique, v_p est la vitesse de phase de l'onde longitudinale (dans la direction de l'épaisseur) et λ la longueur d'onde correspondante.

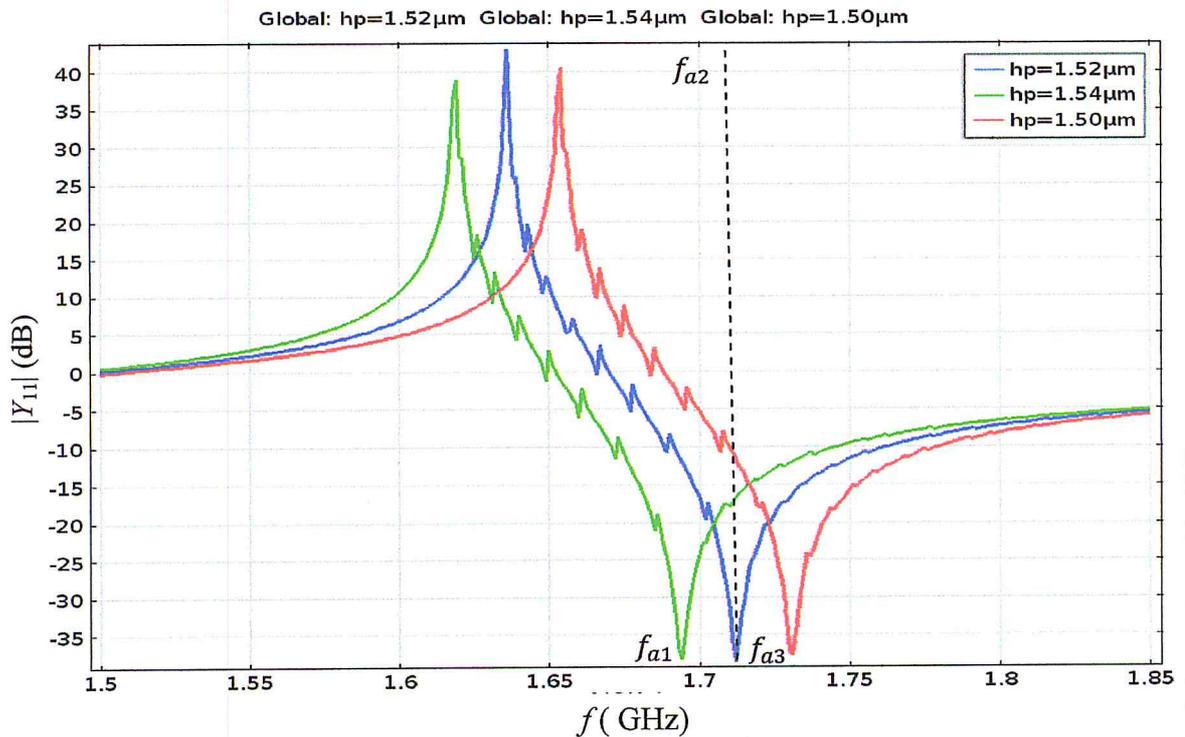


Figure (III.4) : L'influence de l'épaisseur du ZnO sur la fréquence de l'antirésonance.

Tableau (III.3): Valeurs des fréquences d'antirésonance pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche piézoélectrique.

h_p (μm)	1.50	1.52	1.54
f_a (GHz)	1.728	1.712	1.687

La fréquence de résonance électrique du mode fondamental est liée à la fréquence de l'antirésonance et à la constante de couplage électromécanique du matériau piézoélectrique par le biais de la relation :

$$K^2_{eff} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(1 - \frac{f_r}{f_a}\right) \quad (III.3)$$

$$\text{Soit; } f_r = f_a \left(1 - K_{eff}^2 \left(\frac{\pi}{2} \right)^{-2} \right), \quad (\text{III.4})$$

K_{eff}^2 est le coefficient de couplage électromécanique du matériau piézoélectrique.

III.3. Influence de la longueur de la structure sur les modes parasites et sur le coefficient de couplage électromécanique

Dans cette simulation, les épaisseurs de la couche piézoélectrique et des électrodes sont fixés respectivement à 1.52 μm , 0.1 μm , la longueur du FBAR est variée dans chaque simulation.

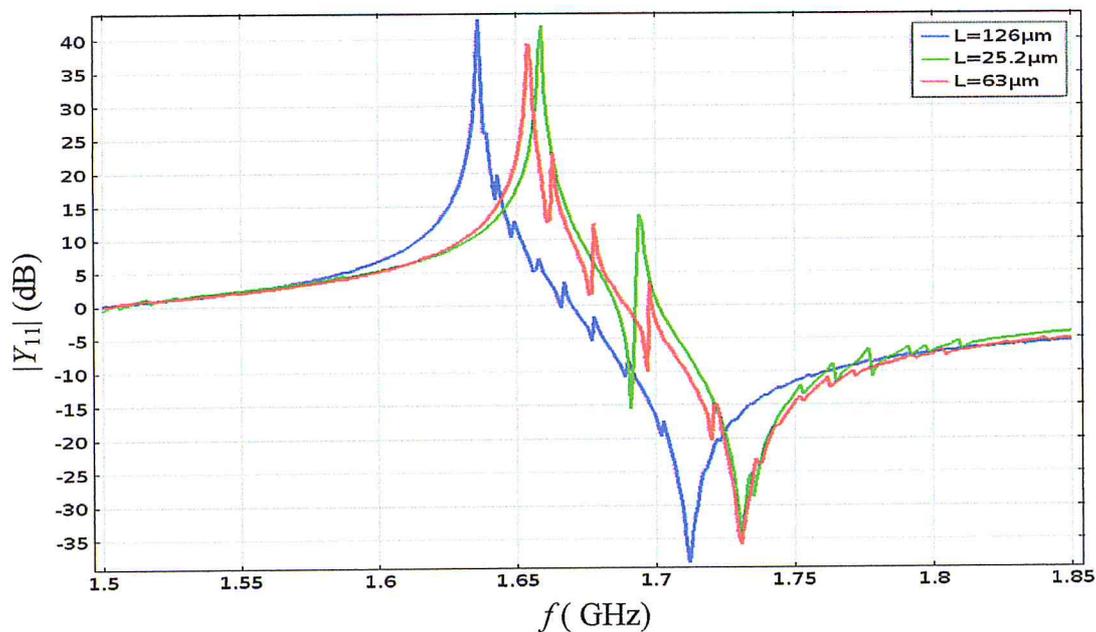


Figure (III.5) : les résonances parasites pour différent longueur de résonateur.

La figure (III.5) montre l'influence de la longueur du FBAR sur les résonances parasites (leurs nombre et leurs amplitudes). Il est claire de cette figure que l'augmentation de la longueur de la structure fait augmenter le nombre des résonances parasites toute en diminue, aux leurs amplitudes pour une longueur de $L=25.2\mu\text{m}$ on remarque l'apparition d'une seul résonance parasite entre f_r et f_a sur la courbe de l'amplitude de l'admittance. Son amplitude est de ~ 16 dB, pour $L=126\mu\text{m}$ le nombre de résonances parasites augmente jusqu' à huit (8) modes, on constate aussi une diminution de la valeur de l'amplitude de chaque résonance parasite qui sont de l'ordre de ~ 1.5 dB.

Le tableau (III.4) montre les valeurs des fréquences f_r et f_a du mode épaisseur ainsi que la valeur du coefficient de couplage électromécanique correspond à chaque

mode. Le meilleur facteur de couplage correspond à valeur de L la plus grande à cause de l'atténuation et modes parasites.

Tableau (III.4): Influence de la longueur de structure du FBAR sur la réponse électrique.

L (μm)	25.2	63	126
nombré des modes parasites	1	4	8
f_r	1.659	1.654	1.636
f_a	1.731	1.73	1.712
K_{eff}^2	10.39%	10.98%	11.23%

III.4. Effet de l'épaisseur des électrodes sur la réponse électrique

Considérons le cas d'une structure FBAR résonante composée d'une couche piézoélectrique (ZnO d'épaisseur $h_p=1.52\mu\text{m}$) insérée entre deux couches métalliques en Molybdène formant les deux électrodes (inferieure et supérieure) de même épaisseur h_e , dans cette étude les paramètres géométriques h_p et L , sont fixes respectivement à $1.52 \mu\text{m}$ et $126.8 \mu\text{m}$. Et on varie la valeur de h_e pour chaque simulation.

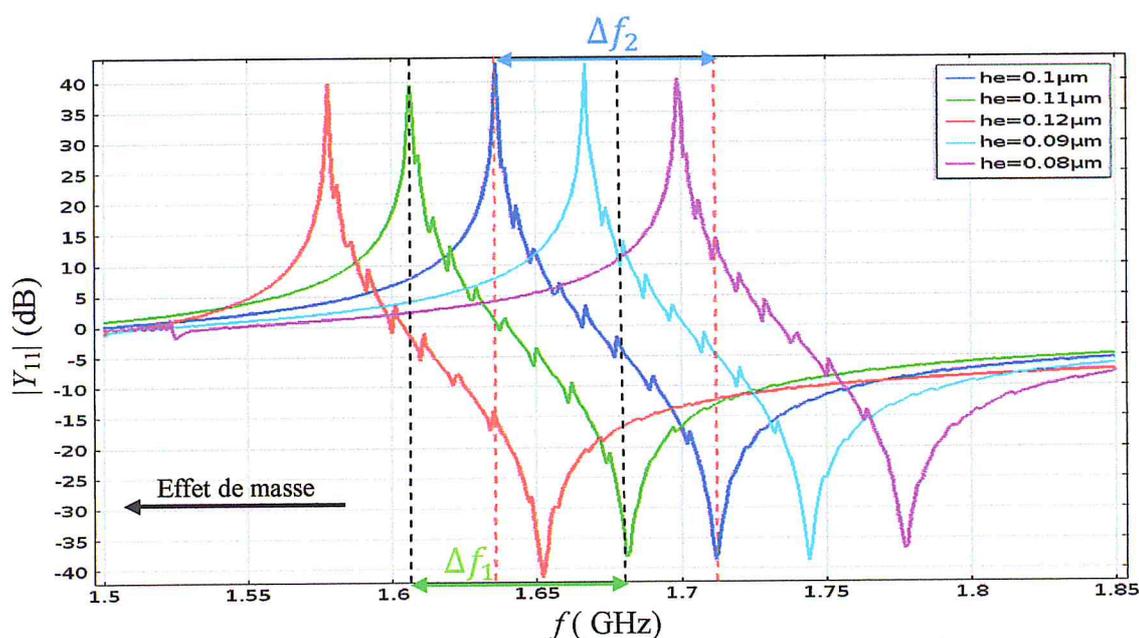


Figure (III.6) : Influence de l'épaisseur des électrodes sur la fréquence de résonance et d'antirésonance du mode épaisseur fondamentale.

La figure (III.6) montre qu'au fur et à mesure que l'épaisseur des couches constituant les électrodes augmente la réponse électrique shift vers les basse fréquences

et par conséquence les valeurs des fréquences de résonances et d'antirésonance diminuent davantage, ceci est dû à l'effet de masse exercé par le Molybdène sur le résonateur, il a pour effet d'alourdir le mouvement de vibration.

On remarque également que pour toutes les valeurs de h_e l'écart entre la fréquence de résonance et la fréquence de l'antirésonance de mode fondamental reste inchangée, par exemple ($\Delta f_2 = \Delta f_1$), on déduit donc la valeur du coefficient de couplage électromécanique qui ne varie pas sous l'effet de masse.

Tableau (III. 5): La fréquence de résonance et de l'antirésonance pour différent valeur de h_e .

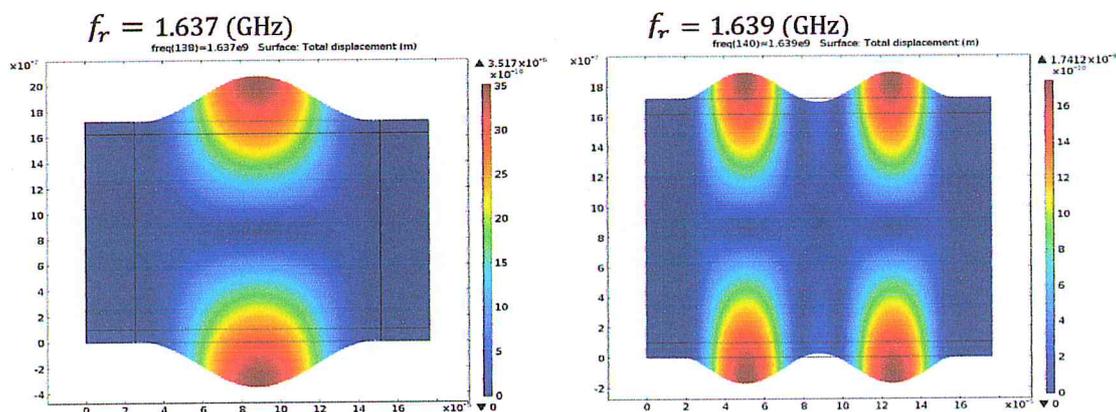
h_e (μm)	0.08	0.09	0.1	0.11	0.12
f_a (GHz)	1.775	1.743	1.712	1.679	1.651
f_r (GHz)	1.7	1.668	1.637	1.604	1.576
K^2_{eff}	11.23%	11.23%	11.23%	11.23%	11.23%

III.5. Réponse mécanique du résonateur FBAR

La réponse mécanique de résonateur piézoélectrique est évaluée par le champ de déplacement mécanique des particules constituant la structure FBAR, on peut aussi visualiser les modes de vibration (fondamentale et parasite) qui sont générés dans la structure.

III.6. Modes de vibration mécanique aux fréquences remarquables

La figure (III.7) présente les modes de vibration de la structure FBAR aux différentes fréquences de résonance observées sur la courbe de l'admittance électrique donné dans la figure (III.3) (fondamental et parasites superposé).



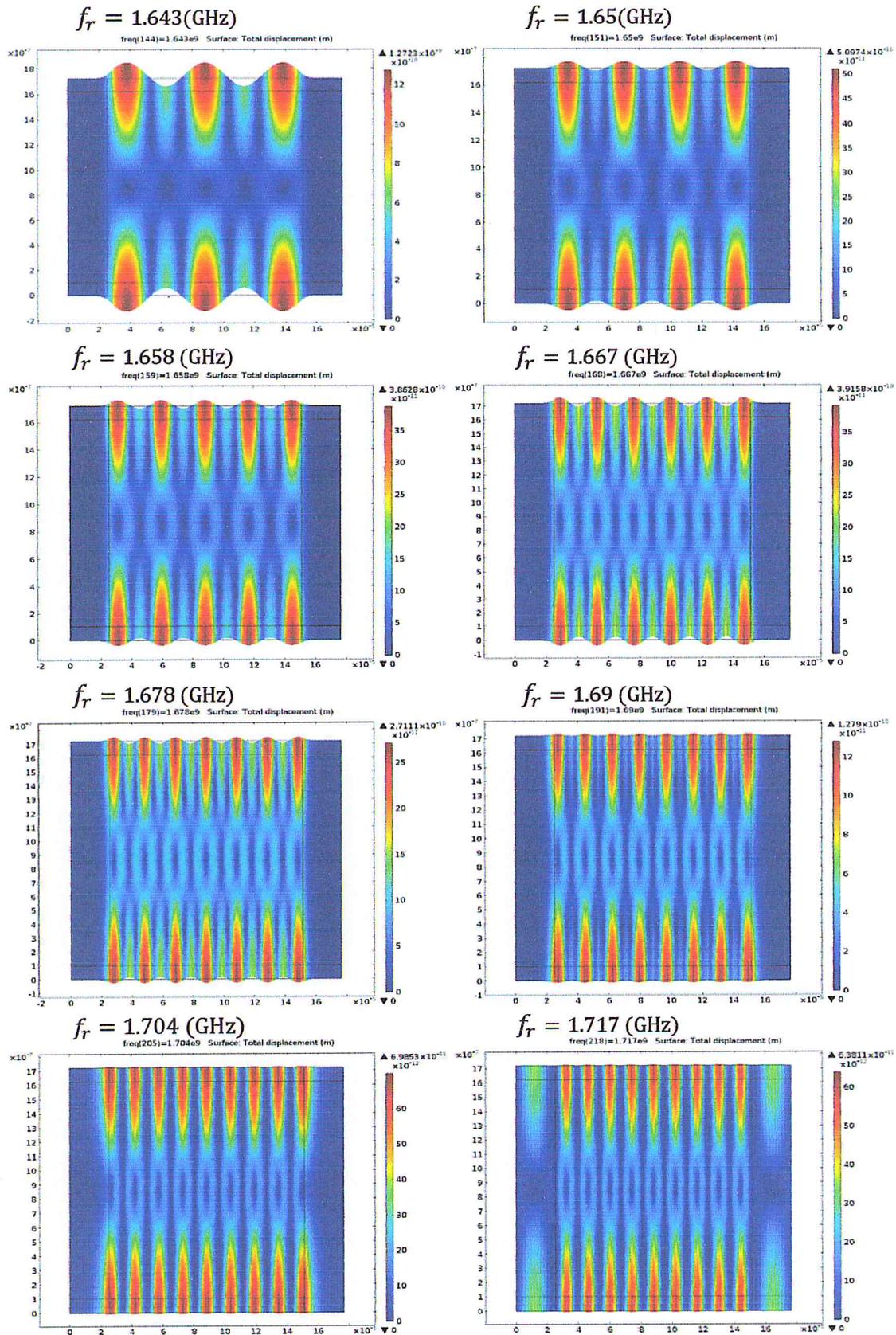


Figure (III.7) : Modes de vibration de la structure aux différentes fréquences de résonances (fondamental et parasites).

La figure (III.7) montre que le premier mode de vibration en épaisseur de la structure est apparu à la fréquence de résonance de 1.637 GHz (c'est le mode de vibration fondamental, correspond à un ventre). Lorsque la fréquence augmente, le nombre de mode de vibration parasites augmente. Le déplacement mécanique total à la surface libre de l'électrode supérieur est maximal aux milieux de chaque ventre, et le déplacement mécanique longitudinal de la surface libre de l'électrode supérieur nulle. On remarque que le champ de déplacement mécanique est nulle sur le plan médiateur passant par $z=0.86\mu\text{m}$, et le champ de déplacement total sur la structure symétrique par rapport le plan $z=0.86\mu\text{m}$. Les modes de vibration parasites sont générés par les interférences des ondes acoustiques transversales réfléchies sur les bords de la structure ou l'encastrement est appliqué, et le mode de vibration fondamental est généré par la propagation de l'onde acoustique longitudinale dans la direction de l'épaisseur.

III.6.1. Déplacement mécanique u_z

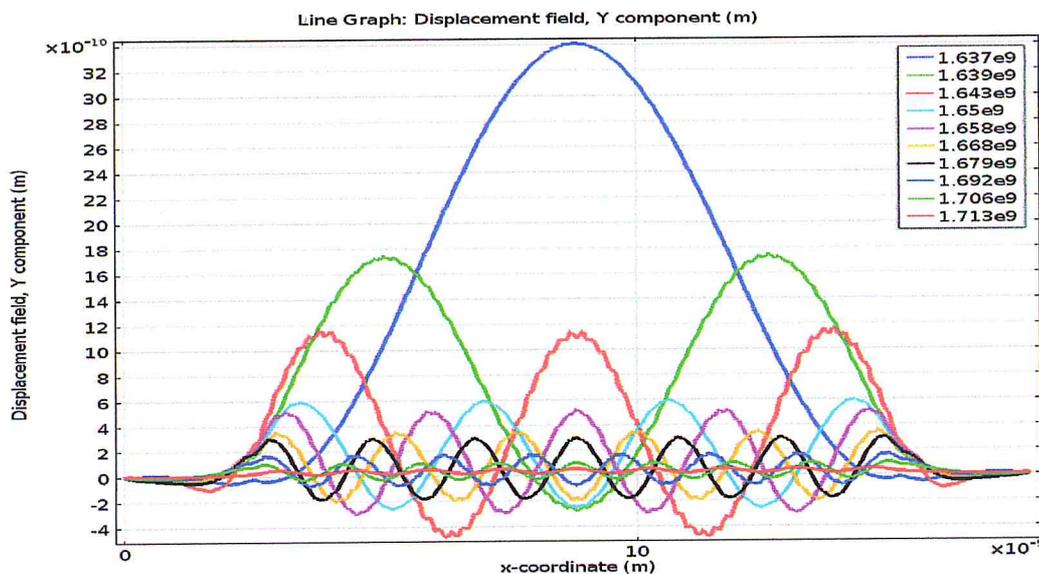


Figure (III.8) : L'amplitude du déplacement mécanique vertical à la surface libre de l'électrode supérieure $u_z(x)$ à la fréquence de résonance des modes figurant sur la réponse électrique.

La figure (III.8) montre l'amplitude du déplacement mécanique vertical u_z à la surface libre de l'électrode supérieur, distribuée sur la longueur de la structure, à des fréquences de résonances (de mode fondamental et des modes parasites). Ces courbes sont obtenues en faisant une coupe linéaire dans Comsol (*cut line*) sur la surface libre du

FBAR. Le déplacement mécanique à la surface libre de l'électrode supérieur (à la résonance électrique $f_r = 1.637$ GHz) est maximale, il est de l'ordre de 3.51 nm, alors qu'à l'antirésonance électrique ($f_a = 1.712$ GHz) il est minimal, de l'ordre de 35 pm. Ces comportements mécaniques inversés s'appliquent également aux comportements électriques à ces fréquences (admittance maximal et minimal à f_r et f_a respectivement). Entre la résonance et l'antirésonance le nombre de ventre augmente et leurs amplitudes diminuent en se rapprochant de f_a .

Le résonateur FBAR, à la résonance du mode épaisseur fondamental se comporte comme un court-circuit (admittance maximal et déplacement mécanique maximal), et à l'antirésonance il se comporte comme un circuit ouvert (admittance minimal et déplacement minimal).

Tableau (III. 6): Les valeurs de l'amplitude du déplacement mécanique u_z max de chaque mode.

	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$	$n=7$	$n=8$	$n=9$
u_{za} (nm)	$35 \cdot 10^{-3}$	3.24	1.24	0.58	0.36	0.3	0.21	0.14	0.009
u_{zr} (nm)	3.51	1.74	1.27	0.5	0.38	0.39	0.27	0.13	0.007

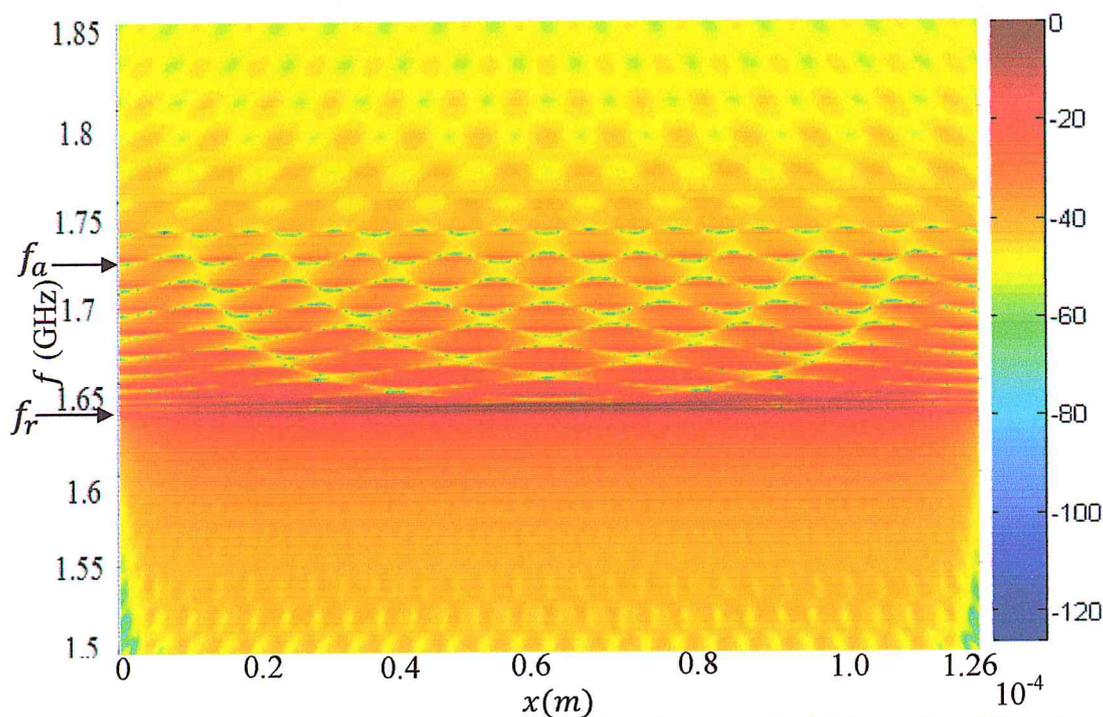


Figure (III.9): Champ de déplacement mécanique vertical à la surface libre du résonateur Mo/ZnO/Mo.

La figure (III.9) présente le champ de déplacement mécanique $u_z(x, f)$, où chaque ligne horizontale sur la courbe présente l'amplitude du déplacement verticale en fonction de la position le long de la surface libre du résonateur. De cette figure, il est clair que le profil du déplacement le plus large (un ventre de vibration latérale le long de la structure) est obtenu à la fréquence de résonance électrique $f_r = 1,637$ GHz avec l'amplitude la plus grande ($\sim 3,51$ nm prise comme référence correspondant à 0 dB).

Au fur et à mesure que la fréquence augmente, des résonances parasites locales apparaissent dans le champ du déplacement après la fréquence de résonance, avec des amplitudes de plus en plus petites en fonction de la fréquence. Ces résonances parasites sont dues à l'établissement d'ondes stationnaires latérales (harmoniques d'ordre supérieur) dans la structure.

La condition d'établissement d'onde acoustique transversal

$$L = n \frac{\lambda_t}{2} = n \frac{v_t}{2f}, \quad (\text{III.5})$$

λ_t et v_t sont respectivement la longueur d'onde et la vitesse de phase de l'onde transversal à la fréquence.

III.7. Courbe de dispersion

Afin de déterminer les longueurs d'onde pouvant se propager à chaque fréquence, le spectre $u_z(k_x)$ du déplacement mécanique vertical dans le domaine du nombre d'onde est calculé par la transformée de Fourier rapide (FFT) sur $u_z(x)$. La relation de dispersion des modes de Lamb est obtenue par calcul de $u_z(k_x)$ à chaque fréquence dans la gamme allant de [1.5 à 1.85] GHz. Les modes de dispersion sont visualisés par le niveau de brillance du module $|u_z|$ dans le plan (k_x, f) .

Nous montrons dans la figure (III.10) l'amplitude $|u_z|$ du déplacement mécanique calculé dans le plan (k_x, f) . Trois branches de dispersion sont apparues dans le champ de déplacement, ces courbes correspondent à la relation de dispersion des modes de Lamb. Mais dans ce cas, seuls les modes symétriques (TS_0) , (TS_2) et (TE_1) (par rapport au plan $z=0.86\mu\text{m}$) sont générés par l'effet piézoélectrique.

Les modes (TS_0) et (TS_2) sur la courbe de dispersion apparaissent depuis les très basses fréquences [66] par contre le mode (TE_1) ne commence à apparaître qu'à la fréquence de coupure correspondant à la fréquence de résonance $f_r=1.637$ GHz ici $k_x=0$

correspond à $\lambda = \infty$ ici les deux surfaces libre du FBAR vibrent parallèlement. Lorsque f augment k_x augmentent et λ diminue, à $f=f_a$ et $k_x=0.49$ [rad/ μm] donnant ainsi une longueur d'onde $\lambda_t = \frac{2\pi}{0.495} = 12.68 \mu\text{m}$ qui se propage a l'antirésonance.

On assiste ainsi une dispersion de type (I) [67]. Dans le cas contraire, où la fréquence de coupure du mode (TS_2) est supérieure à la fréquence de coupure du mode (TE_1), comme c'est le cas du Nitrure d'Aluminium (AlN) [68], on assiste une dispersion de type (II). Le type de dispersion dans une plaquette dépend principalement du rapport entre les deux vitesses transversale et longitudinale et liée directement au coefficient de Poisson du matériau [69].

La troisième branche, indexée par (TE_1) sur la figure (III.10). Cette branche de Lamb présente une fréquence de coupure qui coïncide avec la fréquence de résonance de mode fondamental $f_r=1.636$ GHz.

Au lieu que toute l'énergie mécanique générée par l'effet piézoélectrique soit destinée à l'excitation du mode épaisseur, ces modes de résonances latérales parasites vont consommer une partie de cette énergie et provoquer la dégradation des performances du résonateur.

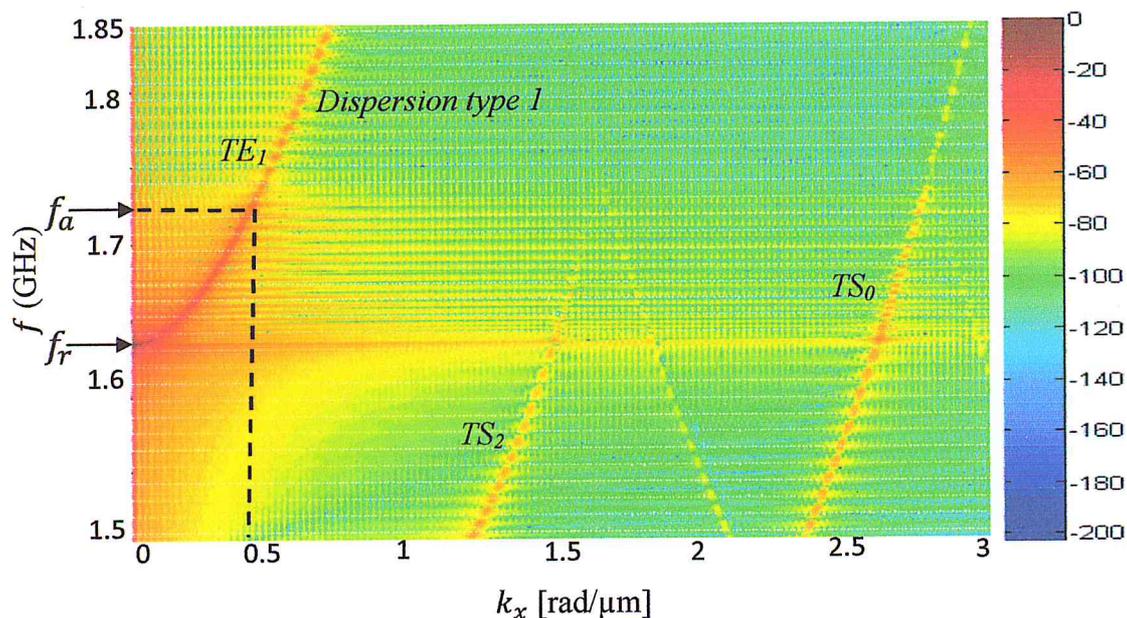


Figure (III.10) : La courbe de dispersion de la structure Mo/ZnO/Mo obtenue par FFT.

La branche (TS_2) apparaît sur la courbe de dispersion avant le mode (TE_1).

III.8. Structure FBAR avec les réflecteurs de Bragg

Dans la structure précédente les résonances parasites provoquent des pertes d'énergie mécanique dans le résonateur FBAR. Afin d'améliorer les performances de FBAR nous proposons ici une nouvelle structure pour supprimer les résonances parasites transversales et diminue les pertes de l'énergie mécanique dans les modes latéraux.

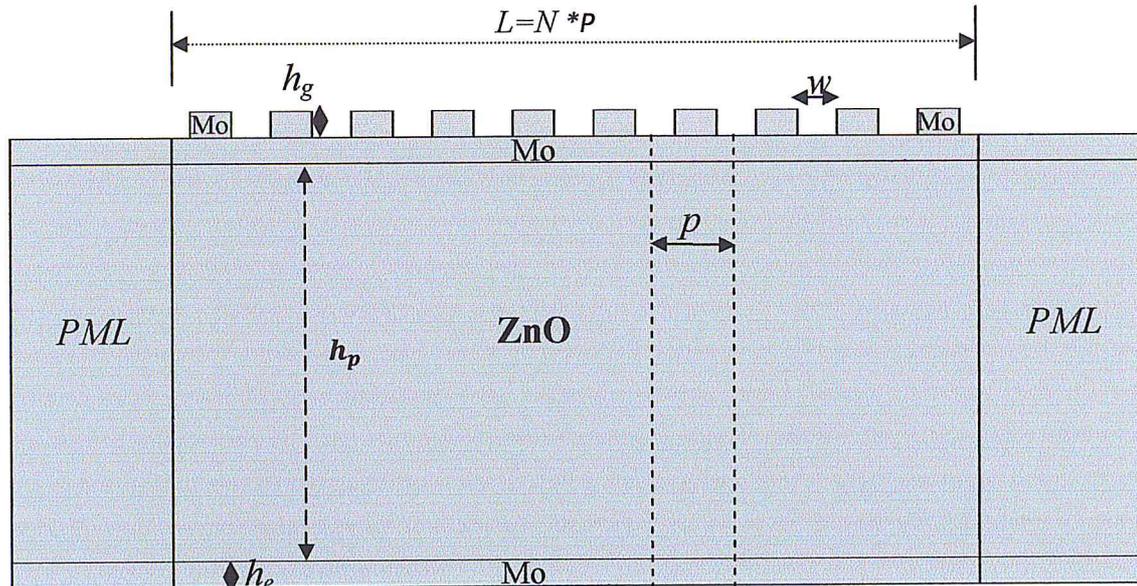


Figure (III.11) : Structure FBAR avec réseau phononique.

La figure (III.11) représente la même structure précédente mais avec un dépôt supplémentaire des structures périodiques (réseau phononique) sur l'électrode supérieure de FBAR. On définit les paramètres géométriques tels que la longueur de la période p , la distance entre les structures périodiques $w=p/2$, la hauteur du réseau h_g . L'étude par MEF est effectuée par Comsol

Dans cette simulation, l'analyse harmonique et dans le domaine fréquentielles toujours allant de 1.5 à 1.85 GHz, la tension V est appliquée entre les électrodes (supérieure et inférieure). La structuration périodique joue le rôle des réflecteurs de Bragg qui contrôle la propagation des ondes acoustiques latérales et par conséquent le mode (TE_1) parasite de Lamb.

III.9. Optimisation des paramètres géométriques des réflecteurs de Bragg

III.9.1. Optimisation de la période p

Dans cette étude on cherche à retrouver les bonnes valeurs des paramètres géométrique pour la longueur de la période p . On fixe les autres paramètres tel que:

h_e, h_g, h_p et L , leurs valeurs sont $0.1 \mu\text{m}$, $0.1 \mu\text{m}$, $1.52 \mu\text{m}$ et $126.8 \mu\text{m}$ respectivement, le paramètre p est balayé de telle sorte que le produit $N \cdot p = L = \text{cte}$.

La figure (III.12) montre l'influence de longueur de la périodicité p sur les résonances parasites. On remarque que les résonances parasites ne sont pas bien éliminés pour $p=6.34 \mu\text{m}$ et pour $p=15.85 \mu\text{m}$, car ces valeurs de p ne correspondent pas à la bonne périodicité qui permet d'éliminer tous les modes parasites. Par contre à la valeur $p=12.68 \mu\text{m}$ on obtient une courbe plus lisse ou tous les modes parasites sont éliminés totalement.

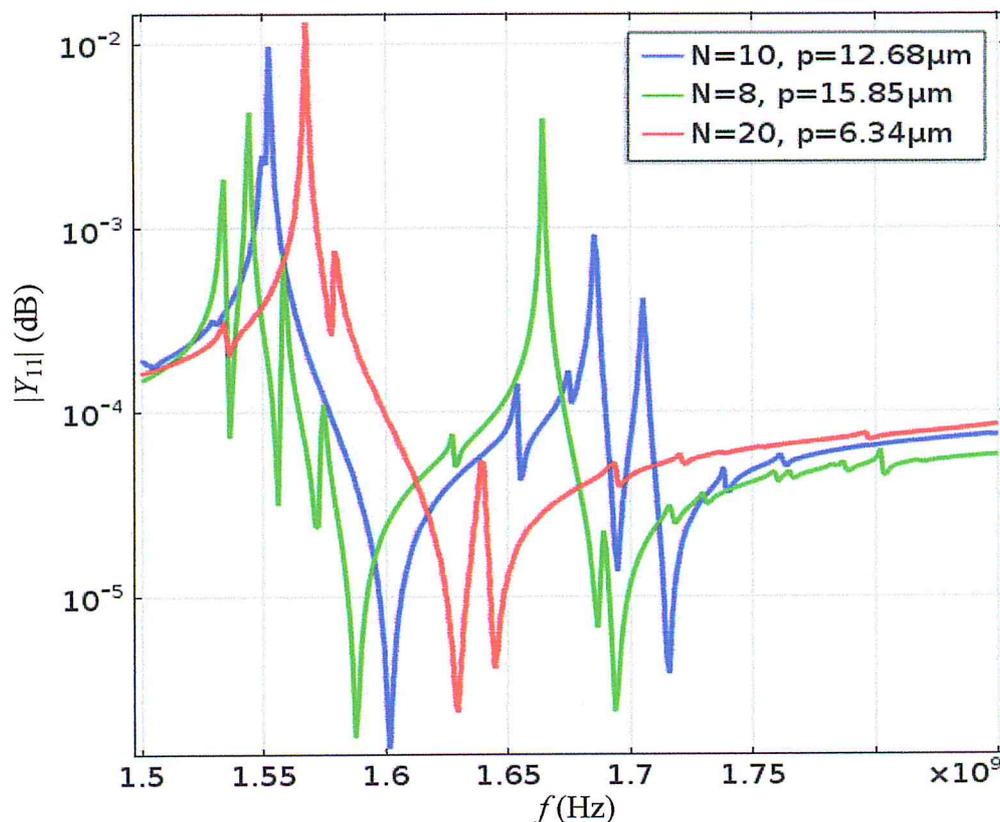


Figure (III.12) : L'amplitude de l'admittance électrique pour différents longueurs de la périodicité p .

III.9.2. Optimisation de l'épaisseur du réseau

La figure (III.13) montre la réponse électrique du résonateur FBAR pour différentes épaisseurs de la structure périodiques déposée sur l'électrode supérieure. D'après cette figure on peut constater que la meilleure réponse électrique du résonateur est obtenue pour une hauteur du réseau de l'ordre de $0.1 \mu\text{m}$.

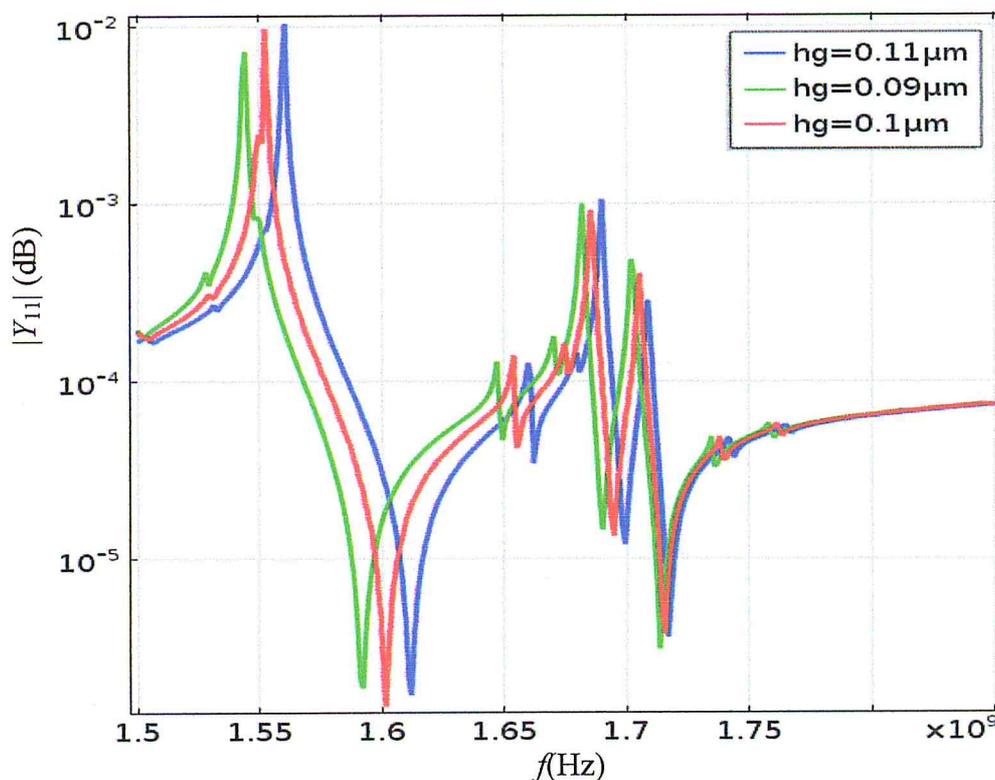


Figure (III.13) : Influence de l'épaisseur du réseau sur la réponse électrique.

III.10. L'effet du réseau phononique sur la réponse mécanique

La figure (III.14), à gauche montre l'influence des cristaux phononiques (CP) (cristal phononique) sur le mode de vibration fondamental: (a) à la fréquence de résonance et (b) à la fréquence de l'antirésonance. On remarque que le mode de vibration fondamental à la résonance électrique change totalement par rapport au mode de vibration fondamental de la structure sans réseau.

La figure (III.14), à droite montre l'effet des réflecteurs de Bragg sur l'amplitude de déplacement mécanique à la surface libre, du FBAR (a) à la fréquence de résonance et (b) à l'antirésonance. Par rapport à la structure précédant, le profil de déplacement mécanique change. L'amplitude maximale de déplacement mécanique u_z subit une légère augmentation par rapport à la structure précédente sans (CP) de 3.51 nm à 5.3nm, elle augmente également à l'antirésonance électrique de 35 pm à 75 pm. L'amplitude du déplacement mécanique aux extrémités latérales de la structure FBAR est nulle ceci due à l'encastrement (*Fixed Constraint*).

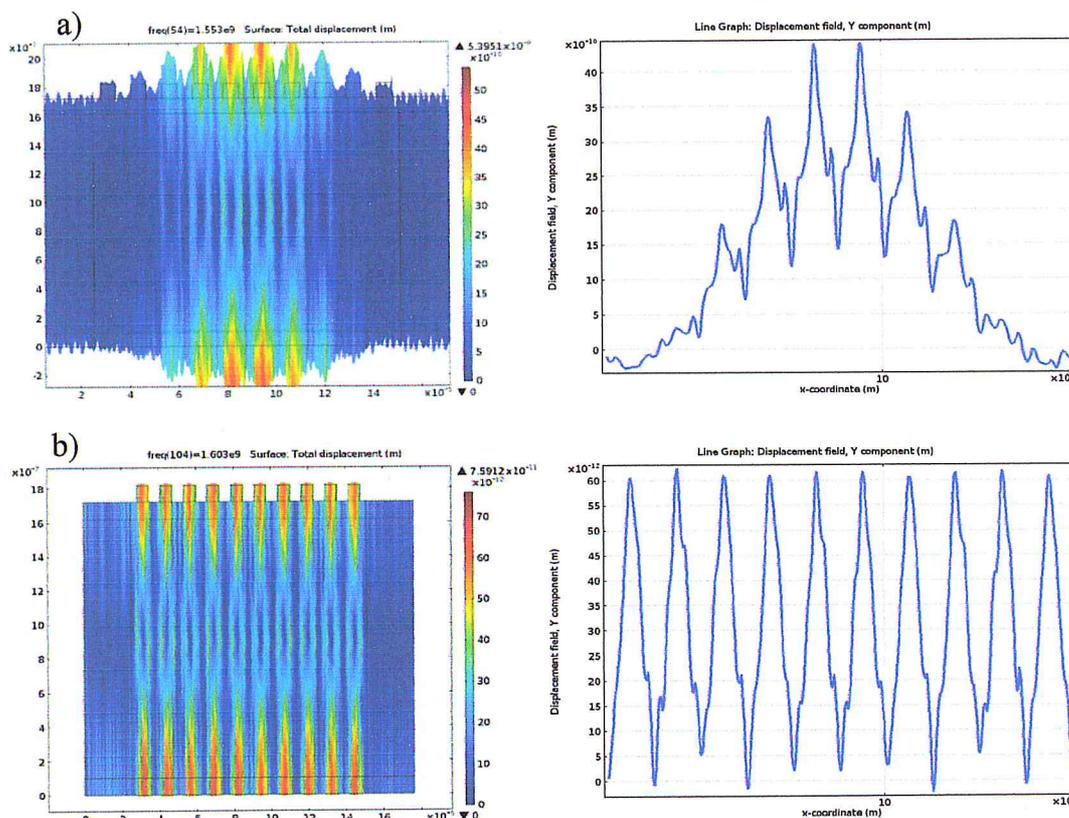


Figure (III.14) : A gauche le champ de déplacement mécanique de la structure et à droite une coupe linéaire montrant le déplacement mécanique $u_z(x)$ à la surface libre de l'électrode supérieure: (a) à la résonance et (b) à l'antirésonance.

La figure (III.15) montre le champ de déplacement mécanique vertical relevé à surface libre du FBAR avec PnC supplémentaire. On remarque que si la fréquence de l'excitation augmente le matériau piézoélectrique ne génère aucune mode mécanique, jusqu'à la fréquence de résonance de mode fondamental $f_r = 1.552$ GHz le déplacement mécanique à cette fréquence a une amplitude de l'ordre 5.3 nm qui correspondent à la valeur 0 dB. Dans cette figure, il est clair que tous les modes de vibration parasites qui apparaissent après la fréquence de résonance de mode fondamental sont éliminés totalement. Le déplacement mécanique à la fréquence de l'antirésonance est très faible est à 75 pm. Le nombre des périodes (10 périodes) sur la structure, correspond au même nombre des périodes apparaissant sur la figure de champ de déplacement mécanique verticale. On peut dire dans ce cas que les modes parasites sont éliminés par l'effet de réseaux périodique de Molybdène.

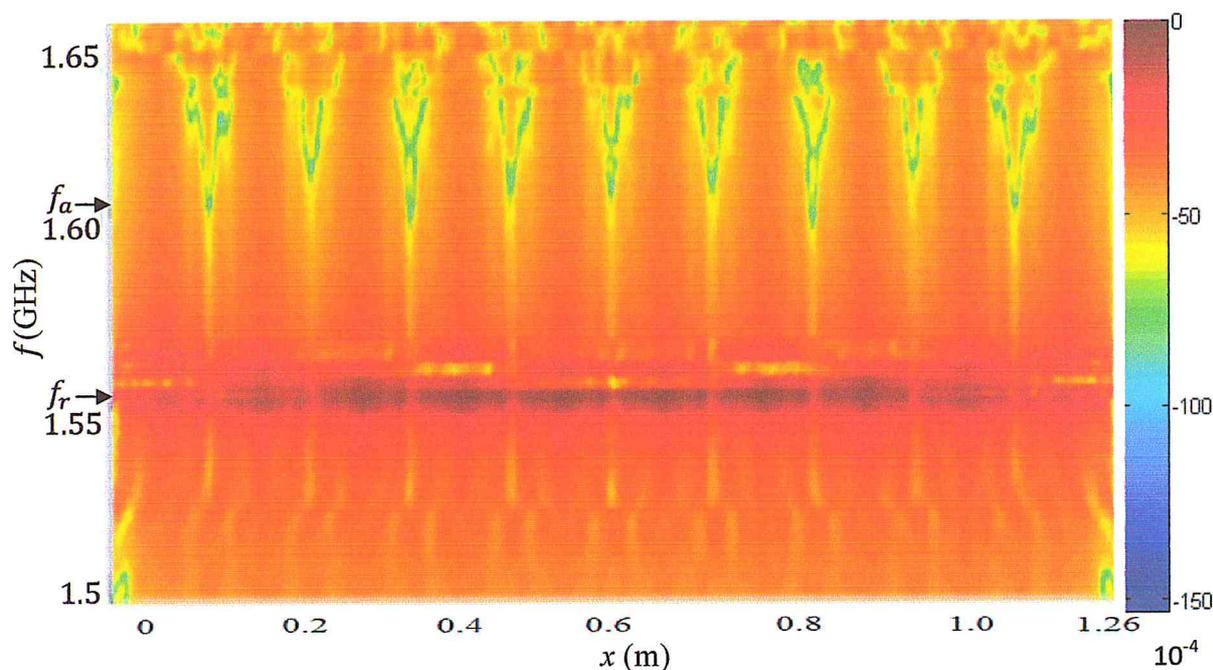


Figure (III.15) : Déplacement mécanique $u_z(x, f)$ de la structure en présence du réseau phononique.

Tableau (III.7) : Les valeurs de l'amplitude maximale du déplacement mécanique suivant la direction de l'épaisseur.

	f_r	f_a
$u_z(\text{nm})$	5.3	$75 \cdot 10^{-3}$

III.11. Courbe de dispersion de la structure avec réflecteurs de Bragg

Par Comsol on obtient le champ de déplacement mécanique vertical $u_z(x, f)$ à la surface de l'électrode supérieure, ensuite on applique par logiciel Matlab la transformée de Fourier spatiale rapide (*FFT*) sur $u_z(x, f)$ afin d'obtenir la courbe de dispersion.

La figure (III.16) présente la courbe de dispersion (la variation de fréquence de l'excitation électrique en fonction de vecteur d'onde) de la structure FBAR avec réflecteurs de Bragg.

D'une part, les résonances parasites sont limitées entre la fréquence de résonance et la fréquence de l'antirésonance du mode fondamental en épaisseur, et d'autre part la fréquence inférieure et supérieure définissant la bande fréquentielle interdite des réflecteurs de Bragg sont déterminées aux voisinages des fréquences de résonance et de l'antirésonance du résonateur.

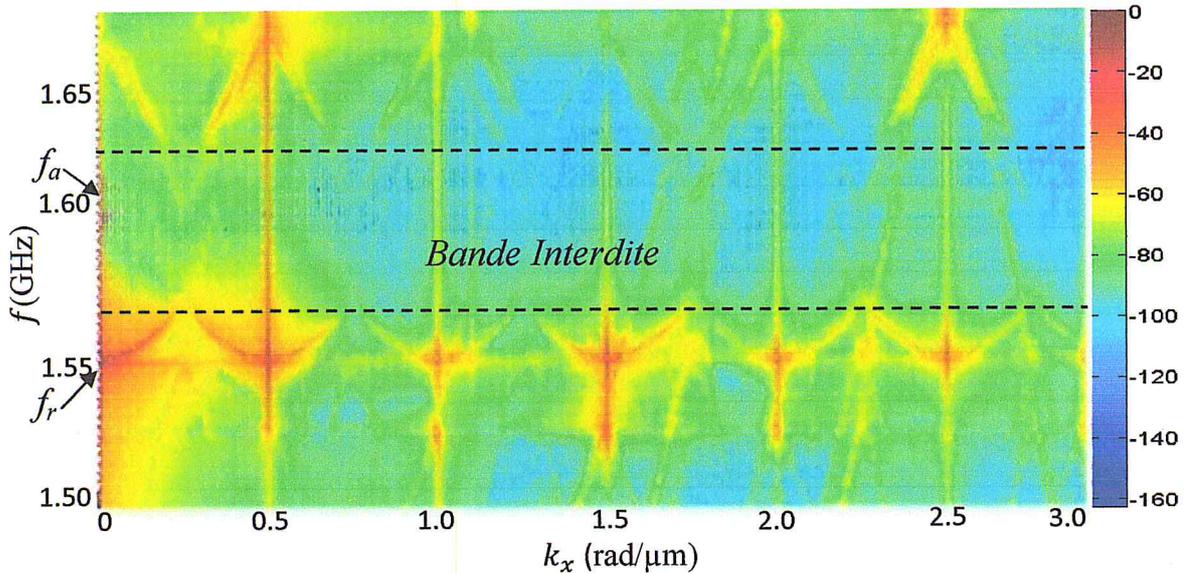


Figure (III.16) : La courbe de dispersion de la structure Mo/ZnO/Mo en présence des CP.

Les dimensions géométriques tels que la périodicité p , l'espacement w et la hauteur h_g sont choisies de telle sorte que la bande interdite fréquentielle des réflecteurs de Bragg coïncide avec les fréquences des résonances parasites afin de les éliminer. Elle est claire que le mode parasite de Lamb (TE_1) est presque éliminé sur la courbe de dispersion.

Dans le cas (figure (III.17)) les caractéristiques $|Y_{11}|(f)$ montre clairement que les résonances parasites transversales sont supprimées lorsque p et h_g sont fixés respectivement à $12.68 \mu\text{m}$ et $0,1 \mu\text{m}$, ainsi la longueur de la structure à $L=126.8 \mu\text{m}$. En raison de la charge mécanique due à l'ajout de masse du réseau en Molybdène, les deux fréquences (f_r, f_a) du mode fondamental en épaisseur sont diminuées respectivement de 1.637 GHz à 1.552 GHz et de 1.705 GHz à 1.603 GHz . De plus on remarque que l'amplitude de l'admittance $|Y_{11}|$ à la fréquence f_r a subi une légère augmentation, tandis qu'à l'antirésonance f_a , elle subit une diminution, ce qui reflète l'amélioration du facteur de qualité du résonateur en présence du PnC.

Ce résultat démontre que la propagation de l'onde transversale (latérale) est bien contrôlée par les réflecteurs de Bragg. Les résonances parasites peuvent être supprimées en choisissant le bon paramètre géométrique. Cependant la valeur de coefficient de couplage électromécanique du matériau ZnO est diminuée de 11.23% à 7.6% .

Cette diminution de la valeur de coefficient de couplage électromécanique du matériau ZnO, peut-être due à l'apparition d'un nouveau mode à la fréquence 1.66 GHz avec un couplage non négligeable qui absorbe l'énergie mécanique de mode fondamental.

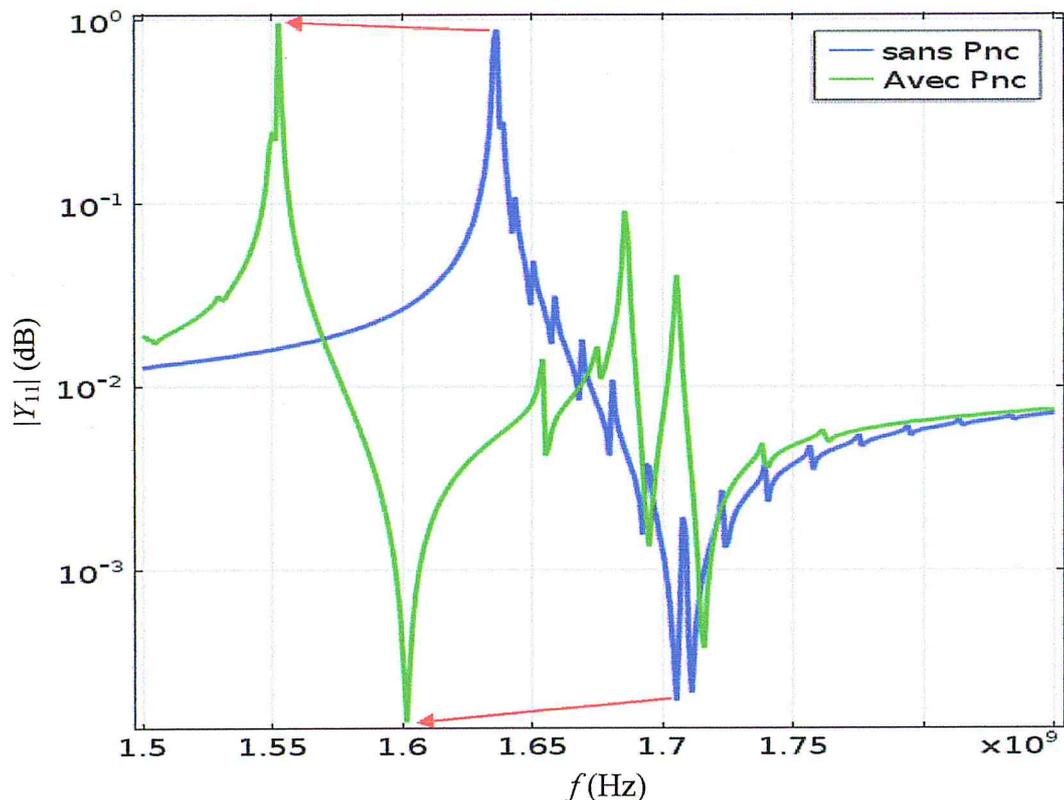


Figure (III.17) : Comparaison des admittances électriques d'entrée de la structure FBAR en présence et en absence des CPs.

III.11.1. Phase de l'admittance électrique

La figure (III.18) montre la variation de la phase de l'admittance électrique d'entrée de résonateur en fonction de la fréquence de l'excitation électrique. Pour des fréquences inférieure à la fréquence de résonance f_r du mode fondamental, la phase montre un comportement de FBAR purement capacitif à $\pi/2$, après au voisinage de la fréquence de résonance électrique, la phase chute brusquement à $-\pi/2$ et le comportement du résonateur devient purement inductive jusqu'à la fréquence d'antirésonance, après laquelle elle saute brusquement à $\pi/2$ pour retrouver son état purement capacitif en hautes fréquences. A la fréquence de résonance et à la fréquence de l'antirésonance la phase de l'admittance est nulle, cette valeur correspondant à un comportement du résonateur purement résistif.

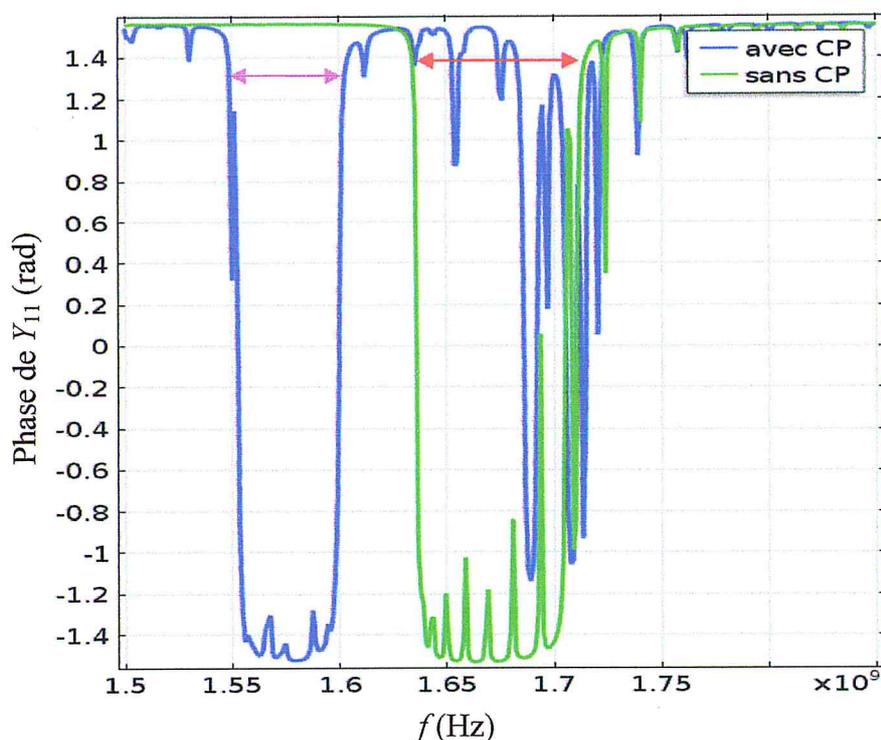


Figure (III.18) : La phase de l'admittance électrique du résonateur FBAR, avec et sans CP.

En absence du réseau périodique CP , la phase sur la figure (III.18) montre l'apparition de plusieurs pics de résonances parasites entre la fréquence de résonance et l'antirésonance, ces pics traduisent des fluctuations capacitives-inductives issues de la propagation des ondes transversales. En présence des réflecteurs de Bragg (Figure III.18), ces pics parasites sont presque supprimés. Pour le mode fondamental, l'intervalle fréquentielle où le comportement est purement inductif diminue de 0.076 GHz à 0.05 GHz. Cette diminution est due à la conversion vers le mode qui apparaît à 1.66 GHz en ajoutant le CP .

III.11.2. Diminution de la dissipation énergétique totale par les CPs

L'un des problèmes qui subsistent dans la technologie FBAR est la suppression des pertes énergétiques acoustique, afin d'améliorer les performances de FBAR. Le problème c'est qu'une partie de l'énergie mécanique générée par l'effet piézoélectrique est dissipée dans les modes latéraux parasites.

Dans un résonateur à base de matériau piézoélectrique les pertes d'énergie [57, 58] sont d'autant plus important au voisinage de la fréquence de résonance que lorsque l'on s'en éloigne.

Nous présentons dans la figure (III.19) les résultats de simulation de l'énergie dissipée dans la structure FBAR en présence et en absence de CP.

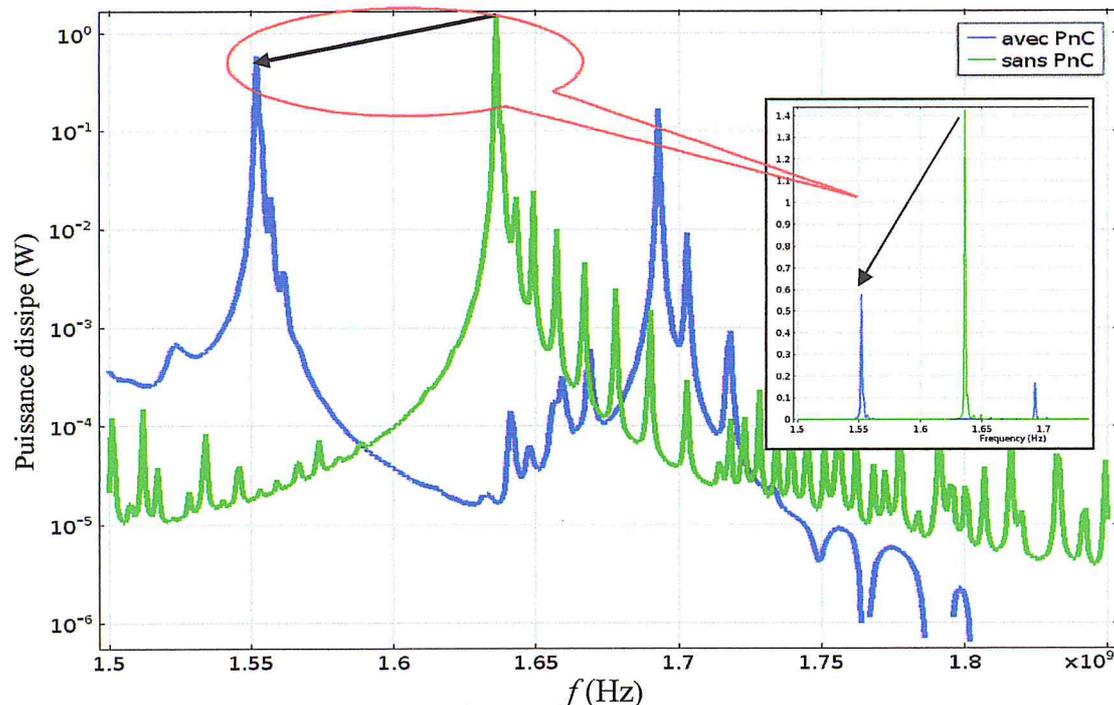


Figure (III.19) : Puissance dissipée dans la structure FBAR sans et avec CP.

En absence des CP, la figure (III.19) montre l'apparition de plusieurs pics parasites, qui résultent de la dissipation de l'énergie mécanique générée piézoélectriquement, le pic à la fréquence de résonance du mode fondamental correspondant à une dissipation énergétique maximale de l'ordre de (1.1 W), les autres pics ont une amplitude inférieure à 1.1 W, ils sont dus à la propagation des ondes latérales. Le nombre de pics parasites pour la structure sans CP est plus important que le nombre de pics dans le cas de la structure avec CP. Ainsi l'énergie dissipée à la fréquence f_r diminue de ~ 1.1 W (sans CP) à ~ 0.7 W (avec CP).

Cette amélioration (réduction des pertes de puissance mécanique) est due à l'effet de réseau périodique en Mo. En conclusion, on peut dire que les cristaux phononiques présentent une solution efficace pour réduire les pertes d'énergie mécanique dans la structure FBAR.

III.11.3. Amélioration de facteur de qualité par les PnC

L'un des problèmes qui subsistent dans la technologie FBAR est la suppression de pertes de l'énergie acoustique dues à la propagation des ondes latérales en plus de la

résonance de mode fondamentale qui provoquée par la vibration en mode d'épaisseur du film ZnO piézoélectrique. La dégradation des performances électrique est observée sur la réduction du facteur de qualité Q en raison des énergétiques.

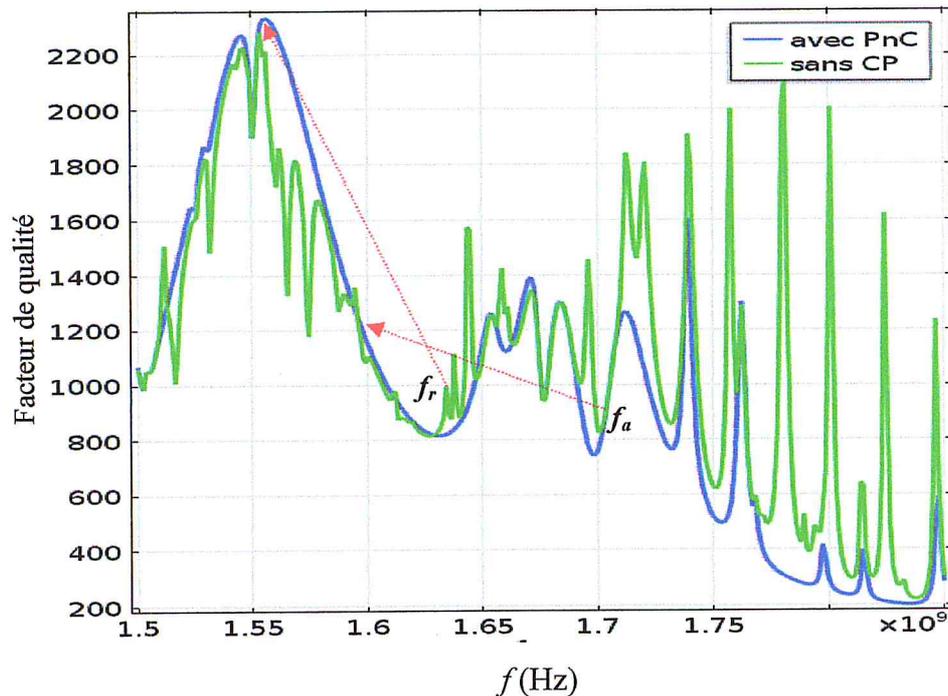


Figure (III.20) : Facture de qualité du résonateur FBAR Sant PnC et avec PnC

Dans la figure (III.20), on montre une comparaison entre le facteur de qualité Q de la structure FBAR sans PnC et le facteur de qualité Q de la structure avec PnC . Il est claire ici que les facteurs de qualité des modes parasites au endroit de leur fréquences de résonance sont complètement éliminés entre f_r et f_a et ils sont largement diminuées après f_a . A la fréquence de résonance et de antirésonance la valeur du facteur de qualité (Q_r, Q_a) en absence du PnC est égale à ($Q_r=1000, Q_a=900$), cette valeur devient égale à ($Q_r=2350, Q_a=1200$) en présence des réflecteurs de Bragg.

III.12. Etude Modale de la structure FBAR bidimensionnelle

Nous considérons la structure FBAR bidimensionnelle de dimensions $12.68 \times 1.72 \mu\text{m}^2$ illustrée dans la figure (III.21). Dans cette section nous avons choisi de retrouver les résultats précédents de la simulation harmonique mais avec une autre méthode, il s'agit ici de faire une simulation modale (*Eigen frequency analysis*) sur une seule cellule (considérée comme une (1) période de réflecteur de Bragg, Voir figure (II.2)) en appliquant des conditions de périodicité de Floquet aux bords latéraux de la

structure afin de balayer la composante du vecteur d'onde k_x . La périodicité de la structure (dans la direction x) engendre une périodicité dans l'espace de Fourier k_x , de ce fait le balayage de k_x est effectué uniquement dans l'intervalle allant de 0 à π/p considéré comme la première zone de Brillouin. Les étapes de simulation par éléments fini (MEF) sont détaillées ci-dessous.

III.12.1. Géométrie

La figure (III.21) présente la géométrie de notre structure FBAR qui est constituée de trois couches superposées, une électrode inférieure, une couche piézoélectrique au milieu et une électrode supérieure.

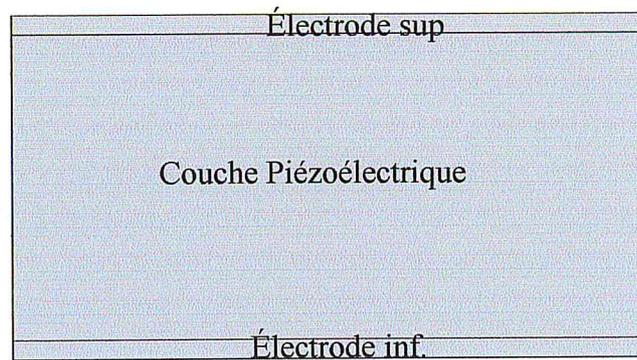


Figure (III.21): Cellule unitaire de la structure FBAR (2D).

III.12.2. Conditions aux limites

La structure étudiée est une structure 2D. Des conditions aux frontières doivent être appliquées afin de simuler le comportement réel de la structure FBAR. Dans ce cas, deux types de conditions aux limites sont appliqués, des conditions aux limites mécaniques et des conditions aux limites électriques.

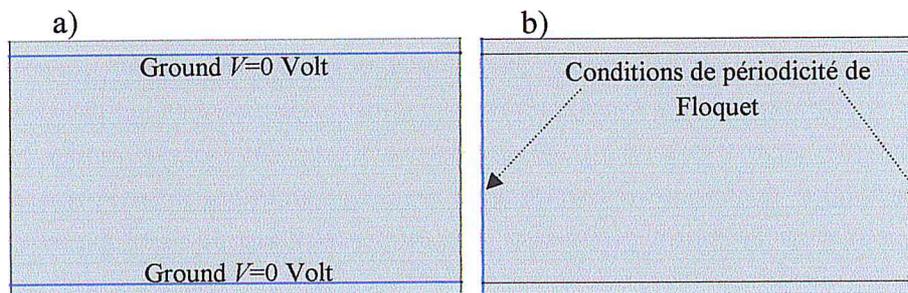


Figure (III.22): Conditions aux limites (électriques et mécaniques).

Pour les conditions aux limites mécaniques de la figure (III.22. b), on applique la périodicité de Floquet sur les deux extrémités latérales de la cellule, on s'intéresse à la propagation de l'onde parasite dans la direction x , donc on crée la variable k_x qui va être balayé dans la 1^{ère} zone de Brillouin en utilisant « *parametric sweep* ». Les conditions aux limites électriques de la figure (III.22. a) sont imposées de telle sorte que les deux électrodes (sup et inf) sont reliées à la masse ($V=0$ Volt).

III.12.3. Courbes de dispersion

La figure (III.23) montre les fréquences propres calculées pour chaque valeur de k_x . Deux branches de dispersion sont apparues à très basse fréquence (à $f=0$ Hz), ces résultats coïncident avec ceux de la référence [66]. En plus du mode de Lamb (TS_0) observée dans le cas de l'étude harmonique, on remarque ici une deuxième branche. Cette dernière est associée au mode antisymétrique (A_0) qui est éliminé par l'excitation piézoélectrique dans le cas de l'étude harmonique. De même, au voisinage de la fréquence de résonance $f_r=1.637$ GHz on remarque l'apparition d'un mode possédant une fréquence de coupure $f_c = 1.636$ (Figure (III.23.b) à $k_x=0$) très rapprochée de la fréquence de résonance, ce mode ne peut être associé qu'au mode TE_1 retrouvé par la méthode harmonique. Le mode (TE_1) apparaît sur la courbe de dispersion après le mode (TS_2), ce qui signifie que la dispersion est de type (1).

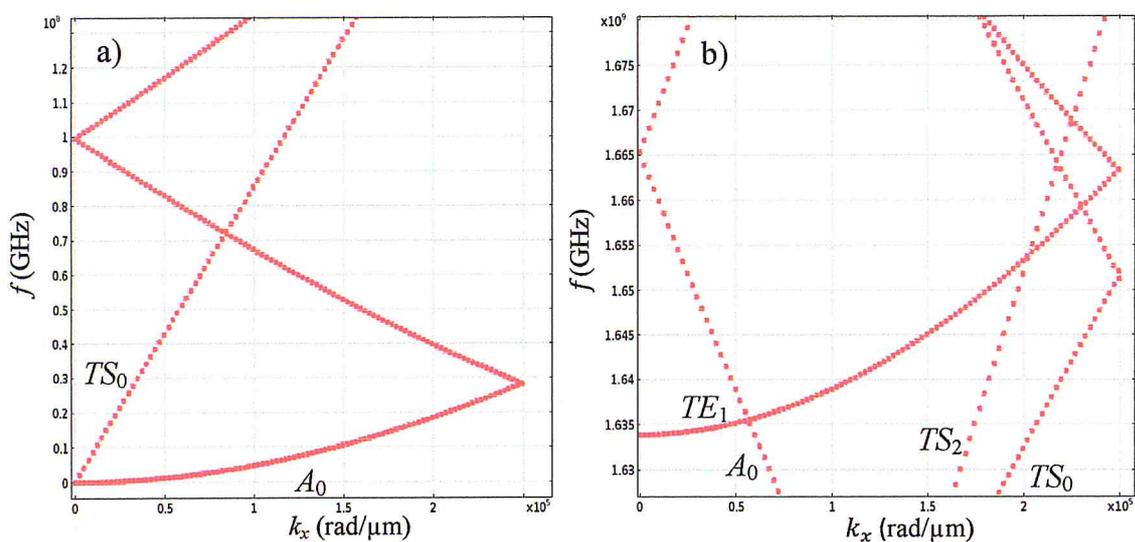


Figure (III.23) : Courbes de dispersion des modes de Lamb dans la structure FBAR, a) à très basse fréquences et b) au voisinage de la résonance.

III.12.3. Structure FBAR avec réflecteurs de Bragg

Nous considérons maintenant la même structure précédente mais avec une structuration supplémentaire des réflecteurs de Bragg, il s'agit d'une couche fine de Molybdène (Mo) d'épaisseur $h_g=0.1\mu\text{m}$ déposé sur l'électrode supérieure en Mo.

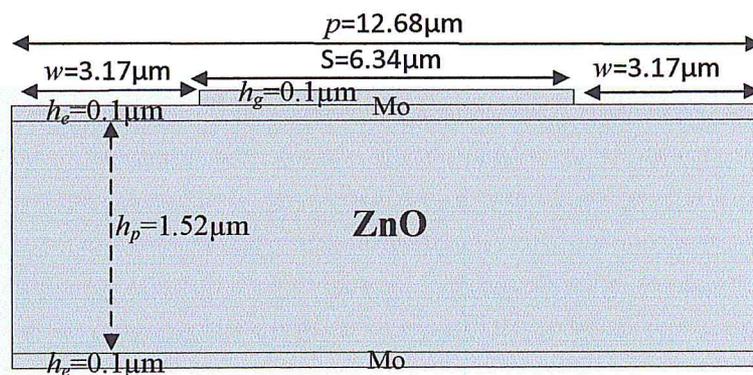


Figure (III.24): Structure Mo/ZnO/Mo en présence des CPs.

Dans la figure (III.24) on définit les paramètres géométriques de la structure élémentaire, tels que h_e la longueur $S=6.64\mu\text{m}$, la position de cette structures sur l'électrode supérieure de FBAR $w=3.17\mu\text{m}$.

III.12.4. Courbe de dispersion de la structure avec réflecteurs de Bragg

La figure (III.25) présente la courbe de dispersion (fréquence de l'onde en fonction de la composante k_x du vecteur d'onde) de la structure FBAR avec réflecteurs de Bragg .

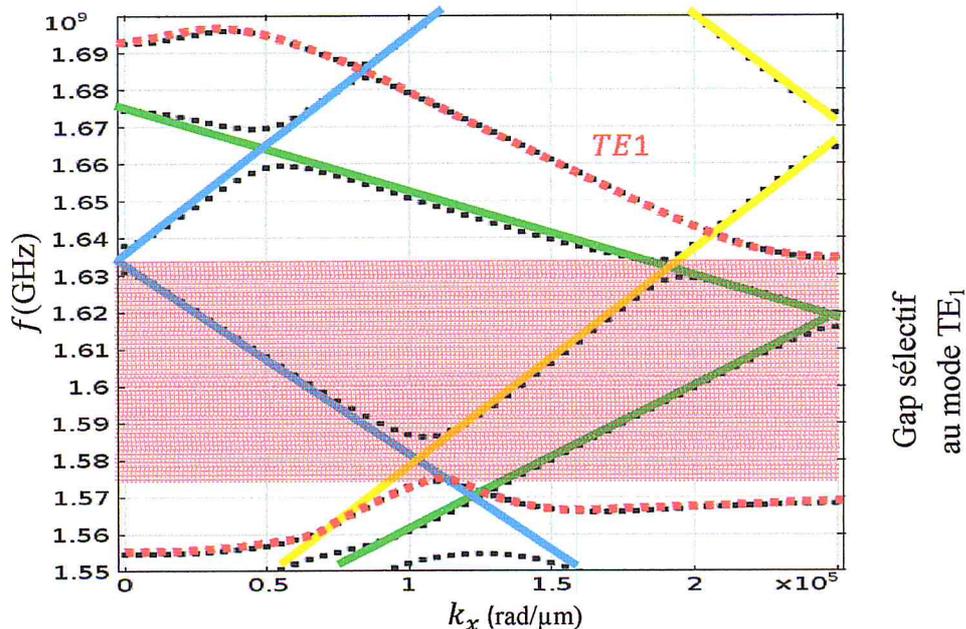


Figure (III.25) : La courbe de dispersion de la structure Mo/ZnO/Mo avec CPs.

Les modes représentés par les couleurs Bleu, Jaune et Vert sont des modes de Lamb antisymétriques, bien qu'ils figurent dans toute plaque Mo/ZnO/Mo avec les épaisseurs décrites précédemment, ils peuvent être omis de la Figure (III.25) dans notre cas de structure FBAR car les modes antisymétriques ne peuvent en aucun cas être excités piézoélectriquement dans une configuration BAW. Avec cette considération on ne peut garder sur la figure (III.25) que les branches en rouge désignant le mode parasite TE_1 avec un gap (1.575 GHz et la fréquence 1.632) où ce mode est interdit de se propager dans la direction x considérée. Cette étude reste sous investigation pour confirmer tous les résultats obtenus.

Conclusion

On a montré que le mode de Lamb (TE_1) est à l'origine des résonances parasites dans les structures FBAR. Dans ce chapitre, on a étudié l'influence des réflecteurs de Bragg sur la réponse électromécanique du résonateur FBAR, pour réduire les résonances parasites figurant sur la courbe de l'amplitude d'admittance électrique, de même, les modes parasites sont éliminés sur la courbe de champ de déplacement mécanique. Les paramètres géométriques des structures périodiques tels que la périodicité p et la hauteur h_g des structures de Bragg sont également optimisés.

L'avantage des réflecteurs de Bragg est leur contribution à la diminution des pertes de puissance mécanique (dissipée dans les modes transversaux). Cependant ils présentent l'inconvénient d'avoir diminué la valeur du coefficient de couplage électromécanique de la structure en ZnO.

L'étude par éléments finis effectuée sur la structure Mo/ZnO/Mo montre que les réflecteurs de Bragg, qui sont placés sur l'électrode supérieure du résonateur FBAR, ont contribué à l'amélioration de la valeur du facteur de qualité Q . Il est ainsi clair qu'avec le bon choix de la géométrie (Période $p=12.68 \mu\text{m}$, hauteur des structures périodiques $h_g=0.1 \mu\text{m}$ et espacement $w=6.34 \mu\text{m}$), les cristaux phononiques peuvent présenter une solution efficace pour bloquer les modes d'ondes parasites et éliminer les pertes d'énergie acoustique latérale.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Dans ce travail, nous avons présenté d'abord une étude par éléments finis d'un résonateur piézoélectrique FBAR de dimension ($L=126.8 \mu\text{m}$, $h=1,72 \mu\text{m}$), nous avons montré que la fréquence d'antirésonance électrique du mode épaisseur a une origine purement acoustique, elle est liée directement à l'épaisseur de la couche piézoélectrique. Cette fréquence peut être aussi diminuée en augmentant les épaisseurs des électrodes.

L'étude des comportements électrique et mécanique montre l'apparition des modes de vibration parasites dus à l'établissement d'ondes stationnaires latérales engendrées par l'encastrement de la structure à ces extrémités. Le nombre de ces résonances parasites (figurant sur la réponse électrique) augmente avec la longueur totale de la structure FBAR.

Nous avons ensuite présenté la structure FBAR avec le réseau phononique constitué de réflecteurs de Bragg distribué périodiquement sur son électrode supérieure. Après balayage des paramètres géométriques caractérisant le réseau phononique (à savoir, la périodicité p , la hauteur h_g , le nombre de période N , ...), on a pu constater que la géométrie optimale permettant de réduire le maximum possible les modes parasites, correspond à ($p=12.68 \mu\text{m}$, $N=10$, $W=6.34 \mu\text{m}$ et $h_g=0.1 \mu\text{m}$).

La réponse du résonateur est ainsi améliorée en supprimant les parasites due à la propagation des ondes transversales le long de la structure, cette amélioration est jugée sur la base de la diminution de l'énergie dissipée à la fréquence de résonance et à l'antirésonance simultanément.

La comparaison entre la réponse électromécanique du résonateur FBAR en absence et en présence des cristaux phononiques pour la périodicité ($p=12.68 \mu\text{m}$, $h_g=0.1 \mu\text{m}$ et $w=p/2$) montre que les modes de vibration parasites sont bloqués par la bande interdite des cristaux phononiques qui coïncide avec la fréquence de coupure de mode parasite TE_1 .

Les résultats précédents sont confirmés par la diminution des dissipations énergétiques surtout au voisinage de la fréquence de résonance, ceci est due à la suppression des pertes de l'énergie mécanique localisée dans les modes acoustiques latéraux.

En perspective à ce travail, nous prévoyons d'étendre l'étude avec une autre méthode, il s'agit de faire la simulation sur uniquement une seule cellule phononique en utilisant les conditions de périodicité de Floquet tout en considérant une étude modale plutôt que l'étude harmonique, et de faire varier le matériau piézoélectrique vers l'AlN (Nitrure d'Aluminium) afin de considérer le cas de la dispersion type II.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] A. HAJJAJI, «Caractérisation multi échelle et lois de comportement dans les matériaux ferroélectriques.» Thèse de doctorat : Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2007. 172p.
- [2] E. BOUCHER, «Elaboration et caractérisation des céramiques PZT Bi-Substituées et modélisation non-linéaire de leur comportement en contrainte et en champ électrique.» Thèse de doctorat : Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2002. 178p.
- [3] T. ELHADROUZ, T. BENZINEB, E. PATOOR, “Micromechanical modèle for ferroelectric and ferroelectric single cristals.” Smart Structures and Materials 2004: Active Materials: Behavior and Mechanics. Edited by Lagoudas, Dimitris C. Proceedings of the SPIE, Volume 5387, pp. 346-353 (2004).
- [4] C. MAGNET, «Traitement non-linéaire de la tension de sortie éléments piézoélectriques: Application aux transformateurs piézoélectriques et au contrôle de vibration de cartes électroniques.» Thèse de doctorat : L’institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2006. 206p.
- [5] N. BAHLOULI, «Cours sur les matériaux composites.» Support de cours : Université de Strasbourg.
- [6] S. Brochen, «Propriétés électriques du ZnO monocristallin», Thèse de Doctorat, Université de Grenoble, (Décembre 2012).
- [7] C. Klingshirn. “ZnO: From basics towards applications”. *Physica.Status.Solidi. (b)*, (2007), 3027–3073.
- [8] S.J. Pearton, D.P. Norton, K. Ip, Y.W. Heo, T. Steiner, Recent progress in processing and properties of ZnO, *Prog. Mater. Sci.* 50 (2005) 293-340.
- [9] Ü. Özgür, Y. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Dogan, V. Avrutin, S. J. Cho and H. Morkoç, “A comprehensive review of ZnO materials and devices”, *J. of App. Phys.* 98 (2005), 041301.
- [10] A. D. Corso, M. Posternak, R. Resta et A. Baldereschi. “Ab initio study of piezoelectricity and spontaneous polarization in ZnO”, *Phys. Rev. B* 50.15 (1994), 10715–10721.
- [11] A. Safari et E. K. Akdogan, “Piezoelectric and Acoustic Materials for Transducer Applications”, Springer, New York, (2008).
- [12] S. H. Tseng, “The Study of Humidity Sensor by SAW Delay-Line”, These de Maser, Tatung University, (July 2000).
- [13] J. H. Visser, *Surface Acoustic Wave Filters in ZnO-SiO₂-Si Layered Structures, Design, Technologie, and Monolithic Integration with Electronic Circuitry*», Nederland, (1989).
- [14] D. Royer et E. Dieulesaint: “Elastic Waves In Solids I: Free And Guided Propagation”, Springer 2000.
- [15] G.C. Coussot. “Bulk wave resonator for the 100-300 MHz frequency range” *Proc. IEEE*, (1974) 590-591.

- [16] T.W. Grudkowski, J.F. Black, T.M. Reeder, D.E. Cullen, and R.A. Wagner. Fundamental mode vhf/uhf bulk acoustic wave resonators and filters on silicon. IEEE Ultra. Symp, (1980) 829-833.
- [17] C. C. Chang, et Y. E. Chen, "Fabrication of High Sensitivity ZnO Thin Film Ultrasonic Devices by Electrochemical Etch Techniques", IEEE Trans. on Ultra. Ferro. AndFreq. Cont., 45 (4), (1998).
- [18] E. Gaboriaud, "Etude des résonateurs piézoélectriques dans le domaine des micro-ondes, application au filtrage", Thèse de Doctorat, Université de Limoges, Octobre 2004.
- [19] C. W. Seabury, J. T. Cheung, P. H. Kobrin, R. Addison et D. P. Havens, "High Performance Microwave Air-Bridge Resonators", IEEE Ultra. Symp, (1995) 909-911.
- [20] M. Hara, J. Kuypers, T. Abe et M. Esashi, "MEMS Based Thin Film 2 GHz Resonator for CMOS Integration", IEEE MTT-S Digest, (2003) 1797-1800.
- [21] H. Zhang et E. S. Kim, "Air-backed Al/ZnO/Al film bulk acoustic resonator without any support layer", IEEE Ultra. Symp, (2002) 20-26.
- [22] K.M. Lakin et al., "Solidly mounted resonators and filters", Proc IEEE Ultra. Symp., 2 (1995), 905-908.
- [23] M. A. Dubois, P. Muralt et V. Plessky, "BAW resonators based on aluminum nitride thin film", IEEE Ultra. Symp, (1999), 907-910.
- [24] A.H. Fahmy et E. L. Adler : Propagation of acoustic surface waves in multilayers: A matrix description. Applied Physics Letters, 22(10):495-497, 1973.
- [25] Akhlesh Lakhtakia, Vasundara V. Varadan et Vijay K. Varadan: Reflection characteristics of an elastic slab containing a periodic array of circular elastic cylinders: P and sv wave analysis. The Journal of the Acoustical Society of America, 83(4):1267-1275, 1988.
- [26] J. Liu, L. Ye, D. A. Weitz et Ping Sheng : Novel acoustic excitations in suspensions of hard-sphere colloids. Phys. Rev. Lett., 65:2602-2605, Nov 1990.
- [27] Ling Ye, Jing Liu, Ping Sheng et D. A. Weitz: Sound propagation in suspensions of solid spheres. Phys. Rev. E, 48:2805-2815, Oct 1993.
- [28] Xiaodun Jing, Ping Sheng et Minyao Zhou: Theory of acoustic excitations in colloidal suspen-sions. Phys. Rev. Lett., 66:1240-1243, Mar 1991.
- [29] Xiaodun Jing, Ping Sheng et Minyao Zhou: Acoustic and electromagnetic quasimodes in disper-sed random media. Phys. Rev. A, 46:6513-6534, Nov 1992.
- [30] Anthony A. Ruffa: Acoustic wave propagation through periodic bubbly liquids. The Journal of the Acoustical Society of America, 91(1):1-11, 1992.
- [31] Jonathan P. Dowling : Sonic band structure in fluids with periodic density variations. The Journal of the Acoustical Society of America, 91(5):2539-2543, 1992.
- [32] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski et B. Djafari-Rouhani: Acoustic band structure of periodic elastic composites. Phys. Rev. Lett., 71:2022-2025, Sep 1993.
- [33] M. S. Kushwaha et P. Halevi: Band-gap engineering in periodic elastic composites. Applied Physics Letters, 64(9):1085-1087, 1994.

- [34] M. S. Kushwaha et B. Djafari-Rouhani: Complete acoustic stop bands for cubic arrays of spherical liquid balloons. *Journal of Applied Physics*, 80(6):3191–3195, 1996.
- [35] E. N. Economou et M. Sigalas: Stop bands for elastic waves in periodic composite materials. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 95(4):1734–1740, 1994.
- [36] M. Sigalas et E.N. Economou: Band structure of elastic waves in two dimensional systems. *Solid State Communications*, 86(3):141 – 143, 1993.
- [37] Sarah Benchabane: Guidage et filtrage des ondes dans les cristaux phononiques. *Theses de doctorat, Université de Franche-Comté*, 2006.
- [38] Lord Rayleigh: Xvii. On the maintenance of vibrations by forces of double frequency, and on the propagation of waves through a medium endowed with a periodic structure. *Philosophical Magazine Series 5*, 24(147):145–159, 1887.
- [39] Eli Yablonovitch: Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys.Rev. Lett.*, 58:2059–2062, May 1987.
- [40] Sajeev John: Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys.Rev. Lett.*, 58:2486–2489, Jun 1987.
- [41] Jean-Jacques Rousseau et Alain Gibaud: *Cristallographie géométrique et radiocristallographie*. Sciences Sup, Dunod, 2007.
- [42] Lord Rayleigh, *Proc. London Math. Soc.* 17, 4 (1885).
- [43] Thèse de Thierry Aubert "Contribution à l'élaboration de capteurs sans-fil, opérant à très haute température (500-1000°C), à base de dispositifs à ondes acoustiques de surface : choix des matériaux constitutifs." (2010).
- [44] B.A. AULD , "Acoustic fields and waves in solids" Volume II (1973).
- [45] Z. Hou, and B. M. Assouar, *Phys. Lett. A* 372, 2091 (2008).
- [46] S.Tamura, D. C. Hurley, and J. P. Wolfe, *Phys. Rev. B* 38, 1427 (1988).
- [47] V. Romero-Garcia, J. V. Sanchez-Pérez, and L. M. Garcia-Raffi, *J. Appl. Phys.* 108, 044907 (2010)
- [48] Z. Liu, X. Zhang, Y. Mao, Y. Y. Zhu, Z. Yang, C. T. Chan, and P. Sheng, *Science* 289, 1734 (2000).
- [49] J. Comput, Bérenger. *Phys.* 114, 185 (1994)
- [50] M. Zlamal: On the finite element method. *Numerische Mathematik*, 12, pp. 394–402 (1968)
- [51] A Khelif, B. Aoubiza, S. Mohammadi, A. Adibi, and V. Laude, *Phys. Rev. E* 74, 046610 (2006)
- [53] F. Thalmayr, K. Hashimoto, T. Omori, and M. Yamaguchi, "Frequency domain analysis of Lamb wave scattering and application to film bulk acoustic wave resonators," *IEEE Trans. Ultrason.Ferroelectr.Freq.Control*, vol. 57 (7), pp. 1641-1648, 2010.
- [52] K.S. Antennas Propag. Yee *IEEE Trans.* 14 (1966), p. 30 View Record in Scopus Citing articles (850)

- [54] H.C. Martin et L. J. Topp, "Stiffness and deflection analysis of complex structures", *J. of Aeron M. J. Turner, R. W. Clough, Sci.* (1956).
- [55] W. Pang, H. Zhang and E. S. Kim, "Micromachined Acoustic Wave Resonator Isolated from Substrate", *IEEE Trans. on Ultra.Ferro.and Freq. Cont.*, 52 (8), (2005).
- [56] W.P. Mason, « Electromechanical transducers and wave filters», 2nd Edition, Van Nostrand-Reinhold, (1948).
- [57] J. Kaitila, "Chapter 3, BAW Device Basics," in *RF Bulk Acoustic Filters for Communications* Edited by K. Hashimoto (Artech House, 2009) pp. 51-90.
- [58] R. Ruby, J. Larson, C. Feng, and S. Fazzio, "The effect of perimeter geomery on FBAR resonator electrical performance," in *Proceedings IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest*, 2005, pp. 217-220.
- [59] A. Link, E. Schmidhammert, H. Heinzet, M. Mayert, B. Badert, and R. Weigel, "Appropriate methods to suppress spurious FBAR modes in volume production," in *Proceedings IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest*, 2006, pp. 394-397.
- [60] J. Kaitila, M. Ylilammi, J. Ella, and R. Aigner, "Spurious resonance free bulk acoustic wave resonators," in *Proceedings of IEEE Ultrasonics Symposium*, 2003, pp. 84-87.
- [61] R. Thalhammer, J. Kaitila, S. Zieglmeier, and L. Elbrecht, "Spurious mode suppression in BAW resonators," in *Proceedings of IEEE Ultrasonics Symposium*, 2006, pp. 456-459.
- [62] B.A. AULD, "Acoustic fields and waves in solids" Volume II (1973).
- [63] J. V. Tirado, «Bulk Acoustic Wave Resonators and their applications to Microwave Devices», Thèse de Doctorat, Barcelona, (2010).
- [64] T. R. Meeker et al, Publication and Proposed Revision of ANSI/IEEE Standard 176-1987 "ANSI/IEEE Standard on Piezoelectricity", *IEEE Trans. On Ultras., Ferro. and Freq. Cont.*, 43(5), 1996.
- [65] K. W. Tay, P. H. Sung, Y. C. Lin, T. J. Hung, "Characteristics of ZnO thin film for bulk acousticwave resonators", *J. of Electroceram.*, 21 (2008), 178-183.
- [66] R.Serhan Thèse « Etude théoriqueet Expérimentale de transducteur Ultrasonores A couche Minces»
- [67] T. Pensala, 'Thin Film Bulk Acoustic Wave Devices, Performance Optimization and Modeling', Thèse de Doctorat, Aalto University (Espoo) Finland, Février 2011.
- [68] J. Liu, T. Omori, C. Ahn, et K. Hashimoto, "Impact of Surface Periodic Grating on FBAR Structures to Spurious Transverse Resonances", 2013 Joint UFFC, EFTF and PFM Symp., 1957- 1960.
- [69] G. G. Fattinger, S. Marksteiner, J. Kaitila, and R. Aigner, 'Optimization of Acoustic Dispersion for High Performance Thin Film BAW Resonators', *IEEE Ultras. Symp.*, (2005), 1175-1178.

Annexe (A)

Etapes de simulation par Comsol de la structure FBAR

A) FBAR without PnC

Modeling Instructions

1) NEW

1) Go to the **Model Wizard** window. 2) Click the **2D** button. 3) Click **Next**. 4) In the **Add physics tree**, select **Piezoelectric Devices**. 5) Click **Next**. 6) Choose **Frequency Domain**, 7) Click **Finish**.

2) Parameters

1) Right-click **Global definition** and choose **Parameters**

Name	Expression	Value	Description
N_g	10	10	Nombre des périodes (<i>Gratings</i> =PnC)
N_{pml}	2	2	Longueur du PML par unité de période
N	$N_g + 2 * N_{pml}$	14	Nombre des périodes (Structure+PML)
P	12.6 e-6[m]	12.6E-6	La période
L	$N * P$	176.4E-4	Longueur totale du FBAR
hp	1.52e-6[m]	1.52E-6	Epaisseur de la couche piézoélectrique
hg	0.1e-6[m]	1E-7	Epaisseur des CP
PML	$N_{pml} * p$	25.2E-6	Longueur de la région PML
he	0.1e-6[m]	1E-7	Epaisseur de l'électrode

3) GEOMETRY

3.1) Rectangle (Electrode supérieur)

1) Right-click **Geometry** and choose **Rectangle**. 2) In the **Width** text field, type L , In the **Height** text field, type he . 3) Locate the **Position** section. In the **y** text field, type $hp + he$. 4) Click to expand the **Layers**, **Layer name** >Layer 1, **Thickness** (μm) > PML . 5) Select the **Layers to the left** check box select the **Layers to the right** check box, Clear the **Layers on bottom** check box. 6) Click the **Build Selected** button.

3.2) Rectangle (Electrode inferieure)

1) Right-click **Rectangle (l'électrode supérieur)** and choose **Duplicate**. 2) Locate the **Position** section. In the **y** text field, type 0 . 3) Click the **Build Selected** button.

3.3) Rectangle (la couche piézoélectrique) 1) Right-click **Rectangle (électrode supérieur)** and choose **Duplicate**. 2) In the **Height** text field, type hp . 3) Locate the **Position** section. In the **y** text field, type he . 4) Click the **Build Selected** button. 5) Click the **Build All Objects** button.

4) Perfectly Matched Layer (PML)

1) Right-click **Definitions** and choose **Perfectly Matched Layer**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type 1-3, 17-19 in the **Selection** text field. 4) Click **OK**.

5) Material

5.1) Material (Mo)

1) right-click **Materials** and choose **Open Material Browser**. 2) In the tree, select **Built-In** and choose **Molybdenum**. 3) Click **Paste Selection**. 4) In the **Paste Selection** dialog box, type 1, 3-4, 6-7, 9 in the **Selection** text field. 5) Click **OK**.

5.2) Material (ZnO)

1) right-click **Materials** and choose **Open Material Browser**. 2) In the tree, select **Piezoelectric** and choose **Zinc Oxide**. 3) Click **Paste Selection**. 4) In the **Paste Selection** dialog box, type **2, 5, 8** in the **Selection** text field. 5) Click **OK**.

6) Piezoelectric Devices (pzd)

1) Click **Piezoelectric Devices (pzd)**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **1-6, 17-19**. 4) Click **OK**. 5) **Thickness** section. In the **d** ext field, type **$N*p$** .

6.1) Damping and Loss

1) Click **Piezoelectric material** and choose **Damping and Loss**. 2) Damping type **Loss factor for cE** . 3) the η_{CE} list, choose **User defined**. In the associated text field, type $0.333e^{-3}$. 4) Dielectric Loss, **Loss factor for ϵS** . 5) the $\eta_{\epsilon S}$ list, choose **User defined**. In the associated text field, type $1e^{-3}$.

6.2) Linear Elastic Material

1) right-click **Piezoelectric Devices (pzd)** and choose **Linear Elastic Material**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **1,3-4,6-7,9** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**.

6.3) Damping

1) right-click **Linear Elastic Material** and choose **Damping**. 2) Damping type **Isotropic loss factor**. 3) the η_S list, choose **User defined**. In the associated text field, type $2e^{-3}$.

6.4) Fixed Constraint

1) right-click **Piezoelectric Devices (pzd)** > **Structural** and choose **Fixed Constraint**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **1, 3, 5, 72-74** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**.

6.5) Ground

1) right-click **Piezoelectric Devices (pzd)** > **Electrical** and choose **Ground**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **11** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**.

6.6) Terminal

1) right-click **Piezoelectric Devices (pzd)** > **Electrical** and choose **Terminal**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **13** in the **Selection** text field. 5) Click **OK**.

7) Mech7.1) Mapped

1) right-click **Mesh** and choose **Mapped**

7.1.1) Distribution 1

1) right-click **Mapped** and choose **Distribution**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **2, 16** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**. 5) In the **Number of elements** text field, type $10*N_{PML}$.

7.1.2) Distribution 2

1) right-click **Mapped** and choose **Distribution**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **1, 5** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**. 5) In the **Number of elements** text field type **2**.

7.1.3) Distribution 3

1) right-click **Mapped** and choose **Distribution**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **9** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**. 5) In the **Number of elements** text field $10*Ng$.

7.1.4) Distribution 4

1) right-click **Mapped** and choose **Distribution**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **3** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**, 5) In the **Number of elements** text field type **10**.

8) Study

1) Click **Step 1: Frequency Domain**. 2) In the **Frequencies** text field, type range (1.5e9, 0.001e9, 1.85e9) GHz. 3) right-click **Study** and click **Compute**.

9) Results**9.1) Admittance**

1) right-click **Results** and choose **1D Plot Group**. 2) **Data Set** choose **Solution 1.3** Axis Select the **y-Axis log scale** check box. 4) right-click **1D Plot Group** and choose **Global**. 5) **y-Axis Data**>**Expression** $\text{abs}(Y.11)$. 6) **X-Axis Data**>**Replace Expression**>**Frequency (pzd.freq)**. 7) Click **Plot**.

9.2) déplacement mécanique

1) right-click **Data Sets** and choose **cut line 2D**. 2) **Line Data: X** (Point 1: 0, Point 2: $N_g * p + 2 * PML$), **Y** (Point 1: $hp + 2 * he$, Point 2: $hp + 2 * he$). 3) right-click **Results** and choose **1D Plot Group**. 4) **Data Set** chooses **cut line 2D 1**. 5) right-click **1D Plot Group** and choose **Global**. 6) **Y-Axis Data**>**Expression** v . 7) **X-Axis Data**>**Expression** X . 7) click **Plot**.

9.3) Quality Factor

1) right-click **Results** and choose **1D Plot Group**. 2) **Data Set** chooses **Solution 1**. 3) right-click **1D Plot Group** and choose **Global**. 4) **Y-Axis Data** >**Replace Expression**>**Piezoelectric Devices**> **Global**>**Quality factor for frequency (pzd-freq)**. 5) **X-Axis Data** >**Replace Expression**>**Frequency (pzd-freq)**. 6) Click **Plot**.

B) With PnC**1) GEOMETRY****1.1) Rectangle (PnC)**

1) Right-click **Geometry** and choose **Rectangle**. 2) In the **Width** text field, type $p/2$, In the **Height** text field, type hg . 3) Locate the **Position** section. In the x text field, type $PML + p/4$. 4) Locate the **Position** section. In the y text field, type $2 * he + hp$.

1.2) Array

1) Right-click **Geometry** > **transforms** and choose **Array**.

2) Input, input objects **rectangle 4**. 3) Array type **linear**, size **N-4**, locate the **Position** section. In the x text field, type P

1.3) Union

1) Right-click **Geometry** > **Boolean Operation** and choose **Union**. 2) Input, input objects **rectangle 1-3**, **Arr 1-10**.

2) Material**2.1) Material (Mo)**

1) Click **Materials**, click **Molybdenum**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **7-16** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**.

3) Piezoelectric Devices (pzd)

1) Click **Piezoelectric Devices (pzd)**. 2) Click **Paste Selection**. 4) In the **Paste Selection** dialog box, type **7-16** in the **Selection** text field. 5) Click **OK**.

3.1) Linear Elastic Material

1) Click **Linear Elastic Material**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **7-16** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**.

7) Mech**7.1.2) Distribution 2**

1) right-click **Mapped** and choose **Distribution**. 2) Click **Paste Selection**. 3) In the **Paste Selection** dialog box, type **15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60** in the **Selection** text field. 4) Click **OK**. 5) In the **Number of elements** text field type **2**.

Annexe (B)

Transformée de Fourier

1) Définition

La transformée de Fourier F est une opération qui transforme une fonction intégrable sur \mathbf{R} en une autre fonction, décrivant le spectre fréquentiel de cette dernière. Si f est une fonction intégrable sur \mathbf{R} , sa transformée de Fourier est la fonction $F(f)$ donnée par la formule :

1.1) Transformée de Fourier continue

La transformée de Fourier continue est utilisée pour le traitement du signal analogique. Si $S(t)$ est une fonction intégrable sur \mathbf{R} , sa transformée de Fourier directe notée est $F(f)$ donnée par la formule suivant:

$$\hat{F}(f) = \int_{-}^{+} f(t) e^{-i2\pi\nu t} dt \quad (1)$$

$f(t)$ est une fonction dans l'espace temporel, et \hat{F} est une fonction dans l'espace fréquentielle, ainsi le temps en secondes et f la fréquence en Hz.

La transformée de Fourier inverse notée F^{-1} , en appliquée sur \hat{F} , afin de retrouver f à partir des données fréquentielles, comme définie par la formule suivant:

$$f(t) = \int_{-}^{+} \hat{F}(\nu) e^{+i2\pi\nu t} d\nu \quad (2)$$

1.2) La transformée de Fourier discrète (TFD)

La transformation de Fourier discrète (TFD) est un outil mathématique de traitement du signal numérique, qui est l'équivalent discret de la transformation de Fourier continue qui est utilisée pour le traitement du signal analogique. Il ne faut pas confondre avec la transformation de Fourier rapide qui est un algorithme particulier de calcul de la transformation de Fourier discrète. Sa définition mathématique pour un signal S de N échantillons est la suivante :

$$S(k) = \sum_{n=0}^{N-1} s(n) e^{-i2\pi k \frac{n}{N}} \quad 0 \leq k < N \quad (5)$$

Est la transformé inverse est donnée par :

$$S(n) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} s(k) e^{i2\pi n \frac{k}{N}} \quad (6)$$

2) Fréquence d'échantillonnage

On peut remarquer que ce signal est périodique de période N , et renseigne sur les fréquences comprises entre $-\frac{F_e}{N}$ et $\frac{F_e}{N}$, F_e étant la fréquence d'échantillonnage (souvent notée f_s dans la littérature anglo-saxonne). On n'a donc que N points pour analyser le spectre, et il peut être intéressant d'augmenter ce nombre de points d'analyse afin d'augmenter la précision spectrale ($\delta F = \frac{F_e}{N}$; sans zero-padding, la résolution se confond avec la précision) et donc de mieux localiser les maxima de son spectre (un signal de fréquence non multiple de $\frac{F_e}{N}$ ne sera pas vu après TFD. Il y a alors perte d'information). Il faut distinguer la précision de la résolution qui est la capacité de distinguer deux sinusoïdes à des fréquences proches ($\frac{F_e}{N}$).

3) L'analyseur de spectre à FFT (numérique)

La FFT (*Fast Fourier Transform* ou transformation de Fourier rapide) est ici utilisée après échantillonnage du signal d'entrée basses fréquences (audio). Avantage : il est capable de capturer les signaux en temps réel avec une résolution spectrale très fine qui dépend du nombre de points N et de la fenêtre de pondération utilisée. L'augmentation de la rapidité et de la résolution des convertisseurs analogique numérique permettra d'analyser des signaux à des fréquences de plus en plus élevées.

3.1) Le rôle de FFT dans la résolution de la problématique

Après le calcul FEM par Comsol on exporte le fichier data (nommé u_z .txt) de l'amplitude de déplacement mécanique à surface libre du FBAR, on calcule en suite par MATLAB en sa transformée de Fourier rapide (FFT) par rapporte à l'espace (x) on obtient ainsi la courbe de dispersion, le programme de calcul est donne dans l'annexe D.

Annexe (C)

Programme Matlab pour le tracé du déplacement mécanique et l'admittance ainsi que le calcul de la FFT de $u_z(x, f)$

```

clear all
close all
clc
format short

                                ***** Uz *****
[fichier chemin ]= uigetfile ('*.txt' , 'Ouverture du fichier Uz.txt');
chemin_fichier = [chemin fichier];
data = load(chemin_fichier); % (x,Uz)
f=1500000000:1000000:1850000000;
[NxNf ]=size(data);
Nf=Nf-1; % car la liere colonne des data est les coordonnées x du cut ligne
Uz=data(:,2:Nf+1);
x=data(:,1);
[X F]=meshgrid(x,f);
figure(1)
surf( X, F, 20.*log10(abs(Uz') ./max(max(abs(Uz')))));
view(gca,[0 90]);
colorbar
shadinginterp

                                ***** FFT(Uz) *****
dx=x(2)-x(1);
k=[0:(1/((Nx-1)*dx)):1/dx]*2*pi;
for i=1:Nf
    U(:,i)=[Uz(:,i) ;zeros(512,1)];
    fft_Uz(:,i)=(fft(U(:,i)).*dx);
end
fft_Uz=(fft_Uz(1:Nx,1:Nf));
[ K F]=meshgrid(k,f);
figure(2)
mesh( K/2, F, 20.*log10(abs(fft_Uz') ./max(max(abs(fft_Uz')))));
view(gca,[0 90]);
colorbar
shadinginterp

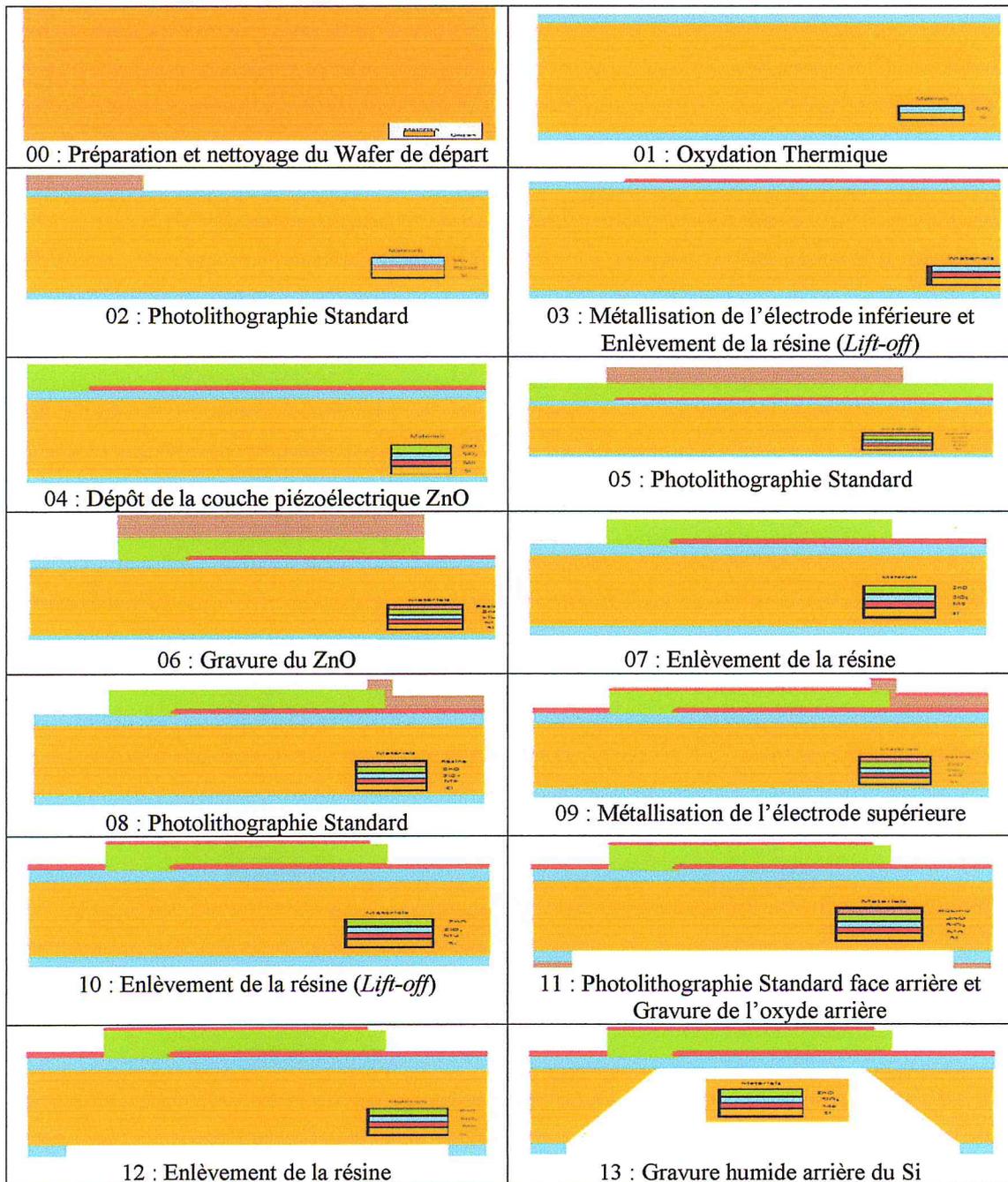
                                ***** Y11 *****

[fichier chemin ]= uigetfile ('*.txt' , 'Ouverture du fichier Y11.txt');
chemin_fichier = [chemin fichier];
data = load(chemin_fichier); % (x,Uz)
f=data(:,1);
Y11=data(:,2);
figure(3)
semilogy(f,Y11,'LineWidth',2)
xlabel('f(GHz)', 'FontSize',14);
ylabel('|Y_{11}| (\Omega^{-1})', 'FontSize',14);
set(gca,'FontSize',14)
grid on

```

Annexe (D)

Procédé de micro-fabrication d'un résonateur FBAR



[66]

