

# AlScN – Development of Novel Piezoelectric Materials

Agne Zukauskaitė – agne.zukauskaitė@iaf.fraunhofer.de

We are in constant need of more and more ways of communicating and sharing large amounts of information. A modern smartphone contains 20 – 50 RF frequency components and it is foreseen that this number will increase to as high as 100 or more over the next few years so as to accommodate all existing and future frequency bands. In order to achieve higher frequencies and build more efficient and smaller devices, we are developing novel piezoelectric materials such as aluminum scandium nitride (AlScN).

1 *A multi-chamber cluster tool dedicated to developing AlScN thin films.*

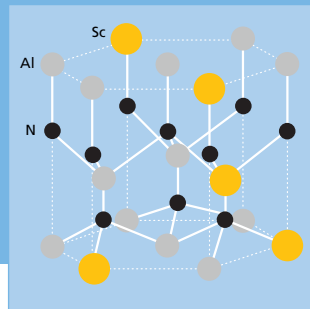
*Clusteranlage zur AlScN-Materialentwicklung.*

The piezoelectric effect allows oscillating electrical voltage to be converted into mechanical vibrations or mechanical load into an electrical signal. This material property can be used for many different applications, such as electroacoustic filters, biosensors, or energy harvesting. Today, due to its good compatibility with Si technology, high thermal stability, and high acoustic velocities, piezoelectric aluminum nitride is one of the dominant materials used in RF frequency filters for mobile telecommunications. However, relatively low electromechanical coupling and piezoelectric coefficients are factors that limit the use of AlN, so enhanced piezoelectric properties of AlScN make it a promising alternative. We use reactive magnetron co-sputtering to investigate a wide range of Sc concentrations. This growth method is attractive for industrial applications due to scalability and moderate process temperatures compatible with device fabrication.

## Highly Piezoelectric AlScN

Wurtzite-type crystals such as AlN have a permanent dipole due to vertical asymmetry in the unit cell. By alloying AlN with ScN, it is possible to create a metastable wurtzite-type aluminum scandium nitride (AlScN), in which Al and Sc are in continuous competition for different symmetry of bonding with nitrogen. This softens the bonds and makes the material more susceptible to deformation.

While this phenomenon has a positive effect on the piezoelectric properties of AlScN, it also makes the material prone to phase separation when the Sc concentration approaches 50 %. This is due to the different crystal structures of parent binary materials, namely wurtzite-type AlN and cubic ScN. If the growth parameters are properly optimized for the stabilization of the wurtzite phase, the piezoelectric coefficient  $d_{33}$  has the potential



- Novel metastable nitrides
- Enhanced piezoelectric properties
- Reactive magnetron sputtering
- Substrate pretreatment
- RF filters for mobile communications

# AlScN – Entwicklung neuartiger piezoelektrischer Materialien

Unser Bedürfnis, auf unterschiedliche Arten zu kommunizieren und große Mengen von Informationen miteinander zu teilen, wächst stetig. Ein modernes Smartphone enthält 20 – 50 Hochfrequenz-Bauelemente. Es ist absehbar, dass mit der Einführung von neuen Mobilfunkbändern die Anzahl der Bauelemente auf bis zu 100 ansteigen wird. Um höhere Frequenzen zu erreichen und um effizientere und kleinere Bauelemente realisieren zu können, entwickeln wir neuartige piezoelektrische Materialien wie beispielsweise AlScN.

15.7  
pC/N

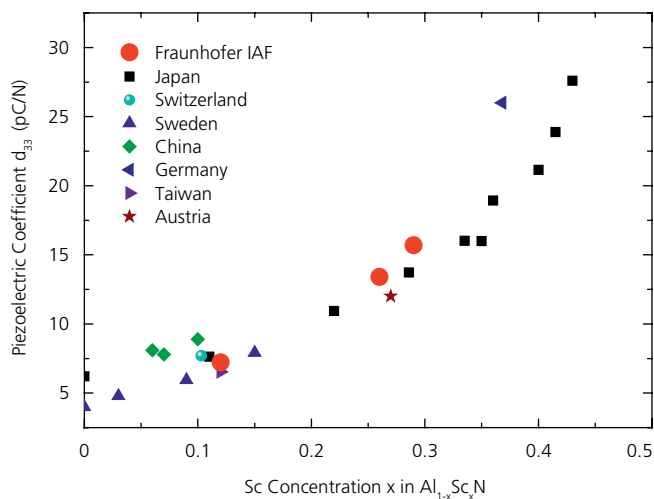
*Piezoelectric coefficient*  
 $d_{33}$  for  $Al_{0.71}Sc_{0.29}N/Si$ .  
*Piezoelektrischer Koeffizient*  
 $d_{33}$  für  $Al_{0.71}Sc_{0.29}N/Si$ .

Der piezoelektrische Effekt ermöglicht die Umwandlung von mechanischer in elektrische Energie. Diese Materialeigenschaft findet in vielen Bereichen Anwendung, z. B. in elektroakustischen Filtern, in Biosensoren oder »energy harvesting«. Aufgrund der guten Kompatibilität zur Si-Technologie, der hohen thermischen Belastbarkeit und einer großen akustischen Geschwindigkeit ist piezoelektrisches Aluminiumnitrid (AlN) eines der dominierenden Materialien für elektroakustische RF-Filter in der Mobilkommunikation. Für künftige Bauelemente, die bei höheren Frequenzen betrieben werden sollen, ist der Einsatz von AlN aufgrund der relativ geringen elektromechanischen Kopplung und des geringen piezoelektrischen Koeffizienten eingeschränkt. Aluminiumscandiumnitrid (AlScN) ist aufgrund der besseren piezoelektrischen Eigenschaften eine vielversprechenden Alternative. Wir verwenden reaktives

Magnetron Co-Sputtern um einen großen Bereich unterschiedlicher Sc Konzentrationen zu untersuchen. Dank der moderaten Prozesstemperaturen und der Skalierbarkeit ist diese Methode sehr interessant für industrielle Anwendungen.

## Stark piezoelektrisches AlScN

Wurtzit-Typ-Kristalle mit einer vertikalen Asymmetrie in der Einheitszelle (z. B. AlN) weisen ein permanentes Dipolmoment auf. Durch den Einbau von ScN in das AlN-Gitter entsteht der metastabile Wurtzit-Typ AlScN. Dabei führt die unterschiedliche Koordination von Al und Sc mit den Stickstoffatomen zu einer Schwächung der Gitterbindungen und das Material lässt sich leichter verformen. Während dieser Effekt eine positive Auswirkung auf die piezoelektrischen Eigenschaften von AlScN hat, wird das Material gleichzeitig anfälliger für Phasenseparationen bei einer



to increase to up to 27.6 pC/N for AlScN containing 43 % Sc. This would represent a more than 400 % increase compared with

AlN. In addition to the piezoelectric coefficient, the electromechanical coupling, which defines the efficiency of mechanic-to-electric energy conversion, increases from 6 % to 15 % or more due to alloying. This allows us to produce RF devices that consume a lot less power.

oxide layer and other surface contaminations are removed in a repeatable way prior to each deposition. Different gases can be used to control the nucleation behavior and polarity of nitride film deposited on substrates after such pre-treatment. Recently, up to 29 % Sc has been successfully incorporated into wurtzite AlScN layers with a d<sub>33</sub> value of 15.7 pC/N. This is in line with previous theoretical predictions and experimental data.

### Integration of AlScN into the Next-generation RF Devices

In order to produce next-generation RF filters for mobile communications in bands over 3 GHz, present-day surface acoustic wave (SAW) and thin film bulk acoustic wave resonators (TFBAR) also need to be replaced by more efficient membrane-based devices, such as Lamb wave resonators (LWR). The LWR enjoys advantages from both SAW and TFBAR: interdigital transducers (IDT) define the frequency, while the suspended membrane enables a higher quality factor Q. By integrating AlScN layers into such novel structures, we will simultaneously address the challenge of achieving higher frequencies on two fronts.

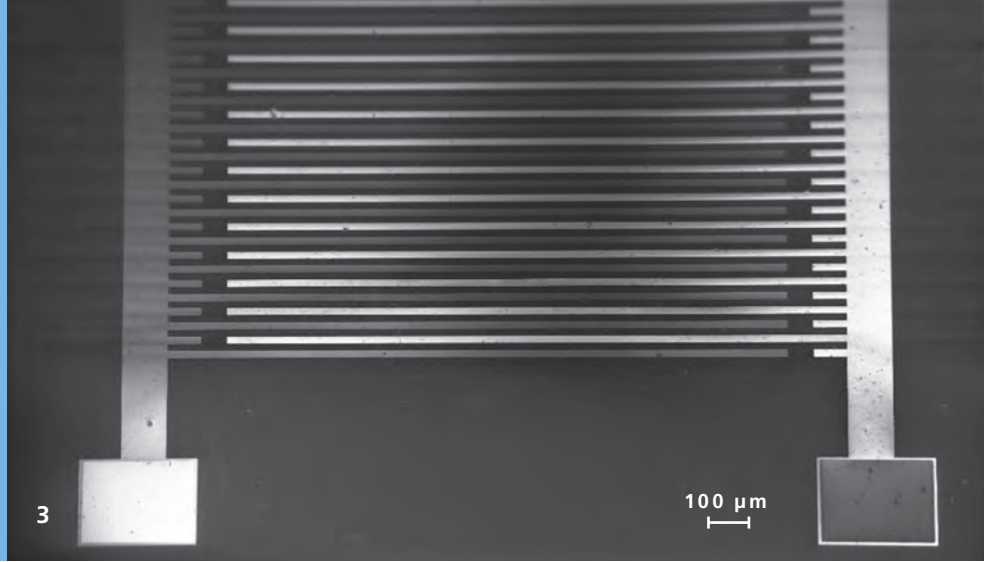
In conclusion, the synergy between material and device development is the key to providing more efficient RF devices. We see AlScN as a very strong candidate for enabling future high-data-rate mobile communications and other applications where the piezoelectric effect plays a role.

## 2 Piezoelectric coefficient d<sub>33</sub> of AlScN thin films as a function of Sc concentration.

*Piezoelektrischer Koeffizient d<sub>33</sub> von AlScN als Funktion der Sc-Konzentration.*

### AlScN Material Development at Fraunhofer IAF

The performance of electroacoustic devices such as RF frequency filters strongly depends on the material quality. Smooth piezoelectric layers with high crystalline quality, thickness uniformity, and low residual stress require careful tuning of the growth parameters as well as substrate surface preparation before growth. Due to the aforementioned metastability, the synthesis of AlScN has to be even more carefully controlled to prevent phase separation and to ensure homogeneous composition on a wafer scale. The optimization of our growth process begins at the substrate surface. By using in-situ plasma-based etching techniques we can ensure that the silicon



**3** *AlScN/Si SAW structure produced at Fraunhofer IAF. AlScN/Si-SAW-Struktur, hergestellt am Fraunhofer IAF.*

Sc-Konzentration ab ca. 50 %, da die zugrundeliegenden binären Materialverbindungen unterschiedliche Kristallstrukturen aufweisen: Wurtzit-Typ bei AlN und kubisch bei ScN. Bei optimierten Wachstumsparametern für die Stabilisierung der Wurtzitphase erreicht der piezoelektrische Koeffizient  $d_{33}$  bei einer Sc-Konzentration von 43 % Werte von bis zu 27,6 pC/N. Dies entspricht einer Zunahme von über 400 % im Vergleich zu AlN. Zusätzlich zum piezoelektrischen Koeffizient kann die elektromechanische Kopplung, das heißt die Effizienz der Wandlung von mechanischer zu elektrischer Energie, von 6 % auf 15 % und mehr gesteigert werden. Dies ermöglicht es uns, HF-Bauelemente mit deutlich geringerem Energieverbrauch herzustellen.

#### **AlScN – Materialentwicklung am IAF**

Die Leistung von HF-Filtern ist stark von der Materialqualität abhängig. Piezoelektrische Schichten mit hoher kristalliner Qualität, Dickenhomogenität und geringer Restspannung erfordern eine sorgfältige Anpassung der Wachstumsparameter sowie der Substratvorbereitung vor dem Wachstum. Aufgrund der oben erwähnten Metastabilität muss die Synthese von AlScN sogar noch genauer kontrolliert werden, um eine Phasentrennung zu verhindern und eine homogene Zusammensetzung auf Wafer-Skala zu gewährleisten. Die Optimierung unseres Wachstumsprozesses beginnt mit der Vorbehandlung der Substratoberfläche. Durch eine in-situ Plasma-basierte Ätztechnik stellen wir sicher, dass die natürliche Siliziumoxidschicht und andere Oberflächenverunreinigungen reproduzierbar

vor jedem Abscheideprozess entfernt werden. Durch die Verwendung unterschiedlicher Gase kann das Nukleationsverhalten und die Polarität der Nitridschicht kontrolliert werden. Kürzlich wurden bis zu 29 % Sc erfolgreich in Wurtzit-Typ AlScN-Schichten mit einem  $d_{33}$ -Wert von 15,7 pC/N eingebaut, der gut mit theoretischen Vorhersagen und experimentellen Daten übereinstimmt.

#### **Integration von AlScN in HF-Bauelemente der nächsten Generation**

Um HF-Filter für die Mobilkommunikation der nächsten Generation für Frequenzen oberhalb 3 GHz herstellen zu können, müssen die heute verwendeten Oberflächen (SAW)- und Dünnschicht-Volumenwellen-Resonatoren (TFBAR) durch neuere, effizientere Bauelemente ersetzt werden. Eine Möglichkeit sind membranbasierte Lamb-Wellenresonatoren (LWR). LWR vereinen die Vorteile von SAW und TFBAR: Interdigitalwandler (IDT) definieren die Frequenz, während die Membran einen höheren Gütefaktor ermöglicht. Durch die Integration von AlScN in die neuartigen Bauelemente bearbeiten wir die Herausforderungen für zukünftige HF-Bauelemente durch zwei wesentliche Weiterentwicklungen.

Folglich ist das Zusammenspiel von Material- und Bauelemententwicklung der Schlüssel für effizientere HF-Bauelemente. Wir betrachten AlScN als einen aussichtsreichen Kandidaten zur Realisierung von zukünftiger Mobilkommunikation mit hoher Datenrate sowie anderen Anwendungen, bei denen der piezoelektrische Effekt eine Rolle spielt.

> 3  
GHz

*Frequencies achievable in AlScN-based RF filters. Erreichbare Frequenzen in AlScN-basierten HF-Filtern.*