

纳米铝膜等效介电常数和磁导率的有限元模拟

樊志良¹, 刘志敏², 郑峰³

- (1. 中南大学 物理科学与技术学院, 长沙 410083; 2. 中国科学院 金属研究所, 沈阳 110001;
3. 中南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410083)

摘要:通过建立纳米铝膜/电介质复合材料的计算模型,用有限元软件 Ansoft's HFSS™ 模拟纳米铝膜/电介质复合结构的电磁散射参数(S 参数),并利用 S 参数反演得到纳米金属 Al 膜的等效介电常数和磁导率。模拟和计算结果表明:在纳米金属膜/电介质复合结构中,反射率随薄膜厚度的增加而增加,透射率则随之减少;吸收率的峰位与薄膜厚度的变化没有关系,只与电介质厚度和介电常数有关;在 X 波段,随频率增加,薄膜等效介电常数实部逐渐增加,虚部逐渐减小;磁导率实部先出现振荡,后逐渐增加;虚部则先减小,后增加,再减小;薄膜厚度的变化对等效介电常数实部和磁导率影响不大,但对等效介电常数虚部的影响显著。

关键词: 纳米铝膜; 有限元模拟; 模拟软件; 等效介电常数; 磁导率

中图分类号: TG111

文献标志码: A

Effective dielectric constant and magnetic permeability of nano Al films by finite element simulation

FAN Zhi-liang¹, LIU Zhi-min², ZHENG Feng³

- (1. School of Physical Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China;
2. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110001, China;
3. School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: A calculation model of nanosized Al films/dielectric multilayers was established. By using finite element software Ansoft's HFSS™, the electromagnetic scattering parameters of metal-dielectric composite layer structure were simulated. The effective dielectric constant and permeability of nanosized metallic films were calculated through S parameter retrieval method. The results show that the reflection of the composite structure is proportional to the film thickness, while the magnetic permeability is inversely proportional to the film thickness. The peak position of absorption is not determined by the film thickness but only related to the thickness and dielectric constant. The results obtained by finite element method and S parameter retrieval method indicate that, in X band, the real part of effective dielectric constant of the film is proportional to the frequency while the imaginary part decreases with increasing frequency. For permeability, its real part first vibrates, then increases with frequency. And its imaginary part first decreases, then increases and finally decreases with increasing frequency. In addition, the film thickness has little effect on the dielectric constant, and the real part of magnetic permeability has large influence on the imaginary part of the effective dielectric constant.

Key words: nanosized Al films; finite element simulation; simulation software; effective dielectric constant; magnetic permeability

随着电子工业集成度的提高,微波器件和微波系统的设计越来越复杂,而设计周期却越来越短。为满

足微波电路设计的需要,使用微波电子设计自动化软件工具已经成为微波电路设计的必然趋势^[1]。微波自

自动化设计软件能缩短设计周期,节约实验成本,因而也得到广泛的应用。有限元法是一种基于变分原理的近似求解数理边界值问题的数值方法,可适用于具有复杂边界形状或边界条件、含有复杂媒质(如非均匀连续媒质)的定解问题。另外,有限元模拟过程中各个环节可以实现标准化,能得到通用的计算程序,而且有较高的计算精度^[2]。因此,在微波器件分析^[3]、电磁辐射^[4]、电磁散射^[5]等众多研究领域中有非常广泛的应用。

纳米金属膜/电介质复合结构被广泛的应用于射频标签和微波器件等领域,其等效电磁参数的测量将直接影响到器件的精确设计。但到目前为止,器件的设计仍以实验为主,这涉及到纳米金属膜的制备、与电介质的复合、其微波吸收性能的检测以及制备参数的反复调整等多个环节。这些环节投入设备多,研究成本高、周期长,若能将微波电子设计自动化软件投入应用设计实际,必将有效降低设计时间和资金投入,因而降低成本,但目前相关器件设计模拟尚不成熟。为此,本文作者采用 Ansoft's HFSSTM 模拟纳米金属膜/电介质复合结构的电磁散射参数,并结合 S 参数反演法对所得到的散射参数进行后处理,得到薄膜材料的微波电磁参数。

1 实验

1.1 有限元模拟软件的选取

在众多的有限元模拟软件中,Ansoft's HFSSTM 是世界上第一个商业化的三维结构电磁场仿真软件^[6]。它采用自适应网格剖分,ALPS 快速扫频,切向元等专利技术,集成了工业标准的建模系统;同时,提供了功能强大、使用灵活的宏语言,直观的后处理器及独有的场计算器,可计算分析显示各种复杂的电磁场,

并利用 Optimetrics 对任意的参数进行优化和扫描分析。可分析仿真任意三维无源结构的高频电磁场,直接得到特征阻抗、传播常数、 S 参数及电磁场、辐射场、天线方向图等结果,因而被广泛应用于无线和有线通信、雷达、半导体和微波集成电路等设计和制造领域。

Ansoft's HFSSTM 的求解范围主要包括基本电磁场数值解和开边界问题、端口特征阻抗和传输常数、 S 参数和相应端口阻抗的归一化 S 参数和结构的本征模或谐振解。本文作者采用 Ansoft's HFSSTM 模拟纳米金属膜/电介质复合结构的电磁散射参数,并结合传输矩阵方法对所得到的散射参数进行后处理,得到薄膜材料的电磁散射参数^[7]。模拟中的薄膜厚度为 10~80 nm,模拟时考虑薄膜电导率的尺寸效应以及表面粗糙度对电导率的影响,具体的计算流程如图 1 所示^[8]。

1.2 建模及反演求解过程

本模拟使用标准的 X 波段波导管来模拟纳米铝膜/电介质复合结构的微波吸收性能,波导管横截面积为 22.86 mm×10.16 mm,模型示意图如图 2 所示。将薄膜夹在同等大小的电介板中间,模拟不同厚度的薄膜与电介板复合结构的 S 参数,然后再模拟单层电介板的散射参数。模型中电介质板为 FR4-Epoxy,厚度 d_q 为 2 mm,介电常数为 $4.4+0.05j$ (j 为虚数单位)。模拟中 Al 膜厚度为 10~80 nm,电导率由 HFSSTM 软件库给出,考虑薄膜电导率的尺寸效应以及表面粗糙度对电导率的影响。为消除波导管内电磁波高次模带来的影响,测试中空载波导管长度 L_0 设定为 20 mm。此外,本模拟利用分层阻抗边界条件来模拟纳米金属薄膜的微波反射特性,波导管壁的两个对称侧面分别设定为 PEC(理想电流边界)边界和 PMC(理想磁体边界)边界,端口 1 和 2 为波端口。考虑到所用的波导管,选择在工作频段 8.2~12.4 GHz 内扫描,在中心频段

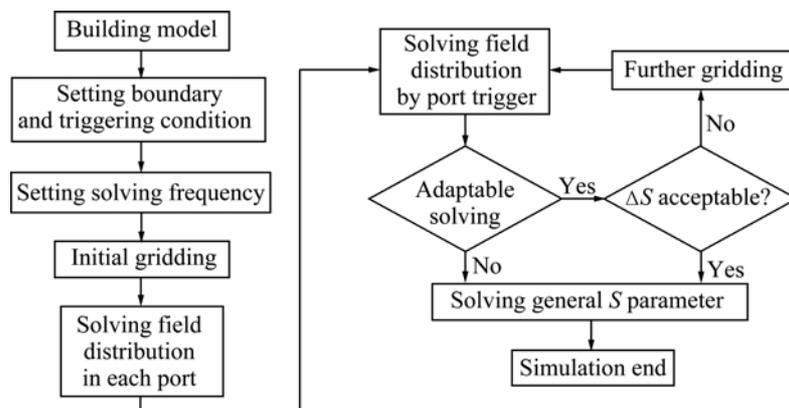


图 1 HFSSTM 求解流程图

Fig.1 Flow chart of problem solving process using HFSSTM

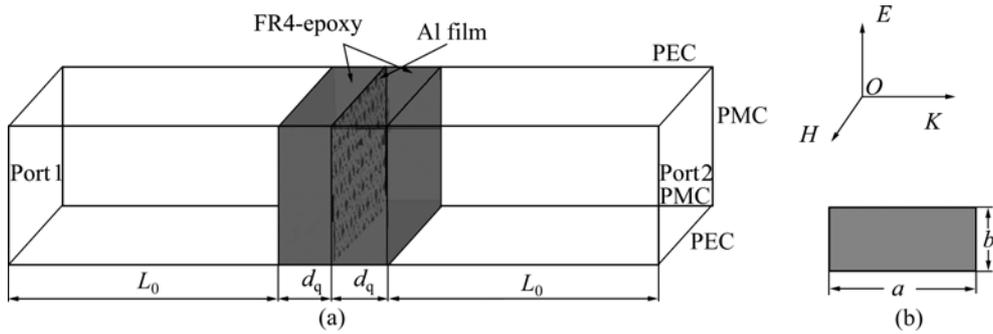


图 2 HFSSTM 仿真模型示意图和波导管的横截面

Fig.2 Schematic diagram of HFSSTM simulation mode (a) and cross section of waveguide ($a=22.86$ mm, $b=10.16$ mm) (b)

10 GHz 上执行 3 步自适应计算。

在同轴传输法/反射法的算法中, 传输样品放置在一段同轴空气传输线中。同轴空气传输线即是测试时的测量夹具, 也是模拟时的空载波导。在实际测试中, 测量夹具对测试结果的影响不可忽视。具体来说, 计算时需要得到待测样品端面 A_0 和 B_0 上的散射参数 S_{11} 和 S_{21} , 而在实际测量中, 由于网络矢量分析仪的校准平面以及测量平面均在同轴测量夹具与同轴电缆的连接面 A_1 和 B_1 上, 直接测得的散射系数分别在 A_1 和 B_1 面上的 S'_{11} 和 S'_{21} , 其中包含了夹具的影响。同样, 在模拟计算时, 为了避免高次模的影响, 需要设置长度远大于电磁波波长的空载波导, 因此引入额外的相位偏差。如何最大限度地消除空载波导的影响, 获得算法中所需要的样品的 S_{11} 和 S_{21} , 是等效电磁参数计算的关键一环^[9]。在进行空载波导去嵌入的数学处理之前, 必须用一种简单的形式来表征空载波导和样品材料。图 3 所示 HFSS 仿真模型中空载波导和待测样品信号流图, 其中样品表示为三个单独的二端口网络。其中, 空载波导被分成两半以表征样品两个端面处的同轴 - 非同轴接口, 定义为波导 A 和波导 B。以 S_{AXX} 、 S_{BXX} ($XX=11, 21, 12, 22$) 分别表示夹具 A_0 和 B_0 的 S 参数。消除测量中夹具的影响有两种方法, 即直接测量法和去嵌入法。直接测量法要求使用特殊的校准标准件插入测试夹具进行测量, 去嵌入方法则使用一个夹具模型, 用数学算法去除整个夹具的影响。夹具的去嵌入过程能对待测样品产生非常精确的测量结果, 而不需要使用复杂的非同轴校准件。在所有去嵌入方法中, 端口扩展是最简单的去嵌入方法。该方法只对测量到的 S 参数进行相位的加减, 不能对夹具损耗或阻抗不连续进行补偿。

由于 HFSSTM 模拟过程中使用的空载波导是标准波导管, 故可认为是相位长度已知的理想传输线, 无耗、特征阻抗恒定, 因此本模拟选择采用端口扩展的方法进行空载波导的去嵌入来消除空载波导对 S 参数

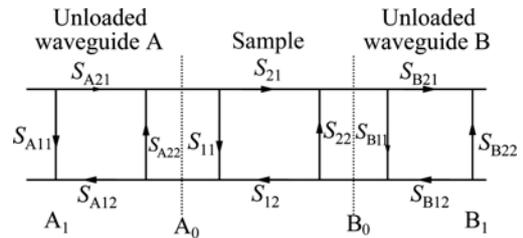


图 3 HFSSTM 仿真模型中空载波导管和待测样品的信号流图

Fig.3 Signal flow graph of unloaded waveguide and sample with HFSSTM simulation mode

结果影响, 其具体算法如下^[10]:

$$S_{11} = S'_{11} \exp(2jk_0L) = S'_{11} \exp(4j\pi L/c) \quad (1)$$

$$S_{21} = S'_{21} \exp(2jk_0L) = S'_{21} \exp(4j\pi L/c) \quad (2)$$

式中: k_0 是电磁波在介电材料中的波数; c 为真空中光速; $4\pi L/c$ 表示电磁波在空载波导中的相位差值。

2 结果与讨论

2.1 微波吸收率的模拟结果

与材料电磁参数的测试原理类似, 有限元模拟过程首先求取复合结构和单层电介质板的 S 参数, 然后利用传输矩阵计算薄膜的等效电磁参数。图 3 所示为使用 HFSSTM 对纳米金属膜/电介质复合结构微波散射参数模拟结果。从图 3 可以发现, 随着薄膜厚度的增加, 反射率 S_{11} 逐渐增加, 透射率 S_{21} 逐渐降低。而在介电材料中, 入射电磁波功率随着入射深度的增加呈指数衰减。这一结果与单层纳米金属铝膜的微波吸收特性是相同的。另外, 从图 4 我们还可以看出, 纳米金属薄膜的厚度不影响反射峰和透射峰的峰位, 只影响峰值的大小, 这与实测数据和传输线法得到的结果相符^[11]。

2.2 等效电磁参数 S 参数的反演

在波导管中，电磁波在真空和电介质材料中的波导波长分别由下式给出：

$$\lambda_{B_0} = \lambda_0 / \sqrt{1 - (\lambda_0 / \lambda_c)^2} \tag{3}$$

$$\lambda_B = \lambda_0 / \sqrt{\epsilon_r \mu_r - (\lambda_0 / \lambda_c)^2} \tag{4}$$

式中： ϵ_r 和 μ_r 分别为电介质材料的介电常数和磁导率， λ_0 为自由空间中的电磁波波长， λ_c 为波导管的截止波长。以式(3)和(4)中的 λ_B 代替 λ ，即可求出等效电磁参数常数^[12]。对于模拟过程中所用的波导管，电磁波

工作模式为横电波(TE_{10})，截止波长为 45.72 mm。而在 X 波段，电磁波在自由空间中的波长范围为 24.2~36.5 mm， $\lambda_0 / \lambda_c \gg 0$ ，截止波长的影响不可忽略。另外，为消除波导管内电磁波高次模带来的影响，取空载波导长度 L_0 远大于波导中电磁波波长，此时软件所记录的是在传输线末端的 S 参数。因此，用波导管法计算电磁参数时，需要同时考虑校准参考平面和截止波长^[13]的影响。

图 5 所示为表面粗糙度为 5 nm、薄膜厚度为 10~80 nm 的纳米金属铝膜在 X 波段等效介电常数和

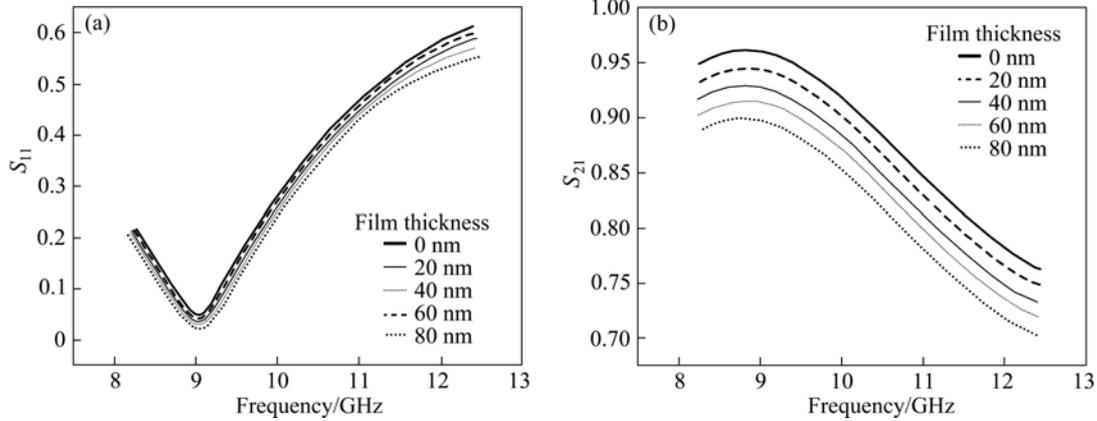


图 4 HFSS™对夹心结构 S 参数的模拟结果

Fig.4 S parameters simulation results of sandwich structure with HFSS™: (a) S_{11} ; (b) S_{21}

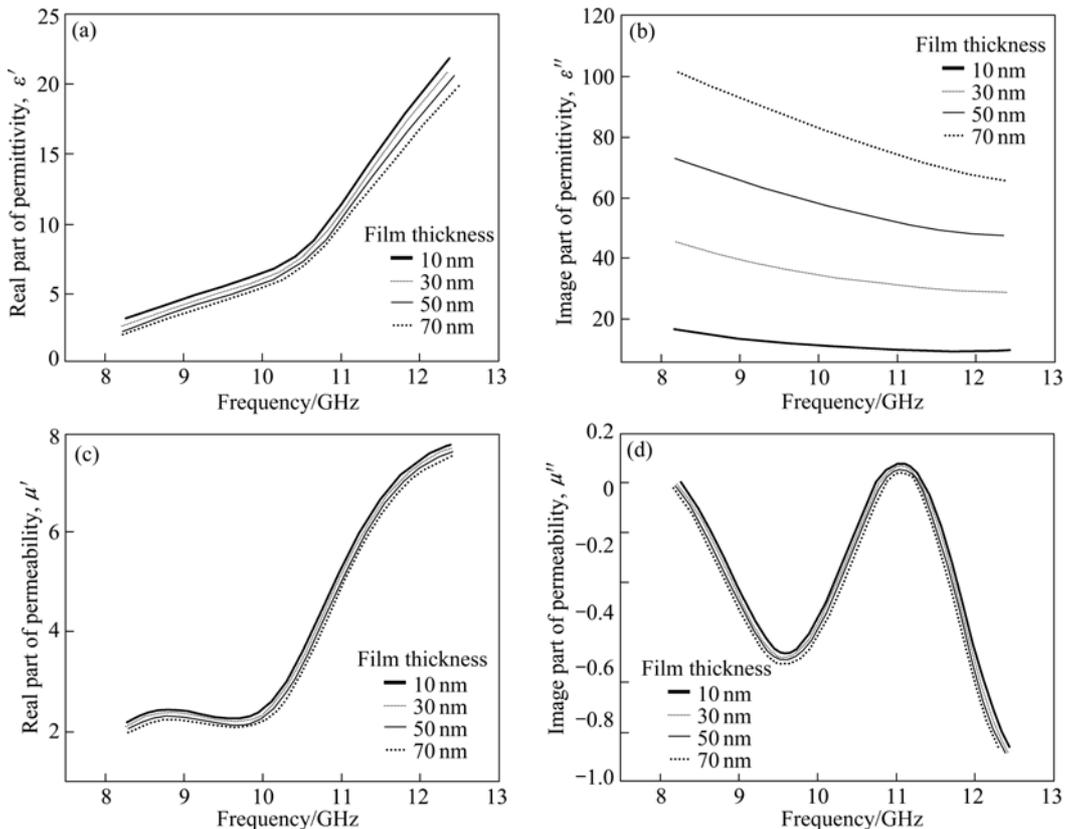


图 5 纳米金属铝膜等效介电常数和磁导率的模拟结果

Fig.5 Simulation results of effective electromagnetic parameters of nano Al films

磁导率的计算结果。

从图 5 中可以看出,在 X 波段,随着频率的增加,薄膜等效介电常数实部逐渐增加,虚部逐渐减小;而磁导率实部则先出现振荡,后逐渐增加,其虚部则先减小,后增加,再减小。另外,薄膜厚度的变化对等效介电常数实部和磁导率影响不大,但对等效介电常数虚部影响显著。原因是由薄膜的尺寸效应引起的,随着薄膜厚度的增加,薄膜电导率逐渐增加,薄膜对电磁波的吸收率会随之增加。作为介电材料对微波吸收率影响因素,等效介电常数的虚部也会逐渐增加。

2.3 等效电磁参数 S 参数反演准确性的分析

为验证实验方法的准确性,本模拟对单层电介质板的 S 参数和介电常数、磁导率进行求解^[14]。模拟时,电介质板厚度为 2 mm、介电常数 $4.4 + 0.05j$;空载波导端长度分别为 50 mm 和 48 mm。在模拟过程中,将表面粗糙度取值为 0,即不考虑金属薄膜的作用^[15]。图 6 所示为用 HFSS™ 得到的单层电介质板 S 参数模拟结果。

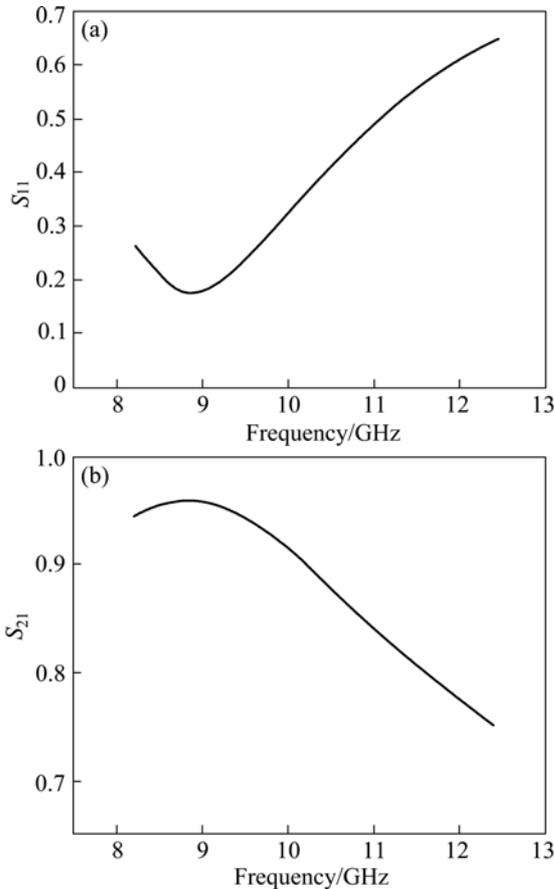


图 6 HFSS™ 对单层介质层的 S 参数模拟结果
Fig.6 S parameters simulation result of signal dielectric layer with HFSS™: (a) S_{11} ; (b) S_{21}

同样利用 S 参数反演方法,得到单层介质板的等效电磁参数,结果如图 7 所示。由计算结果可以看出,在 X 波段,电介质板的介电常数为 $4.4 + 0.05j$,磁导率为 1。这与预设的实验参数相符,证明该实验方法是可行的。

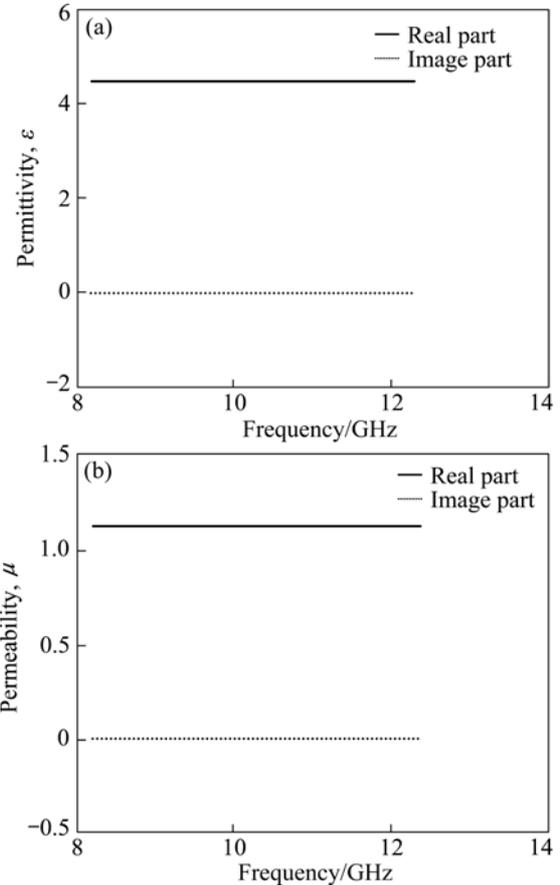


图 7 单层 FR4 板的介电常数和磁导率模拟结果
Fig.7 Simulation results of electromagnetic parameters of FR4 slab

3 结论

- 1) 在纳米金属膜/电介质复合结构中,反射率随薄膜厚度的增加而增加,透射率则随之减少,这与实验结果和传输矩阵结果是一致的。
- 2) 纳米金属膜/电介质复合结构吸收率峰位与薄膜厚度的变化没有关系,它只与电介质厚度和介电常数有关。模拟结果也验证这种关系。
- 3) 利用有限元模拟和 S 参数反演得到等效介电常数和磁导率。结果表明,在 X 波段,随频率增加,薄膜等效介电常数实部逐渐增加,虚部逐渐减小;磁导率实部先出现振荡,后逐渐增加;虚部则先减小,

后增加,再减小。另外,薄膜厚度的变化对等效介电常数实部和磁导率影响不大,但对等效介电常数虚部影响显著。

REFERENCES

- [1] KONING J, RIEBEN R N, RODRIGUE G H. Vector finite-element modeling of the full-wave maxwell equations to evaluate power loss in bent optical fibers[J]. *Journal of Lightwave Technology*, 2005, 23: 4147-4154.
- [2] 何小祥. 基于有限元法的混合技术及其在复杂电大腔体电磁分析中的应用[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2003.
HE Xiao-xiang. Hybrid methods based on EB-FEM and their applications to the EM problems of electrically large complex cavities[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2003.
- [3] LIU J, JIN J M. Scattering analysis of a large body with deep cavities[J]. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions*, 2003, 51: 1157-1167.
- [4] SHIN H, FAN S. All-angle negative refraction for surface plasmon waves using a metal-dielectric-metal structure[J]. *Physical Review Letters*, 2006, 96: 73904-73907.
- [5] BOSMAN H, LAU Y Y, GILGENBACH R M. Power absorption by thin films on microwave windows[J]. *Plasma Science, IEEE Transactions*, 2004, 32: 1292-1297.
- [6] 谢拥军, 王鹏. Ansoft hfss 基础及应用[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2007: 51-95.
XIE Yong-jun, WANG Peng. Base and basic applied study of Ansoft hfss[M]. Xi'an: Xidian University Press, 2007: 51-95.
- [7] 赵倩. Fem/pml 算法在电磁散射特性分析中的应用[D]. 西安: 西北工业大学, 2006.
ZHAO Qian. the Application of Fem/pml on electromagnetic scattering[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2006.
- [8] BOSMAN H, LAU Y Y, GILGENBACH R M. Microwave absorption on a thin film[J]. *Applied Physics Letters*, 2003, 82: 1353-1355.
- [9] User's guide-high frequency structure simulator (HFSS10) [M]. 10th ed. Pittsburgh, PA: Ansoft Corporation, 2005.
- [10] 闫润卿, 李英惠. 微波技术基础[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1997: 67-72.
YAN Run-qing, LI Ying-hui. The base of microwave technique [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1997: 67-72.
- [11] POZAR D M. Microwave engineering[M]. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons Inc, 1998: 157-162.
- [12] TAMYIS N, RAMLI A, GHODGAONKAR D K. Free space measurement of complex permittivity and complex permeability of magnetic materials using open circuit and short circuit method at microwave frequencies [C]// *Research and Development, SCOReD 2002*. 2002, 51: 394-398.
- [13] LEE M H J, COLLIER R J. Sheet resistance measurement of thin metallic films and stripes at both 130 GHz and DC[J]. *Instrumentation and Measurement, IEEE Transactions*, 2005, 54: 2412-2415.
- [14] CHARTON C F M. Optical and electrical properties of sputtered Ag films on pet webs[J]. *Surface and Coating Technology*, 2001, 142/144: 175-180.
- [15] LEE M H J, COLLIER R J. The sheet resistance of thin metallic films and stripes at both DC and 130 GHz[J]. *Microelectronic Engineering*, 2004, 73/74: 916-919.

(编辑 龙怀中)