

MODELAJE Y SIMULACION MULTIFISICA DE UN SENSOR DE GAS DE SnO₂ EN COVENTORWARE™

Andrés Felipe Méndez Jiménez, Alba Ávila Bernal

Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica, Universidad de los Andes. Bogotá, Colombia.
Noviembre de 2005

felip-me@uniandes.edu.co, a-avila@uniandes.edu.co

Resumen: Se desarrolló modelo en COVENTORWARE™ de un sensor de gas de película delgada de SnO₂, previamente fabricado en el LAAS² y se validó utilizando los resultados experimentales del sensor MS que propuso [2], se analizaron los efectos de la variación de parámetros como la conductividad térmica de la membrana, su espesor y los coeficientes de convección del dispositivo y a partir de las simulaciones se optimizó el sensor al proponer una nueva geometría para la superficie de la membrana y cambiar el material de ésta además de usar un nuevo modelo para el microcalefactor. Los resultados de simulación arrojan un ahorro en potencia cercano al 75% respecto al sensor MS con una mejora notable en la selectividad¹ y sensibilidad del sensor.

Palabras Clave - Finite element methods, Gas detectors, Microsensors, Microelectromechanical devices, Pollution control, Simulation software.

1. INTRODUCCIÓN

En la última década la comunidad mundial se ha dado cuenta de la importancia de la conservación del medio ambiente y ha sido clara la tendencia creciente por la utilización de tecnologías ‘verdes’ que contribuyan al desarrollo ecológicamente sostenible de los países. Es esta una de las causas por las que los sensores de gas se han convertido en un atractivo campo de investigación por su utilidad en el control de emisión de gases para el sector automotriz e industrial. [3] Además de este campo de aplicación los sensores de gas son también utilizados en los sectores de seguridad industrial/comercial (detección de gases combustibles como el propano, metano, hidrogeno, etc), consumidor domestico (alarmas de CO en hogares, vehículos recreativos como jet sky, botes, etc), detección de olores (narices electrónicas), detección de fugas (gases tóxicos), control ambiental (monitoreo de la calidad del aire, ozono, etc), detectores de humo y en general en numerosas tecnologías

que requieren de la detección de partículas en el medio ambiente.

En 1998 Astié [2] diseñó un sensor de gas de SnO₂ (MGS1100) para MOTOROLA con la colaboración del LAAS², basado en una tecnología existente propiedad de MICROSENS SA que constituyó un gran avance respecto a las otras tecnologías, pues el consumo de potencia era 10 veces menor al de sus competidores y los costos de fabricación se redujeron enormemente al utilizar los procesos tradicionales de micro-maquinado en MEMS.

Este trabajo complementa los resultados de un modelamiento previo en SESES [2] y ANSYS [1] y presenta algunas de las principales ventajas de COVENTORWARE™ sobre otros paquetes, que entre otras se traducen en una reducción significativa del tiempo de diseño. COVENTORWARE™ es el paquete computacional líder a nivel mundial en la industria de diseño y simulación de MEMS, con la base instalada mas grande del mundo que incluye a los 10 fabricantes mas importantes de microsistemas y entre cuyos clientes se encuentran compañías tan importantes como Intel, BOSCH, EPSON, Texas Instruments, Mitsubishi Electric, Hewlett Packard, Pirelli entre otros [19].

Este documento esta estructurado de la siguiente forma: En la siguiente sección se hará una breve introducción al funcionamiento específico de la familia de sensores de gas de Motorola. Posteriormente se describe la metodología de diseño que maneja COVENTORWARE™ además se mostrarán algunas de las consideraciones que se tuvieron en cuenta para el desarrollo del modelo FEM del sensor MS que se validó con los resultados experimentales de [2], posteriormente con base en las simulaciones se hace una análisis del funcionamiento del sensor y finalmente se muestran los resultados de la optimización del sensor MS.

¹ La capacidad de un sensor para distinguir entre diferentes tipos de gases.

² Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes, Toulouse FR.

2. SENSORES DE GAS DE PELÍCULA DELGADA DE SnO₂

Recientemente se ha venido trabajando con una generación de micro-sensores en los que la película sensible esta compuesta por una delgada capa de dióxido de estaño (SnO₂) sobre un sustrato de silicio. Esta generación de sensores aventaja a otras familias principalmente por su tamaño y costo de fabricación, pues se utilizan las tecnologías convencionales de micro-fabricación utilizadas en MEMS que aseguran la fácil reproducibilidad de los dispositivos (producción en masa) a un bajo costo.

Mediante la detección de las variaciones de conductividad eléctrica en la película de SnO₂ por el fenómeno de adsorción³, se detectan las partículas de gas presentes en el ambiente

Para el buen funcionamiento de estos sensores (alta selectividad y sensibilidad) es necesario que la película sensible (SnO₂) alcance una temperatura de operación máxima cercana a los 450°C [2], esto constituye un problema creciente por lograr alta eficiencia en el proceso de calentamiento, pues se deben minimizar las pérdidas térmicas para disminuir el consumo de potencia del dispositivo. Utilizando esta tecnología se diseñó en 1998 el sensor MGS1100 para Motorola [2].

El sensor es fabricado sobre un sustrato de Silicio que sirve de soporte para la micro-estructura (Fig. 1). El núcleo de funcionamiento del sensor es el micro-calefactor que se encarga de calentar la película sensible de SnO₂ a una temperatura máxima de 450°C, este micro-calefactor es de polisilicio con características de alta conductividad eléctrica y baja conductividad térmica para minimizar el consumo de potencia del dispositivo.

La membrana es de silicio P++ y es fabricada a partir de un proceso de *etching* anisotrópico con KOH [2], esta membrana funciona como soporte mecánico y aislante térmico para el micro-calefactor, disminuyendo así las pérdidas térmicas por conducción hacia el sustrato.

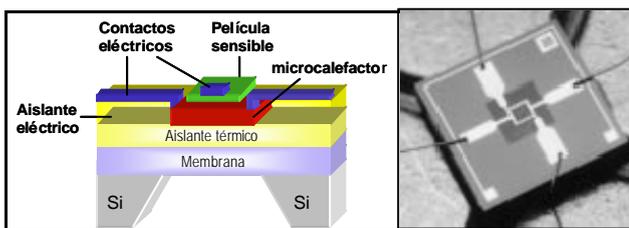


Fig 1. a) [14] Diagrama esquemático de un sensor de gas de SnO₂, corte transversal. b) [18] Imagen bajo el microscopio del sensor MSGS3000.

En la parte superior de la membrana se deposita una película de oxido de Silicio con el fin de aislar térmicamente al micro-calefactor de la membrana, sobre el micro-calefactor se deposita otra capa de oxido con el la función de aislar eléctricamente a la película sensible. Finalmente se hacen 4

metalizaciones de platino para formar los contactos eléctricos que permiten el calentamiento del micro-calefactor y la medición de las características de la película sensible. El MGS1100 es producto de un cambio en la geometría del microcafeactor del sensor MS diseñado por [2] en el mismo trabajo para MOTOROLA, para la validación del modelo en COVENTORWARE™ se usaron los resultados del sensor MS, sus principales características físicas son las siguientes:

- Superficie del chip: 3100x3100 μm².
- Película sensible: SnO₂ de 300 x 360 μm². 0.25 μm de grosor.
- Contactos eléctricos: Cr/ Ti /Pt.
- Resistencia de calentamiento: En polisilicio con un grosor de 0.4 μm.
- Membrana: de silicio P++, superficie de 1800 x 1800μm², 2.5 μm de grosor.
- Aislamiento eléctrico: sobre el microcafeactor se usa Oxido de silio de 0.5 μm de grosor y bajo este un oxido de 0.25 μm de espesor.

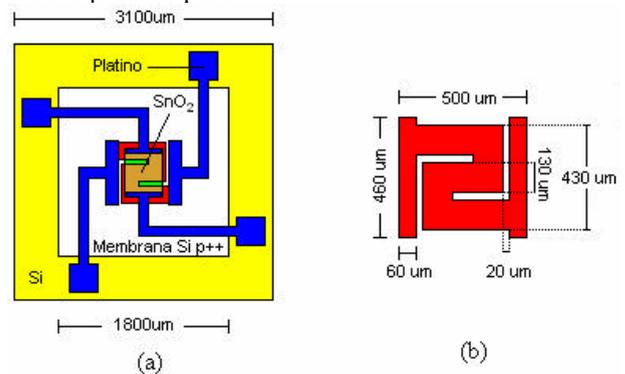


Fig. 2. (a) Vista superior del sensor MS y dimensiones del dispositivo. (b) Geometría del microcafeactor.[2]

3. METODOLOGÍA DE DISEÑO EN COVENTORWARE™

En general el proceso de diseño de dispositivos en herramientas de modelado por elementos finitos comprende 3 grandes etapas: Definición de la geometría, Enmallado, condiciones de frontera y Simulación del modelo.

Usualmente se crea la geometría del dispositivo con el uso de entornos CAD, en otros casos como el de SESES se define un archivo de texto a partir del cual se genera la geometría en base a las funciones matemáticas que describen los modelos 2D y se generan los volúmenes a partir de operaciones vectoriales de revolución, extrusión, etc. En el caso de COVENTORWARE™ se define la geometría en términos del proceso de fabricación, esto brinda una versatilidad enorme al momento de crear estructuras complejas además que ofrece una estrategia de modelado consistente con el diseño de MEMS. El programa posee 4 módulos: DESIGNER, ARCHITECT, ANALYZER E INTEGRATOR.

Se utiliza el DESIGNER para construir la geometría del dispositivo (Fig. 2). Para esto hay que definir las propiedades

³ Es el fenómeno químico mediante el cual se acumulan moléculas en la superficie de una sustancia.

de los materiales a utilizar, hay que tener en cuenta que estas son propiedades *in situ*, y posteriormente se define en forma de lista el proceso de fabricación del modelo, este proceso puede incluir etapas de *etching* (isotrópico, anisotrópico, etc.), deposición de capas, capas de sacrificio, etc.

Una vez se definen los materiales y el proceso de fabricación se utiliza el Layout Editor para crear las máscaras que caracterizan cada una de las etapas de *etching* que dan forma a las capas definidas en el proceso de fabricación, de modo similar a los procesos tradicionales de fotolitografía.

Finalmente el *Preprocessor* genera automáticamente el modelo 3D que representa la geometría del dispositivo. Posteriormente se debe crear un enmallado para el modelo, para esto COVENTORWARE™ cuenta con varias posibilidades que se escogen dependiendo de la geometría y la precisión que se busca tener en las simulaciones, con el *trade-off* de una gran carga computacional cuando la precisión requerida es muy alta.

Esta etapa de enmallado corresponde al módulo ANALYZER que se encarga de las simulaciones numéricas. El siguiente paso consiste en escoger el ambiente de simulación, el programa posee simuladores para efectos: térmicos, eléctricos, mecánicos, termoeléctricos, ópticos y magnéticos. Una característica importante es que a pesar que internamente el simulador trabaja en forma cíclica, es decir que encadena los resultados de los entornos físicos, el flujo de modelamiento puede ser paralelo, pues para el usuario es posible realizar simulaciones acopladas en una sola simulación.

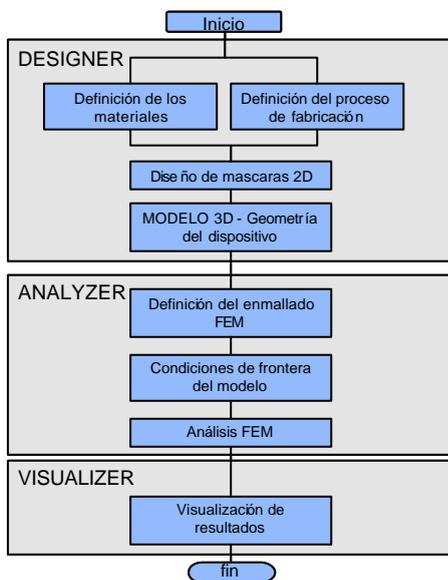


Fig. 3. Proceso de diseño en COVENTORWARE™

Ya en el simulador se definen las condiciones de frontera y se corre la simulación. Además de las simulaciones estáticas, COVENTORWARE™ permite hacer simulaciones paramétricas de manera automática, basta con definir el parámetro y los incrementos, sin embargo para este tipo de simulaciones es recomendable definir un enmallado no muy complicado para ahorrar tiempo de simulación. Para la visualización de resultados se utiliza el VISUALIZER que es un software que permite crear imágenes 2D y 3D del modelo así como visualizar

campos vectoriales, gráficas de temperatura, voltaje, Animaciones, etc.

Los módulos ARCHITECT e INTEGRATOR no fueron usados en este proyecto, sin embargo ofrecen características únicas en el mercado, el INTEGRATOR permite extraer macro-modelos de las simulaciones FEM y a partir de estos modelos simplificados es posible utilizar el ARCHITECT para hacer simulaciones complejas a nivel de sistema (simulaciones esquemáticas con el uso de varias librerías de dispositivos, actuadores, generadores de onda, etc) de un dispositivo en ocasiones hasta 1000 veces más rápido que con algún modelo FEM tradicional.

Bajo este esquema podemos identificar algunas de las principales ventajas:

- Al permitir un flujo de diseño como el presentado, es posible modelar geometrías complejas mediante un proceso similar al proceso de fabricación. Esto permite que, gracias a que la geometría se construye con máscaras, sea posible realizar cambios importantes de forma únicamente manipulando las máscaras de proceso.
- Es posible enmallar en corto tiempo geometrías complejas con tamaños distintos de los elementos de la malla sin necesidad de definir ecuaciones de acople entre las partes de un dispositivo. Además, se presentan varias alternativas de enmallado que le dan gran versatilidad a este proceso.
- Permite la definición de coeficientes de convección a partir de la velocidad y temperatura del aire sobre una superficie.
- COVENTORWARE™ permite definir una gran variedad de simulaciones, desde paramétricas (En términos de la variación de un parámetro físico, como por ejemplo las propiedades de los materiales, la temperatura, etc) hasta paramétricas acopladas (permite acoplar los esfuerzos mecánicos y deformaciones a partir de los resultados de una simulación electro-térmica, entre otros). Todas estas predeterminadas y fácilmente realizables.

4. CONSIDERACIONES DE DISEÑO Y RESULTADOS.

4.1 Especificación del Modelo

Inicialmente se pensó en la posibilidad de importar la geometría del sensor del modelo ya realizado en ANSYS por [1], sin embargo dada la exclusividad de los métodos de diseño de COVENTORWARE™ es complicado importar modelos 3D compatibles, además que ANSYS solo tiene un formato para exportar que es el IGS3D, formato que no contiene información sobre el modelo FEM, sino únicamente información de la Geometría.

Para el diseño del sensor de gas se siguió el proceso mostrado en la figura descrito en la anterior sección. La geometría que se construyó conserva las especificaciones de tamaño y materiales del sensor MS, con la única diferencia que en este modelo no se incluyó la película sensible, los contactos eléctricos sobre ésta y el *etching* de la base del sensor no fue

anisotrópico, es decir que las paredes laterales interiores del sustrato se modelaron a 90° respecto a la superficie y no con la inclinación⁴ producida por el proceso de fabricación. El análisis del sensor se centra en la optimización del proceso por el cual se calienta la película sensible a 450°C, los aspectos relevantes sobre el funcionamiento de esta película se analizan en el trabajo realizado en [17].

Las propiedades de los materiales que son importantes dentro de una simulación termoeléctrica son la conductividad térmica, la conductividad eléctrica, el calor específico y la densidad. COVENTORWARE™ tiene predefinida una librería de materiales de los que se usó el Silicio para el sustrato y el óxido térmico y de silicio para los aislantes, las propiedades de estos son las mismas de los definidos por ASTIE [2]. Respecto a los otros materiales ASTIE [2] define las conductividades térmicas, y se utilizó la información de [4] a [11] para determinar el calor específico y la densidad, y la conductividad eléctrica fue determinada a partir de la resistividad.

Una de las propiedades más importantes en el sensor es la conductividad térmica de la membrana, pues ésta se encarga de disminuir las pérdidas por conducción hacia el sustrato, existe poca información en la literatura sobre esta propiedad para materiales dopados, en [12] y [13] se muestran valores para el silicio dopado con 10^{19} atm/cm³ aceptores, los valores son de 50 W/mK y 70 W/mK respectivamente. La variación de este parámetro es significativa dentro del modelo como muestra Astié en [2] quien determinó que un cambio de 10 W/mK en este parámetro puede ocasionar una variación de hasta 100K en la temperatura máxima de la película sensible, lo que demuestra la importancia de la escogencia de las propiedades de los materiales para el correcto análisis e interpretación del modelamiento de MEMS, además los valores propuestos en la literatura llevan a resultados errados en las simulaciones de [2], por lo que para obtener resultados acordes entre las simulaciones y los experimentos Astié determina que la conductividad térmica de la membrana debe ser 35 W/mK. Sin embargo esta conclusión se basa en los resultados de simulación en SESES⁵, por lo que para este caso en que se utiliza una herramienta distinta es necesario ajustar el valor de la conductividad térmica para obtener simulaciones precisas. Así se determina que bajo el ambiente de simulación de COVENTORWARE™ es necesario que la conductividad térmica de la membrana sea 38 W/mK de forma que se minimice el error de simulación.

Las discrepancias entre estos valores y la literatura radican principalmente en que en los estudios realizados no exceden normalmente los 400K, mientras que en el sensor la temperatura de operación es cercana a los 700K y si se sabe que la conductividad térmica depende del dopaje y la temperatura [15] y los dopajes son similares, se puede atribuir la diferencia a

⁴ Esto se asumió teniendo en cuenta que [1] concluyó que estos aspectos no son relevantes en la simulación del modelo y si aportan mayor grado de complejidad computacional a la solución.

⁵ SESES es la herramienta de simulación FEM que se utiliza en [2], es un software suizo no comercial desarrollado por el centro de física computacional del ZHW.

que la temperatura del sensor es mucho más alta y la conductividad térmica para el silicio disminuye en función de la temperatura [9].

Además de estas propiedades COVENTORWARE™ permite definir la constante elástica, viscosidad, propiedades piezo-resistivas, constante dieléctrica e incluso cada uno de los parámetros puede ser definido de múltiples formas por ejemplo como constantes escalares, según una tabla, de acuerdo a un polinomio, según el dopaje, etc. En este caso dado que se va a realizar una simulación estática se asumieron las propiedades de los materiales como constantes.

Una vez definidos los materiales, el proceso y las mascararas se genera automáticamente el modelo geométrico 3D del sensor. El siguiente paso es el proceso de enmallado, para la simulación del sensor MS se escogieron elementos *Manhattan Bricks* lineales que gracias a su característica de ortogonalidad en las 3 dimensiones brindan una solución acorde a la geometría del dispositivo. Además no es necesario utilizar condiciones de contacto, ya que el modelo es enmallado automáticamente por COVENTORWARE™ al definir correctamente los tamaños de los elementos, optimizando así el tiempo de diseño, cosa que no sucede con ANSYS. Hay que tener en cuenta que generalmente el proceso de enmallado es engorroso en otras herramientas como ANSYS, pues toca definir manualmente los elementos en las partes del modelo, junto con sus ecuaciones de acople en las fronteras.

La geometría del sensor requiere que se definan tamaños distintos para los elementos de la malla en cada una de las partes del modelo, pues si se usara el mismo tamaño para todas las partes se tendría un modelo muy complejo para poder representar con precisión los fenómenos que ocurren en las partes más pequeñas de la geometría como en el microcalefactor. Por esto es necesario definir elementos de menor tamaño en la resistencia de calentamiento y los caminos de platino. COVENTORWARE™ no permite definir elementos diferentes para una misma región⁶ con el fin de poder generar un enmallado continuo para todo el modelo. Si se quiere hacer eso es necesario generar varias regiones y utilizar condiciones de contacto mecánico, térmico y eléctrico que se definen en el simulador correspondiente.

A pesar de esto, si es posible, para algunos elementos, especificar factores de refinado para las distintas partes de una geometría. En el caso de los *Manhattan Bricks* se puede definir una restricción de tamaño y otra de número de elementos, cada una de estas se puede especificar para las 3 dimensiones X, Y y Z. La primera restricción establece el tamaño máximo de los elementos y la segunda el mínimo y máximo número de elementos por cada borde del modelo. Esta última restricción es muy útil e importante, pues permite definir distintos tamaños para los elementos de la malla en distintas partes de la geometría ya que el tamaño de estos depende del tamaño de los bordes y de este modo se puede lograr una buena resolución para la parte central del sensor en la que hay bordes muy pequeños (el más pequeño es de 20µm en la resistencia de

⁶ Coventorware define una región para todos los elementos que estén en contacto entre sí.

calentamiento). Si solo se usara la primera restricción, el algoritmo generaría un enmallado en el que se obtiene una precisión similar en cada parte del modelo, sin embargo al incluir la segunda restricción se limita la complejidad de la malla en las partes de mayor tamaño.

En [14] se hizo un análisis teniendo en cuenta los tiempos de simulación y la precisión de los resultados para determinar las restricciones de enmallado, en este se estableció el mínimo número de elementos en X y Y igual a 4, en Z igual a 1 y el tamaño máximo en X, Y igual a $100\mu\text{m}$ y en Z = $60\mu\text{m}$ para obtener un buen balance entre precisión y complejidad. Bajo estas condiciones las simulaciones termoeléctricas toman entre 5 y 10 minutos⁷ con errores inferiores al 5% respecto al valor de convergencia.

Para el módulo de simulación termoeléctrica COVENTORWARE™ permite establecer condiciones de frontera de temperatura, Voltaje, corriente, densidad de corriente, flujo de calor, convección-radiación, entre otros, únicamente aplicables a superficies. Las condiciones de frontera que se utilizaron para la validación del modelo son las mismas definidas por [2] para la simulación del sensor MS en SESES.

A partir de termografías tomadas de los experimentos sobre el sensor, Astié determinó que la temperatura en la base y las caras laterales exteriores se mantiene constante a 350K. Astié también utilizó una CF de convección y otra de radiación, completando así los 3 fenómenos de transferencia de calor COVENTORWARE™ permite definir CF de este tipo aun sin saber los coeficientes de convección de las superficies, basta con conocer la temperatura y velocidad del aire y el programa determina el coeficiente de convección. En este caso conocemos los coeficientes según [2] quien propone $125\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ para la superficie del sensor y $62.5\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ para las paredes interiores del sustrato junto con la base de la membrana (Fig. 4). Las emisividades se toman como 0.7 y 0.3 para el silicio y el platino respectivamente y la temperatura del aire igual a 300K (temperatura ambiente).

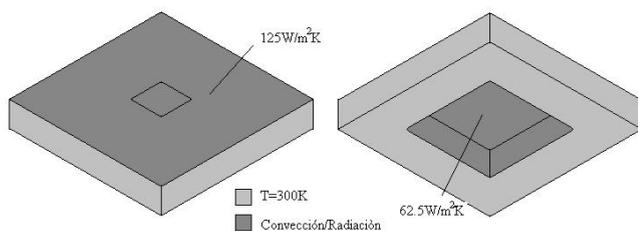


Fig. 4. Condiciones de frontera de temperatura [1].

Finalmente otra CF que se utiliza en la simulación es el potencial aplicado entre las 2 terminales del microcalefactor (Sobre los contactos de platino), [2] no define el valor de este potencial, sin embargo debe ser el necesario para elevar la temperatura máxima de la película sensible a 450°C que en este caso fue de 6.48V tomado de una simulación paramétrica.

⁷ Las simulaciones se hicieron en una máquina con Windows XP, 512MB de RAM DDR 333 y un procesador Athlon XP 1800+.

4.2 Resultados experimentales

Los resultados experimentales son producto de los experimentos de Astié [2] para el diseño del sensor MGS1100 para Motorola, estos se resumen en la Tabla 1 y corresponden a los resultados tomados de la operación del sensor MS que se muestra en la Fig. 2. Con estos resultados se pretende validar el modelo realizado en COVENTORWARE™ y posteriormente se utilizará esa herramienta para la validación del modelo propuesto por [1] quién lo simuló en ANSYS.

Tabla 1. Resultados experimentales del Sensor MS.

CONSUMO(mW)	TEMP SnO ₂	TEMP. CONTACTOS Pt(°C)
166	390	300

4.3 Validación del modelo

Los experimentos realizados para tomar las medidas sobre el sensor MS se detallan en [2]. Para garantizar el óptimo funcionamiento del sensor la temperatura máxima en la película sensible de SnO₂ no debe sobrepasar los 450°C , además la temperatura promedio debe ser lo mas cercana a este valor para mejorar la selectividad y sensibilidad del sensor[2]. La segunda restricción sobre el dispositivo es que la temperatura máxima de los contactos de platino-polisilicio no sobrepase los 300°C para evitar efectos de electro migración y electrodifusión que degradan los contactos [2].

Para la validación del modelo realizado en COVENTORWARE™ se usaron los procedimientos y condiciones de frontera presentadas en la sección 4.1. En la Tabla 2 se resumen los resultados de la simulación Termoeléctrica del Sensor MS usando MemEthern, este simulador calcula inicialmente el potencial eléctrico en el modelo a partir de las CF de Voltaje o Corriente, posteriormente usando los valores de corriente calcula el calentamiento de Joule en los elementos resistivos teniendo en cuenta las CF de conducción, convección y/o radiación para generar los valores de temperatura en el modelo. Usando el campo térmico que genera el simulador es posible utilizar MemMech para calcular las deformaciones y esfuerzos causados por las expansiones térmicas.

Los resultados de la simulación son muy similares a los datos experimentales, lo que valida el modelo realizado en COVENTORWARE™ y permite utilizarlo para analizar el funcionamiento del sensor y explorar cambios en la geometría que puedan mejorar las condiciones de operación del dispositivo.

Tabla2. Resultados experimentales y simulaciones del sensor MS para una Temp. Max. de 450°C en la película sensible con un grosor de 2.5 μm en la membrana.

	CONSUMO (mW)	TEMP. SnO ₂ (°C)	TEMP. CONTACTOS Pt(C)
EXPERIMENTAL[2]	166	390	300
SESES[2]	164.5	387	307
ANSYS[1]	153	400	299
COVENTORWARE	165	399	298

4.4 Análisis del sensor MS

Las CF eléctricas no tienen ningún problema, pues basta con recalcularlas en cada modelo para satisfacer la restricción de temperatura máxima en la película sensible (450°C). Sin embargo las CF de temperatura no representan adecuadamente el modelo general del sensor, pues [2] define una temperatura constante en las extremos laterales del sensor a partir de las termografías realizadas, cuando en realidad esta temperatura depende de los procesos de transferencia de calor por convección, radiación y conducción que se presentan en los bordes del sustrato y por lo tanto la CF cambia cuando se alteran las características del modelo. [1] propuso modelar esta CF como un proceso de transferencia de calor por convección.

A partir de esto se hizo una simulación paramétrica para determinar el valor del coeficiente de convección de las paredes laterales exteriores tal que se cumplan las CF del modelo experimental, el valor obtenido fue de 70 W/m²K, el valor que obtuvo [1] fue de 64.7 W/m²K, la diferencia entre estos dos resultados se debe principalmente a las consideraciones que se tuvieron en este caso sobre la conductividad térmica de la membrana y que se detallan en la sección 4.1.

La mayor ventaja de utilizar modelos computacionales para simular dispositivos es poder simular cambios en las especificaciones del modelo sin necesidad de recurrir a costosas pruebas experimentales. A continuación se aprovecha la capacidad de COVENTORWARE™ para hacer simulaciones paramétricas al simular los efectos de variaciones en algunos de los parámetros de diseño mas significativos del sensor.

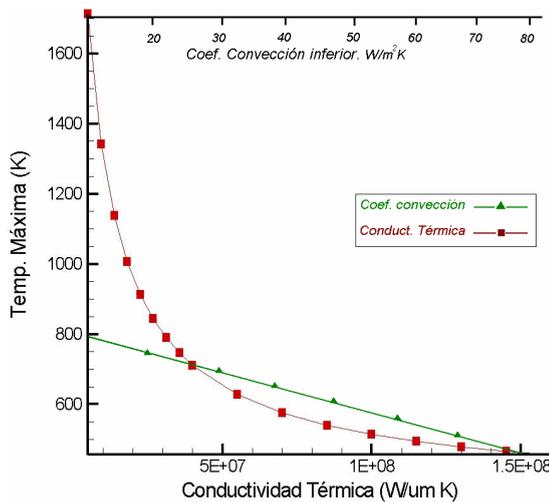


Fig. 5. Variación del coeficiente de convección (W/m²K) de la cavidad inferior del sensor y de la conductividad térmica de la membrana.

Según la Fig. 5 al disminuir el coeficiente de convección⁸ se disminuye el consumo de potencia del dispositivo, pues se

⁸ Hay que tener en cuenta que el coeficiente de convección superior es el doble del inferior [16].

requiere menos potencia para alcanzar temperaturas altas en la película sensible.

Esto tiene sentido, pues al disminuir el coeficiente de convección se está disminuyendo la tasa de transferencia de calor y por lo tanto se minimizan las pérdidas por convección en el sensor. Según [2] la cantidad de calor disipada por convección en la superficie está dada por:

$$q = hA(T_s - T_\infty) \quad (\text{Ec. 1})$$

En donde h y A corresponden al coeficiente de convección promedio y el área de la superficie respectivamente, y $T_s - T_\infty$ representa la diferencia de temperaturas entre la superficie y la temperatura ambiente. La Ec. 1 corresponde a la aproximación del fenómeno de convección a un proceso de convección forzada de flujo laminar [9]. En esta aproximación el coeficiente de convección es proporcional a la raíz cuadrada del número de Reynolds que está dado por:

$$\text{Re}_L = \frac{u_\infty L}{\nu} \quad (\text{Ec. 2})$$

Donde u_∞ es la velocidad del aire, L es la longitud del lado de la superficie paralelo al flujo y ν es la viscosidad cinética del aire. El coeficiente de convección se relaciona con L de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$h = K \sqrt{\text{Re}_L} / L \quad (\text{Ec. 3})$$

En donde K es una constante que incluye varias propiedades del fluido, en este caso el aire. Usando la Ec.2 en la Ec.3 e incluyendo ese resultado en la Ec. 1, tenemos que:

$$q = K \sqrt{L} L_2 (T_s - T_\infty) \quad (\text{Ec. 4})$$

De la Ecuación 4 se deduce que para minimizar la potencia disipada por convección en la superficie bajo condiciones de temperatura constante es necesario reducir la longitud L y L_2 de la superficie, es decir disminuir el área superficial del chip. Además teniendo en cuenta la Ec. 2, otra forma de disminuir las pérdidas por convección es reduciendo la velocidad del flujo de aire u_∞ en el sensor.

Según la Fig. 5 es necesario reducir la conductividad térmica de la membrana para disminuir el consumo de potencia del dispositivo, pues al igual que con el coeficiente de convección, a medida que disminuye la conductividad térmica se necesita menos potencia de entrada para garantizar las condiciones de operación en la película sensible. A partir de esta simulación surge la necesidad de ajustar la conductividad térmica de la membrana, pues como se vio en la sección 4.1, los valores propuestos en la literatura no coinciden con los resultados experimentales. Según la simulación cuando la conductividad térmica es menor a 50 W/mK el consumo de potencia es muy sensible a cambios en la conductividad y como en este caso se quiere trabajar con materiales de baja conductividad térmica es necesario determinar con exactitud este parámetro para obtener simulaciones coherentes. El efecto de la disminución de la conductividad térmica es minimizar las pérdidas por conducción hacia el sustrato.

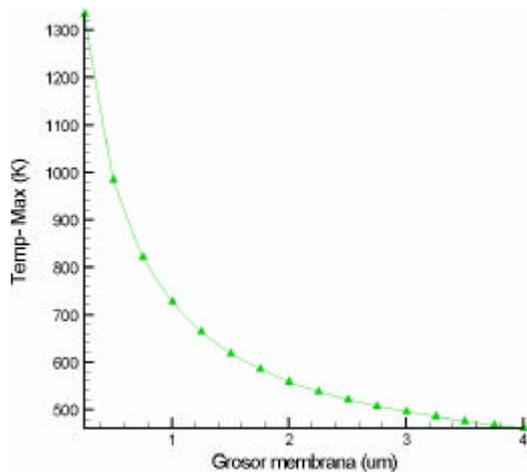


Figura 6. Efectos del grosor de la membrana en la temperatura máxima de la película sensible.

En la fig. 6 se muestra como influye el grosor de la membrana en la temperatura de la película sensible, este factor es muy significativo en el consumo de potencia, pues la temperatura máxima de la película de SnO₂ es muy sensible a pequeñas variaciones en el grosor de la membrana para valores inferiores a 2μm.

5. OPTIMIZACIÓN DEL SENSOR MS

En el diseño de este tipo de dispositivos se deben tener en cuenta los siguientes criterios de optimización:

- Minimizar el consumo de potencia.
- Maximizar la selectividad y sensibilidad del sensor.
- Reducir los costos de producción.

Para lograr el primer objetivo es necesario buscar estrategias para minimizar las pérdidas por algún efecto térmico, bien sea convección, conducción o radiación, pues el funcionamiento del sensor se centra en el calentamiento de la película sensible y este debe ser un proceso eficiente. El segundo criterio se puede satisfacer garantizando una temperatura homogénea y elevada que no supere los 450°C en la película de SnO₂[2] Finalmente para minimizar los costos de producción es necesario buscar procesos productivos más eficientes, materiales menos costosos y en general buscar la fácil reproducibilidad de los sensores.

5.1 Membrana de oxinitruro de silicio.

En la sección 4.4 se analizaron 3 factores que pueden minimizar el consumo de potencia del dispositivo. Uno de ellos es disminuir el tamaño del chip para minimizar las pérdidas por convección, sin embargo esta estrategia requeriría de un montaje experimental como el que usó [2] para determinar los coeficientes de convección de manera precisa, por lo que en este caso no se tendrá en cuenta este aspecto.

Los otros 2 parámetros involucran disminuir el grosor de la membrana y utilizar un material de menor conductividad térmica. Aparentemente un buen candidato para el material de la membrana sería el óxido de silicio que presenta una baja

conductividad térmica (1.4 W/mK), sin embargo su comportamiento mecánico es deficiente debido a su alto estrés residual [2]. En la literatura se proponen algunos materiales dieléctricos para las membranas, sin embargo [2] utiliza una membrana de oxinitruro de silicio (SiO_xN_y) que presenta baja conductividad térmica y buen comportamiento mecánico. La composición que optimiza el rendimiento de fabricación y minimiza los esfuerzos internos de la membrana es SiO_{0.89}N_{0.73} [4], la conductividad térmica de este material se determina experimentalmente en 5 W/mK, además en [2] se hace un análisis similar al de la sección 4.4 en el que se determina que el grosor que minimiza el consumo de potencia y maximiza el rendimiento de fabricación es de 1.5μm, de este modo se utilizará en el modelo una membrana de menor conductividad térmica (k) y grosor (g). Según el análisis de la sección 4.4 menor k y menor g debe reducir significativamente las pérdidas por conducción en el sensor MS.

Para reducir las pérdidas por conducción proponemos una nueva geometría para la superficie de la membrana que permite ahorros en potencia cercanos al 75%. La nueva superficie se muestra en la fig. 7.b, con esta geometría se obtiene un gradiente muy grande entre las regiones del microcalefactor que están en contacto con la membrana y las que no lo están, a medida que disminuye L la geometría se aproxima al caso inicial y los ahorros en potencia no son significativos. Es por esto que se prefiere usar la geometría de la Fig 7.c, pues el mayor ahorro en consumo se presenta al minimizar la superficie de contacto bajo la resistencia de calentamiento sin comprometer la estabilidad mecánica de la micro-estructura.

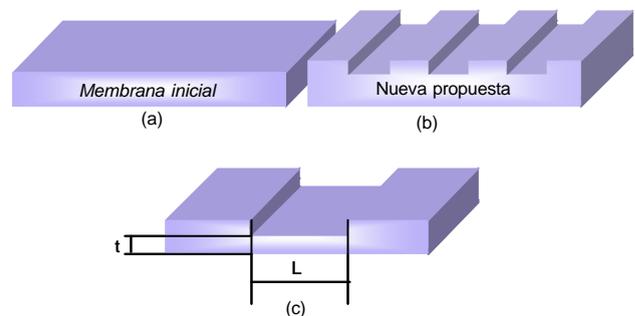


Fig. 7 a) superficie de la membrana del Sensor MS. b) Nueva propuesta para la geometría superficial de la membrana. c) Propuesta final para la membrana.

Después de realizar una simulación paramétrica para L , se tiene que con $L=720\mu\text{m}$ y $t=1\mu\text{m}$ se obtiene una temperatura promedio en la película sensible de 390°C. A medida que se disminuye L se sacrifica la homogeneidad de la temperatura e incrementa el consumo de potencia. Se hizo una simulación estructural con la nueva geometría y la máxima deflexión en el dispositivo cuando se aplica una fuerza de 980.7μN (una masa aplicada de 100mg) sobre la superficie es de tan solo 11nm. El comportamiento de la deflexión en función de la masa aplicada es lineal de 0 a 100mg.

Al utilizar esta nueva geometría pueden ocurrir efectos de convección y radiación en la cavidad entre el óxido que sostiene al microcalefactor y la membrana. Esto requiere

pruebas experimentales para garantizar buena precisión en la simulación, sin embargo utilizando los coeficientes de radiación del modelo inicial se hizo una simulación paramétrica para el coeficiente de convección en la cavidad, en donde se encontró que una variación del coeficiente de convección de 0 a 200mW corresponde a una disminución de 140°K en la temperatura de la película sensible. Según el análisis de la sección 4.4, el coeficiente de convección es inversamente proporcional a L, sin embargo si asumimos que en el peor de los casos la velocidad del aire en la cavidad es la misma de la superficie, en la nueva geometría L tendría la misma magnitud por lo que la potencia disipada dependería únicamente del área de convección. En este caso, despreciando la superficie que no esta con contacto con el microcalefactor, la potencia disipada corresponde al 23% del área superficial, por lo que las pérdidas estimadas al utilizar la nueva geometría para la membrana deben ser cercanas al 23% de la potencia disipada por convección en la superficie.

Sin tener en cuenta la convección en la cavidad, el consumo del dispositivo es de 19.6mw. Utilizando un coeficiente de convección de 125W/m²K el consumo es de 24.4mW, cerca de un 85% menor al del sensor MS.

5.2 Geometría del microcalefactor

Además de minimizar el consumo de potencia es necesario garantizar la buena selectividad y sensibilidad del sensor, el bajo consumo de potencia exhibido por la nueva geometría de la membrana permite elegir una nueva geometría para la resistencia de calentamiento, ver Fig. 8⁹. Esta geometría a pesar que su consumo es superior al de las usadas por [1] y el sensor MS, permite una homogeneidad superior en la película sensible.

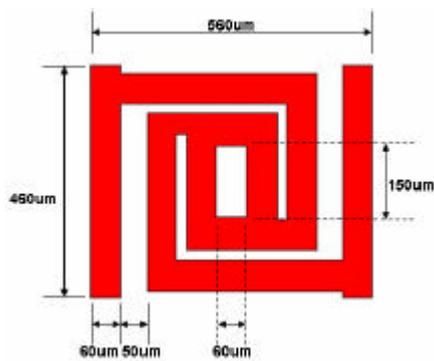


Fig. 8. Nueva geometría para el microcalefactor.

5.3 Optimización del sensor MS

El sensor optimizado incluye la nueva geometría para la superficie de la membrana; el oxinitruro de silicio SiO_{0.89}N_{0.73} en vez del silicio p++ y la nueva propuesta para la geometría del microcalefactor. En la Tabla 3 se muestran los resultados de las simulaciones en COVENTORWARE™ del sensor MS, el

sensor propuesto por [1] que hasta el momento solo se había simulado en Ansys y la nueva propuesta. Se incluye una medida de la homogeneidad que corresponde a la varianza de los datos de temperatura en la película sensible (900 datos).

Tabla 3. Resultados de la simulación varios sensores.

	MS	Nueva Propuesta	Sensor de [1]
CONSUMO(mW)	166	38	35
TEMP. SnO ₂	398	415	388
TEMP	298	237	235
CONTACTOS(°C)			
HOMOGENEIDAD	988	286	1591

El sensor propuesto presenta un ahorro de cerca del 75% respecto a la simulación del sensor MS, además la temperatura promedio en la película sensible aumentó 15°C, lo que representa una mejora en la selectividad y sensibilidad del sensor. la temperatura de los contactos no excede los 300°C.

6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

- Dentro de la simulación termoeléctrica uno de los factores críticos es la conductividad térmica de la membrana, es de vital importancia asegurar buena precisión en la medida de esta propiedad.
- COVENTORWARE™ permite optimizar el tiempo en el proceso de diseño de microestructuras, algunas de sus principales ventajas son la creación de geometría mediante una lista de proceso y la facilidad para enmallar cualquier tipo de geometría en poco tiempo.
- En partes de un modelo cuyo espesor es menor a 4μm resulta irrelevante utilizar mas de un elemento en el enmallado para el grosor.
- Una geometría como la propuesta para la membrana en esta investigación constituye una alternativa muy interesante para disminuir el consumo de potencia, sin embargo es necesario comprobar experimentalmente que tipo de fenómeno domina el transporte de calor en la cavidad.
- Se analizó un sensor de gas de SnO₂ modelado en la herramienta COVENTORWARE™. Se analizó el consumo de potencia sobre una geometría óptima con menor consumo de potencia y mayor homogeneidad en la película sensible, bajo las restricciones de temperatura en los contactos (300°C). La disminución de la conductividad térmica, el espesor de la membrana y el coeficiente de convección representan ahorros importantes en el consumo de potencia del sensor.
- Fue imposible utilizar elementos parabólicos, hacer simulaciones por el algoritmo indirecto al usar *Manhattan Bricks* y simular el comportamiento dinámico del sensor principalmente por altos requerimientos de memoria RAM para los elementos parabólicos y por errores de convergencia causados aparentemente por incompatibilidades entre la arquitectura de la máquina y COVENTORWARE™.

⁹ La nueva geometría se escogió teniendo en cuenta los análisis de [1] y [2] sobre varias geometrías alternativas para el microcalefactor.

- Dado que el fenómeno de convección domina las pérdidas de potencia es necesario disminuir el tamaño de los sensores y asegurar un flujo mínimo de aire para minimizar las pérdidas térmicas. A futuro las investigaciones se enfocarán en independizar el modelo de resultados experimentales mediante la simulación del aire con las herramientas de *microfluidics* de COVENTORWARE™, de este modo sería posible simular los fenómenos de convección sin necesidad de conocer los coeficientes, permitiendo así la manipulación total de la geometría.

7. REFERENCIAS

- [1] D. Reyes, A. Avila, “Modelaje Multifísico de un Sensor de Gas”. Proyecto de grado. Universidad de los Andes. Por Publicar.
- [2] S. Astie, “Intégration d’un capteur de Gaz à Oxyde Semi-conducteur sur Silicium”. Rapport LAAS 98537. Toulouse 1998.
- [3] <http://www.sensorsmag.com/resources/businessdigest/sbd1102.shtml>
- [4] S. Astie, A. Gue, Thermal Simulation of an Integrated Gas Sensor Using SESES, LAAS report 96504, 1996.
- [5] S. Astie, A. Gue, E. Scheid, J. Guillemet. “Electro-Thermal Modeling: Design Tool for the Conception of A Low Power SnO₂ Gas Sensor”, LAAS Report 98141, 1998.
- [6] Tai-Ran Hsu, MEMS and Microsystems Design and Manufacture. McGraw Hill. 2003.
- [7] <http://web.mit.edu/6.777/www/matprops>
- [8] <http://www.memsnet.org/material/>
- [9] F. Incropera, D. DeWitt, “Introduction to Heat Transfer”, Third Edition, John Wiley & Sons, New York, 1996.
- [10] <http://www.comppub.com/publications/msm/2000/pdf/t45.08.pdf>
- [11] Ben G. Streetman and Sanjay Banerjee, “Solid State Electronic Devices”, 5th Edition, Prentice Hall, New Jersey, 2000.
- [12] V. Demarne, “Réalisation d’un capteur de gaz intégré sur silicium, étude des mécanismes physicochimiques liés au fonctionnement de ces capteurs, dans le cas de couches minces de dioxyde d’étain pur et dopé”, Thèse n° 934, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 1991.
- [13] O. Paul, M. Von Arx, H. Baltes, “Process-dependent thermo-physical properties of CMOS IC thin films”, 8th Int. Conf. Solid State Sensors and Actuators and Eurosensors IX, Sessions A1 – PD6 n°1, 1995.
- [14] A. Méndez, A. Ávila. “Modelaje y Simulación Multifísica de un Sensor de Gas de SnO₂ en COVENTORWARE™”. Proyecto de Grado. Universidad de los Andes.
- [15] M. N. Wybourne, “Properties of Silicon”, EMIS Data Reviews Series N°4, INSPEC, 1998.
- [16] J. F. Sacadura. “Initiation aux transferts thermiques”. Technique et Documentation, Paris, ISBN 2-85206-618-1, 1993.
- [17] Muñoz, M. Guerrero, “Formulación y validación de un modelo funcional para un sensor de gas de SnO₂”. Universidad de Los Andes.
- [18] Microsens S.A. “Microsens Semiconductor Gas Sensor”. Sensor Description.
- [19] www.coventor.com