

Математическое моделирование распределения температуры в тепловых микросенсорах

А.Г. Козлов

Омский государственный университет, kozlov@phys.omsu.omskreg.ru

Аннотация — Представлен метод аналитического моделирования распределения температуры в тепловых микросенсорах с термически изолированными структурами. Двумерная структура разделяется на ряд прямоугольных зон, для каждой из которых определяются условия теплообмена с окружающей средой и соседними зонами. Распределение температуры в каждой зоне находится методом Фурье. Плотности тепловых потоков между соседними зонами представлены как суммы соответствующих ортогональных функций с неизвестными весовыми коэффициентами, значения которых определяются из граничных условий сопряжения между всеми соседними зонами. Система уравнений для неизвестных весовых коэффициентов является системой линейных уравнений. В качестве примера представлено определенное распределение температуры в конкретной структуре микроболометрической ячейки, изготовленной травлением жертвенного слоя.

Ключевые слова — тепловые микросенсоры, распределение температуры, метод Фурье, микроболометр.

I. ВВЕДЕНИЕ

Большую группу среди микроэлектронных сенсоров составляют тепловые микросенсоры, которые характеризуются тем, что при их функционировании существенную роль играют тепловые процессы [1]. Все многообразие тепловых микросенсоров можно разделить на следующие группы:

- 1) микросенсоры прямого преобразования, которые используются для непосредственного измерения параметров тепловых процессов (температура, количество тепла, тепловые потоки);
- 2) микросенсоры с промежуточным тепловым преобразованием, в которых измеряемая величина вначале преобразуется в тепловой сигнал, а затем в электрический; к этой группе тепловых микросенсоров относятся тепловые приемники излучения, микроболометры, электротепловые преобразователи, микрокалориметры;
- 3) микросенсоры с управляемыми тепловыми потоками; к этой группе микросенсоров относятся тепловые микросенсоры для измерения потока жидкости или газа, тепловые микросенсоры для измерения давления, тепловые акселерометры, газовые кондуктометрические микросенсоры;

- 4) микросенсоры с температурной активацией и управлением; к этой группе микросенсоров относятся газовые микросенсоры на основе полупроводниковых оксидных материалов и твердых электролитов;
- 5) микросенсоры, использующие несколько тепловых эффектов; к этой группе микросенсоров относятся газовые каталитические микросенсоры, которые функционируют при высоких температурах и при этом преобразуют концентрацию горючего газа в окружающей среде в тепло, а только затем в электрический сигнал.

С целью повышения эффективности тепловых микросенсоров, уменьшения их потребляемой мощности и увеличения чувствительности элементы микросенсоров располагают на специальных термически изолированных структурах, полученных анизотропным травлением кремния или травлением жертвенных пленочных слоев. При определении параметров тепловых микросенсоров, разработке и оптимизации их конструкции необходимо знать распределение температуры в их термически изолированных структурах. Экспериментальное определение распределения температуры в тепловых микросенсорах является чрезвычайно сложной задачей из-за малых размеров термически изолированных структур. Единственным путем определения распределения температуры в микросенсорах на термически изолированных структурах является математическое моделирование. В частности, в данной работе будет рассмотрено аналитическое моделирование распределения температуры в тепловых микросенсорах на термически изолированных структурах на основе метода, предложенного в [2, 3].

II. МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Метод для моделирования температуры в тепловых микросенсорах использует следующий алгоритм.

1. Двумерная структура теплового микросенсора разделяется на прямоугольные зоны в зависимости от состава слоев и условий тепловыделения. Каждая зона заменяется эквивалентной зоной с однородными параметрами (эквивалентной толщиной, $d_c^{(j)}$, и эквивалентной теплопроводностью, $\lambda_c^{(j)}$):

$$d_e^{(j)} = \sum_{i=1}^n k_i^{(j)} d_i^{(j)} ;$$

$$\lambda_e^{(j)} = \frac{\sum_{i=1}^n k_i^{(j)} d_i^{(j)} \lambda_i^{(j)}}{d_e^{(j)}} ,$$

где $k_i^{(j)}$ - коэффициент, равный отношению общей площади слоя i в зоне j к площади этой зоны; $d_i^{(j)}$ - толщина слоя i в зоне j ; $\lambda_i^{(j)}$ - удельная теплопроводность материала слоя i в зоне j .

2. Для каждой зоны определяются условия теплообмена с окружающей средой посредством теплопередачи через газовую среду и радиационного теплообмена через нижнюю и верхнюю поверхности зоны и посредством теплопроводности через края зоны с соседними зонами и подложкой. При этом общую удельную мощность теплопередачи от зоны j в окружающую среду через нижнюю и верхнюю поверхности, $N_t^{(j)}$ можно представить в следующей форме

$$N_t^{(j)} = A_j (T_j - T_{en}) ,$$

где $A_j = h_c + \frac{\lambda_a}{d_1^{(j)}} + 4\sigma(\varepsilon_1^{(j)} + \varepsilon_u^{(j)})T_{en}^3 ;$

A_j - суммарный коэффициент поверхностного теплообмена в зоне j ; T_j - температура зоны j ; T_{en} - температура окружающей среды; h_c - коэффициент конвекции для данной структуры газового микросенсора; λ_a - удельная теплопроводность окружающей воздушной среды; $d_1^{(j)}$ - расстояние между нижней поверхностью зоны j и дном протравленной полости; σ - постоянная Стефана-Больцмана; $\varepsilon_1^{(j)}$, $\varepsilon_u^{(j)}$ - коэффициенты излучения нижней и верхней поверхностей зоны j , соответственно.

Условия теплообмена с соседними зонами и подложкой посредством теплопроводности через края зоны j могут быть заданы с помощью граничных условий на этих краях. При этом, исходя из геометрии термически изолированных структур тепловых микросенсоров, возможны три варианта граничных условий на краях выделенных зон:

- край зоны совпадает с линией крепления термически изолированной структуры к подложке; в этом случае подложка является эффективным поглотителем тепла и на краю зоны следует использовать неоднородные граничные условия 1 рода;

- край зоны граничит с окружающим воздухом; в этом случае, учитывая малую толщину зоны, можно использовать однородные граничные условия 2 рода;

- край зоны граничит с краем соседней зоны; в этом случае должны использоваться граничные условия сопряжения.

3. Для каждой зоны определяется стационарное уравнение теплопроводности, которое решается методом Фурье. Учитывая, что условия теплообмена в зонах (за исключением теплообмена по краям зон) имеют одинаковый вид, стационарные уравнения теплопроводности для зон будут иметь также одинаковый вид. Эти уравнения могут быть представлены в следующей общей форме:

$$\frac{\partial^2 T_j'}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 T_j'}{\partial y_j^2} - p_j^2 T_j' = \varphi^{(j)} , \quad (1)$$

где

$$T_j' = T_j - T_{en} ;$$

$$p_j = \sqrt{\frac{A_j}{\lambda_e^{(j)} d_e^{(j)}}} ;$$

$$\varphi^{(j)} = -\frac{q^{(j)}}{\lambda_e^{(j)} d_e^{(j)}} ;$$

$q^{(j)}$ - удельная мощность тепловыделения в зоне j .

Решение уравнения (1) методом Фурье имеет следующий вид:

$$T_j'(x_j, y_j) =$$

$$- \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Psi_{km}^{(j)}}{\|\Psi_{km}^{(j)}\|^2} \frac{1}{(\gamma_{km}^{(j)})^2} \int_0^{l_j} \int_0^{b_j} \Psi_{km}^{(j)} \varphi^{(j)} dx_j dy_j +$$

$$+ \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Psi_{km}^{(j)}}{\|\Psi_{km}^{(j)}\|^2} \frac{1}{(\gamma_{km}^{(j)})^2} \int_{L_j} [\Theta_{km}^{(j)}(x_j, y_j)]_{(x_j, y_j) \in L_j} d\xi_j , \quad (2)$$

где $\Psi_{km}^{(j)}$ - собственные функции однородной краевой задачи с однородными граничными условиями для рассматриваемой зоны; $\|\Psi_{km}^{(j)}\|^2$ - квадрат нормы собственных функций; $(\gamma_{km}^{(j)})^2$ - собственные значения однородной краевой задачи с однородными граничными условиями для рассматриваемой зоны; $\Theta_{km}^{(j)}(x_j, y_j)$ - функция, заданная на граничном контуре L_j , которая зависит от граничных условий и значения собственных функций; $d\xi_j$ - дифференциал длины дуги граничного контура.

Форма решения уравнения теплопроводности для каждой зоны зависит от граничных условий на ее краях и определяется видом собственных функций. Для зон, которые имеют границы с соседними зонами, граничными условиями на этих границах являются граничные условия сопряжения. Для них распределение температуры в форме (2) получено при условии, что на указанных границах выполняются граничные условия 2 рода. В этом случае после вычисления функции $\Theta_{km}^{(j)}(x_j, y_j)$ в выражении для распределения температуры появляются плотности тепловых потоков между соседними зонами, значения которых неизвестны. Для нахождения значений плотностей тепловых потоков они представляются как суммы соот-

ветствующих ортогональных функций с неизвестными весовыми коэффициентами. В окончательном виде выражение для распределения температуры, полученное на основе выражения (2), содержит неизвестные весовые коэффициенты, которые характеризуют процесс теплообмена между соседними зонами.

4. Определяются значения неизвестных весовых коэффициентов. Для этого используются уравнения равенства температур из граничных условий сопряжения между соседними зонами. В этих уравнениях необходимо перейти к конечным суммам и разделить их на отдельные уравнения в соответствии с индексами "k" и "m". Полученные уравнения являются линейными уравнениями относительно неизвестных весовых коэффициентов. Чтобы получить полную систему уравнений для всех неизвестных весовых коэффициентов, следует объединить системы линейных уравнений для всех границ в одну обобщенную систему линейных уравнений. Удобно записать эту обобщенную систему уравнений в матричном представлении

$$M\Delta = \Phi, \quad (3)$$

где M – матрица коэффициентов при неизвестных весовых коэффициентах; Δ – вектор неизвестных весовых коэффициентов; Φ – вектор правых частей.

Матрица M может быть представлена в виде блочной матрицы с подматрицами, которые характеризуют каждое множество коэффициентов при весовых коэффициентах на каждой границе между зонами. Аналогичным образом можно представить векторы Δ и Φ . Вектор Δ содержит подвекторы, каждый из которых состоит из весовых коэффициентов для плотности теплового потока на данной границе. Вектор Φ содержит подвекторы, каждый из которых состоит из правых частей уравнений, полученных из уравнения равенства температур на данной границе.

В общем случае, система линейных уравнений (3) содержит большое число неизвестных весовых коэффициентов и уравнений. Однако при практическом применении число неизвестных весовых коэффициентов и уравнений в системе (3) может быть сокращено, исходя из требуемой точности решения, путем выбора предельных значений для индексов "k" и "m". В этом случае, система линейных уравнений решается известными методами. Весовые коэффициенты, найденные в результате этого решения, позволяют окончательно определить распределение температуры в зонах газового микросенсора.

Разработан ряд модификаций метода: а) метод с использованием замены граничных условий; б) метод определения распределения температуры в косоугольных структурах; в) метод с использованием усеченных структур; г) метод определения распределения температуры в микросенсорах с высокой рабочей температурой; д) метод определения нестационарного распределения температуры.

При моделировании распределения температуры в тепловых микросенсорах, работающих при высоких температурах, необходимо использовать специальные итерационные процедуры, которые позволяют более точно учитывать тепловые потери за счет радиационного теплообмена и зависимость параметров используемых материалов от температуры. Применение итерационных процедур в представленном методе определения распределения температуры дает дополнительное преимущество, которое обусловлено тем, что для каждой зоны теплового микросенсора итерационная процедура проводится независимо. Это позволяет повысить точность определения распределения температуры в тепловых микросенсорах, работающих при высоких температурах.

Рассмотрены погрешность и адекватность предложенного метода моделирования распределения температуры в тепловых микросенсорах. Установлены основные составляющие погрешности моделирования. Определено, что для всего спектра применяемых материалов и при соотношении геометрических размеров зон $d_e^{(j)} \leq \frac{l_j}{3}, \frac{b_j}{3}$ средневзвешенная по модулю

погрешность физической модели, обусловленная переходом к эквивалентным зонам с однородными параметрами, не превышает 4,8%, а средневзвешенная по модулю погрешность физической модели, обусловленная использованием условий сопряжения между зонами, – 2,2%. Погрешность расчета, обусловленная использованием предельного значения индексов суммирования равно 25, не превышает 0,51%. Для подтверждения адекватности предложенного метода проведено сравнение с экспериментальными результатами, полученными тепловизионным методом на примере тестовой структуры. Показано, что погрешность моделирования температуры по отношению к экспериментальным результатам не превышает 7,6%. Расхождение результатов, полученных предложенным методом для консольной структуры, с точным аналитическим решением при предельном значении индексов суммирования, равно 25, не превышает 0,66%. Предложено для оценки адекватности моделей использовать условия теплового баланса: сравнение генерируемой в структуре мощности с мощностью, рассеиваемой в окружающую среду, значение которой определяется из полученного распределения температуры.

III. ПРИМЕРЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Предложенный метод был использован для моделирования распределения температуры в тепловых микросенсорах с различными конструктивными вариантами термически изолированных структур, а именно: консоли; мосты (двух- трех- и четырехплечевые); закрытые прямоугольные мембраны; прямо-

угольные мембраны, закрепленные с помощью прямоугольных и косоугольных мостов. На основании данного метода разработаны алгоритмы моделирования стационарного распределения температуры в следующих типах тепловых микросенсоров: тепловые приемники излучения с неоднородным распределением потока излучения, тепловые приемники ИК излучения с оптическим считыванием на основе биметаллов, электротепловые преобразователи, газовые термокаталитические микросенсоры, тепловые акселерометры.

Предложенный метод был использован для моделирования распределения температуры в структуре микроболометра с термически изолированной структурой, изготовленной путем травления жертвенного слоя. Конструкция микроболометрической ячейки представлена на рис. 1. Конструктивные параметры болометрической ячейки имели следующие значения:

- размеры термически изолированной структуры: длина – 200 мкм; ширина – 200 мкм; толщина – 0,5 мкм;
- ширина поддерживающих мостов – 20 мкм; толщина – 0,5 мкм;
- толщина резистивного слоя – 0,4 мкм;
- материал резистивного слоя – диоксид ванадия;
- материал прямоугольной термически изолированной структуры и поддерживающих мостов – диоксид кремния.

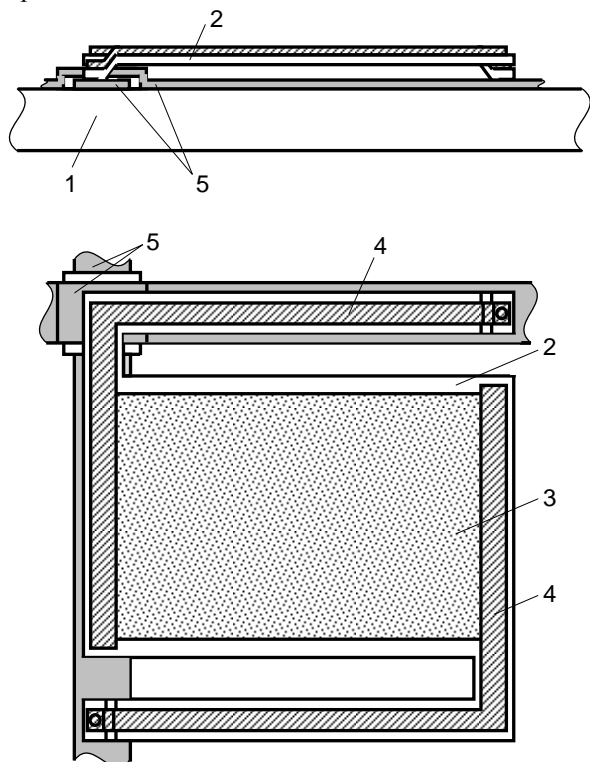


Рис. 1. Микроболометр, изготовленный путем травления жертвенного слоя: (1) подложка; (2) термически изолированная структура; (3) резистивный слой; (4) проводящий слой; (5) шины считывания

Полученное распределение температуры в ряде зон болометрической ячейки показано на рис. 2.

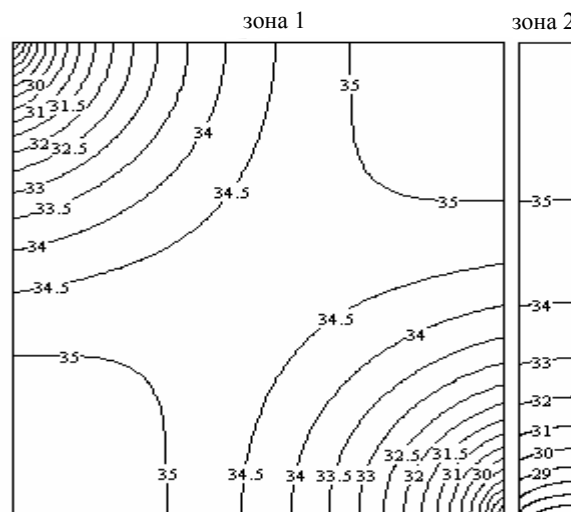


Рис. 2. Распределение температуры перегрева в ряде зон микроболометра: зона 1 – зона расположения резистивного слоя; зона 2 – зона расположения контакта к резистивному слою

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный метод моделирования распределения температуры в тепловых микросенсорах может быть использован для определения влияния различных параметров (толщины и тепловых свойств термически изолированной структуры и пленочных слоев, из которых изготовлены элементы микросенсора; размеров элементов; расстояния между термически изолированной структурой и основанием) на величину выходного сигнала микросенсора. Полученные практические результаты показывают, что представленный метод моделирования распределения температуры может быть положен в основу создания простых систем автоматизированного проектирования тепловых микросенсоров.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Baltès H., Paul O., Brand O. Micromachined thermally based CMOS microsenors // Proceedings of the IEEE. - 1998. - V. 86. - P. 1660-1678.
- [2] Kozlov A. G. Analytical modelling of steady-state temperature distribution in thermal microsenors using Fourier method. Part 1. Theory // Sensors and Actuators A. Physical. - 2002. - V. 101. - P. 283-298.
- [3] Kozlov A. G. Analytical modelling of steady-state temperature distribution in thermal microsenors using Fourier method. Part 1. Theory // Sensors and Actuators A. Physical. - 2002. - V. 101. - P. 299-310.