

# ANÁLISIS DINÁMICO DE SENSOR DE GAS SnO<sub>2</sub> MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS: MODELO REDUCIDO Y SIMULACIÓN

## A DYNAMIC ANALYSIS OF SnO<sub>2</sub> GAS SENSOR USING FINITE ELEMENTS: REDUCED MODEL AND SIMULATION

RICARDO PIRAJÁN CANTILLO<sup>1</sup>

RECIBIDO: AGOSTO 2009

APROBADO: OCTUBRE 2009

### RESUMEN

Los estudios sobre sensores de gas de película delgada tienen antecedentes de diseño en investigaciones realizadas, en el primer lustro del presente siglo, por el Centro de Microelectrónica de la Universidad de los Andes (Bogotá, Colombia), que han conducido a tesis de grado. El presente artículo recrea el análisis dinámico transiente con herramientas de elementos finitos y enriquece el fenómeno a través de la generación de un modelo de orden reducido que permite realizar pruebas del prototipo más rápidamente, desde un programa de simulación matemático como Matlab©. A los resultados obtenidos, se adiciona un nuevo desarrollo en la fabricación del sensor, para comprobar y ajustar el modelo funcional.

### Palabras clave

Sensor de gas, dióxido de estaño, Ansys, mor4ansys, análisis transiente, modelo de orden reducido.

### Abstract

Studies on gas-sensing thin-film design have a history of research in the first half of this century, the microelectronics center University of the Andes (Bogotá, - Colombia), has lead to this dissertation. This article, recreates the transient dynamic analysis tools and some finite elements enrich the phenomenon through the generation of a reduced order model that allows testing of

the prototype, more rapidly, from a mathematical simulation program such as Matlab ©. For the results, a new development in the manufacture of the sensor is added to check and adjust the functional model.

### Key words

Gas sensor, tin dioxide, AnsysNSYS, mMO-R4ANSYSor4ansys, transient analysis, reduced order model.

1 Ingeniero electrónico, Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Docente en las áreas de Instrumentación y Electrónica Digital, Facultad Tecnológica, Universidad Distrital. M.Sc. en Ingeniería Electrónica y Computadores, Universidad de los Andes. Phd(c) Universidad Nacional de Colombia. Correo: r-piraja@uniandes.edu.co, rpirajanc@udistrital.edu.co

### 1. INTRODUCCIÓN

En Colombia, así como en todo el mundo, hay una creciente preocupación por el medio ambiente. Esto ha motivado el desarrollo tecnológico mundial de herramientas para medición de variables ambientales, entre ellas, la contaminación producida por gases presentes en el entorno. Colombia ratificó la Convención de Cambio Climático, mediante la Ley 164 de 1995, y el Protocolo de Kyoto, mediante la Ley 629 de diciembre de 2000. En este sentido, el compromiso del sector energético colombiano busca generar políticas, desarrollo de herramientas y metodologías para la protección ambiental [1].

En la Universidad de los Andes, que no es ajena a estas nuevas tendencias, se viene desarrollando un sensor de gas de película sensible, mediante trabajos realizados por D. Reyes [2] y A. Méndez [3], A. Muñoz [4], Guerrero [5], quienes llevaron a cabo sendas investigaciones encaminadas a modelar el sensor. Se concentraron en mejorar características de consumo de potencia y la distribución de temperatura, a través de herramientas de elementos finitos, como Ansys y Coventoreware. También se validó el modelo de la respuesta de la película sensible por medio de ecuaciones diferenciales. El presente artículo describe la investigación que permitió desarrollar complementos a estos estudios, particularmente incorporando el análisis dinámico transiente de la estructura propuesta, y la generación de un modelo de orden reducido. Este modelo, obtenido con mor4ansys [6], permite realizar pruebas con esfuerzo computacional mínimo y con muy poco margen de error. Finalmente, con los resultados obtenidos por Muñoz [4] y los aquí presentados se puede simular la respuesta del sensor, tanto en el ambiente electrotérmico como en el físico-químico, en el software de simulación Matlab®.

### 2. ANÁLISIS DINÁMICO [8]

El sensor de gas tiene como principio de operación el cambio de conductividad de la película sensible, en la medida que la concentración del gas objetivo aumente o disminuya. La operación de estos sensores se realiza a temperaturas relativamente elevadas (aproximadamente entre 250 y 500 °C). Sin embargo, esta temperatura tiene que estar concentrada principalmente en la película sensible y no en toda la estructura y debe tener una distribución lo más uniforme posible. Es por ello que Reyes y Ávila [2] y Méndez y Ávila [3] encaminaron sus esfuerzos en este sentido y lograron comprobar que la estructura más adecuada para el calefactor de polisilicio es la que se presenta en la Figura 1. Aquí se pueden distinguir cuatro capas: la base de la estructura en la cual se utilizó silicio con una altura de 300 μm, una capa aislante térmica y eléctrica de oxinitruro de silicio ( $SiO_{0.89}N_{0.73}$ , con índice de refracción de 1,67 [2]), calefactor de polisilicio (Figura 1b), membrana aislante de Si y la película sensible de dióxido de silicio ( $SiO_2$ ). Tanto el calefactor de polisilicio, como la película sensible se conectan con el exterior mediante electrodos de platino.

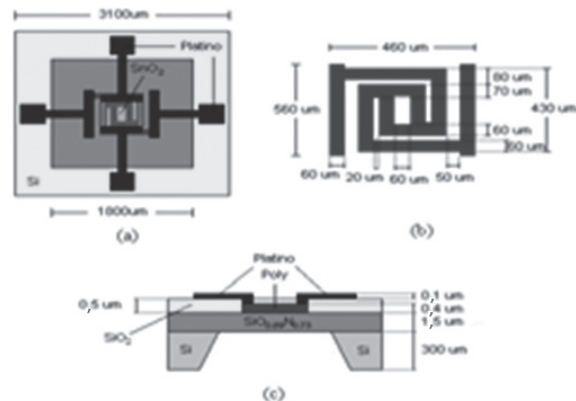


Figura 1. (a) Película sensible y electrodos de platino, (b) Resistencia calefactora de polisilicio, (c) Corte transversal de la estructura del sensor. Tomado de [2].

Tanto en [2] como en [3] se trabajó independientemente en la optimización del consumo de energía y la distribución de temperatura en la película sensora, en estado estable, es decir, se realizaron análisis estáticos. Uno de los objetivos de este trabajo era realizar un análisis dinámico transiente de las estructuras obtenidas en [2] y [3]. Este análisis tiene como objetivo conocer la evolución temporal de la distribución de temperatura en la película sensible. En las figuras 2 y 3 se muestra el modelo de elementos finitos utilizado. Con Ansys, la herramienta elegida [7], los pasos para realizar el análisis transiente son: 1. Crear la estructura del modelo. 2. Establecer condiciones iniciales de temperatura. 3. Configuración de opciones adicionales de solución. 4. Aplicación de cargas. 5. Almacenar la configuración de cargas del paso actual. 6. Repetir los pasos desde el tercero cuantas veces sea necesario.

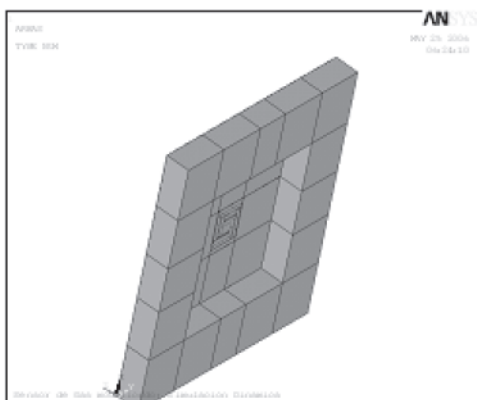


Figura 2. Vista inferior del modelo de elementos finitos utilizado en Ansys.

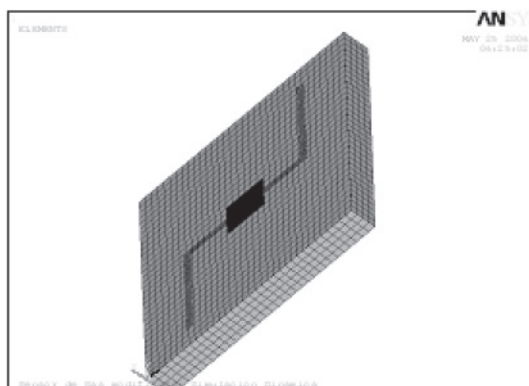


Figura 3. Vista superior del modelo de elementos finitos utilizado en Ansys.

Los comandos utilizados para realizar este análisis son:

- ANTYPE,TRANS: define el análisis de tipo transiente.
- TRNOPT,FULL: método completo
- KBC: aplicación de cargas por pasos (1) o rampa (0).
- TIME: tiempo que dura la aplicación de cargas.
- AUTOTS: pasos de tiempo automáticos.
- DELTIM: tamaño de paso de tiempo.
- OUTRES: opciones para archivo de resultados de datos.
- LSWRITE: almacena los pasos.
- LSSOLVE: inicia solución por múltiples pasos.

Segmento de programa en donde se realizó el análisis transiente:

RICARDO PIRAJÁN CANTILLO

- deltime 0.1
- time,1
- da,541,volt,0
- da,518,volt,6.287 ! Voltaje en las terminales.
- allsel,all,all
- kbc,1
- deltime,0.1
- time,2
- da,541,volt,0
- da,518,volt,0 ! Voltaje en las terminales.
- allsel,all,all
- kbc,1

Los resultados se muestran en las figuras 4 y 5.

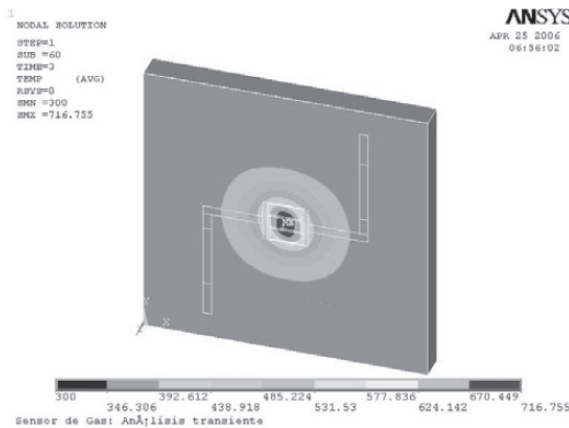


Figura 4. Comportamiento del sensor durante la aplicación de voltaje.

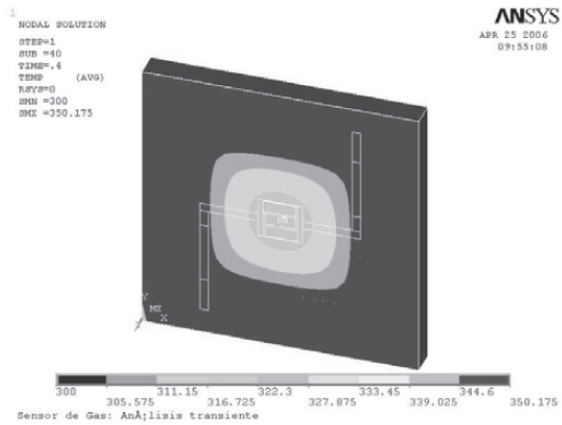


Figura 5. Comportamiento del sensor durante aplicación de voltaje 0.

En estas figuras puede observarse que el cuerpo total mantiene una temperatura aproximadamente constante (entre 350 y 360 °K, promedio), mientras que en el sector en donde se encuentra el sensor la temperatura varía ostensiblemente (325-690 °K, promedio).

Dentro de las mediciones realizadas, se obtuvieron respuestas en las que el cambio de temperatura del microcalefactor es extremadamente rápido. Con estas simulaciones se pudo estimar los tiempos de subida y de bajada de las respuestas transientes. El tiempo de subida fue  $t_r = 20$  ms y el tiempo de bajada fue de  $t_f = 25$  ms. Cabe anotar que mientras el sistema térmico responde en milisegundos (ms), el proceso químico involucrado entre la película sensora y el gas objetivo es de segundos, como lo muestran las mediciones realizadas por Muñoz en [4], para sensores de este tipo.

Si se varía el ancho del pulso, es posible controlar la temperatura del calefactor, de manera que, estimando la relación entre el ancho del pulso en alto ( $T_1$ ) y el ancho del pulso en bajo ( $T_2$ ) con respecto a un periodo fijo  $T$ , podría estimarse la respuesta del sistema. Esta señal puede aproximarse a una señal de voltaje directo,

cuyo valor corresponde al valor promedio de la señal. Entonces:

$$V_{prom} = V * \frac{T1}{T1 + T2} \quad (1)$$

En la ecuación 1,  $V$  es el valor de voltaje aplicado (Figura 6).

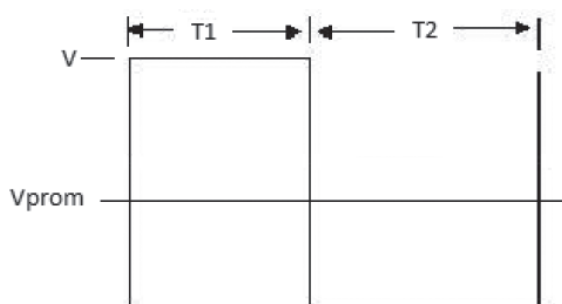


Figura 6. Periodo de señal aplicada con respecto a su promedio.

Finalmente, si se usa una señal periódica, la respuesta es similar a la obtenida, como si se enviara un pulso con valor promedio de la señal. Así lo muestran las respuestas obtenidas que se presentan en la Figura 7.

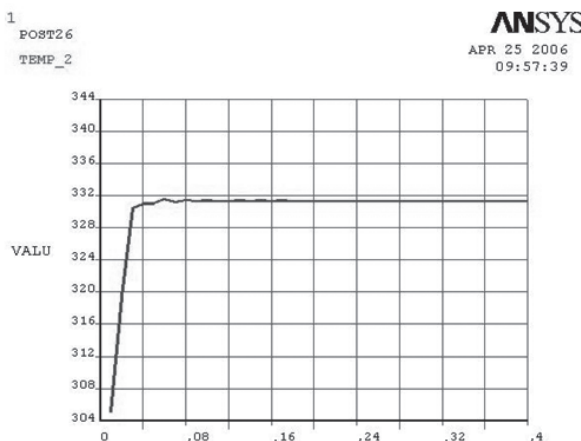


Figura 7. Respuesta a aplicación de señal cuadrada periódica mediante simulación con Ansys (modelo de elementos finitos).

La respuesta corresponde a un sistema de primer orden dada por:

$$H(s) = \frac{1}{\tau * s + 1} \quad (2)$$

$\tau$  es la constante del tiempo del sistema [8]. Si se aplica una señal escalón de amplitud  $A$ , se obtiene una respuesta dada por:

$$C(s) = \frac{1}{\tau * s + 1} * \frac{A}{s} \quad (3)$$

Y su respuesta temporal está dada por:

$$c(t) = A * \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \quad (4)$$

Para las simulaciones realizadas, se obtuvo  $\tau = 0,01$  s, lo que confirma las observaciones anteriores.

### 3. MODELO DE ORDEN REDUCIDO

A medida que el modelo se va haciendo cada vez más complejo, realizar una simulación tarda cerca de diez minutos. Cuando el modelo incluye simulación multifísica [7], como es el caso del sensor de gas de película sensible, en donde se tienen dos elementos físicos (eléctrico y térmico), cualquier verificación o cambio que se quiera realizar durante del proceso de prototipaje lleva mucho tiempo y se torna dispendioso.

El proceso utilizado en este caso se lleva a cabo básicamente en tres fases [9]. Primero, se definen la geometría y el comportamiento físico co-









