

УДК 51-73

КОНСТРУИРОВАНИЕ ГАЗОВЫХ МИКРОСИСТЕМ НА ОСНОВЕ НАНОПОРИСТОГО АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Белогуров Е.А., Шукевич Я.И., Баркалин В.В., Хатько В.В., Таратын И.А.

Белорусский национальный технический университет, г. Минск, Республика Беларусь

Установлено влияние пористости подложки из анодного оксида алюминия на основные параметры 4-сенсорной газовой микросистемы. В расчетах использованы зависимости компонентов тензоров модуля упругости и теплопроводности от пористости для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, полученные методом конечных элементов. (E-mail: viacheslav.khatko@gmail.com)

Ключевые слова: нанопористый анодный оксид алюминия, газовая сенсорная микросистема.

Введение

Для успешного использования в современной газоаналитической аппаратуре химических сенсоров или микросистем на их основе необходимо выполнение нескольких условий, связанных с их функционированием. Они должны иметь, во-первых, низкое энергопотребление, при котором мощность единичного сенсора не должна превышать 100 мВт и, во-вторых, высокую кросс-селективность чувствительного слоя [1]. Решение этих задач возможно путем применения как новых конструктивно-технологических решений в разработке и изготовлении газовых микросистем, так и наноструктурированных материалов, в частности пористого анодного оксида алюминия (АОА) или пористого кремния [2, 3].

Нанопористая структура АОА, представляющая собой периодическую матрицу параллельных ячеек гексагональной симметрии с центральной цилиндрической порой, улучшает целый ряд его механических свойств, а именно упругость, твердость, износостойкость и др. [4]. Это делает возможным применение его в конструкции химических сенсоров и микросистем на их основе в качестве: пассивной диэлектрической маски, упорядоченной матрицы для заполнения пор определенным материалом, подложки для чувствительных элементов химических сенсоров. Важно отметить, что размеры самой ячейки и диаметр поры АОА могут варьироваться в достаточно широком интервале, что позволяет целенаправленно улучшать характеристики химических сенсоров и микросистем через

оптимизацию структурных параметров и свойств АОА.

При проектировании различных устройств на основе пористого АОА важное значение имеет получение достоверных зависимостей его термомеханических параметров от пористости, что в настоящее время в научной литературе отсутствует. В данной работе представлена методика определения этих зависимостей для модуля упругости и коэффициентов теплопроводности АОА на основе моделирования стандартных экспериментальных методик методом конечных элементов, а также результаты расчета распределения температуры, возникающей в структуре 4-сенсорной газовой микросистемы, изготовленной на подложке из пористого АОА. Полученные результаты позволяют разработать конструкцию данной микросистемы с оптимальной величиной потребляемой мощности.

Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 представлена конструкция 4-сенсорной газовой микросистемы. Она включает подложку (1) из пористого $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, на которой расположены платиновые нагреватели типа меандра (2) с газочувствительным слоем на основе оксида индия и олова. В данном случае используется квадратная подложка размерами $1 \times 1 \times 0,08$ мм с платиновой металлизацией толщиной 0,2 мкм. Ширина платиновой металлизации в области меандра составляет 15 мкм, расстояние между витка-

ми меандра 5 мкм. Толщина газочувствительного слоя равна 20 мкм, а его площадь соразмерна площади меандра.

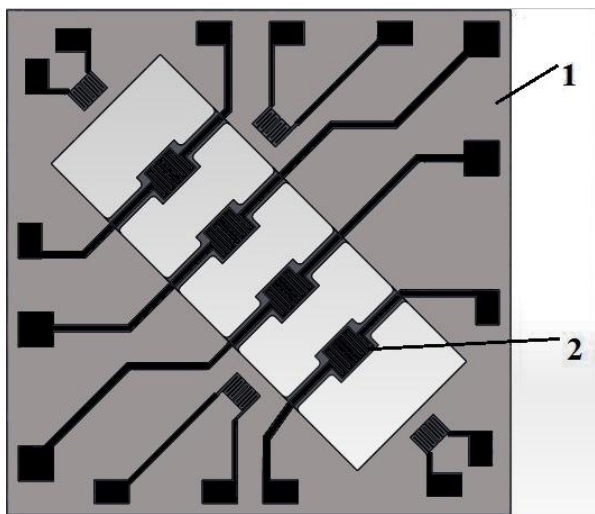


Рисунок 1 – 4-сенсорная газовая микросистема (вид сверху): 1 – подложка; 2 – платиновые нагреватели

Для указанной конструкции микросистемы проводился расчет распределения теплового поля на подложке и определялась зависимость потребляемой мощности от пористости подложки. Для этого первоначально определялись зависимости модуля упругости и коэффициентов теплопроводности от пористости для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Известно, что определение модулей упругости и коэффициентов теплопроводности пористых материалов экспериментальным методом, особенно для анизотропных материалов, представляет собой достаточно сложную задачу, особенно для образцов малых размеров, часто многофазных. В этой связи особую актуальность приобретают методы компьютерного моделирования, основанные на использовании различных подходов [5].

Наиболее прямым подходом к вычислению материальных констант наноструктурированных материалов является использование алгоритмов молекулярной динамики и механики как с феноменологическими межатомными потенциалами, так и алгоритмов *ab initio* [6]. Расчет модулей упругости в этом случае обычно предполагает вычисление энергии образца как функции компонентов тензора макроскопических деформаций и ис-

пользование определения модулей упругости в виде [7]:

$$C_{IJ} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E(\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \varepsilon_I \partial \varepsilon_J}, \quad (1)$$

где C_{IJ} – компонента тензора модулей упругости; $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор деформаций; ε_I – компоненты тензора макроскопической упругой деформации в матричных обозначениях; $I, J = 1-6$, $E(\boldsymbol{\varepsilon})$ – энергия упругой деформации; V – объем образца. Коэффициенты теплопроводности материалов в методе молекулярной динамики определяются на основе формул Кубо, требующих расчета автокорреляционной функции локального теплового потока в равновесном состоянии системы [8].

Следует, однако, отметить, что метод молекулярной динамики, особенно в его *ab initio* варианте, очень требователен к компьютерным ресурсам и дает хорошие результаты только при тщательно выбранном потенциале межатомных взаимодействий. Для определения зависимости термомеханических параметров наноструктурированных материалов с регулярной структурой, какими являются пористый кремний и АОА, в данной работе используется гораздо менее требовательный к компьютерным ресурсам метод конечных элементов. Причем для определения модулей упругости применяется энергетический подход, основанный на использовании соотношения (1), в котором в качестве $E(\boldsymbol{\varepsilon})$ берется упругая энергия периодической ячейки пористого материала, вычисляемая при заданном смещении точек границ ячейки в соответствии с выражениями:

$$\begin{aligned} x &= (1 + e_1)x_0 + \frac{1}{2}e_6y_0 + \frac{1}{2}e_5z_0; \\ y &= +\frac{1}{2}e_6x_0 + (1 + e_2)y_0 + \frac{1}{2}e_4z_0; \\ z &= +\frac{1}{2}e_5x_0 + \frac{1}{2}e_4y_0 + (1 + e_3)z_0; \end{aligned} \quad (2)$$

где (x_0, y_0, z_0) – координаты точек границ в недеформированном состоянии с использованием модулей упругости сплошного материала. Определение коэффициентов про-

дольной и поперечной теплопроводности пористых материалов осуществлялось имитационным моделированием экспериментальной методики, которая заключается в пропускании стационарного единичного теплового потока через торец образца и снятии разницы температур с противоположных торцов в соответствии с ГОСТом 7076-99:

$$k = \frac{W}{l\Delta T}. \quad (3)$$

где W – мощность теплового потока, Вт; ΔT – разность температур на противоположных торцах образца, К; l – длина образца, м.

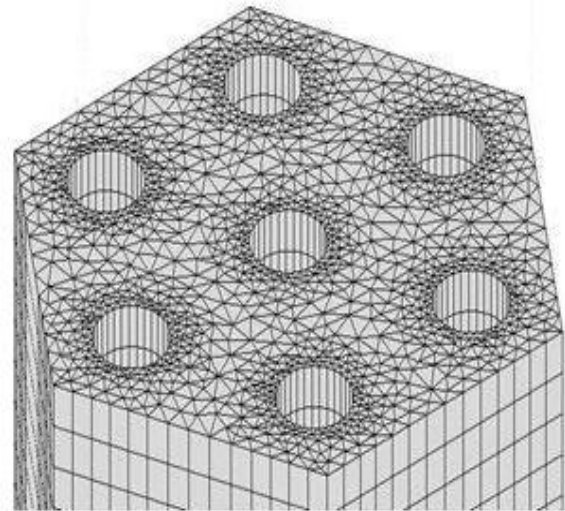
При расчете модуля упругости использовалось допущение, что матрица пор в образце имеет идеальную периодичность. На рисунке 2а показана геометрическая модель структурной ячейки α -Al₂O₃.

Для α -Al₂O₃ рассматривалась ячейка с семью порами для учета периодичности и взаимодействия соседних пор. Диаметр описанной окружности вокруг шестиугольника составлял 150 нм, высота ячейки – 750 нм, диаметр поры варьировался от 20 до 120 нм. Ячейка подвергалась воздействиям полей механических деформаций величиной порядка 10⁻³, прикладываемых ко всем узлам сетки конечных элементов (КЭ). По всей площади поверхности поры задавалось условие отсутствия нормальных механических напряжений: $\sigma = 0$. Затем проводилось вычисление упругой энергии ячейки при указанных деформациях. Вычисления проводились на структурированной и неструктурированной сетках, число конечных элементов составляло 35 000.

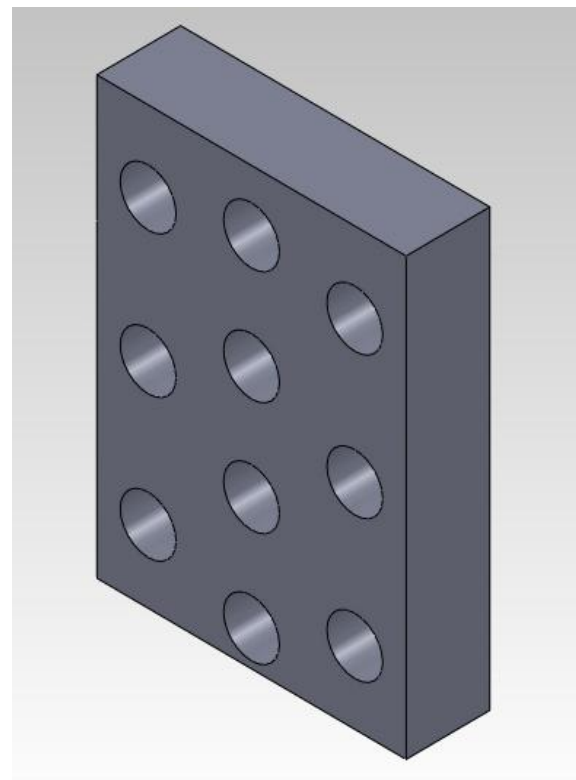
Геометрические модели для определения коэффициента продольной и поперечной теплопроводности представлены на рисунке 2а и б при условии, что тепловой поток распространяется в материале вдоль и перпендикулярно оси поры соответственно. Объемное содержание пор варьировалось от 0 до 90 % за счет изменения их радиуса. Основные параметры непористого оксида алюминия приведены в таблице 1.

Полученные зависимости независимых компонент тензора модуля упругости для оксида алюминия от пористости представлены на рисунках 3. Ввиду монотонности зависимостей компонент тензора модуля упругости

от пористости было решено ограничиться ее значениями не более 70 %.



а



б

Рисунок 2 – Геометрические модели, используемые для расчёта модуля упругости и коэффициента продольной теплопроводности (а) и коэффициента поперечной теплопроводности (б) пористого α -Al₂O₃

Таблица 1 – Физические параметры α -Al₂O₃

Параметры	α -Al ₂ O ₃
Модуль упругости, ГПа	C ₁₁ = 495; C ₁₂ = 160; C ₁₃ = 115; C ₁₄ = 230; C ₃₃ = 497; C ₆₆ = 146
Плотность, кг/м ³	3985
Продольная теплопроводность, Вт/м·К	25,2
Поперечная теплопроводность, Вт/м·К	23,1

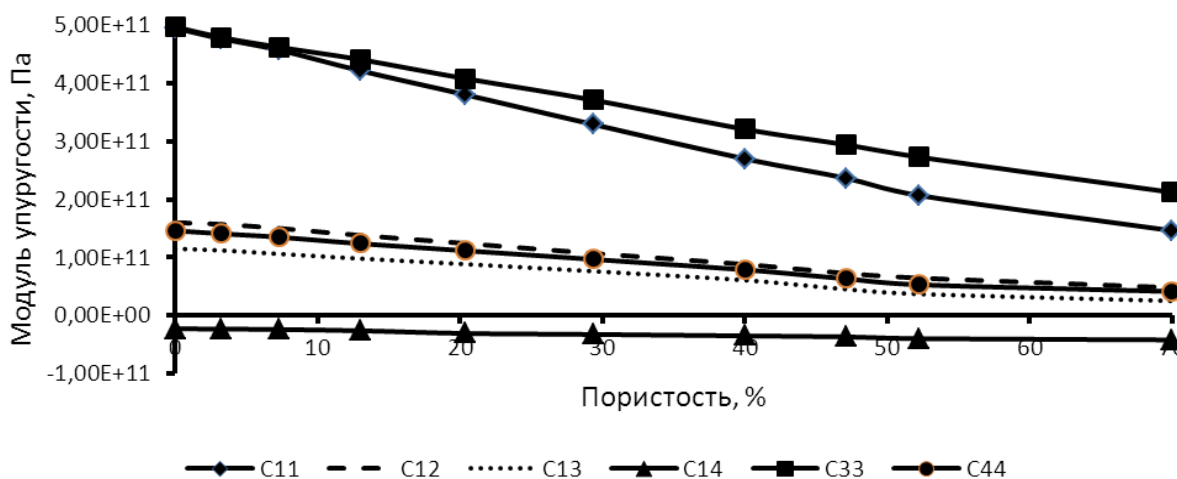


Рисунок 3 — Зависимости независимых компонент модуля упругости оксида алюминия от пористости

В работе использованы следующие зависимости от пористости для поперечного и продольного коэффициентов теплопроводности

$$\begin{aligned}
 \chi_1' &= \left(1 - \frac{4}{3}n\right)\chi_1, \\
 \chi_3' &= (1 - n)\chi_3,
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

где χ_1 , χ_1' – коэффициенты поперечной теплопроводности при нулевой и ненулевой пористости n (в относительных единицах); χ_3 , χ_3' – коэффициенты продольной теплопроводности при нулевой и ненулевой пористости соответственно. Для поперечной компоненты указанное в (4) соотношение получено в работе [10] на основе статистических соображений. Для продольной компоненты указанный результат следует из геометрических соображений, поскольку основной эффект пор сводится к уменьшению поперечного сечения теплопроводящего материала с ростом диаметра пор (полые поры по предположению тепло не проводят, поскольку теплопроводность воздуха в них на несколько порядков ниже), а при фиксированной длине пор

пористость материала пропорциональна их площади.

На рисунке 4 представлены полученные в данной работе зависимости коэффициента продольной теплопроводности от пористости для оксида алюминия вместе с теоретическими прямыми, полученными из уравнения (4), а на рисунке 5 – соответствующие зависимости для коэффициента поперечной теплопроводности. Как следует из представленных данных, результаты теоретического расчета и имитационного моделирования соответствуют друг другу в достаточно широком интервале пористостей. Полученные в работе данные о зависимости коэффициентов теплопроводности для α -Al₂O₃ от его пористости были использованы для расчета потребляемой мощности 4-сенсорной газовой микросистемы, изготавливаемой на основе пористого АОА. На рисунке 6 изображено рассчитанное поле температур при напряжении на микросистеме в 0,4 В. Подложка микросистемы имеет пористостью ~10 %. При этом напряжении температура на меандрах сенсоров остается в пределах допустимой ~300–400 °С (рисунок 6), а

минимальная температура на подложке составляет 160 °С. Потребляемая интегральная мощность при пористости подложки ~10 % составляет примерно 46–47 мВт (рисунок 7).

Из рисунка 7 видно, что только при превышении пористости в алюмооксидной подложке выше 70 % наблюдается уменьшение потребляемой мощности микросистемы до 25 мВт и ниже. Это в полной мере соответствует уравнениям (4) и расчетным значениям, представленным на рисунках 4 и 5, так как при пористости подложки порядка 75 % поперечный коэффициент теплопроводности алюмооксидной подложки равен нулю.

Таким образом, при разработке газовых микросистем на подложках из нанопористого АОА можно целенаправленным образом уменьшать значение потребляемой микросистемой мощности за счет выбора величины пористости подложки. Однако следует иметь в виду, что при увеличении пористости подложки наряду с положительным эффектом, связанным с уменьшением потребляемой мощности каждого сенсора микросистемы, можно ожидать разрушение области чувствительного слоя за счет упругих термических воздействий, что является предметом дальнейших исследований.

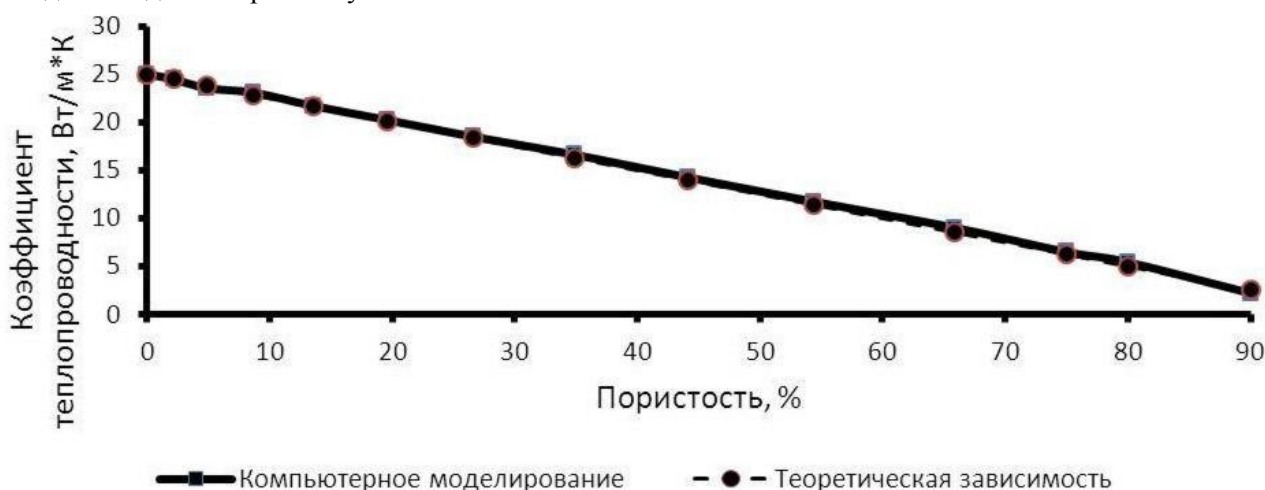


Рисунок 4—Зависимость коэффициента продольной теплопроводности от пористости для оксида алюминия

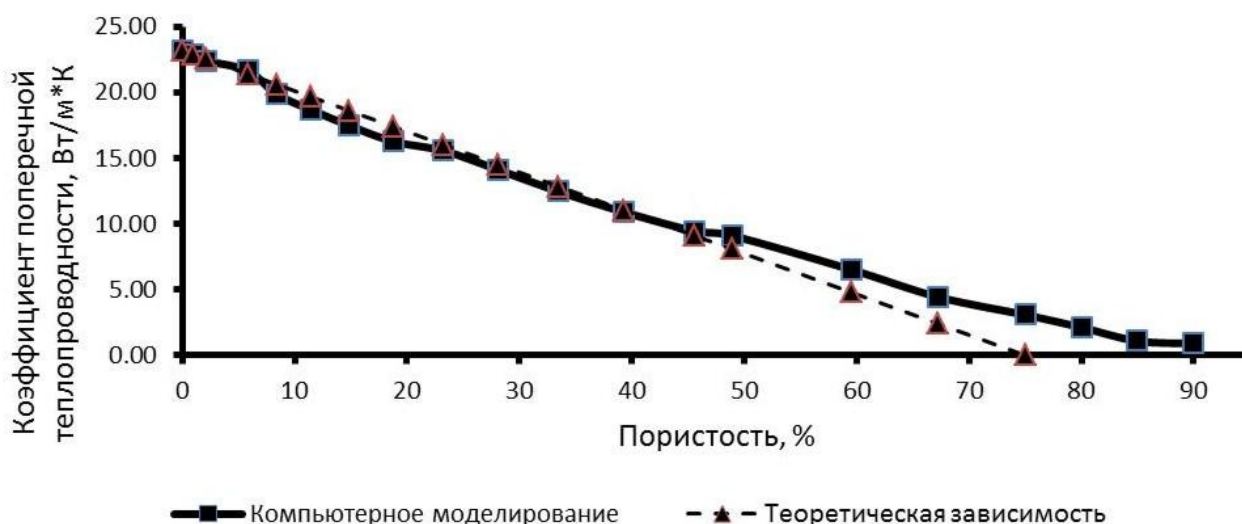


Рисунок 5 — График зависимости коэффициента поперечной теплопроводности от пористости для оксида алюминия

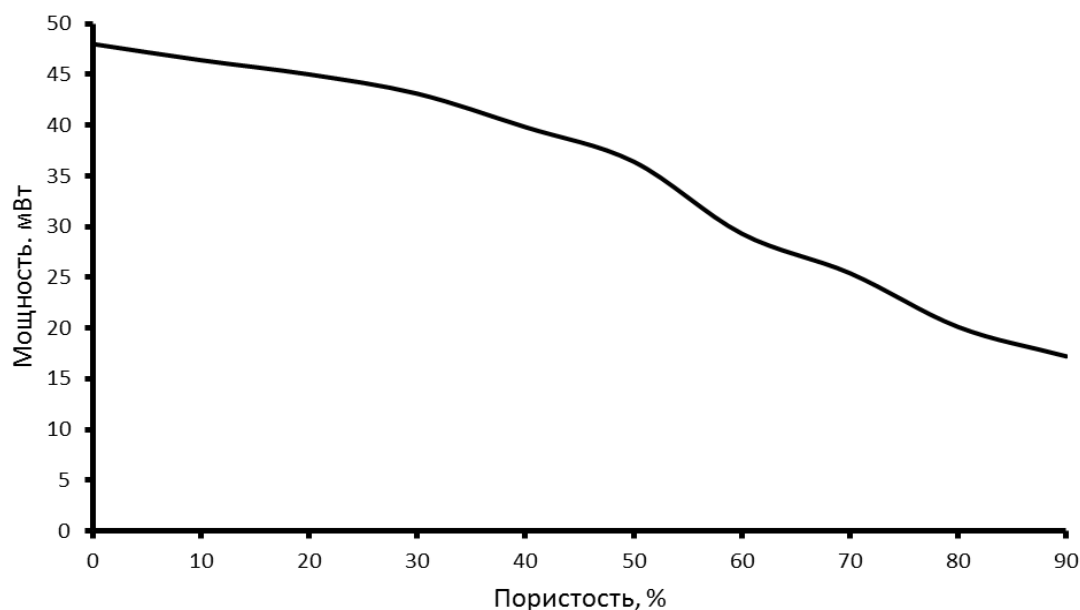


Рисунок 6 — Зависимость потребляемой мощности 4-сенсорной газовой микросистемы от пористости алюмооксидной подложки

Заключение

1. Показана принципиальная возможность моделирования термомеханических свойств нанопористого анодного оксида алюминия методом конечных элементов и определены зависимости всех независимых компонентов тензора модуля упругости и коэффициентов теплопроводности от пористости анодного оксида алюминия.

2. Рассчитано распределение температурных полей в 4-сенсорной газовой микросистеме, изготовленной на подложке нанопористого анодного оксида алюминия, имеющей пористость ~10 %.

3. Показано, что выбором величины пористости алюмооксидной подложки можно целенаправленным образом уменьшать потребляемую мощность 4-сенсорной газовой микросистемы до 25 мВт и ниже.

Список использованных источников

1. Гринчук, А.П. Разработка газовых сенсоров для контроля горючих газов / А.П. Гринчук, И.А. Таратын, В.В. Хатько // Приборы и методы измерений. – 2010. – № 1. – С. 51–55.
2. Khatko, V. Tungsten Trioxide Sensing Layers on Highly Ordered Nanoporous Alumina Templates / V. Khatko [et al.] // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2006. – Vol. 118. – № 1. – P. 255–262.

3. Lang, W. Application porous silicon as a sacrificial layer / W Lang [et al.] // Sensors and Actuators A. – 1994. – Vol. 43. – P. 239–242.
4. Xia, Z. Mechanical properties of highly ordered nanoporous anodic alumina membranes / Z. Xia [et al.] // Rev. Adv. Mat. Sci. – 2004. – Vol. 6. – P. 131–139.
5. Баркалин, В.В. Иерархическая система моделирования физических процессов и свойств материалов на базе суперкомпьютерной конфигурации СКИФ К-1000 / В.В. Баркалин [и др.] // Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач: Труды Всероссийской научной конференции (22–27 сентября 2008 г., г. Новороссийск). – М.: МГУ. – 2008. – С. 101–105.
6. Barkaline, V.V. Molecular dynamics simulation of mechanical properties of carbon nanotubes and their contact interaction with substrate / V.V. Barkaline, A.S. Chashynski, S.A. Chizhik // Proc. SPIE 7377, 737702 (2008).
7. Odegard, G.M. Equivalent-Continuum Modeling with Application to Carbon Nanotubes / G.M. Odegard [et al.]. – NASA/TM-2002-211454, 2002.
8. Frenkel, D. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications / D. Frenkel, B. Smit. – N.Y. Academic Press, 2002. – 658 p.
9. Shaskolskaya, M.P. Acoustic Crystals Handbook, Nauka / M.P. Shaskolskaya. – Moscow, 1982. – 382 p.

10. *Ташкинов, А. А.* Прогнозирование эффективных теплофизических характеристик пироуглеродных матриц / А.А. Ташкинов, В.Е. Шав-

шуков // Математическое моделирование систем и процессов. – 2002. – № 10. – С. 124–132.

Belahurau Ya. A., Shukevich Ya.I., Barkaline V.V., Khatko V.V., Taratyn I.A.

Application of nanoporous anodic alumina by gas microsystem design

Influence of the porosity of anodic alumina substrate on basic characteristics of four gas sensor microsystem has been determined. Dependences of the tensor components of modulus of elasticity and thermal-conductivity coefficients as a function of α -Al₂O₃ porosity obtained by FEA were utilized in the calculations. (E-mail: viacheslav.khatko@gmail.com)

Key Words: nanoporous anodic alumina substrate, gas sensor microsystem.

Поступила в печать 03.10.2011.