

DOI:10.16515/j.cnki.32-1722/n.2019.02.002

基于 COMSOL 的气敏薄膜初始电阻模拟计算

张子立¹, 殷晨波²

(1. 金陵科技学院机电工程学院, 江苏 南京 211169; 2. 南京工业大学机械与动力工程学院, 江苏 南京 211816)

摘要: 叉指电极可有效降低金属氧化物半导体气敏薄膜的测试电阻, 有利于薄膜气敏性能的测量, 已广泛用于薄膜型气体传感器上。而叉指电极的尺寸不仅会影响传感器表面的热量分布, 也会对薄膜初始电阻造成影响。提出了解微分方程法计算叉指电极上气敏薄膜的初始电阻, 推导了计算薄膜初始电阻的微分方程, 采用 COMSOL 软件中的 AC/DC 模块, 对特定尺寸叉指电极上的气敏薄膜在不同工作温度时初始电阻进行了仿真, 并与实验进行了对比, 证明了该方法的可行性。

关键词: 叉指电极; 气敏薄膜; 初始电阻; 微分方程

中图分类号: TP212

文献标识码: A

文章编号: 1672-755X(2019)02-0006-05

Simulated Calculation of Initial Resistance of Gas Sensing Thin Film Based on COMSOL

ZHANG Zi-li¹, YIN Chen-bo²

(1. Jinling Institute of Technology, Nanjing 211169, China; 2. Nanjing Technology University, Nanjing 211816, China)

Abstract: The interdigital electrode can effectively reduce the test resistance of metal oxide semiconductor gas sensing film, which is conducive to test the performance of the thin film gas sensing. It has been widely used in thin film type gas sensors. But the size of the interdigital electrode will not only affect the heat distribution on the surface of the sensor, but also affect the initial resistance of the film. In this paper, the method of solving differential equation for calculating the initial resistance of gas sensing thin film is presented. The differential equation for calculating the initial resistance of thin films is derived. The initial resistances of gas sensing thin film on the interdigital electrodes at different operation temperature are simulated by using AC/DC module of COMSOL software. Compared with the experiment, the method is proved to be feasible.

Key words: interdigital electrode; gas sensing film; initial resistance; differential equation

薄膜型金属氧化物半导体(MOS)气体传感器因灵敏度高、制作简单、与 MEMS 工艺兼容、易于大规模生产等优势受到了众多研究者的青睐^[1]。其气敏机理是在加热情况下气体分子与材料晶粒之间的反应导致的薄膜电阻的变化。因此,对薄膜电阻的测量成为传感器检测气体浓度的关键。然而,MOS 薄膜的电阻往往较大,会对测量带来不便,尤其是周围空气等效电阻与薄膜电阻相当时,会造成电阻测量的不准确,从而影响检测效果。而叉指电极的使用能有效降低薄膜的测试电阻,且叉指电极本身容易采用 MEMS 工艺集成进微热板中,因此叉指电极已大量使用在薄膜型金属氧化物半导体气体传感器中^[2],如

收稿日期: 2019-04-21

基金项目: 国家自然科学基金(51575255)

作者简介: 张子立(1984—),男,湖南长沙人,讲师,博士,主要从事气体传感器研究。

图1所示。而叉指电极的尺寸不仅影响了微热板表面温度分布,而且影响了薄膜初始测试电阻值,进而影响气敏性能,因此,需要对叉指电极的尺寸进行优化设计以优化微热板表面温度分布及薄膜初始测试电阻。叉指电极尺寸对热量分布的影响已多有研究^[3-5],因此本次主要针对电阻的影响进行研究。

叉指电极对薄膜初始电阻影响的分析,多采用分块积分法^[6]。但是分块积分法更适用于计算等截面导线的电阻,当叉指电极指尖间距较宽时会产生较大误差。因此,本文采用解微分方程法对薄膜电阻进行计算。拟以 SnO₂ 薄膜为研究对象,采用 COMSOL 软件对使用了叉指电极的薄膜初始电阻值进行模拟计算。首先在 COMSOL 的建设模块中构建薄膜及叉指电极的整体结构,形成三维简化模型,再推导出用于计算薄膜初始电阻值的微分方程,然后使用 AD/AC 模块实现基于解微分方程法的薄膜初始电阻计算。

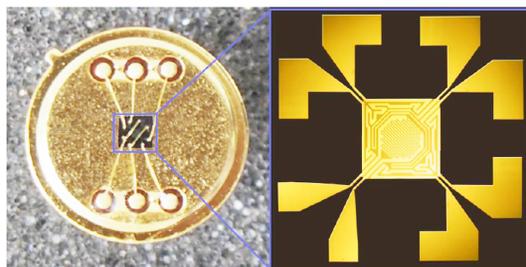


图1 带叉指电极的气体传感器原型

1 薄膜初始电阻的计算

1.1 模型建立与参数设置

采用 COMSOL 三维模块构建薄膜与叉指电极的三维简化模型,其中叉指电极的宽度为 10 μm,指条长度为 360 μm,厚度为 1 μm,指条间距为 5 μm,侧边斜角为 45°,电极材料为银(Ag),薄膜厚度为 1 μm。所建立的模型如图2所示。

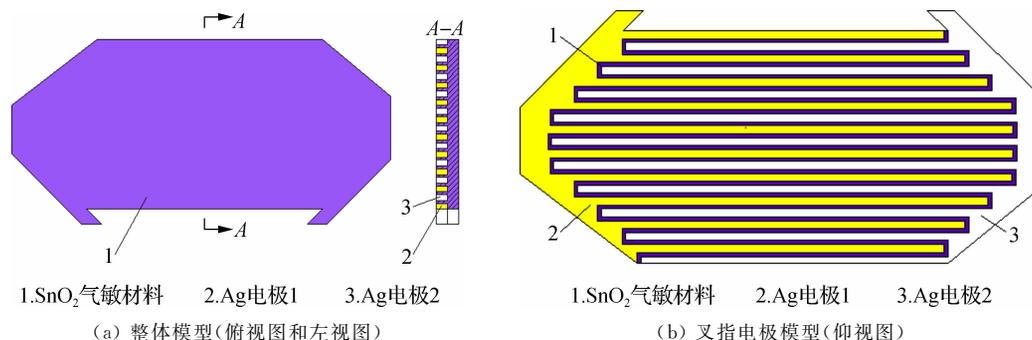


图2 薄膜及叉指电极三维简化模型

半导体薄膜电导率与温度得关系可以用阿伦尼乌斯公式^[7](Arrhenius equation)表示,见公式(1),

$$\sigma = \sigma_{\infty} \exp(-E_a/kT) \quad (1)$$

即

$$\ln \sigma = \ln \sigma_{\infty} - E_a/kT \quad (2)$$

而又有

$$\rho = 1/\sigma \quad (3)$$

则可以推导出

$$\ln \rho = \ln \rho_{\infty} + E_a/kT \quad (4)$$

可以进一步推导出

$$\rho = \rho_{\infty} \cdot \exp(E_a/kT) \quad (5)$$

其中, T —绝对温度,单位为开尔文(K); σ —SnO₂薄膜在某一温度 T 时对应的电导率,单位为 $\Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$;

σ_∞ —薄膜在温度无限高的电导率; k —玻尔兹曼常数,约为 1.38×10^{-23} ; E_a —活化能,约为 7.46×10^{-20} J;
 ρ_∞ —SnO₂ 薄膜在温度无限高时的电阻率, $10^{-3} \Omega \cdot \text{m}$ 。

从公式(4)中可以看出 $\ln \rho$ 与 T 呈反比,电阻率随温度的升高而下降。根据公式(5)可推导出 SnO₂ 薄膜初始电阻和温度的关系(表 1)。

表 1 SnO₂ 薄膜电阻和温度的关系

温度/°C	电阻率/($\Omega \cdot \text{m}$)	温度/°C	电阻率/($\Omega \cdot \text{m}$)
175	173.25	250	30.73
200	91.60	275	19.19
225	51.62	300	12.48

Ag 的电阻率与温度的关系,可由公式(6)表达:

$$\rho = \rho_0 + \alpha \rho_0 (T - T_{\text{ref}}) \quad (6)$$

其中: T_{ref} —参考温度,293.15 K; ρ_0 —温度为 T_{ref} 时的电阻, $2.19 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$; α —电阻温度系数,0.003 8。

根据公式(6)可推导出 Ag 初始电阻和温度的关系(表 2)。

表 2 Ag 电极电阻与温度的关系

温度/°C	电阻率/($10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$)	温度/°C	电阻率/($10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$)
175	2.52	250	2.97
200	2.67	275	3.12
225	2.82	300	3.27

1.2 初始电阻计算微分方程的推导

以一个叉指电极周期为例(图 3),叉指电极两端上电势差恒定,则导体内电流恒定,电流密度则有:

$$\nabla \cdot J = 0 \quad (7)$$

由欧姆定律可知:

$$J = \frac{E}{\rho} \quad (8)$$

则有:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} E = 0 \quad (9)$$

电阻率 ρ 在特定温度下为常数,则:

$$\nabla \cdot E = 0 \quad (10)$$

由于电场恒定,则:

$$E = -\nabla \varphi \quad (11)$$

其中, φ —电势。

当边界条件满足

$$\begin{cases} x = x_1, \varphi = \varphi_{x1} \\ x = x_2, \varphi = \varphi_{x2} \end{cases} \quad (12)$$

针对图 3 则有:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right|_{\text{侧面}} = 0 \quad (13)$$

其中 n 指向侧面外法线方向。

则通过 $x = x_1, x = x_2$ 截面的第 i 个周期的等效电流 I_{Ji} 为

$$I_{Ji} = \int J_i \cdot dS_i = - \int \nabla \varphi \cdot dS_i \quad (14)$$

则第 i 个周期的指间电阻为:

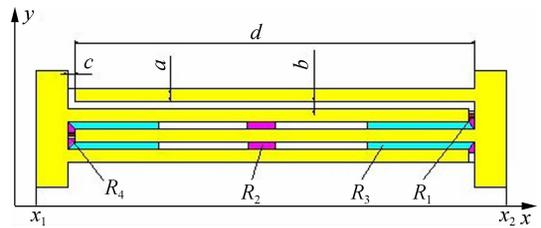


图 3 电极间电阻分布及电极结构尺寸

$$R_{J_i} = \frac{\varphi_{r1} - \varphi_{r2}}{I_{J_i}} \quad (15)$$

且总电阻为:

$$R_{\text{总}} = \frac{\varphi_{r1} - \varphi_{r2}}{I_{\text{总}}} \quad (16)$$

1.3 模型的网格划分与求解

划分网格时,选择自由剖分四面体网格,最大单元尺寸 $2.5 \mu\text{m}$,最小单元尺寸 $0.5 \mu\text{m}$,最大单元增长率 1.45,曲率因子 0.5,窄区域解析度 0.6,划分网格结果如图 4 所示。采用 AC/DC 模块,设置图 4 中边界面 1 电势为 5 V,边界面 2(接地端)为 0 V。将表 1、表 2 中相应的电阻赋予模型中的 SnO_2 薄膜及 Ag 电阻。模拟所用相关方程及边界条件见公式(16)然后直接进行计算,将得到电势分布情况,如图 5 所示。

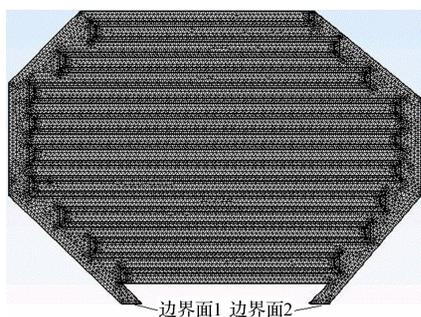
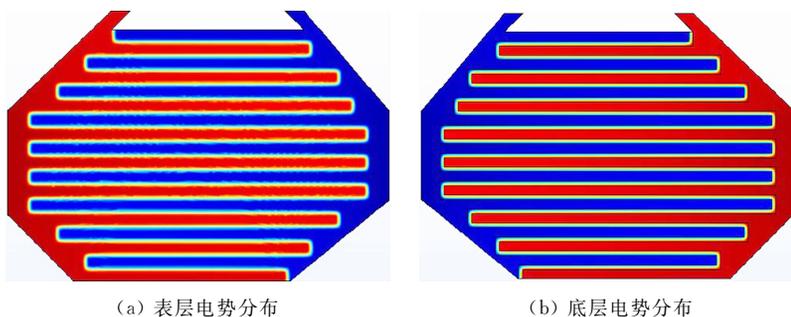


图 4 划分网格结果图



(a) 表层电势分布

(b) 底层电势分布

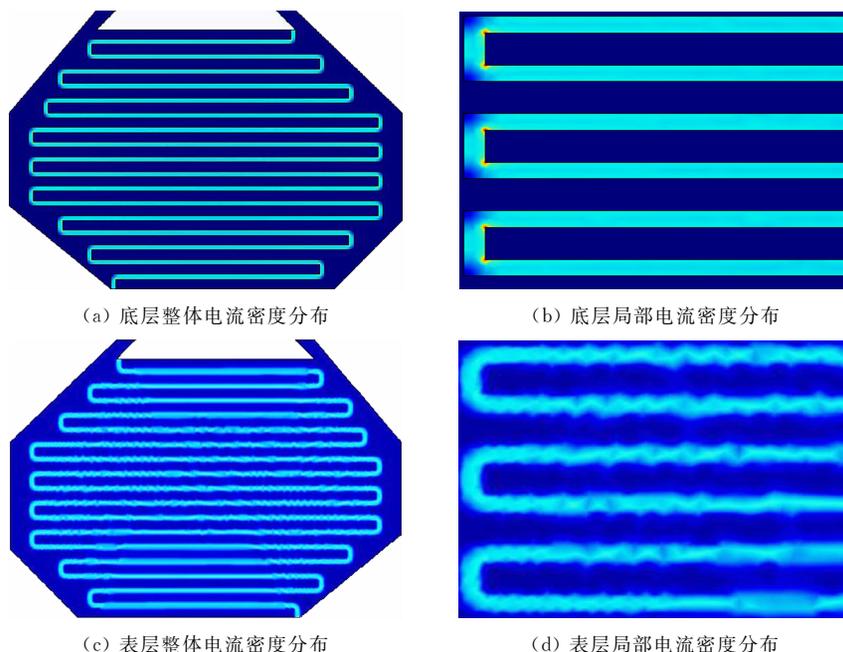
图 5 电势分布图

2 结果与分析

2.1 电场分析

从图 5 中可以看出,电极电阻很小,几乎可以看成等势体,而薄膜电势将从高向低均匀降低,上表面(图 5(a))与下表面(图 5(b))的电势分布规律基本相同。

电流密度分布图如图 6 所示,其中,图 6(b)、(d)为底部和表层局部电流密度分布图。从图中可以看出电流分布并不均匀,指尖的电流分布比较集中,是最敏感的区域,因此可适当增加指条的数量以增加薄膜的灵敏度。



(a) 底层整体电流密度分布

(b) 底层局部电流密度分布

(c) 表层整体电流密度分布

(d) 表层局部电流密度分布

图 6 电流密度分布图

2.2 电阻分析

选择图 3 中边界面 x_2 为积分面,对电流密度进行积分,从而得到不同温度下的电流,如表 3 所示。再根据公式(16)计算出不同温度时的电阻值,如图 7 所示。从图中可以看出工作温度越高,初始电阻值越小,趋势与实验研究一致^[8],且在 100 °C 时阻值小于 100 k Ω ,远小于不含叉指电极的薄膜阻值,证明采用解微分方程法计算薄膜初始电阻是可行的。但是电阻值偏低,主要原因在于当 SnO₂ 薄膜加热时会吸附空气中的氧气,从而束缚住 SnO₂ 材料中的电子,增加薄膜的电阻值。因此,可采用基于密度泛函的第一性原理的方法计算不同温度下氧吸附对 SnO₂ 电导率的影响,使得电阻计算更为精确。

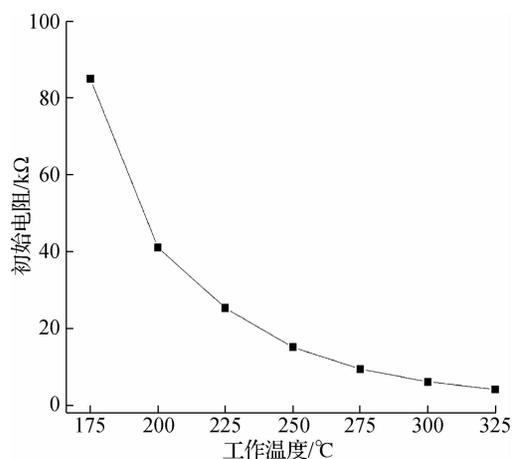


图 7 不同温度下的初始电阻变化

表 3 不同温度时的初始电流变化

温度 / °C	电流 / μ A	温度 / °C	电流 / μ A
175	58.9	250	332.0
200	122.0	275	532.0
225	198.0	300	817.0
325	1 210		

3 结 语

借助 COMSOL 的三维模块建立了叉指电极和气敏薄膜的三维等效模型,推导了气敏薄膜初始电阻计算的微分方程,并用 AC/AD 模块对气敏薄膜进行了电场分析和电阻分析。结果发现,温度越高,薄膜的初始电阻越低,趋势与实验结果一致。

参考文献:

- [1] Dey A. Semiconductor metal oxide gas sensors: A review[J]. Mater. Sci. Eng. B, 2018, 229: 206 - 217
- [2] Zhang Z L, Yin C B, Tao C M, et al. Characteristics of suspended planar-type gas sensor based on MEMS process[J]. Journal of Southeast University(English Edition), 2012, 28(3): 315 - 320
- [3] Castagna M E, Modica R, Cascino S, et al. A high stability and uniformity W micro hot plate[J]. Sens. Actuator A, 2018, 279: 617 - 623
- [4] Khan U, Falconi C. Micro-hot-plates without simply connected hot-spots and with almost-circular temperature distribution[J]. Sens. Actuator B, 2013, 185: 274 - 281
- [5] Khan U, Falconi C. Temperature distribution in membrane-type micro-hot-plates with circular geometry[J]. Sens. Actuator B, 2013, 177: 535 - 542
- [6] 朱斌, 殷晨波, 陶春旻, 等. 气体传感器叉指电极结构设计及电极间分布电阻计算[J]. 仪表技术与传感器, 2011(8): 14 - 16
- [7] 李根. SnO₂ 基负温度系数热敏陶瓷结构与电性能研究[D]. 长沙: 中南大学, 2012
- [8] Zhang Z L, Yin C B, Yang L, et al. H₂ response characteristics for sol-gel-derived WO₃-SnO₂ dual-layer thin films[J]. Ceram. Int., 2017, 43: 6693 - 6699

(责任编辑: 谭彩霞)