

Schnelle IR-MEMS-Strahler für NDIR-Anwendungen

Toni Schildhauer¹, Martin Schädel¹, Andreas T. Winzer¹

¹CiS Forschungsinstitut für Mikrosensorik, Konrad-Zuse-Str. 14, 99099 Erfurt, Deutschland

Zusammenfassung

Infrarot-Emitter auf der Basis von MEMS-Technologien sind für die Miniaturisierung von NDIR-Spektrometern hervorragend geeignet. Bisherige kommerzielle IR-MEMS-Strahler erreichen allerdings bereits bei Messfrequenzen von 20 Hz ihre Einsatzgrenze. Für einige Anwendungen, wie in der Atemgasanalyse werden jedoch höhere Messfrequenzen im Bereich von 100 Hz benötigt. Wir haben daher unsere IR-MEMS-Emitter weiterentwickelt und sowohl die Chip-Architektur als auch die Aufbau- und Verbindungstechnik für schnelle NDIR-Spektroskopie-Anwendungen optimiert. Zur Verbesserung des Chip-Designs wurde ein digitaler Zwilling unserer bisherigen Technologie in der Simulationssoftware COMSOL angefertigt. Mithilfe dieses Modells konnte der Einfluss verschiedenster Design-Änderungen erprobt und somit die Variantenvielfalt für den zeitaufwändigen technologischen Durchlauf effizient gestaltet werden. Mit sinkender Chipgröße steigt bei den Emittieren zwar die Grenzfrequenz jedoch sinkt gleichzeitig die Strahlstärke. Um bei hohen Messfrequenzen trotzdem ausreichend Signal zu erhalten, optimierten wir den Aufbau der Emitter-Chips für Array-Anordnungen mit einer maximalen Packungsdichte. Mit diesen neuen IR-Quellen sind Gasanalysen im Wellenlängenbereich von 2 bis 20 μm und bei Pulsfrequenzen von bis zu 100 Hz möglich.

Keywords: Gassensorik, Infrarot, NDIR, Simulation

Überblick

Für die Analyse verschiedenster Gase, ob in der Sicherheitstechnik, Prozesstechnik oder in der Lebensmittelindustrie werden NDIR- (Nichtdispersive Infrarot-) Sensoren genutzt. Diese bestehen aus einer infraroten Lichtquelle (typischerweise mit Glühdraht bzw. Glühwendel), einem mechanischen Chopper zur Modulation der Quelle, der Messküvette, durch die das Proben- oder Referenzgas strömt, einem gaspezifischen infraroten Bandpassfilter und einem thermischen Detektor (z.B. pyroelektrischer Sensor, Thermopile).

Glühwendelbasierte Lichtquellen emittieren aufgrund ihrer Glaskörper nur Wellenlängen bis maximal 5 μm [1], benötigen zur Modulation einen externen Chopper und sind wegen des aufgehängten Glühfadens empfindlich gegenüber kleinen Erschütterungen. MIR-LEDs als Alternative lassen sich zwar sehr schnell elektrisch pulsen, bieten aber leider auch nur eingeschränkte Wellenlängen bis 6 μm und sind deutlich teurer.

IR-Quellen auf Basis von MEMS-Technologien sind breitbandig und emittieren mindestens bis 12 μm , lassen sich elektrisch pulsen, sind unempfindlich gegenüber kleinen Erschütterungen und kostengünstig. Daher sind sie derzeit die beste Lösung für miniaturisierte NDIR-Sensoren. Kommerzielle Anbieter sind bspw. Infrasolid GmbH (Dresden, Deutschland)

und Micro-Hybrid Electronic GmbH (Hermsdorf, Deutschland). Am Markt verfügbare IR-Emitter lassen sich aktuell allerdings nur bis etwa 20 Hz effektiv pulsen. Auch wenn einzelne Strahler laut Datenblatt Grenzfrequenzen von bis zu 40 Hz aufweisen sollten, konnten wir bei den

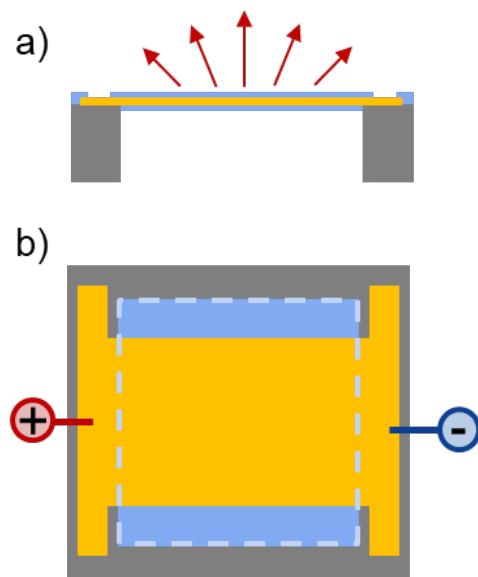


Abb. 1: Schematische Darstellung unserer IR-MEMS-Emitter-Chips. Die dielektrischen Schichten sind hier zu jeweils einer vereinfacht. Dabei zeigt a) einen Querschnitt und b) eine Draufsicht.

getesteten Strahlern keine Grenzfrequenz größer als 25 Hz nachweisen.

Ziel dieser Arbeit war es, unsere eigenen IR-MEMS-Emitter auf eine Modulationsfrequenz im Bereich von 100 Hz zu optimieren. Für eine geplante Anwendung in der Atemgasanalyse waren eine maximale elektrische Leistung von 5 W (bei unter 1 A) und ein handelsüblicher TO-39-Sockel als Chip-Träger vorgegeben.

Vorgehen / Vorarbeit

Es gibt verschiedene Möglichkeiten IR-Emitter mit mikrotechnischen Prozessen herzustellen. Unsere Technologie ist CMOS-kompatibel und basiert auf einer dünnen Heizer-Membran. Wie in Abbildung 1 dargestellt, besteht diese aus einem Schichtstapel mehrerer dielektrischer, sowie einer stromführenden Ebene. Letztere verhält sich wie ein ohmscher Widerstand, sodass sich die Membran infolge des Stromflusses nach dem Joule-Lenz-Gesetz erwärmt. Dabei ist die Membran für Temperaturen von bis zu 700°C ausgelegt.

An unserem Institut war bereits ein technologischer Ablauf zur Herstellung von IR-MEMS-Emitter-Chips etabliert. Hierbei wird das Membranschichtsystem zusammen mit den Kontaktflächen auf einen Silizium Wafer Schicht für Schicht auf der Vorderseite aufgebaut. Am Ende wird die Membran durch rückseitiges Ätzen freigestellt, wobei das Silizium unter der Membranfläche komplett entfernt wird. Dabei können die Geometrien der einzelnen technologischen Ebenen frei variiert werden.

Mit dieser Technologie wurden an unserem Institut bisher IR-Emitter-Chips hergestellt, die eine lange Lebensdauer garantieren und auf hohe Intensitäten bei langsamen Messungen bis 10 Hz optimiert sind.



Abb. 2: Drei verschiedene unserer IR-Emitter aufgebaut auf TO-39-Sockel

Bei den gefertigten vier verschiedenen Chipgrößen (drei davon in Abbildung 2 dargestellt) zeigte sich eine lineare Abhängigkeit der thermischen Zeitkonstante (siehe Abbildung 3), sodass der erste Ansatz

hin zu einem schnellen und „hellen“ IR-Strahler ein Strahler-Array war. Dies kann diskret durch eine Anordnung mehrerer Strahler-Chips im Aufbau umgesetzt werden, oder aber als neues Chip-Design, bei dem die Membran durch Stege in mehrere Membranen/ Membran-Segmente unterteilt wird.

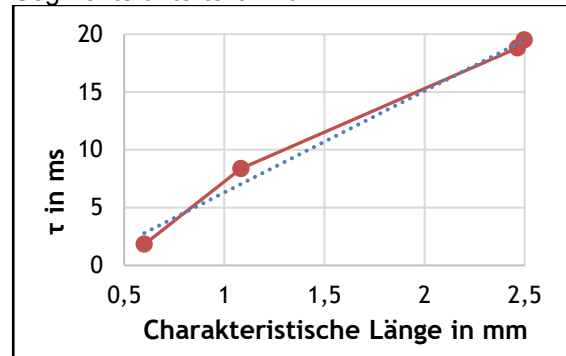


Abb. 3: Die mittlere thermische Zeitkonstante in Abhängigkeit von der Membrangröße, betrieben mit einer Stromquelle bei etwa 600 °C maximaler Membrantemperatur, aufgebaut auf TO-39-Sockel.

Mess- und Simulationstechnik

Für die Messung und Charakterisierung unserer IR-Strahler stehen uns verschiedene Messgeräte zur Verfügung. Die Thermografie-Aufnahmen wurden mit der Infrarotkamera PI 640i (Optris GmbH, 13127 Berlin, Deutschland) mit Mikroskopobjektiv erstellt. Die Kamera misst in einem Wellenlängenbereich von 8-14 μm . Zur Messung der Strahlstärke nutzten wir das Radiometer RM9 mit Chopper (Ophir Spiricon Europe GmbH, MKS Instruments Inc., 64291 Darmstadt, Deutschland) in Verbindung mit einem 4 μm Bandpass-Filter FB4000-500 (Thorlabs GmbH, 85232 Bergkirchen, Deutschland). Die Emissionsspektren wurden mit dem Nicolet IS50 FT-IR (Thermo Fisher Scientific GmbH, 63303 Dreieich, Deutschland) aufgenommen. Die Zeitabhängigkeit der Strahler wurde mit der InAsSb-Fotodiode P13894 (Hamamatsu Photonics Deutschland GmbH, 82211 Herrsching, Deutschland) charakterisiert. Die Ansteuerung und gleichzeitige Messung der elektrischen Parameter der Emitter fand mithilfe einer Keithley SMU 2602B (Tektronix GmbH, 50739 Köln, Deutschland) statt.

Für die Simulationen nutzten wir Comsol Multiphysics (Comsol Multiphysics GmbH, 37073 Göttingen, Deutschland) in der Version 6.1 mit dem AC/DC-, dem Heat Transfer-, dem Ray Optics- und dem Design-Modul. Zur Berechnung der Materialparameter mittels neuronaler Netze wurde Mathematica Version 13 (Wolfram Research Inc. Champaign, IL 61820-7237 United States) verwendet.

In den Experimenten wurde zur Vergleichbarkeit der Strahlertypen immer eine maximale Membrantemperatur von 600°C angestrebt bzw. eingestellt. Dies ist die Temperatur bei der für das Schichtsystem eine zufriedenstellende Lebensdauer garantiert werden kann. In den Simulationen wurden auch Temperaturen bis 800°C zugelassen unter Beachtung einer beschleunigten Alterung.

Modellbildung hin zum „Digitalen Zwilling“

Der größte unserer IR-Emitter-Chips wurde in der Simulationssoftware Comsol geometrisch exakt konstruiert. Die im Grundmaterial aus Silizium bestehenden IR-MEMS-Strahler werden üblicherweise auf TO-39-Sockel aufgebaut, sodass die Mikrochips über Klebeflächen an den vier Ecken thermisch mit dem Sockel aus Kovar-Material verbunden sind. Dementsprechend wurde auch dieser Verbund im Modell berücksichtigt.

Die Parameter der in unserem Reinraum abgeschiedenen Schichten sind nur begrenzt bekannt und lediglich in grober Näherung durch Literaturwerte zu beschreiben. Die direkte Messung der benötigten Materialparameter ist derzeit nicht möglich, sodass diese mit einem Algorithmus über den Vergleich der Simulation mit gemessenen Kennlinien bestimmt wurden. Hierfür wurden zuerst die Temperatur und der elektrische Widerstand einer Charge IR-Strahler in Abhängigkeit der angelegten elektrischen Leistung bei Normaldruck und im Vakuum gemessen. Die sich ergebenden Kennlinien dienen als Zielgrößen für die Modellbildung.

Zu Beginn wurden für die gesuchten Materialparameter physikalisch sinnvolle Grenzwerte festgelegt. Mit diesen Grenzwerten wurden die ersten Simulationen durchgeführt. Die damit errechneten Kennlinien aus Temperatur, elektrischem Widerstand und elektrischer Leistung wurden dem neuronalen Netz übergeben. Dieses bestimmte aus den Simulations-Datensätzen im Vergleich mit den Messdaten neue Materialparameter, mit denen erneut eine Simulation durchgeführt und den Datensätzen hinzugefügt wurde.

Dieser iterative Prozess aus Simulation, Vergleich und Parameteränderung führte schließlich zu einer konvergierten Lösung bestehend aus einem eindeutigen Parameter-Datensatz für die gesuchten thermo-elektrischen Schichtparameter. Der Vergleich der Simulation mit den gefundenen Materialparametern und den gemessenen Werten ist in Abbildung 4 dargestellt und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung.

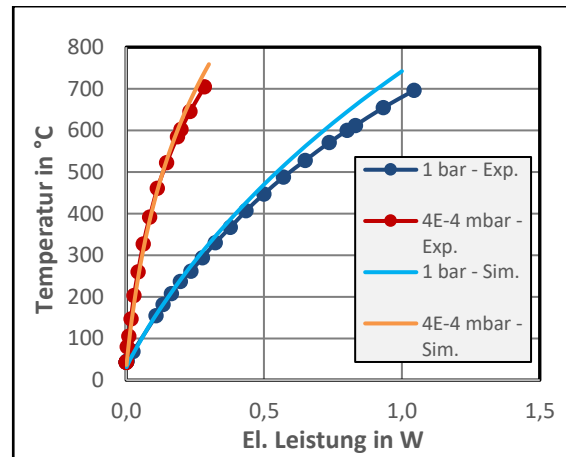


Abb. 4: Vergleich der Temperatur-Leistungskurven (bei zwei unterschiedlichen Drücken) zwischen Messergebnissen und den Simulationen, die aus den gefundenen Materialparametern resultieren.

Diskrete Arrays

Tabelle 1: Übersicht über unsere drei derzeit wichtigsten Emitter-Chips und der aufgebauten Arrays, gezeigt in Abb. 2.

	Membranfläche in mm ²	Elektr. Leistung in mW	Relative Strahlstärke
Kleiner Strahler	0.36	130	0.08
Mittlerer Strahler	1.17	350	0.18
Großer Strahler	6.08	600	1
4er-Array	1.44	510	0.29
16er-Array	5.76	1900	0.88

Der erste Lösungsansatz hin zu einem schnellen IR-Strahler mit ausreichender Strahlstärke war der Aufbau mehrerer kleinerer Strahler, die allein genommen keine ausreichende Intensität, aber die kleinste Zeitkonstante aufweisen. Hierfür mussten die etwa 1 mm² großen Membran-Chips möglichst eng auf einem TO-Sockel angeordnet und elektrisch miteinander verbunden werden. Der Abstand zwischen den Chips konnte dabei auf 150 µm reduziert werden. Weiterhin entschieden wir uns für eine Schaltung, bei der jeweils zwei Emitter in Reihe geschaltet sind. Diese 2er-Verbunde sind dann wiederum in

einer Parallelschaltung mit insgesamt bis zu 16 Strahlern auf einem TO-39-Sockel angeordnet. Bei Reihenschaltungen besteht allgemein das Problem, dass der Ausfall eines Elements zum Ausfall der gesamten Reihe führt. Hätten wir aber alle Elemente parallelgeschaltet, wären Stromstärken von über einem 1 A erreicht worden, was über den Vorgaben lag.

Verglichen werden Einzelstrahler, 4er-Array und 16er-Array des kleinsten Emitters mit einem mittleren und einem großen Emitter (siehe Tabelle 1).

Das 4er-Array ist bezüglich der elektrischen Leistung vergleichbar mit einem großen Strahler. Obwohl das 4er-Array bei 1 Hz nur 30 % der Strahlstärke eines großen Strahlers liefert, ist bei Messungen ab 35 Hz schon das 4er-Array im Vorteil (siehe Abbildung 5).

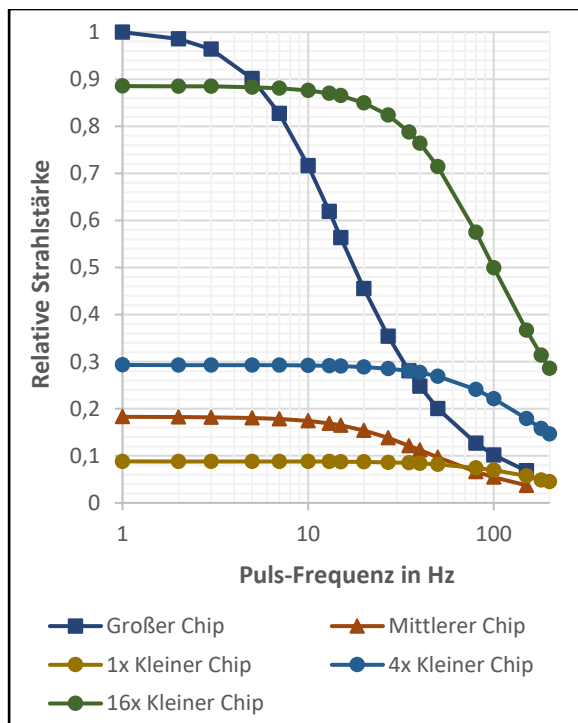


Abb. 5: Vergleich der Strahlungsintensität auf TO-39-Sockel aufgebauter IR-Strahler im Pulsbetrieb.

Wird nun die Anzahl der Strahler im Array auf 16 erhöht, würde einerseits eine Vervielfachung der elektrischen- und andererseits der Strahlungsleistung erwartet werden. Da die höhere elektrische Leistung von 1.9 W zu einer erheblichen Erwärmung des Sockels führt und sich daraus resultierend auch das Off-Signal erhöht, performt dieses Array bei kleinen Frequenzen vergleichsweise schlecht. Im Vergleich zum 1 Hz-Signal des großen Emitters, erreicht das 16er-Array bei ebenfalls 1 Hz nur etwa 88 %. Dies sinkt bei einem Betrieb von 100 Hz aber nur auf etwa 50 % des Vergleichswertes ab. Damit hat sich das

absolute Peak-to-Peak-Signal im Vergleich zum 100 Hz-Betrieb des großen Strahlers vervielfacht.

Bei einem Array aus 16 Einzelchips stellt sich die Frage der Konsistenz und Wiederholbarkeit, da die Widerstände der Einzelchips nicht exakt übereinstimmen. Beispielhaft ist in Abbildung 6 zu sehen, wie sich die Maximaltemperaturen über das Array zwischen 558 °C und 630 °C verteilen. Wird nun für 600 °C Maximaltemperatur bei über 30 verschiedenen Arrays die elektrische Leistung gesucht, gibt es eine sehr breite Verteilung von etwa 1.7 W bis 2.2 W. Hier wird praktisch immer nur der Chip mit der maximalen Temperatur erkannt.

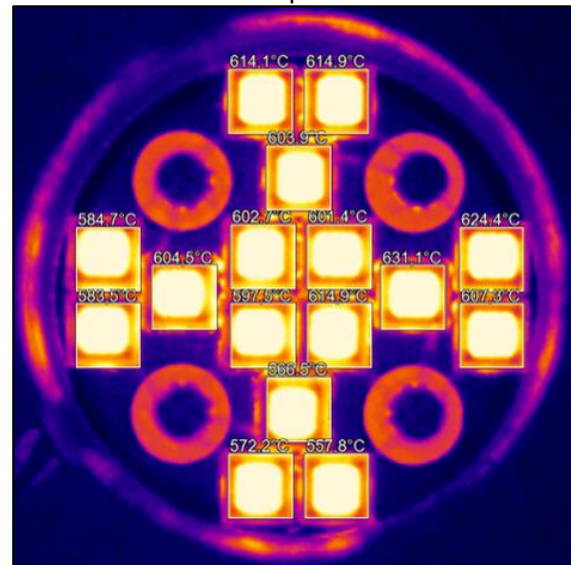


Abb. 6: IR-Kamera-Aufnahme eines 16er-Arrays bei 1.9 W. Für alle Einzelchips wurden die Maximaltemperaturen der jeweiligen Membran gemessen. Die Werte schwanken zwischen 557.8 °C und 631.1 °C.

Wird jetzt aber die Strahlungsleistung festgehalten, die sich aus der Summe aller Strahler ergibt, ist die Verteilung der Arrays wesentlich enger zwischen 2.1 W und 2.2 W (siehe Abbildung 7). Die statistische Verteilung der Einzelstrahler scheint sich in der Masse gut auszugleichen.

Hinsichtlich der Leistung und Zuverlässigkeit scheint das 16er-Array eine Alternative für hohe Frequenzen zu sein. Allerdings sind die Lebensdaueruntersuchungen noch nicht abgeschlossen. Diese werden Rückschlüsse auf die Leistungen bzw. Temperaturen zulassen, bei denen das Array zuverlässig betrieben werden kann. Damit im Zusammenhang steht auch, ob für bestimmte Anwendungen der Ausfall einzelner Chips unkritisch wäre, bzw. ab wie vielen Einzelchip-Ausfällen das Array zu einem vollständigen Ausfall des Systems führt.

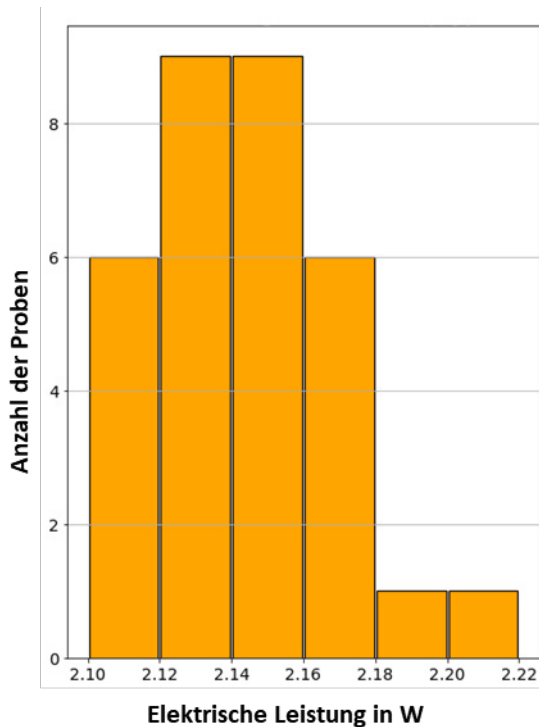


Abb. 7: Es wurden 31 16er-Arrays aufgebaut und auf dieselbe Strahlstärke eingestellt. Das Diagramm zeigt die Verteilung der dazu benötigten elektrischen Leistung.

Ein weiterer Aspekt sind die Kosten. Die reinen Chipkosten sind bei den 16 kleinen Chips in Summe etwa 25 % höher als bei dem großen Einzelemitter (was sich aus der Chipfläche ergibt). Zusätzlich gibt es bei dem Array einen erheblichen Aufwand im Aufbau, weshalb diese Lösung eine wesentlich teurere Alternative zum Einzelchip darstellt. Abhilfe könnte ein bereits auf dem Wafer vorgesehenes Array schaffen, welches aus zusammenhängenden Einzelchips besteht.

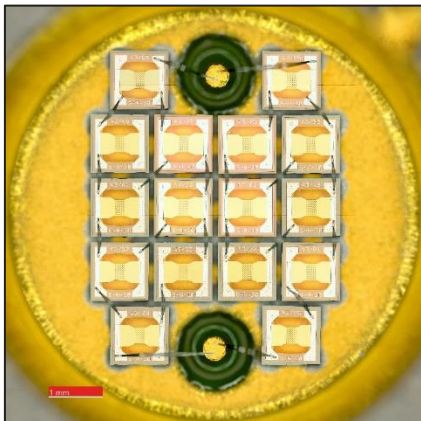


Abb. 8: Aufgebautes 16er-Array mit 1 mm-Maßstab auf einem TO-39-Sockel

Chip-Optimierung mittels Simulation

Der technologische Durchlauf zur Produktion von IR-MEMS-Emittern ist sehr aufwändig, sodass nur möglichst vielversprechende Designs hergestellt werden sollten. Auch wenn die Möglichkeit besteht, mehrere Designs auf einem Wafer unterzubringen, gilt es in der Entwicklungsphase die Variantenvielfalt möglichst gering zu halten.

Einerseits muss für die Sicherstellung aller für eine aussagekräftige Bewertung notwendigen Testmöglichkeiten eine entsprechende Anzahl an Chips pro Variation auf dem Wafer untergebracht werden können. Andererseits muss bei der Planung berücksichtigt werden, dass der Messaufwand proportional zur Anzahl an Variationen steigt. Werden dann noch Parameter wie die elektrische Leistung variiert, ergibt sich schnell eine sehr komplexe Messmatrix.

Zur Reduktion des Produktions- und Messaufwandes wurden Änderungen am Chipdesign ausführlich mit dem Simulationsmodell getestet.

Um verschiedene Emitter-Designs miteinander zu vergleichen, braucht es eine Kennzahl. Diese sog. „Figure of Merit“ (FOM) haben wir folgendermaßen definiert:

$$FOM = \frac{\Phi_{rad}}{\tau \cdot j_{max} \cdot T_{max}}$$

Mit Φ_{rad} als Strahlungsleistung, τ als thermische Zeitkonstante, j_{max} als maximale Stromdichte auf der Membran und T_{max} als Maximaltemperatur auf der Membran. Dabei dienen die Strahlungsleistung und die Zeitkonstante um die Pulsperformance dazustellen. Hohe Stromdichten und zu hohe Temperaturen führen langfristig zu Degradationen und Alterung, sodass diese zwei Größen in erster Näherung als Faktor für die Lebensdauer dienen.

Weiterführend kann der IR-Strahler in erster Linie als „grauer Körper“ beschrieben werden, wobei sich die Strahlungsleistung mithilfe des Emissionsgrades ϵ und des Stefan-Boltzmann-Gesetzes ergibt. Auf der Heizermembran herrscht zudem eine definierte Temperaturverteilung, sodass jedes Flächenelement dA einen spezifischen Beitrag zur gesamten Strahlungsleistung beiträgt:

$$\Phi_{rad} = \epsilon \cdot \sigma \int T^4(A) dA$$

Zum Vergleich mit dem aktuellen Chip wurde das bisherige Design in Teilen beibehalten. Die Chip-Außenkanten und die Größe der Membran sind in allen Modellen gleich. Variiert wurden

hingegen die Breite der leitenden Schicht, sowie Strukturen bzw. Stege aus Silizium, die als thermische Leiter auf der Membran verbleiben. Hierbei wurden diverse Geometrien und Strukturhöhen simuliert.

In der technologischen Fertigung würden diese Strukturen beim Freistellen der Membran ausgelassen, sodass nur der rückseitige Ätzprozess angepasst werden würde.

Da die ideale elektrische Leistung nicht bei jeder Variation dieselbe und anfänglich unbekannt ist, wurden immer auch verschiedene elektrische Leistungen simuliert. Dabei sollte allerdings eine Maximaltemperatur von 800 °C und eine maximale Stromdichte kleiner 150 A/m auf der Membran nicht überschritten werden.

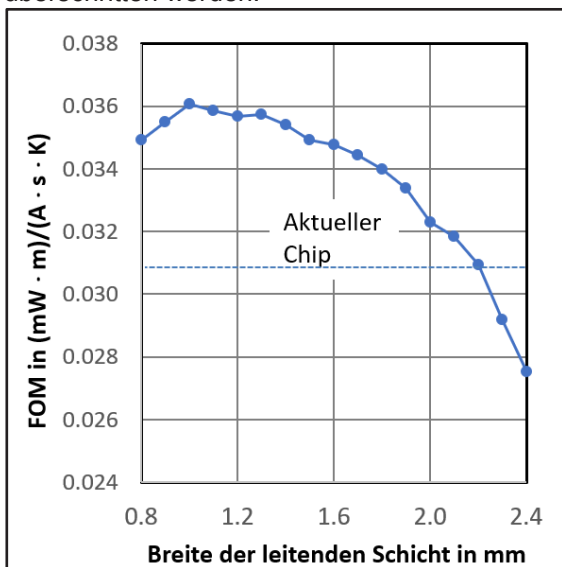


Abb. 9: Vergleich verschieden breiter leitender Schichten, wobei der FOM-Wert des aktuellen Chips hervorgehoben eingezeichnet ist. Die Membran ist insgesamt 2.65 mm breit.

Auf den ersten Blick zeigt sich in der ersten Studie über die Anpassung der Breite der stromleitenden Schicht, dass die FOM grundsätzlich um bis zu 18 % gesteigert werden kann (siehe Abbildung 9). Dabei scheint das beste Ergebnis bei einer Leiterbahn-Breite von etwa 40-50 % der Membranbreite zu liegen. Allerdings steigt unterhalb einer schmalen Leiterbahn-Breite von 1.5 mm die Maximaltemperatur auf über 800 °C an, sodass eine deutlich beschleunigte Alterung zu erwarten wäre.

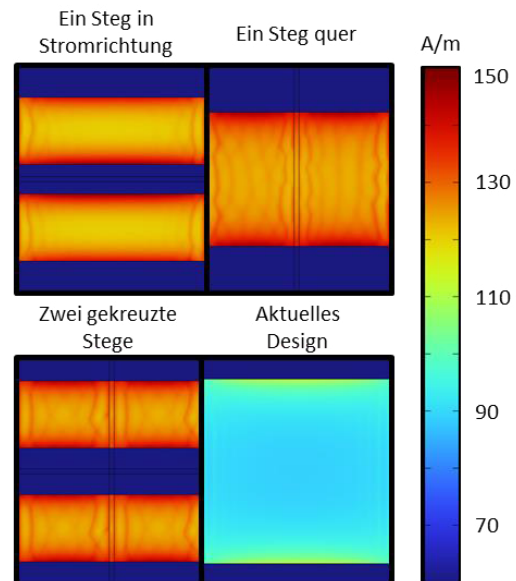
Als aufwändigste Studie folgte die Evaluation verschiedenster Steggeometrien auf der Membran. Dabei wurden auch im Vergleich zu einfachen Stegen komplexere Geometrien evaluiert, wie Kreisstrukturen, sternförmige Anordnungen, tropfenförmige und mehr.

Dabei zeigten sich einfache Stege am vielversprechendsten, sodass hier eine große

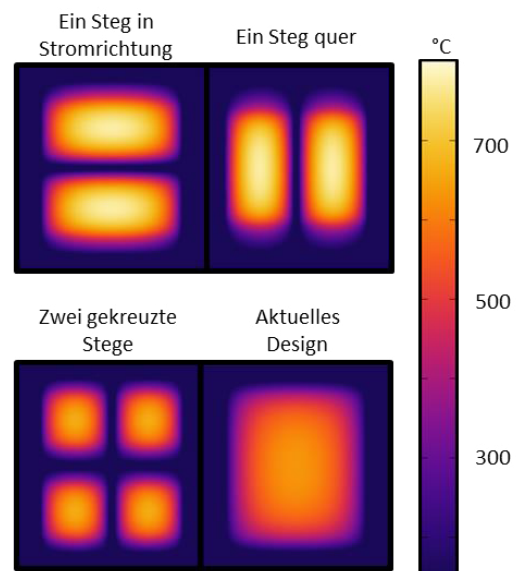
Studie zu verschiedenen Parametern (Breite, Höhe, Anzahl, Längs- und/oder Querausrichtung) durchgeführt wurde.

Beispielhaft sind in Abbildung 10 die im Modell optimalen Varianten für einen Steg längs bzw. quer in der Membranmitte, sowie eine Kombination aus beiden zu sehen. Dargestellt sind Stromdichte, Temperatur und spezifische Ausstrahlung. Abbildung 11 zeigt die FOM und ihre assoziierten Größen im Vergleich mit dem derzeitigen Design.

a) Stromdichte



b) Temperatur



c) Spezifische Ausstrahlung

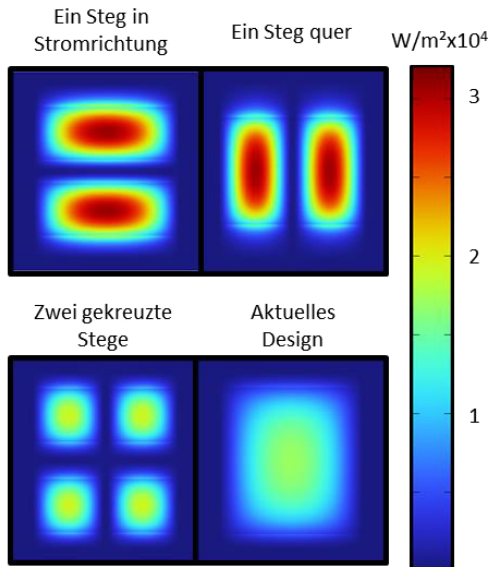


Abb. 10: Stromdichte, Temperatur und spezifische Ausstrahlung im Vergleich zwischen dem derzeitigen Chip und drei Varianten mit Silizium-Stegen.

Durch die wärmeleitenden Stege wird die große Membran in mehrere Stücke unterteilt, sodass sich im Endeffekt jeweils ein Array ergibt. In der Variante längs zur Stromrichtung ausgeführten Steg zeigt eine Unterbrechung der stromführenden Schicht deutlich bessere Ergebnisse. Wird in dieser Variante die stromführende Schicht nicht unterbrochen, fließt ein großer Strom über den kalten Bereich über dem Steg, ohne dabei die Membran zu heizen.

Mit allen Steg-Varianten lässt sich die Zeitkonstante auf etwa 60 % reduzieren, dies geht in allen Fällen auf Kosten einer höheren Stromdichte. Insgesamt lässt sich die FOM durch die einfachen Stege um bis zu 50 % steigern. Die Variante mit dem Steg entlang der Stromrichtung und der getrennten leitenden Schicht zeigt in der Simulation die besten Ergebnisse.

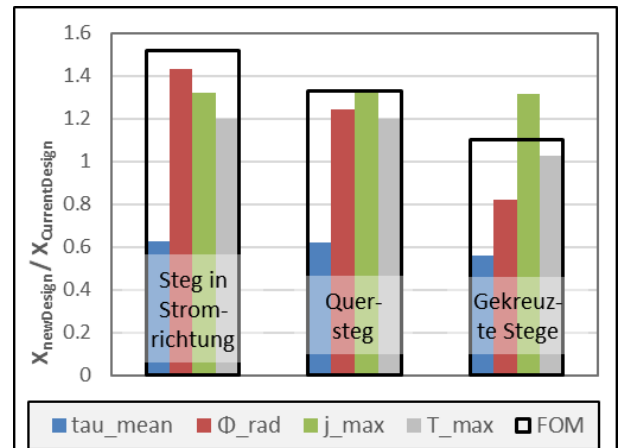


Abb. 11: Thermische Zeitkonstante, Strahlstärke, maximale Stromdichte, maximale Temperatur und FOM der neuen Designs mit Steg in Relation zum aktuellen Design.

Ausblick

Aktuell befinden sich zwölf der gefundenen Designs im technologischen Durchlauf. Wenn diese gemessen wurden, kann die geeignetste Variante ausgewählt werden. Die Messergebnisse werden weiterhin zur Verfeinerung des digitalen Zwillings dienen. Auch die initiale Idee des Arrays, die als diskreter Aufbau in der Messung sehr gute Ergebnisse erzielen konnte, hat sich später in der Design-Optimierung wiedergefunden. Darüber hinaus entwickeln wir unser Simulations-Modell täglich weiter. Gerade sind wir dabei eine neue Figure of Merit zu erarbeiten, da wir mittlerweile ein Lebensdauer-Modell, welches Elektromigration beachtet, in unsere Simulations-Auswertung integrieren konnten.

Literaturnachweis

- [1] <https://internationallight.com/instrumentation-sensor-light-sources/subminiature-t-34-and-t-1-ndir-lamps>, 08.04.2024