

Introduction à la Modélisation Multiphysique de Microsystèmes Sur l'environnement COMSOL Multiphysics

G. A. Ardila Rodríguez¹, G. Ablart², A. Cazarre^{1,2}, C. Rossi¹

¹LAAS-CNRS ; Université de Toulouse ; 7 avenue du colonel Roche, 31077 Toulouse Cedex 04,
France

²Université de Toulouse, Université Paul Sabatier

E-mail : gaardila@laas.fr

Résumé

Cet exposé a pour objectif de présenter un bureau d'études dédié à la modélisation multiphysique, mettant en avant le transfert des connaissances issues de la recherche vers l'enseignement. Ce bureau d'études est issu des travaux de thèse menés au LAAS au sein du groupe (N2IS) du pôle MINAS.

Nous présenterons la modélisation d'un micro actionneur développé pour une application micro fluidique. L'intérêt de cette application est la prise en compte de plusieurs phénomènes physiques agissant sur l'actionneur et les différentes techniques pour réaliser des structures et maillages. Un point important est l'analyse des résultats théoriques comparés aux résultats expérimentaux.

Publics concernés

Au niveau du site Toulousain

Ce module a été mis en place à l'AIME pour la promotion 2007-2008 du Master Recherche MNS (Micro et Nano Systèmes) et sera utilisé aussi pour la promotion 2008-2009 du nouveau Master Professionnel (IM2P2) Ingénierie de la Matière : Modélisation des Processus Physiques. Nous rappelons qu'un projet multi thèmes avait été d'ailleurs présenté lors des JPCNFM 2006 [1].

La formation compte deux heures de cours en guise d'introduction à l'environnement COMSOL et douze heures de travail sur machine.

Toutes les formations M2 du domaine des nanotechnologies en cursus Ecoles d'Ingénieurs et Masters professionnels peuvent suivre cette formation. Les Ecoles Doctorales sont également concernées à travers de la formation des doctorants.

1. Méthodologie de conception et modélisation sous COMSOL

Plusieurs aspects importants dans la modélisation des microsystèmes à partir des Méthodes d'Eléments Finis (FEM) doivent être pris en compte dans ce bureau d'études:

- D'abord montrer les avantages que présente cette méthode (géométries complexes, non-linéarités, couplages multiphysiques...).
- La pertinence de réaliser des modèles multiphysiques pour décrire le comportement des microsystèmes, qui par définition, sont des systèmes qui intègrent plusieurs physiques (mécanique, fluidique, thermique...).
- L'importance de valider les modèles réalisés soit à partir de la littérature soit avec des mesures expérimentales dans la mesure du possible.

2. Conception et modélisation d'un actionneur électro-thermo-pneumatique

L'approche multiphysique développée dans cette formation est issue des travaux de thèse de G. Ardila [2] et présente une méthode de conception d'un micro actionneur

totallement intégrable dans une canalisation micro fluidique.

Le concept et la structure de l'actionneur modélisé sont reportés sur la Figure 1.

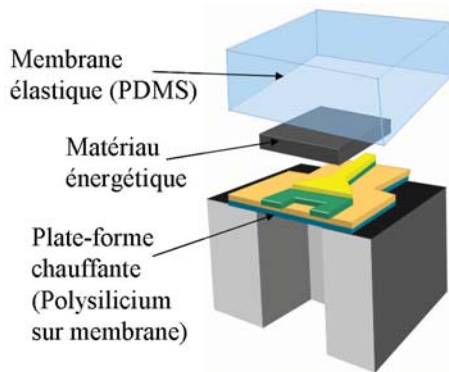


Figure 1. Schéma de la micro source de pression

Les équations sont résolues avec le logiciel à éléments finis COMSOL qui permet de résoudre des équations multi physiques.

Le dispositif comprend trois parties (Figure 1):

- Une résistance chauffante sur une membrane diélectrique fine.
- Un matériau énergétique déposé en couche mince sur la résistance.
- Une membrane élastomère très élastique qui couvre l'actionneur.

Quand la température d'initiation du matériau est atteinte (225°C), le matériau se décompose en générant des gaz biocompatibles, gonflant alors la membrane élastique et poussant le fluide par surpression.

Pour atteindre la précision de pression (kPa) et température (°C), il est important de bien comprendre les phénomènes mis en jeu dans l'actionnement. Ainsi un modèle multiphysique du système est idéal pour optimiser le « design » du dispositif. Chaque phénomène est modélisé indépendamment et ensuite intégré dans un modèle global.

Il s'agit :

- Du modèle électro-thermique de la plate-forme chauffante.
- Du modèle de changement de phase du matériau énergétique et son évolution dans la cavité.
- Du modèle mécanique de la membrane très élastique.

Dans ce qui suit nous allons présenter chaque modèle pris isolément de l'actionneur par ordre croissant de difficulté, ceci tenant compte de la complexité de la géométrie et du maillage et en ajoutant à chaque fois les différents couplages multiphysiques pour rendre le modèle chaque fois plus réaliste. Ainsi on présente d'abord la membrane élastique, ensuite la plate-forme chauffante et finalement le modèle de génération de gaz.

2.1. Modèle mécanique de la membrane élastique.

Le modèle repose sur une membrane d'épaisseur h et un matériau polymère (PDMS) très élastique qui permet une grande déformation sous une faible pression. On considère le PDMS avec son module de Young de 4MPa et un coefficient de Poisson de 0.48. Une pression appliquée sur la membrane élastique entraîne une déformation (w) importante de celle ci ($w \gg h$). Le modèle dit Neo-Hookean qui est adapté à de grandes déformations et au caractère hyper élastique du matériau a donc été implémenté. Ainsi, la définition de la contrainte (ϵ) prend en compte les grandes déformations à travers le terme non linéaire de la variation du déplacement (u_i) en fonction des coordonnées spatiales (x_i), L'expression considérée s'écrit :

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]$$

Le modèle Neo-Hookean considère la fonction de l'énergie liée à la contrainte:

$$W_{hyp} = \frac{1}{2} \mu (I_1' - 3) + \frac{1}{2} \kappa (J_{el} - 1)^2$$

en tenant compte des paramètres physiques tels que le module de cisaillement (μ), le premier module d'invariance (I_1), le module d'incompressibilité (κ) et la partie élastique du changement total de volume (J_{el}). A partir de cette énergie on peut calculer les contraintes de Piola-Kirchhoff (p) selon l'équation [2]:

$$p = \frac{\partial W_{hyp}}{\partial \nabla \bar{u}}$$

La Figure 2 donne les résultats sur la déformation issus du modèle COMSOL sur un quart de la membrane.

On peut alors noter que la déformation maximale atteinte au centre de la membrane est de 45µm dans les conditions suivantes :

- Pression appliqué : 0,01MPa;
- Conditions aux limites : Déformation nulle sous et sur le côté de la membrane (partie collée sur le substrat).

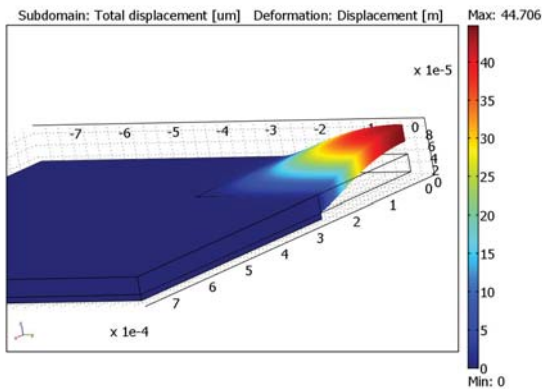


Figure 2. Déformation de la membrane élastique pour une surpression de 0,01Mpa

Confrontation théorie expérience

Il est indispensable sur le plan pédagogique d'avoir une confrontation théorie expérience qui permette à l'étudiant non encore expérimenté en simulation, d'avoir un esprit

critique sur les calculs. La Figure 3 donne une comparaison théorie expérience de la déformation maximale (w_{max}) d'une membrane en fonction de la pression exercée. On constate une faible différence entre les deux courbes qui peut s'expliquer par une adhérence imparfaite entre le PDMS et le substrat, ce qu'entraîne un décollement des membranes. Ceci change les conditions du modèle.

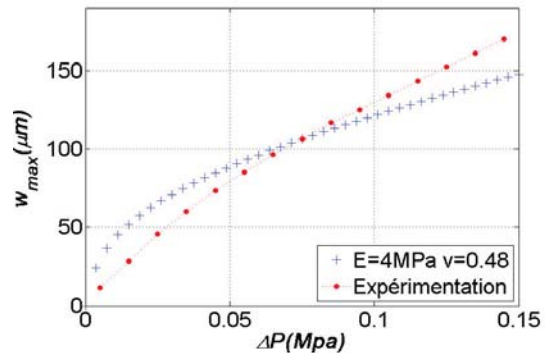


Figure 3. Comparaison théorie/expérience de la déformation d'une membrane polymère en fonction de la pression exercée.

2.2. Modèle électrothermique de la plate-forme chauffante

La structure de la plate-forme conçue au LAAS pour notre application est montrée sur la Figure 4. Seul un quart de la structure est suffisant pour la simulation. La résistance est en polysilicium dopé, déposé sur une membrane SiO2/SiNx. Le substrat de silicium est gravé pour faire apparaître une cavité sous la membrane.

Les équations du modèle électrothermique sont l'équation du potentiel électrique et l'équation de la chaleur, le lien entre ces deux équations est l'effet Joule

La résolution de ces équations sous COMSOL Multiphysics donne les résultats reportés sur la Figure 5. La température maximale obtenue sur la résistance est de 123°C avec les conditions suivantes :

- Tension appliquée : 4V ;
- Conditions aux limites :

Convection au dessus de la membrane : $h=125W/m^2.K$, convection sous la membrane $h=60W/m^2.K$, température ambiante sous le substrat.

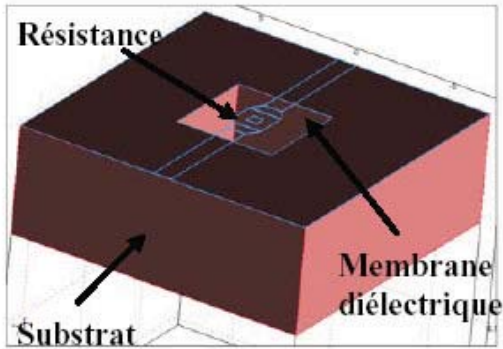


Figure 4. Structure de la plate forme chauffante sur Si

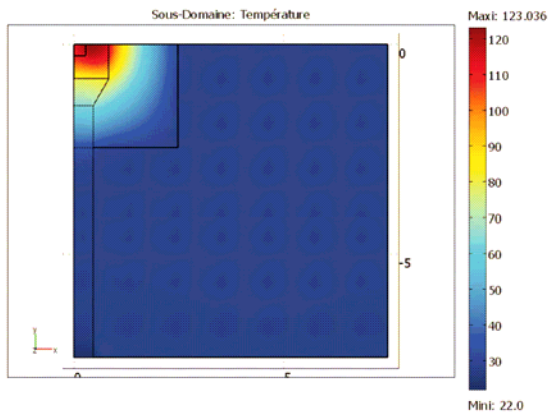


Figure 5. Echauffement de la plate forme chauffante : résultat sous COMSOL

Une deuxième simulation est réalisée en incluant l'effet de la température sur les propriétés conductrices des matériaux, notamment le polysilicium avec l'expression :

$$\sigma_{poly}(T) = \frac{\sigma_{poly}(23^{\circ}C)}{1,0483 - 0,0021 \times T}$$

Confrontation théorie expérience.

La Figure 6 montre la comparaison théorie/expérimentation de la température sur la plate forme chauffante avec les deux modèles implémentés. On peut constater

l'amélioration du modèle quand on considère l'effet de la température sur les propriétés des matériaux, ce qui fait un vrai couplage multiphysique.

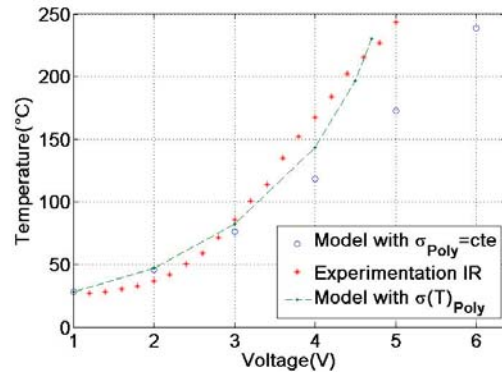


Figure 6. Variations de la température en fonction de la Tension pour la plaque chauffante : Théorie et expérience.

2.3. Modèle pour la génération et diffusion du gaz.

Ce modèle comprend deux parties : d'abord la génération de gaz et ensuite son évolution dans la cavité de l'actionneur.

Le matériau énergétique suit une loi de décomposition de type Arrhenius selon l'équation :

$$\dot{m}_g(T) = A_s \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT_s}\right)$$

Pour simplifier ce modèle nous allons considérer une approche instantanée de cette loi :

- Si $T \geq T_i$: $m_g = m_s$
- Si $T < T_i$: $m_g = 0$

où m représente la masse et les subscripts g et s , l'état gazeux ou solide respectivement. Les deux lois sont montrées dans la Figure 7. Ensuite, pour évaluer l'évolution du gaz dans la cavité, on considère la loi de diffusion de Fick représentée par l'équation :

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla c) = 0$$

où c représente la concentration des espèces et D , le coefficient de diffusion donné par :

$$D = 435,7 \frac{T^{3/2}}{2p(V^{1/3})^2} \sqrt{\frac{2}{M}}$$

V indique le volume molaire et M est la masse molaire. Ensuite on peut représenter la pression dans la cavité à partir de la relation pour les gaz parfaits :

$$P = cRT$$

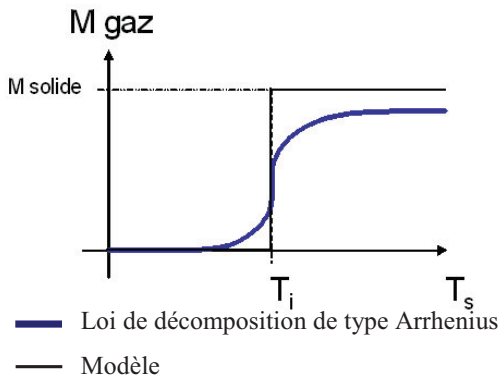
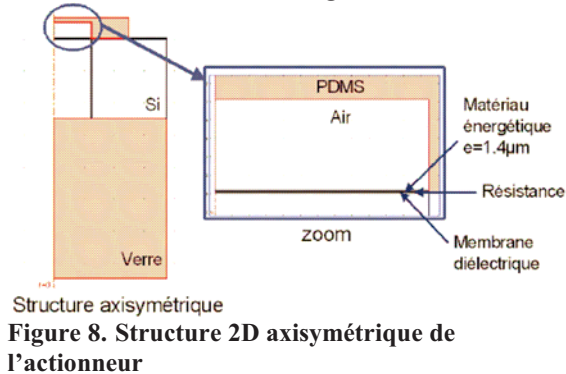


Figure 7. Modèles pour la décomposition d'un matériau énergétique.

Cette physique est ajoutée aux modèles électrique et thermique mentionnés précédemment sur l'actionneur. Dans cette nouvelle étape de modélisation, nous montrons aux étudiants comment on peut simplifier à nouveau la géométrie en utilisant un modèle 2D axisymétrique comme montré dans la Figure 8.



Evidemment la structure de la résistance chauffante dans une approche axisymétrique n'est pas la même que dans le modèle 3D réalisé précédemment, une calibration est nécessaire notamment en termes de tension appliquée et chauffage obtenu : La conductivité du polysilicium de la résistance chauffante est divisée par 3.

Procédure de simulation

Cette dernière étape de simulation est divisée en deux parties :

Etape 1 - D'abord on réalise une simulation statique liée au chauffage du dispositif par l'effet Joule. En regardant la distribution de la température du matériau énergétique nous pouvons déterminer la quantité de matériau qui se décompose (voir Figure 9), ceci nous donne notamment les conditions initiales en température et concentration de gaz issu de la décomposition du matériau énergétique pour l'étape suivante.

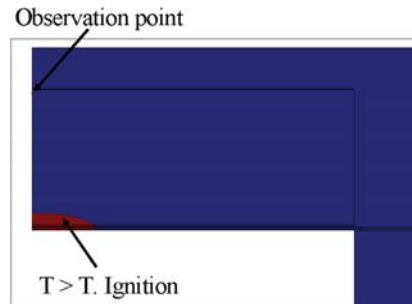


Figure 9. Schéma du modèle et positionnement du point d'observation dans la cavité.

Etape 2 - Dans cette étape nous allons simuler un échelon en tension en fonction du temps pour arrêter le chauffage de la résistance et nous allons observer l'évolution de la pression dans la cavité (Figure 10). La déformation de la membrane est calculée à partir d'une régression polynomiale de la courbe caractéristique du comportement de la membrane (Figure 3).

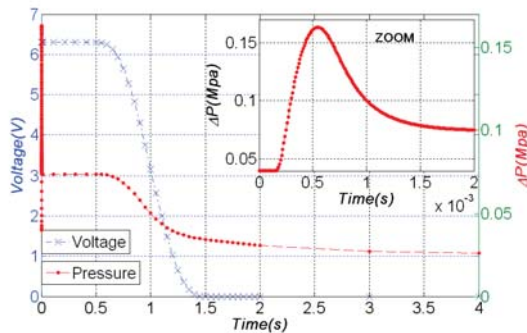


Figure 10. Evolution de la pression du gaz sur le point d'observation sous la membrane élastique.

3. Conclusions et perspectives

Dans cet article, nous avons présenté un bureau d'études concernant la modélisation multi physique à partir d'un environnement qui semble être très attractif dans le domaine des systèmes microélectroniques et des microsystèmes. Une application type dans le domaine des microactionneurs et dans la microfluidique particulièrement a été choisie, prenant en compte les multiples physiques interagissant dans le système et les multiples techniques de modélisation développées pour le concevoir. Ces différentes techniques sont montrées aux étudiants du Master Recherche en ordre croissant de difficulté. Nous commençons par un modèle simple au niveau géométrique et maillage considérant une seule physique, puis on ajoute des autres phénomènes physiques pour créer des modèles complexes.

Naturellement, ce bureau d'études ne couvre pas toutes les possibilités de modélisation du logiciel COMSOL. Pour compléter cette formation, une possibilité intéressante est d'inclure une introduction à la modélisation par « script » de COMSOL: un outil qui permet de créer des modèles à partir d'un code semblable à celui du MATLAB. Cela permet de réaliser des simulations paramétriques avec efficacité, en plus de présenter une grande versatilité si on ajoute les possibilités de la programmation avec MATLAB. Pour aller plus loin on peut

envisager une formation incluant les possibilités de coupler COMSOL avec Simulink/MATLAB (option inclus sur COMSOL) pour réaliser de l'optimisation ou des boucles de commande. Un exemple de cette option de simulation paramétrique est l'évaluation des performances de l'actionneur (surpression, déformation de la membrane) en fonction de la quantité de matériau énergétique déposé sur la résistance chauffante (voir Figure 11). La figure illustre aussi une caractérisation réalisée sur le dispositif final, avec une déformation de $46\mu\text{m}$ correspondant à 13kPa en surpression. Cette erreur est notamment due à l'imprécision dans la quantité de matériau déposé et la difficulté de centrer le dépôt au milieu de la résistance chauffante [3].

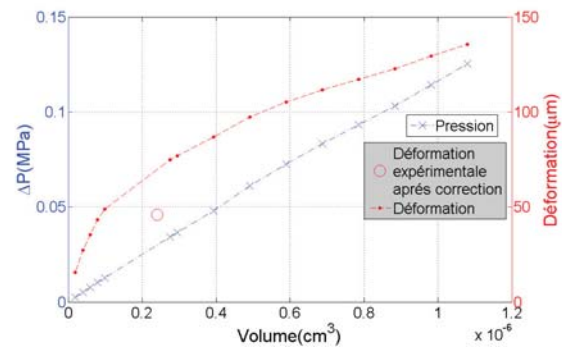


Figure 11. Surpression dans la cavité et déformation maximale de la membrane en fonction de la quantité de matériau énergétique déposé

Références

- [1] A. Cazarre, C. Rossi, G. A. Ardila Rodriguez *et al*, *Proc. JNCNFM 2006*, St-Malo, France.
- [2] G. A. Ardila Rodriguez, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier (2008), Toulouse, France.
- [3] G. A. Ardila Rodriguez *et al*, "A micro actuator based on the decomposition of an energetic material for disposable Lab-on-Chip applications: Fabrication and Test", *Accepted au Journal of Micromechanics and Microengineering* en Octobre 2008.