



**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt

**Wissenschaftliche Berichte**  
FZKA 6564

**Workshop zum Thema  
„Simulationen in der  
Mikrosystemtechnik“**

**26. Oktober 2000**

**im Forschungszentrum Karlsruhe**

**zusammengestellt von der  
Programmleitung**

**Programm Mikrosystemtechnik**

**November 2000**

---



# **Forschungszentrum Karlsruhe**

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6564

**Workshop zum Thema**

**„Simulationen in der Mikrosystemtechnik“**

**26. Oktober 2000**

**im Forschungszentrum Karlsruhe**

zusammengestellt von der Programmleitung

**Programm Mikrosystemtechnik**

---

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2000

**Als Manuskript gedruckt**  
**Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**  
**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH**  
**Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

---

**Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft**  
**Deutscher Forschungszentren (HGF)**

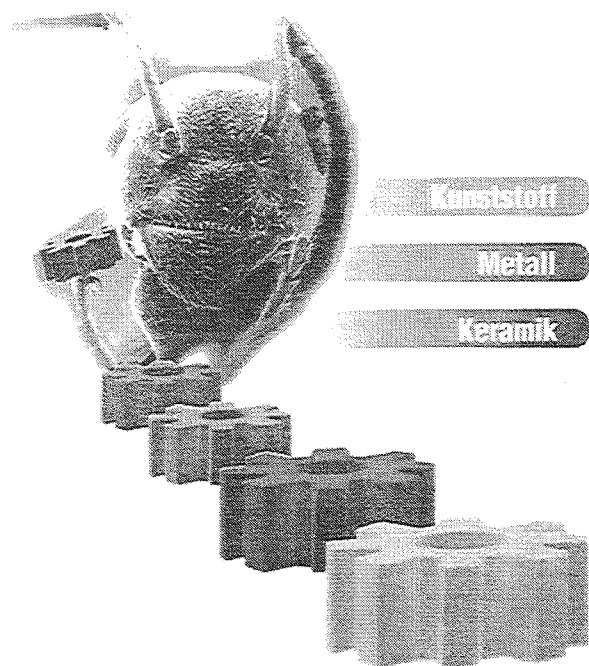
**ISSN 0947-8620**

# WORKSHOP zum Thema „Simulationen in der Mikrosystemtechnik“

am 26. Oktober 2000

Ort: FTU, Mittlerer Hörsaal Nr. 236  
 Beginn: 26.10. um 08:30 Uhr

## Programm



Ansprechpartner bei Fragen:

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH  
 Programmleitung Mikrosystemtechnik  
 Dr. P. Bley / Dr. S. Voigt  
 Postfach 3640  
 D-76021 Karlsruhe

Telefon: 07247-825578  
 Telefax: 07247-825579  
 E-mail: [pmt@pmt.fzk.de](mailto:pmt@pmt.fzk.de)  
 Internet: <http://www.fzk.de/pmt>

Uhrzeit	Thema	Name / Institut
8:30	Begrüßung und Einführung	P. Bley / MIKRO
<b>Bauteil-Simulationen in der MST</b>		
8:45	Simulation von LIGA-Spektrometern	B. Krevet / IMT
9:00	Simulation in der Entwicklung und Konstruktion eines Mikrospektrometers	C. Solf / IMT
9:15	Optiksimulation für die Gasanalysekammer	I. Sieber / IAI
9:30	Bauteiloptimierung in der MST mit FEM	E. Diegele / IMF II
9:45	Finite-Elemente-Modellierung des Großsignal-Hysterese Verhaltens von Piezokeramiken	M. Kamiah / IMF II
10:00	Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinduktoren	A. von der Weth / IMF II
10:15	FE-Simulation zur mechanischen Belastung einer Mikroverzahnungspumpe	J. Aktaa / IMF II
10:30	Kaffeepause	
<b>Prozess-Simulationen in der MST</b>		
11:00	Simulation der Bestrahlung und Entwicklung von Resists (optische- u. Röntgentiefenlithographie)	J. Schulz / IMT
11:30	Simulation des Heißprägeprozesses	M. Worgull / IMT
11:45	Simulation zum Mikrospritzgießen	K. Mueller / IMF III
12:00	Prozessmodellierung zur Laseroberflächenmodifikation keramischer Substrate	H. Gruhn / IMF I
12:15	Mittagspause	
<b>Fluidik-Simulationen in der MST</b>		
13:30	Fluidiksimulation für medizinische Teststreifen	S. Halstenberg / IAI
13:45	Simulation eines passiven Mikroventils und strukturierter Mikrokanäle	A. Quinte / IAI
14:00	Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Mikromischern	P. Ehrhard / IKET
14:15	Simulation von Thermo- und Fluidodynamischen Prozessen in Mikrostrukturapparaten	D. Struwe / IRS
14:30	Kaffeepause	
<b>Allgemein anwendbare Simulationen in der MST</b>		
15:00	Simulation von dynamischen Systemen für den Einsatz in der Regelungstechnik	W. Eppler / HPE
15:15	Thermische Simulation von Gassensorchips	T. Blank / HPE
15:30	Anwendung gekoppelter FEM-Programme zur Simulation von Aktoren mit Formgedächtnis-Antrieb und galvanischer Abscheidung	B. Krevet / IMT
15:45	Schlussbemerkungen	P. Bley / MIKRO
16:00	Ende der Veranstaltung	



# INHALT

Einführung zum Workshop „Simulationen in der Mikrosystemtechnik“ P. Bley (MIKRO)	1
Simulation von LIGA Spektrometern B. Krevet, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)	7
Simulationen in der Entwicklung und Konstruktion eines Mikrospektrometers C. Solf, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)	25
Anwendung gekoppelter FEM-Programme zur Simulation von Aktoren mit Formgedächtnis- Antrieb und galvanischer Abscheidung B. Krevet, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)	39
Optiksimulation für die Gasanalysekammer I. Sieber, Institut für Angewandte Informatik (IAI)	61
Bauteiloptimierung in der MST mit FEM E. Diegele, Institut für Materialforschung (IMF II)	77
Finite-Elemente-Modellierung des Großsignal-Hysterese Verhaltens von Piezokeramiken M. Kamlah, Institut für Materialforschung (IMF II)	103
Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinduktoren A. von der Weth, Institut für Materialforschung (IMF II)	123
Simulation der Bestrahlung und Entwicklung von Resists mittels Röntgentiefenlithographie und optischer Lithographie J. Schulz, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)	139
Simulation des Heißprägeprozesses zur Herstellung mikrostrukturierter Kunststoffkomponenten M. Worgull, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)	153
Simulation zum Mikrospritzgießen K. Müller, Institut für Materialforschung (IMF III)	161
Prozeßmodellierung zur Laseroberflächenmodifikation keramischer Substrate H.Gruhn, Institut für Materialforschung (IMF I)	177
Simulation kapillarisch getriebener Fluide in Mikrokanälen S. Halstenberg, Institut für Angewandte Informatik (IAI)	193
Variantensimulation mit NetSim A. Quinte, Institut für Angewandte Informatik (IAI)	207
Simulation von Stroemungs- und Transportprozessen in Mikromischern P. Ehrhard, Institut für Kern-und Energietechnik (IKET)	219
Simulation von Thermo- und Fluidodynamischen Prozessen in Mikrostrukturapparaten D. Struwe, Institut für Reaktorsicherheit (IRS)	229
Simulation von dynamischen Systemen für den Einsatz in der Regelungstechnik W. Eppler, Hauptabteilung Prozessdatenverarbeitung u. Elektronik (HPE)	243
Thermische Simulation von Gassensorchips T. Blank, Hauptabteilung Prozessdatenverarbeitung u. Elektronik (HPE)	257





**Einführung zum Workshop**  
**„Simulationen in der Mikrosystemtechnik“**

P. Bley,

Programmleitung Programm Mikrosystemtechnik (MIKRO)



## Einführung zum Workshop

### „Simulationen in der Mikrosystemtechnik“

Peter Bley

Programmleitung Programm Mikrosystemtechnik

Das erste Ziel des Workshops ist es, die gegenseitige Information zu verbessern,

- wer
- welche Simulationen
- für welche Anwendungen
- mit welchen Tools (kommerzielle Programme oder Eigenentwicklungen) innerhalb des Programms Mikrosystemtechnik durchführt.

Die Simulationen innerhalb des Programms Mikrosystemtechnik sind sehr vielfältig, unterschiedlich ausgerichtet und fast alle Organisationseinheiten führen entsprechende Arbeiten durch. Allgemein lassen sich die Simulationen in Produkt- und Prozesssimulationen aufgliedern.

Die Verbesserung der Information alleine ist jedoch nicht ausreichende Motivation für die Durchführung eines solchen Workshops. Aber die Information und Kenntnis der gegenseitigen Arbeiten - insbesondere der eingesetzten Tools - sind eine notwendige Voraussetzung, um Hilfe bei ähnlichen Problemen zu leisten. Es ist auch eine Abstimmung der Arbeiten, die ähnliche Problemstellungen behandeln (z.B. Mikrofluidik), erforderlich, denn die Arbeiten sollen sich ergänzen und es soll keine Doppelarbeit durchgeführt werden. Dies ist u.a. wichtig für die Zielvereinbarungen für das Jahr 2001, die z. Z. erstellt werden, und für die FuE-Planung des Jahres 2002, die in Kürze beginnen wird. Es wird daher angeregt, Arbeitsgruppen zu bilden, die ähnliche Probleme bearbeiten. Die Verbesserung der institutsübergreifenden Arbeiten durch gegenseitige Hilfe und Abstimmung der Aufgaben ist daher ein zweites Ziel dieses Workshops.

Ein drittes Ziel des Workshops ist es, die Arbeiten zur Simulation nach außen besser vertreten zu können. Im Gegensatz zu den Fertigungstechniken für die Nicht-Silizium-Materialien, bei denen das Programm Mikrosystemtechnik des Forschungszentrums weltweit als eine der führenden Institutionen angesehen wird, werden die Arbeiten zur Simulation in der Mikrosystemtechnik außerhalb des Zentrums nicht so sehr wahrgenommen (mit Ausnahme unserer Partner in den Verbundprojekten), obwohl auf diesem Gebiet die verschiedenen Organisationseinheiten sehr gute und vielfältige Arbeiten durchführen. Es gab in der Vergangenheit auch relativ wenige direkte Aufträge der Industrie zur Durchführung von Simulationsrechnungen. Indirekt gab es dagegen eine größere Zahl von Aufträgen, wobei in diesen Fällen unser Know-how in den Simulationen erforderlich war, um Mikrokomponenten oder Mikrosysteme im Auftrag zu entwickeln. Auch durch die 10 % Aufwandsentschädigung, die das Zentrum von der Industrie bei der Durchführung von BMBF-Verbundprojekten erhält, werden industrielle Drittmittel indirekt eingeworben. Es ist jedoch durchaus vorstellbar, dass auch direkte Aufträge von der Industrie zur Simulation eingeworben werden könnten, wenn das Zentrum sein Know-how auf dem Gebiet der Simulation gegenüber der Industrie auf breiter Front ver-

treten würde. Hierzu sollte - analog dem Vorbild der Datenblätter der Fertigungstechnologien - auch in einheitlicher Form das Know-how in den verschiedenen Gebieten der Simulationsrechnungen dargestellt werden.

Die Arbeiten zur Simulation, die im Programm Mikrosystemtechnik durchgeführt werden, sind sehr anwendungsorientiert, was sich auch in den Vorträgen des Workshops zeigt. Dieser Anwendungsbezug ist sehr wichtig. Würde man Simulationsrechnungen ohne einen konkreten Bezug zu Projekten durchführen, so könnte man beliebig viele Probleme bearbeiten, was zu einer Verzettelung führen würde. Diese sehr gute Problemorientiertheit der Simulationsrechnungen muss in Zukunft auch beibehalten werden. So müssen im FuE-Programm 2002 alle Simulationsrechnungen dort eingeordnet werden, wo sie im Rahmen der Fertigungstechniken oder im Rahmen von Anwendung/Visionen durchgeführt werden.

Wie aus den folgenden Vorträgen zu ersehen sein wird, arbeiten viele Wissenschaftler mit ausgeklügelten Simulationsprogrammen zur Lösung komplexer Aufgaben. Es stellt sich nun aber die Frage, ob auch andere Personen als die Entwickler diese Programme nutzen. Es hat sich in der Vergangenheit gezeigt, dass im Zentrum entwickelte MST-Programme durch Anwender auch außerhalb des Forschungszentrums meist nicht genutzt werden, um Mikrosysteme zu entwerfen oder zu optimieren. Es sollte daher das vierte, mittelfristige Ziel sein, dass die Simulationsprogramme nicht nur im Forschungszentrum, sondern auch von anderen Nutzern angewandt werden können. Dieses relativ schwierige Problem wirft einige Fragen auf:

- wer würde die Programme vermarkten und verkaufen
  - wer hat die Rechte (Patente usw.)
  - wer erstellt die dann erforderliche umfangreiche Dokumentation
  - wer wartet die Programme
  - wer entwickelt die Programme weiter
  - wer erfüllt die notwendigen Garantieleistungen
- usw.

Aus diesen Fragen wird ersichtlich, dass die Vermarktung in der Regel nicht durch eine Forschungsinstitution geleistet werden kann, sondern von einer Firma durchgeführt werden muss. Es erscheint also erforderlich, mit Firmen zu kooperieren, um die im Zentrum entwickelten Simulationen in schon bestehende, kommerzielle Programme einzubinden. Firmen könnten unsere Entwicklungen aber auch als eigenständige Programme vermarkten.

Es gibt für die Mikrosystemtechnik schon kommerzielle Programme, beispielsweise MICROCOSM (USA) oder MEMSCAP (Frankreich). Diese Programme haben folgende Vorteile:

- schöne Oberfläche
- leicht erlernbar
- gut dokumentiert
- werden kontinuierlich gewartet
- werden weiterentwickelt und neuen Aufgaben angepasst (upgrade, update)
- viele Benutzer weltweit nutzen diese Programme schon heute

- man kann auf diese Programme verweisen, wenn die Technologie, die man verwendet, in den Programmen enthalten ist (das ist bis jetzt leider nur die Silizium-Technologie).

Diese Programme haben sicherlich auch Nachteile:

- sie sind nicht so leistungsfähig wie die Spezialprogramme, die unsere Experten entwickelt haben
- sie haben unsere Technologien (Lithographie, Galvanikprägen, Spritzgießen) nicht als abrufbare Unterprogramme integriert
- sie sind teuer.

Es scheint jedoch absolut notwendig zu sein, dass die Technologien des Zentrums auch in kommerziellen Rechenprogrammen enthalten sind. Dann könnten die Kunden des Zentrums mit diesen Rechenprogrammen ihre Komponenten oder Systeme selbst simulieren und dies würde den Technologien des Programms Mikrosystemtechnik des Forschungszentrums zu einer größeren Akzeptanz verhelfen.

Es ergibt sich also eine Vision: Kommerziell vertriebene Rechenprogramme, die neben der Siliziumtechnologie auch die LIGA-Technologie und andere Fertigungstechnologien des Zentrums als abrufbare Unterprogramme enthalten, werden auf dem Weltmarkt vertrieben.

Dieser Workshop kann nur ein erster Schritt sein, diese Vision zu realisieren, aber wir müssen beginnen!

Mein Dank gilt allen, die zur erfolgreichen Durchführung des Workshops mitgewirkt haben.



# Simulation von LIGA Spektrometern

B. Krevet, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)

Die Simulation von LIGA Spektrometern wird an einem Beispiel demonstriert. Hierzu werden zwei im IMT entwickelte Programme eingesetzt. Das erste Programm dient zur Auslegung der idealen Geometrie anhand vorgegebener Designdaten (z. B. Auflösung und Wellenlängenbereich), mit dem zweiten Programm kann der Einfluß fertigungsbedingter Geometriefehler simuliert werden.





## **Simulation von LIGA-Spektrometern**

### **Simulation idealer Spektrometer**

Einflußgrößen

Programm - Rechenablauf

Beispiele

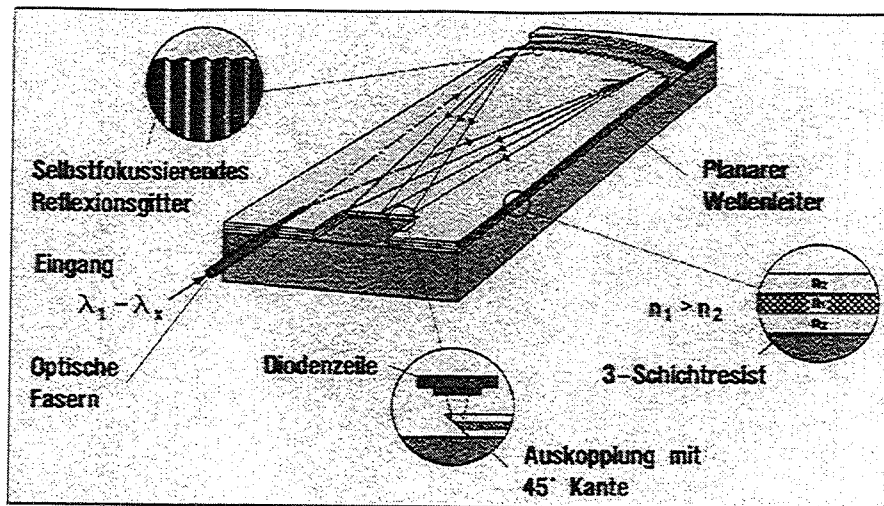
### **Simulation realer Spektrometer**

Rechenprinzip

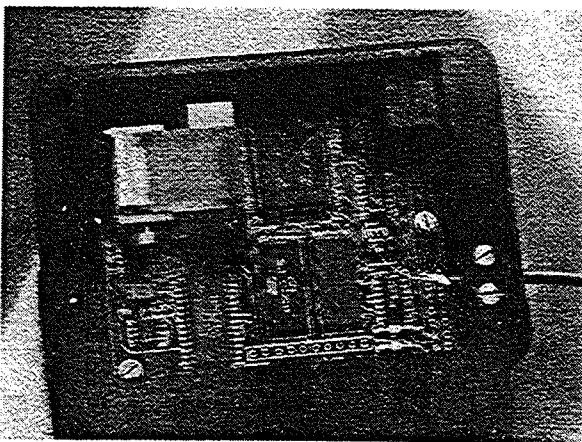
Reale Abweichungen

Ergebnisse

## Mikrospektrometer

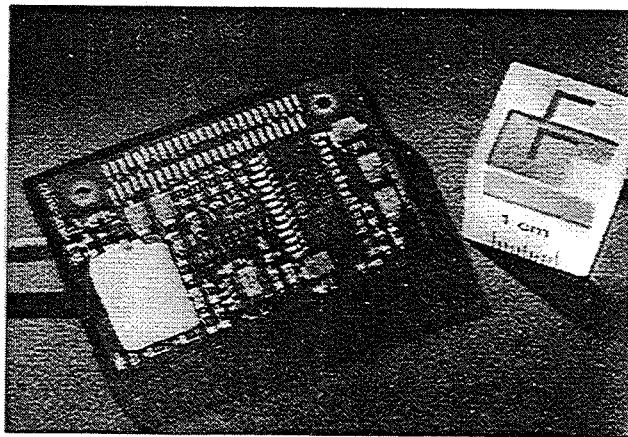


### Prinzip des Aufbaus des LIGA-Mikrospektrometers



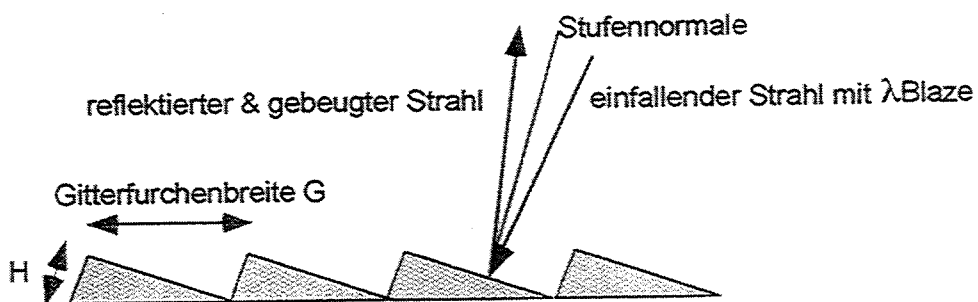
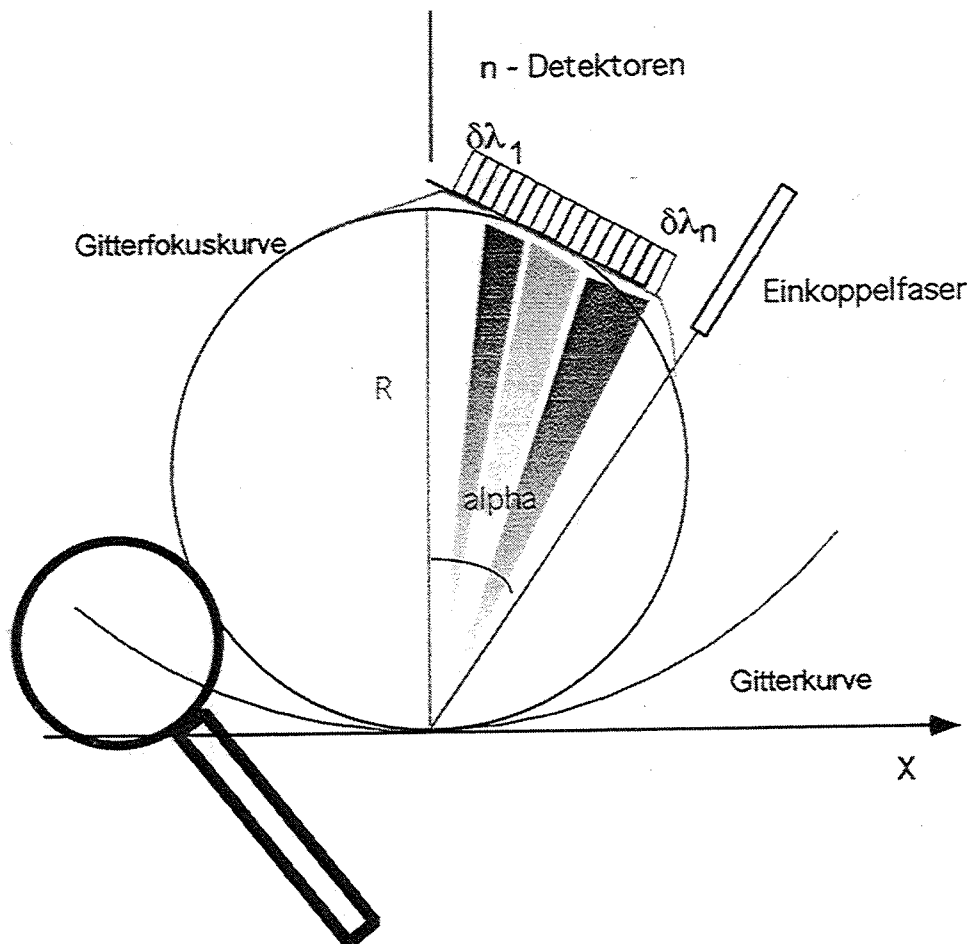
Evaluation-Kit des sichtbaren  
Spektrometers

- Farbanalyse
- Zahnfarbenanalyse
- Gelbsuchtdetektion



Evaluation-Kit des NIR-  
Spektrometers

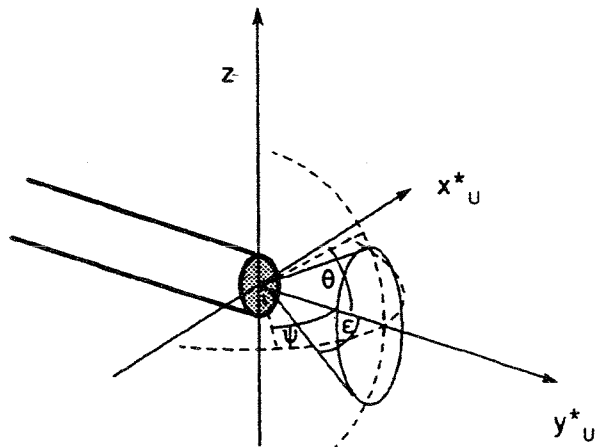
- Lebensmittelkontrolle
- Online-Prozesskontrolle in  
der chemischen Produktion
- Blutzuckerdetektion





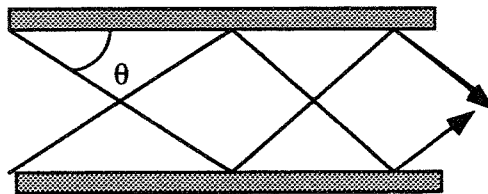
Raytrace-Simulation

Übertragungsfaser- Daten

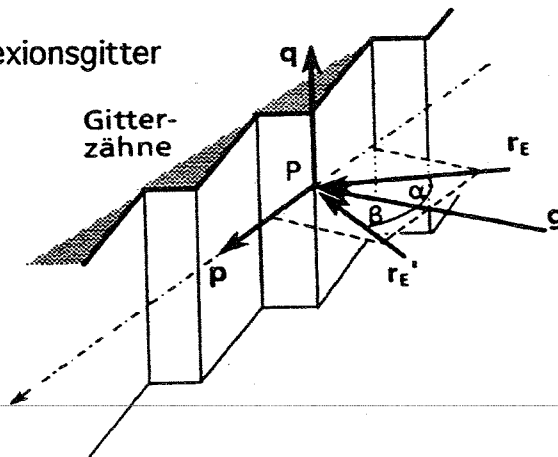


effektive Modenwellenlängen

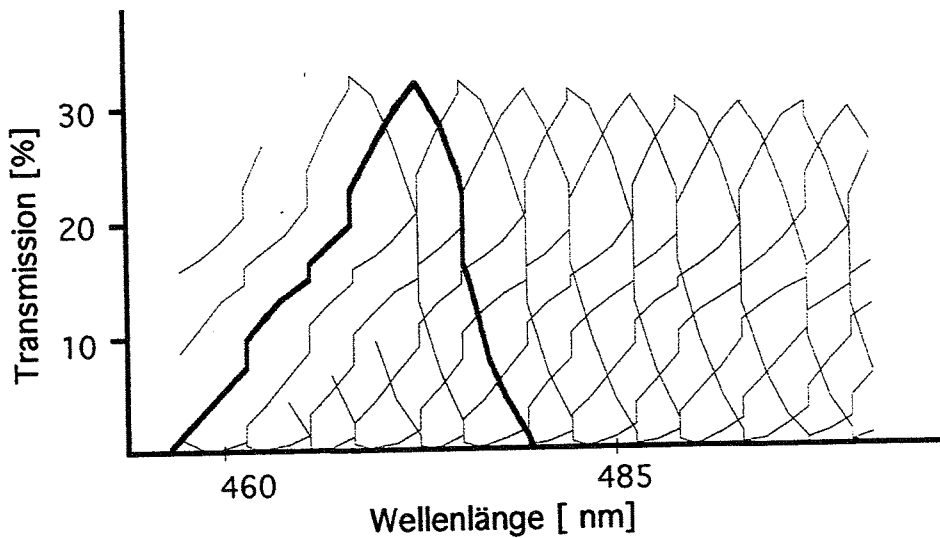
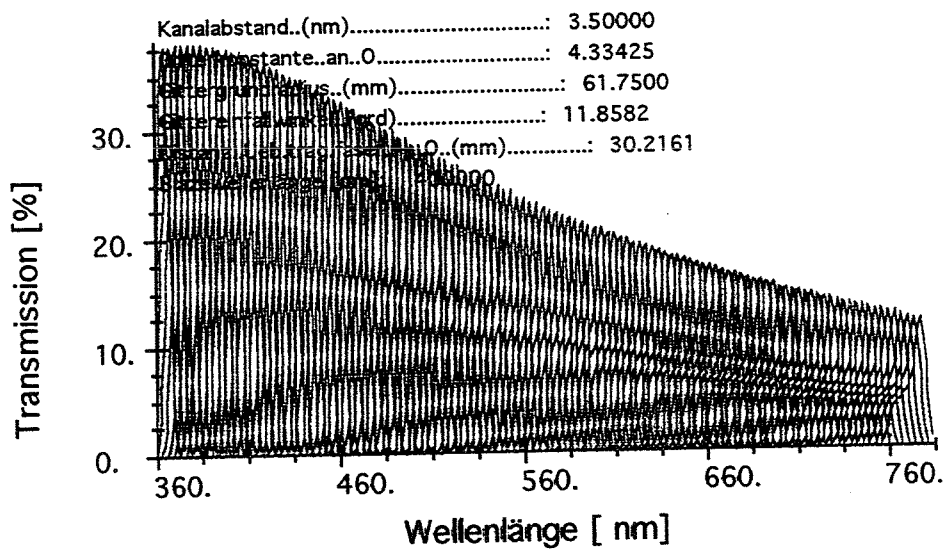
$$\lambda_M = \frac{\lambda_0}{\cos(\theta)}$$



Beugung am Reflexionsgitter



Raytrace-Simulation

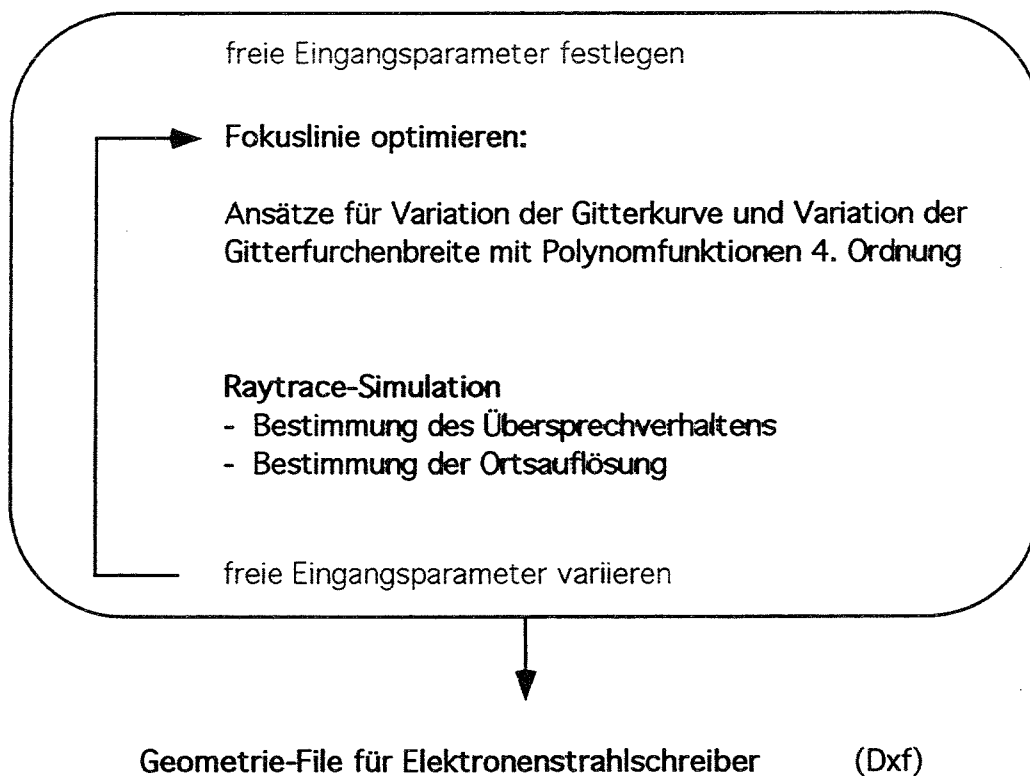


**Kundenvorgaben:**

Wellenlängenbereich  $\lambda_{\min}$ ,  $\lambda_{\max}$

Dispersion:  $\delta\lambda$  / Detektor

Detektorabmessung



### Geometriedaten

<b>Spektrometer</b>		<b>Optische Eigenschaften</b>	
Gittergrundkreisradius (mm)	<input type="text" value="98.6700"/>	min. Wellenlänge (µm)	<input type="text" value="1.00312"/>
Einkoppelwinkel (grad)	<input type="text" value="15.4800"/>	max. Wellenlänge (µm)	<input type="text" value="2.60000"/>
Beugungswinkel max (grad)	<input type="text" value="8.89200"/>	Brechungsindex	<input type="text" value="1.00000"/>
Gitterkonstante (µm)	<input type="text" value="6.16882"/>	Dispersion (µm/ MD)	<input type="text" value="3.125000E-03"/>
<b>Sender</b>		Blazewellenlänge [µm]	<input type="text" value=".400000"/>
Manteldurchmesser (µm)	<input type="text" value="75.0000"/>	Beugungsordnung	<input type="text" value="1.00000"/>
Kerndurchmessermesser (µm)	<input type="text" value="50.0000"/>		
numerische Apertur	<input type="text" value=".220000"/>		
Distanz zum Ursprung (mm)	<input type="text" value="47.5453"/>		
<b>Detektor</b>		<input type="button" value="cancel"/>	
Anzahl der Detektoren	<input type="text" value="512.000"/>		
Kerndurchmesser (µm)	<input type="text" value="24.9990"/>		
Manteldurchmesser (MD) (µm)	<input type="text" value="25.0000"/>	<input type="button" value="ok"/>	
numerische Apertur	<input type="text" value=".500000"/>		

### Scan - Parameter

Lesen von Constrain - File

Startdaten auf minimalen Abstand

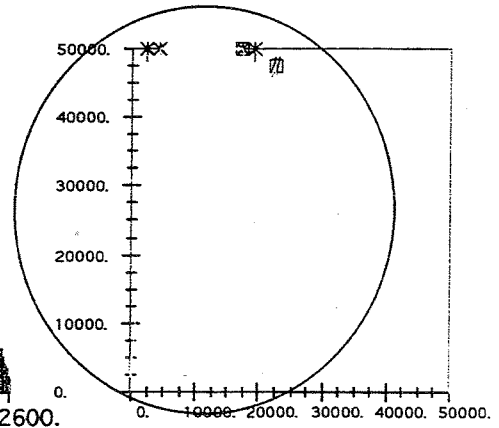
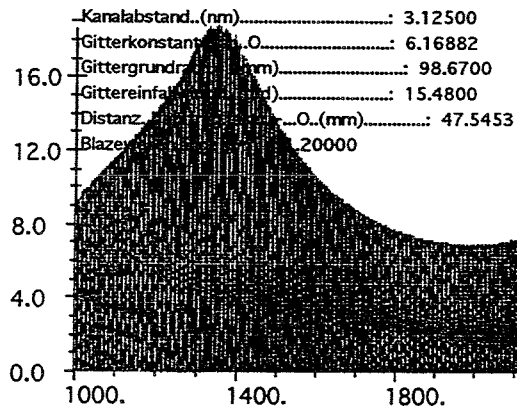
Startdaten von maximalen Abstand

---

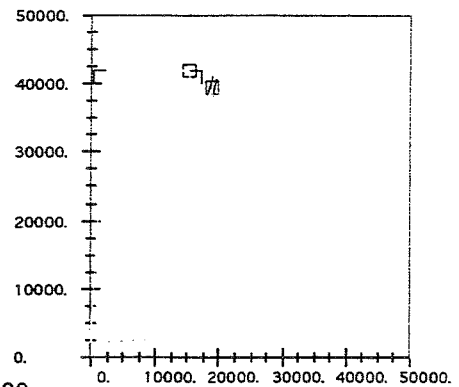
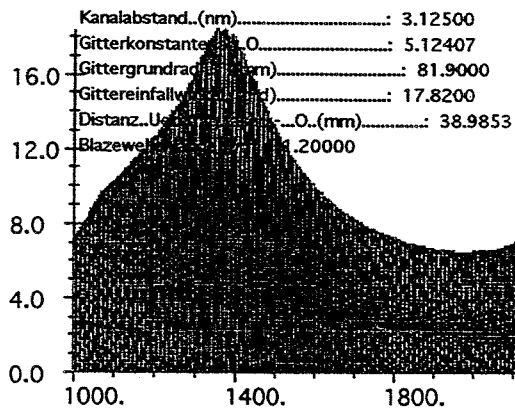
Variable	Stepweite %	Step-Anzahl	bei Optimierung feste Parameter
<input type="radio"/> Beta	<input type="text" value=".000000"/>	<input type="text" value="1"/>	
<input checked="" type="radio"/> Alpha	<input type="text" value=".000000"/>	<input type="text" value="1"/>	
<input checked="" type="radio"/> R	<input type="text" value=".000000"/>	<input type="text" value="1"/>	
<input type="radio"/> G	<input type="text" value=".000000"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="radio"/>
<input type="radio"/> Auflösung	<input type="text" value=".000000"/>	<input type="text" value="1"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input type="radio"/> Abst.	<input type="text" value=".000000"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="radio"/>

Simulation von LIGA-Spektrometern

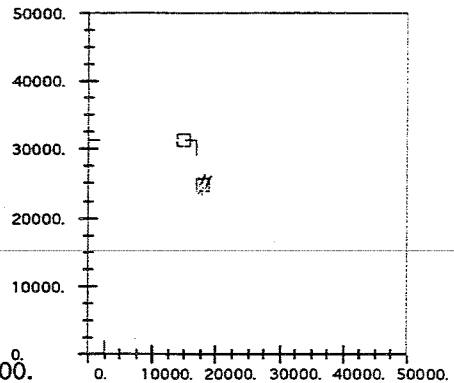
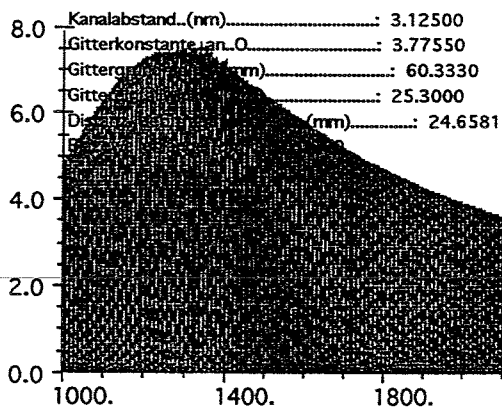
Design6 Nr.9



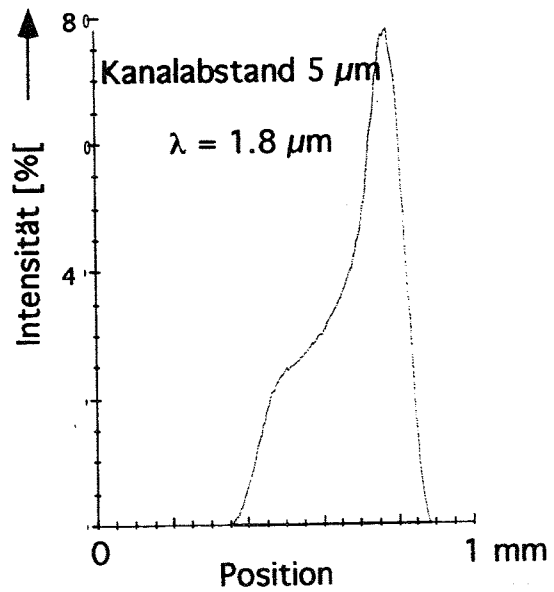
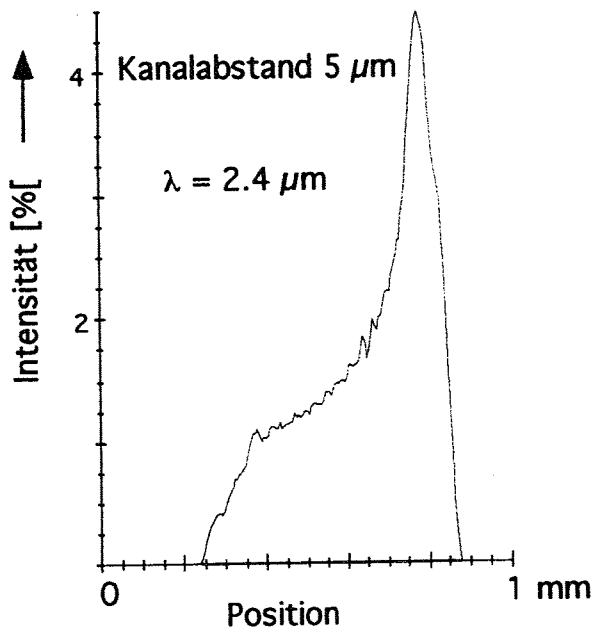
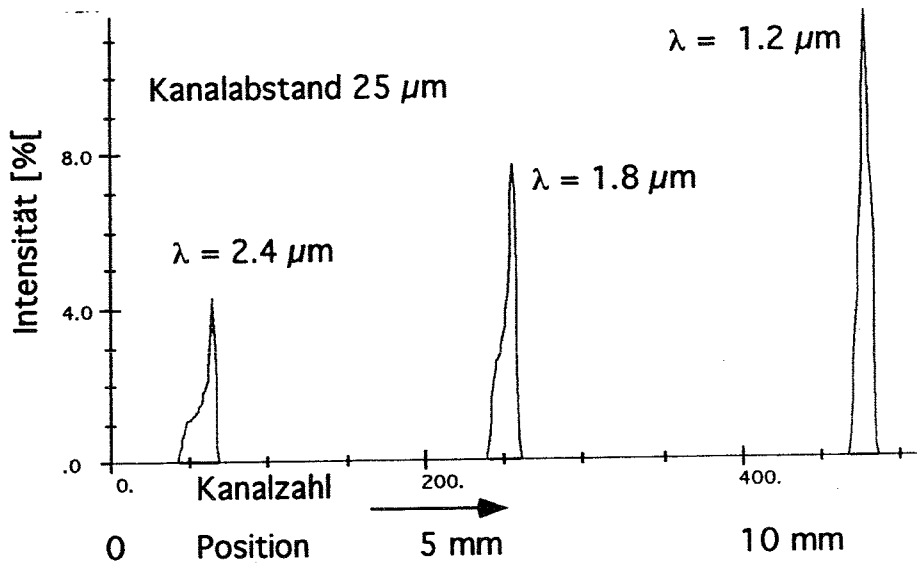
Design 5 Nr. 10



Design 3 Nr. 15







## Design W\_G\_22

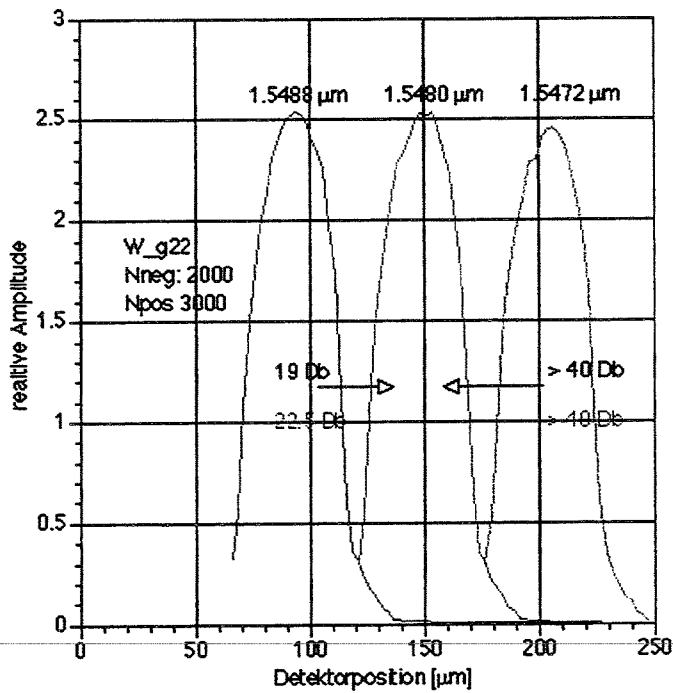
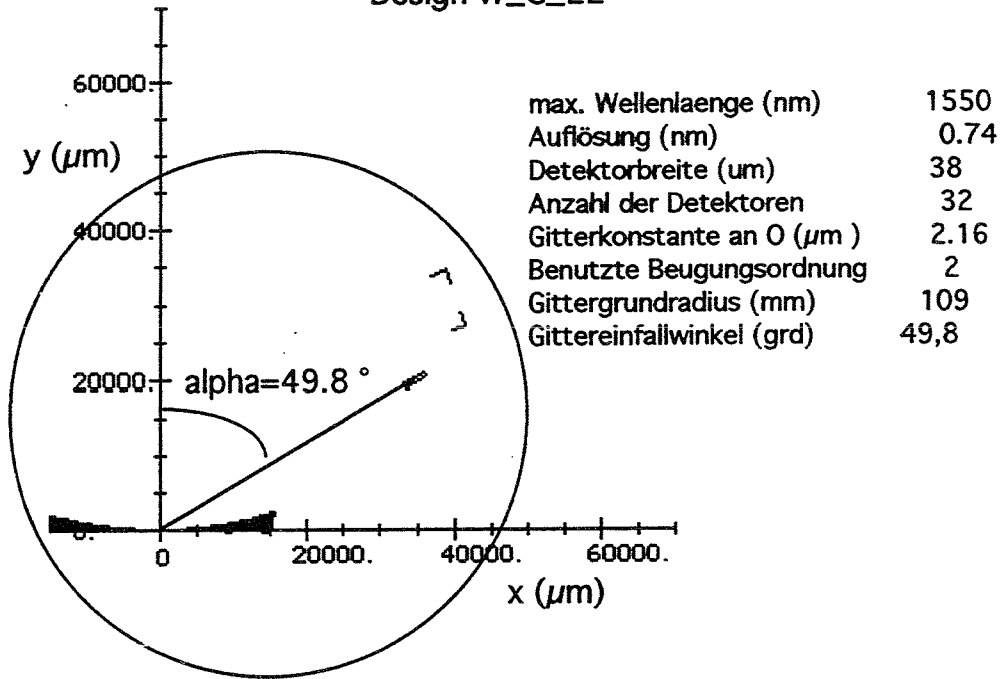
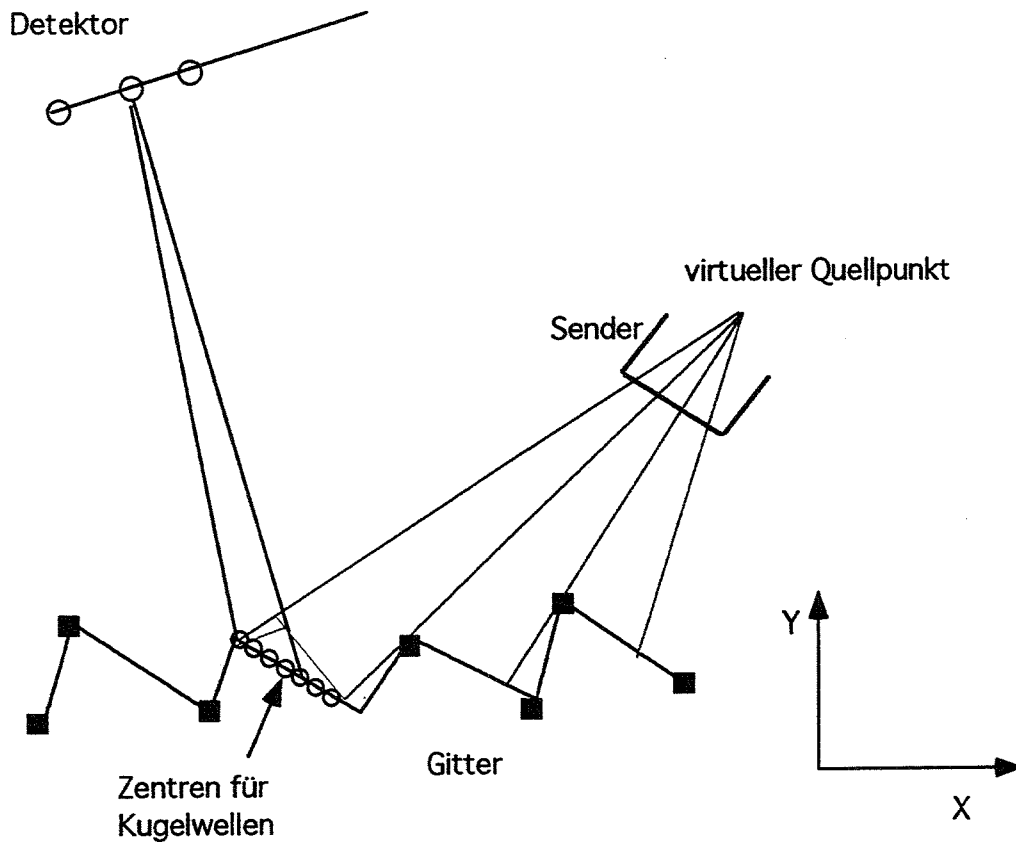


Abb. 1 Detektor von 128.75 μm bis 166.25 μm  
Detektor von 133.75 μm bis 171.25 μm

**Beugungsberechnung nach Huygens**

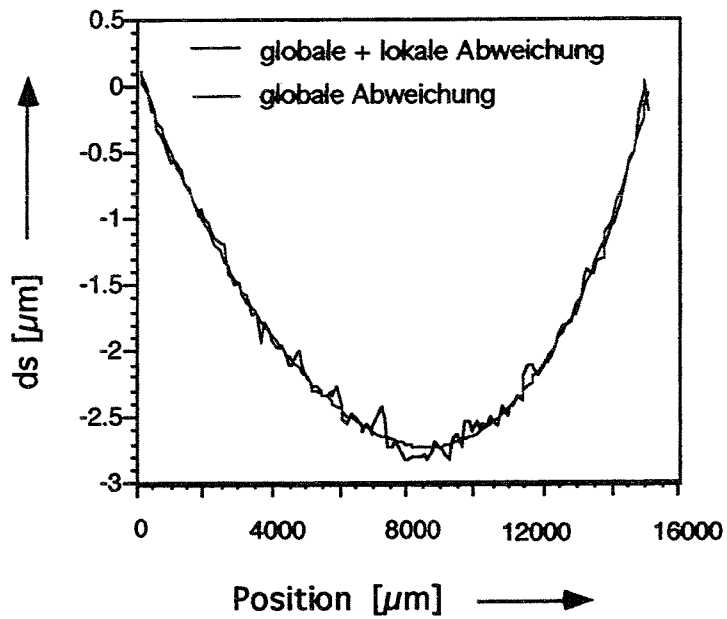


- Koordinaten werden vom Ausgabefile eingelesen  
 statistische Verschiebung in x, y oder xy -Richtung  
 (einzeln oder in Gruppen)

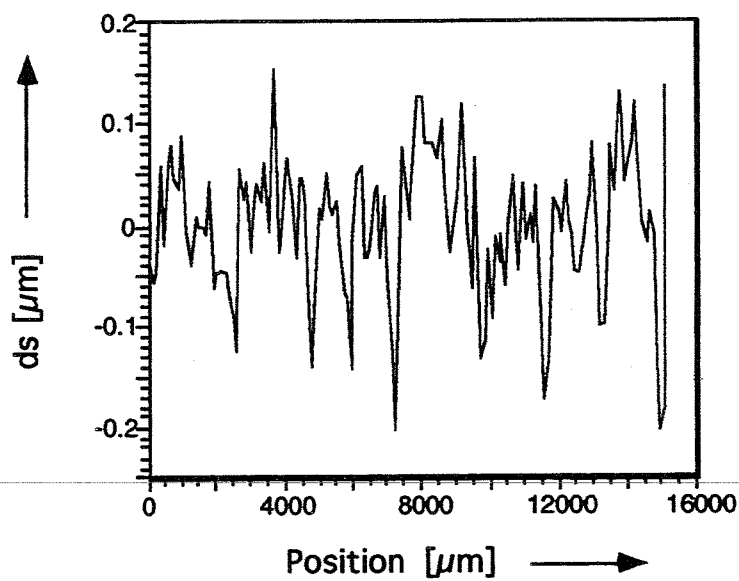
Verschiebung anhand gemessener Daten



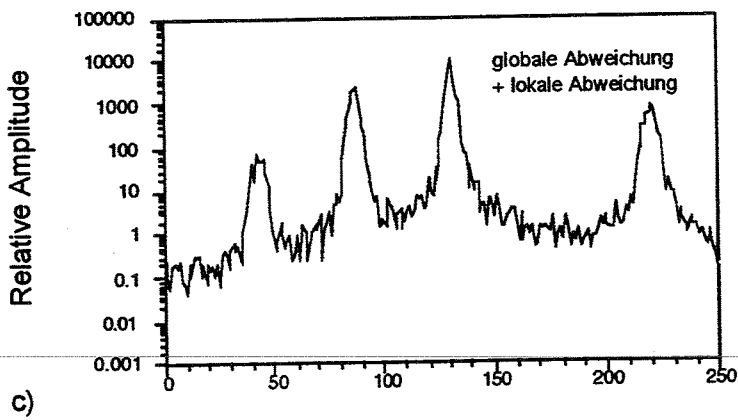
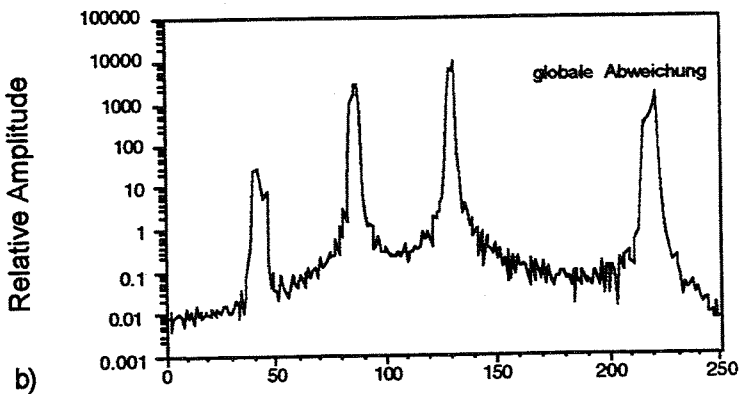
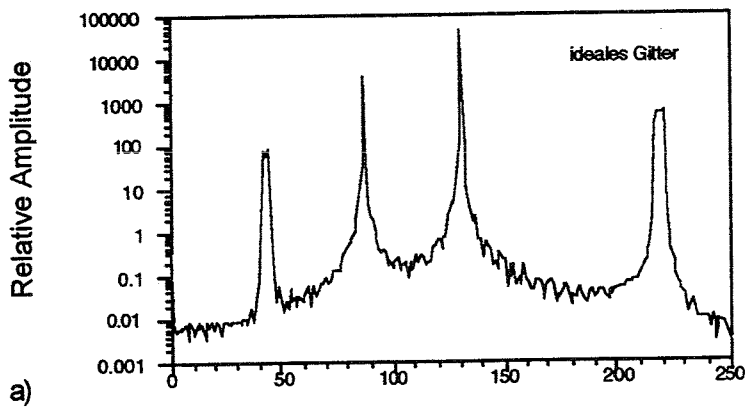
## Abweichung von der idealen Gittergeometrie



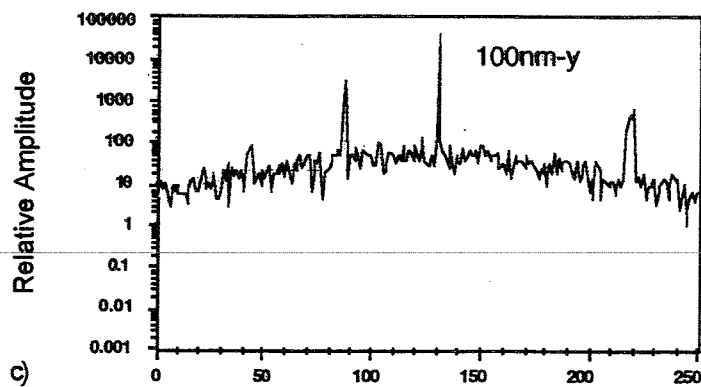
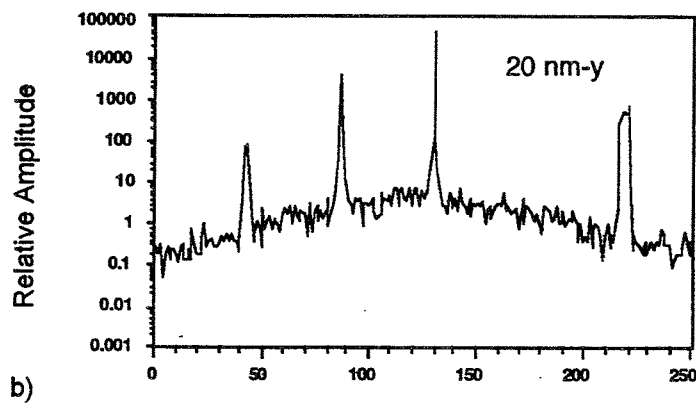
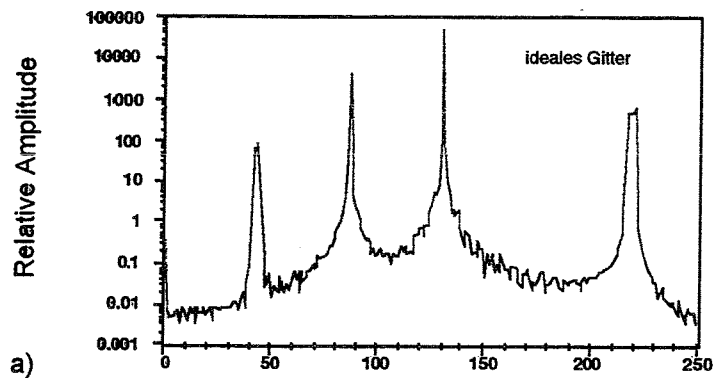
## Lokale Abweichung von der idealen Gittergeometrie



Relativer Intensitätsverlauf für 3 Wellenlängen ( $\lambda = 0.4 \mu\text{m}$ ,  $0.6 \mu\text{m}$ ,  $0.8 \mu\text{m}$ ).



Relativer Intensitätsverlauf für 3 Wellenlängen ( $\lambda = 0.4 \mu\text{m}$ ,  $0.6 \mu\text{m}$ ,  $0.8 \mu\text{m}$ )  
bei statistischer Zahnverschiebung in y-Richtung



## **Zusammenfassung**

Im IMT sind Programme zum Design von Reflexionsbeugungsgitter vorhanden.

Automatischer Ablauf von Fokuslinienoptimierung und Raytrace-Simulation

Ortaufgelöste Berechnungen für beliebige Wellenlängenspektren

Prozeß bedingte Baufehler können simuliert werden.





# **Simulationen in der Entwicklung und Konstruktion eines Mikrospektrometers**

C. Solf, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)

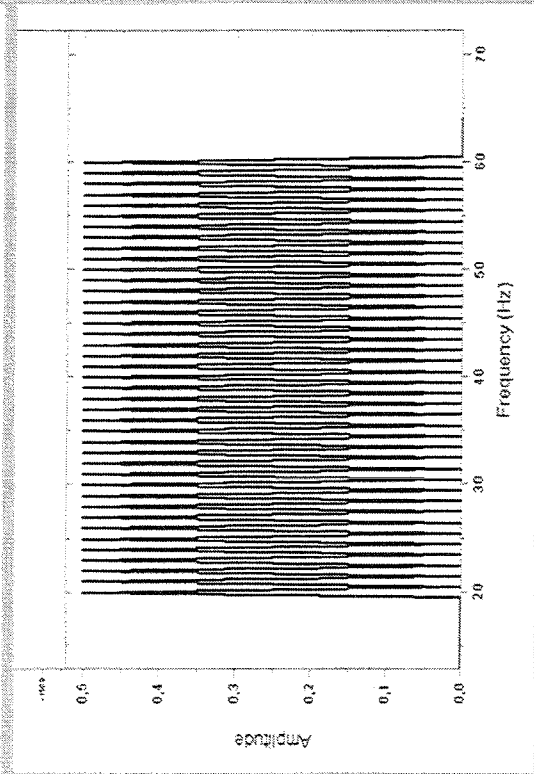
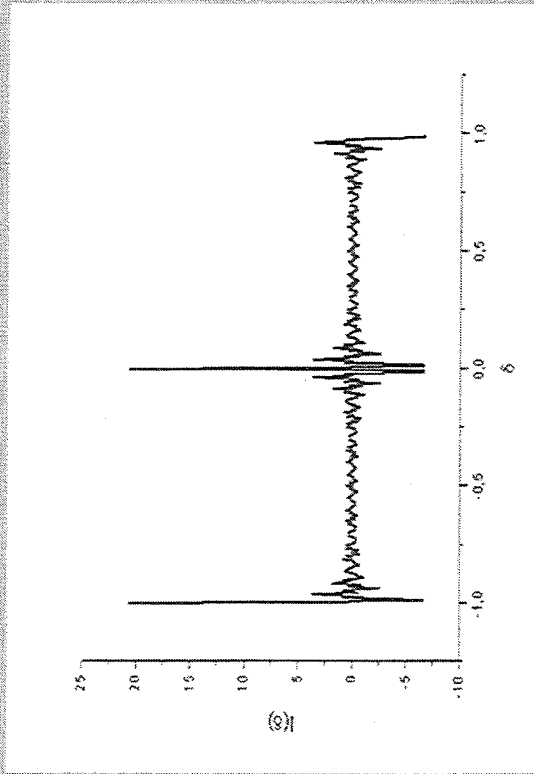
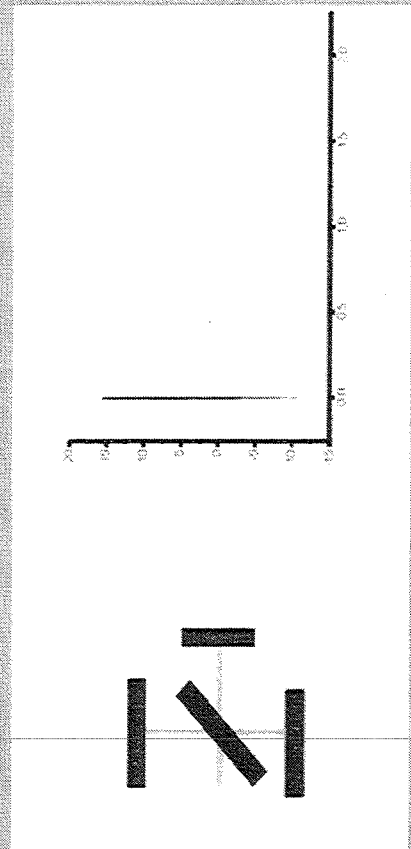
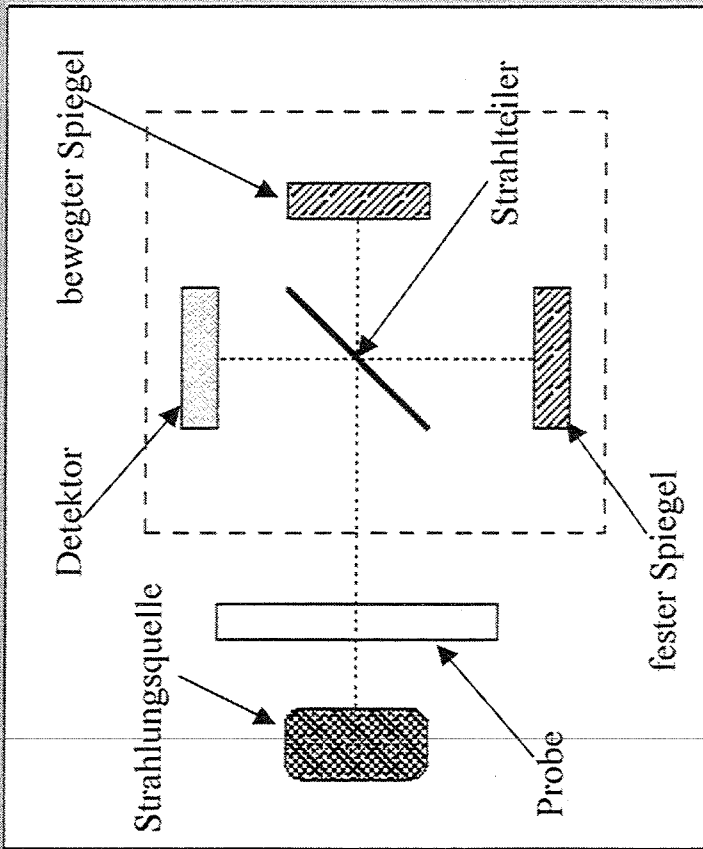
Im Vortrag wird eine Arbeit vorgestellt, die die Entwicklung eines FT-IR Spektrometers zum Ziel hat. Es werden die voraussichtlich geplanten Berechnungen und Simulationen beschrieben. Ziel ist es, die geplante Vorgehensweise und den Bedarf an benötigten Simulationswerkzeugen anhand eines konkreten Beispiels aufzuzeigen.

Ziel meiner Arbeit ist die Entwicklung eines miniaturisierten Fouriertransformationsspektrometers für den infraroten Bereich (FT-IR Spektrometer). FT-IR Spektrometer weisen gegenüber dispersiven Spektrometern verschiedene Vorteile auf und haben diese daher in der Laboranalytik weitgehend abgelöst. Typische Einsatzfelder für FT-IR Spektrometer liegen in der Laboranalytik und der Qualitätsanalyse. Vielfältige weitere Einsatzmöglichkeiten, unter anderem in der Medizin, sind denkbar. Für die Arbeit wird eine möglichst durchgehende Unterstützung in allen Phasen von Entwurf bis zur Fertigung angestrebt. Es soll auf eine möglichst konsistente Datenhaltung und Wiederverwertbarkeit der Daten geachtet werden. Im einzelnen sind bisher Simulationen des Systemverhaltens auf Differentialgleichungs-Ebene sowie die Simulation und gegebenenfalls Optimierung von Festigkeiten, Eigenfrequenzen und thermischem Verhalten mit der Methode der Finiten Elemente geplant. Hinzu kommt die Berechnung von Strahlverläufen. Ziel ist es, bereits vor Erstellung des ersten Prototypen eine möglichst realistische Einschätzung der Leistungsfähigkeit des Systems zu erhalten. Zusätzlich wird eine möglichst gute softwaretechnische Unterstützung bei der Fertigungsplanung angestrebt, wie etwa eine automatische Überprüfung des Entwurfs auf die Einhaltung von Gestaltungsregeln oder der Ableitung von Maskendaten und Fertigungsanweisungen. Es wird aufgezeigt welche Programme für die unterschiedlichen Simulationen zur Verfügung stehen und wo aus Sicht des Anwenders Entwicklungs- und Verbesserungsbedarf besteht.



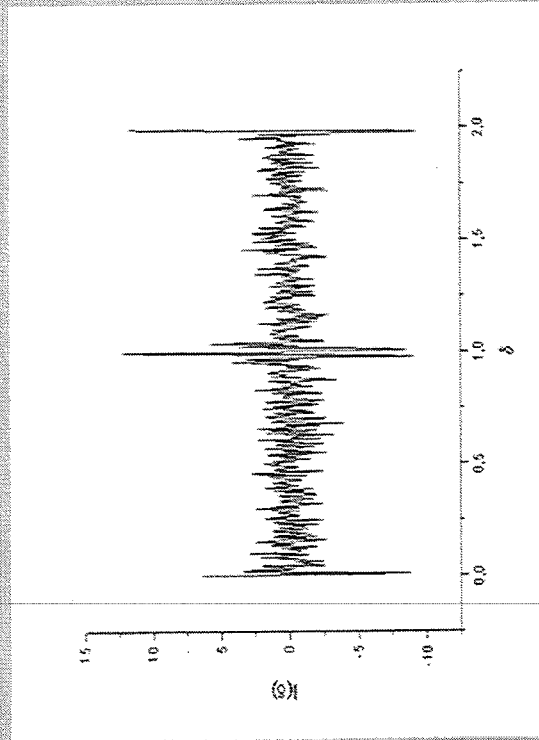
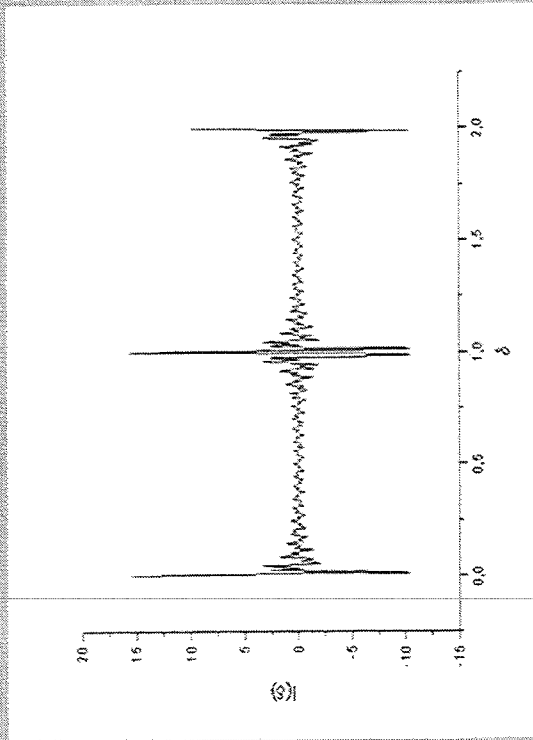
Rechnerunterstützung in der Entwicklung  
und Konstruktion eines  
Fourier-Transformation-Spektrometers  
für den nahen Infrarotbereich

# Funktion eines Fourier-Transformations-Spektrometers

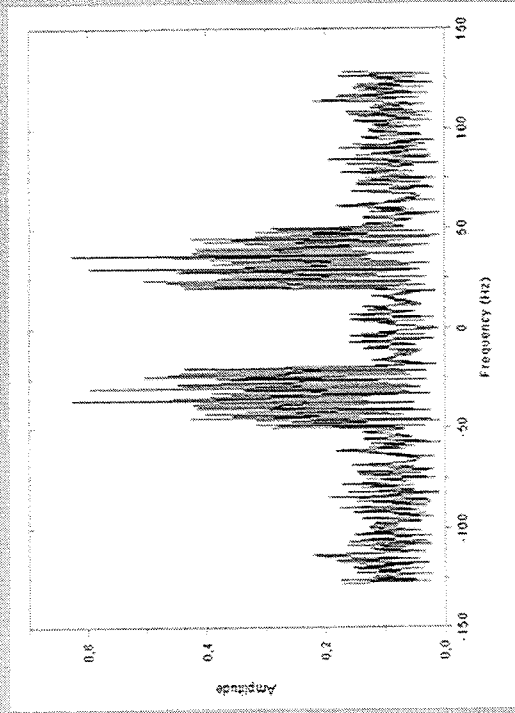
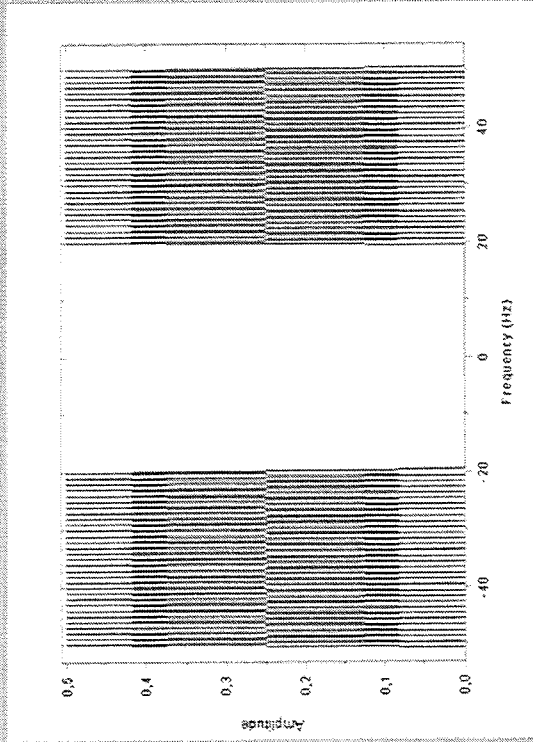


# Simulation des Sensorsignals

Interferogramme



Spektrren



## Anforderungen an Lagerung und Antrieb des Spiegels

- Geplanter Verfahrenweg des Spiegels  $> 500 \mu\text{m}$
- Abstand zwischen den Meßpunkten  $0,5 \mu\text{m} \pm 5 \text{nm}$   
(alternativ Mittelwertbildung)
- Zulässige Verkippung des Spiegels  $< 2 \mu\text{rad}$   
(alternativ Einsatz von Katzenaugenreflektoren)

## Suche nach Wirkprinzipien zur Funktionserfüllung

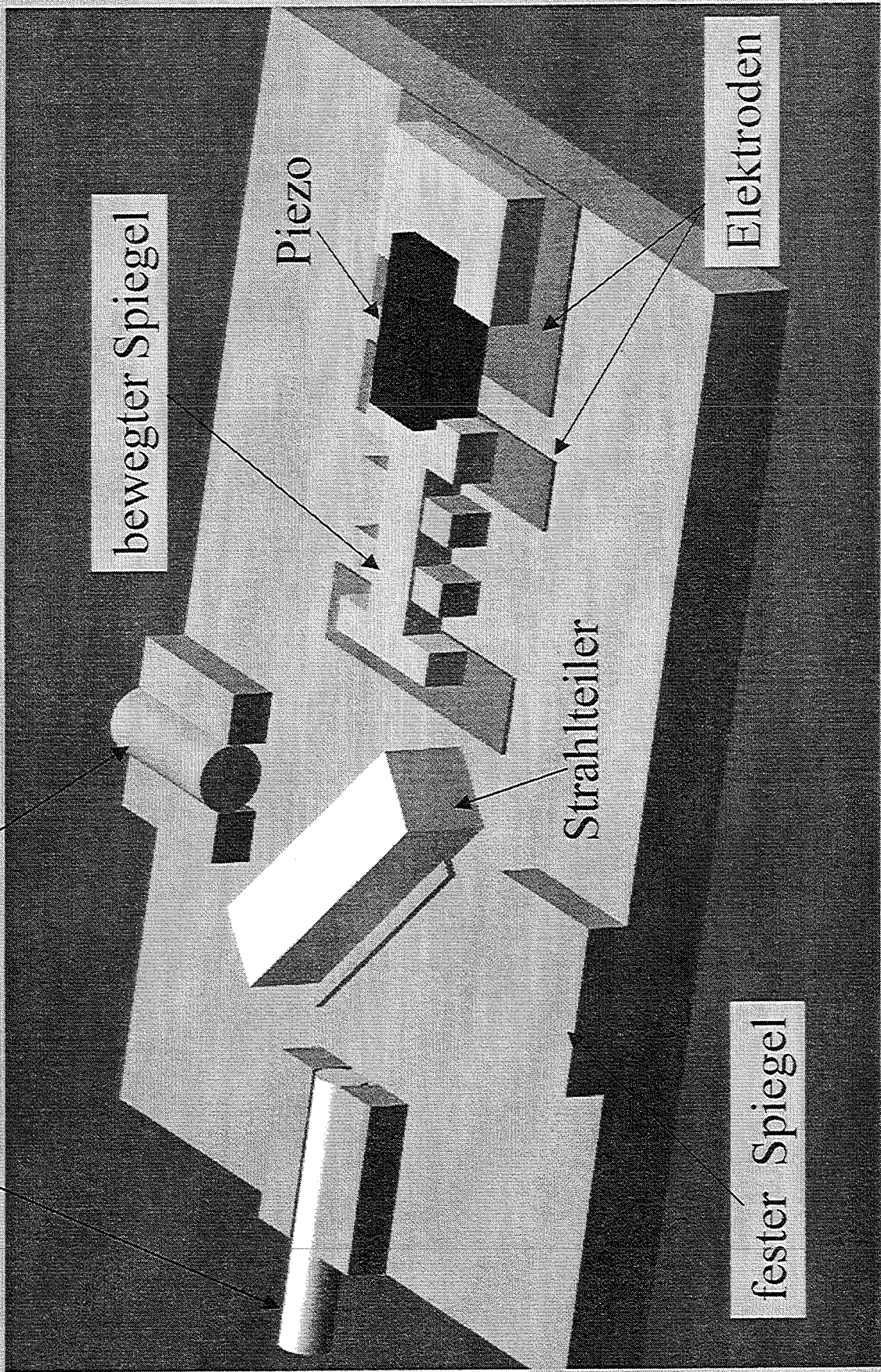
	Wirkprinzip 1	Wirkprinzip 2	Wirkprinzip 3	Wirkprinzip 4
Lagerung des Spiegels	Gleitlager	magnetostatisches Gleitlager	aerostatisches Gleitlager	hydrodynamisches Gleitlager
Antrieb des Spiegels	elektromagnetische Antrieb	pneumatischer Antrieb	piezoelektrischer Antrieb	thermischer Antrieb

Mögliche Unterstützung durch geeignete Programme oder Datenbanken

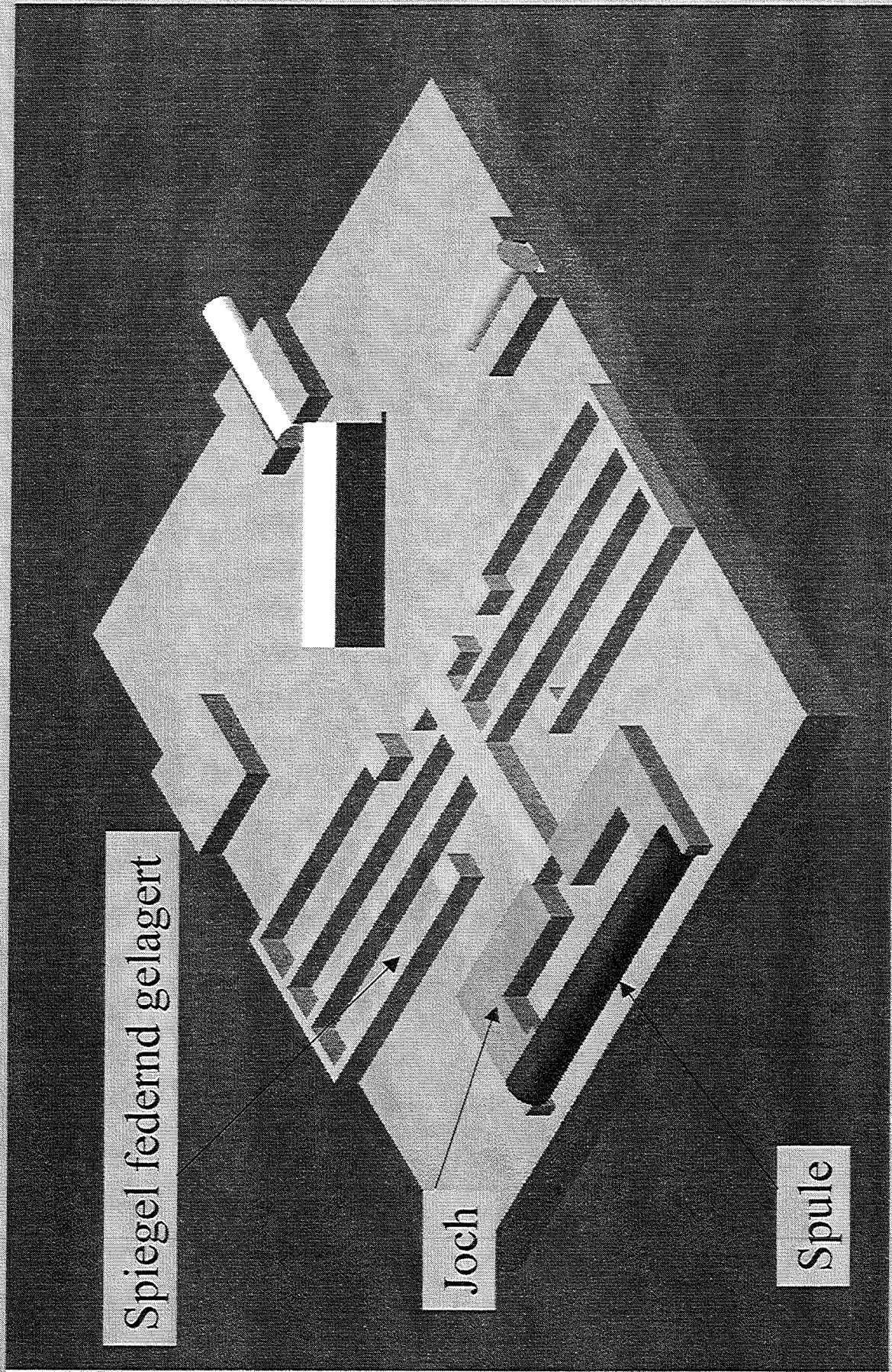
# Piezelektrischer Inchwormantrieb

Lichtleiter

Detektor

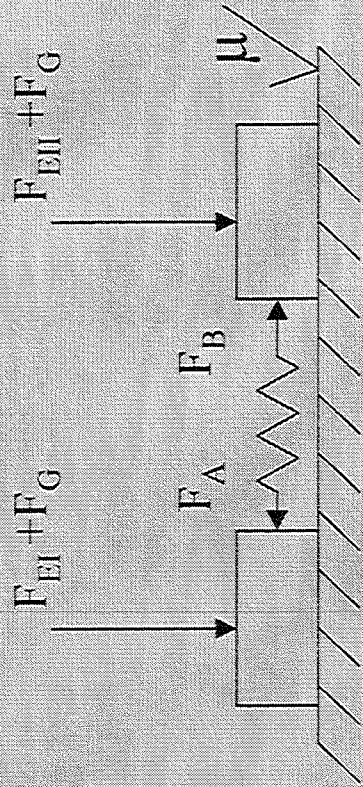


# Elektromagnetischer Antrieb





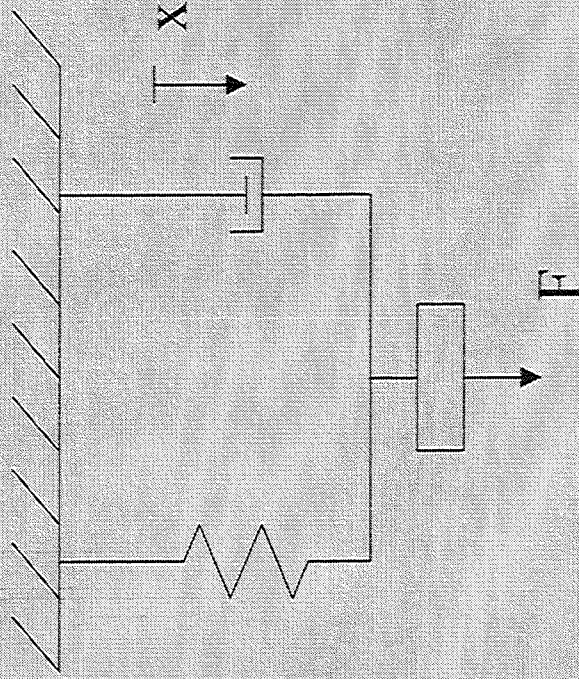
## Modell des Inchworm Antriebs



$$\mu(F_{EI} + F_G) + m\ddot{x}_1 - F_A + c(x_1 - x_2) = 0$$

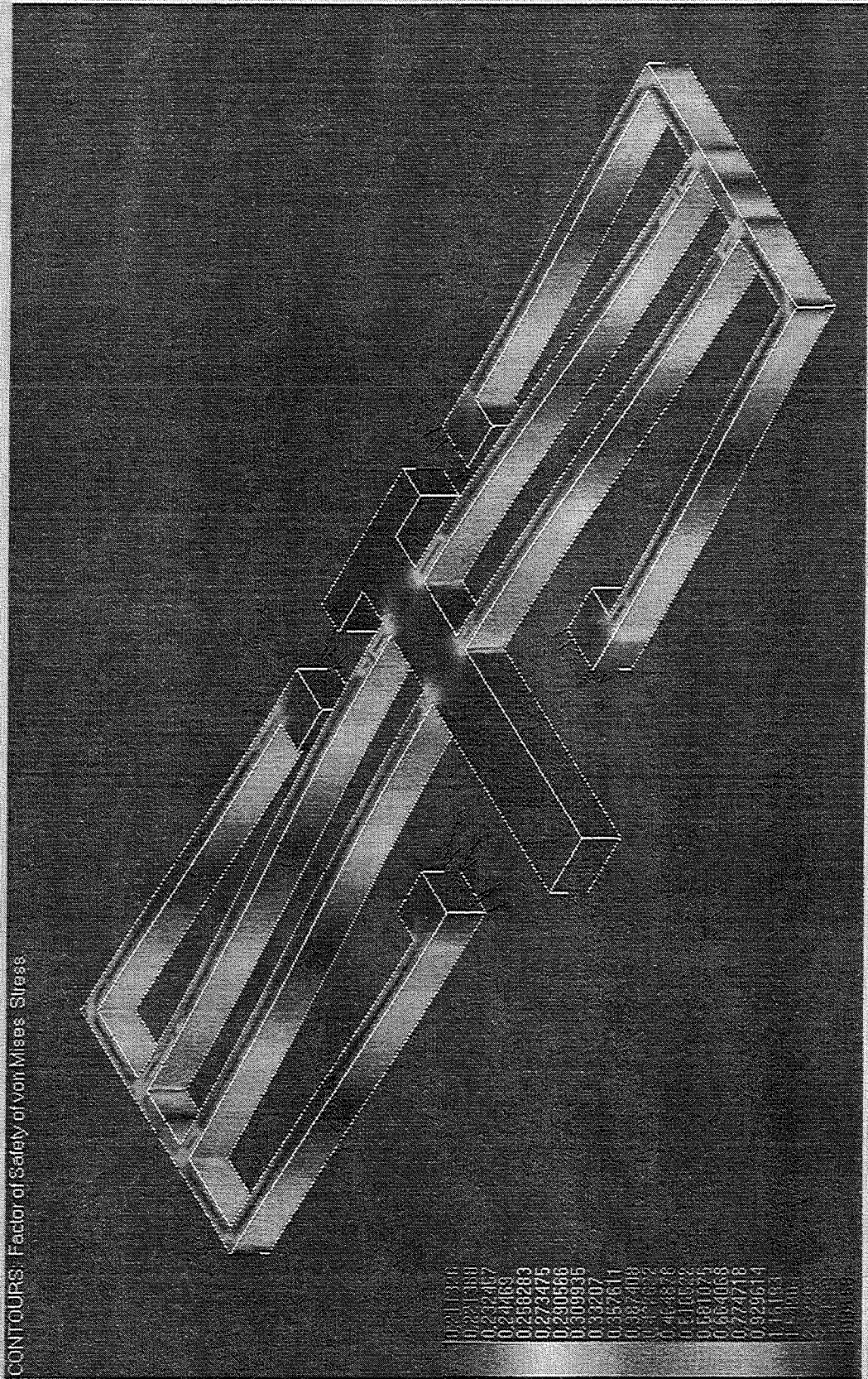
$$\mu(F_{EII} + F_G) + m\ddot{x}_2 - F_B + c(x_1 - x_2) = 0$$

## Modell des elektromagnetischen Antriebs

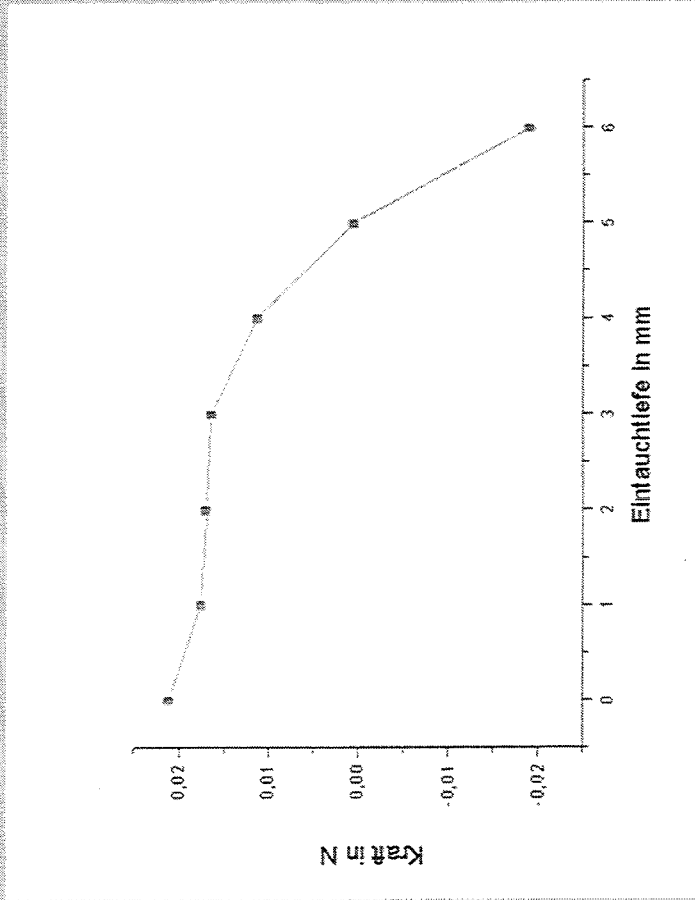
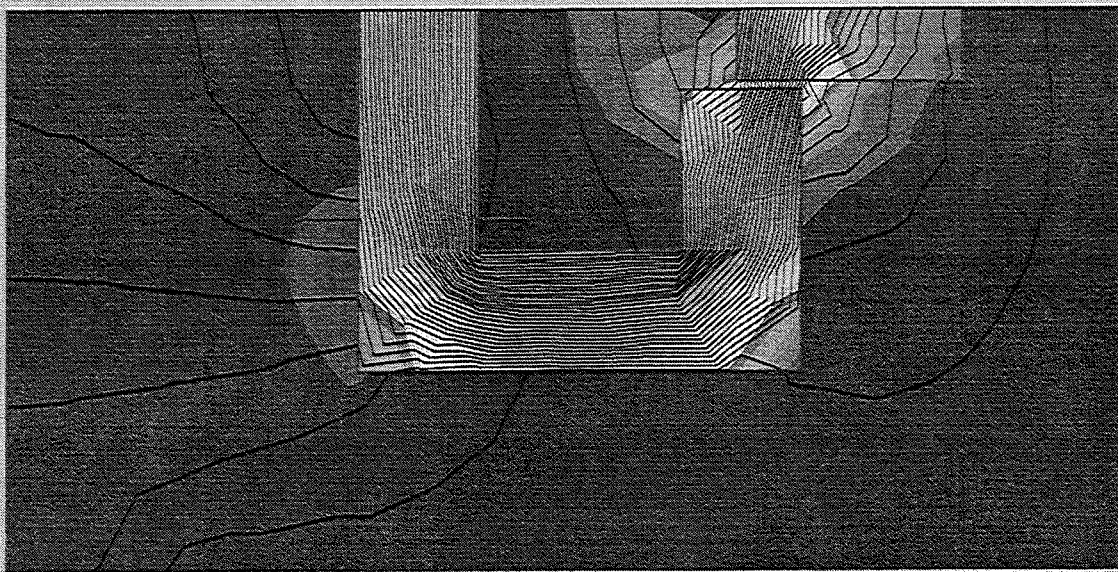


$$m\ddot{x} + b\dot{x} + cx = F(I, t)$$

# Berechnung und Optimierung von Federkonstante und Eigenfrequenzen, Simulation der mechanischen Dämpfung des Systems



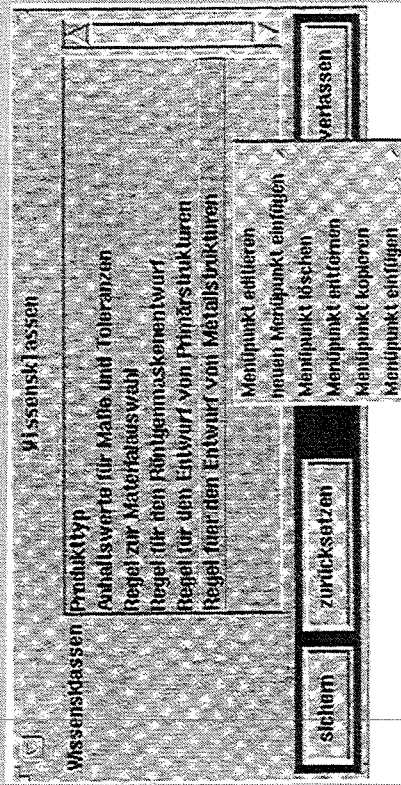
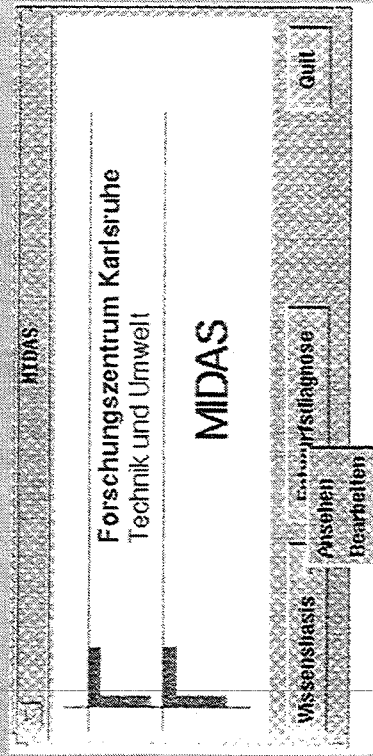
# Berechnung von elektrischen und magnetischen Feldern



Kraft-Weg Kennlinie für elektromagnetischen Aktor

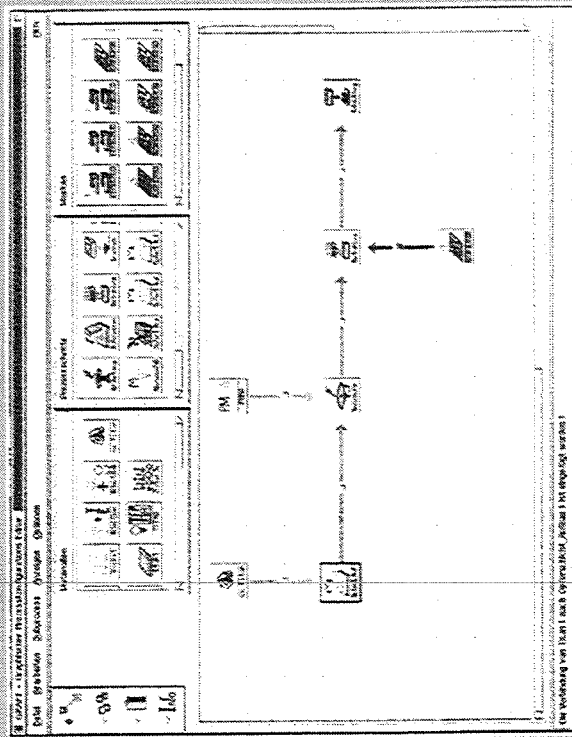
# Rechnerunterstützung bei der Entwurfsverifikation und Planung des Fertigungsprozesses

## Überprüfen Design auf Einhaltung von Entwurfsregeln Bereitstellung von Fertigungswissen



Fertigungsgerechte Gestaltung von LIGA-Mikrostrukturen	Anwendung:		Tabelle Nr.: 4.6 Blatt 1/4 1992
	Design von Primärstrukturen, bestrahlungs- und entwicklungsgerecht	bevorzugen	
Gestaltungsregel	vermeiden	bevorzugen	Begründung
<p>Voraussetzungen für die Anwendbarkeit der Tabelle:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Herstellung von Primärstrukturen mittels Röntgenlithographie</li> <li>- Beachtung der Regeln für die Auswahl von Materialien und Substraten (Tab. 4.3)</li> <li>- Beachtung der Regeln für Röntgenmasken (Tab. 4.5)</li> </ul>			
4.6.1: In der Röntgenmaske möglichst glatte Absorberkanten vorziehen	$R_{min} > 0,05 \mu m$	<p>z.B. <math>R_{min} = 0,05 \mu m</math></p>	Spannungsrisikofahr durch Kerbwirkung in abgeschalteten Resistsbereichen
4.6.2: Innliegende Ecken ausrunden, spitze Einkerbungen im Resist vermeiden		<p>Resist</p> <p>z.B. <math>R = 2 \cdot 20 \mu m</math></p>	Spannungsrisikofahr durch Kerbwirkung, Entwickelbarkeit eingeschränkt
4.6.3: Kanten von Vertiefungen im Resist nicht auf eine Höhe legen			Spannungsrisikofahr reduziert
4.6.4: Resistschände nicht zu schmal gestalten oder Entlastungshilfen schaffen	<p>z.B. 3 <math>\mu m</math></p>	<p>z.B. 5-15 <math>\mu m</math></p>	bessere Dimensionsstabilität, Wand ist gegen Umfallen geschützt

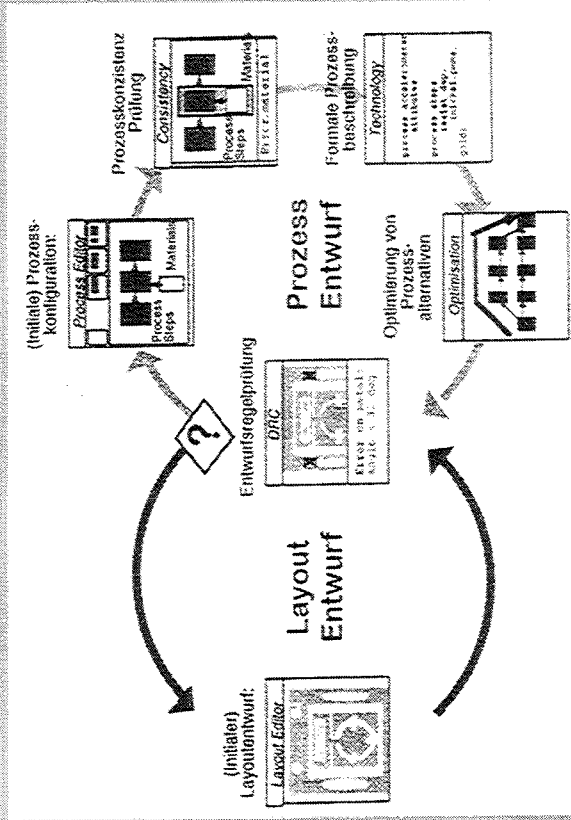
# Unterstützung bei Prozessplanung und Prozessoptimierung



# Prozesseditor des Systems LIDO

- Galvanik Hilfsstrukturen
- Maskendaten mit Fertigungsverhalt
- Prozesssimulation

# Entwurfsablauf im LIDO-System



Arbeitsschritt	einsetzbare Werkzeuge
Simulation Sensorsignal	Maple, Matlab
Suche nach Wirkprinzipien	TechOptimizer, Datenbanken
Zeichnungserstellung	SolidEdge, ProEngineer, SolidWorks
Simulation Systemverhalten	Adams Mechanical, Visual Nastran Desktop, Spice, Saber, Maple, Matlab
Simulation mechanischer Problemstellungen	Ansys, Nastran, Abacus, Tochnog, QuickField
Simulation elektrischer und magnetischer Felder	Ansys, Mafia, Tosca, QuickField
Entwurfsverifikation und Fertigungsunterstützung	MIDAS, LIDO

# **Anwendung gekoppelter FEM-Programme zur Simulation von Aktoren mit Formgedächtnis-Antrieb und galvanischer Abscheidung**

B. Krevet, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)

Es wird ein im IMT entwickeltes Programmpaket vorgestellt, das eine Simulation von Mikrosystemen mit Wechselwirkung zwischen unterschiedlichen physikalischen Größen (mechanisch, elektrisch, thermisch, etc.) ermöglicht. Hierzu werden verschiedene Programme (z.B. Finite Elemente Programme) je nach Anwendung in beliebiger Reihenfolge gestartet und der Datenaustausch zwischen ihnen gesteuert. Rechenergebnisse können zur Änderung der Geometrie von Bauteilen verwendet werden. Als Beispiel wird die Simulation von Ventilen mit Formgedächtnis-Antrieb vorgestellt, sowie eine Anwendung zur Berechnung des Wachstums galvanischer Schichten.





**Anwendung gekoppelter FEM-Programme zur Simulation  
von Aktoren mit Formgedächtnis-Antrieb und galvanischer  
Abscheidung**

Ziele der Kopplung

Programme, Rechenablauf

Beispiel 1: Berechnung von Bauteilen aus Formgedächtnis-Material

- a) Biegebalken aus Formgedächtnis-Material
- b) Ventil mit Formgedächtnis-Antrieb

Beispiel 2: Simulation von galvanischer Abscheidung

Zusammenfassung

## **Anforderungen an FEM - Kopplung**

Austausch aller Daten.

Ändern aller Volumendaten und Randbedingungen mit einfachen Befehlen.

Steuerung von Programmaufgaben.

Rückkopplung von Ergebnissen auf das Maschennetz.

Verändern des Makromaschennetzes.

Parametervariation – Optimierung.

Generierung und Verwaltung zusätzlicher Variablen.

Verwaltung und Weitergabe der Zeit.

Steuerung der Ergebnisausgabe.

## **Nebenbedingungen**

Möglichst wenig Änderungen der FEM Programme.

Automatischer Aufruf verschiedener FEM Programme in beliebige Abfolge.

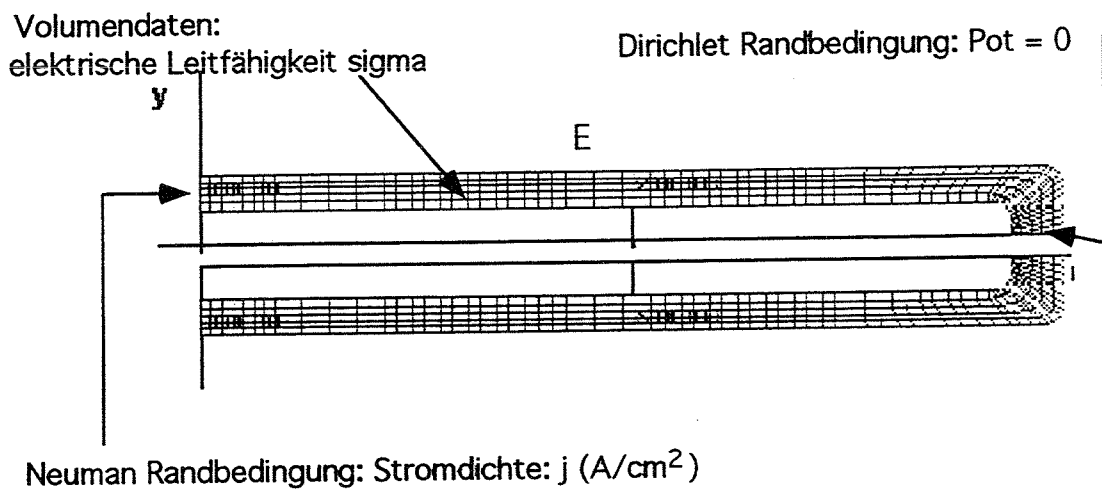
Maschennetze müssen nicht topologisch gleich sein.

Bei jedem Aufruf sollen obige Aufgaben frei wählbar sein.

**Berechnung der Temperaturverteilung eines elektrisch beheizten Formgedächtnis -Aktors**

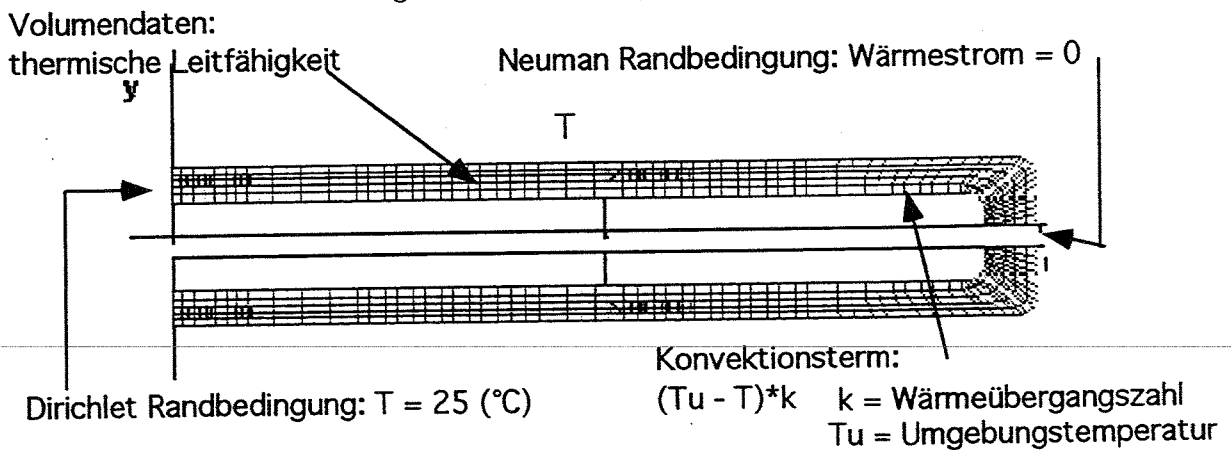
**elektrische FEM Simulation**

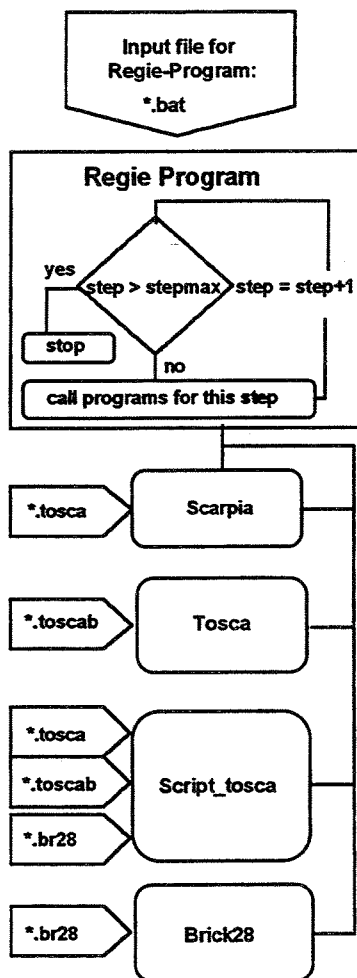
gesucht:  $E$  = elektrische Feldstärke



**thermische FEM Simulation**

gesucht:  $T$  = Temperatur





the input file contains:

- list of programs with code numbers indicating at which steps they are called
- list of all scripts
- time for each step

the scripts contain the commands to be executed

The Regie - Program calls the programs Brick28, Scarpia, Tosca and Script\_tosca and passes time, filenames and scripts to them

Scarpia generates the meshes

Tosca solves the electrostatic and (time dependent) thermal problem

Script\_tosca strongly connects Tosca and Brick28:  
It reads both input files, allows the change and export of all data including the mesh geometry, calculates forces and sets the tasks for Tosca

Brick28 is the nonlinear solver (including shape memory material) for displacements and stress

### Script für elektrische, thermische und mechanische Kopplung

```
program
scarpia 1,1
script_tosca 2,2 ;1,2
brick28 2,2
script_brick28 2,2 ;1,4
tosca 1,1
script_tosca 1,1 ;1,1
tosca 1,1
end program

time ;3,0.01 ;2,0.05 ;
end time

script_1
set gauss=3
select surface elements
generate q3d layer=1 color=soln
calculate heat
save etemp
restore etemp to scala
create bound=pmix all 7.e-5 25
replace diel=1250. with 0.018
change neuman=26.01 to diri=25
change diri=0.0 to neuman=0.0
set task=therm
end script_1

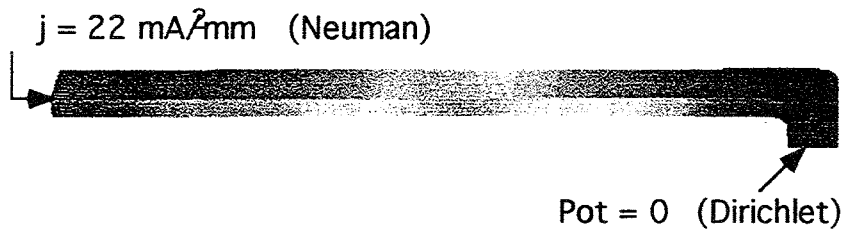
script_2
select surface elements
generate q3d layer=1 color=temp
export temp to brick28
end script_2

script_3
pause for diagnostic
save diri
save diel
save neum
create earmk 1 for diel=1250
end script_3

script_4
update mesh with result
select surface elements
generate q3d layer=1 color=mises
end script04
```

**Biegebalken aus Formgedächtnis-Material**

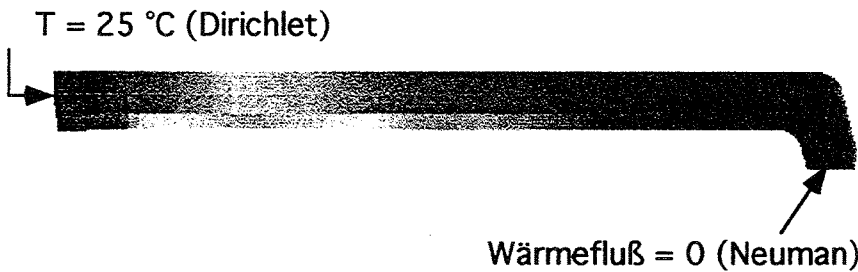
Elektrische Feldverteilung



Potential [V]

- 7.216473E-02
- 6.494826E-02
- 5.773178E-02
- 5.051531E-02
- 4.329884E-02
- 3.608237E-02
- 2.886590E-02
- 2.164942E-02
- 1.443295E-02
- 7.216473E-03
- 0.000000

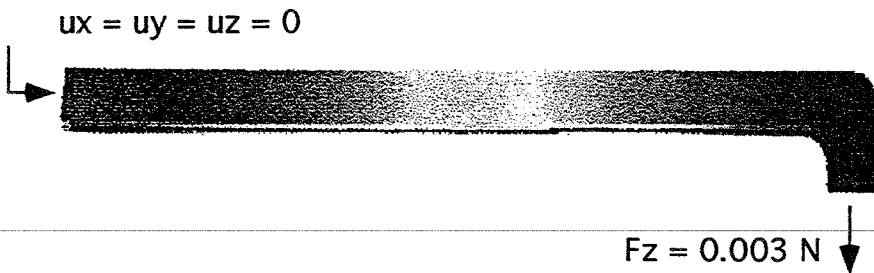
Temperaturverteilung



Temperatur [°C]

- 102.526
- 94.7730
- 87.0204
- 79.2679
- 71.5153
- 63.7628
- 56.0102
- 48.2577
- 40.5051
- 32.7526
- 25.0000

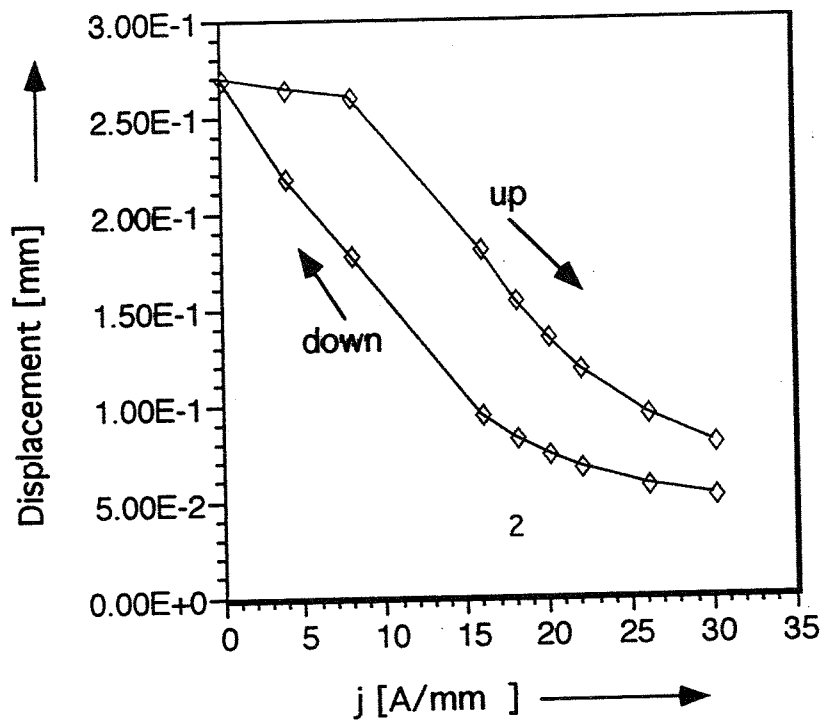
Stressverteilung (Mises-Stress)



Stress [MPa]

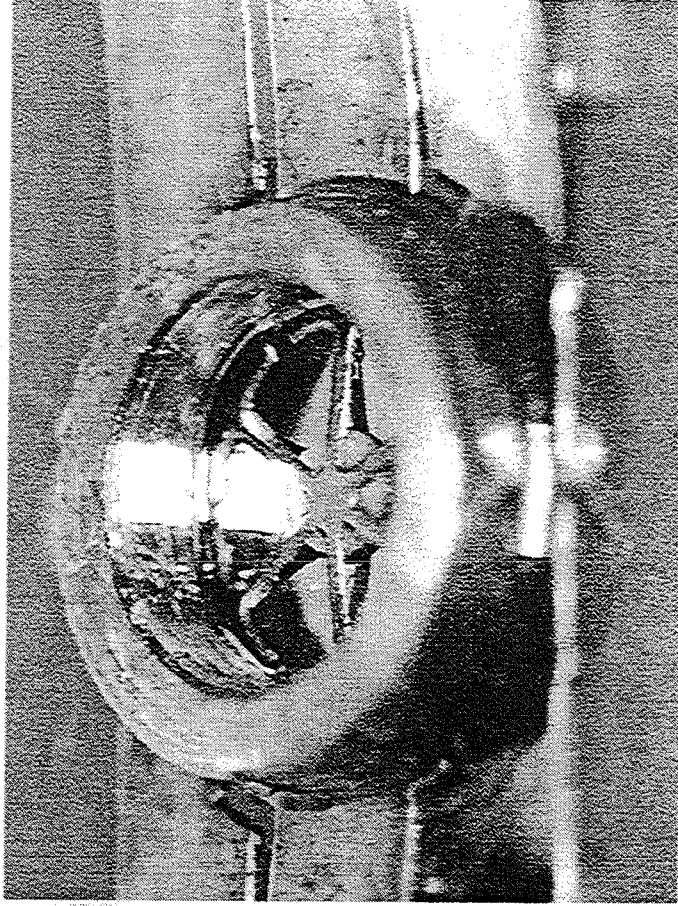
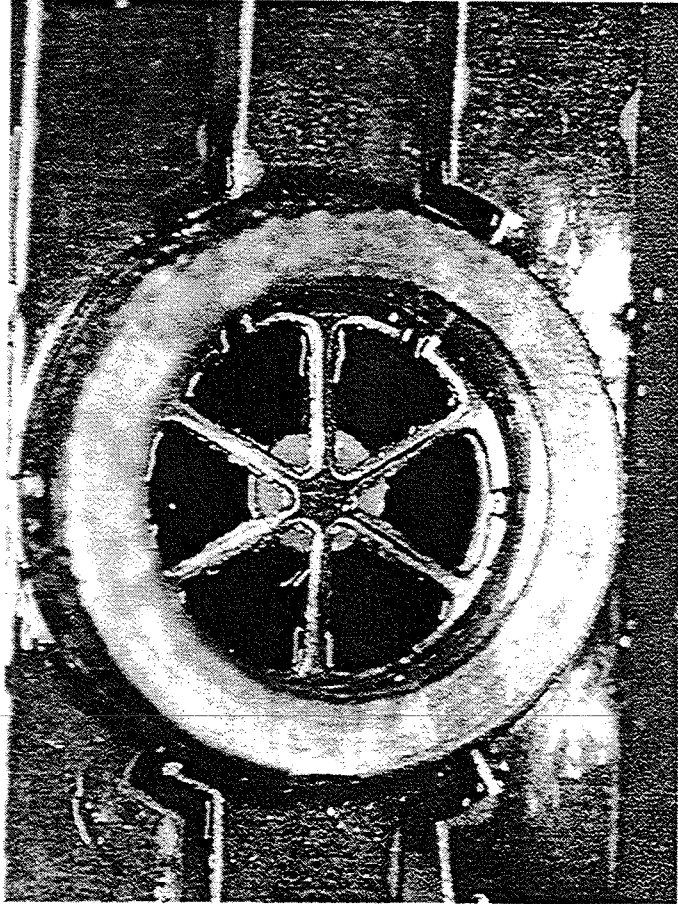
- 12.8602
- 11.5750
- 10.2899
- 9.00476
- 7.71963
- 6.43449
- 5.14935
- 3.86422
- 2.57908
- 1.29394
- 8.806976E-03

Current - Displacement Characteristic of  
Shape Memory Actuator

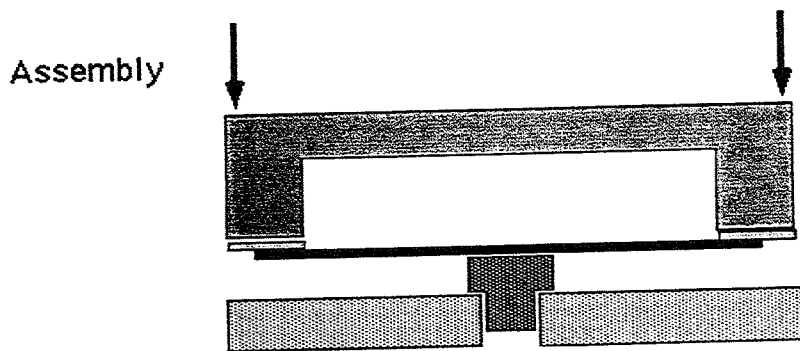


## **Mikrofluidisches Modulsystem**

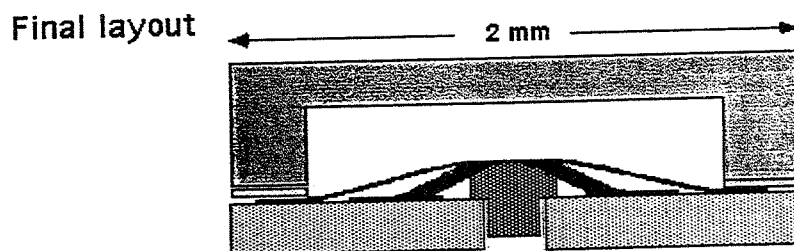
Mikroventil mit Formgedächtniseffekt





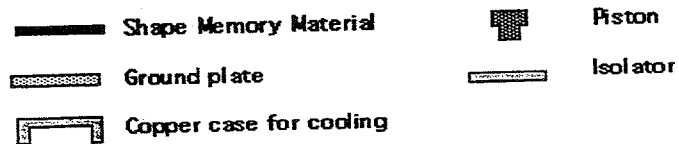


$T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$  , the actuator is prestrained



$T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ : Low elastic modulus of the shape memory material, pseudo plastic deformation.  $\rightarrow$  only small forces on the piston

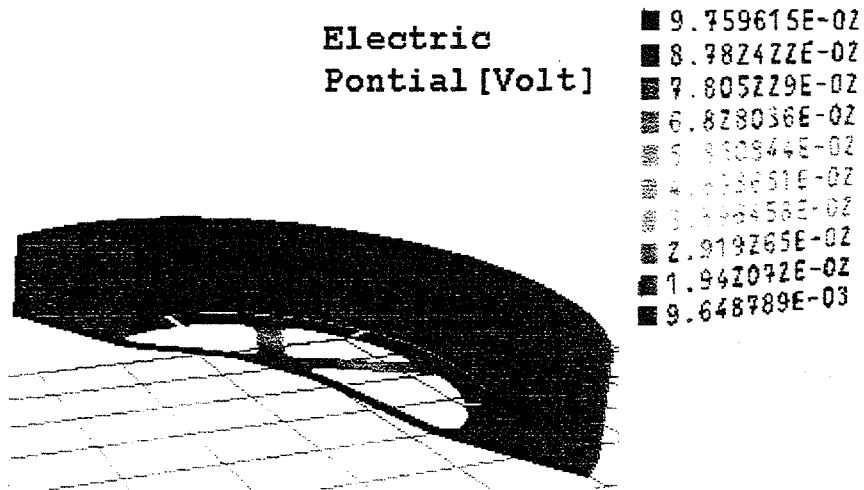
Heating the shape memory material by electrical currents up to  $T > 80\text{ }^{\circ}\text{C}$ : High elastic modulus, no pseudo plastic deformation  $\rightarrow$  large forces on the piston



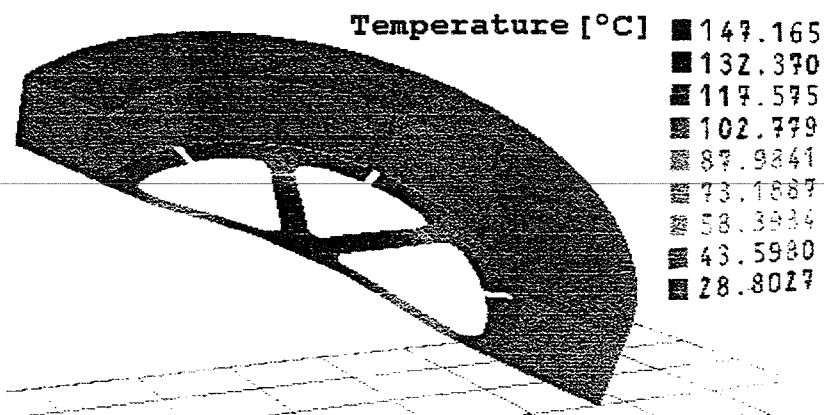
Brick28 first calculates the deflected mesh



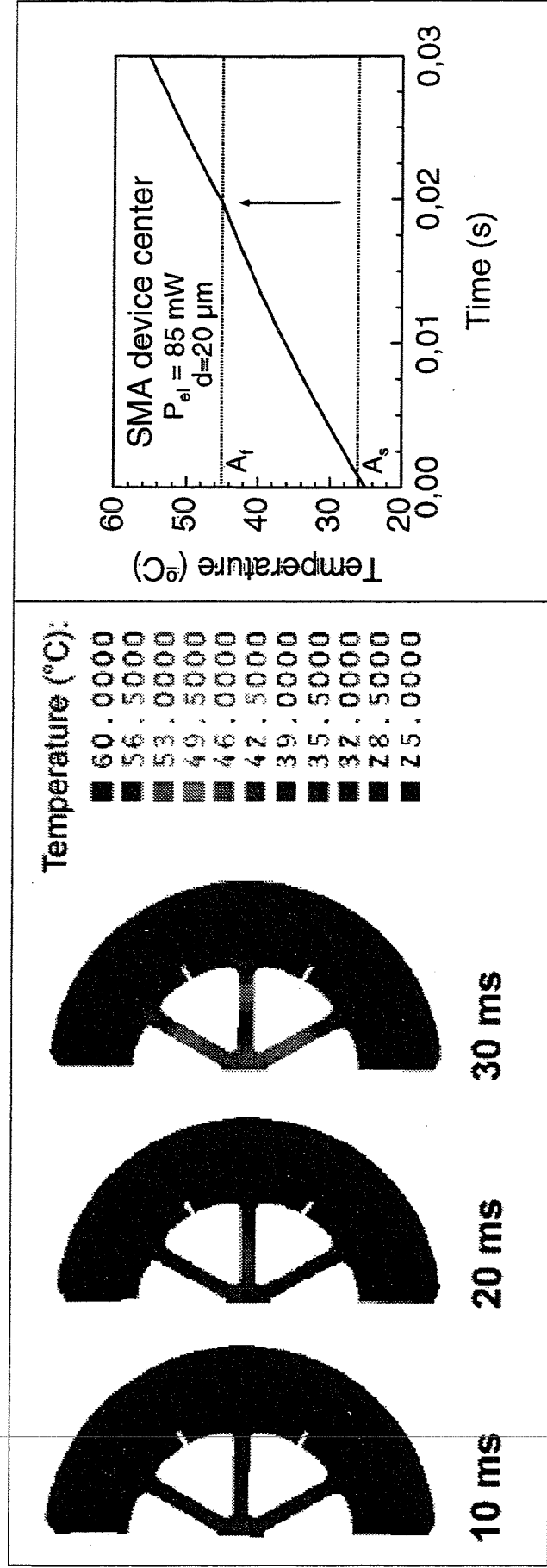
Script\_tosca updates the Tosca mesh with results of brick28, then Tosca calculates the electrical potential



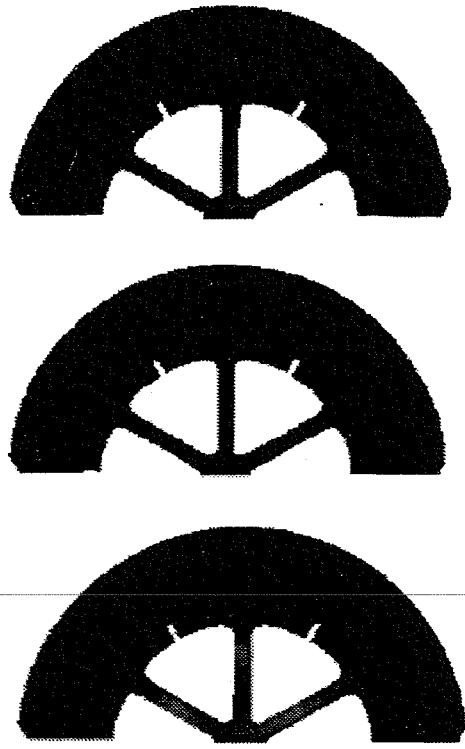
Script\_tosca switches boundaries to thermal problem and set parameters for time dependent analysis, then Tosca calculates the temperature distribution



## Temperature Profile upon Heating



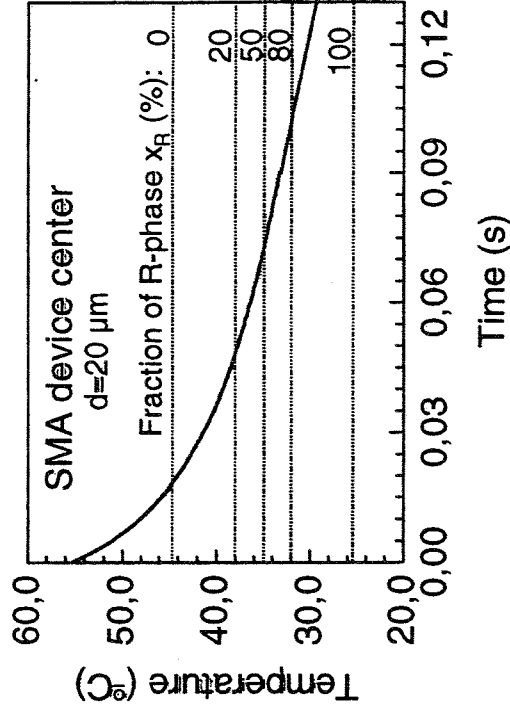
# Temperature Profile upon Cooling



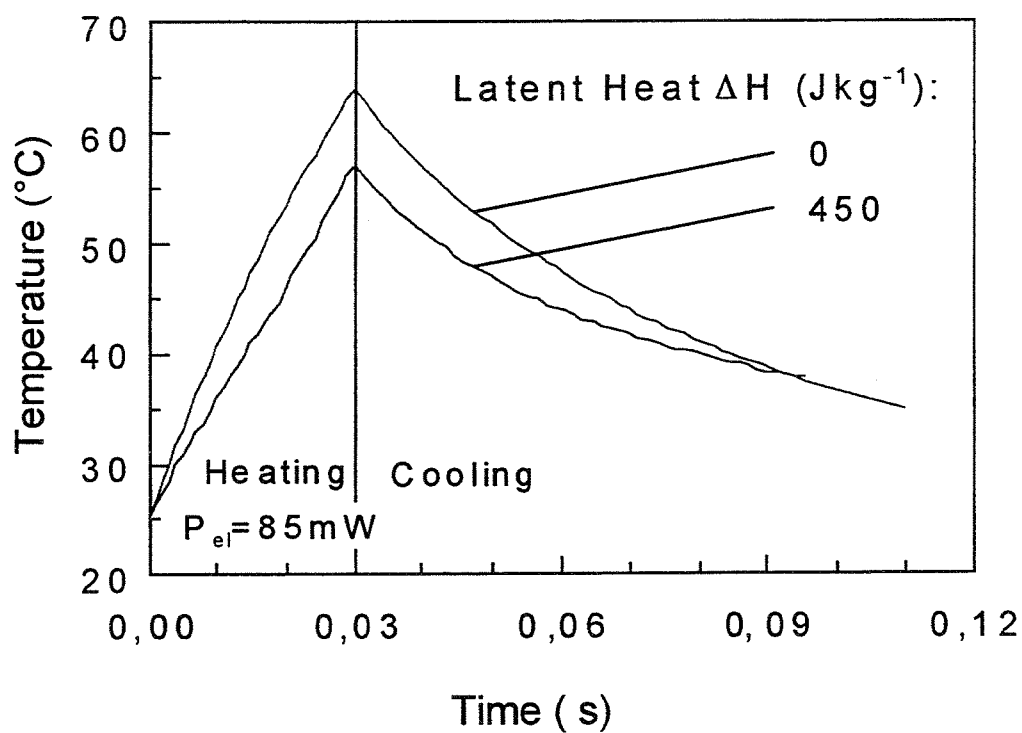
0 ms                      50 ms                      100 ms

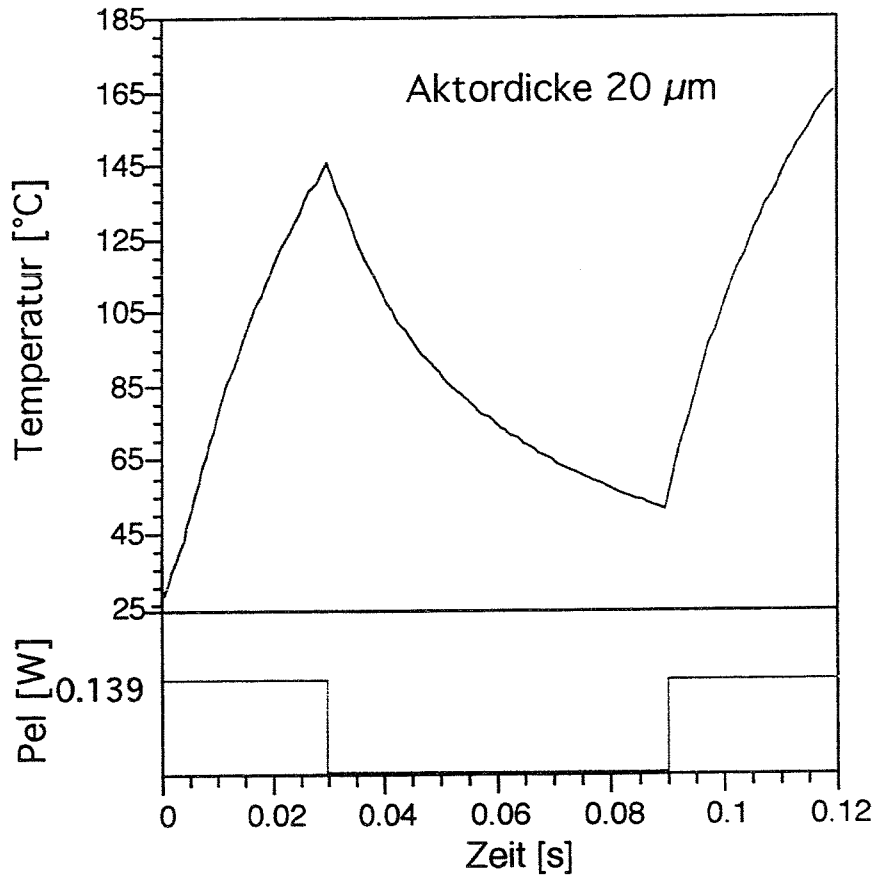
Temperature (°C):

- 60 . 0000
- 56 . 5000
- 53 . 0000
- 49 . 5000
- 46 . 0000
- 42 . 5000
- 39 . 0000
- 35 . 5000
- 32 . 0000
- 28 . 5000
- 25 . 0000



Heat transfer coefficient:  $70 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$



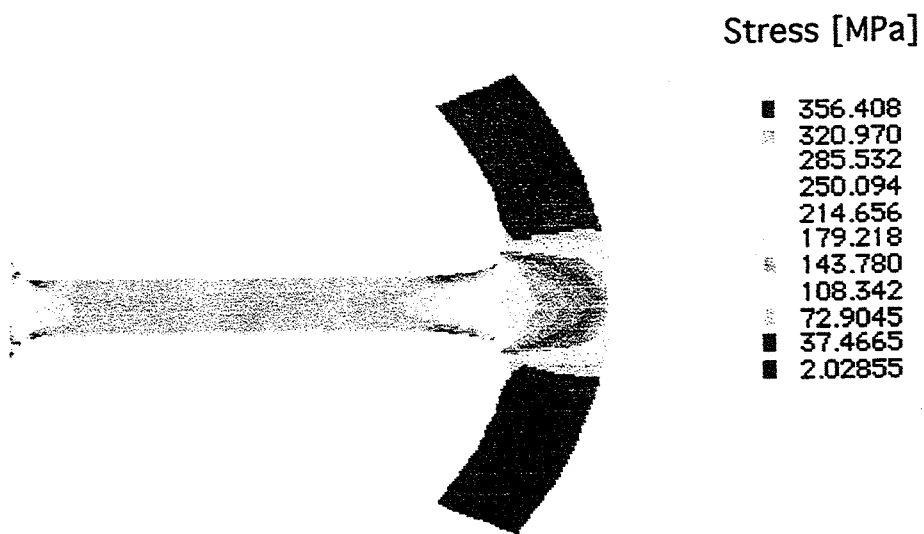


Scriptbefehle für Leistungsregelung

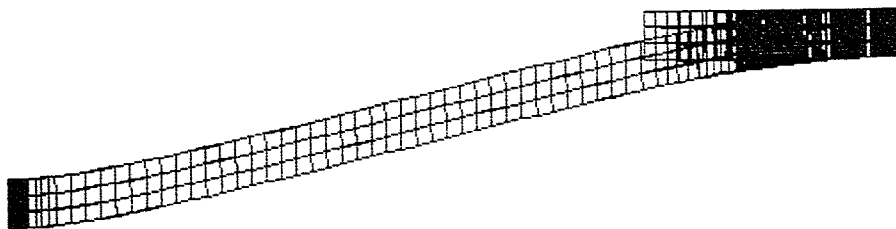
Lauf1	Lauf2	Lauf3
save scalar	restore scalar	restore heat to scalar
calculate heat		
restore heat to scalar		



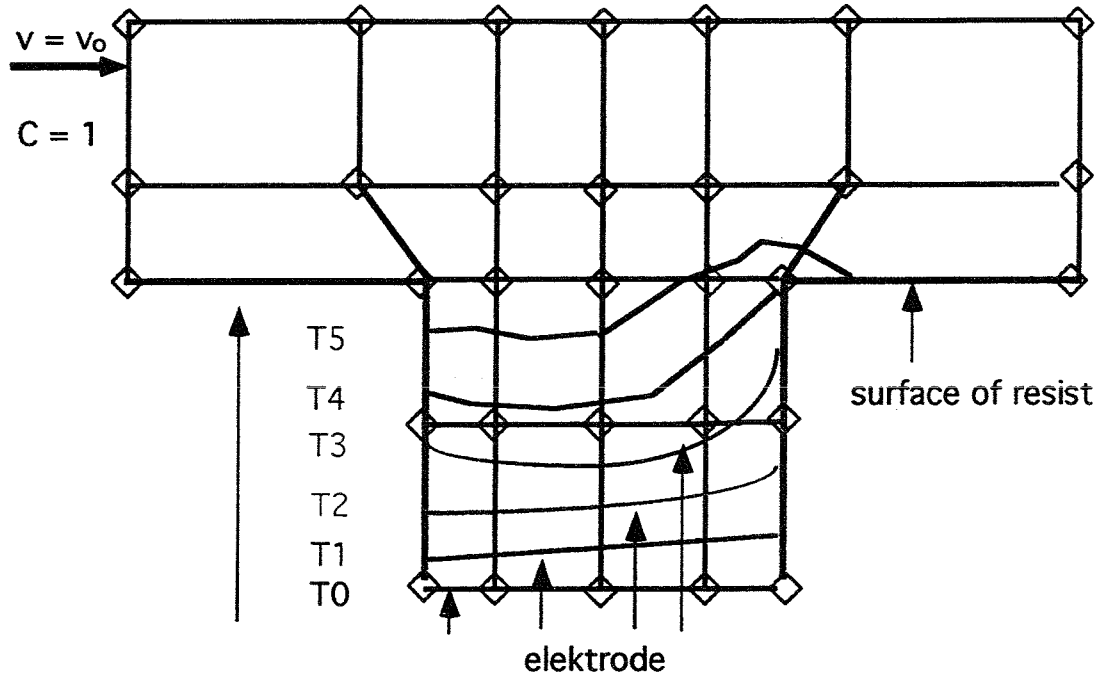
Mises -Stress in the Midplain of the SM Actuator



Displaced Mesh



FEM - model of galvanic deposition in a LIGA chanel



limiting current condition ( $C = 0$ ) or selfconsistent calculation



```

program
scarpia 1,8
tosca 1,8
script_tosca 1,8 ; 8,1
end program

```

```

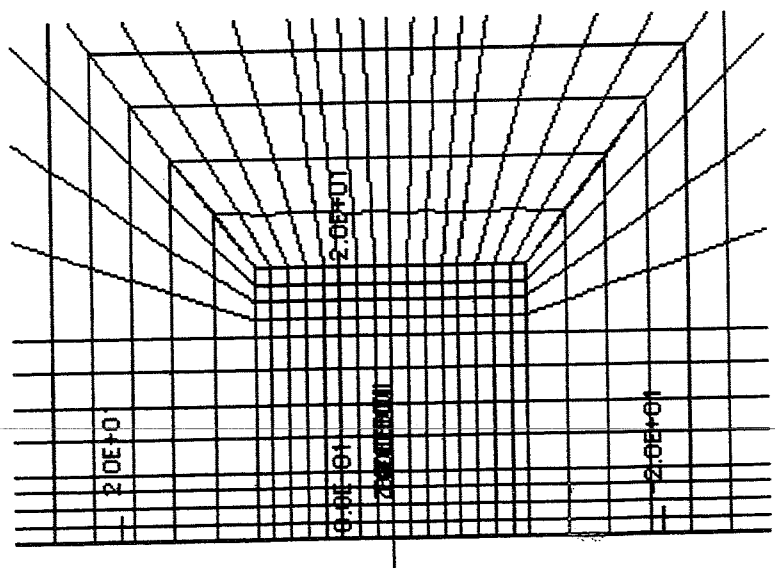
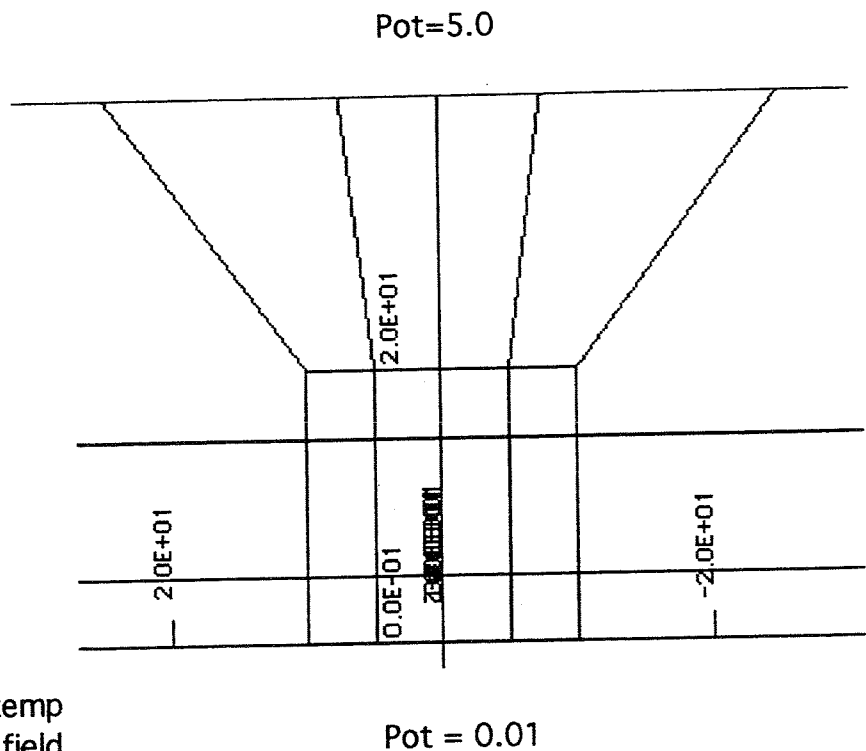
time 5,1.01;
end time

```

```

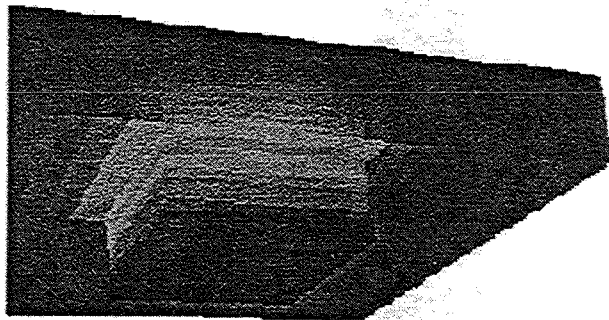
script_1
read macro
select surface elements
generate q3d layer=1 color=temp
update macro pot=0.01 with field
pause for diagnostic
generate) q3d surfa=pot 0.01 color=field
end script_1

```



FEM – Galvanik 01

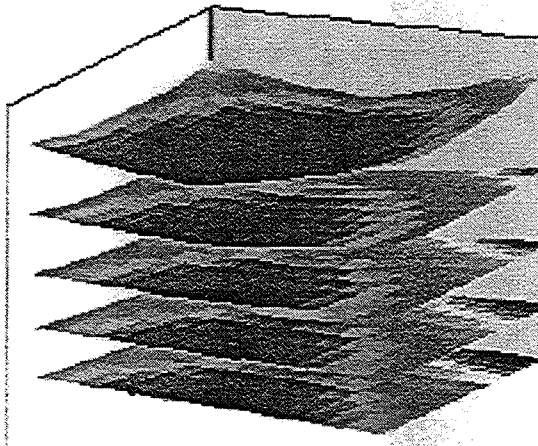
Elektrisches Potential  
auf der Oberfläche



Potential (V)

■	5.00000
■	4.50100
■	4.00200
■	3.50300
■	3.00400
■	2.50500
■	2.00600
■	1.50700
■	1.00800
■	.50900
■	1.000000E-02

Äquipotentialflächen



Feldstärke (V/μm)

	Step 1	Step 5
■	.331423	1.10393
■	.327495	1.02616
■	.323567	.948391
■	.319639	.870622
■	.315711	.792853
■	.311783	.715084
■	.307855	.637315
■	.303927	.559545
■	.299999	.481776
■	.296071	.404007
■	.292144	.326238

Zusammenfassung und Ausblick in 3D

**FEM Programme:**

elektrischer, magnetischer und  
zeitabhängiger thermischer (Diffusion) Solver                      Tosca

Stress and Displacement Solver  
mit "Formgedächtnis" und "Large Deflection" Fähigkeit                      Brick28

Shell Element                      Plate3b

**Hilfsprogramme**

grafischer Preprozessor                      Scarpia5a

Postprozessor                      Femgraf

**Mögliche Spezialanwendungen:**

Simulation von Shape Memory Aktoren  
Optimierung (Stress, Felder, Auslenkungen )  
Einfluß mechanischer Kräfte auf Felder  
Simulation von galvanischen Abscheidungen  
Simulation von Resistentwicklung, Rückkopplung der Ergebnisse  
in den Preprozessor zur realen Modellerzeugung



# Optiksimulation für die Gasanalysekammer

I. Sieber, Institut für Angewandte Informatik (IAI)

Der Beitrag beschäftigt sich mit der Simulation optischer Komponenten und Systeme innerhalb der Mikrosystemtechnik. Es handelt sich dabei also um Produktsimulation. Der Vortrag wird am aktuellen Beispiel der optischen Simulation einer Gasanalysekammer eines IR-Detektors die Problematik der Wahl zwischen kommerzieller und eigenentwickelter Software behandeln. In einer kurzen Zusammenfassung wird ein Überblick über die Simulationstätigkeiten in der Vergangenheit gegeben wobei auch genannt wird ob Eigenentwicklungen oder kommerzielle Software zum Einsatz kam.



# **Optiksimulation einer Gasanalysekammer**

Ingo Sieber

Institut für Angewandte Informatik

## Inhalt

- ◆ Fragestellung
- ◆ Modellierung der Gasanalysekammer
  - Problematik der Auswahl des Simulationstools
- ◆ Vorstellung abgeschlossener Simulationsarbeiten
  - mikrooptischer Heterodynempfänger
  - mikrooptischer Abstandssensor



Anwendung: IR-Gassensor

## Fragestellung

- **Optimierung von Mikrosystemen für Diagnose- und Überwachungsanwendungen:** BMBF-Förderprojekt im Verbund mit 6 Industriepartnern und 3 Forschungseinrichtungen unter Federführung des Forschungszentrums Karlsruhe
- **Gesamtziel:** Erreichen optimierter Mikrosystementwürfe mit unmittelbar sich anschließender Produktentwicklung und -fertigung

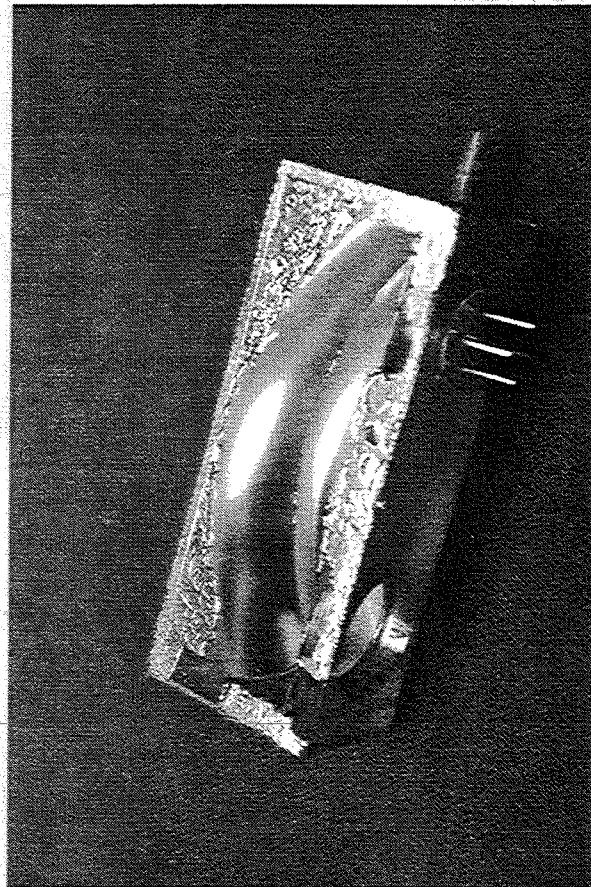


- **Anwendung IR-Gassensor:** Simulation und Optimierung der Gasanalysekammer eines IR-Gassensors

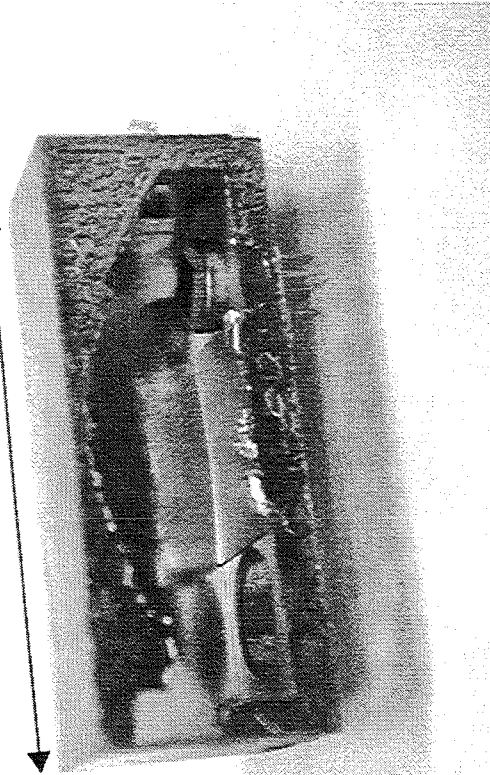


Anwendung: IR-Gassensor

## Gas-Analysekammer



4.42 cm



Anwendung: IR-Gassensor

## Werkzeugauswahl

- Modellbildung mit der Software  
*Mathematica*

**Vorteil:** große Flexibilität  
**Nachteil:** aufwendige Programmierung von  
Modulen, die in kommerzieller  
Simulationssoftware bereitgestellt  
werden

- Modellbildung mit der optischen  
Simulationssoftware *SOLSTIS*

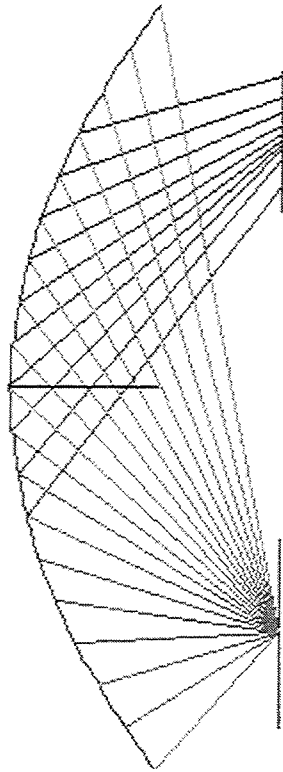
**Vorteil:** Bereitstellung optischer Funktionen  
**Nachteil:** Beschränkung auf vorgesehene  
optische Funktionen  
Beschränkung auf vorgesehene  
Datenausgaben



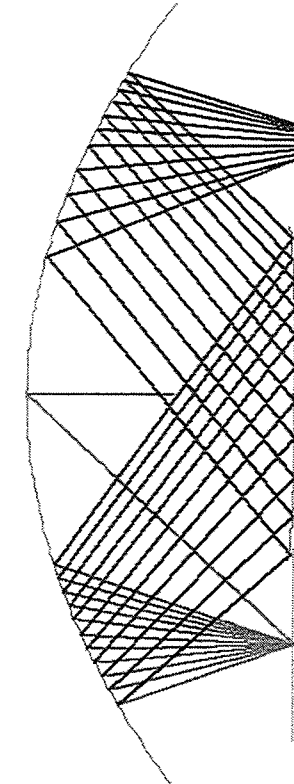
Anwendung: IR-Gassensor

## Modellierung mit SOLSTIS

Teilmodell für eine Reflexion  
am Kammerdeckel



Teilmodell für zwei Reflexionen  
am Kammerdeckel

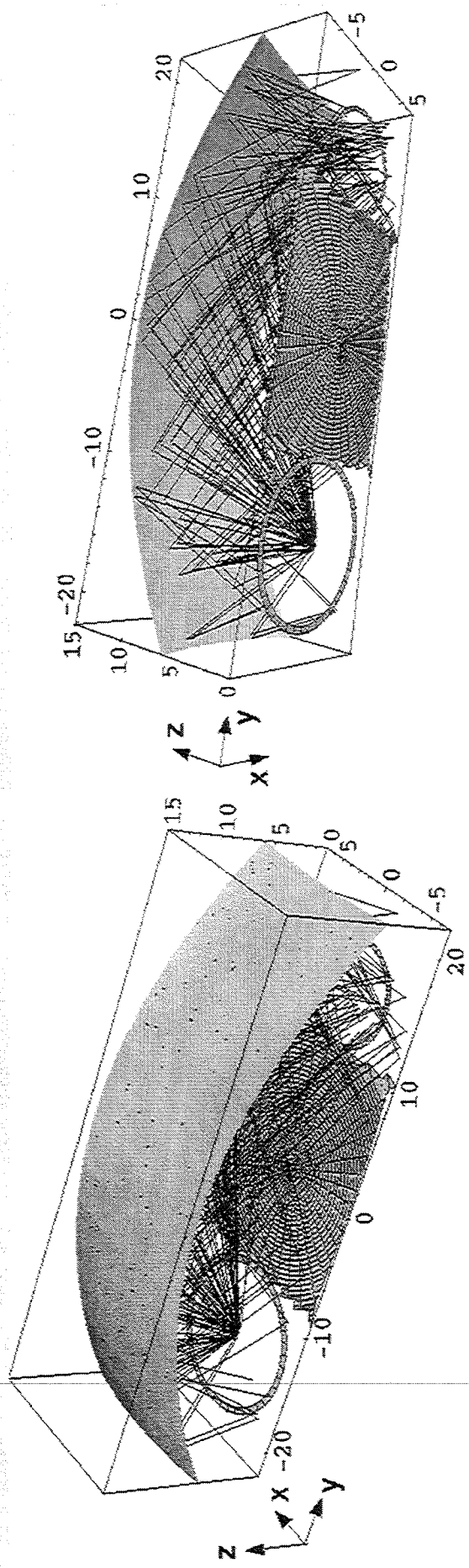


Nachteil: für die gegebene Problemstellung müssen mehrere Teilmodelle erstellt werden.



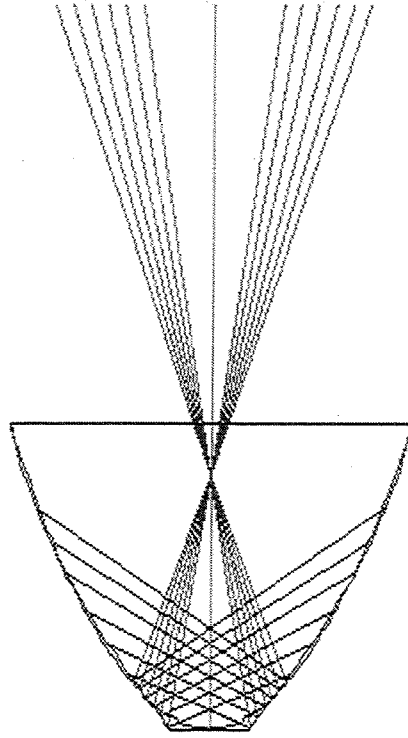
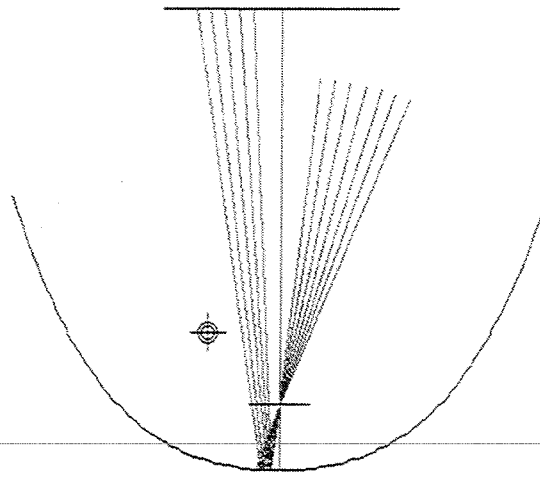
Anwendung: IR-Gassensor

## Modellierung mit *Mathematica*



Anwendung: IR-Gassensor

## Modellierung des Lampenreflektors mit SOLSTIS

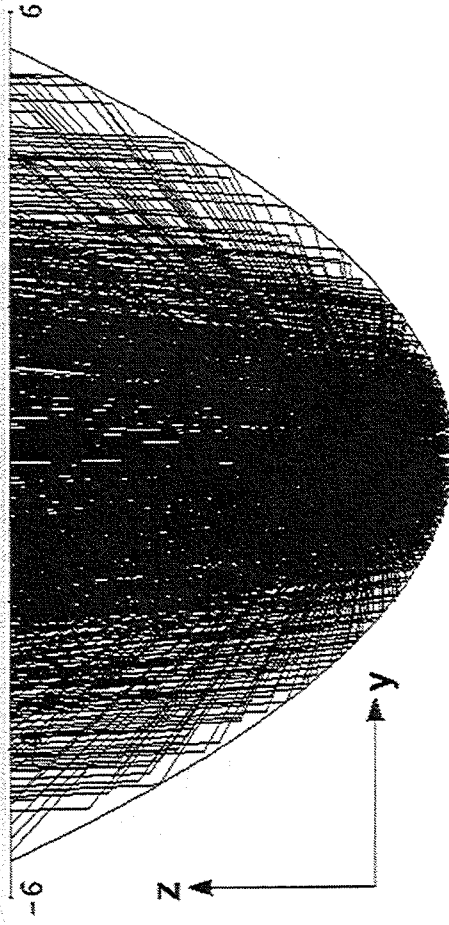


Nachteil: für die gegebene Problemstellung müssen mehrere Teilmodelle erstellt werden.



Anwendung: IR-Gassensor

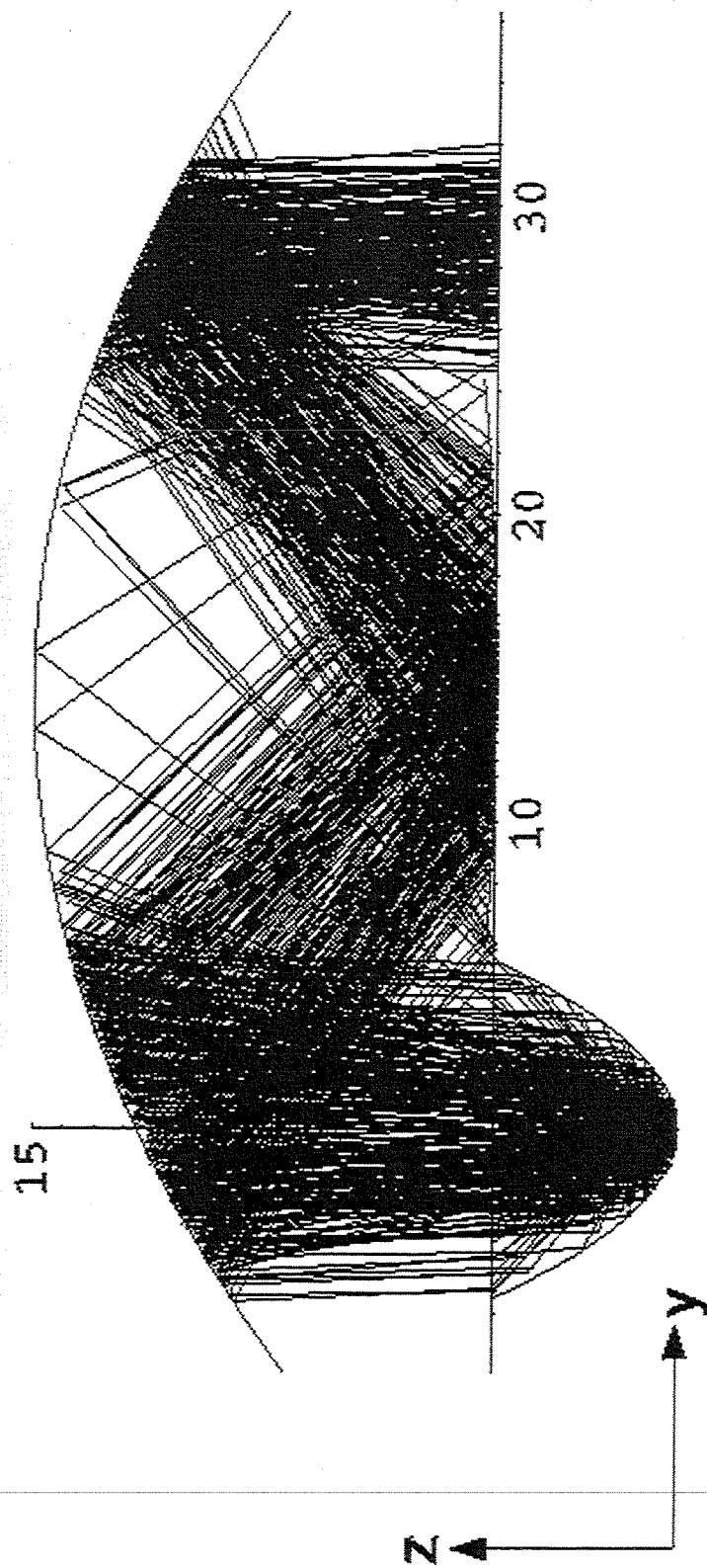
## Modellierung des Lampenreflektors mit *Mathematica*





Anwendung: IR-Gassensor

## Gesamtmodell mit Strahlberechnungen (*Mathematica*)



Fazit: die Modellierung kann mit *Mathematica* in einem Gesamtmodell geschehen

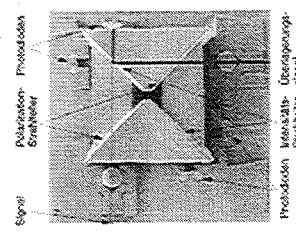
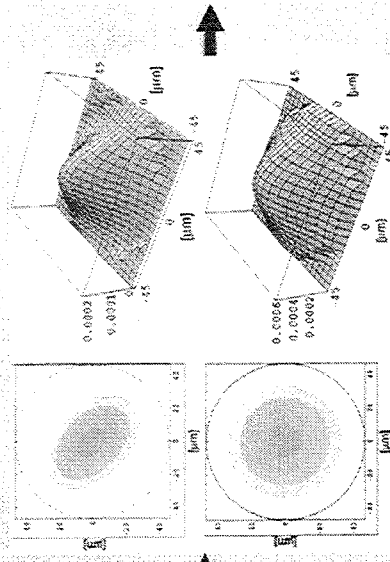
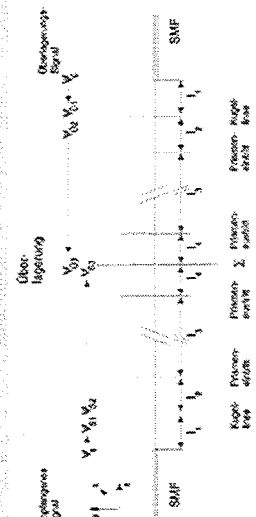
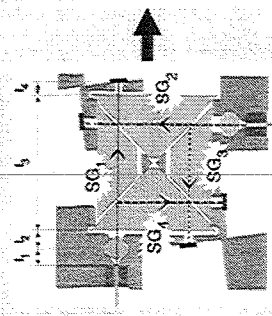
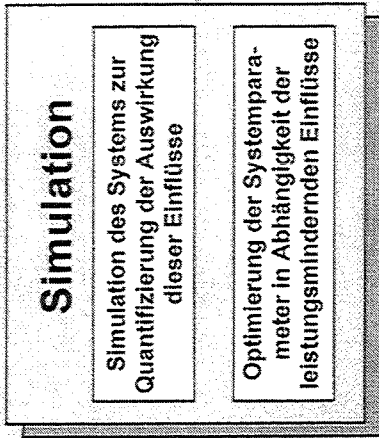
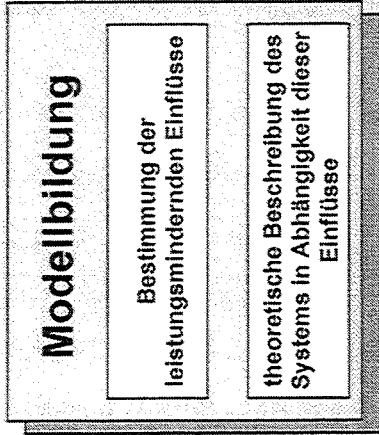


# Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt

Rechnergestützte Erstellung optimierter Systementwürfe

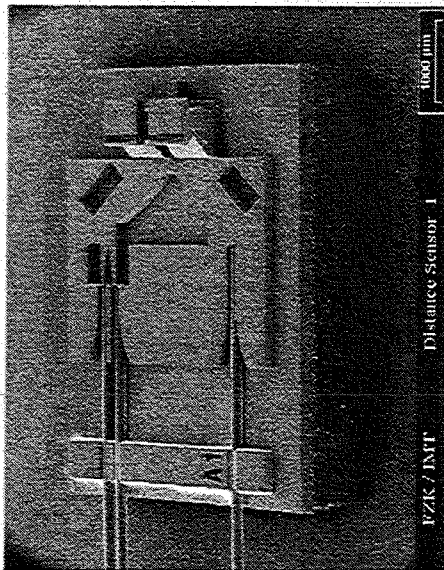


modifizierter, optimierter Systementwurf



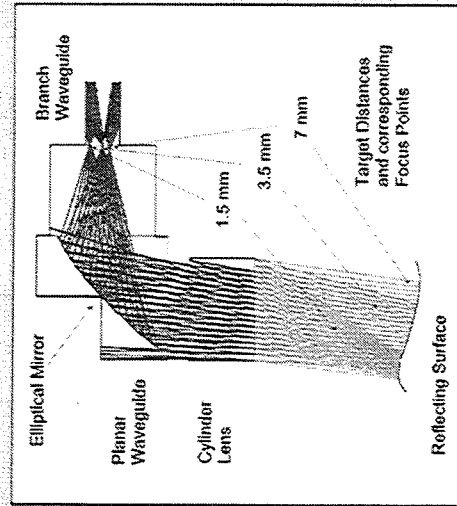
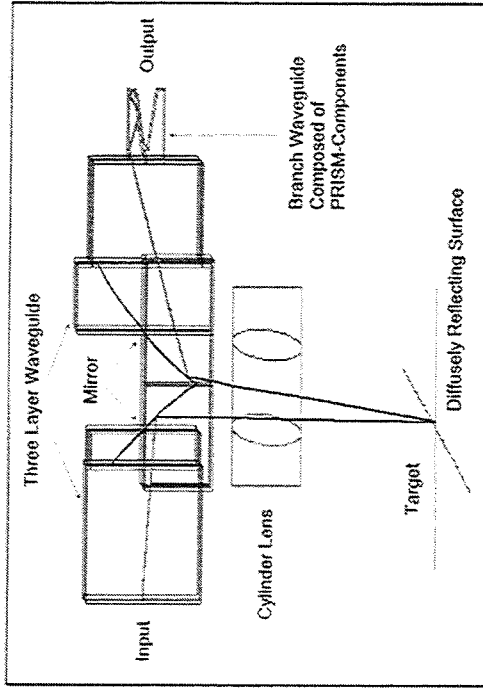
Modellbildung mit Mathematica

Abstandssensor

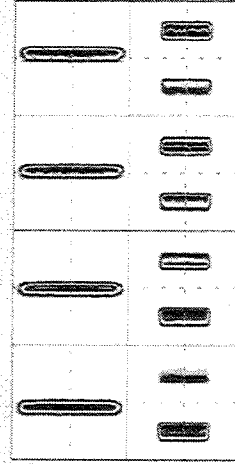


Prototyp

Simulationsmodell



Modellausschnitt:  
Detektorteil



Modellbildung mit SOLSTIS

## Fazit

**In Abhängigkeit von der Problemstellung muß die geeignete Vorgehensweise für die Simulation erarbeitet werden. Daraus ergibt sich der Einsatz von kommerzieller Software oder die Entwicklung anwendungsspezifischer Werkzeuge.**



## **Bauteiloptimierung in der MST mit FEM**

E. Diegele, Institut für Materialforschung (IMF II)

Am IMF II werden nichtlineare Finite Elemente Methoden verschiedener Art zur Optimierung von Strukturen der MST verwendet, deren erfolgreicher Einsatz dieser Beitrag anhand mehrerer Beispiele erläutern wird. Der kommerzielle FE-Code ABAQUS bietet die Möglichkeit, geometrische und physikalische Nichtlinearitäten zu berücksichtigen (grosse Deformationen, Viskoelastizität, ...). Für ABAQUS wurden spezielle Routinen für thermo-viskoplastisches Materialverhalten mit Schädigung programmiert. Für den nichtkommerziellen Code PSU entstand eine Materialroutine für das Grosssignal-Hysterese Verhalten von Piezokeramiken. In der Biomechanik wurden in Anlehnung an Vorgänge in der Natur Verfahren zur Gestaltoptimierung entwickelt (CAO).



# **Bauteiloptimierung in der Mikrosystemtechnik mit der Finite Element Methode**

**E. Diegele, N. Huber, IMF II  
26. Oktober 2000**

**WORKSHOP zum Thema  
Simulationen in der Mikrosystemtechnik**

## Roter Faden

- Wo liegt unsere Kompetenz ?
- Welche Hilfsmittel setzen wir ein ?
  - Kommerzielle Software
  - Eigenentwicklungen
- Was bearbeiten wir für PMT ? (Vergangenheit, Gegenwart, Zukunft)
  - Bauteilanalysen
    - Designoptimierung
    - Prozeßoptimierung
  - Einfluß der Mikrostruktur



# Themenschwerpunkte in der Forschung

- **Werkstoffmodellierung von Struktur- und Funktionswerkstoffen**
  - Elektro-mechanische Kopplung
  - Viskoplastische und viskoelastische Stoffgesetze
  - Beschreibung der Schädigung (Lebensdauer)
  - Mikromechanische Modelle
- **Bauteilanalyse mit deterministischen und probabilistischen Methoden**
- **Bauteiloptimierung**

# Werkzeuge und Programme

## „Kommerziell verfügbar“

- Finite Elemente Programm  
ABAQUS
- Finite Elemente Programm PSU  
(elektro-mechanische Kopplung)  
( >> *Kamlah* )
- MAFIA ( >> *von der Weth* )  
(elektro-magnetische Kopplung)
- BEM (Randlelementmethode)
- Neuronale Netze

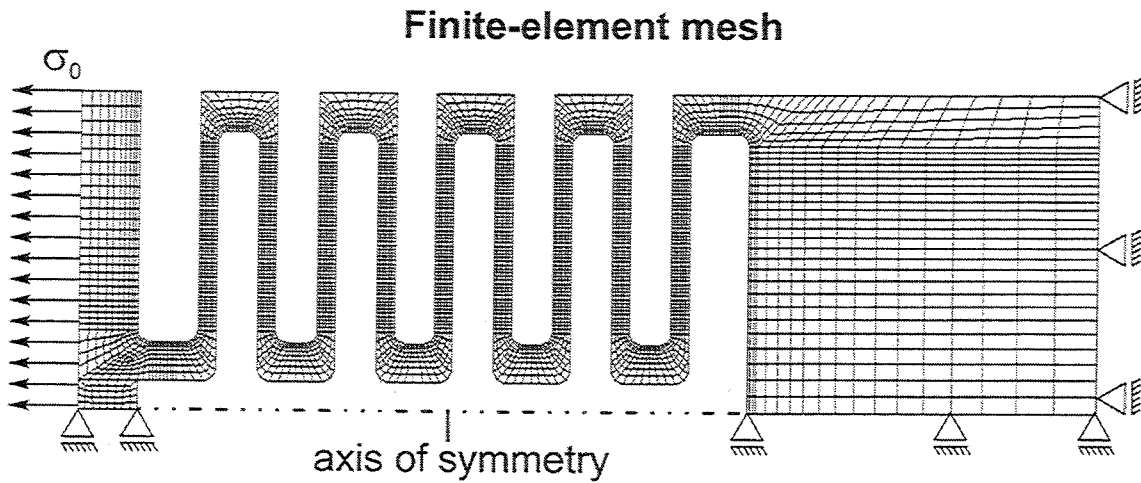
## Eigene Entwicklungen

- Programme zur Beschreibung von komplexem Materialverhalten und Schädigung in ABAQUS über User-supplied MATerials Option:
  - Viskoplastizität
  - Plastische Anisotropie
- Programme zur Form- und Gestaltoptimierung
  - CAO
  - SKO
- Stochastische Modellierung

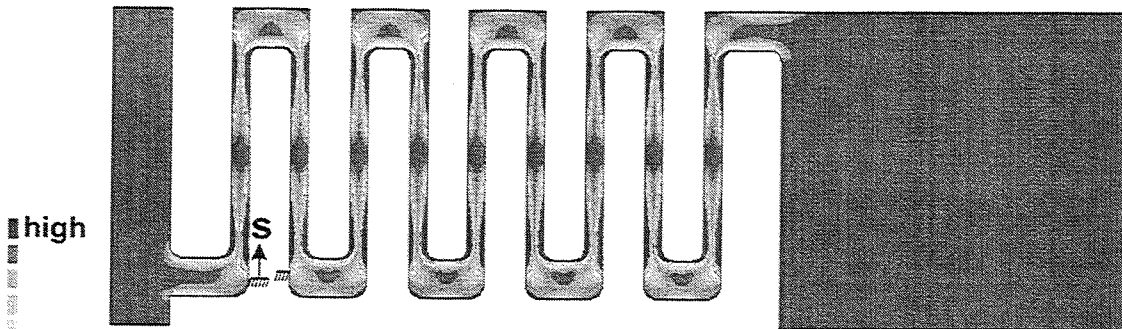
## Strukturmechanik in der Mikrosystemtechnik

- Bauteiloptimierung durch
  - geometrische Optimierung
  - Materialauswahl
- Festigkeitsnachweis und Lebensdauer
- Prozessoptimierung
- Berücksichtigung der Mikrostruktur

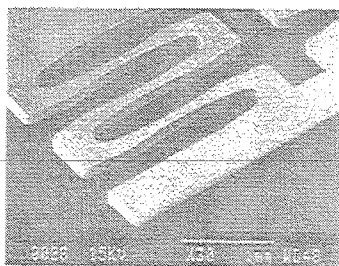
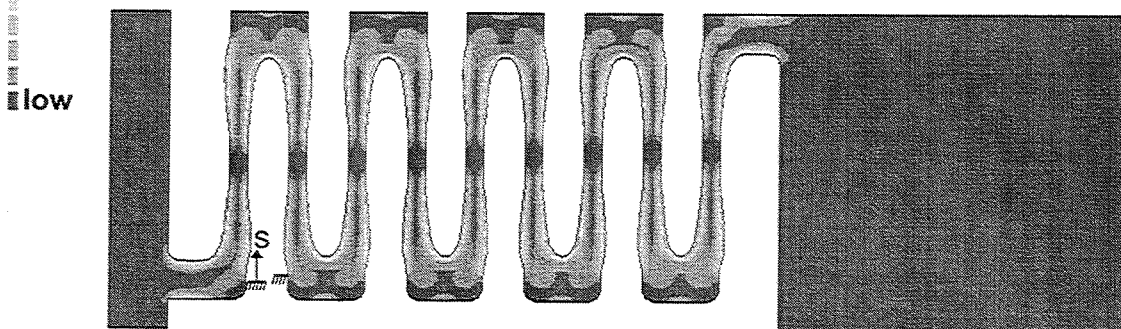
① Formoptimierung  
**Form Optimization of SMA Actor Components**



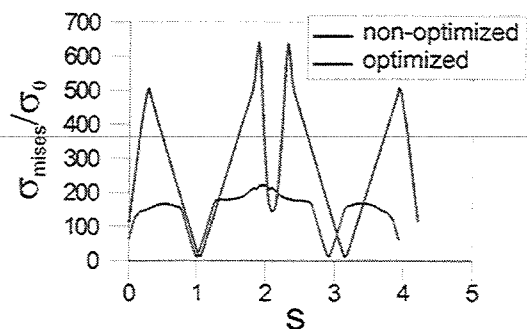
**Mises stress distribution for the non-optimized form**



**Mises stress distribution for the optimized form**

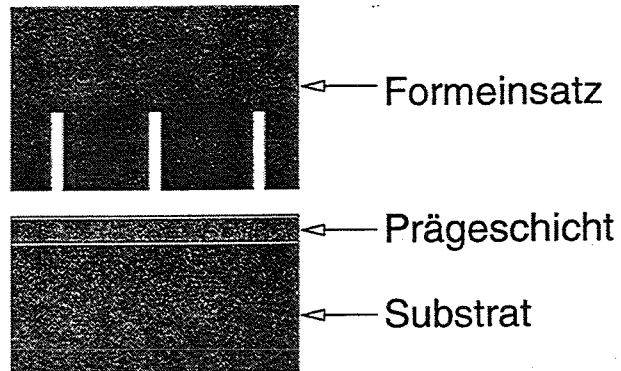


manufactured actor component (laser cutting)

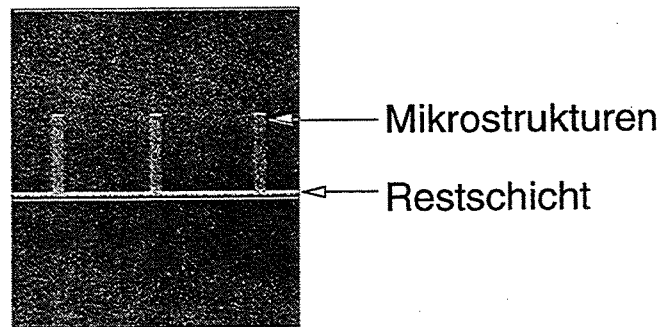


## 2. Simulation eines Abformvorgangs

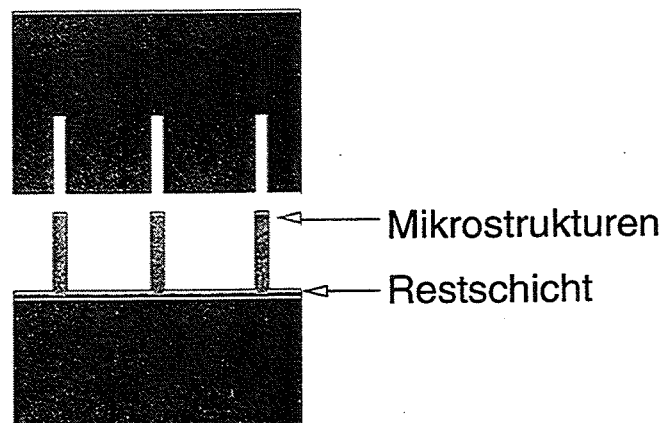
Evakuieren  
und  
Heizen



Prägen der  
Mikrostrukturen



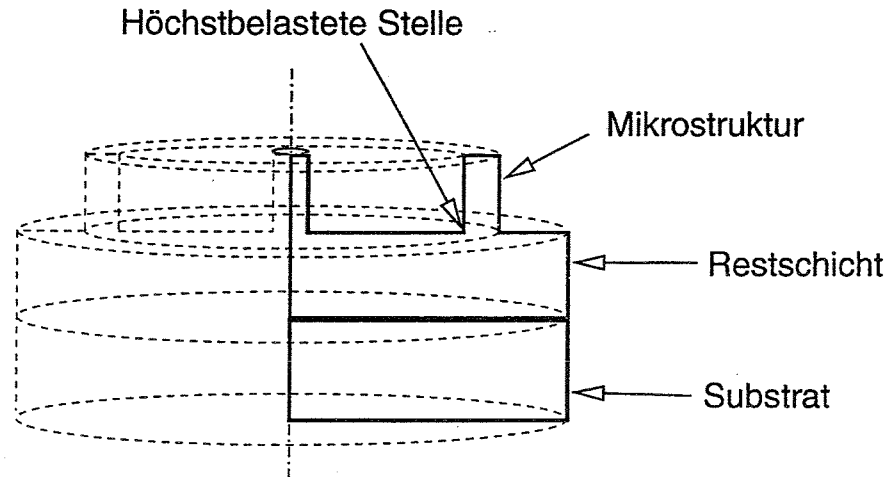
Kühlen  
und  
Entformen



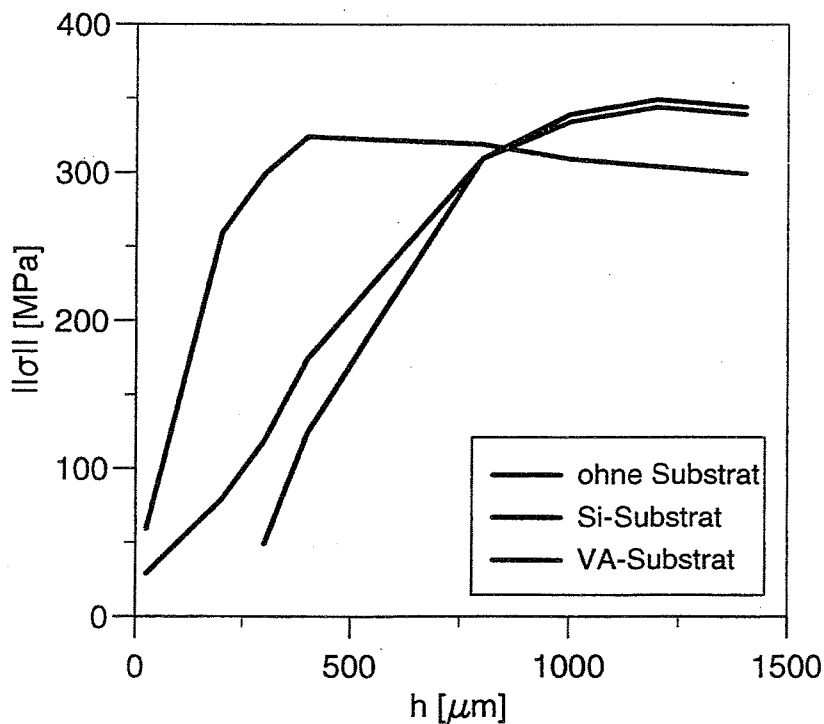
*Abformprozeß als letzte Stufe des LIGA-Verfahrens*

2a

## Maximale Belastung während des Abformens



*Lage in der Modellstruktur*

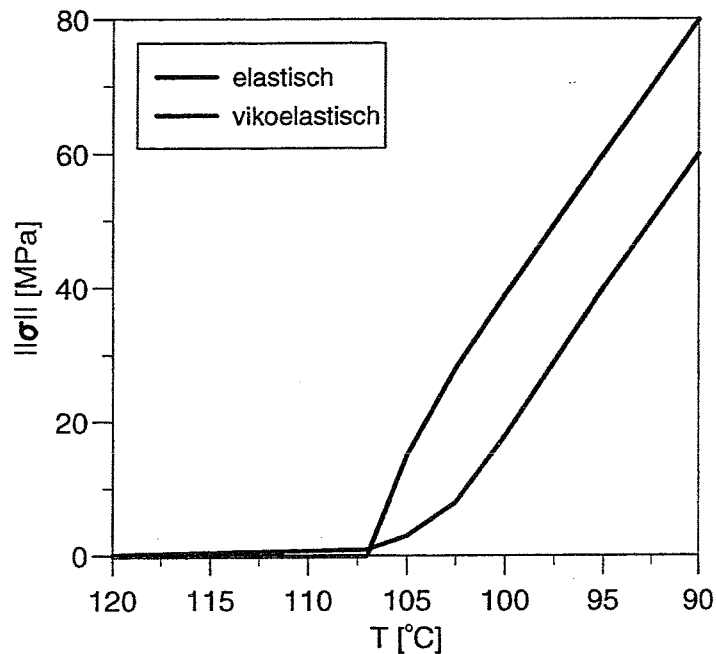


*Abhängigkeit von der Restschichtdicke  $h$*

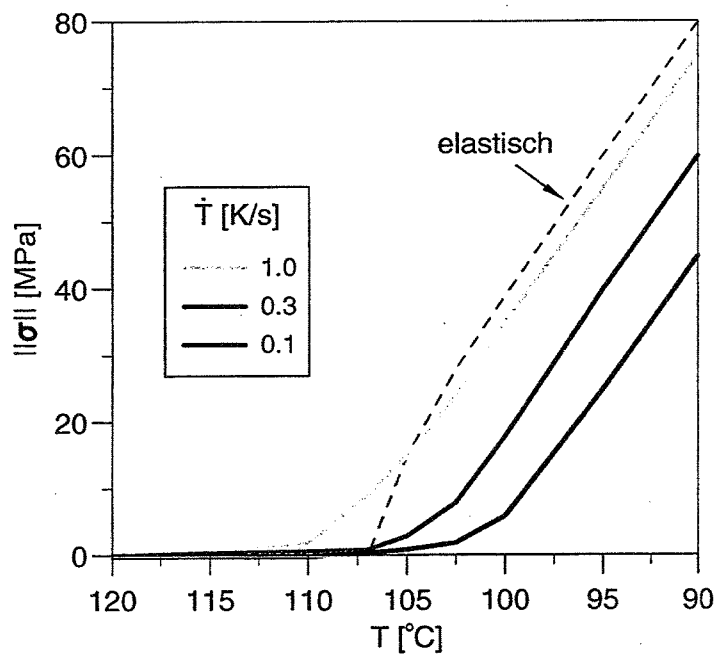
- ⇒ (i) FE liefert kritische Spannung  
(ii) Optimierung durch Wahl des Substrates und der Höhe möglich

2b

## Simulation für viskoelastisches Materialverhalten



Vergleich für Elastizität und Viskoelastizität



Einfluss der Abkühlgeschwindigkeit

- ⇒
- (i) Einfluß der Abkühlgeschwindigkeit  
    ↳ Optimierung von Prozessen
  - (ii) Kenntnis der Material eigenschaften wichtig

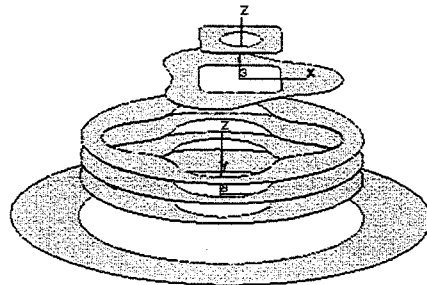
3

## FE-Simulation der Mikrozahnringspumpe

- Nichtlineares Problem
  - Große Deformationen
  - Dynamik
  - Kontakt
  - Modellierung des Fluides
  - Dämpfung

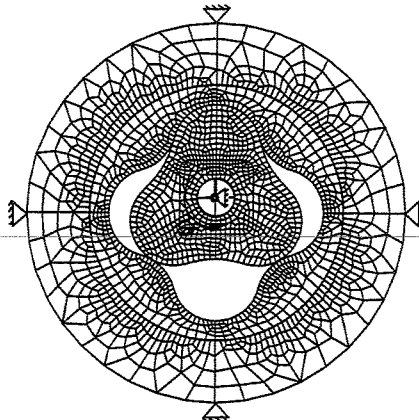
Komplexes  
System

- Baukasten



- Innenrotor
- Aussenrotor
- Gehäuse

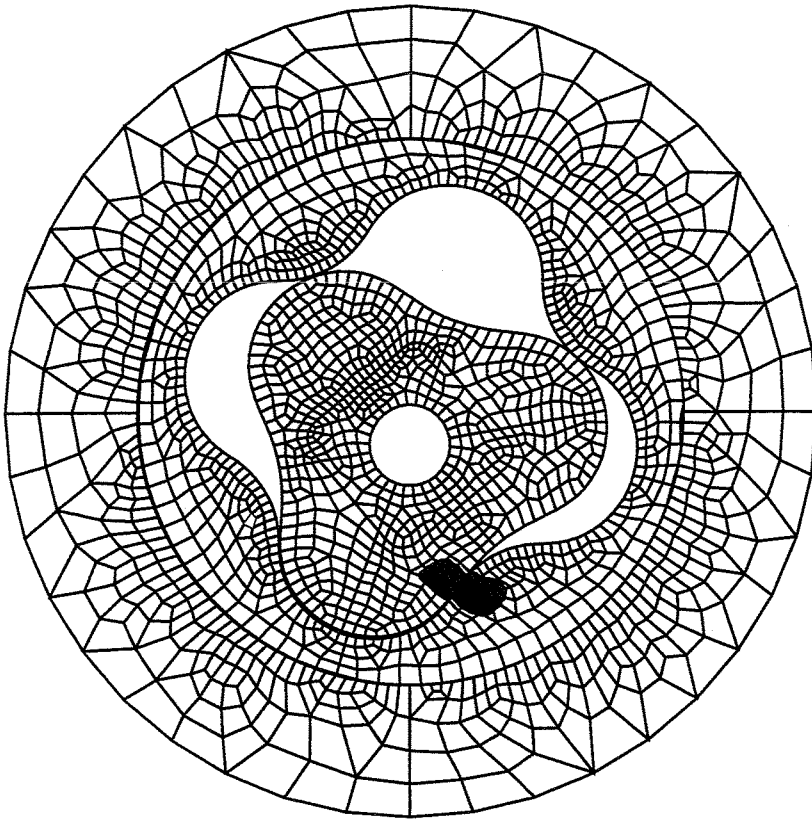
- Netz



Ziel:

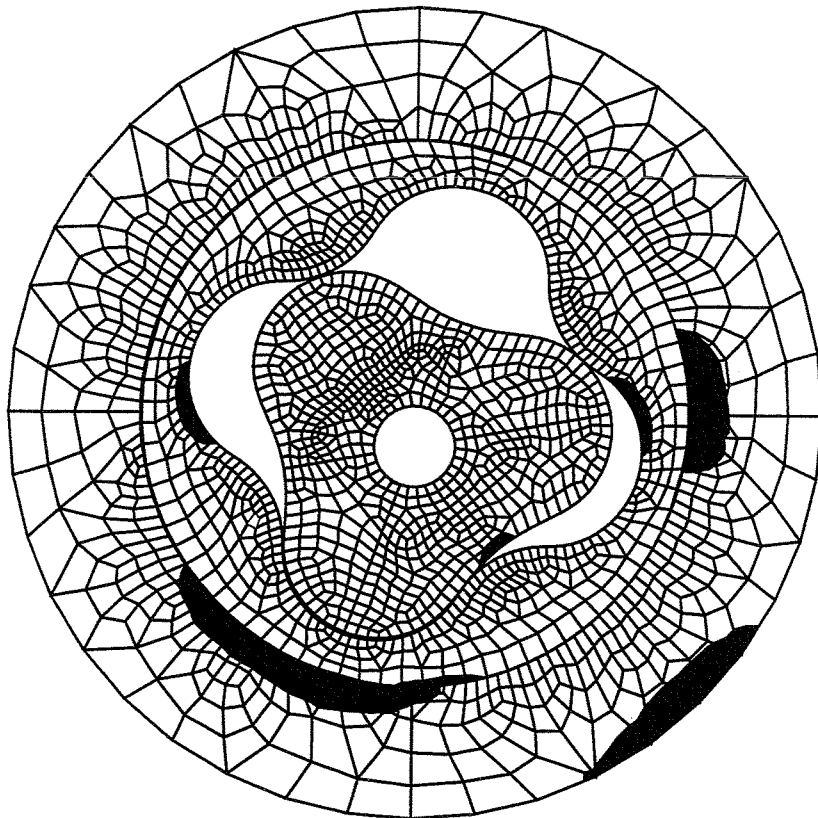
Bestimmung von  
Parametern  
für die Auslegung





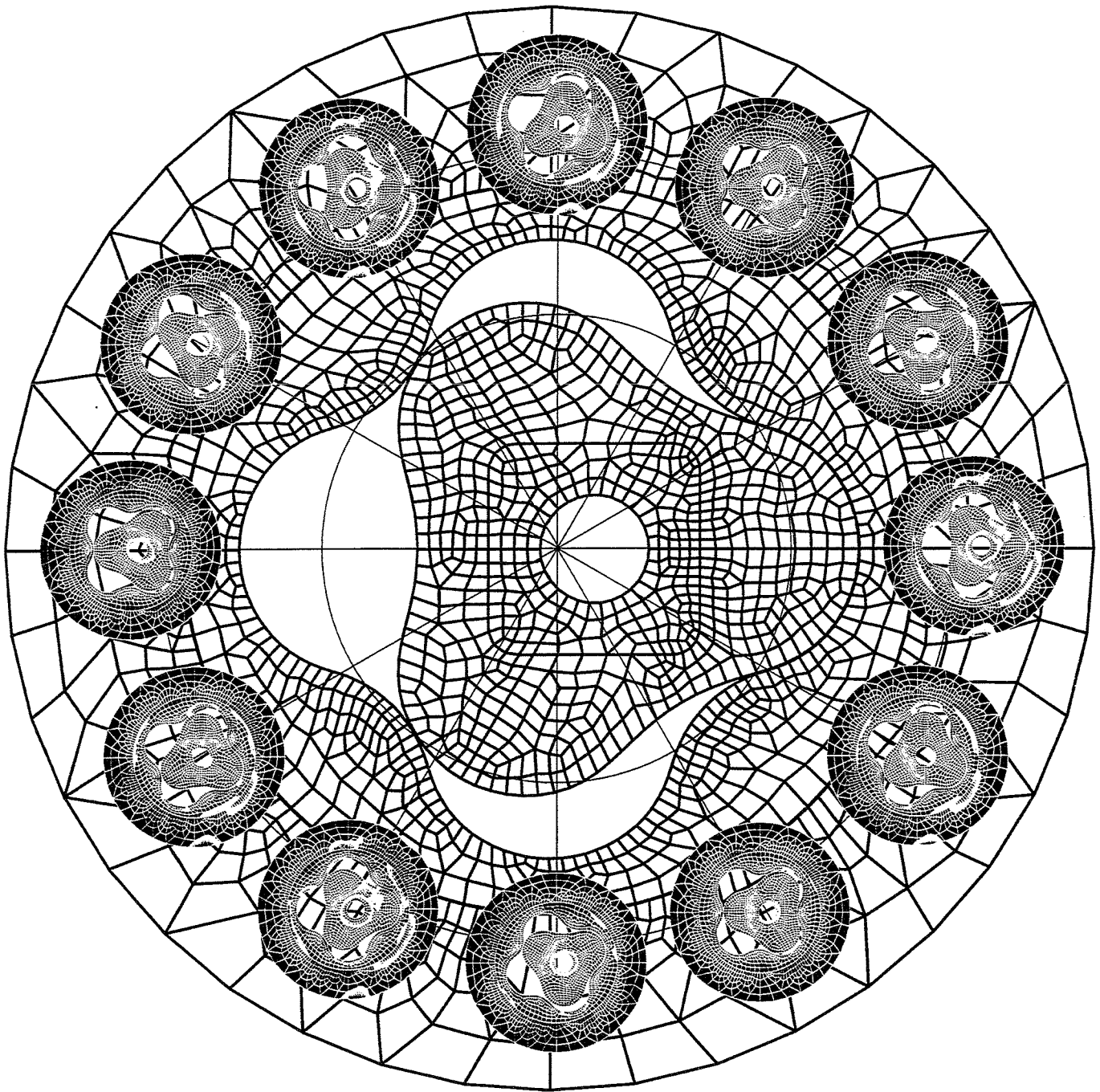
→ maximale Druckspannungen  $\approx 800 \text{ MPa}$

↗ bestimmt Verschleiß



⇒ maximale Zugspannungen  $\approx 190 \text{ MPa}$

↷ bestimmen zyklische Ermüdung

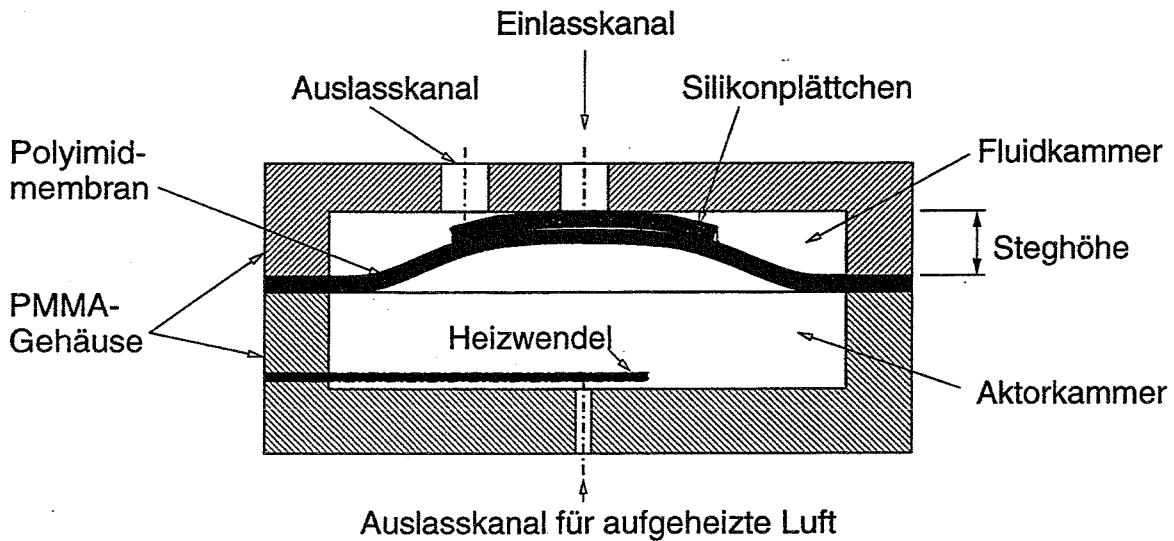


Darstellung der Spannungsverteilung für  
verschiedene Winkel!

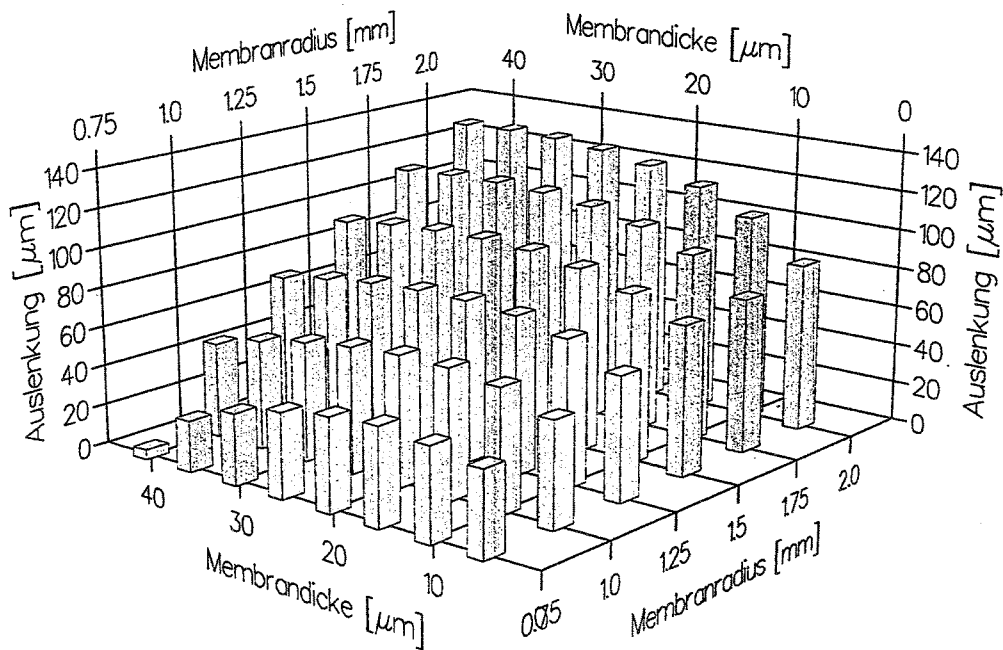
rot → gelb  
blau → grün

Zug } Spannungen  
Druck }

## 4. Berechnung eines Schaltventils



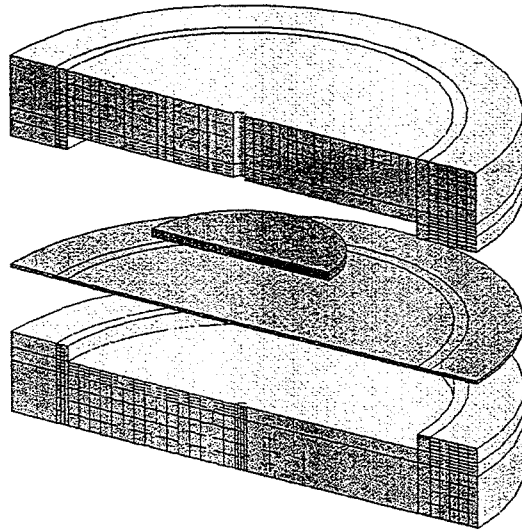
*Skizze des Ventils mit bistabiler Membran*



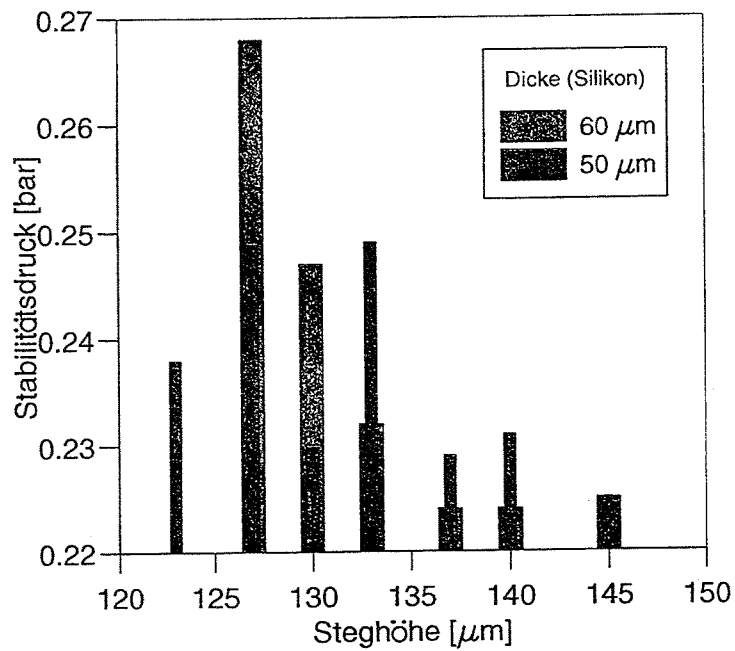
*Designparameter für die Einstellung der Auslenkung berechnet mit Schalenelementen*

⇒ Geometrisches Design  
Vielzahl möglicher Kombinationen

# Berechnung des kritischen Drucks

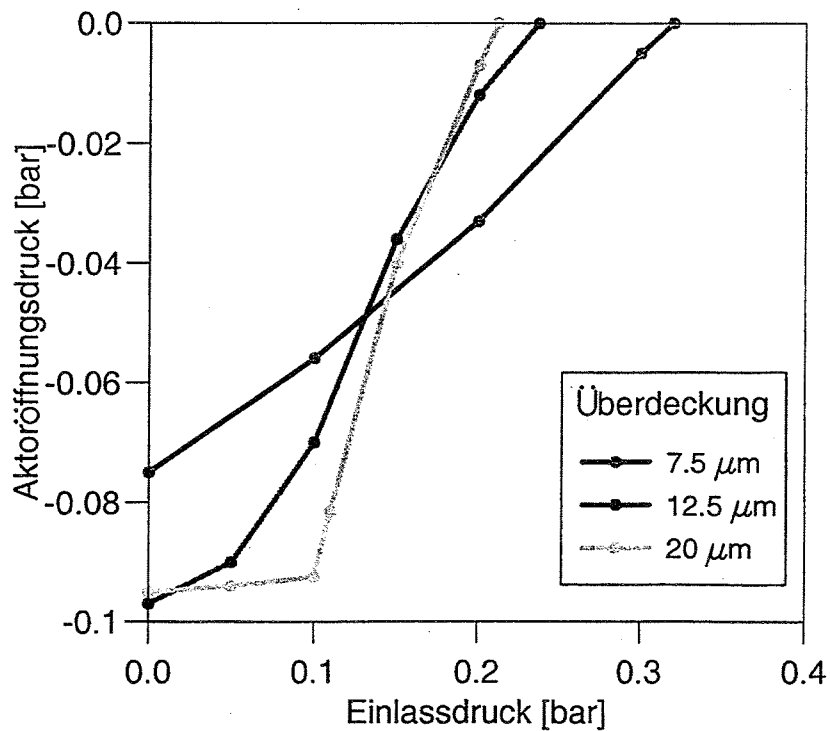
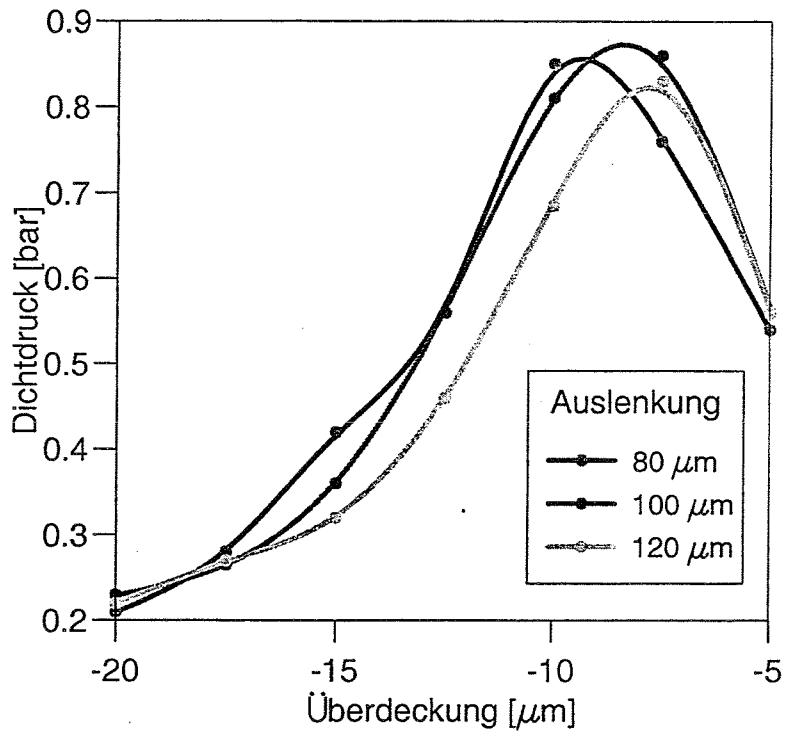


*Explosionszeichnung des Modells  
mit axialsymmetrischen 2D-Solid-Elementen*



*Kritischer Druck in Abhängigkeit der Steghöhe*

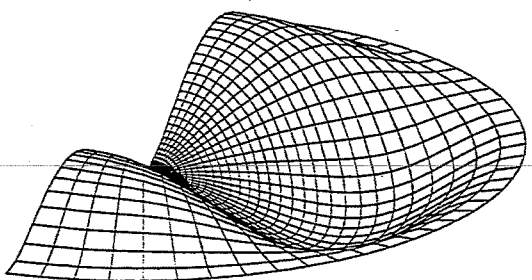
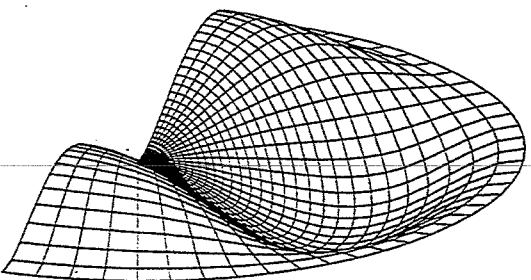
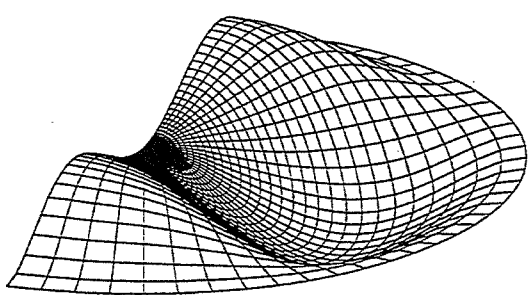
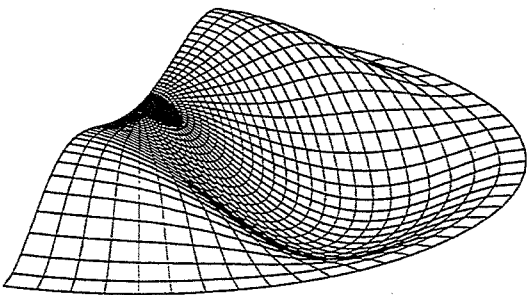
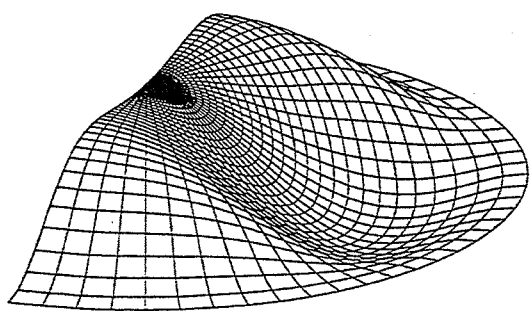
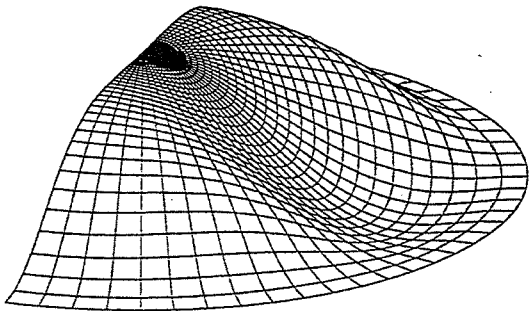
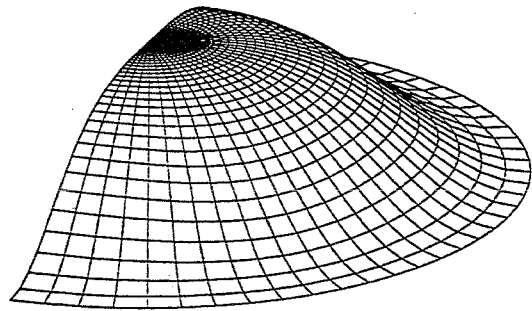
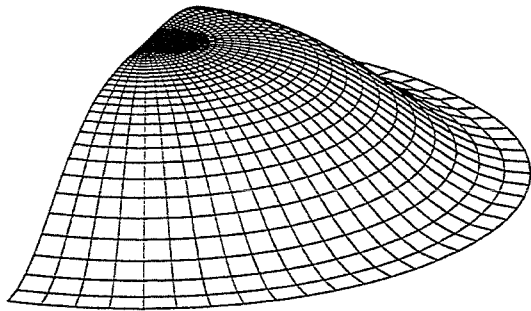
## Ergebnisse für ideale Membran (2D)



⇒ Optimierung der Betriebsbedingungen  
z.B. (maximal möglicher Dichtdruck)

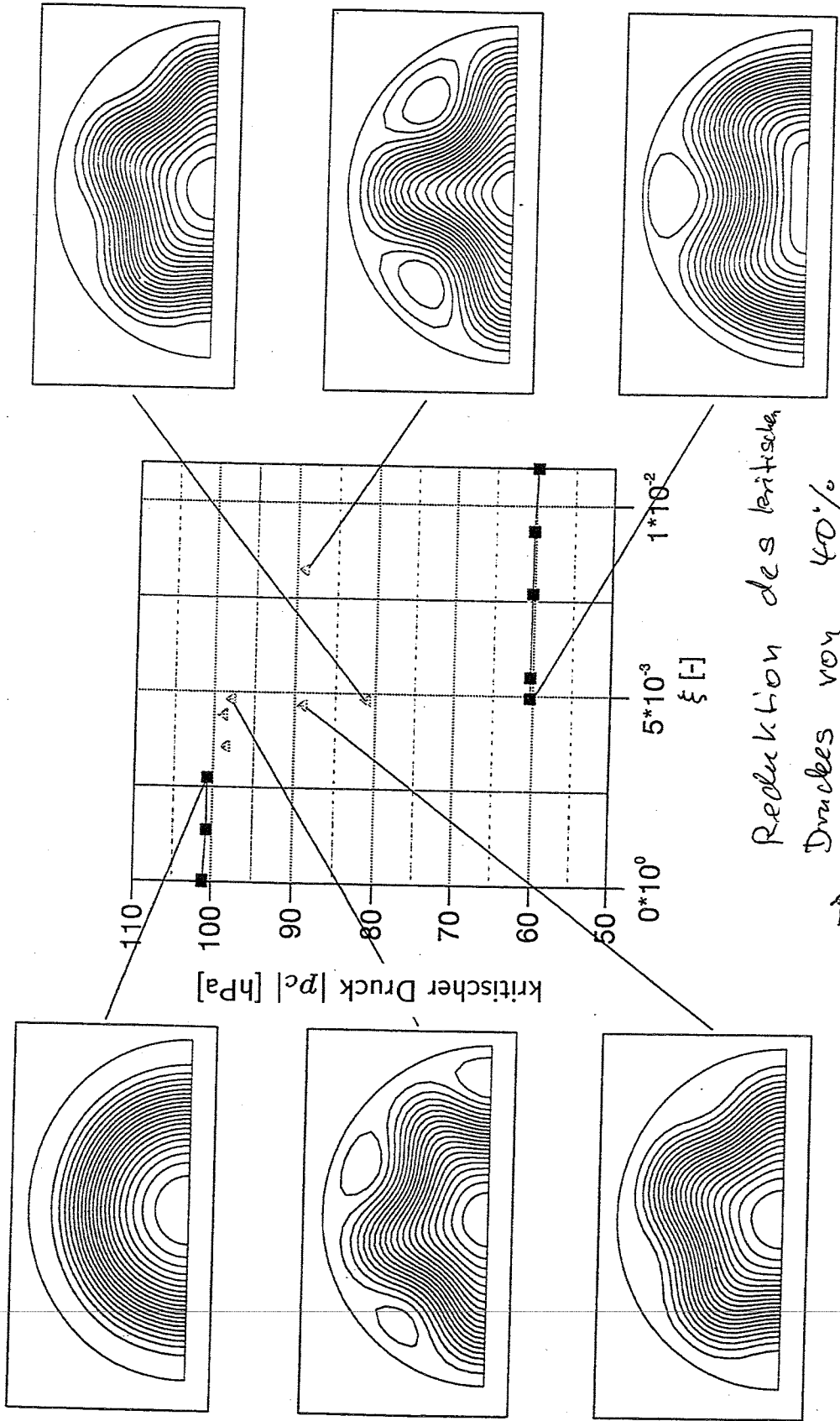
## Verformungsverhalten der imperfekten Membran

durch Variation des Materialparameter oder  
geringe Abweichung von nomineller Dicke:



# Schaltdruck für Membran mit Imperfektion (3D)

$$\xi = \frac{E - E_i}{E}$$



Reduktion des kritischen Druckes von 40% durch geringste Imperfektion (0.5%).

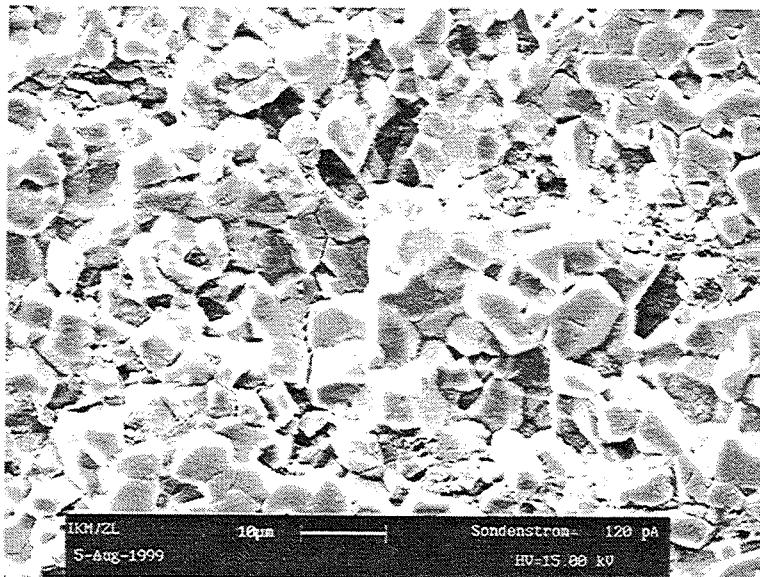


## Mikromechanische Modellierung

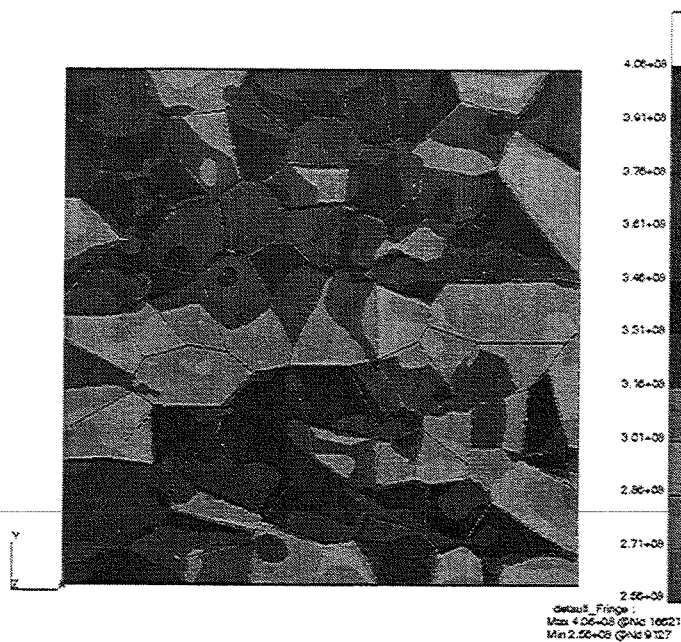
- Charakteristisch für (metallische) Mikrostrukturen
  - wenige Körner
  - statistische Verteilung von Größe, Orientierung und Materialkennwerten (z.B E-modul)
- Stochastische Modellierung
  - Geometrische Zerlegung (Voronoi-Mosaik) bildet die Mikrostruktur ab
  - Verteilung der Materialkennwerte
- Ziel
  - Bild von der lokalen Verteilung der Belastung (z.B. Spannungen) und der Verformung
  - Aussagen über die Verteilung der Bauteilantwort

# Mikromechanische Modellierung

5

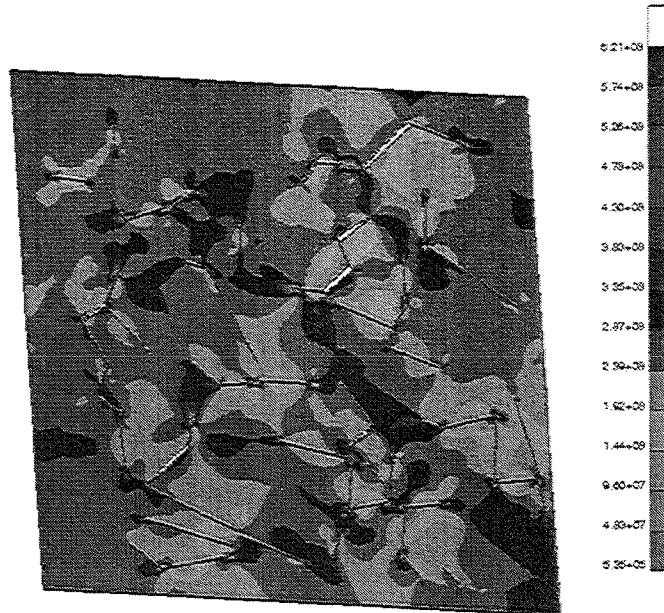


Schliffbild (Al-oxid)

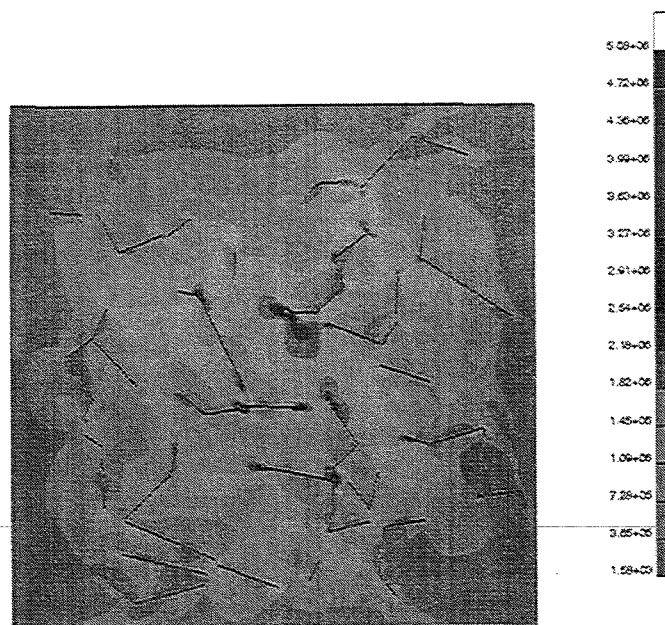


FE-Modell mit lokaler Spannungsverteilung  
(Vergleichsspannung)

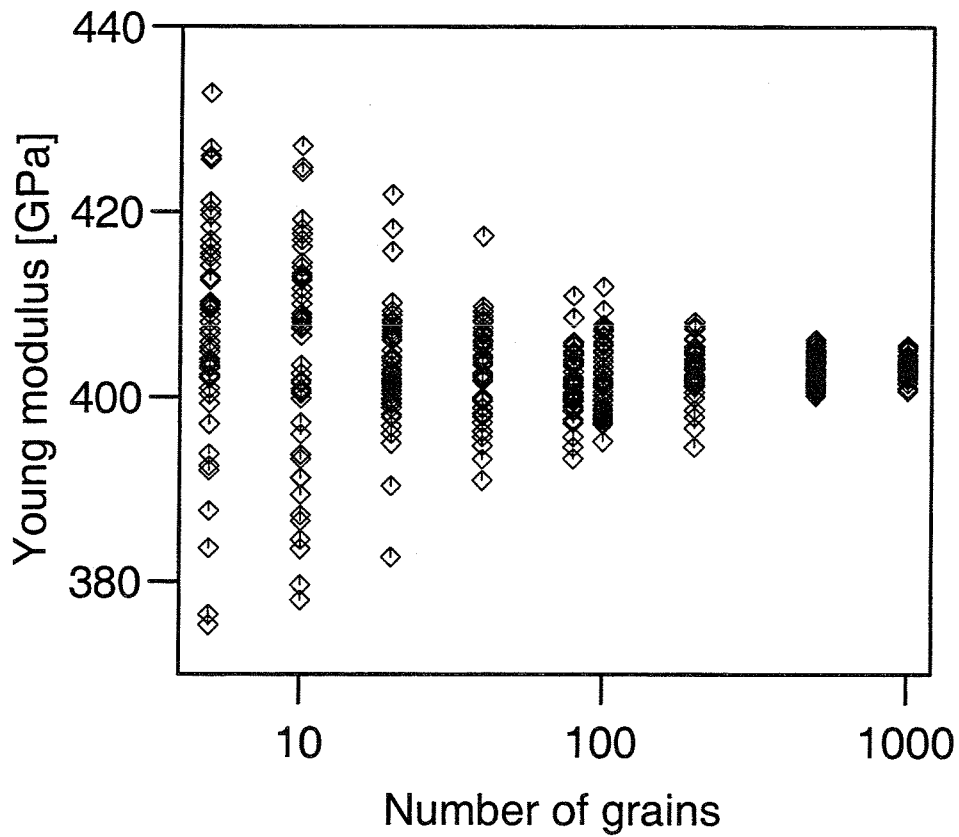
## Modell mit Vorschädigung



## Spannungsverteilung unter Belastung



## Eigenspannungen nach Entlastung



- ↘ Je geringer die Anzahl der Körner desto größer die Streuung von Bauteil zu Bauteil  
 ↘ Probabilistische Auslegung nötig.

# Zusammenfassung

- FE Simulationen  
sind ein wertvolles Werkzeug für die Auslegung von Mikrokomponenten
  - Reduktion des Entwicklungsaufwandes
  - Prüfung der Funktionalität
  - Optimierung (bezgl. Lebensdauer oder Betriebsbedingungen)
- ermöglichen die Berücksichtigung von
  - großen Deformationen
  - Dynamik
  - Kontakt u. Reibung
  - Instabilitäten (Beulen und Knicken)
- haben weiteres Potential in der Forschung
  - Berücksichtigung der Mikrostruktur
  - Entwicklung von Materialmodellen für Kunststoffe
  - Berücksichtigung von Oberflächeneffekten



# **Finite-Elemente-Modellierung des Großsignal- Hysterese Verhaltens von Piezokeramiken**

M. Kamlah, Institut für Materialforschung (IMF II)

Piezokeramiken besitzen zwar ein grosses Anwendungspotential in Sensorik und Aktorik, aber es fehlt noch an Methoden zur Untersuchung ihrer Zuverlaessigkeit, z.B. Spannungsanalyse. Die mechanischen Spannungen haengen naemlich entscheidend von den komplizierten Hysterese-Eigenschaften piezokeramischer Materialien ab. Wir stellen typische Hysterese-Phaenomene vor und ein einfaches Stoffgesetz hierfuer. Die Anwendung von dessen Finite-Elemente-Implementierung auf einige typische Beispiele einige diskutiert.





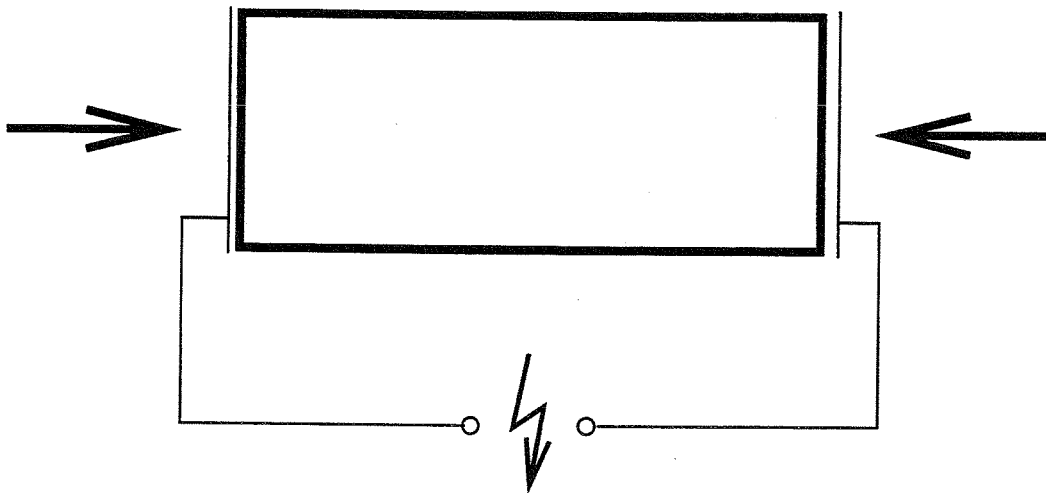
**Finite-Elemente-Modellierung  
des Großsignal-Hysterese-Verhaltens  
von Piezokeramiken**

Marc Kamlah

- Motivation
- Piezokeramiken
- Stoffgesetz
- Stapelaktuator
- 1-3 Komposit
- teilelektrodisierte Proben

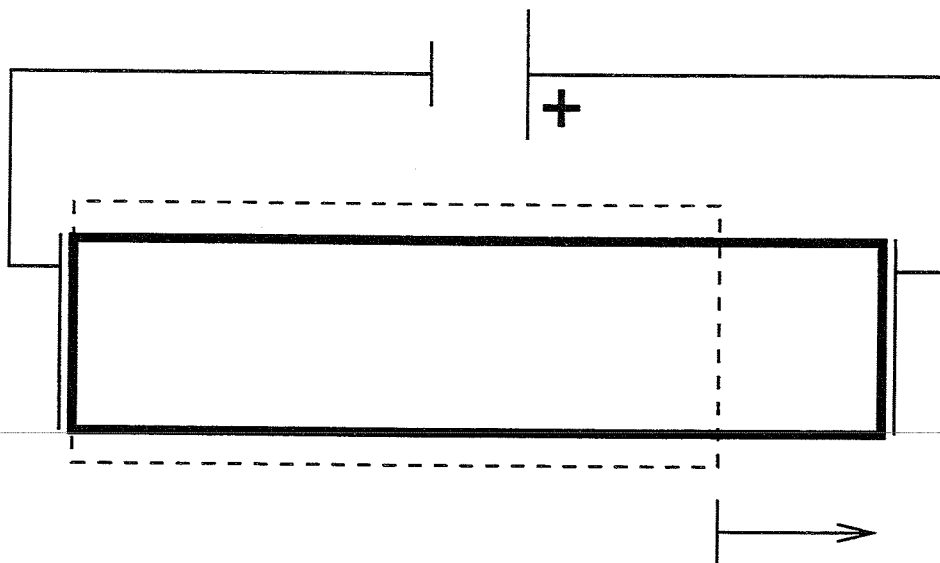
## piezoelectricity

- Pierre and Jaques Curie, 1880
- direct piezoelectric effect



→ sensor applications

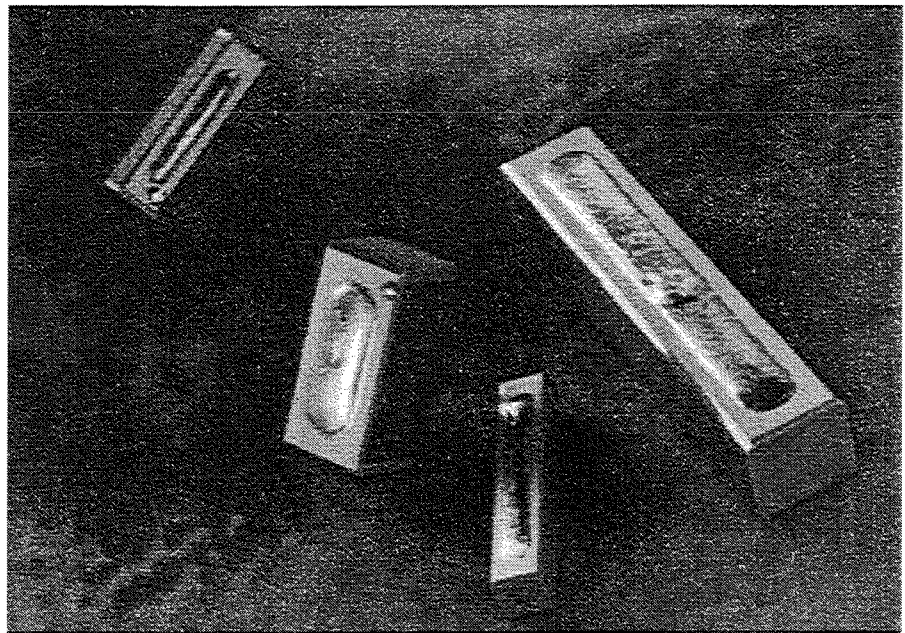
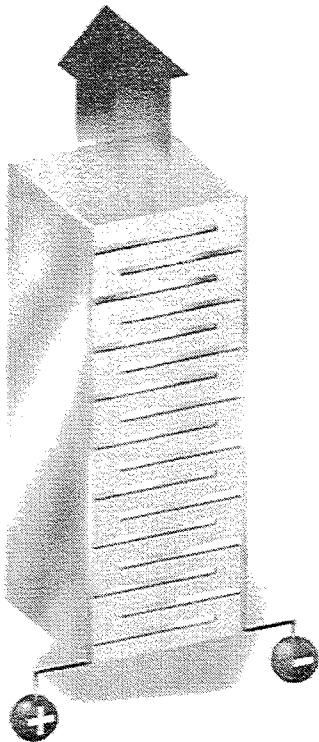
- inverse piezoelectric effect



→ actuator applications

## piezoelectricity

- multilayer actuator

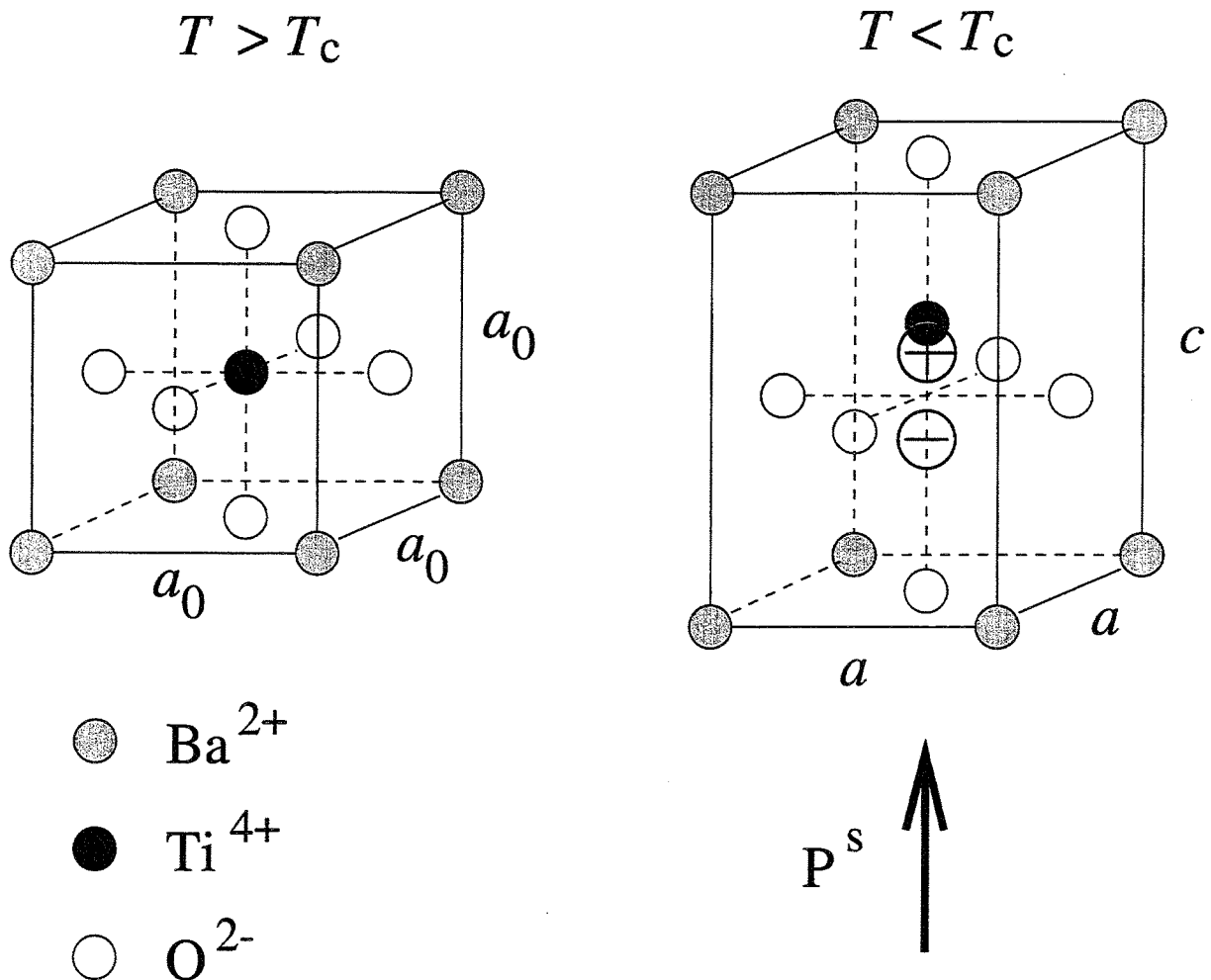


- large forces
- high precision positioning
- short response times
- fuel injection for diesel engines:  
minimisation of noise and harmful exhaust  
by precisely controlled injection cycles

microscopic mechanisms

piezoceramic materials

- $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ : PZT
- paraelectric-ferroelectric phase transition



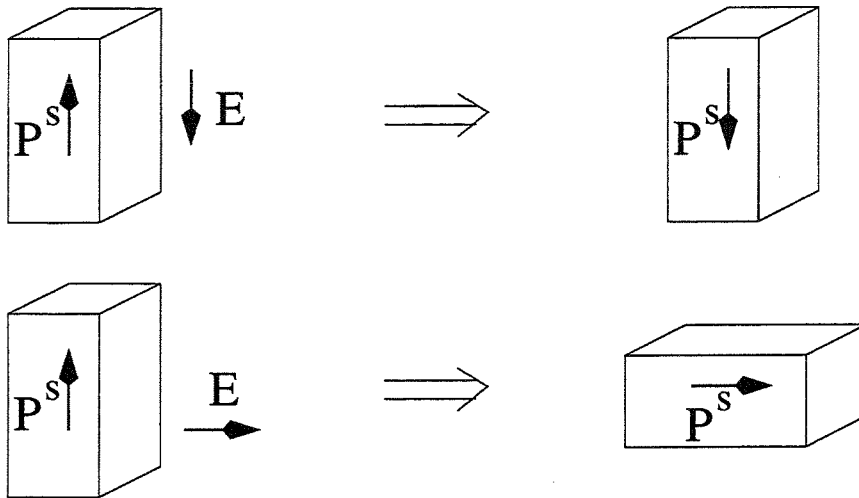
$$\frac{c - a_0}{a_0} \approx 0.5 \dots 1.0\%$$

→ spontaneous polarization and spontaneous strain

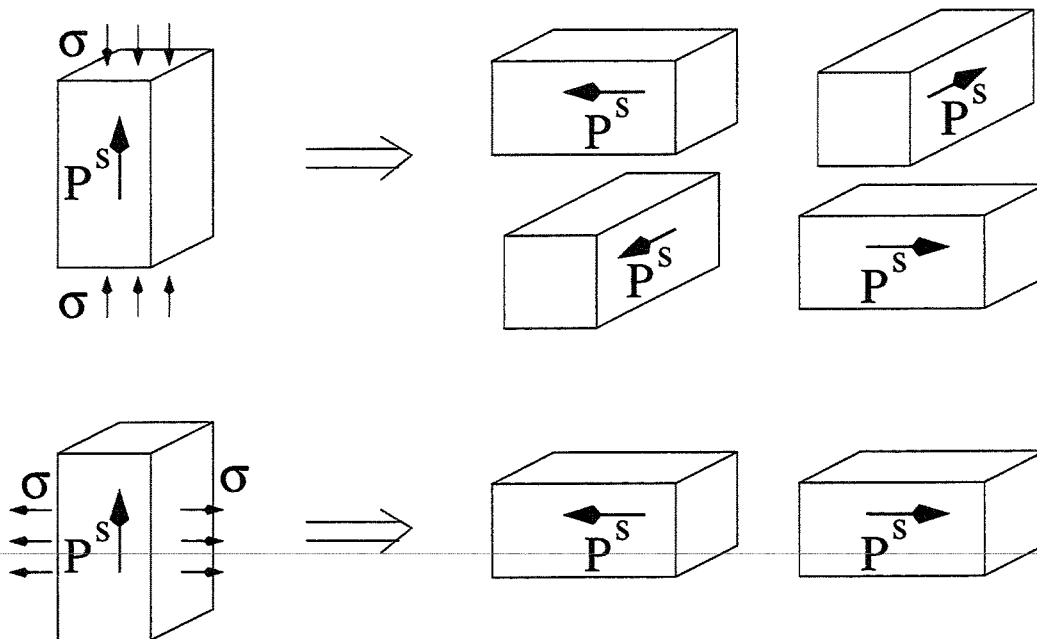
microscopic mechanisms

- switching

$|E| > E_c$ : ferroelectricity



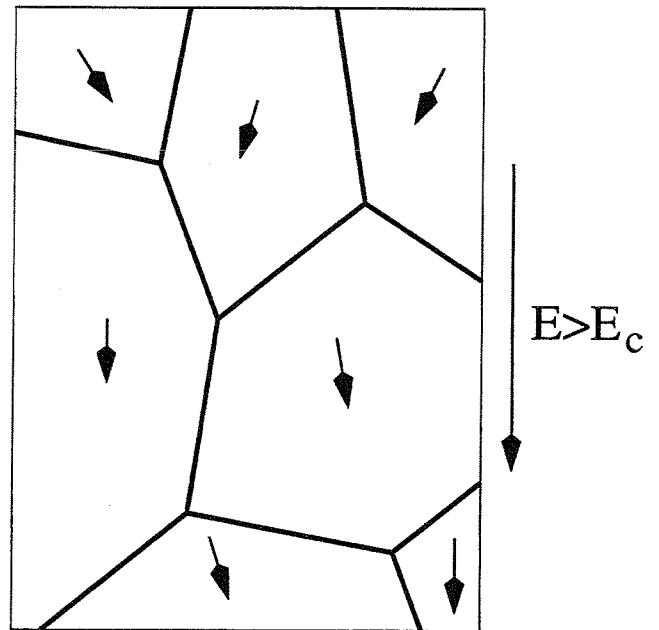
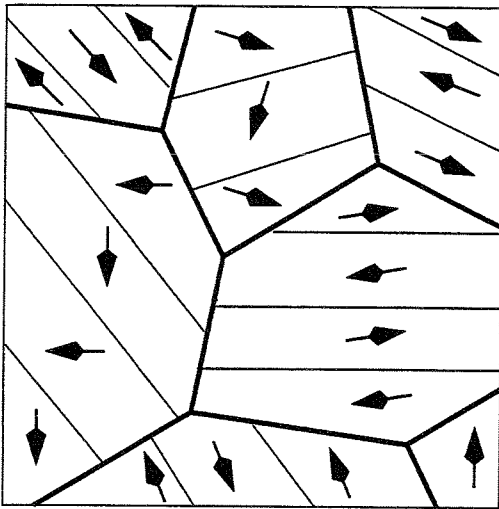
$|\sigma| > \sigma_c$ : ferroelasticity



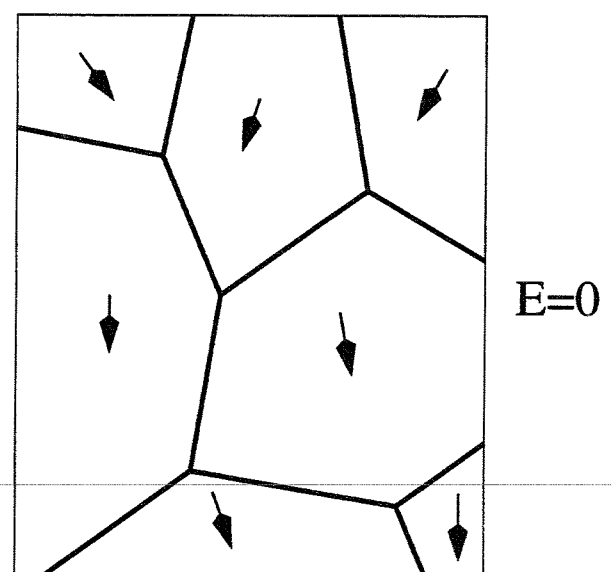
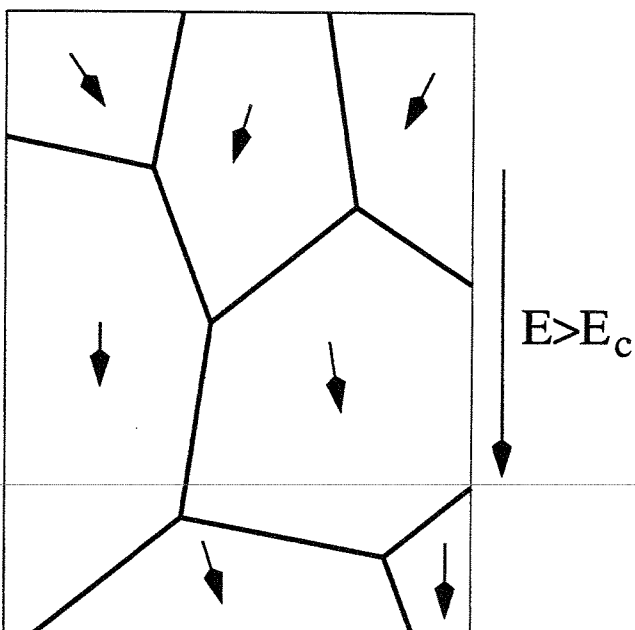
→ limits of linear behavior: large signal range

microscopic mechanisms

- poling



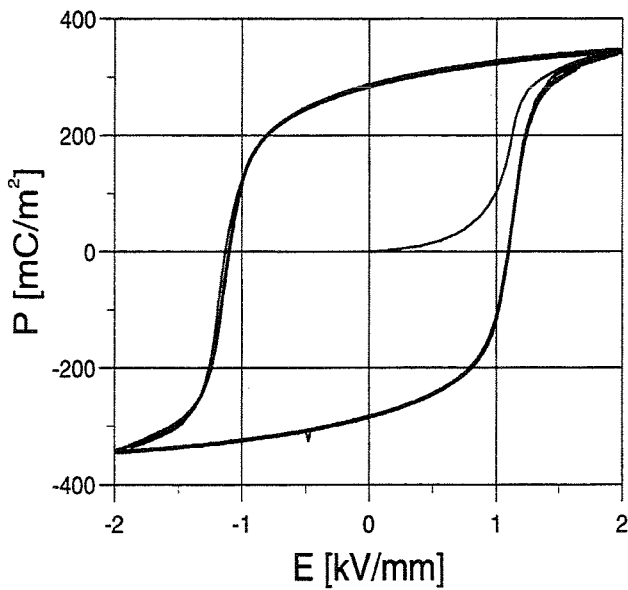
- piezoelectric unloading



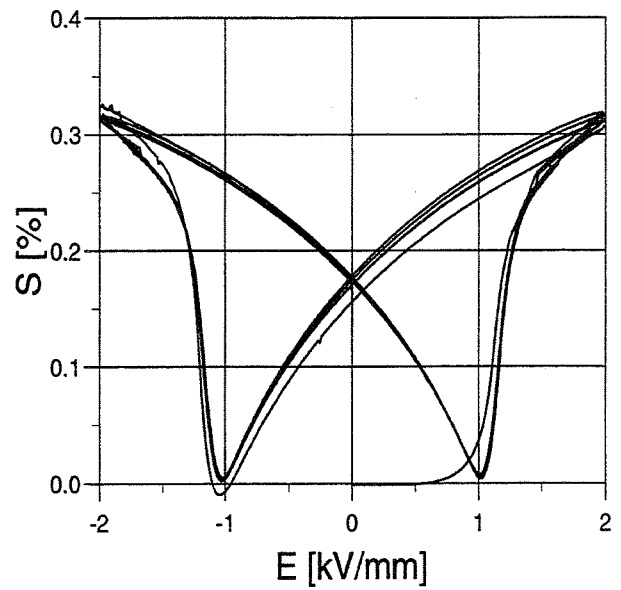
phenomena

- ferroelectric piezoceramics: domain switching

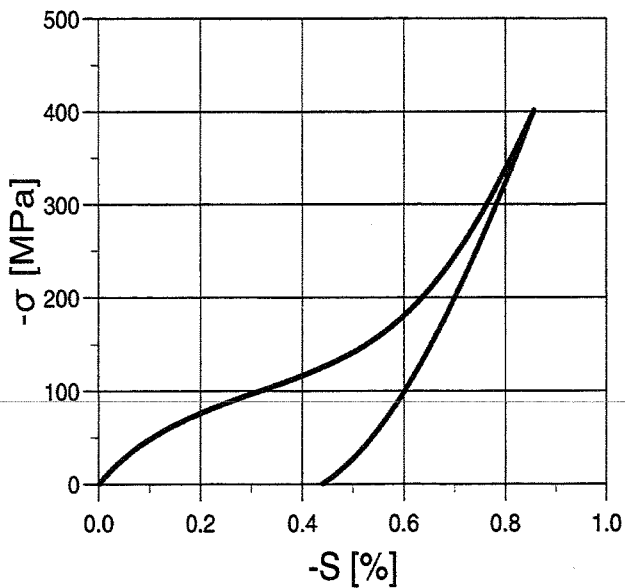
dielectric hysteresis



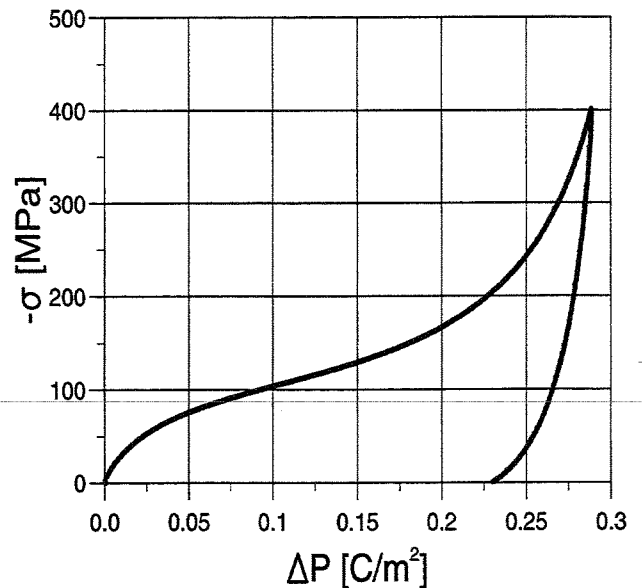
butterfly hysteresis



ferroelastic hysteresis



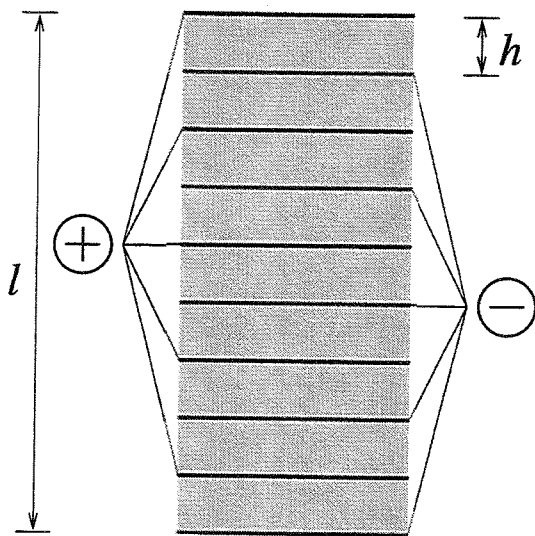
mechanical depolarization



motivation

**multilayer actuators**

- stack principel



$$\Delta l = S l$$

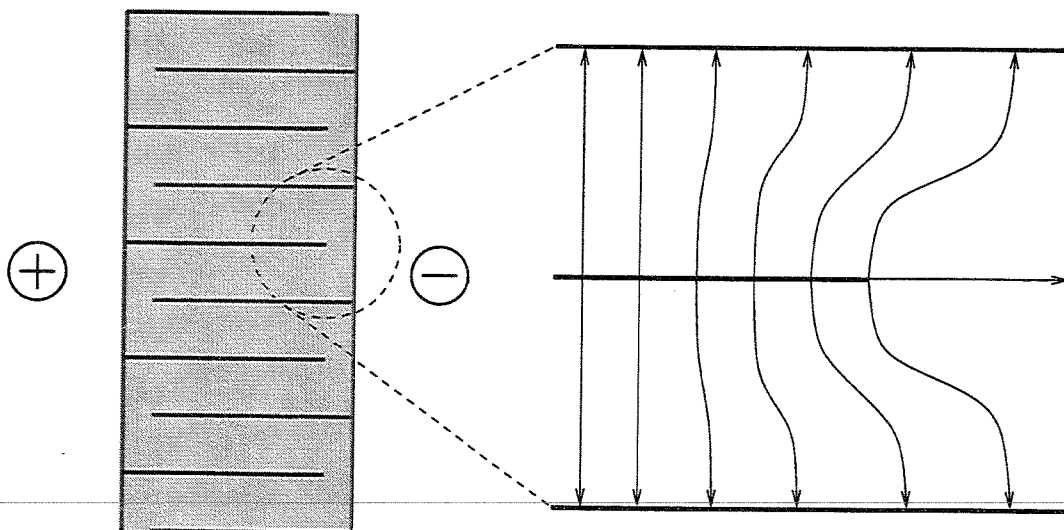
$$S = d E$$

$$E = \varphi / h$$

$$\Rightarrow \Delta l = d \varphi \frac{l}{h}$$

$$h \approx 100 \mu\text{m}$$

- electric connection



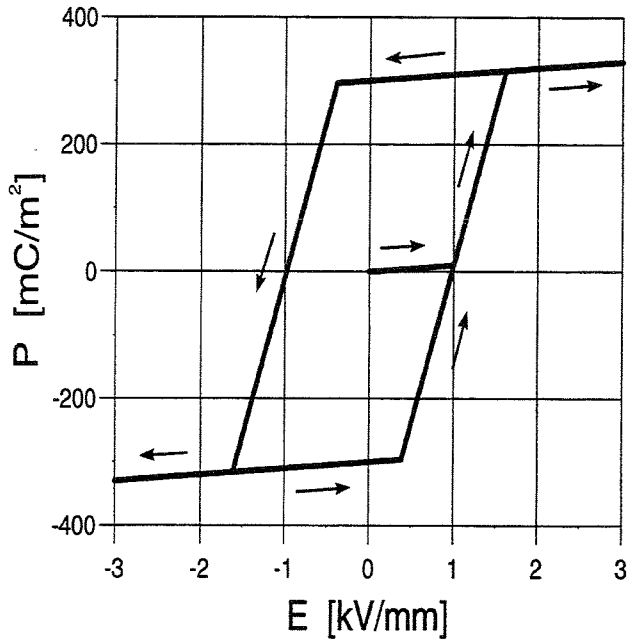
→ critical areas: poling cracks

- objective: nonlinear stress analysis

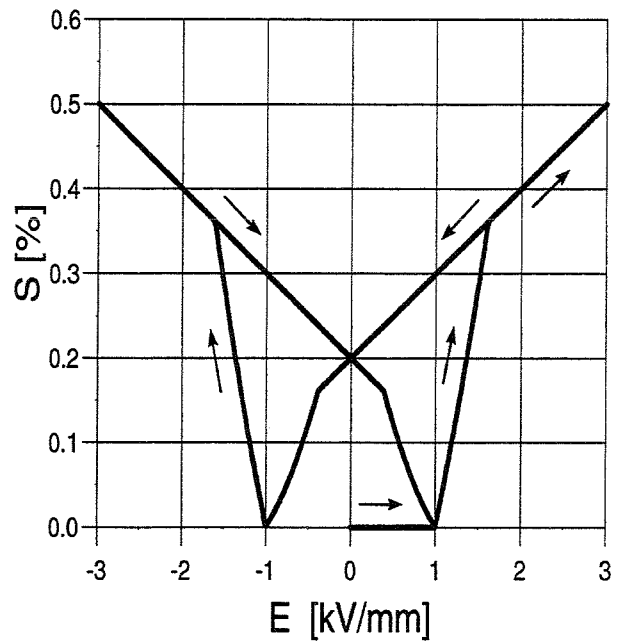


constitutive law

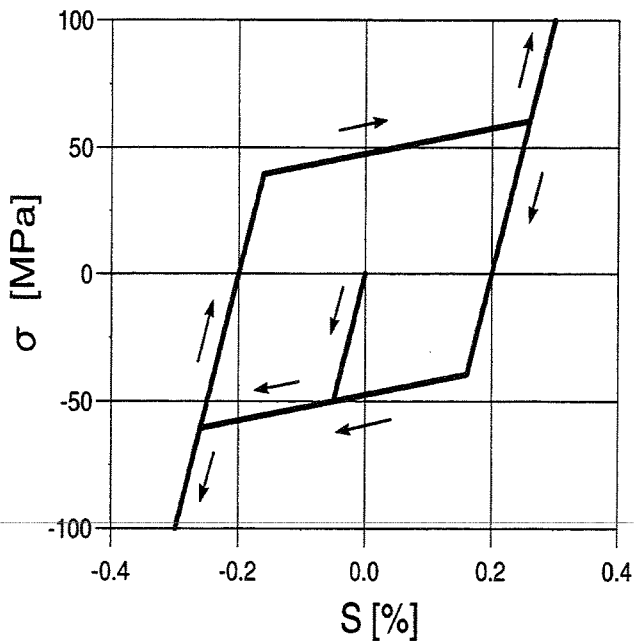
dielectric hysteresis



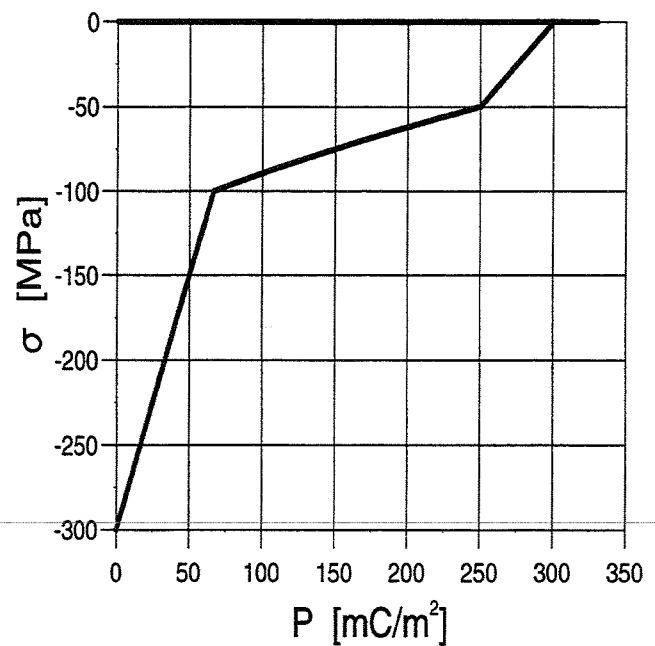
butterfly hysteresis



ferroelastic hysteresis



mechanical depolarization

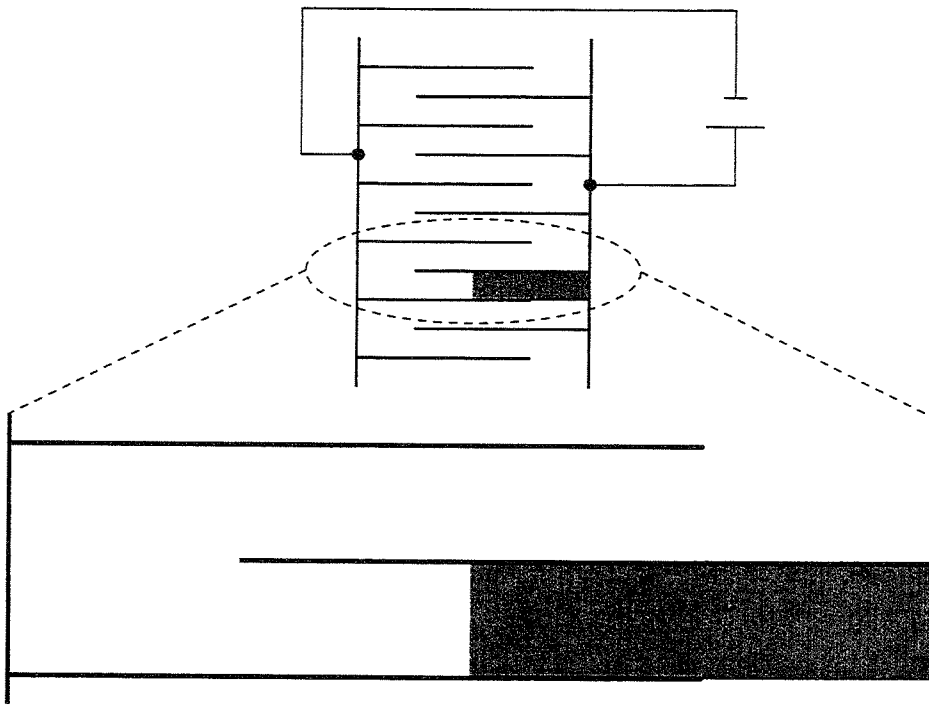


→ implementation of the 3D formulation in PSU

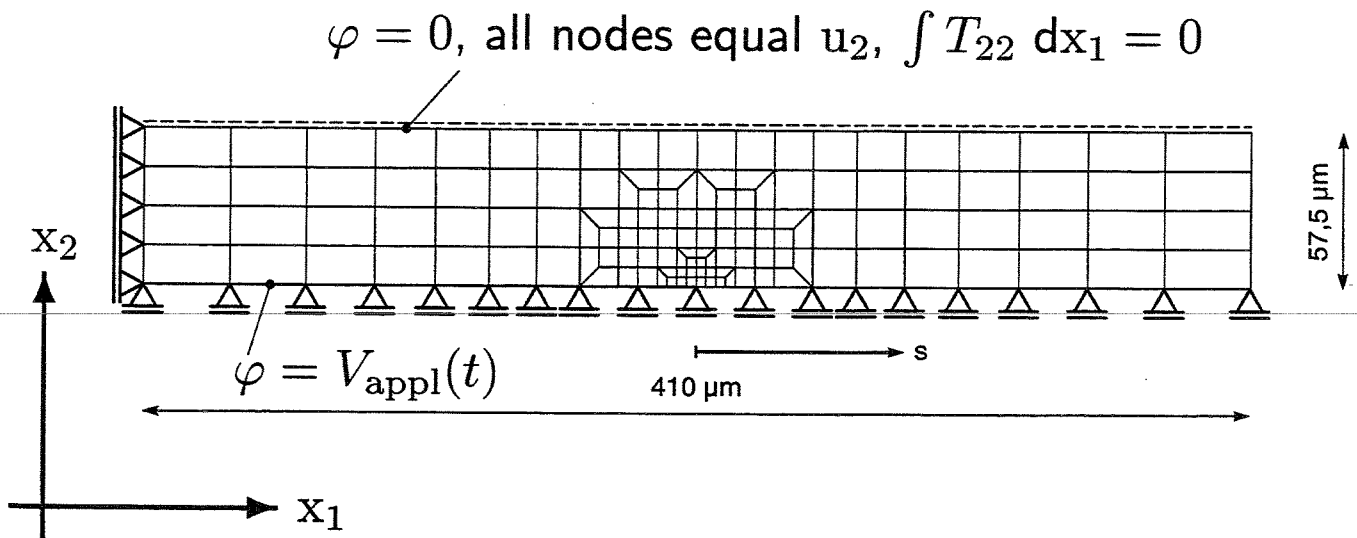
multilayer stack actuator

residual stresses induced by the poling process

- exploitation of symmetries



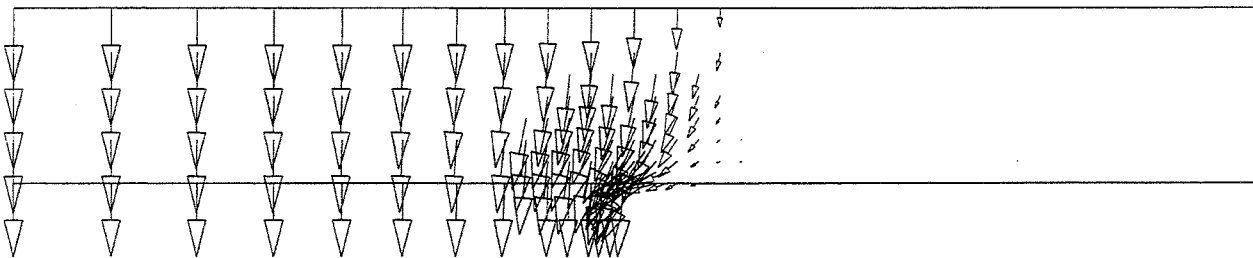
- finite element model, plane strain



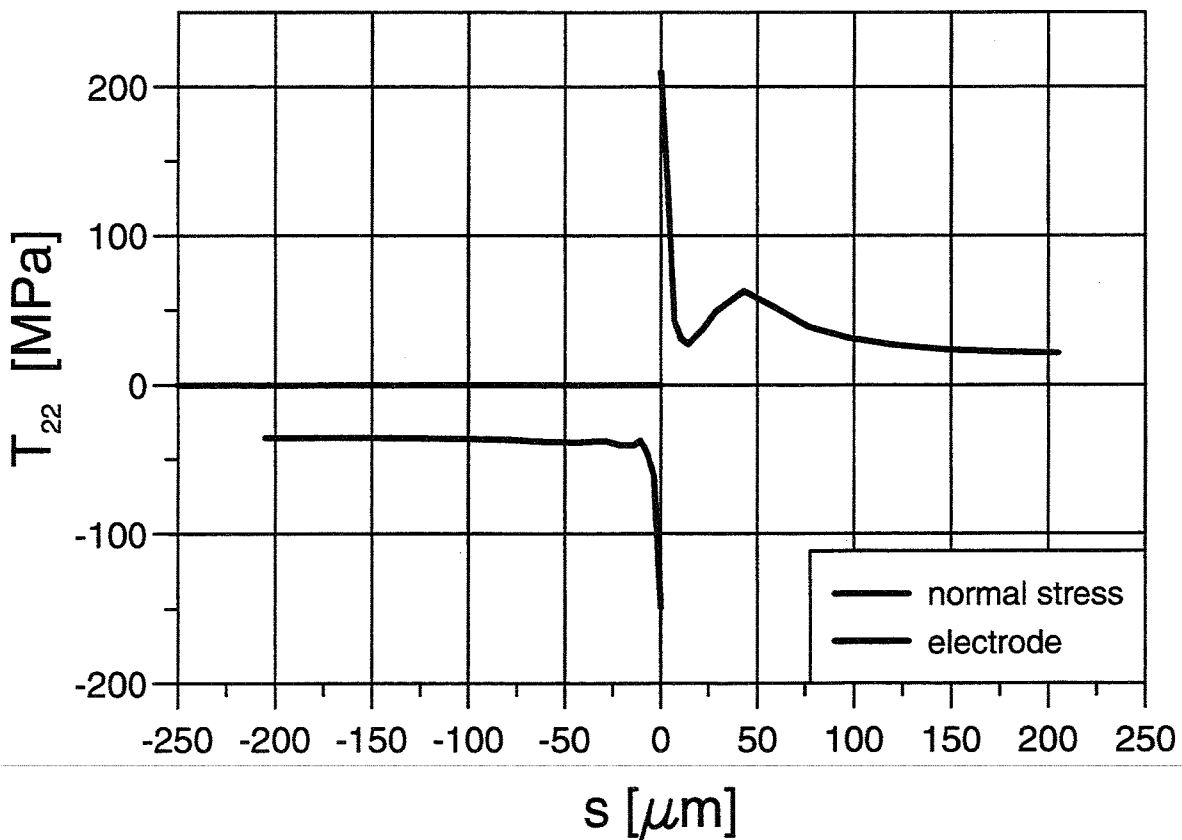
multilayer stack actuator

electro-mechanical analysis

- irreversible polarization



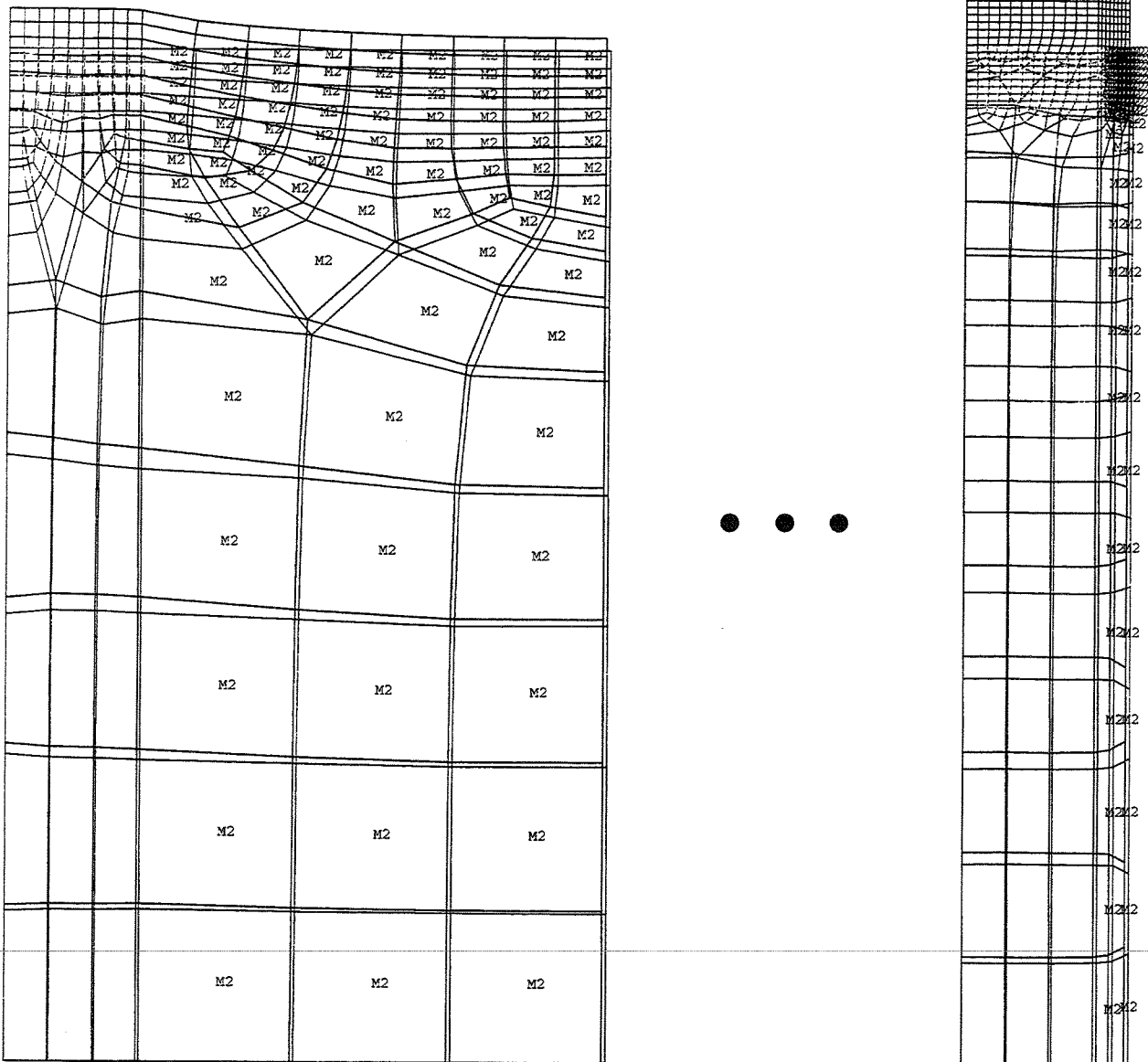
- residual stresses normal to the electrode



→ influence of hysteresis phenomena on the poled state

## 1-3 composite

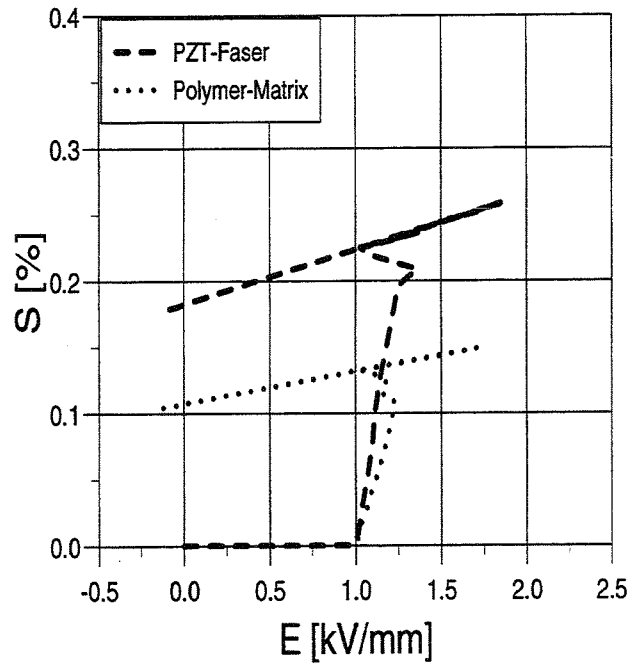
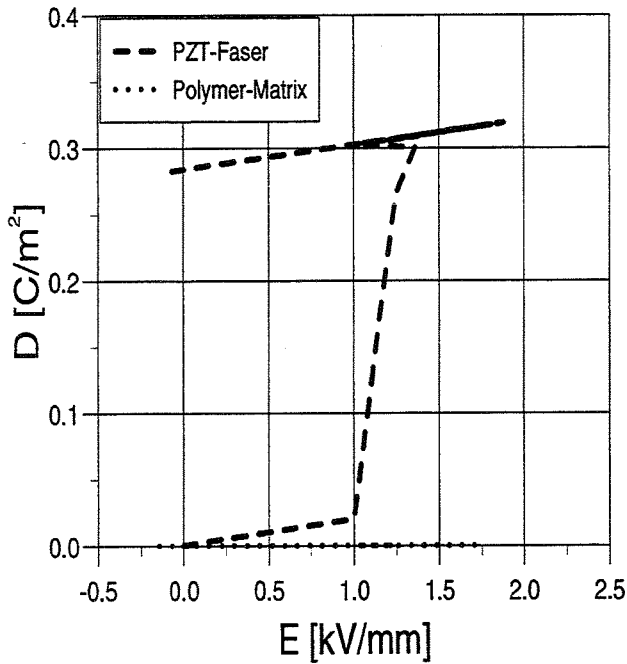
- Prof. Beige, Dr. Hauke, DP Steinhausen (Halle):  
1-3 composite PZT-Polymer
- volume fraction of PZT: 5%, 9%, 15%, 25%, 45%, 65%



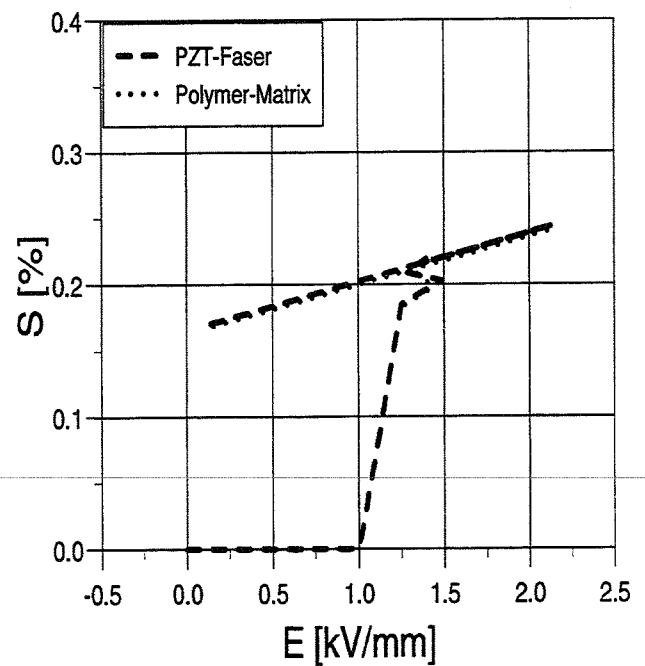
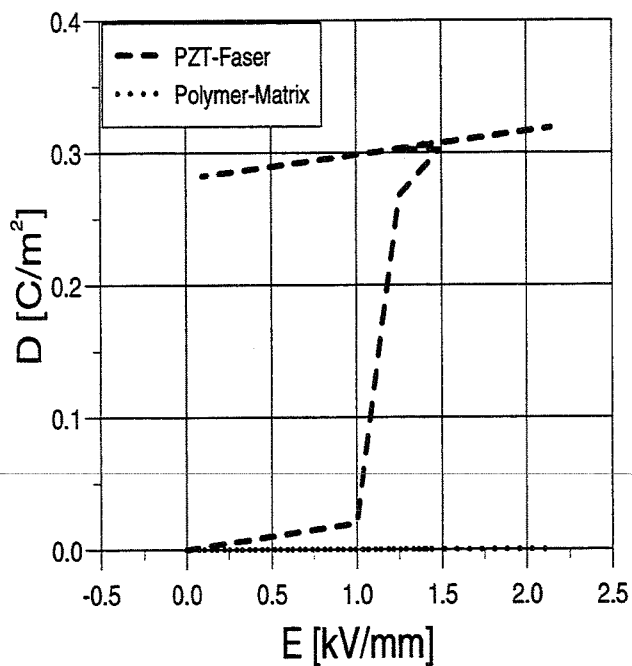
axisymmetric, deformation after unloading magnified 30 times

1-3 composite

- 25%, free surface ("top")

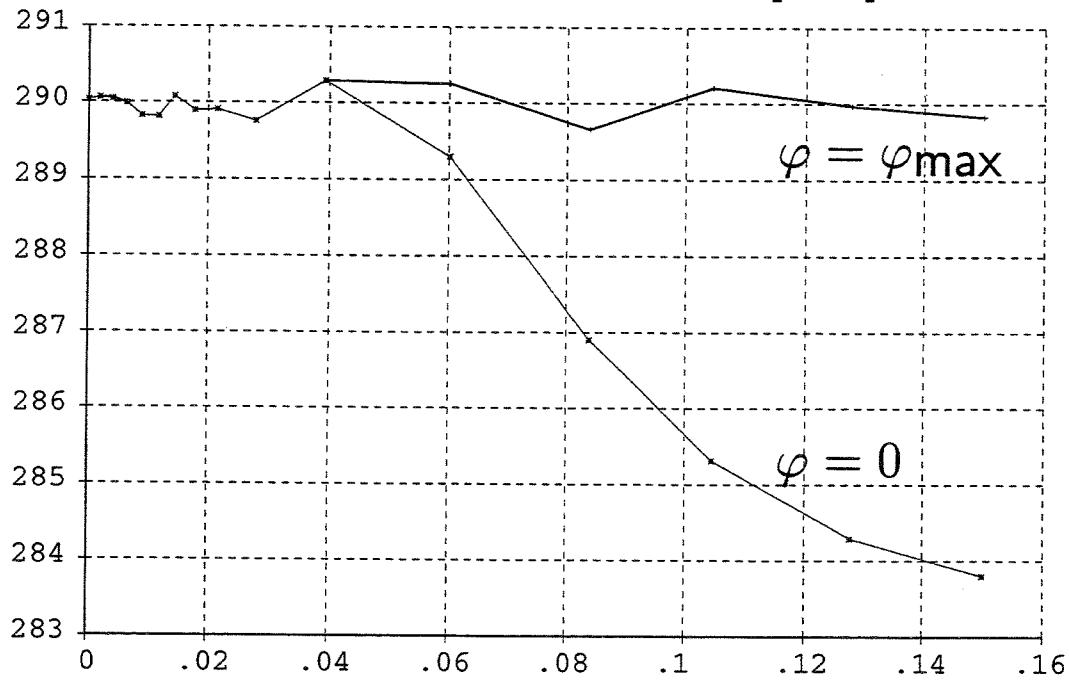


- 25%, interior region ("bottom")

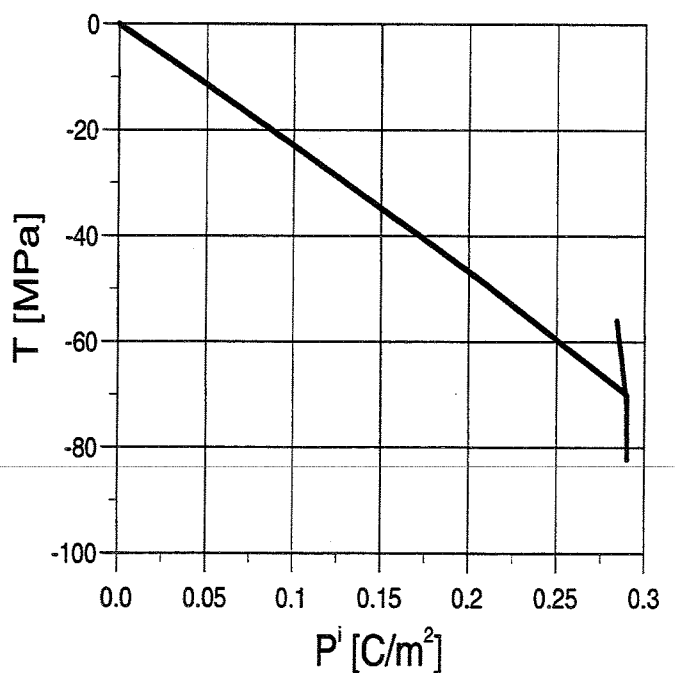
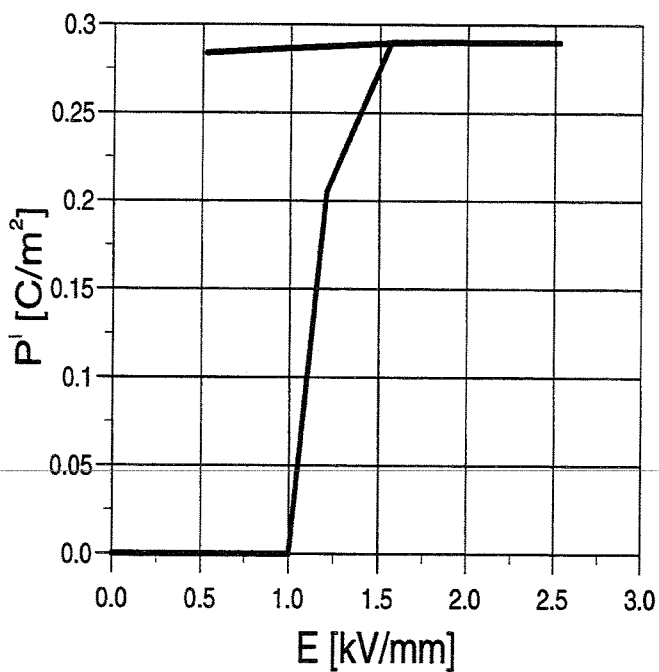


1-3 composite

- 5%,  $P^i$  [ $\text{mC}/\text{m}^2$ ] along axis of fiber [mm]

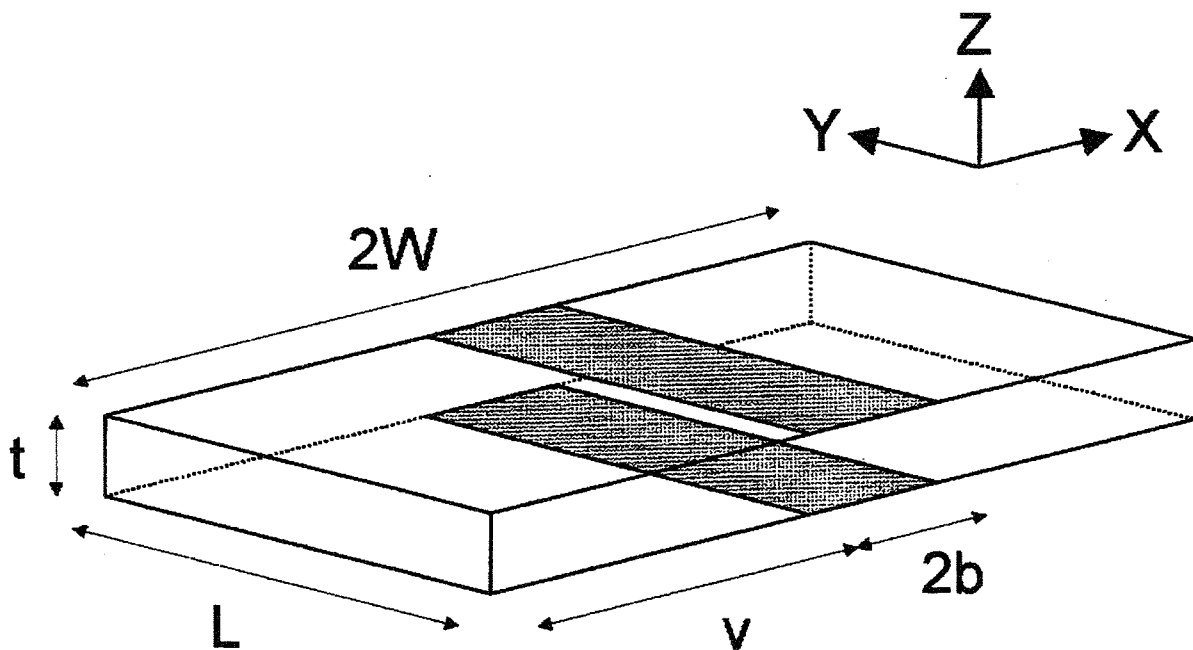


- mechanical depolarization during unloading,  $\sigma_c = 40 \text{ MPa}$



partly electroded specimen

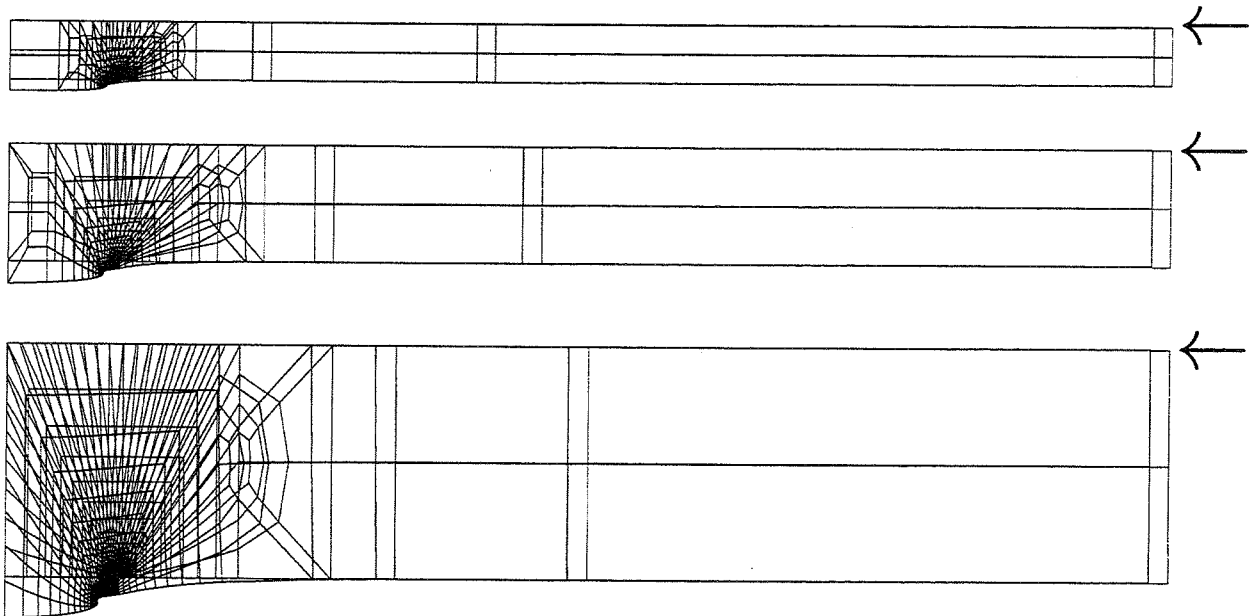
- Prof. Rödel, Dr. Lupascu, DI Lucato (Darmstadt):  
crack initiation and growth  
due to poling of piezoceramic components



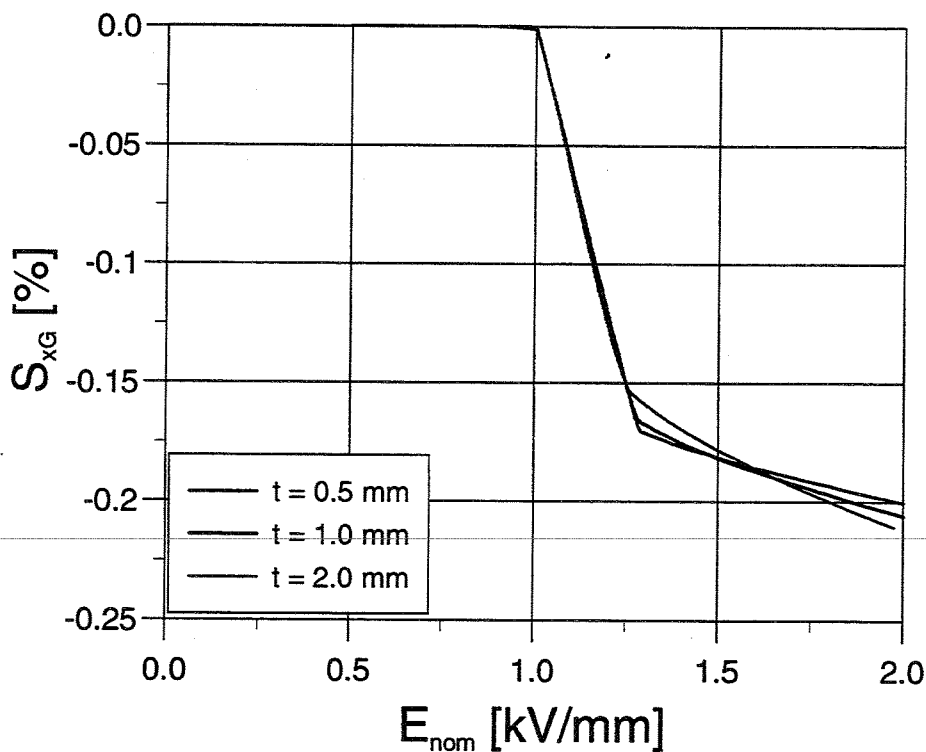
- polarized region, deformation, stresses
  - $b = 1.0$  mm,  $W = 5.0$  mm
  - $t = 0.5, 1.0, 2.0$  mm
  - PIC 151
  - $E_{\text{nom}} = 2.0$  kV/mm

partly electroded specimen

- deformation (80 times) at  $E_{\text{nom}} = 2.0 \text{ kV/mm}$



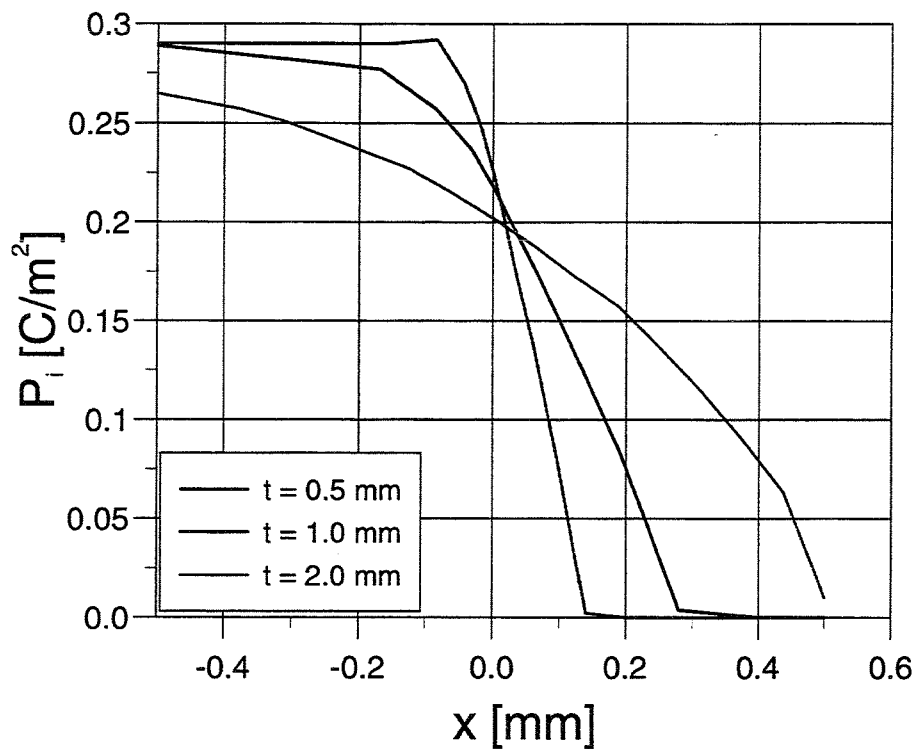
- global strain:  $S_{xG} = u_x/b$



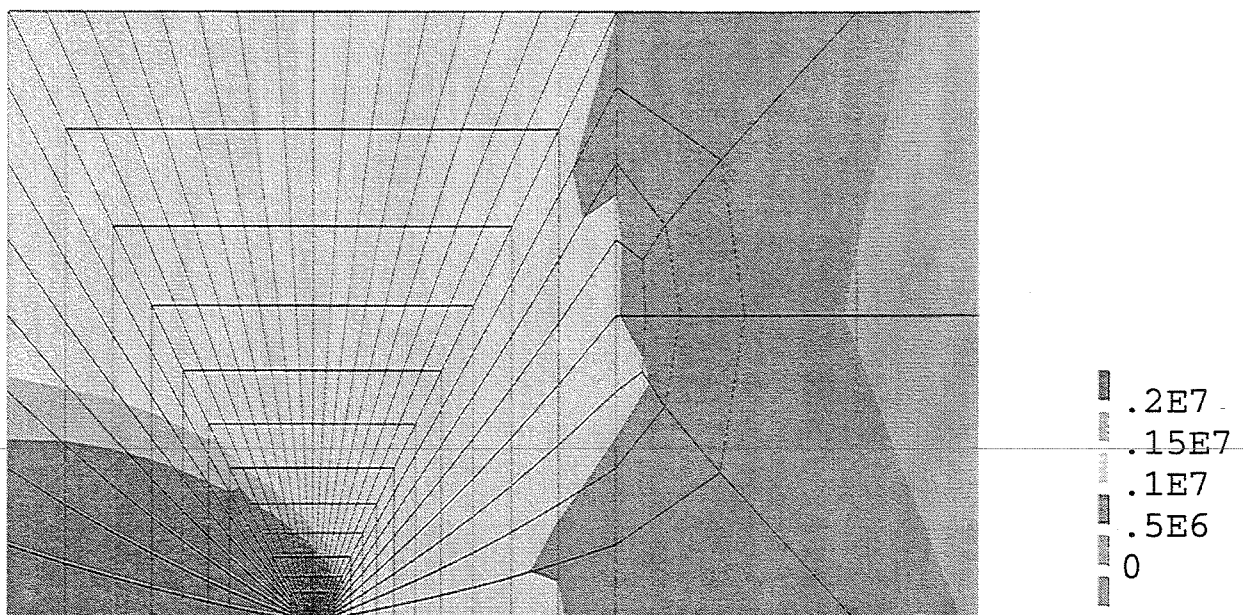


partly electroded specimen

- remanent polarization



- $E_{\text{lok}}$  bei  $E_{\text{nom}} = 2.0 \text{ kV/mm}$ ,  $t = 2.0 \text{ mm}$





# **Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinduktoren**

A. von der Weth, Institut für Materialforschung (IMF II)

Im Rahmen des MALVE A Projekt wurde ein neues Konzept für einen Hochleistungs-Mikroinductor (I-Inductor, hohe Güte im Bereich 0.1-4 GHz) in Dünnschicht-technologie entwickelt. Der Vortrag stellt die hierfür eingesetzten Programme vor: Es wurden die elektromagnetischen Felder der einzelnen Konzepte mit MAFIA (FEM, kommerziell) und einer Eigenentwicklung (BEM) berechnet. Zur Optimierung des endgültigen Konzeptes wurde ein Programm auf Basis der sogenannten Nikolausalgorithmen (ähnlich Fuzzy-Logic, Randomwalk-Algorithmen) erfolgreich eingesetzt, welches Interpolationen aus den Feldlösungen eines linear anisotropen Materialmodell benutzt. Da in derartig kleinen Systemen mit Sättigungseffekten zu rechnen ist, wurde ein auf Differentialgleichungen basierendes Materialmodell entwickelt. In Verbindung mit Ergebnissen aus den MAFIA-Simulationen konnte so der maximal mögliche Impulsstrom eines I-Inductors abgeschätzt werden.



# **Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinductoren**

**Karlsruhe, 26. Oktober 2000**

**Workshop zum Thema  
Simulationen in der Mikrosystemtechnik**

**Axel von der Weth, J. Aktaa**

**FZK, IMF-II**

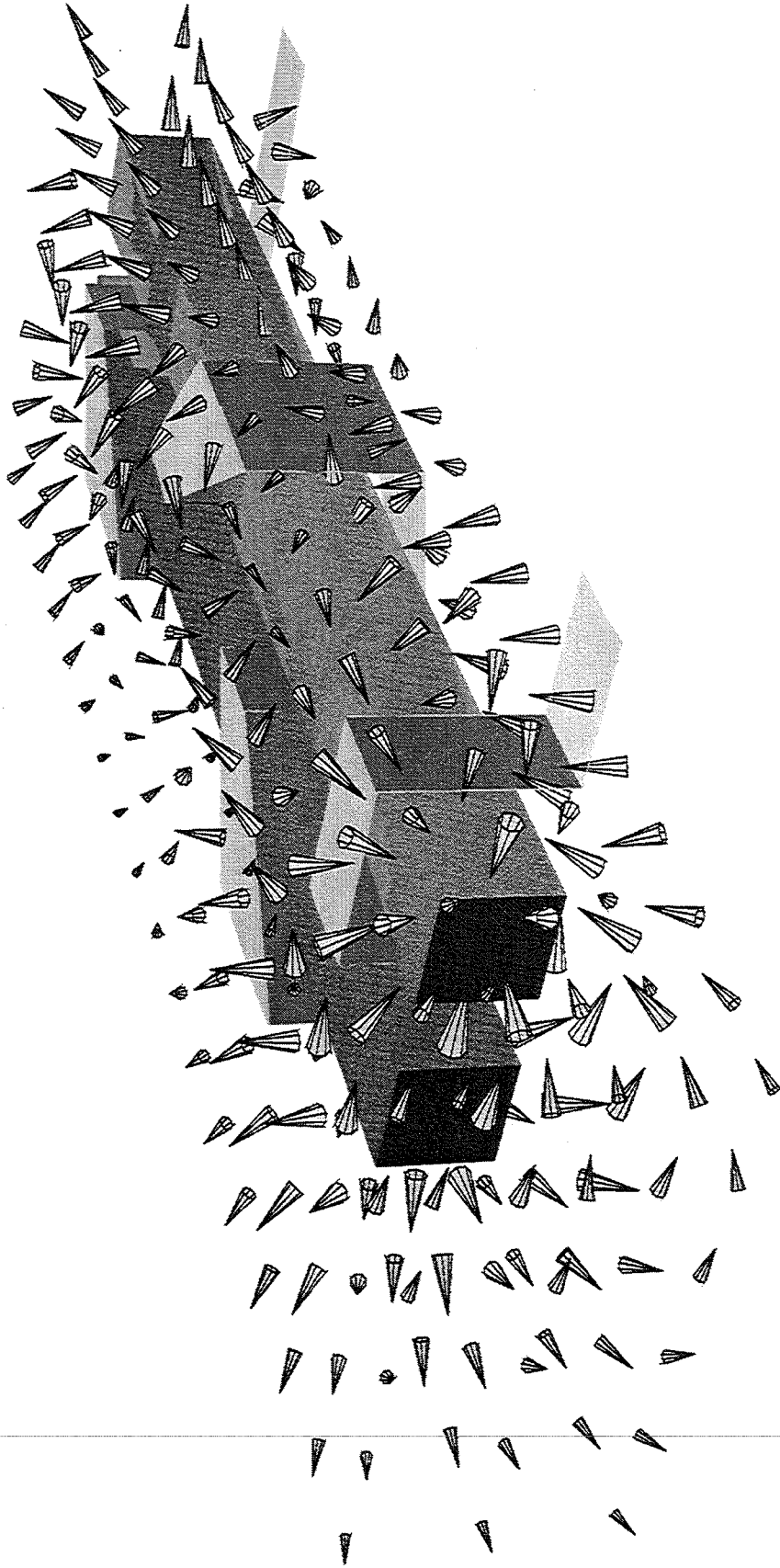
---

# Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinductoren

Karlsruhe, 26. Oktober 2000

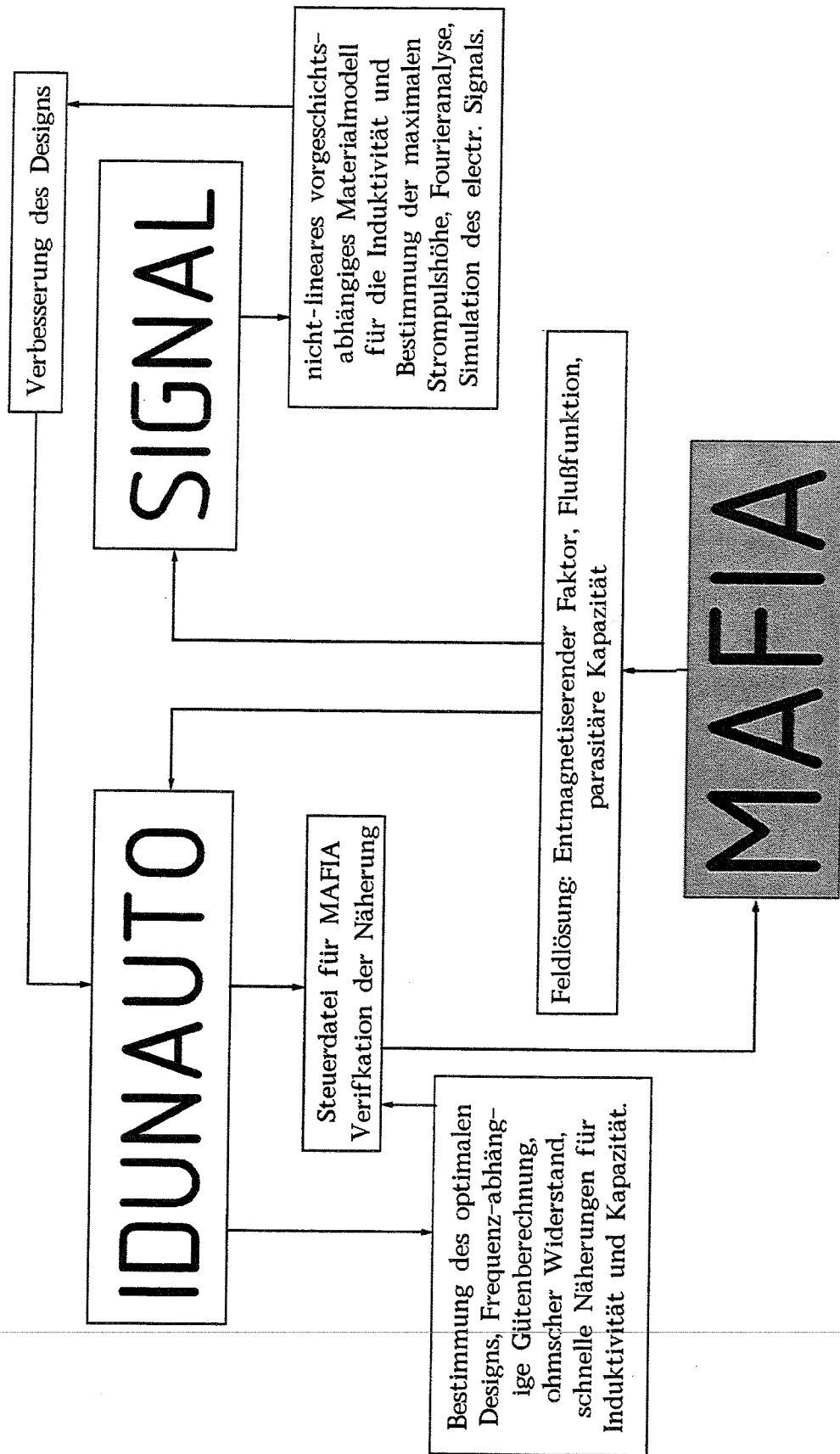
- Einleitung
- FEM-Modellierung von Mikroinductoren
- Optimierung von Mikroinductoren mit den Nikolausalgorithmen
- Berechnung der Induktivität mit einem nichtlinearen Materialmodell
- Ausblick

**Stark überhöhte Darstellung eines I-Inductors**



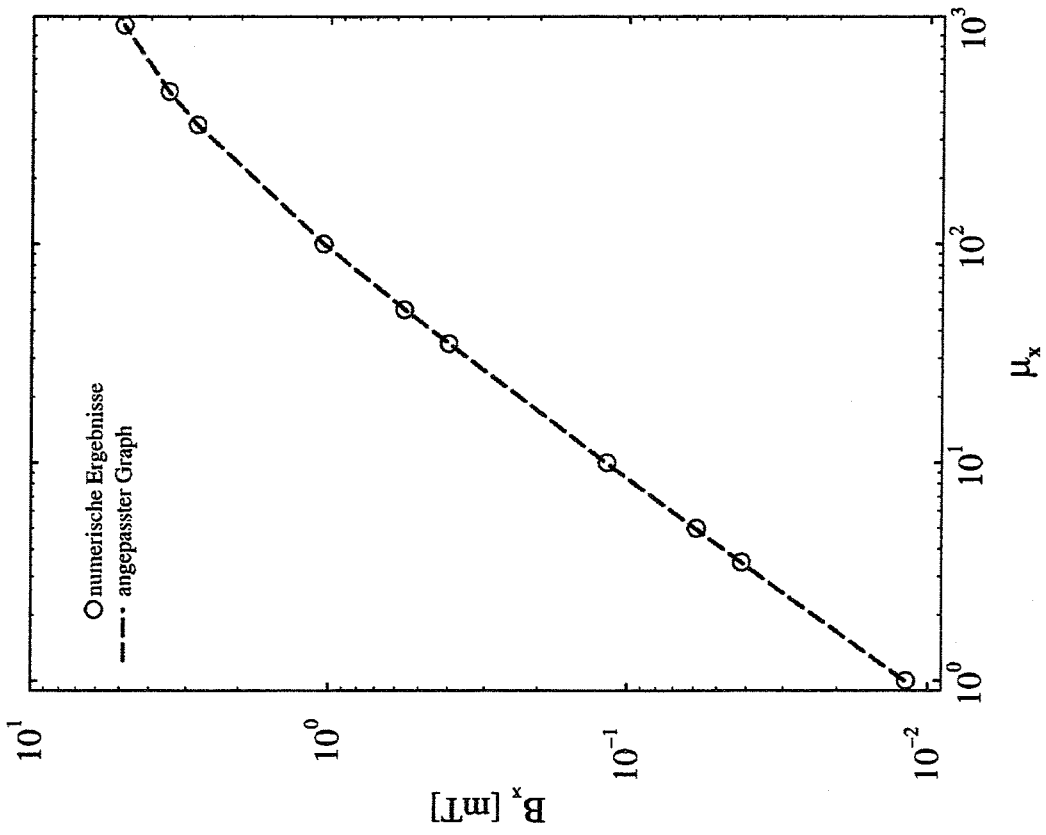
FZK, IMF-II, MALVE-A, eigenes Konzept für einen Mikroinductor, I-Inductor, Dr. Axel von der Weth

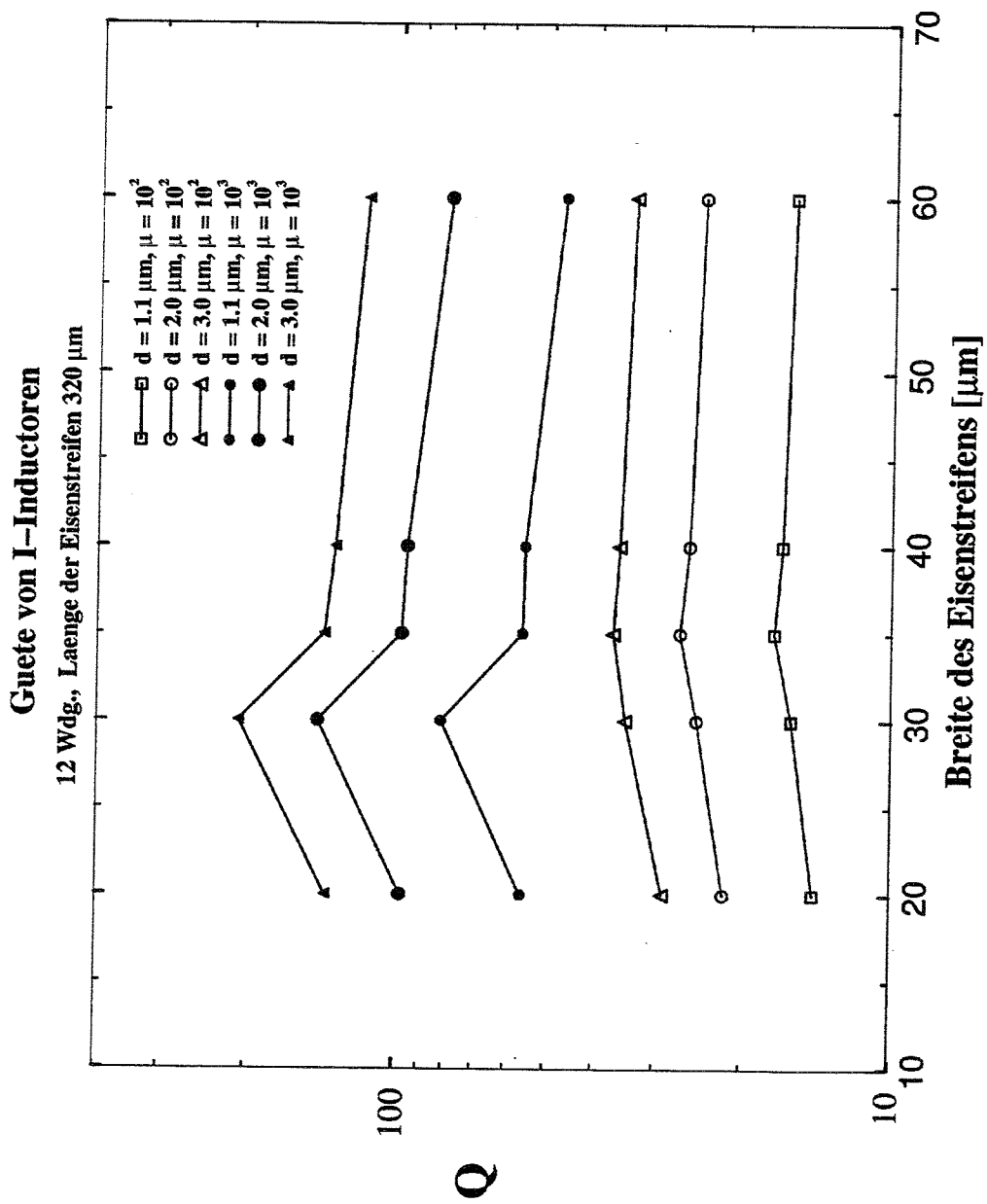
**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt



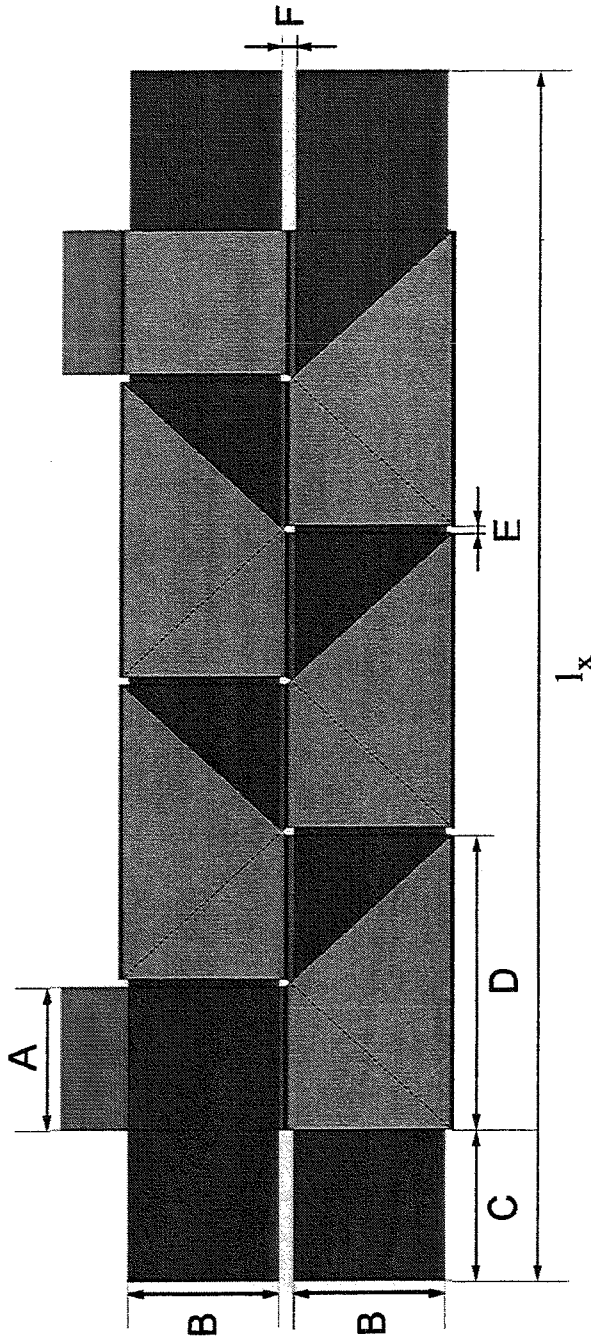
FZK, IMF-II, Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinductoren, Axel von der Weith







Parameter in „IDUNAUTO“ für die Optimierung des I-Inductors



N: Anzahl der Windungen

A: Breite der Anschlußleitungen, Länge der inneren wire holes

B: Breite eines Eisenstreifens

C,  $l_x$ : Länge der Eisenstreifen.

D: Länge der äußeren wire holes, von  $l_x$  und A abhängig.

E: Minimaler Abstand zweier Leiter

F: Abstand der Eisenstreifen

durch  $l_x$  begrenzt

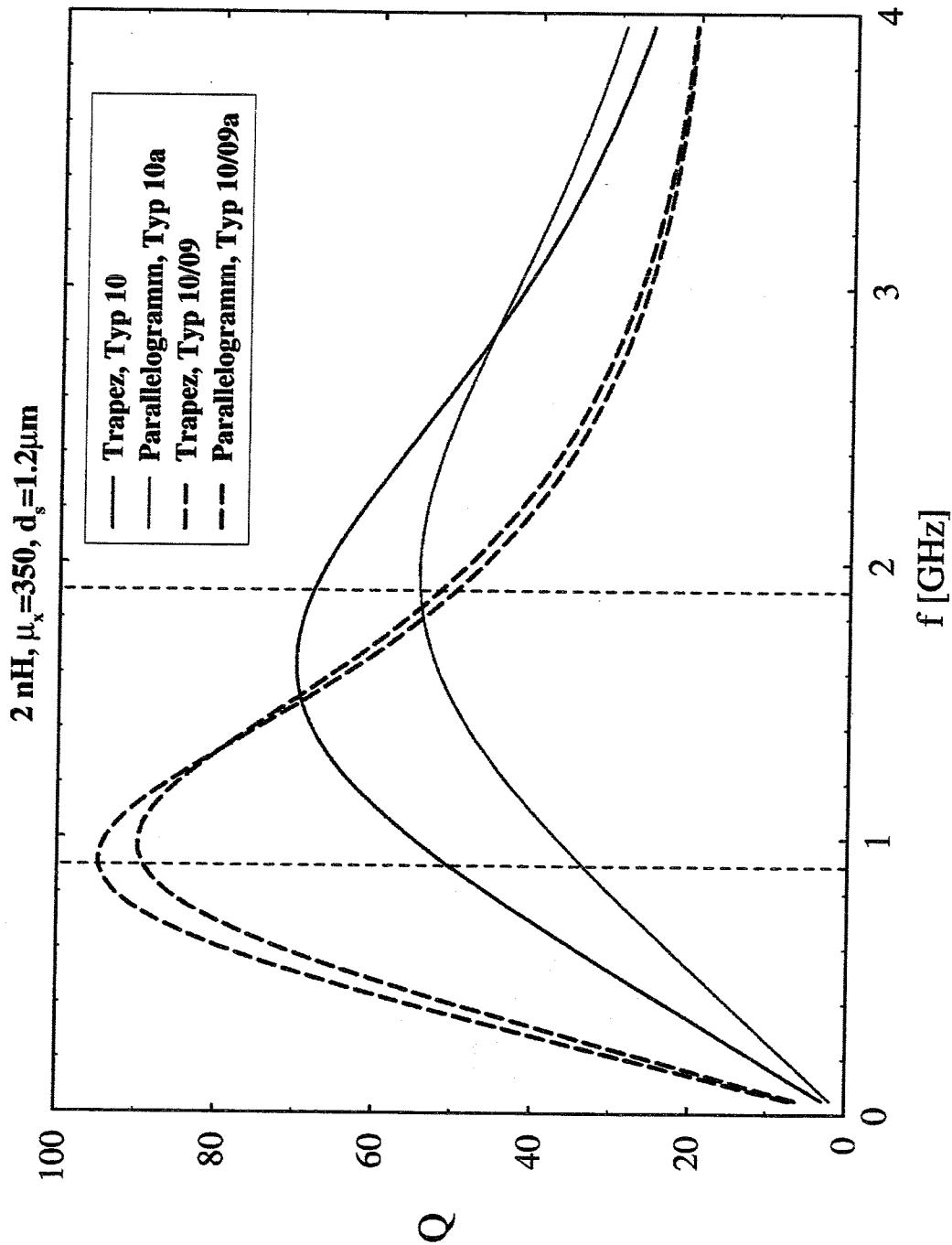
abhängig von der Umgebung  
variabel

variabel ( $\mu$ -abhängig)

$A \leq D \leq 2 \cdot A + E$

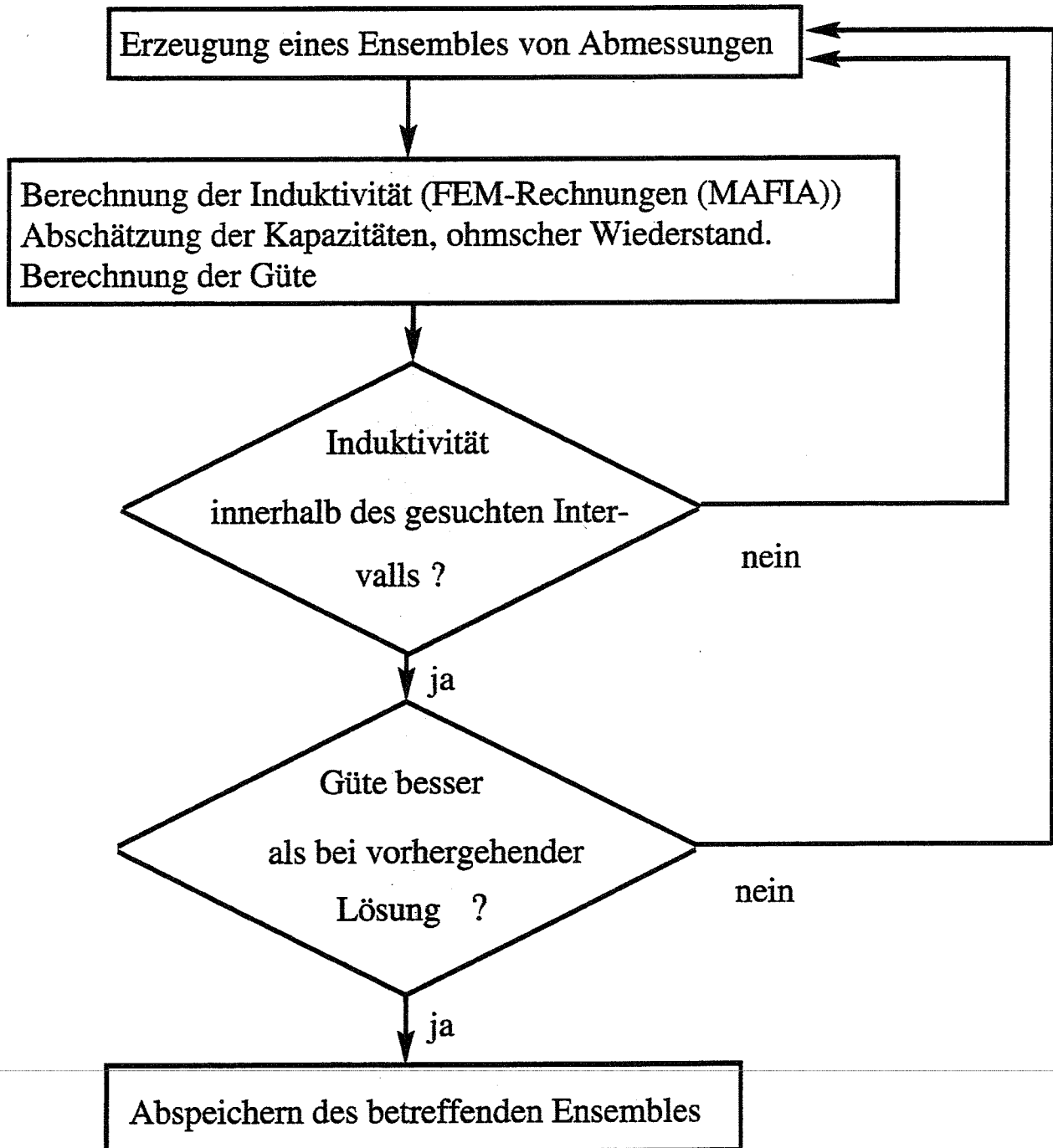
technologieabhängig

technologieabhängig



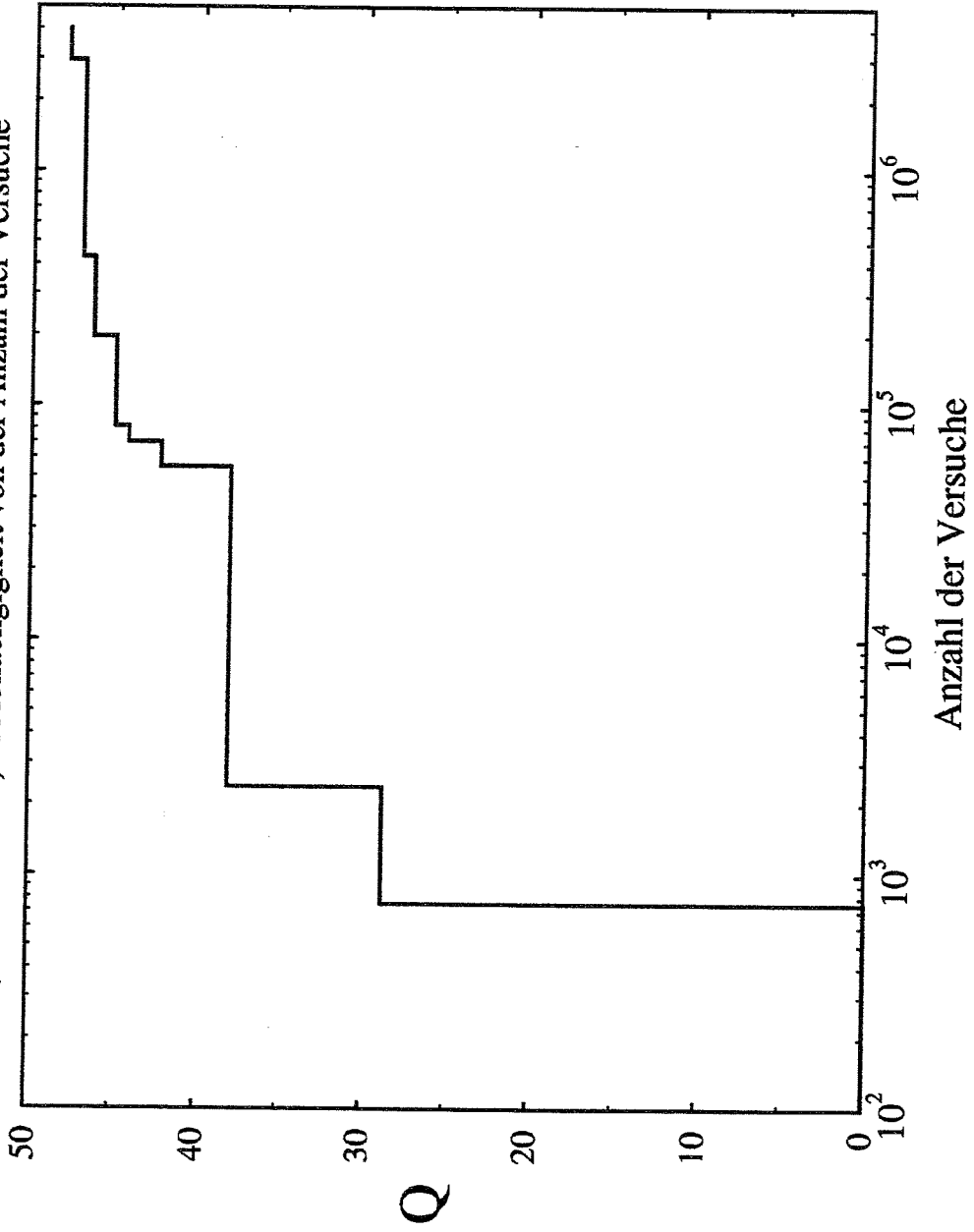
FZK, IMF-II, Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinductoren, Axel von der Weth

„IDUNAUTO“: Optimierung von I-Inductoren mit Hilfe der  
Nikolausalgorithmen

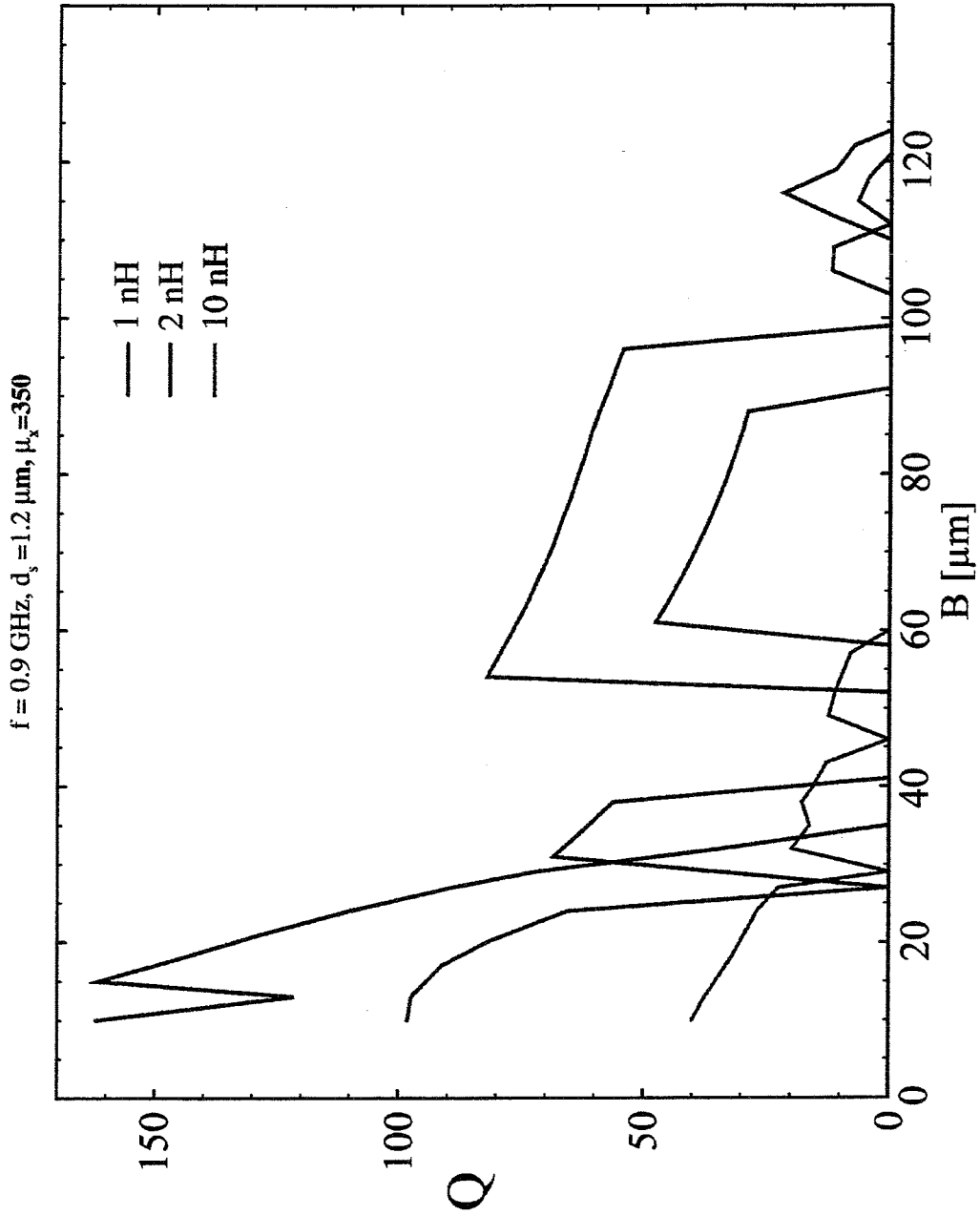


# Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt

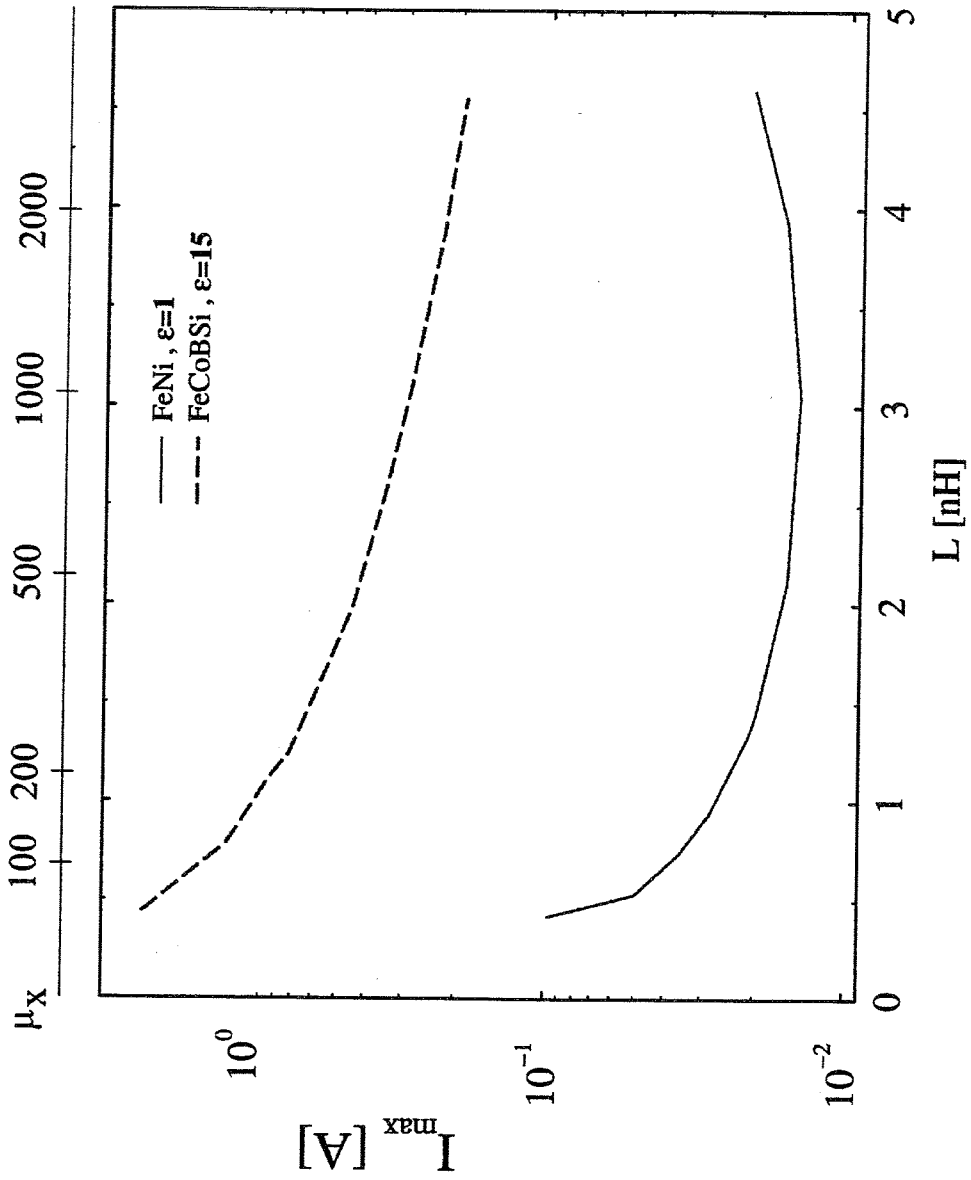
Optimierung eines 1 nH-I-Inductors mit den Nikolausalgorithmen  
(kleine Version) in Abhängigkeit von der Anzahl der Versuche



FZK, IMF-II, MALVE-A, Optimierung von Mikroinductoren mit den Nikolausalgorithmen, Dr. Axel von der Weth



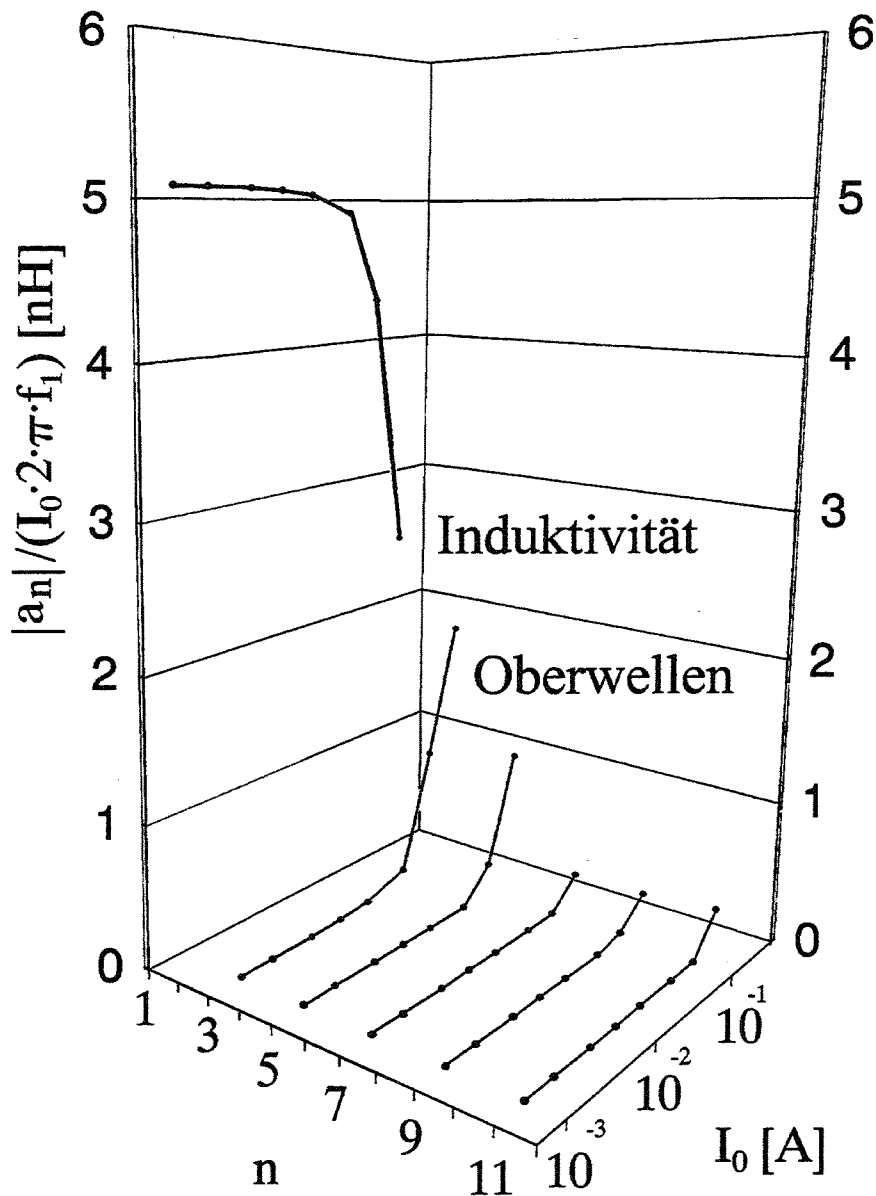
Berechnung des maximalen gepulsten Stroms mit „SIGNAL“



FZK, Institut für Material-Forschung-II, Simulation der elektromagnetischen Felder von Mikroinductoren, Axel von der Weith



Fourierkoeffizienten des mit der Feldlösung (MAFIA)  
berechneten Induktionssignal (SIGNAL)





# **Simulation der Bestrahlung und Entwicklung von Resists mittels Röntgentiefenlithographie und optischer Lithographie**

J. Schulz, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)

Die Simulation der Lithographie ist für die Halbleiterbranche (Photoresists einer Dicke von 0,5 bis etwa 3 $\mu$ m) zu einem essentiellen Werkzeug geworden, um sich den hohen Aufwand vieler Experimente zu ersparen. Durch das exzellente Verständnis der Einzelprozesse sind die Einflüsse von Schwankungen der Prozesseparameter sehr gut simulierbar. Für die Bereiche Optische Lithographie und Röntgenlithographie am IMT sind die Voraussetzungen eines derart exzellenten Prozessverständnisses noch nicht gegeben.

Für die Optische Lithographie dicker DNQ-Novolak-Resists wurde im Rahmen einer Doktorarbeit (S.J.Chung) ein Simulationsprogramm erarbeitet, das den Trocknungsprozess nach dem Beschichten, die Belichtung und die Entwicklung beschreibt. Neu gegenüber kommerziellen Programmen ist die Berücksichtigung des Einflusses von Lösemittelresten nach dem Backen auf den Entwicklungsvorgang. Dieses Programm ist recht leicht zu bedienen und kann unterschiedliche Prozessparameter einigermaßen verlässlich simulieren. Weitere Aktivitäten ruhen derzeit.

Für die Röntgenlithographie wird derzeit gemeinsam mit Partnern eines EU-Projektes an einem Programm gearbeitet, das die Belichtung und die Entwicklung von Polymethylmethacrylat (PMMA) als Resist simulieren soll. Im Gegensatz zur Optischen Lithographie sind für diesen Bereich allerdings wesentliche Einflussgrößen noch nicht ausreichend durch mathematische Modelle fassbar. So sind Temperatureffekte beim Bestrahlen zwar im Grundsatz verstanden aber wegen der Abhängigkeit von der Absorberfläche layoutspezifisch und somit nur schwer fassbar. Beim Entwickeln ist zum Beispiel die Rolle der gasförmigen Bestrahlungsprodukte noch nicht geklärt.



# **Bestrahlung und Entwicklung in „dicker“ Optischer- und Röntgen-Lithographie**

## **1. Prinzip der Schattenwurflithographie**

## **2. Optische Lithographie**

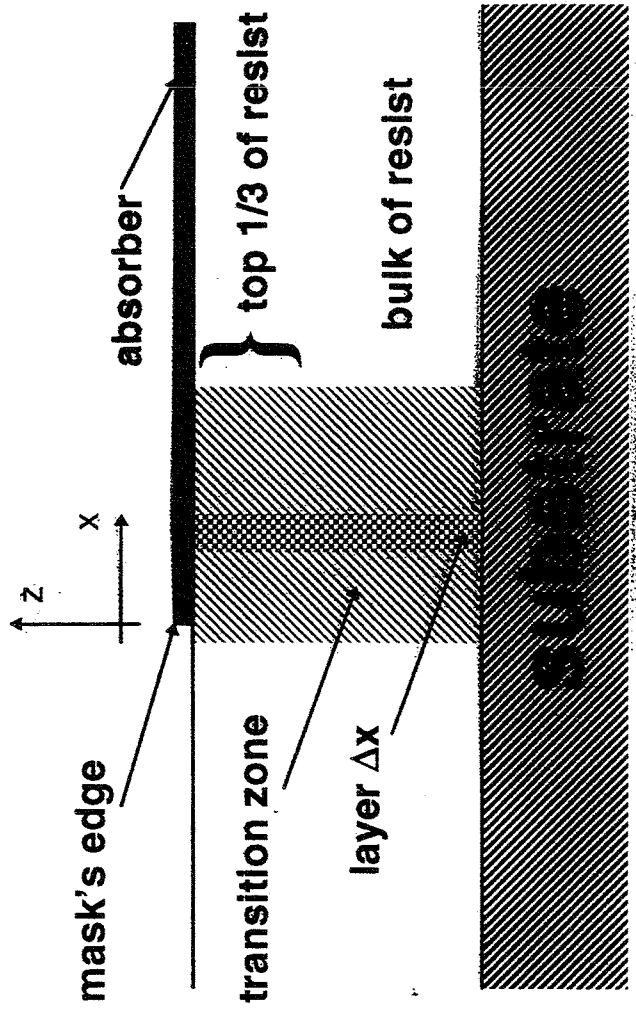
- **Prozesseinflüsse**
- **Mathematische Beschreibung**
- **Status des Simulationsprogramms**

## **3. Röntgen-Lithographie**

- **Prozesseinflüsse**
- **Mathematische Beschreibung**
- **Status des Simulationsprogramms**

## **4. Schlussbemerkung**

### Simplified schematic illustrating contact printing



## **Prozesseinflüsse in der Optischen Lithographie**

### **1. Belichtung**

- **Fresnel-Beugung**
- **Umwandlung DNQ in ICA**

### **2. Entwicklung**

- **Rate ist Funktion von [DNQ]/[ICA]**
- **Neu: Restlösemittel beschleunigt die Rate**

### **3. Umsetzung auf PC (2D)**

- **basierend auf SAMPLE, UC Berkley**

## **Prozesseinflüsse in der Optischen Lithographie**

### **1. Belichtung**

- **Fresnel-Beugung**
- **Umwandlung DNQ in ICA**

### **2. Entwicklung**

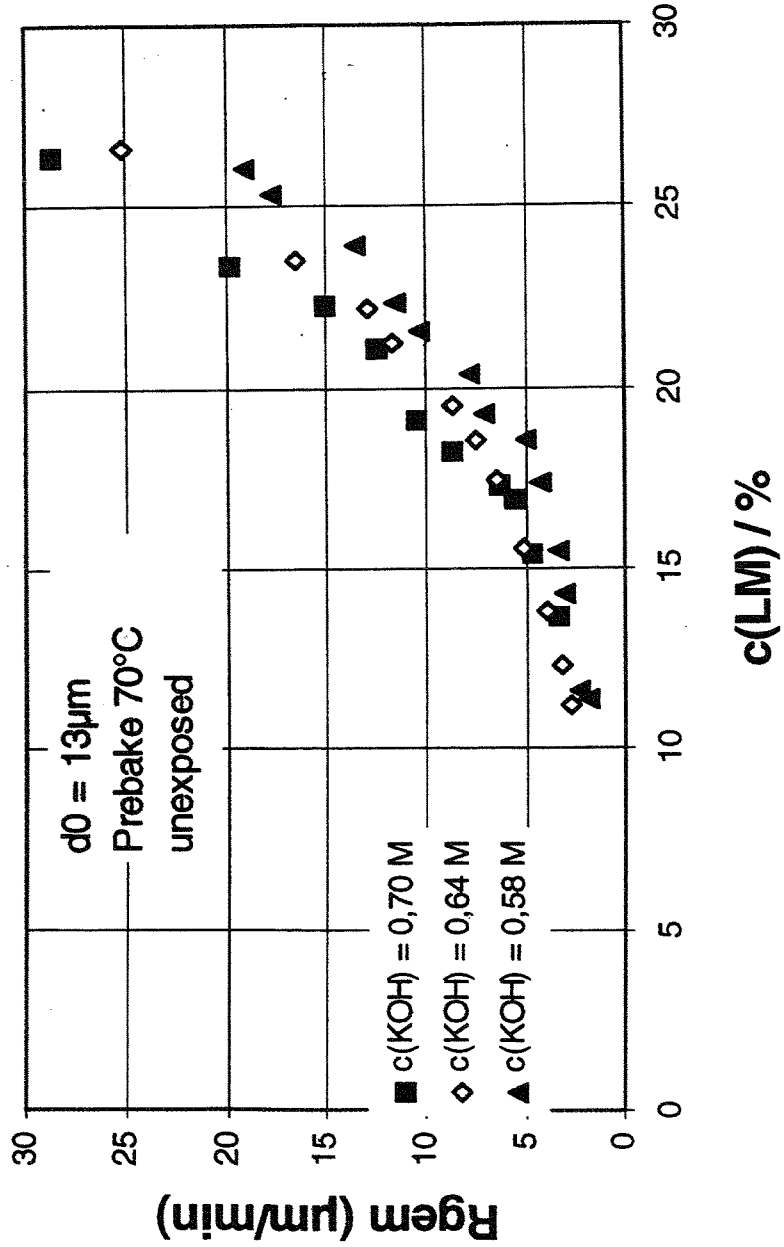
- **Rate ist Funktion von  $[DNQ]/[ICA]$**
- **Neu: Restlösemittel beschleunigt die Rate**

### **3. Umsetzung auf PC (2D)**

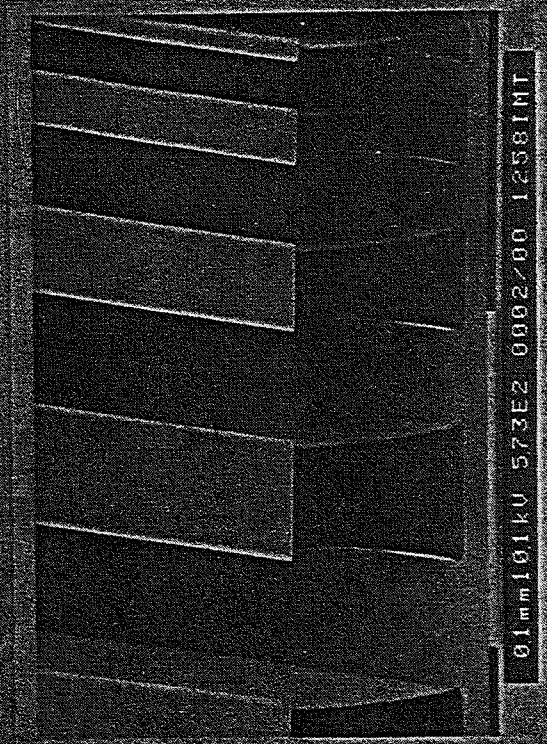
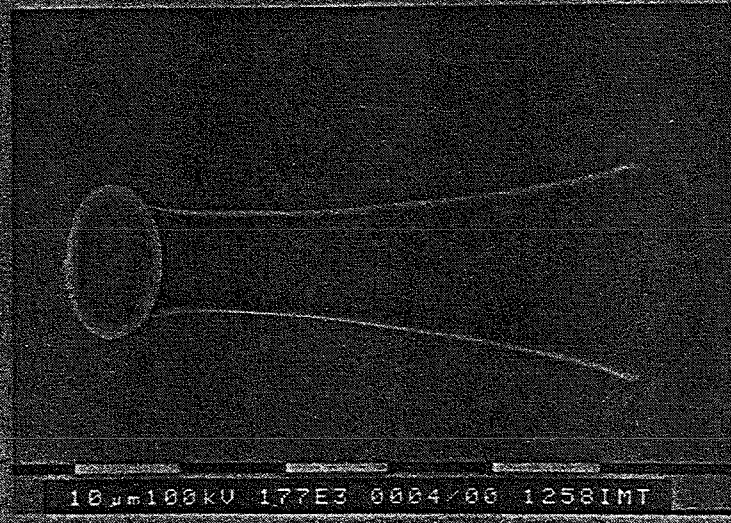
- **basierend auf SAMPLE, UC Berkley**



Average dissolution rate  $R_{gem}$  as a function of residual solvent content



## Examples of optical HARMST

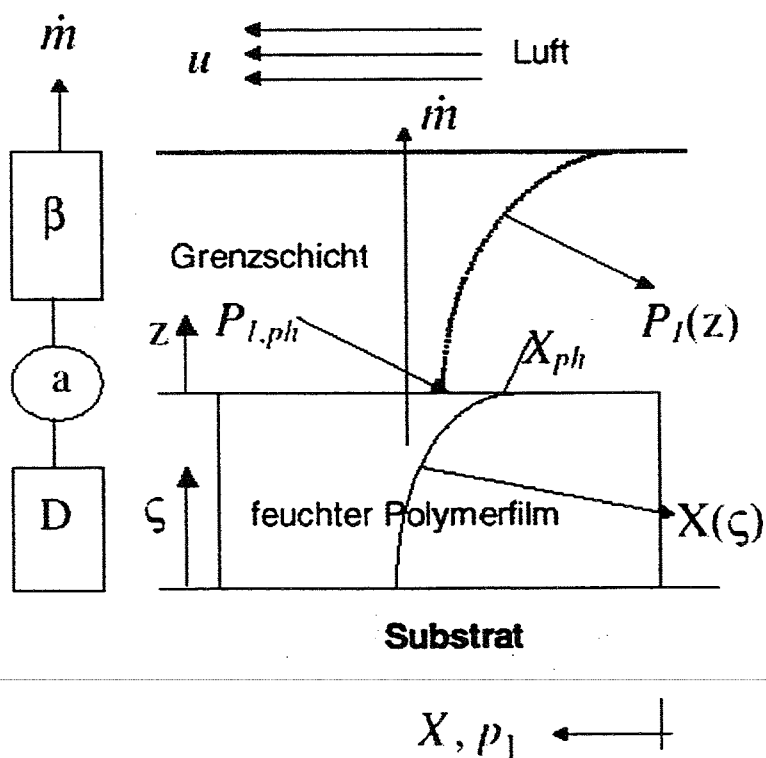


64 μm high resist structures fabricated in UV-resist AZ 4562

## Model for Simulating Profile

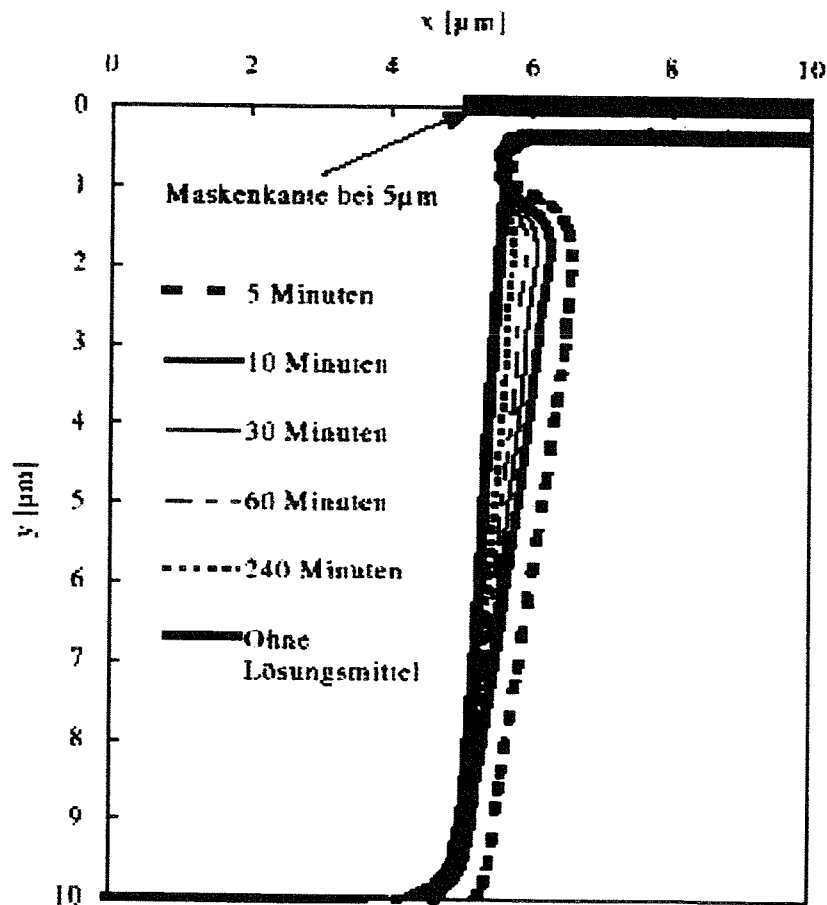
- Model for Drying Film
- Exposure: Dill's ABC-Parameters
- Development: Percolation Theory

## Model for Drying Film



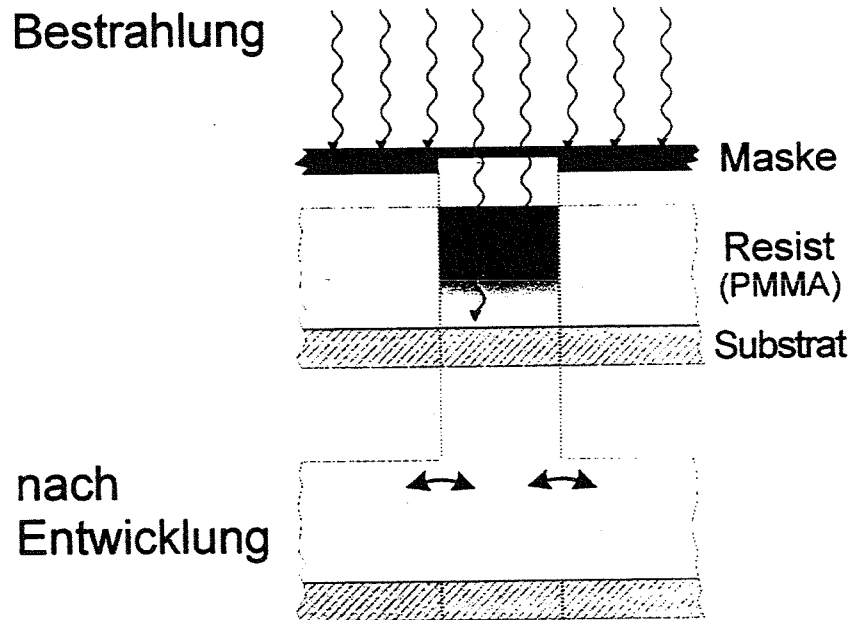
## Simulated Profile of Thick UV- Resist

Parameter: Prebake Duration at 90C

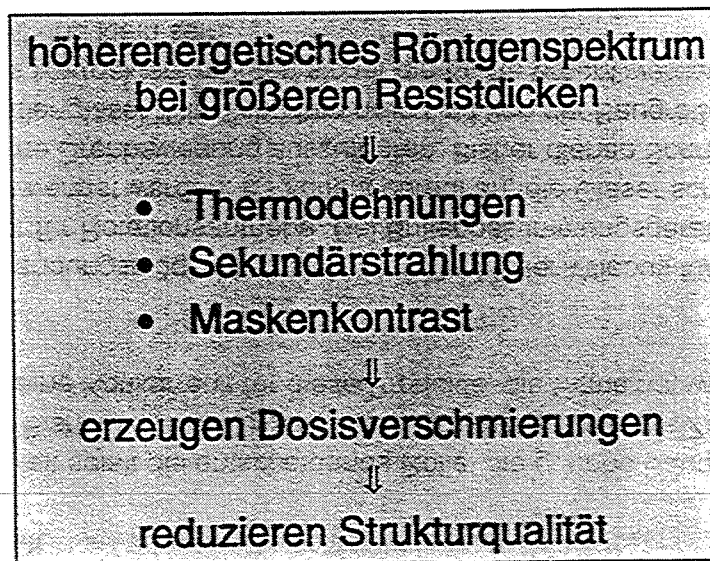


# Charakterisierung: Bestrahlungsprozeß

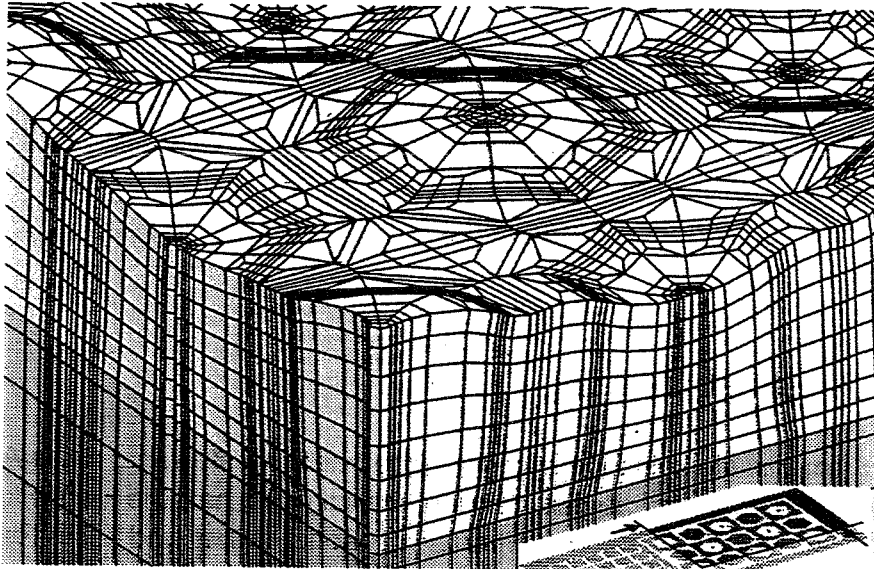
## Verfahrensskizze der Röntgentiefenlithographie:

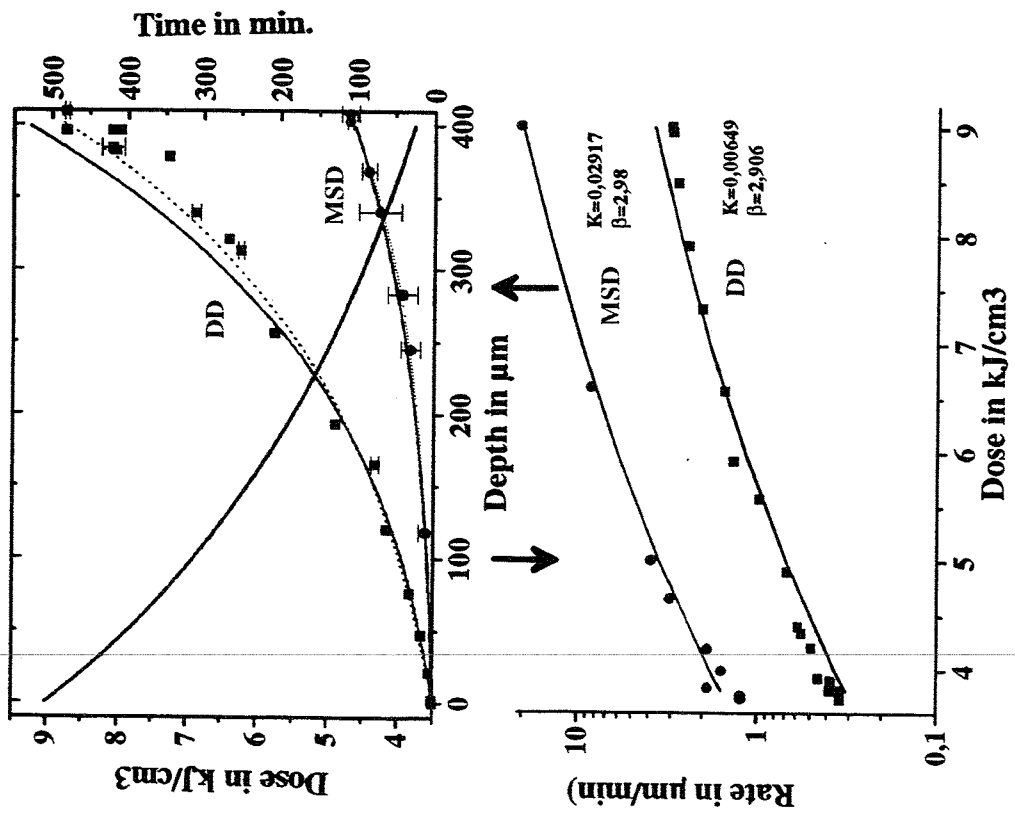


## Technische Herausforderung bei der UDXRL:



## **Thermische Verzüge hexagonaler Strukturen (ABAQUS)**





$$D(z) = \mu_R(\lambda) e^{-\mu_R(\lambda)z} T(\lambda) \frac{P(\lambda)}{A} t$$

$$R(D) = K D^\beta$$

$$t(h) = \int_0^h \frac{1}{K D(z)^\beta} dz$$

## **Schlussbemerkung**

- **Optische Lithographie:**
  - + Profil, Kontrastkurven, Unterschiedliche Dicke
  - Linienbreiten, Einfluss des Abstands Maske/Resist
- **Röntgen-Lithographie:**

**Einzelne Elemente vorhanden;  
Noch ein weiter Weg**



# **Simulation des Heißprägeprozesses zur Herstellung mikrostrukturierter Kunststoffkomponenten**

M. Worgull, Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT)

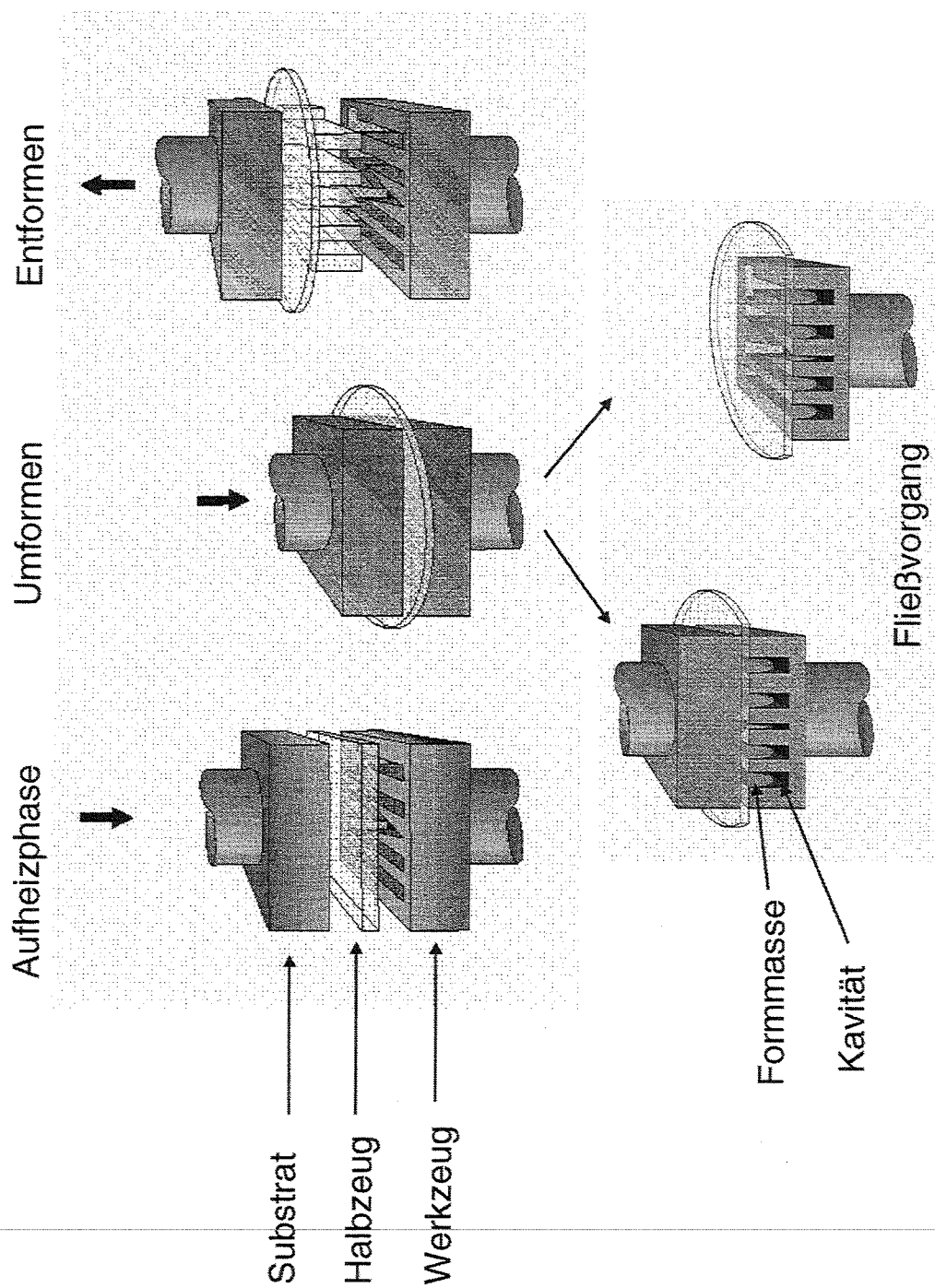
Ziel des Projektes ist die Simulation des Heißprägeprozesses zur Herstellung von Mikrostrukturkomponenten. In einem ersten Schritt wird dazu die kommerziell erhältliche Spritzgießsimulationssoftware „Moldflow“ eingesetzt. Aus dem Prozeßvergleich zwischen Spritzgießen und Heißprägen sollen für die Mikrostrukturierung Parameter gewonnen werden, die es erlauben, den Heißprägeprozeß hinsichtlich des Fließverhaltens, der Temperierung und der Verzüge der Formteile zu optimieren.



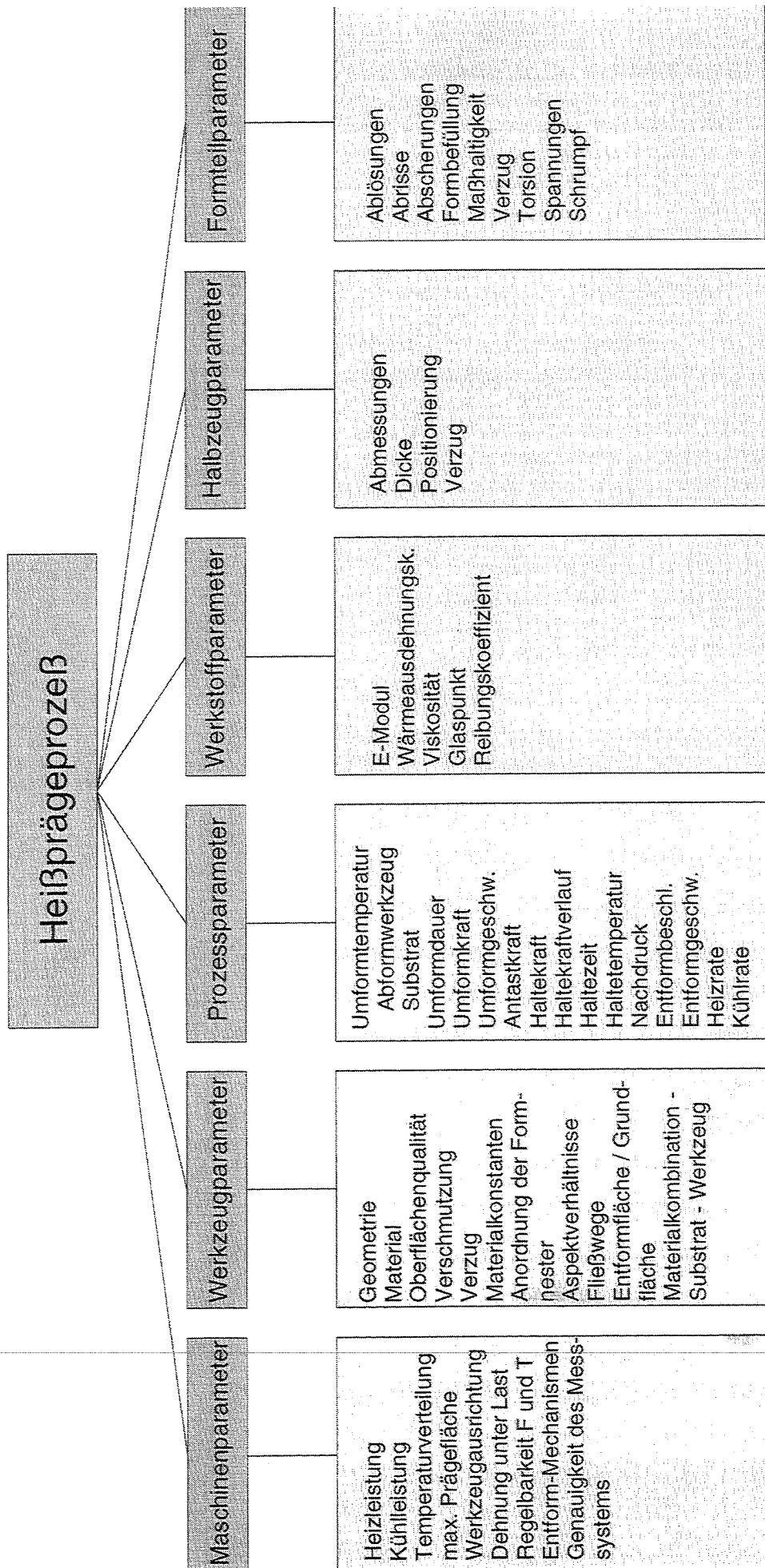
Simulation Heißprägeprozeß

- Stichwort Heißprägen
- Konzeption der Simulation
- Simulationstool Moldflow
- Modellierungsansätze

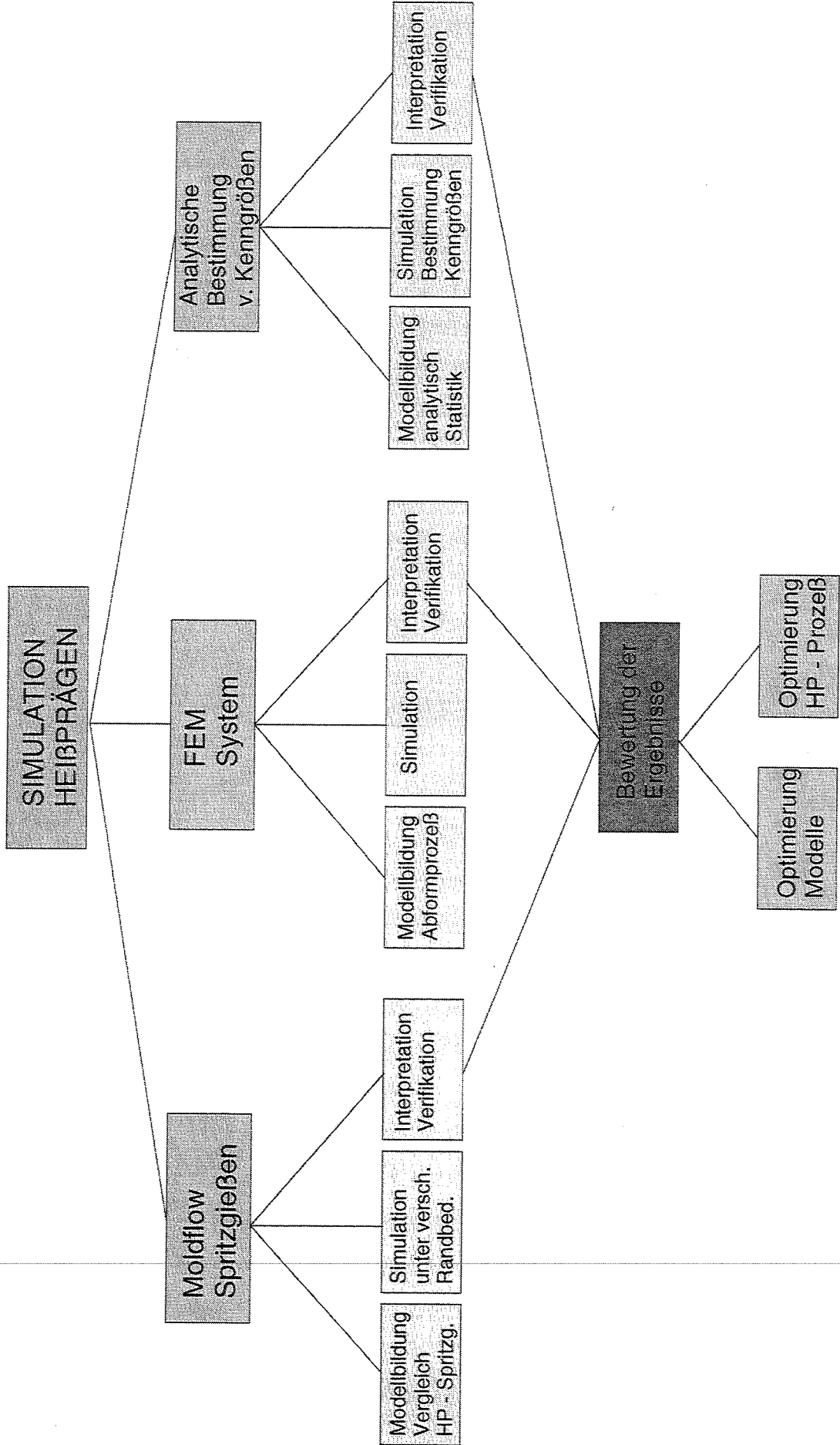
## Heißprägeprozess



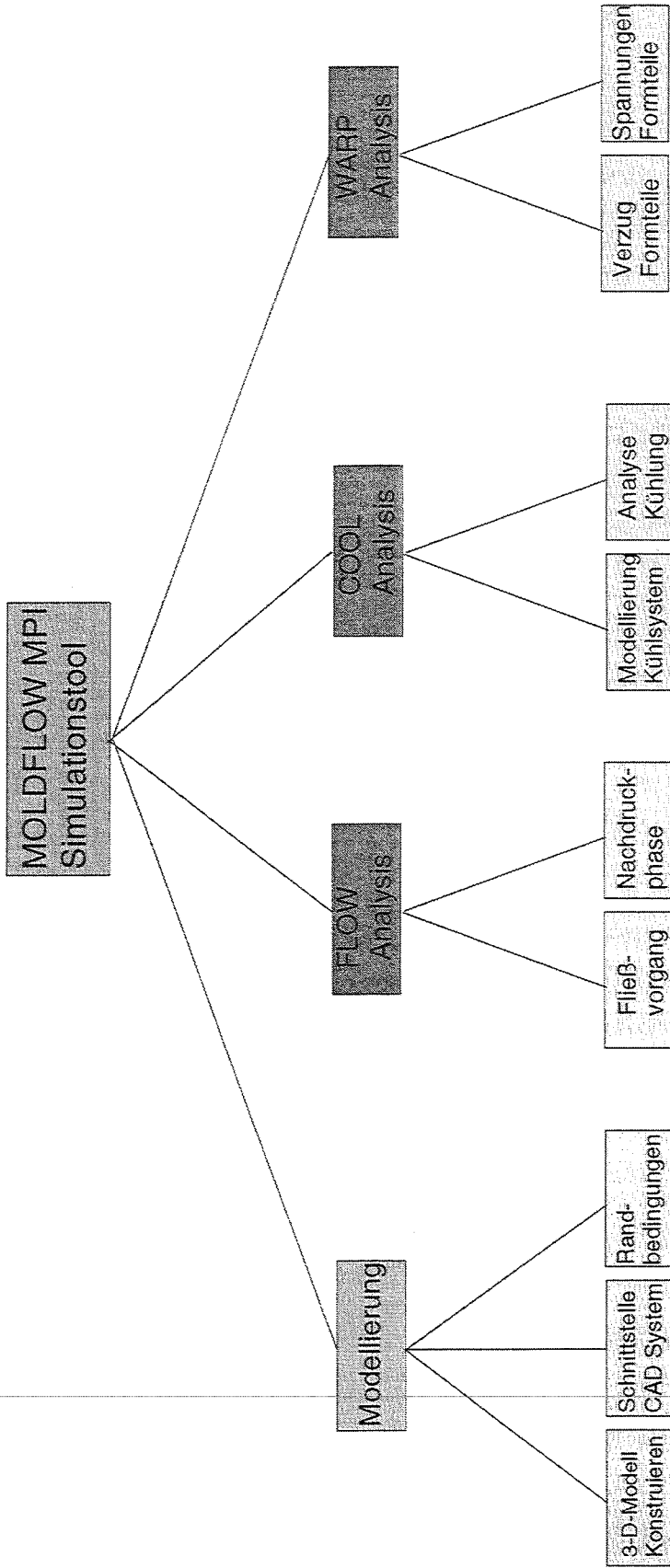
Parameter Heißprägeprozeß



Konzeption der Simulation



Simulationstool „Moldflow“

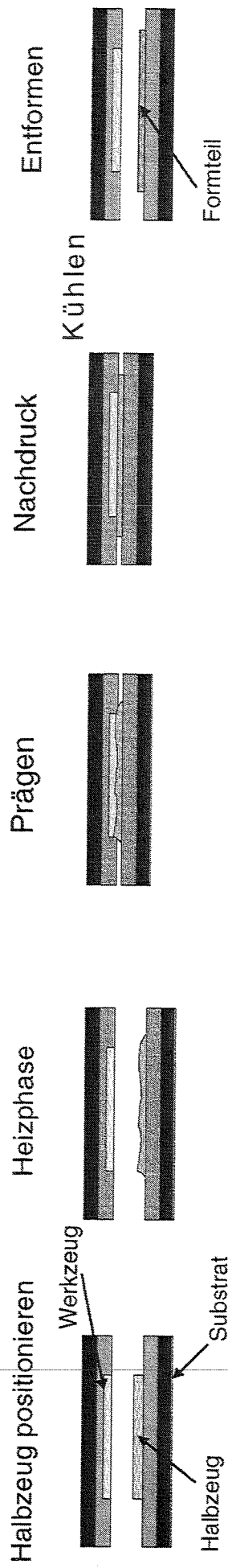


**Vorteile:**

- Benutzerorientiertes, etabliertes Simulationstool
- Datenbank für Kunststoffe
- Schnittstelle zu CAD Systemen

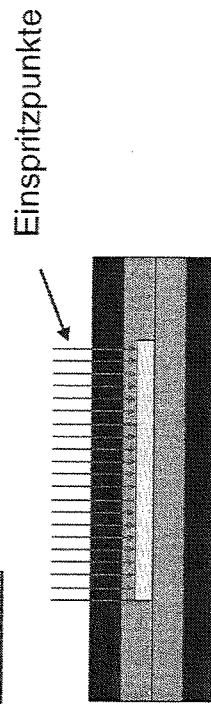
Vergleich Heißprägen - Spritzgießen

Prozessschritte Heißprägen

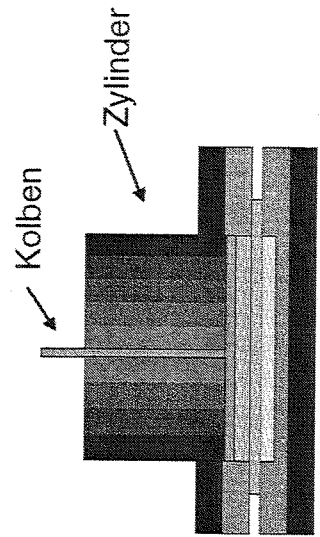


Ansatzpunkte für die Simulation mit „Moldflow“

Modellierung Einspritzpunkt



Modellierung Einspritzmenge





## **Simulation zum Mikrospritzgießen**

K. Müller, Institut für Materialforschung (IMF III)

Kommerzielle Simulationsprogramme erlauben es, die während des makroskopischen Spritzgießprozesses im Werkzeug ablaufenden Vorgänge rechnerisch abzuschätzen und auf Eigenschaften des herzustellenden Formteils zu schließen. Damit ist eine Optimierung von Formteil, Werkzeug und Prozeßführung möglich, bevor das Spritzgießwerkzeug oftmals kosten- und zeitintensiv gebaut wird. Da die Anforderungen bei der Entwicklung und industriellen Umsetzung von mikrostrukturierten Bauteilen vergleichbar sind, ist auch für das Mikrospritzgießen der Einsatz der Simulation interessant. Anhand des am IMF III seit 1995 eingesetzten, weltweit verbreiteten Programmtools MOLDFLOW wird gezeigt, in welchem Rahmen dessen Entwicklungsstand auch für die Simulation des Mikrospritzgießprozesses anwendbar ist.



## **Simulation in der Mikrosystemtechnik**

MIKRO-Workshop, 26.10.2000

Forschungszentrum Karlsruhe

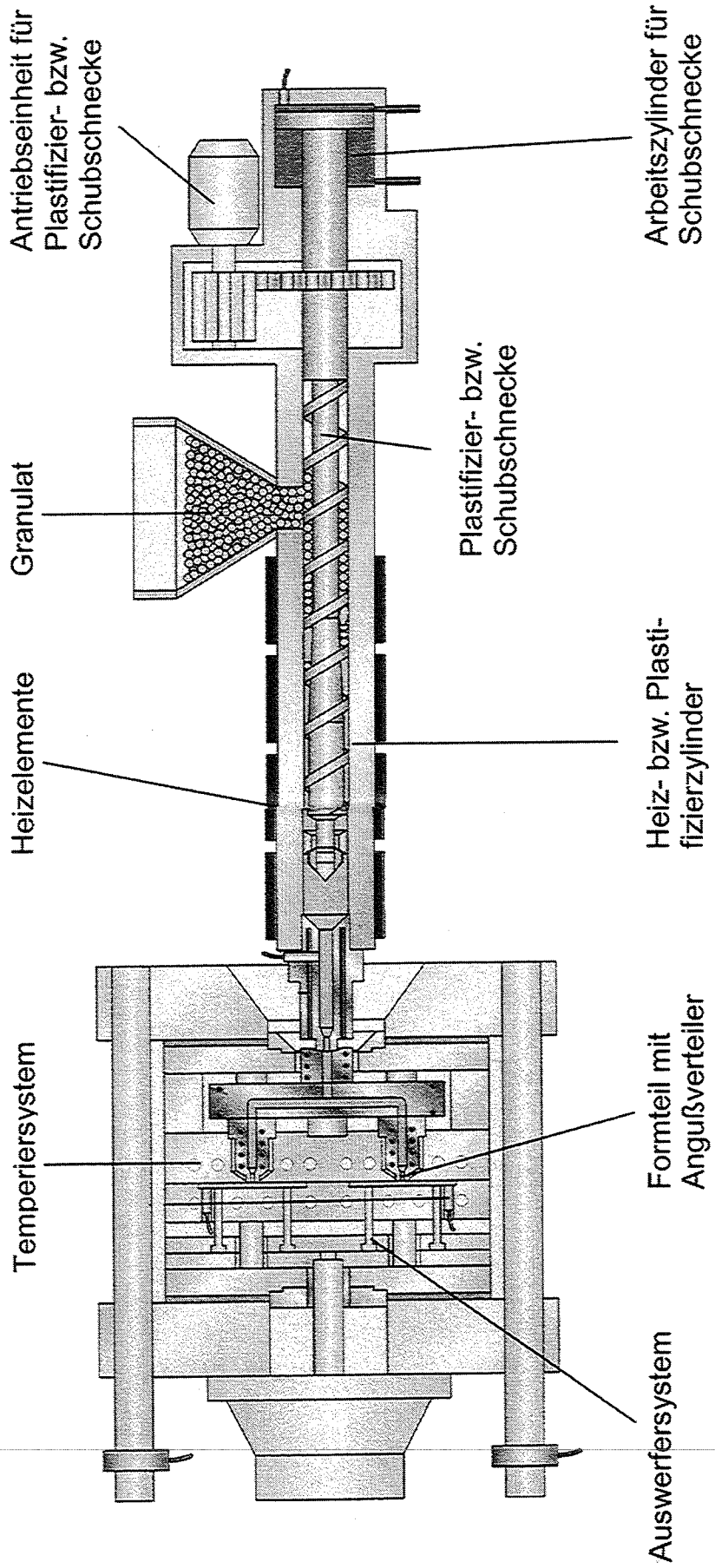
### **Thema: Simulation zum Mikrospritzgießen**

- Wer:** Klaus Müller, IMFIII
- Was:** Prozesssimulation und Werkzeugauslegung zur Herstellung polymerer, keramischer und metallischer Mikrokomponenten
- Womit:** Kommerzielle Programme von MOLDFLOW für detaillierte Berechnungen im konventionellen Kunststoff-Spritzguß

## **Simulation zum Mikrospritzgießen**

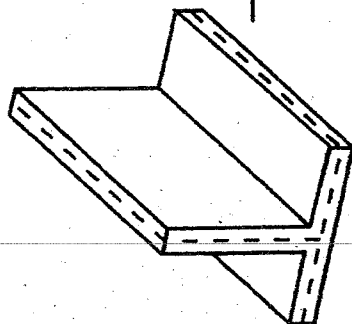
1. Einleitung
2. Berechnungsmodelle
3. Spritzgießsimulation
4. Ausblick

## Spritzgießprozeß

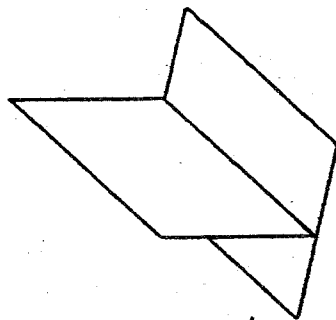


## 2,5D-Geometriemodell

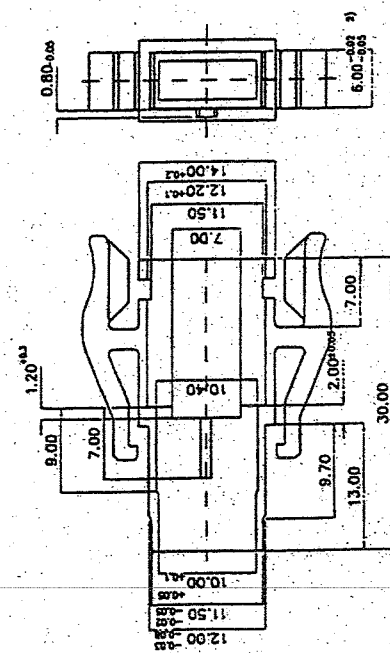
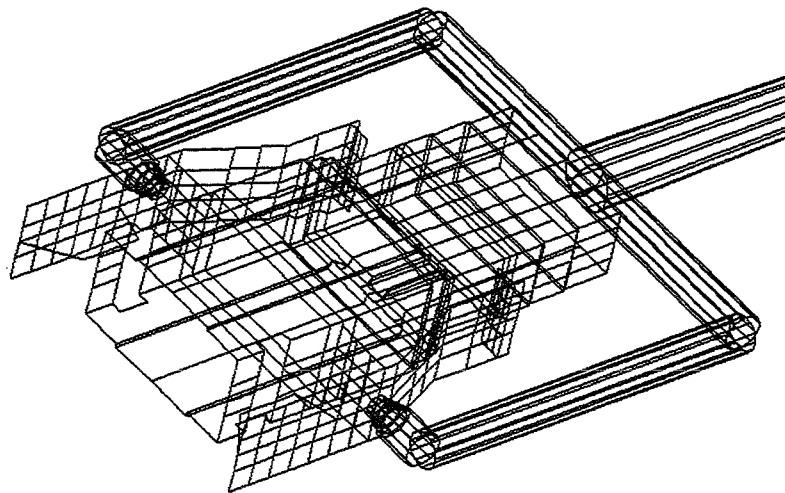
Volumenkörper



Schalenmodell



Schalenmodell  
Steckergehäuse mit Angußsystem

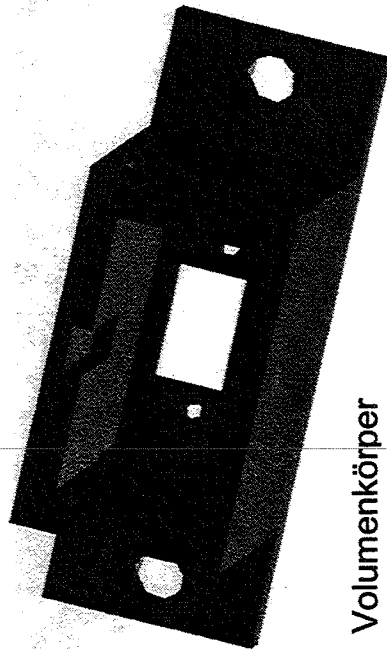




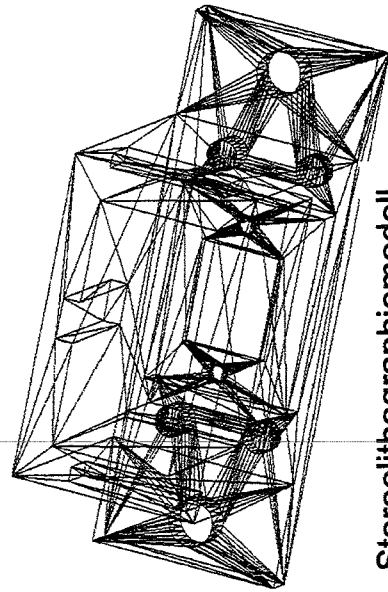
## 2,5D-Geometriemodell

CAE-System: MOLDFLOW

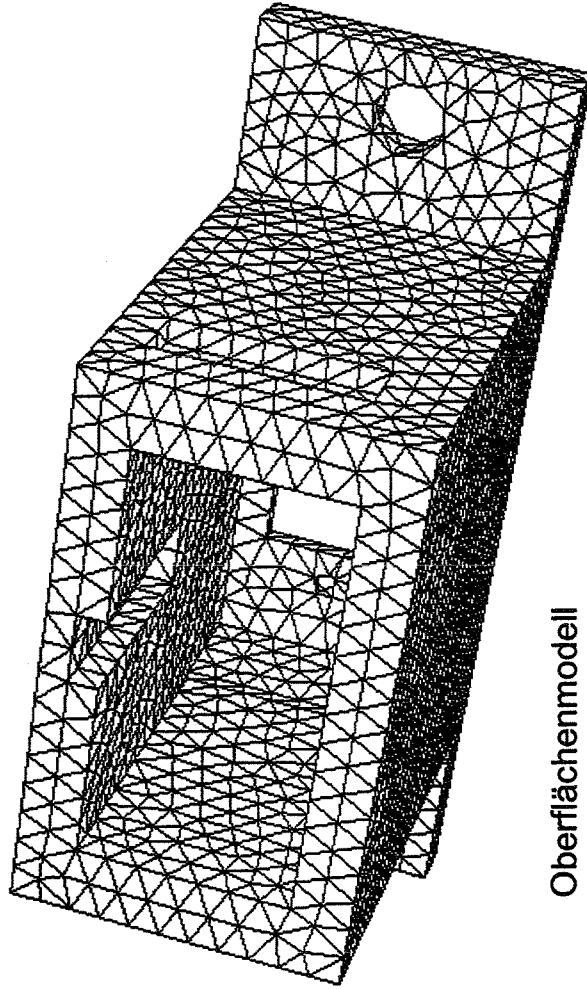
CAD-System: AutoCad



Volumenkörper



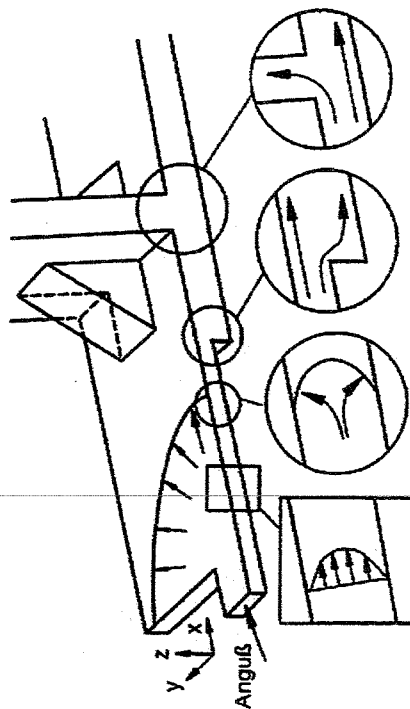
Stereolithographiemodell



Oberflächenmodell

## 3D-Geometriemodell

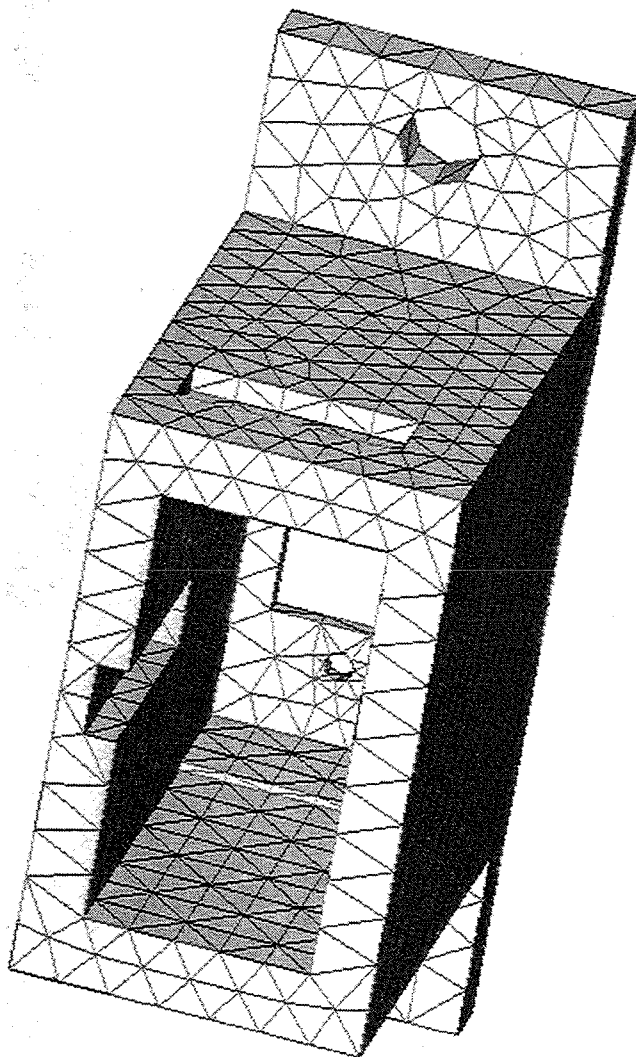
### 3D-Effekte



A. B. C. D.

- A. Ebene Plattenströmung
- B. Quellströmung an der Fließfront
- C. Querschnittserweiterung in Dickenrichtung
- D. Strömungsumlenkungen an Rippen oder Ecken

### Tetraedermodell



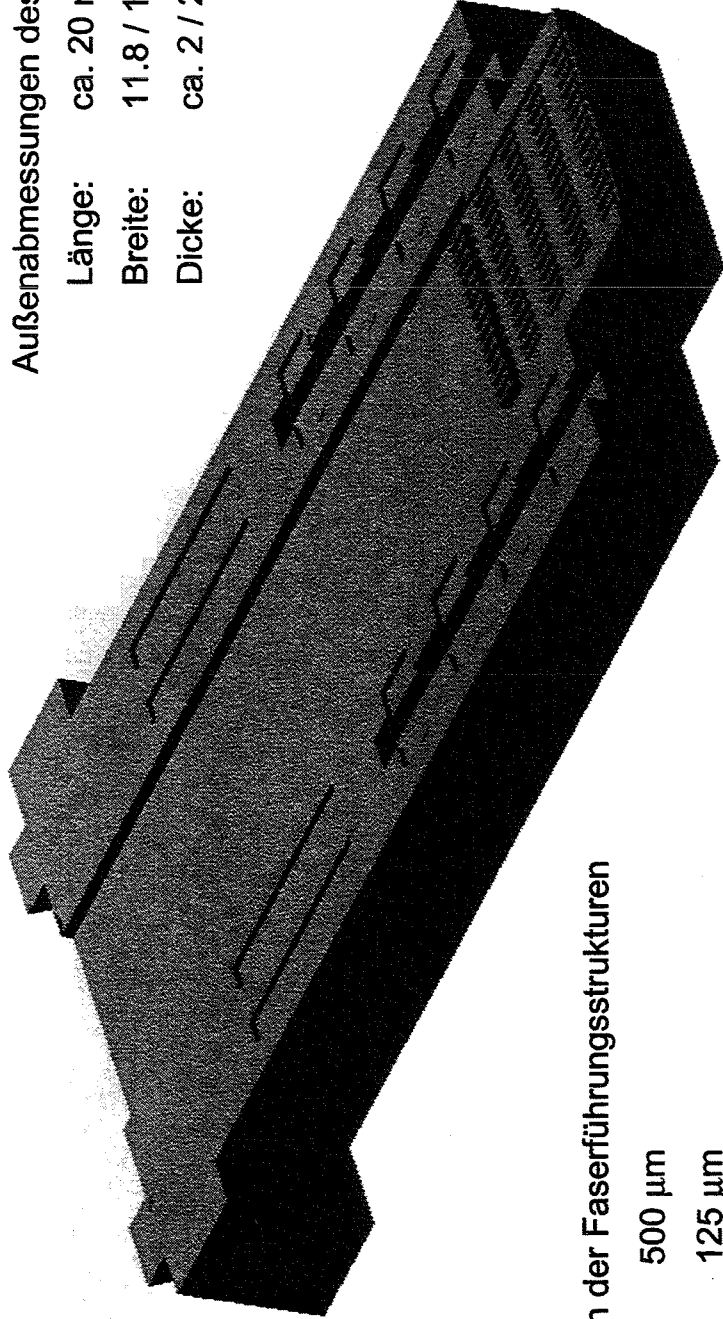
- ⇒ 3D-Autocad (parametrische Volumenkörper)
- ⇒ Nastran (3D-Geometriemodell, Tetraeder)
- ⇒ MF/FLOW 3D (Echte 3D-Simulation)



## Stecker-Unterteil aus PMMA

Außenabmessungen des Stecker-Unterteils

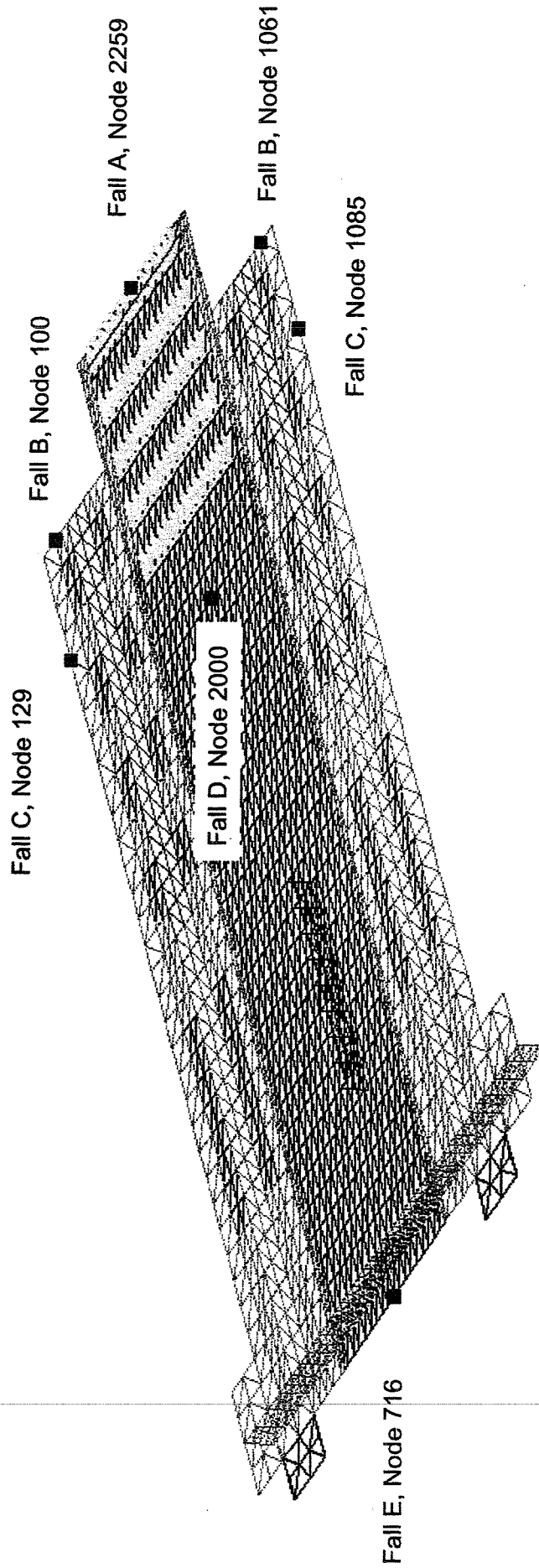
Länge: ca. 20 mm  
Breite: 11.8 / 10 / 4.8 mm  
Dicke: ca. 2 / 2.5 mm



Abmessungen der Faserführungsstrukturen

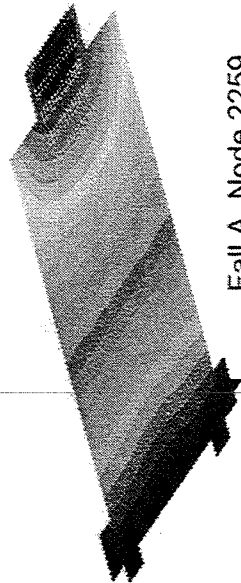
Länge: 500  $\mu\text{m}$   
Breite: 125  $\mu\text{m}$   
Höhe: 100/200  $\mu\text{m}$

## **Anschnittoptimierung am Stecker-Unterteil**



**Füllstudie zur Ansnittoptimierung**

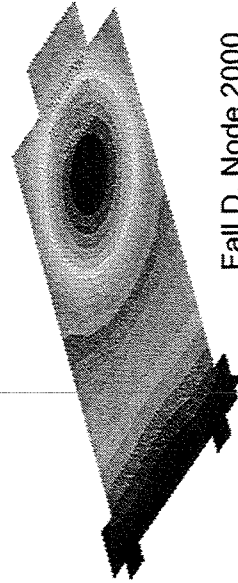
st\_utoccc4n155\_0145.fnr      FILL TIME [sec]      9.76E-6      st\_utoccc4n129d\_pmma\_155\_0145.fnr      FILL TIME [sec]      2.00E-4  
MULTI-LAMINATE ALGORITHM      MULTI-LAMINATE ALGORITHM



Fall A, Node 2259

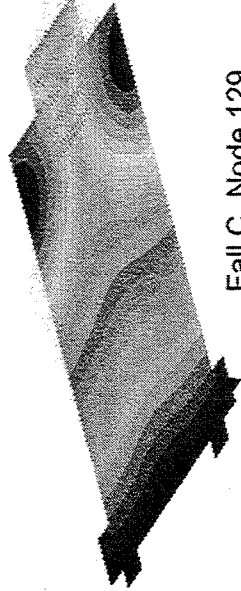
0.147

MOLDFLOW  
st\_utoccc4n2000\_pmma\_155\_0145.fnr      FILL TIME [sec]      9.01E-5  
MULTI-LAMINATE ALGORITHM



Fall D, Node 2000

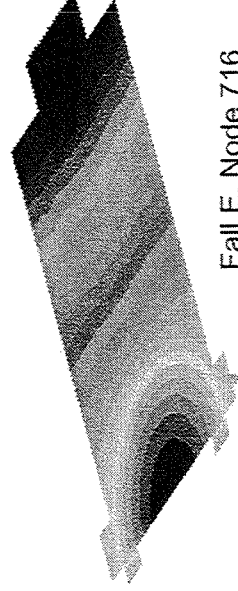
0.146



Fall C, Node 129  
Node 1085

0.146

st\_utoccc4n716\_pmma\_155\_0145.fnr      FILL TIME [sec]      4.50E-5  
MULTI-LAMINATE ALGORITHM



Fall E, Node 716

0.146

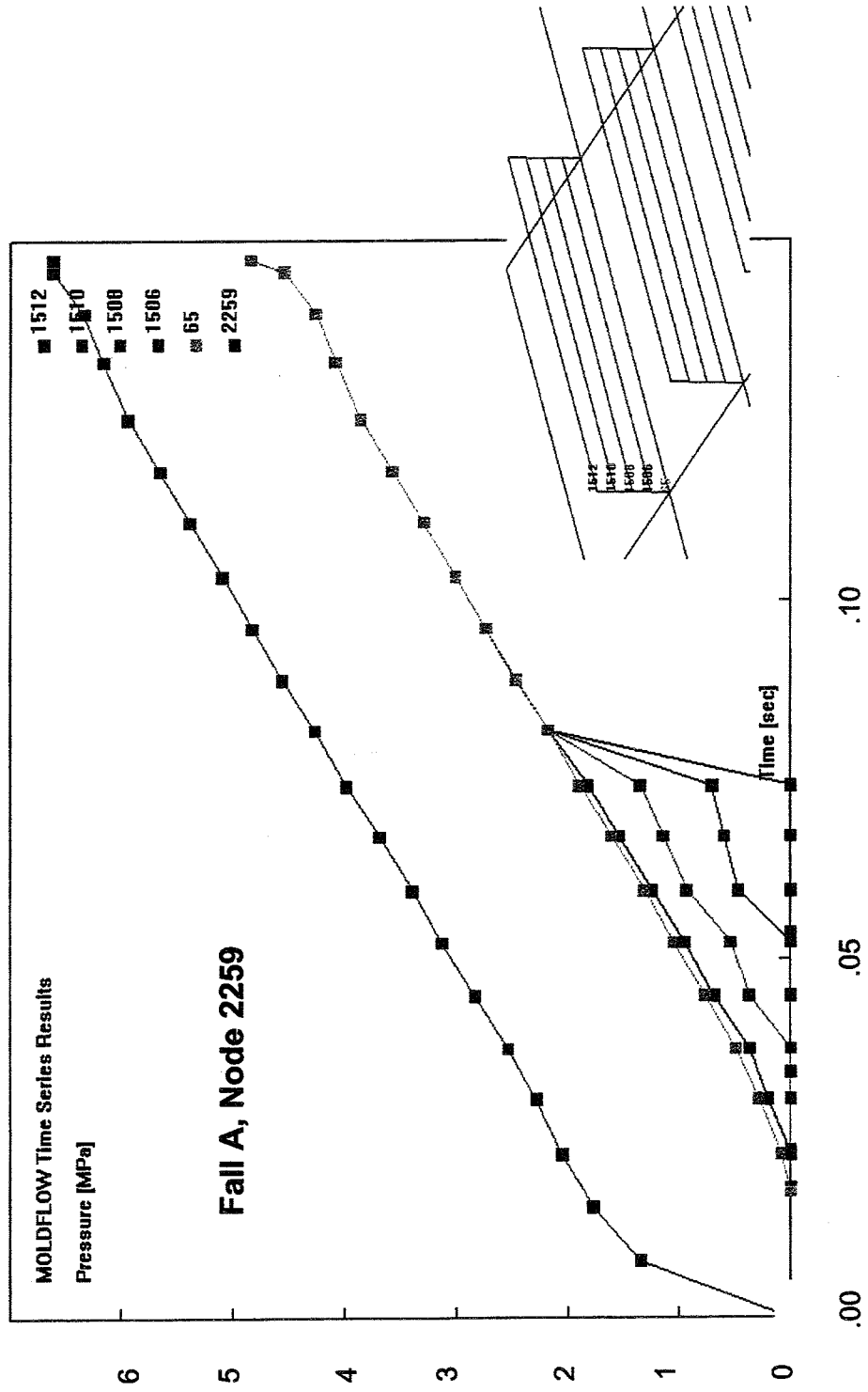
Spritzparameter:

- Werkzeugtemperatur: 155 °C
- Formstofftemperatur: 230 °C
- Füllzeit: 0.14 s

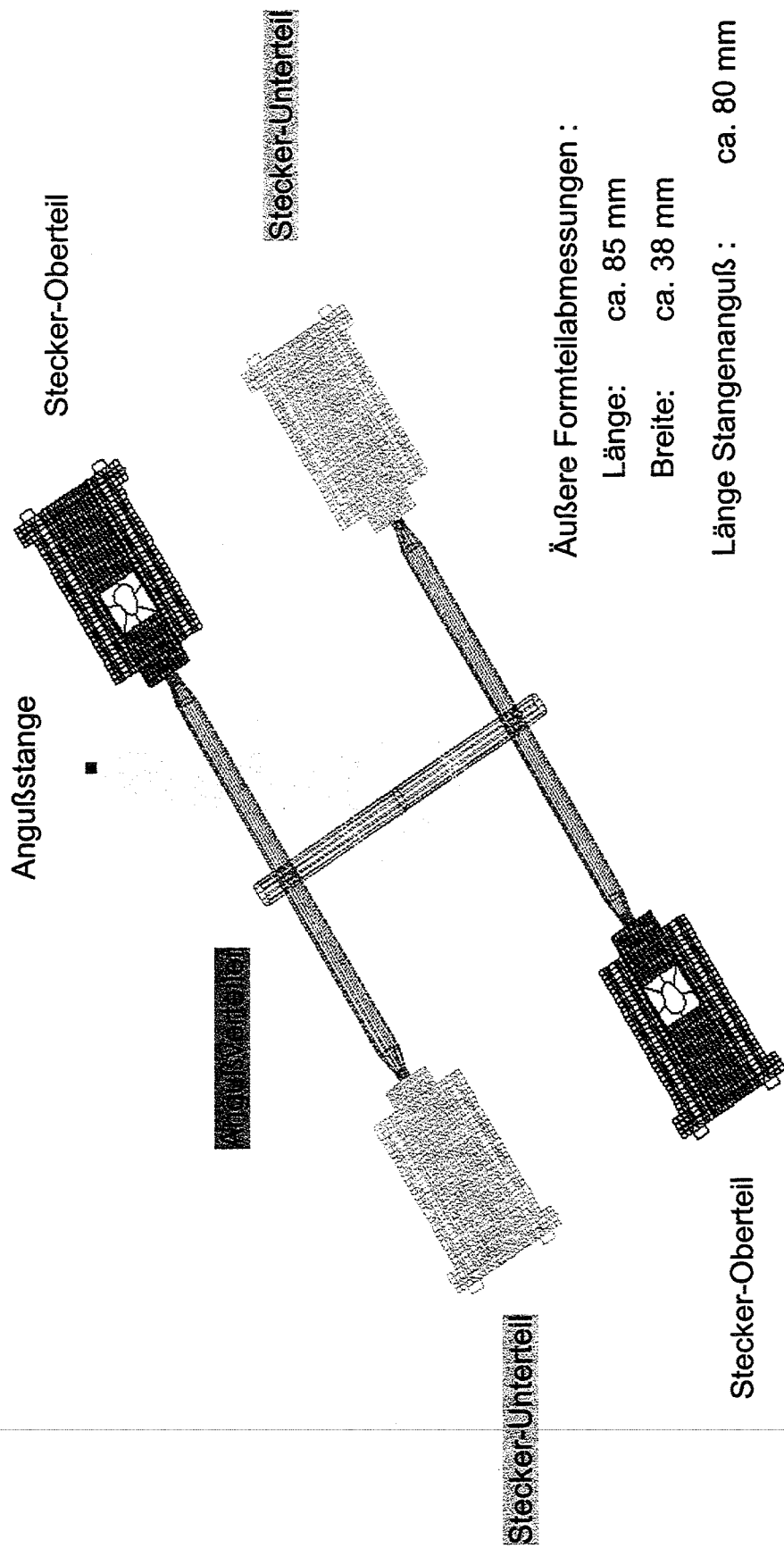
Formstoff: PMMA

Formteilvervolumen: 1.47 cm<sup>3</sup>

### Druckverlauf im angußernen Faserführungssteg am Füllende



## 2,5D-Geometriemodell des Formteils



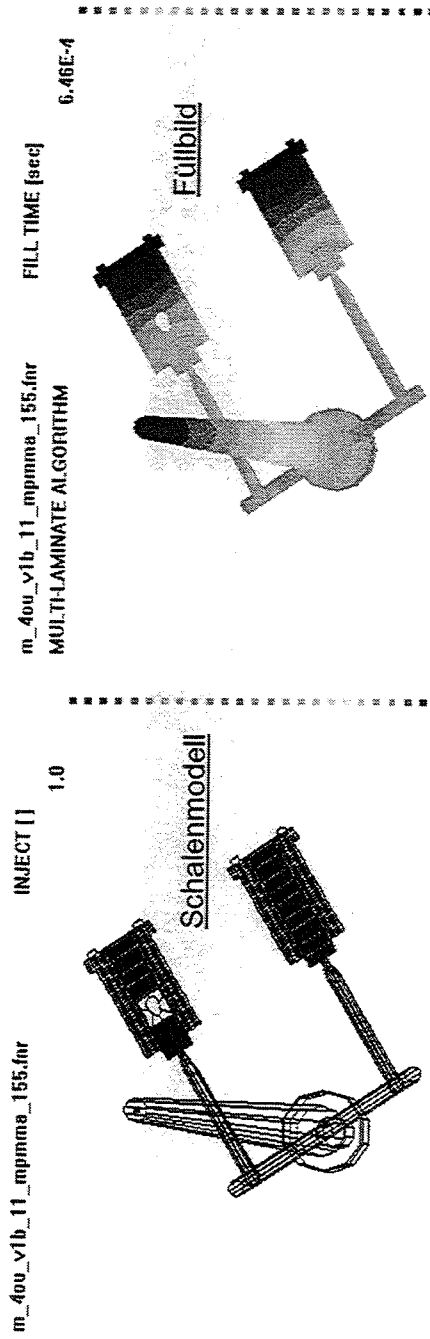
## Simulationsergebnisse

Spritzparameter:

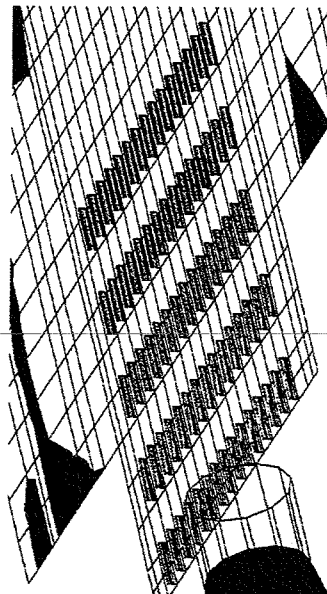
- Werkzeugtemperatur: 155 °C
- Formstofftemperatur: 230 °C
- Füllzeit: 0.4 s

Formstoff: PMMA

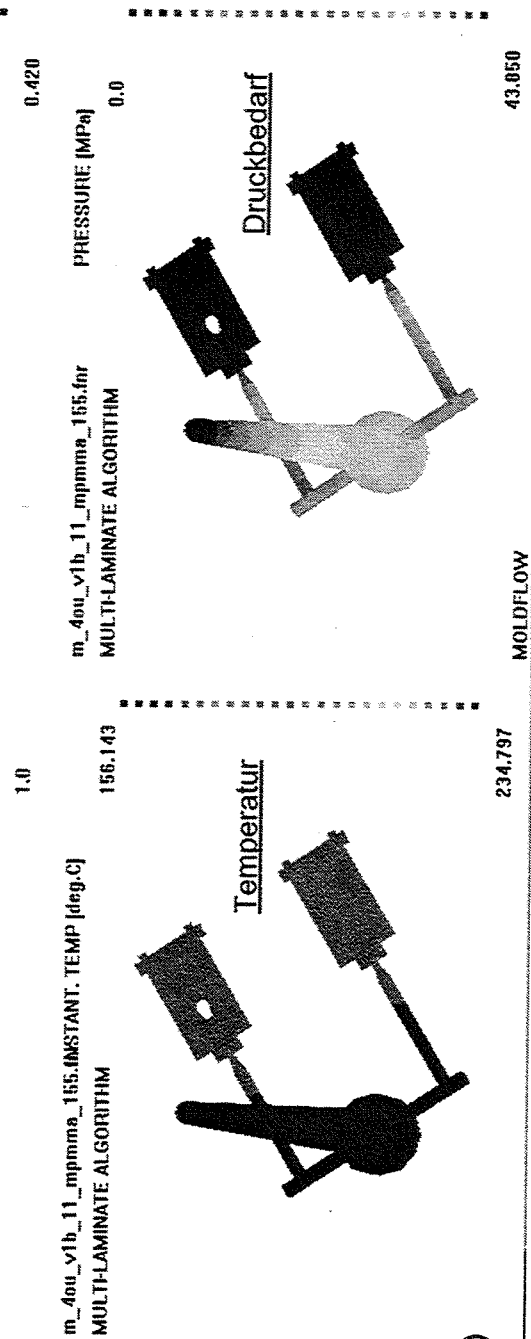
Formteilvervolumen: 4.06 cm<sup>3</sup>



Faserführungsstrukturen



Skalierte Fließfronttemperatur (160 bis 231 °C)



234.797 MOLDFLOW

43.050

## **Simulation zum Mikrospritzgießen**

### **Ausblick**

- **2,5D-Simulationen an mikrostrukturierten Formteilen** liefern weitgehendst verlässliche rheologische Auslegungsdaten für die Werkzeugkonstruktion.
- Ertüchtigung der kommerziellen Programme für die Simulation des Mikrospritzgießprozesses hinsichtlich:
  - ⇒ Berücksichtigung von **Oberflächen- und Kapillarkräften** bei der Fülldruckermittlung.
  - ⇒ **Variotherme Werkzeugtemperaturführung** beim Spritzgießzyklus.
- Ziel sollte ein **3D-Programm** sein, das die Simulation des Mikrospritzgießprozesses an realen Volumenkörpern durchgängig ermöglicht, d.h. von der **rheologischen Auslegung** des Formteils mit Mikrostrukturen, über die **Auslegung der Werkzeugtemperierung** bis hin zur Berechnung des **Formteilverzugs**.





# **Prozeßmodellierung zur Laseroberflächenmodifikation keramischer Substrate**

H.Gruhn, Institut für Materialforschung (IMF I)

Zur Herstellung von thermischen und elektrischen Leitpfaden in der Oberfläche keramischer Substrate für Anwendungen in der Mikroelektronik und der Hochfrequenztechnik wird mittels Laserstrahlung die Substratoberfläche lokal aufgeschmolzen und Fremdpartikel eingebracht. Durch Finite Elemente Modellierung (ABAQUS, FEMGV) wird die Temperaturverteilung beim Laserprozeß in der Keramik berechnet, Breite und Tiefe der Leitpfade bestimmt und die entstehenden Eigenspannungen simuliert. Erreicht werden soll hiermit die Optimierung der Prozeßparameter sowie die Reduzierung der Rißentstehung. In Zukunft soll durch CFD (FIDAP) die sich auf Grund der Marangoniekonvektion in der Schmelze einstellende Partikelverteilung berechnet werden.



## Arbeitsprogramm “Werkstoffe für feinskalige Systeme”

**F+E-Vorhaben:** Lokale Eigenschaftseinstellung von Funktionskeramiken durch laserinduzierte Randschichtmodifizierung

### Prozessmodellierung zur Laseroberflächenmodifikation keramischer Substrate

H. Gruhn, S. Schreck, R. Heidinger, M. Rohde, J. Schneider, K.-H. Zum Gahr

- Einleitung
- Aufgabenstellung der Prozeß- und Modellentwicklung
- Prozeßmodellierung
  - Temperaturverteilung
  - Eigenspannungen und Risse
- Zusammenfassung, Ausblick

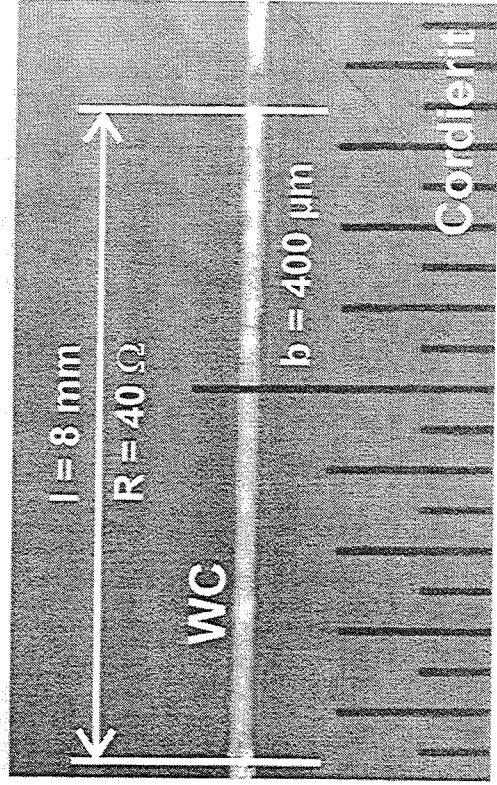
## Prozeßentwicklung I: Aufgabenstellung

Eindispersieren metallischer Hartstoffe  
( TiC, TiN, WC )

in die Oberfläche keramischer Substrate  
( Cordierit ( 2 MgO 2 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 5 SiO<sub>2</sub> ), Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, PZT )

zur Erzeugung thermisch und elektrisch leitender Strukturen  
für Anwendungen in der Mikroelektronik und Mikrosystemtechnik

Spur-Aufsicht:  
WC-Spur  
in Cordierit



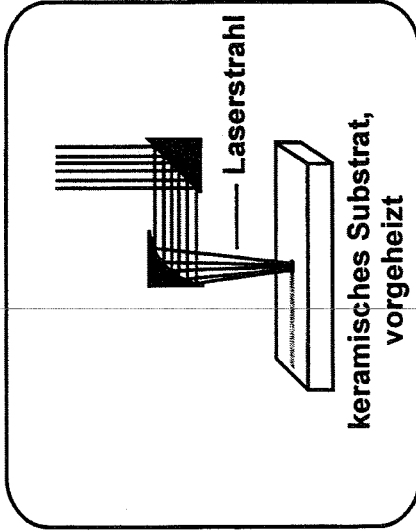
Schichtwiderstand

$$R_{\square} = R b l^{-1}$$

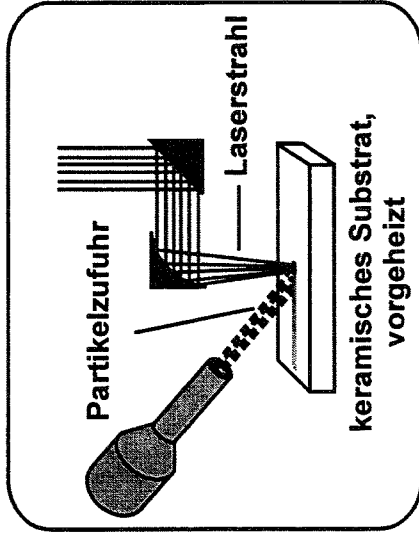
$$R_{\square} = 2 \Omega$$

## Prozessentwicklung II

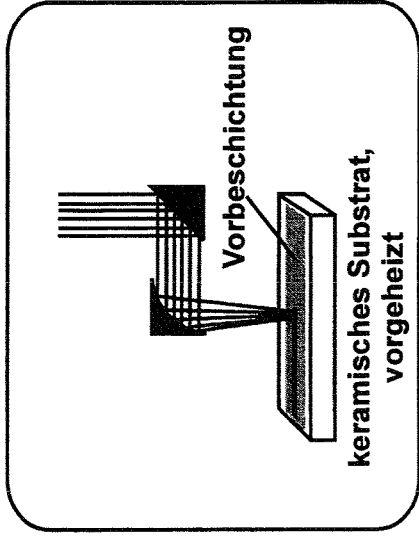
### Umschmelz-Prozess



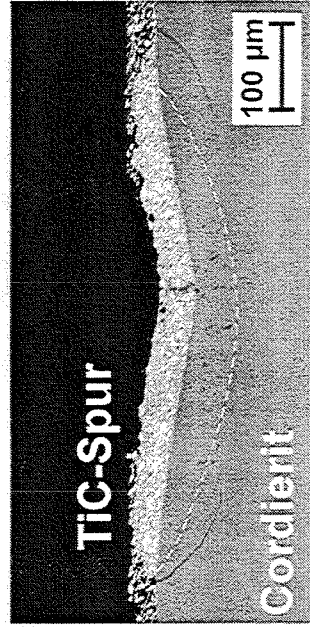
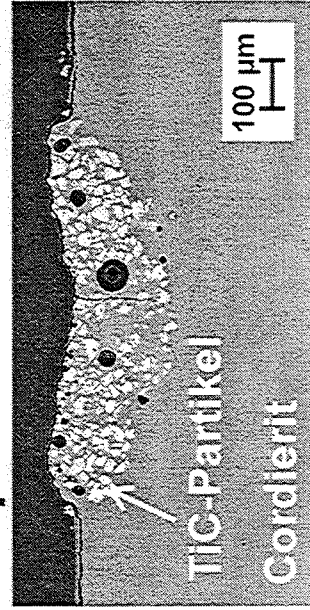
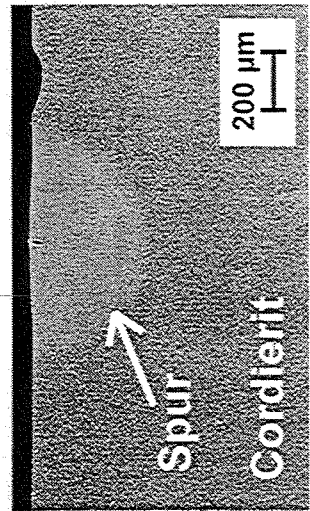
### Einstufiger Prozess



### Zweistufiger Prozess



### Spur-Querschliffe



## Modellentwicklung I: Aufgabenstellung

**Aufgabe:**

Modellierung des Ein- und Zweistufigen Laser-Oberflächen-Dispergierens

**Ziel:**

Vorhersage und definierte Einstellung

- der Breite und Tiefe der dispergierten Spur
- der Eigenspannung und der Reißbildung in der Spur
- der Position und der Konzentration der dispergierten Partikel
- der Phasenumwandlung und Phasenzusammensetzung

in Abhängigkeit der verwendeten Materialien und der Prozessparameter

- Laserleistung, Vorschub, Strahlprofil, Vorheiztemperatur
- der Pulverzufuhr bzw. der Beschichtung

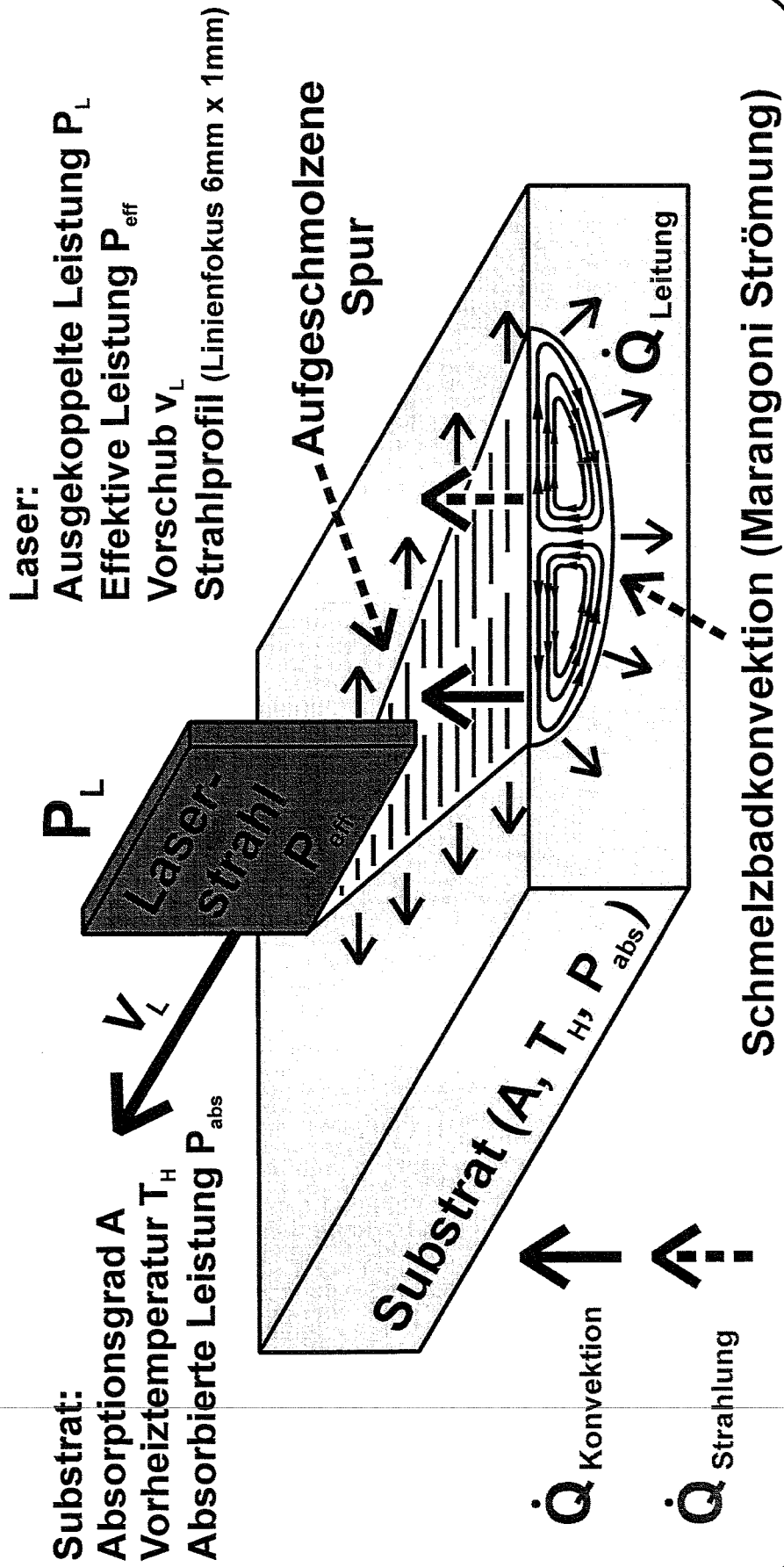
zur Optimierung der Spureigenschaften thermische und elektrische Leitfähigkeit

**1.Schritt:**

Modellierung des Laser-Oberflächen-Umschmelzens, Substratmaterial  $\text{Al}_2\text{O}_3$

## Modellentwicklung II

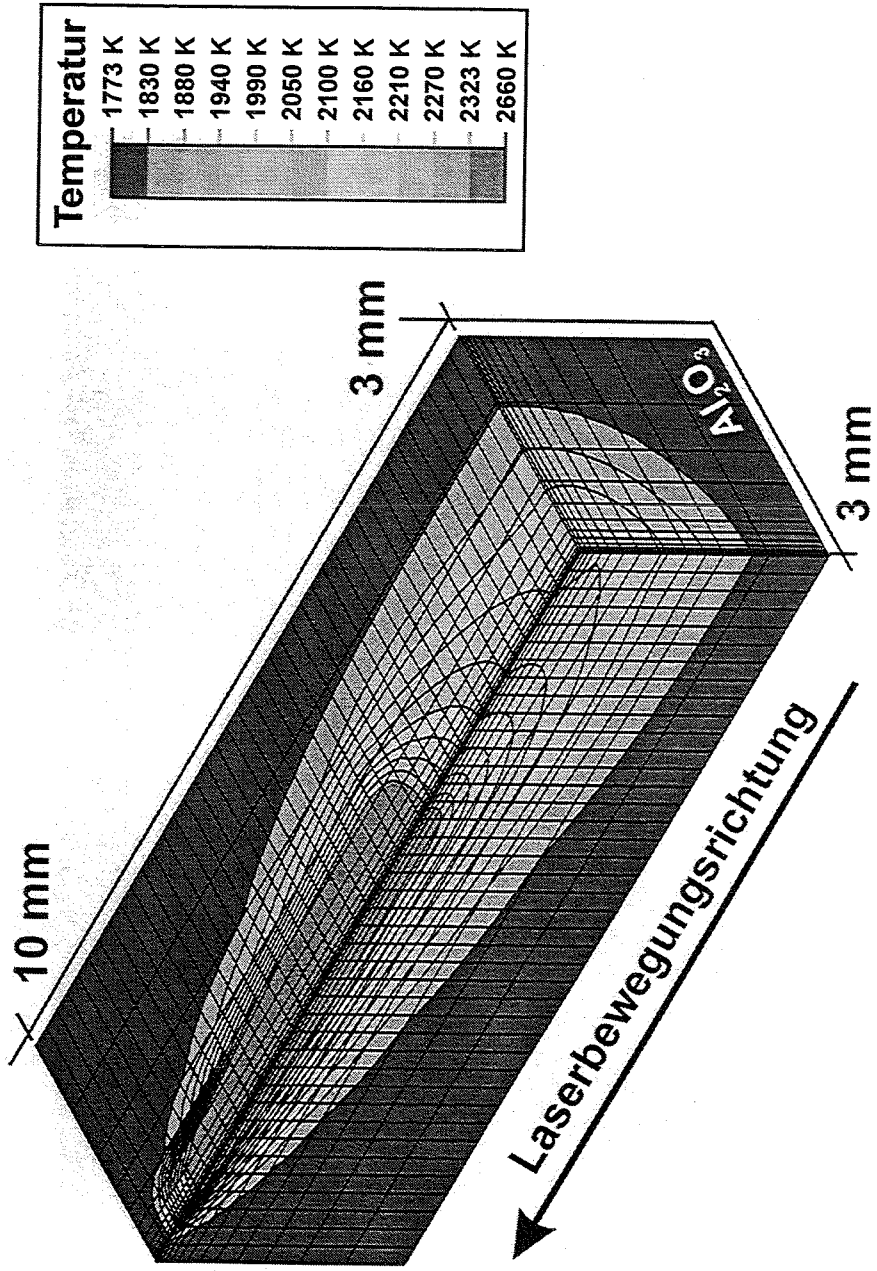
### Thermodynamisches Modell des Laser-Oberflächen-Umschmelzens



## Modellentwicklung III: Finite Elemente Modell

### 3-dim. Berechnung der Temperaturverteilung beim Umschmelz-Prozeß

- Strukturmechanisches Programm ABAQUS
- achsensymmetrisches Modell  
5760 8-Knoten-Elemente
- temperaturabhängige Materialdaten:  
Dichte,  
spezifische Wärmekapazität,  
Wärmeleitfähigkeit
- Strahlung und Konvektion
- Laserstrahlprofil:  
Linien-Fokus 6 mm x 1 mm



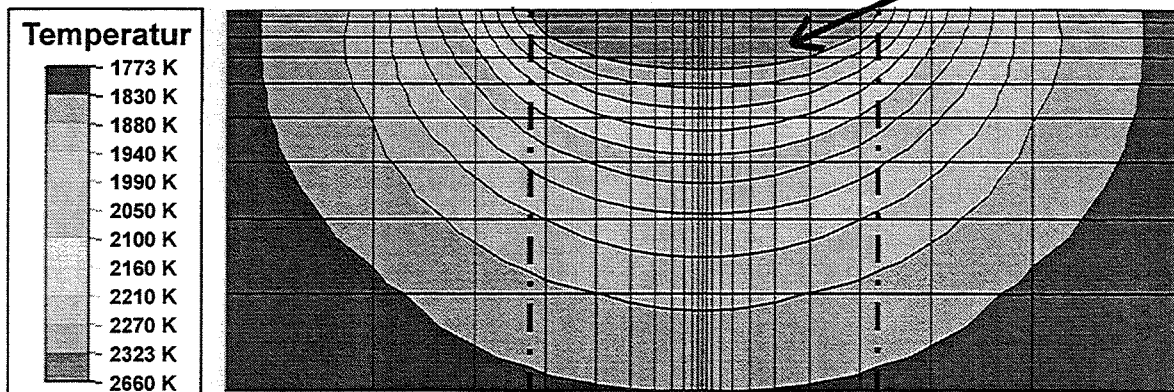


## Modellentwicklung IV: $\text{Al}_2\text{O}_3$

### Modellanpassung

Modellparameter: Anisotrope Wärmeleitfähigkeit  
Absorptionsgrad  $A = 70\%$

Simulation:  $1520\ \mu\text{m} \pm 20\ \mu\text{m}$  Schmelze

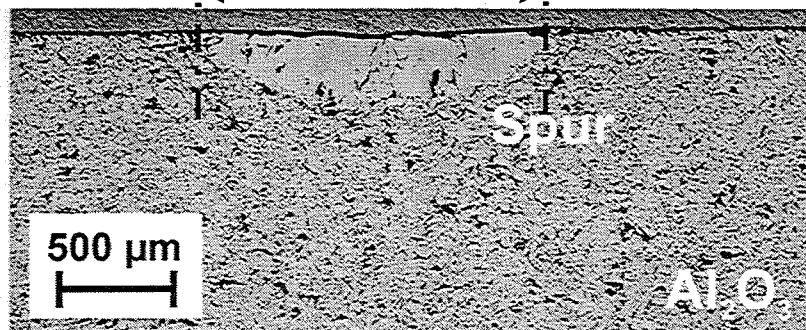


Experiment:  $1560\ \mu\text{m} \pm 40\ \mu\text{m}$

Laserleistung  
 $P_L = 125\ \text{W}$

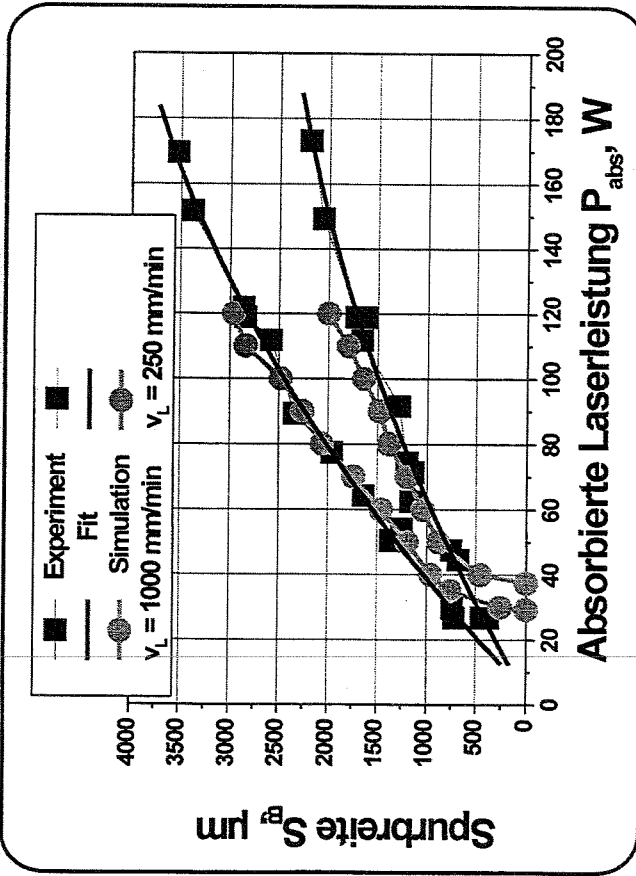
Laservorschub  
 $v_L = 500\ \text{mm} / \text{min}$

Vorheiztemperatur  
 $T_H = 1500^\circ\text{C}$

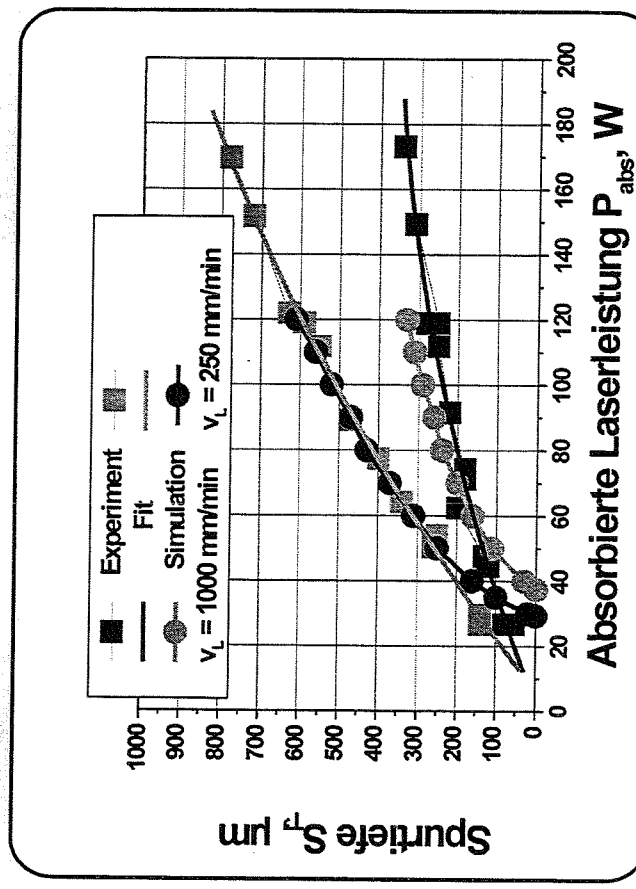


# Modellverifikation: $Al_2O_3$

Vergleich Simulation / Experiment:  
Spurbreite und Tiefe in Abhängigkeit der Laserleistung  
für unterschiedlichen Laservorschub  $v_L$



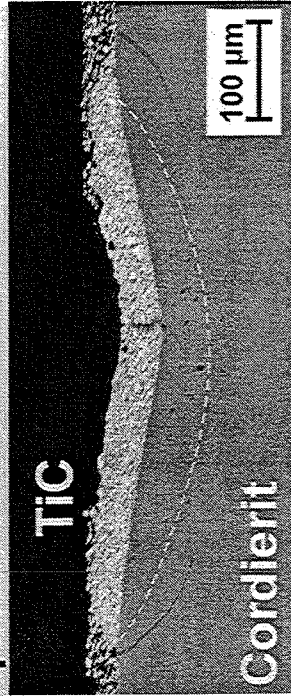
Fit: Polynomial Fit ( $y = a + bx + cx^2$ )



Substratmaterial  $Al_2O_3$   
 Absorptionsgrad der  $CO_2$ -Laserstrahlung in  $Al_2O_3$  angenommen zu  $A = 70\%$   
 Verluste an Laserleistung durch Umlenkspiegel  $V = 15\%$

## Prozeßmodellierung: Risse I

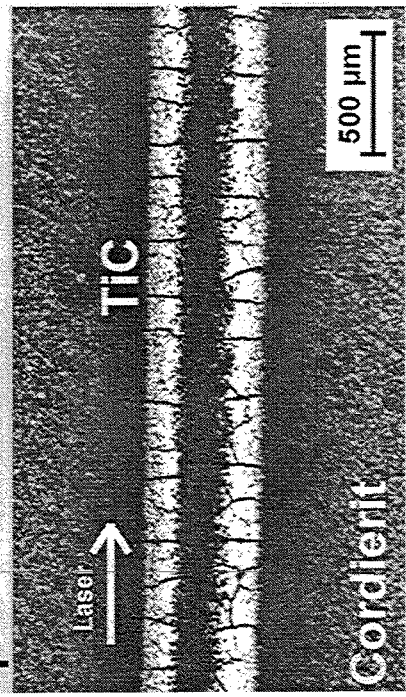
Spur-Querschliff



Risse bilden sich:

- im Substrat
- in der dispergierten Spur quer und parallel zur Laserbewegungsrichtung

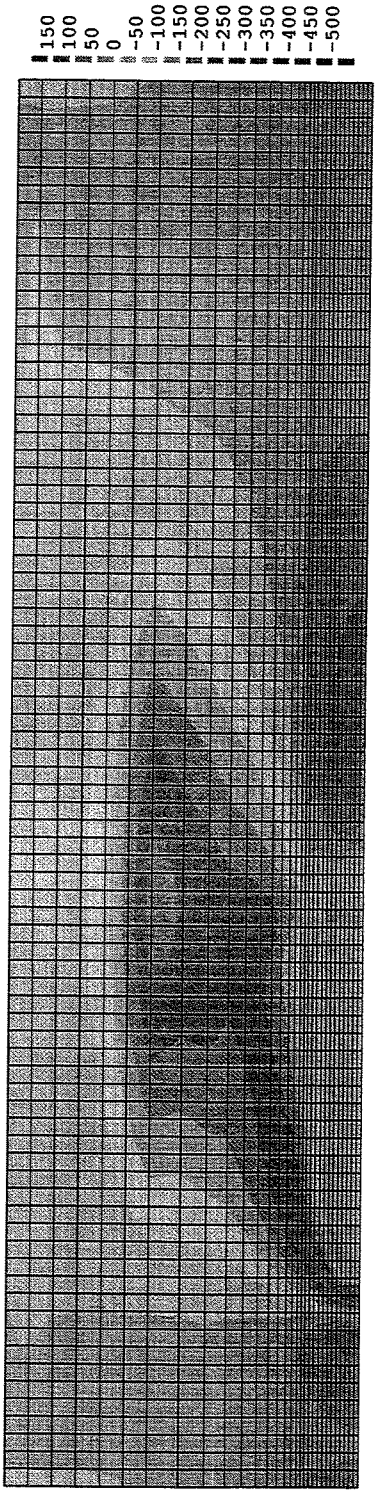
Spur-Aufsicht



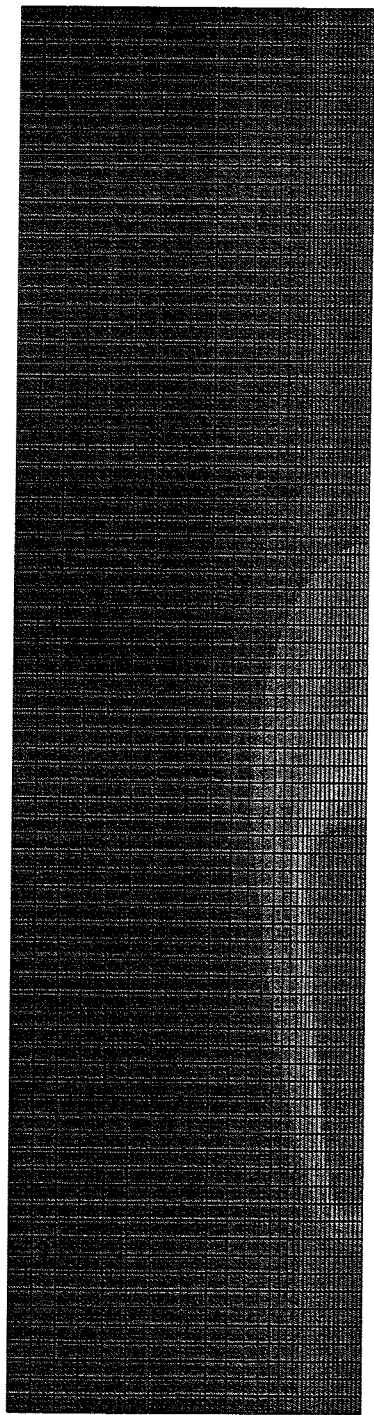
Mögliche Ursachen der Rißentstehung:

- Thermoschock
- Hohe Vorheiztemperatur
- Hoher Widerstand gegen Thermoschock von Cordierit
- ↑ Geringer Einfluß
- Thermische Fehlanpassung

Model: OTIC1  
 LI: STATIC  
 Step: 1 TIME: 1  
 Nodal STRESS S11  
 Max = 174  
 Min = -515



150  
 100  
 50  
 0  
 -50  
 -100  
 -150  
 -200  
 -250  
 -300  
 -350  
 -400  
 -450  
 -500



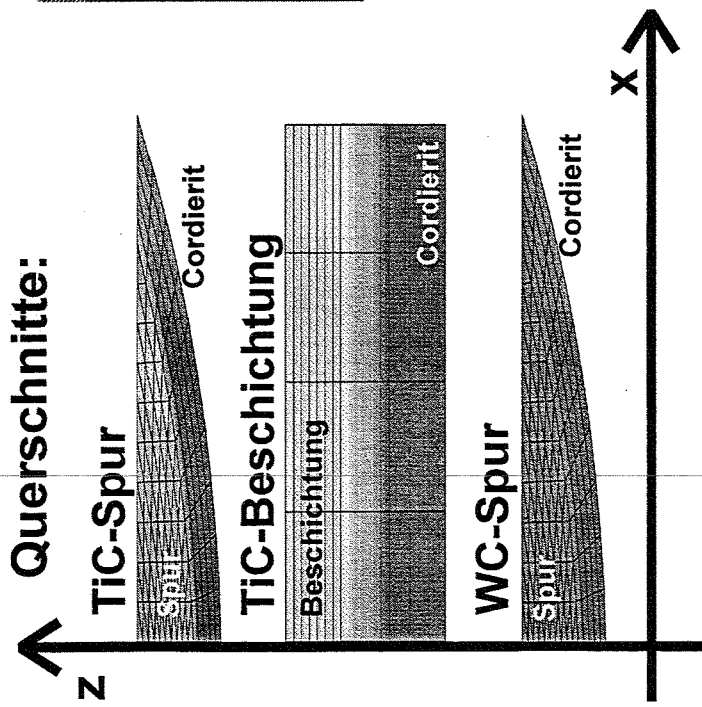
.232E4  
 .227E4  
 .222E4  
 .217E4  
 .212E4  
 .207E4  
 .202E4  
 .197E4  
 .192E4  
 .187E4  
 .182E4  
 .177E4

x  
 y

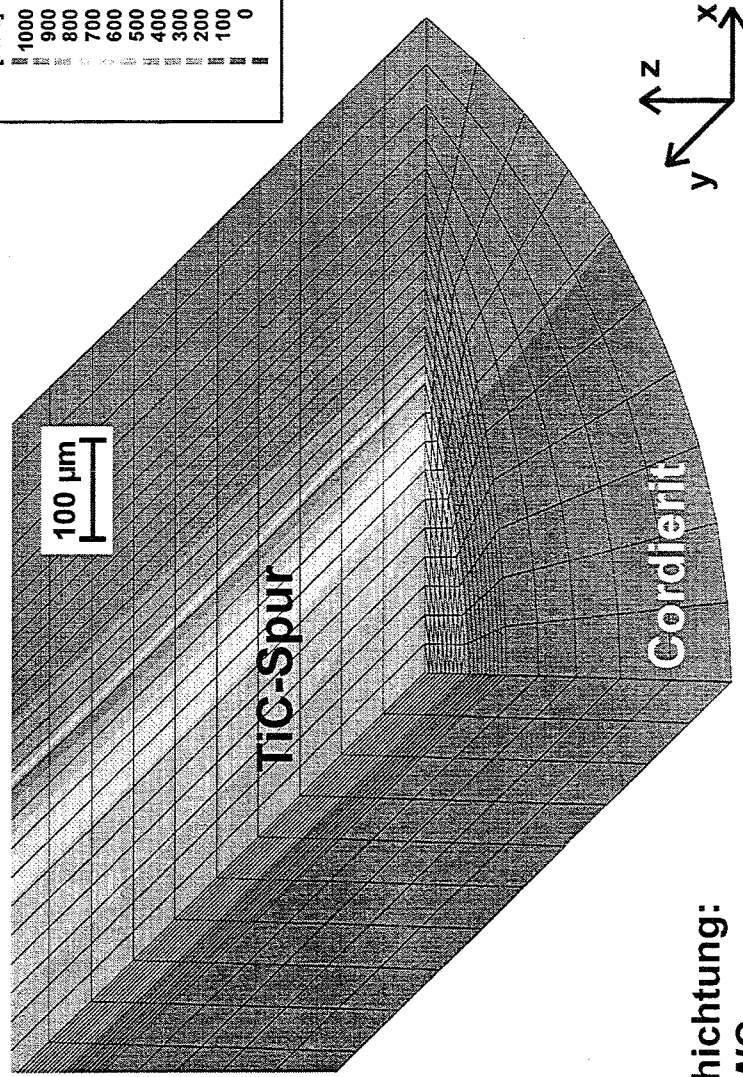
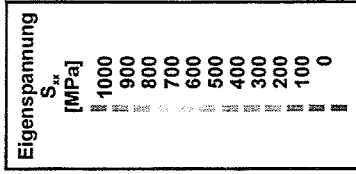
Model: OSPA2T  
 LI: HEAT TRANSFER, DELTMX  
 Step: 291 TIME: .8  
 Nodal NT  
 Max = .266E4  
 Min = .177E4

## Prozessmodellierung: Risse III

Eigenstressen  $S_{xx}$  in Spur und Substrat  
 bei Abkühlung von  $T_{plast}$  auf Raumtemperatur

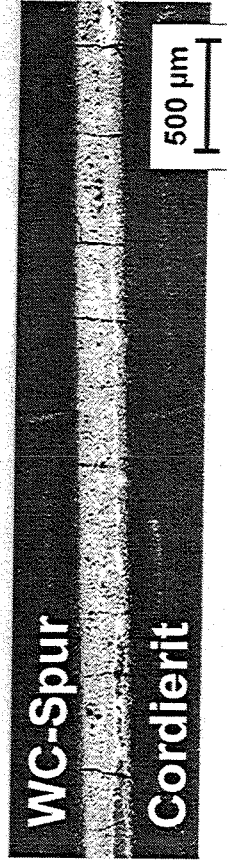
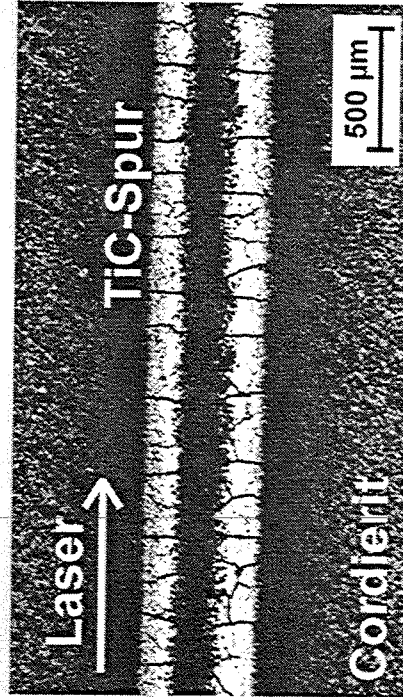


Zusammensetzung Spur / Beschichtung:  
 50 % Cordierit + 50 % TiC oder WC

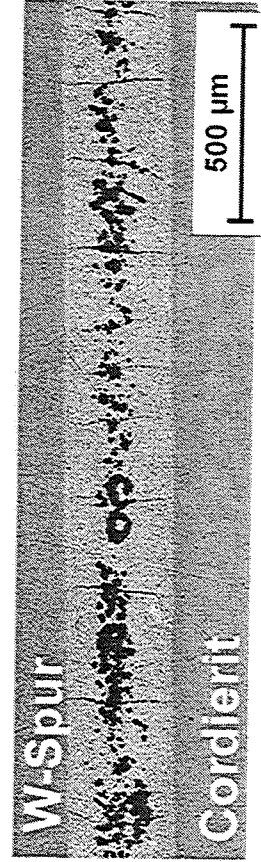


## Prozessmodellierung: Risse IV

Reduzierung der Rißbildung  
durch Verwendung von an das thermische Ausdehnungsverhalten  
von Cordierit angepassten Additiven



Aufsichten  
verschiedener dispergierter Spuren



## **Zusammenfassung und Ausblick**

### **Status:**

- Kompaktes Modell zur Simulation der Schmelzbadgeometrie mit guten Ergebnissen für  $\text{Al}_2\text{O}_3$  und Cordierit
- Erste Berechnungen der thermischen Eigenspannungen zum Verständnis und zur Vermeidung der Rißentstehung

### **Modellentwicklung:**

- Übertragung des Modells auf das Substratmaterial PZT
- Weitere Untersuchungen und Eigenspannungsberechnungen zur Rißentstehung
- Berechnung des Temperaturgradienten im Substrat beim Vorheizen im (Vakuum-) Ofen als Randbedingung für die Simulation
- 3-dim. Modellierung der Strömungsprozesse im Schmelzbad für den Umschmelz- / Einstufigen / Zweistufigen Prozeß (Fluid-dynamisches Programm FIDAP)



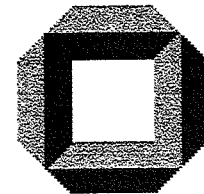


# **Simulation kapillarisch getriebener Fluide in Mikrokanälen**

S. Halstenberg, Institut für Angewandte Informatik (IAI)

Der Beitrag diskutiert den Einsatz des Werkzeugs CFX4 (Firma AEATechnology) hinsichtlich laminarer Strömungen in Mikrokanälen. Das Konzept zur Erstellung eines Gesamtmodells am Beispiel eines medizinischen Teststreifens wird vorgestellt und die hierzu durchgeführten Simulationen einphasiger als auch zweiphasiger Strömungen werden vorgestellt. Aufgezeigt wird auch die Erstellung parametrisierbarer Modelle, die zur Durchführung von Parameterstudien notwendig sind.





PMT Workshop  
26. Oktober 2000

## **Simulation kapillarisch getriebener Fluide in Mikrokanälen**

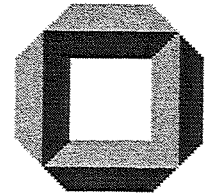
**S. Halstenberg**  
Institut für Angewandte Informatik/Automatisierungstechnik  
Universität Karlsruhe

BMBF-Verbundprojekt

**OMID**

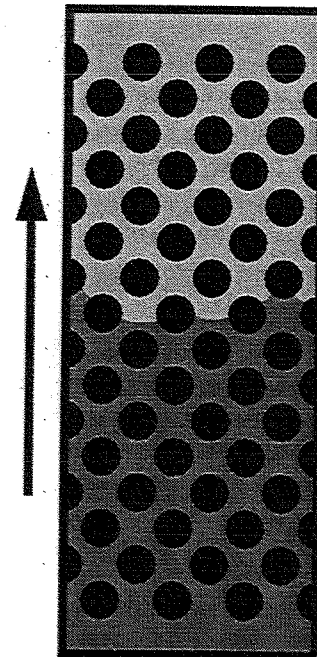
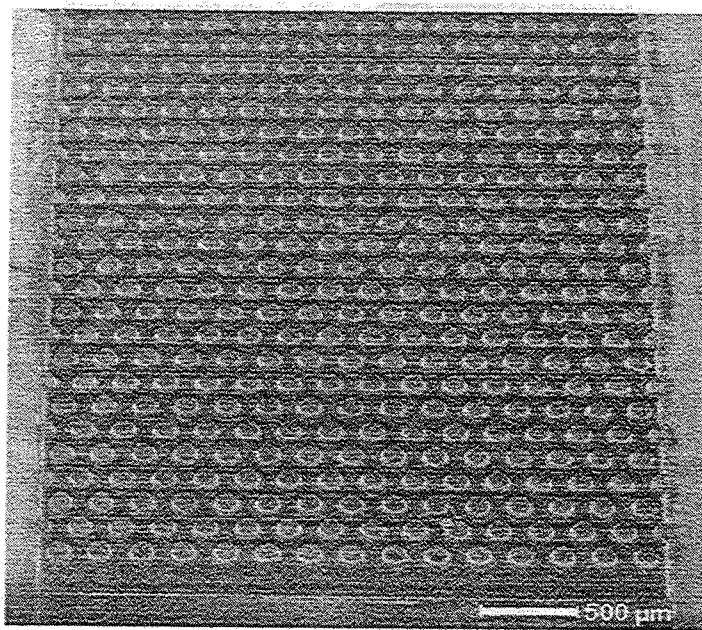
(Optimierung von Mikrosystemen für Diagnose-  
und Überwachungsanwendungen)

- **Motivation**
- **Werkzeugevaluierung:  
Offener Plattenspalt  
Rechteckkanal**
- **Implementierung einer Modellkopplung am  
Beispiel des Mikrokanals**
- **Erstellung parametrisierbarer Modelle für  
strukturierte Kanäle**
- **Ausblick**



## Motivation

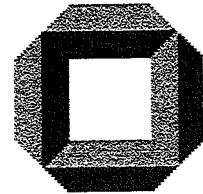
**Entwicklung medizinischer Teststreifen auf Basis strukturierter Mikrokanäle unter Einsatz numerischer Simulationsverfahren**



**Mikrokanal mit integrierter Säulenstruktur**

### **Phänomenologische Charakterisierung**

- **Zweiphasenströmung mit freier Oberfläche**  
→ komplexe Geometrie
- **kapillarisch getriebene Strömung**  
→ laminares und inkompressibles Problem
- **transiente Problemstellung**



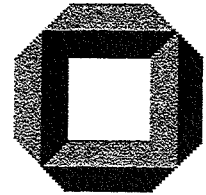
## **Werkzeugevaluierung**

### **Erstellung einfacher Testmodelle:**

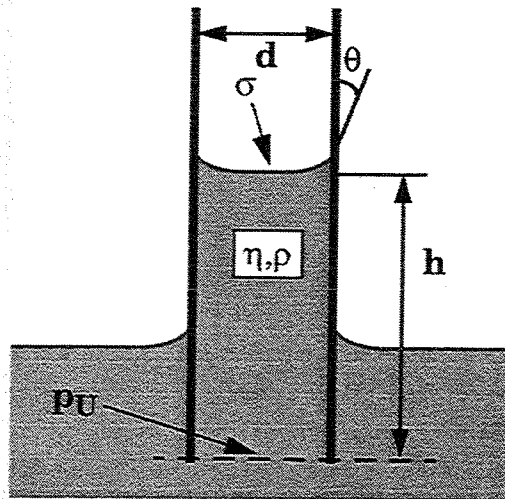
- **Einarbeitung in die Thematik**
- **Evaluierung kommerzieller Simulationswerkzeuge:**
  - CFX 4 der Firma AEA Technology (Finite Volumen Methode)**
  - FLOW-3D der Firma Flow Science (Finite Differenzen Methode)**
- **Lokalisierung möglicher Problemzonen und Erarbeitung entsprechender Lösungen**

### **Testmodelle:**

- **Offener Plattenspalt**
- **Rechteckiger Mikrokanal**
- **Modell zur Kontaktwinkelbestimmung**
- **Modellkopplung am Beispiels des Mikrokanals**



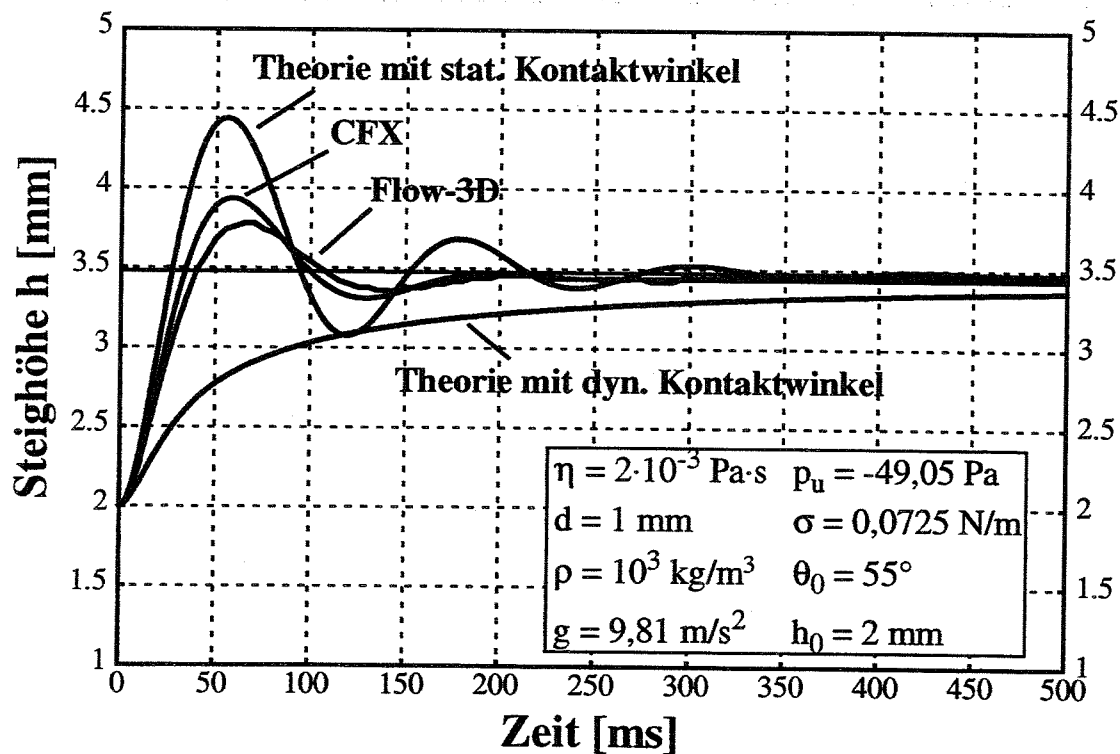
## Offener Plattenspalt



Das zeitliche Verhalten der Fließfront läßt sich mit folgender Differentialgleichung beschreiben:

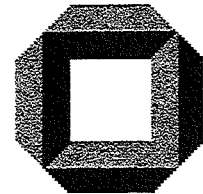
$$\ddot{h} + \frac{12\eta}{d^2\rho} \dot{h} + g - \frac{p_U}{\rho h} - \frac{2\sigma \cos\theta}{d\rho h} = 0$$

mit  $h(t=0) = 0$  und  $\dot{h}(t=0) = h_0$ .



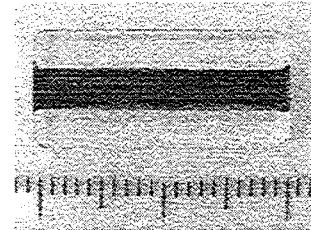
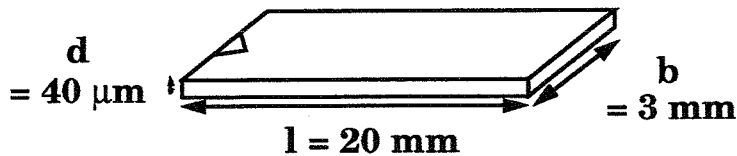
**Dynamischer Kontaktwinkel nach BRACKE:**

$$\cos(\theta_d) = \cos(\theta_0) - 2(1 + \cos(\theta_0)) \cdot \sqrt{\frac{\eta \dot{h}}{\sigma}}$$



# Fließverhalten in rechteckigen Mikrokanälen

Rechteckkanal mit  $b \gg d$



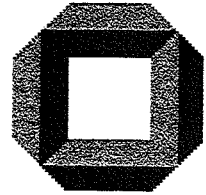
- **Laminare Strömung im Rechteckkanal:**

$$\dot{V} = \frac{d^3 b}{12\eta l [1 + (d/b)^2]} \cdot dp$$

- **Vergleich der Durchflüsse [ $10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$ ]:**

Breite [mm]	Dicke [ $\mu\text{m}$ ]	dp = 200 mbar			dp = 400 mbar		
		Theorie	Simulation	Abweichung	Theorie	Simulation	Abweichung
1	25	0.129	0.132	2	0.258	0.265	3
	40	0.527	0.537	2	1.055	1.075	2
	100	8.251	7.890	4	16.502	15.966	3
3	25	0.387	0.401	3	0.774	0.802	3
	40	1.584	1.638	3	3.168	3.277	3
	100	24.725	24.704	0	49.460	50.089	1
5	40	2.640	2.739	4	5.280	5.479	4
	50	5.156	5.344	4	10.313	10.688	4
	100	41.238	41.519	1	82.477	84.242	2

- **Übereinstimmung der theoretischen Durchflüsse zu Meßergebnissen: zwischen 84% und 103% (STEAG microParts)**

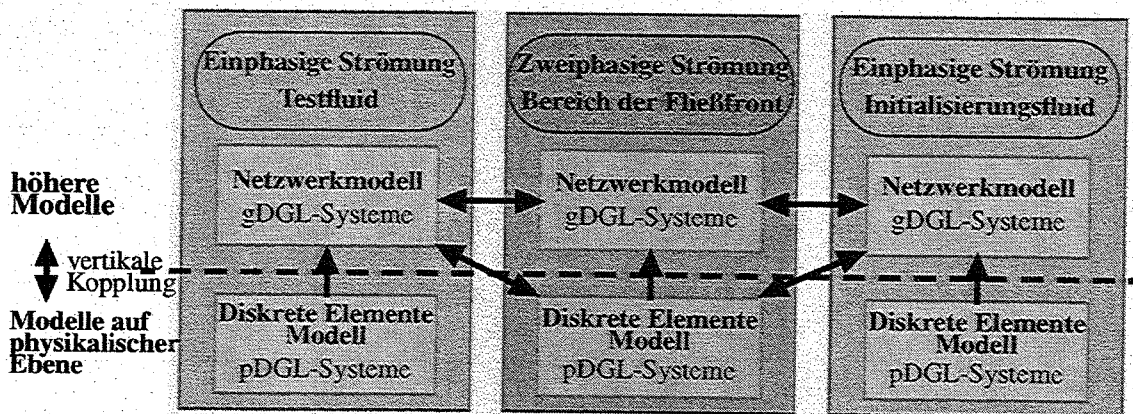


## Gesamtmodell der medizinischen Teststreifen

- **Zu hohe Rechenzeiten:**

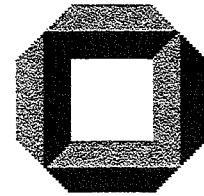
Simulator	Zeitschrittweite	Anzahl der Iterationen	$t_{\text{end}}$	Anzahl Elemente	CPU-Zeit
CFX4	fest: 0,1 ms	fest: 15	0,5 s	1000	3h29'
CFX4	dynamisch	dynamisch	0,48 s	1000	55'
FLOW-3D	dynamisch	dynamisch	0,5 s	1200	1h54'
FLOW-3D	dynamisch	dynamisch	0,5 s	432	19'

- **Simulator- bzw. Modellkopplung:**



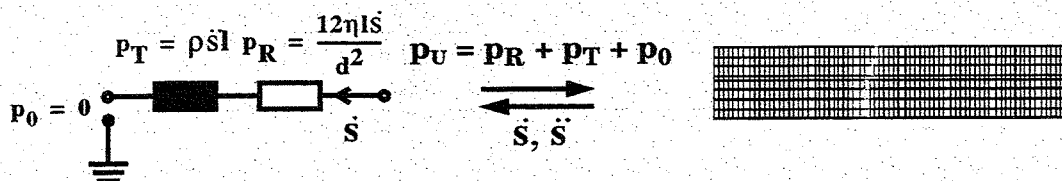
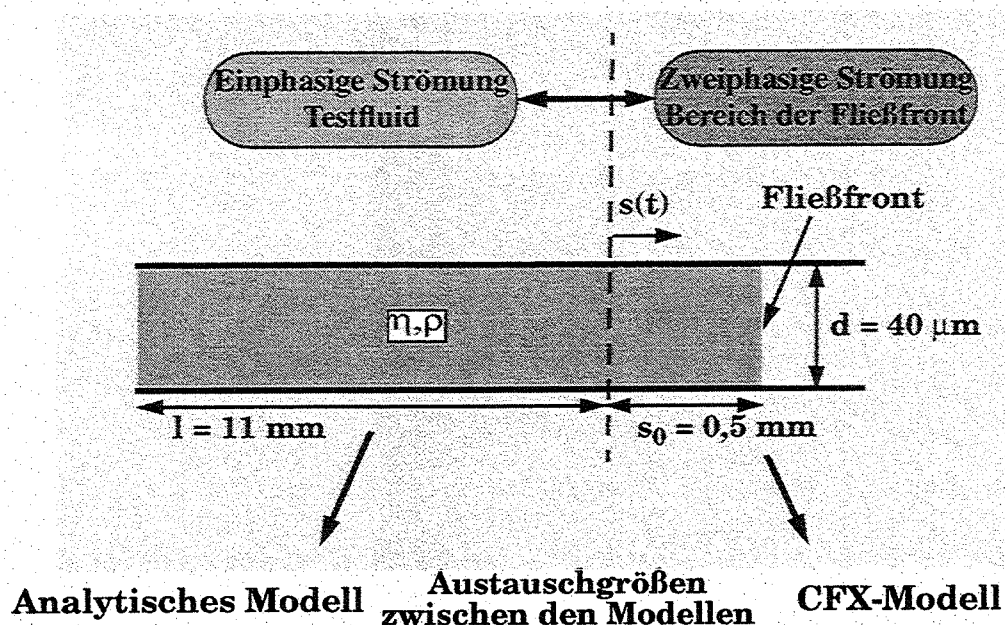
→ **Besondere Anforderungen an das Simulationswerkzeug:**  
**CFX ist gegenüber FLOW-3D das offenere Simulationswerkzeug**



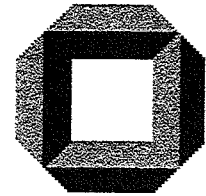


## Modellkopplung am Beispiel des Mikrokanals

- **Kopplung eines einfachen analytischen Modells mit dem CFX-Modell**

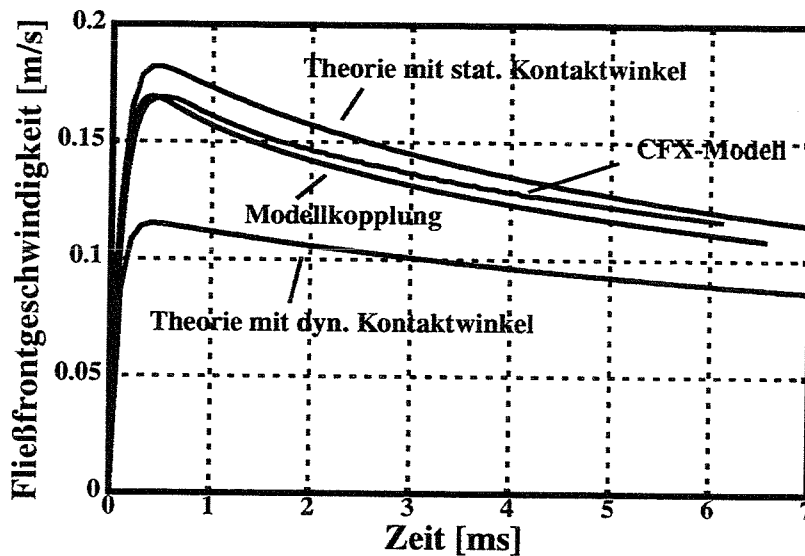


- **Implementierung des analytischen Modells und Kopplung der beiden Modelle mit Fortran-User Routinen in CFX**



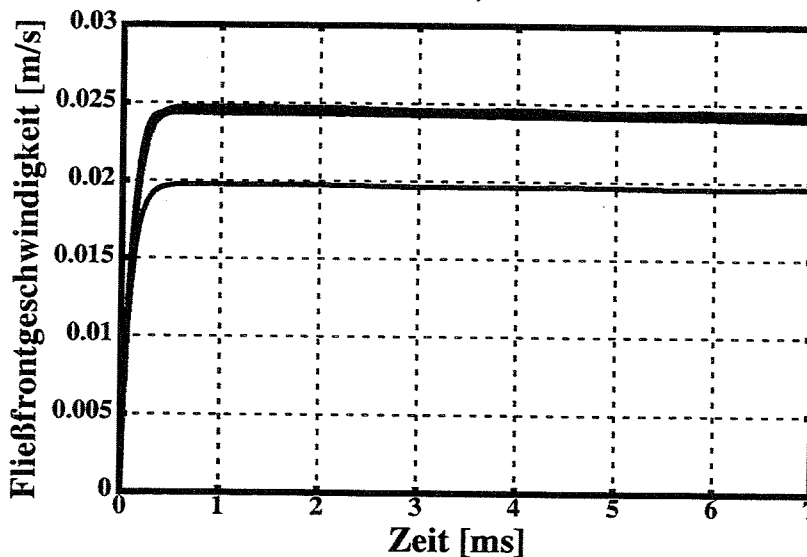
# Erste Ergebnisse der Modellkopplung

Mikrokanal mit 1,5 mm Vorlauf

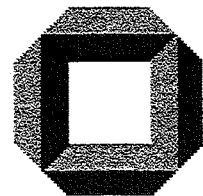


	Modellkopplung	CFX-Modell
Rechenzeit pro 1 ms Simulationszeit	12,4 min	6,2 min

Mikrokanal mit 11,5 mm Vorlauf



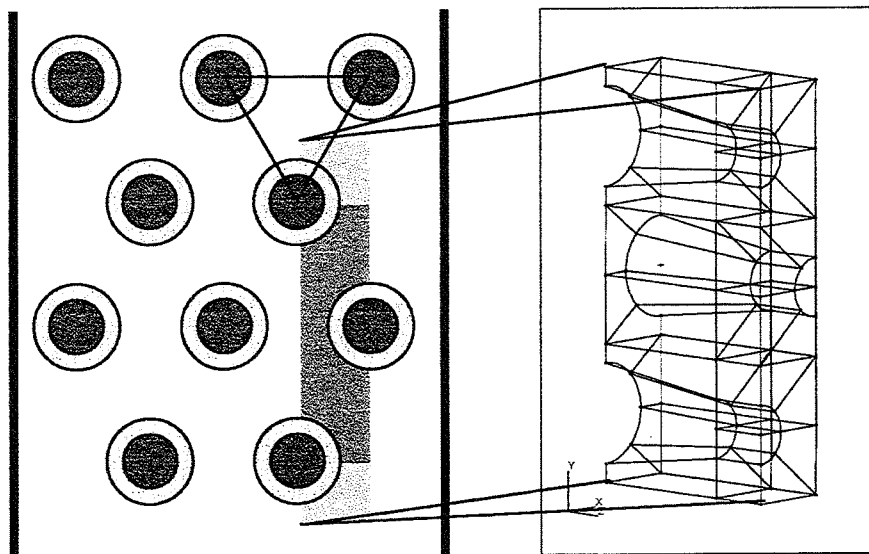
	Modellkopplung	CFX-Modell
Rechenzeit pro 1 ms Simulationszeit	11,4 min	24,4 min



## Geometriedaten zweier Teststrukturen

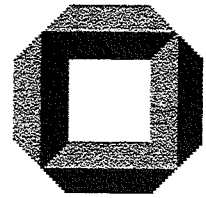
- **Kanal mit runden Säulen:**

**Kanallänge:** 20 mm  
**Kanalbreite:** 1 mm, 3 mm, 5 mm  
**Säulenhöhe:** 25  $\mu\text{m}$ , 50  $\mu\text{m}$   
**Durchmesser der Säulendeckfläche:** 10  $\mu\text{m}$   
**Der Säulenabstand ist das Doppelte des Säulendurchmessers auf halber Höhe.**  
**Die Säulen sind in einem gleichseitigen Dreieck angeordnet.**  
**Der Neigungswinkel der Säulenwände beträgt 8°.**



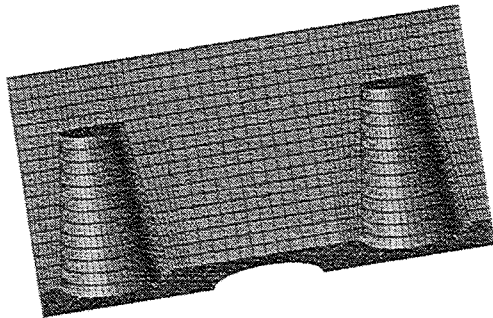
- **Kanal mit Lamellen:**

**Lamellenlänge:** 50  $\mu\text{m}$   
**Lamellenbreite:** 10  $\mu\text{m}$   
**Abstand der Lamellen = 2 · mittl. Breite**



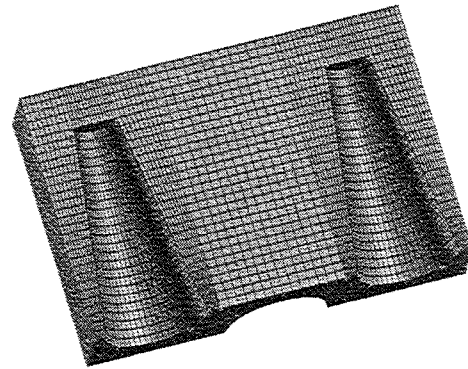
## Varianten der Teststrukturen

### Kanal mit runden Säulen



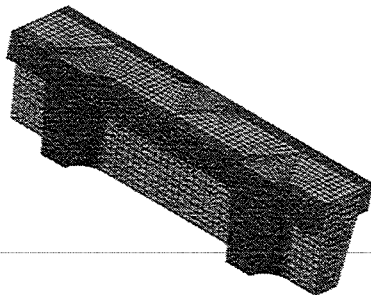
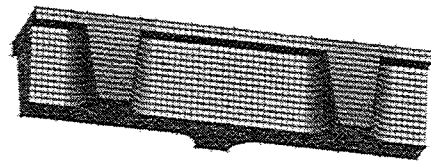
Säulenhöhe: 25  $\mu\text{m}$

Säulenhöhe: 50  $\mu\text{m}$

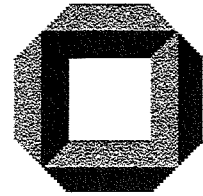


### Kanal mit Lamellen

Deckelabstand: 4  $\mu\text{m}$

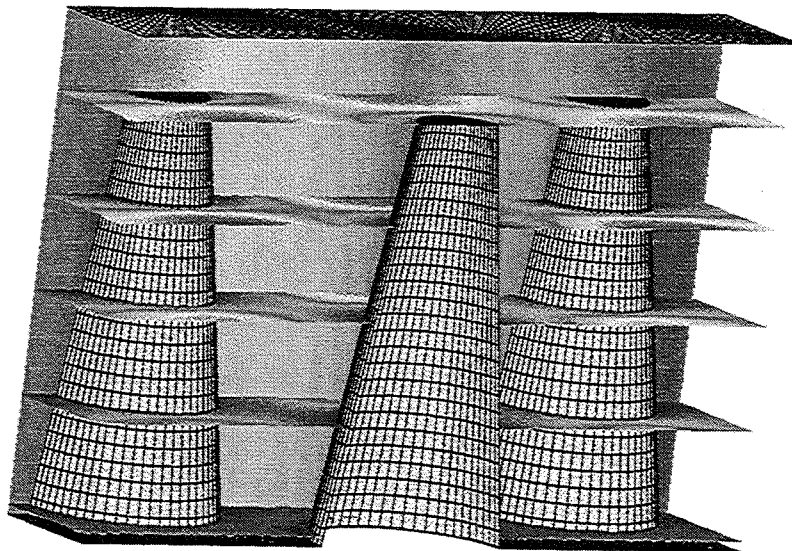


Deckelabstand: 10  $\mu\text{m}$



## Modellparameter

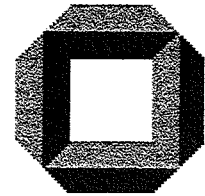
**Eingangsparameter:**  
Geometrie  
Druck am Einlaß und Auslaß  
Vernetzung  
Simulationsablaufsteuerung



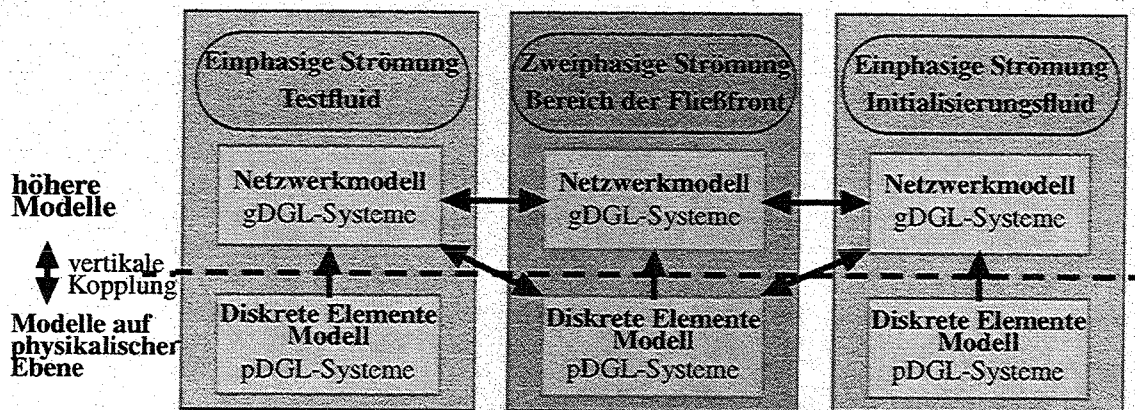
**CFX-Simulation einer stationären Strömung**



**Ausgangsparameter:**  
Volumenstrom  
Strömungswiderstand



## Ausblick



- **Weiterentwicklung der CFX-Modelle für die strukturierten Kanäle zur Simulation der einphasigen Strömung**
- **Durchführung von Variantensimulationen zur Erstellung höherer Modelle**
- **Entwicklung der CFX-Modelle für die strukturierten Kanäle zur Simulation der zweiphasigen Strömung**
- **Modellkopplung und Optimierung der Strukturen**

## **Variantensimulation mit NetSim**

A. Quinte, Institut für Angewandte Informatik (IAI)

Es wird der im Rahmen einer Doktorarbeit entwickelte Multisimulationsmanager NetSim (Manager for Networked Multiple Simulation) vorgestellt. NetSim ermöglicht dem Anwender die automatisierte Durchführung umfangreicher Variantensimulationen verteilt auf mehreren Rechnern. Am Beispiel eines passiven Mikroventils und am Beispiel strukturierter Mikrokanäle wird der Einsatz von NetSim mit den Simulationstools Ansys/Flotran und CFX4 gezeigt.





# **Variantensimulationen mit NetSim**

**A. Quinte**  
**Institut für Angewandte Informatik**

- **Motivation**
- **NetSim**
- **Anwendungen mit NetSim**

**Mikroventil (Ansys/Flotran)**

**Mikrostrukturierte Kanäle (CFX)**

## **Motivation**

### **Problem:**

**Parameterstudien bzw. die Erzeugung multidimensionaler Kennlinien erfordern in der Regel die Durchführung einer großen Anzahl von Variantensimulationen.**

- hoher Verwaltungsaufwand**
- lange Rechenzeiten**
- hohe Fehleranfälligkeit**

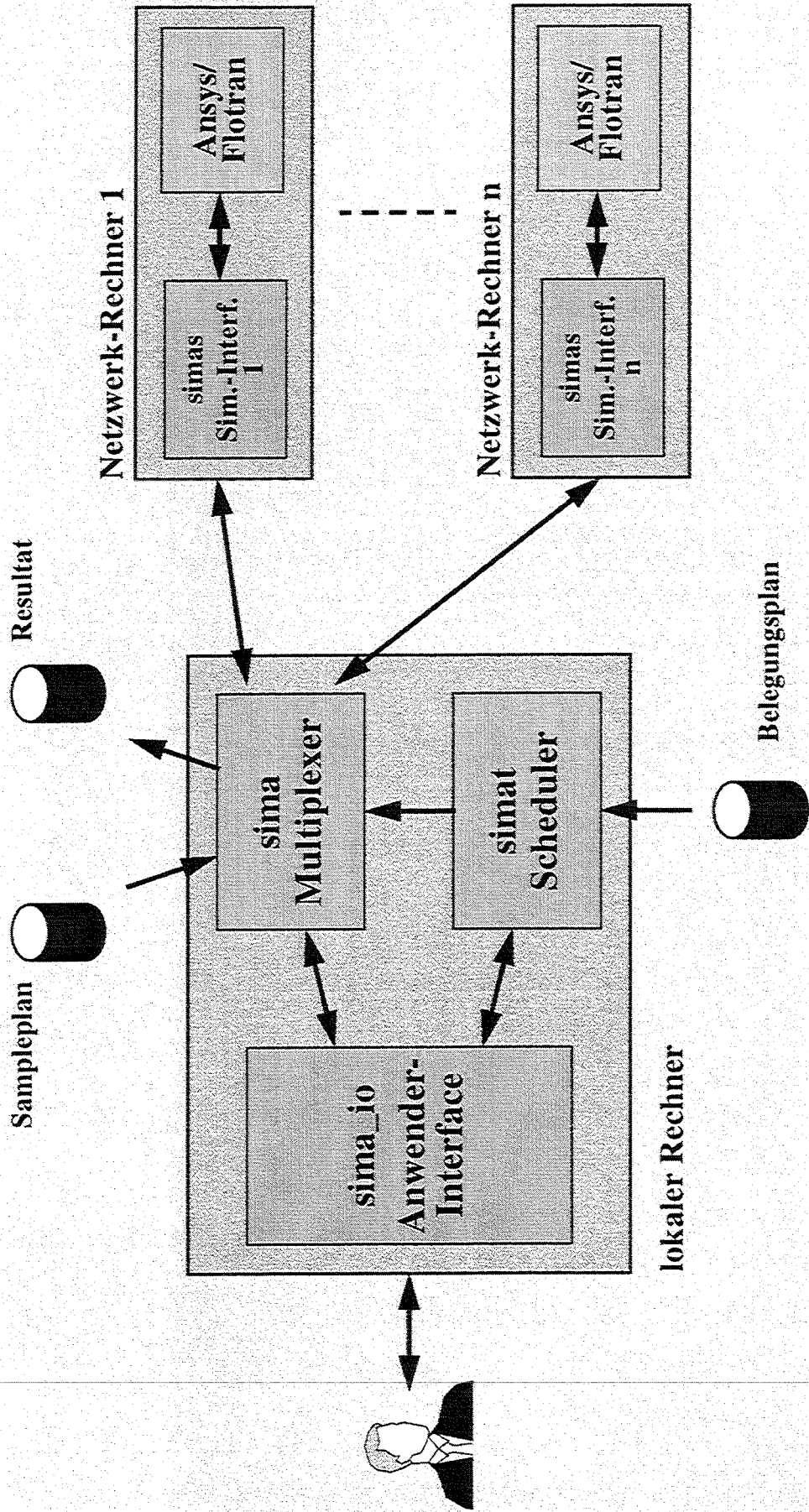
### **Lösung:**

**Manager for Networked Multiple Simulation**

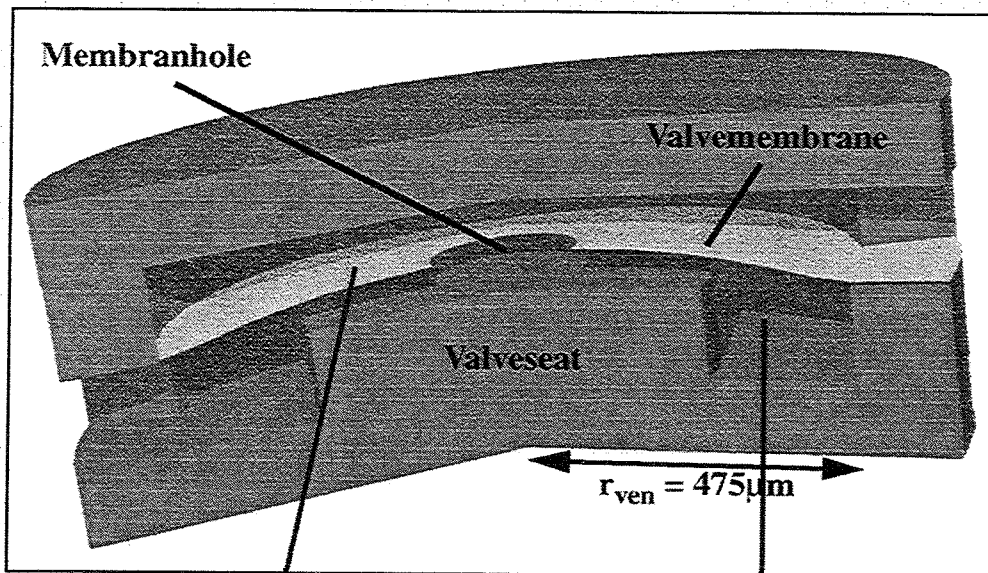
**NetSim ermöglicht die automatisierte und verteilte Durchführung von Variantensimulationen in einem Rechnernetzwerk.**

**Literatur: FZKA 5951**

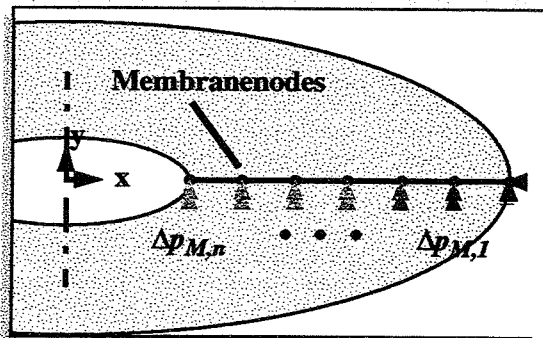
# Manager for Networked Multiple Simulation (NetSim)



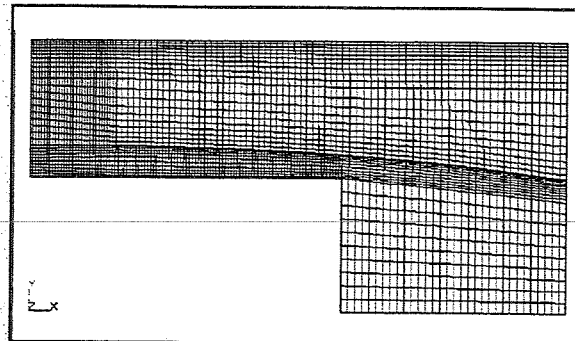
# Microvalve



**Structural model**



**Fluid model**



## (Pre-) Optimization of the Microvalve

	Number of designparameters
Microvalve	9
Micropump	> 40

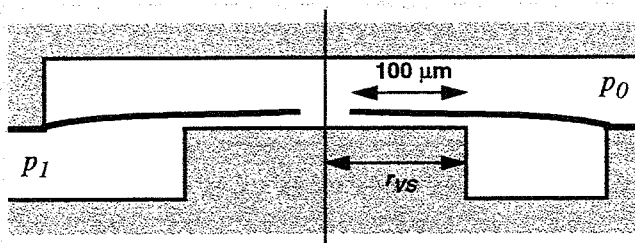
### Problem:

Considering of all design parameters in computer-supported system optimization of the micropump is not realizable.

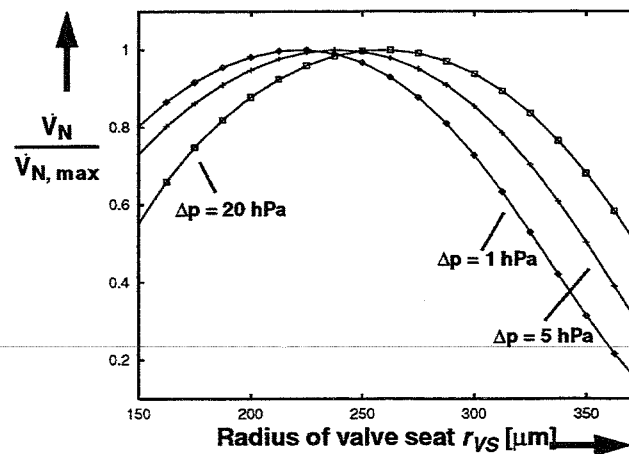
Oversized search space!

⇒ Therefore, a reasonable limit of the design parameter spaces of the different system components is necessary.

### Example of a parameter study with FEM:

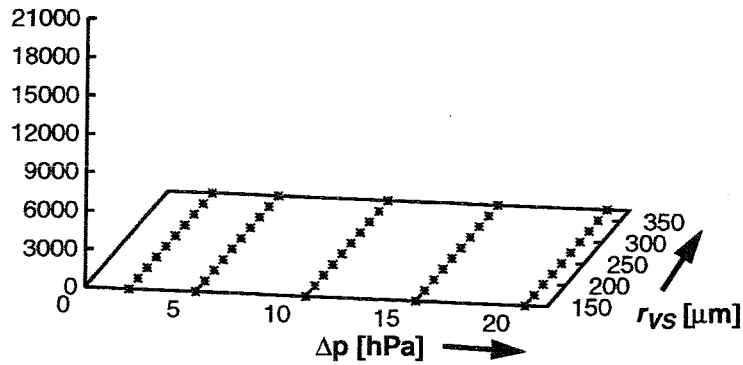


Radius of the valve seat  $r_{VL}$  with constant length of overlap  $100 \mu\text{m}$   
 $r_{VL} = r_{VS} - 100 \mu\text{m}$

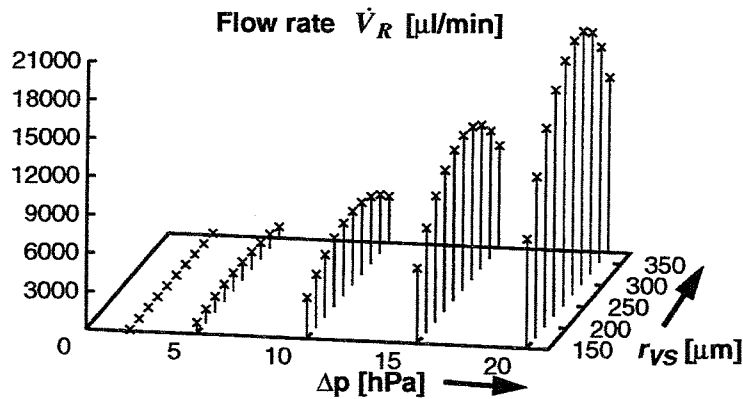


# Generation of Reference Data with FEM

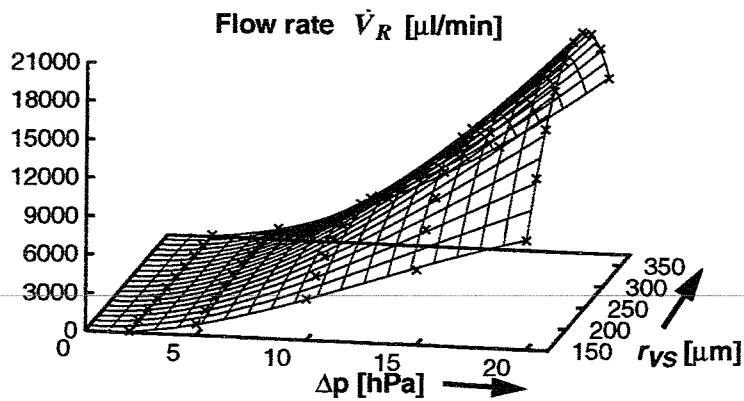
## Sample plan with discrete sample points



## Variant simulation with FEM

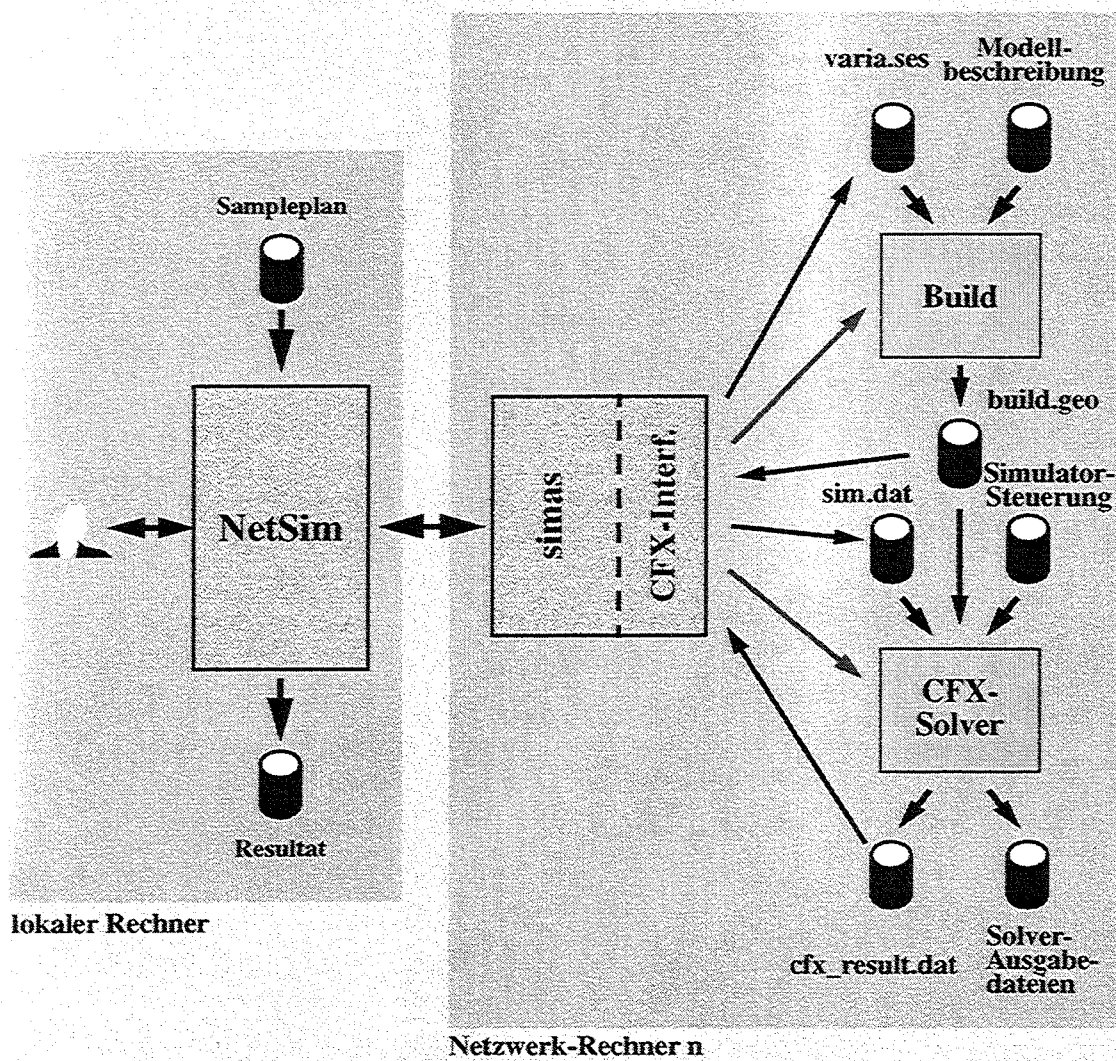


## Fitting



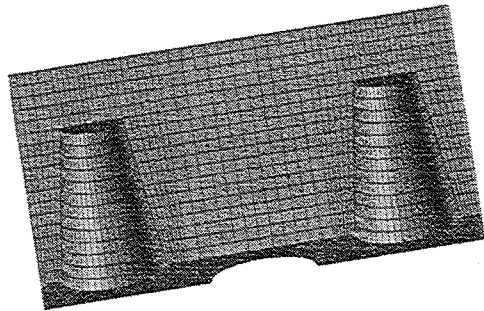
## Variantensimulation mit NetSim

### NetSim: Manager for Networked Multiple Simulation



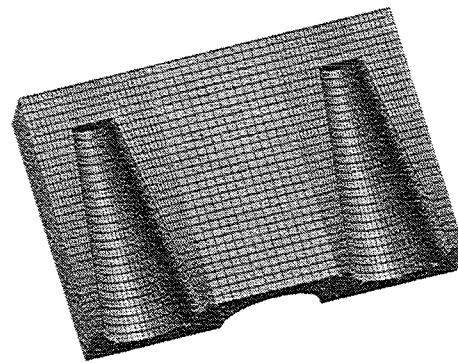
## Varianten der Teststrukturen

### Kanal mit runden Säulen



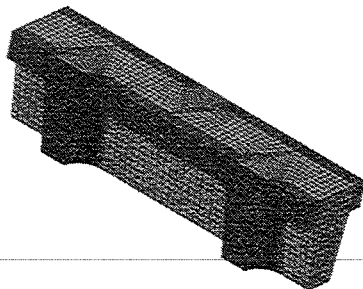
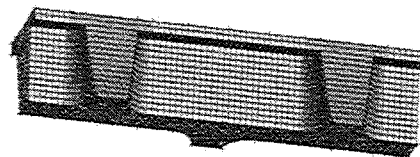
Säulenhöhe: 25  $\mu\text{m}$

Säulenhöhe: 50  $\mu\text{m}$



### Kanal mit Lamellen

Deckelabstand: 4  $\mu\text{m}$

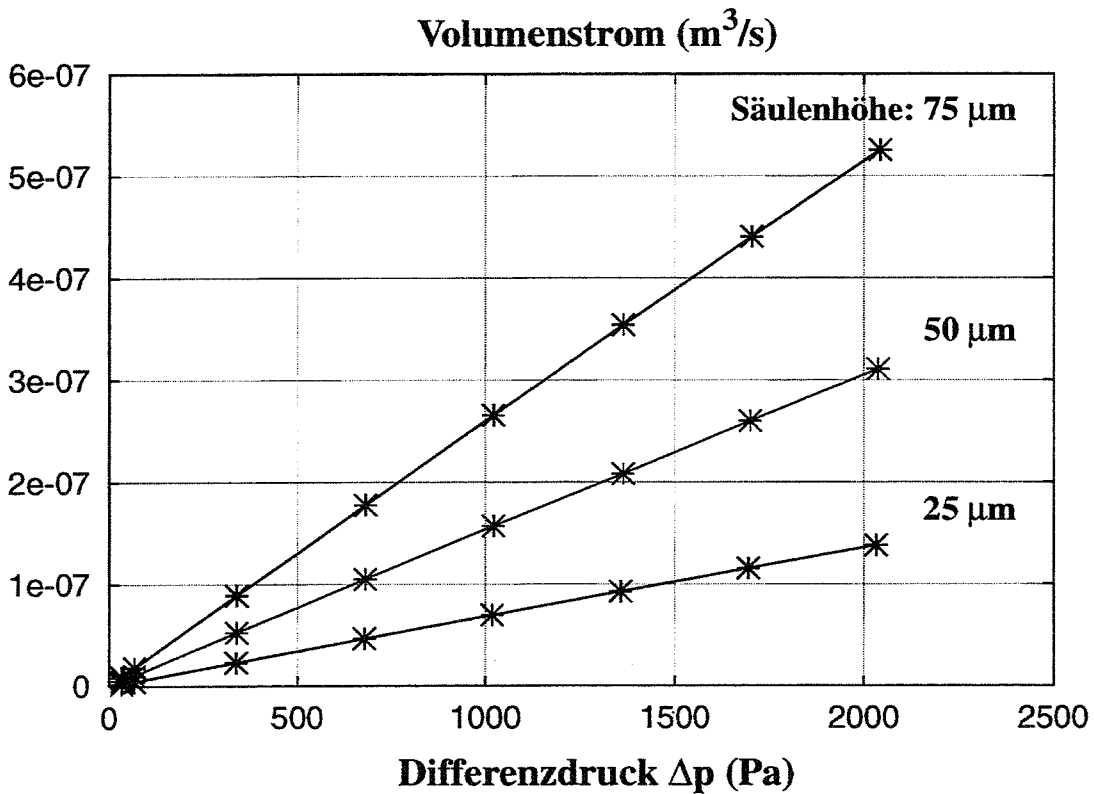


Deckelabstand: 10  $\mu\text{m}$



Parameterstudie mit NetSim

**Eingangsparameter:**  
Säulenhöhe  
Druck am Einlaß und Auslaß



Referenzdaten für die Erstellung höherer Modelle



# **Simulation von Stroemungs- und Transportprozessen in Mikromischern**

P. Ehrhard, Institut für Kern-und Energietechnik (IKET)

Bei der Simulation von Prozessen in sehr kleinen Kanälen bewegt man sich an der Grenze der Gültigkeit der konventionellen Modelle der Thermo- und Fluidmechanik. Aus diesem Grund sind Simulation und Validierung als unverzichtbare Einheit zu sehen ! Vorgestellt wird die Methodik am IKET zur Behandlung solcher Prozesse sowie die für Modellbildung, numerische (FEM) Simulation und Experiment eingesetzten Werkzeuge.





---

**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt

Institut für Kern- und Energietechnik (IKET)

## *Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Mikromischern*

*P. Ehrhard*

---

**konkret: Entwicklung und Optimierung eines ebenen Mischermoduls**  
(zentrales Modul der Kapillaranalytik)

- Bereitstellung geeigneter Modelle,
  - CFD-Simulation der Strömungs- und Transportprozesse,
  - Validierungsexperimente (Maßstab 1:1) mit wässrigen Fluiden,
  - Parameterstudie (CFD) zur Optimierung;
- }
- !

## Theoretische Beschreibung

$$F_S \propto L^3,$$

$$F_T \propto L^2,$$

$$F_V, F_K \propto L^1,$$

$$F_E \propto L^{-2} \delta_{el}.$$

- ▶ die viskosen Kräfte, die Kapillarkräfte an der l/s-Grenzfläche und gegebenenfalls elektrostatische Kräfte dominieren die Strömung;
- ▶ die einphasige Fluidmechanik berücksichtigt keine Kapillarkräfte an festen Wänden, stattdessen wird die Haftbedingung gestellt;
- ▶ Kapillarkräfte und elektrostatische Kräfte infolge angelegter Felder können über eine „elektrische Grenzschichttheorie“ erfaßt werden;

- ▶ die Wechselwirkungen der Strömung mit der festen Wand infolge der sehr dünnen elektrischen Grenzschicht muß für Mikrokanäle modelliert werden;
- ▶ die elektrische Grenzschicht hat im Zusammenspiel mit angelegten elektrischen Feldern zusätzlich das Potential die Strömung gezielt zu beeinflussen;
- ▶ rechenstechnisch ist dies über eine analytische Behandlung der mikroskopischen elektrischen Grenzschicht in Verbindung mit einem kommerziellen FEM-Code (*FIDAP*) für die makroskopische Strömung bei geeigneter Schnittstellen des Codes zu leisten (Skalenseparation).

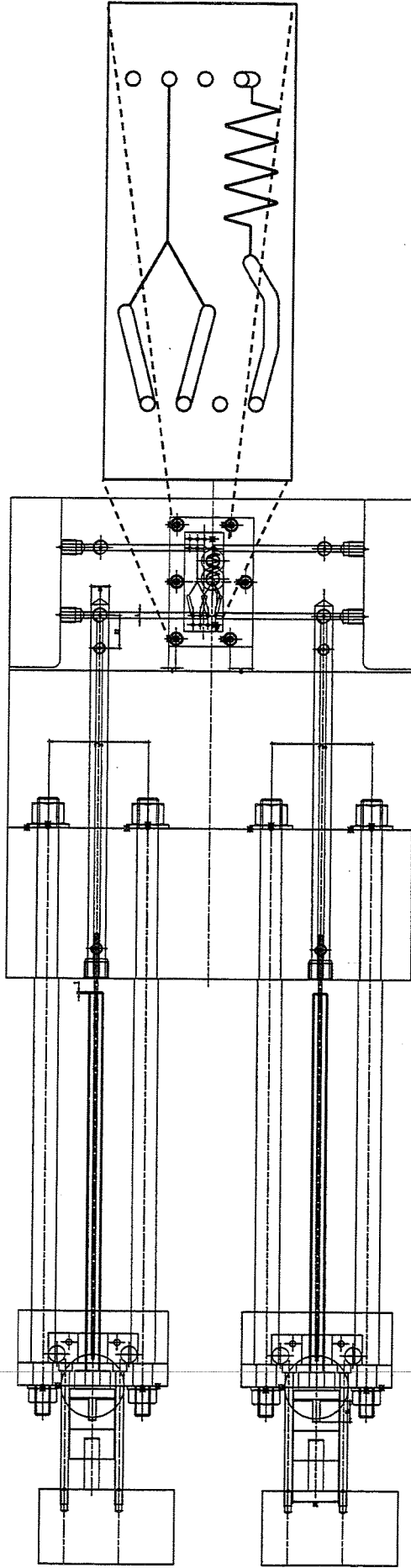


## Aufbau eines Mikrofluidlabors

- ▶ modulares System mit Spritzenpumpen, Druck-, Temperatur- und Durchflußmeßtechnik,
- ▶ wässrige Fluide in glasgedeckelten Strukturen, Maßstab 1:1,
- ▶ „Micro-Particle-Image-Velocimetry“ ( $\mu$ PIV) für Stromfelder in koaxialer Anordnung über Fluoreszenztrennung,
- ▶ Durchlicht-Interferometrie für Konzentrationsfelder,

## Aufbau eines Mikrofluidlabors

modulares System:

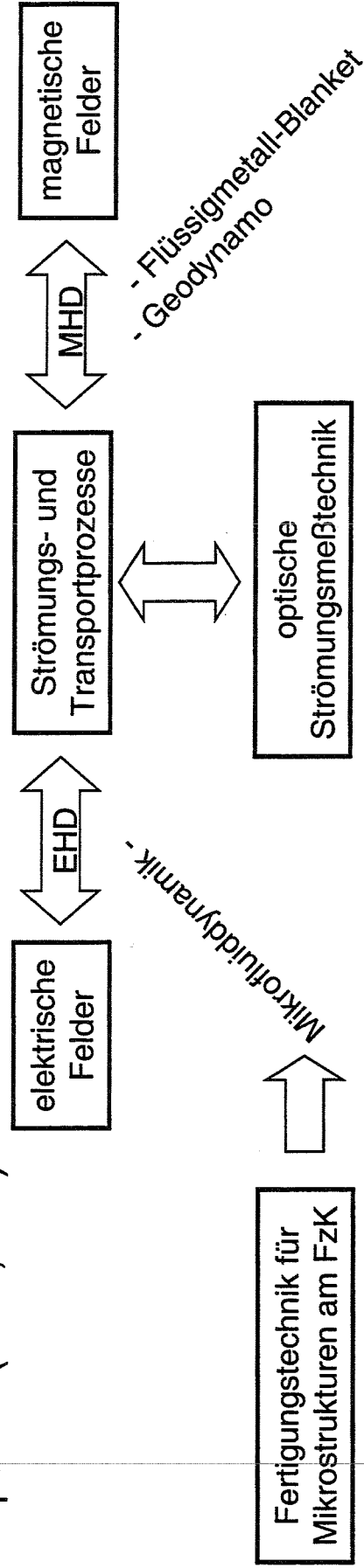


aufgesetztes Mikromodul:

## Kontext

- die Mikrofluidik wird bisher, trotz immensen Bedarfs, in Europa nur an ganz wenigen Stellen behandelt (Mainz, Ulm, Lausanne, Prag ...), in USA sind im letzten Jahr erhebliche Anstrengungen unternommen worden;
- es besteht, neben Anwendungsrechnungen, erheblicher Forschungsbedarf bei:
  - a) Modellierung (Erhaltungsgleichungen, Randbedingungen, Numerik) !
  - b) Validierungsexperimente (Strömungs- und Konzentrationsmeßtechnik);

- Kompetenz (IKET, FzK):



## Zusammenarbeit

- ▶ **HVT:** Fertigung der Prägewerkzeuge für die Mikrostrukturen,
- ▶ **IMT:** Abformung der Mikrostrukturen,
- ▶ **Universität Ulm:** Modellierung,
- ▶ **University of California, Santa Barbara:**  $\mu$ PIV Meßtechnik,
- ▶ **PMT:** *Kapillaranalytik (Lab-on-Chip)*

# Simulation von Thermo- und Fluidodynamischen Prozessen in Mikrostrukturapparaten

D. Struwe, Institut für Reaktorsicherheit (IRS)

Zum Verständnis der physikalischen Vorgänge in Mikrowärmetauschern und zur Entwicklung von Simulationswerkzeugen für deren Auslegung und Optimierung ist eine vollständige dreidimensionale Beschreibung der Wärmeübertragungs- und Strömungsverhältnisse im Wärmetauscher einschließlich der Anschlussleitungen wünschenswert. Ein Ansatz zur Reduzierung der numerischen Anforderungen an die Lösung dieses Problems ist die Simulation des Wärmetauschers als eine Summe poröser Teilkörper mit quasi eindimensionalen parallelen Strömungen, die durch dreidimensionale Wärmeleitung gekoppelt werden. Diese Methode enthält quasi-empirische Parameter, die durch detaillierte Simulationen und Auswertungen von experimentellen Ergebnissen für Einzelkanäle bestimmt werden müssen. Die Berechnungen sollen mit einem noch auszuwählenden kommerziellen Fluidodynamik-Programm durchgeführt werden. Voruntersuchungen hierzu wurden mit einem Programm aus der Reaktortechnik durchgeführt.

In den Einzelkanälen können unter bestimmten Voraussetzungen zweiphasige Strömungen auftreten. Experimentelle Untersuchungen von Zweiphasenströmungen zeigen, dass für Makrokanäle entwickelte Strömungsformkarten nicht auf Kanäle mit Durchmessern kleiner etwa 1mm anwendbar sind. Zur Entwicklung geeigneter Strömungsformkarten für Mini- und Mikrokanäle sollen mit dem Rechenprogramm TURBIT-VoF Direkte Numerische Simulationen der zweiphasigen Strömung in einem Mikrokanal durchgeführt werden. Das im IRS entwickelte Rechenprogramm beschreibt detailliert die dynamische Entwicklung der deformierbaren Phasengrenzfläche und wurde erfolgreich für Blasenströmungen in Makrokanälen angewandt. TURBIT-VoF wird derzeit für die Wärme- und mittelfristig für die Stoffübertragung in zweiphasigen Strömungen in einem Mikrokanal weiterentwickelt. Die Möglichkeiten, derartige theoretische Analysen durch gezielte experimentelle Untersuchungen zu begleiten, sind zu prüfen.



# **Simulation von fluiddynamischen Prozessen in Mikrostrukturapparaten**

A. Wenka, K. Schubert

Hauptabteilung Versuchstechnik

D. Struwe, M. Wörner, U. Imke, D.G. Cacuci  
Institut für Reaktorsicherheit

Simulationen in der Mikrosystemtechnik

26. Oktober 2000

## **Forschungsumfeld und Ziel**

- Forschungsumfeld:  
Entwicklung miniaturisierter fluidischer Systeme und Apparate für die Verfahrenstechnik
  - z.B. Mikrowärmetauscher, Mikroreaktoren
- Ziel:
  - Erweiterung des Verständnisses der Detailphänomene in Wechselwirkung mit grundlegenden Experimenten
  - Modellierung und numerische Simulation von Mikro-wärmetauschern und Mikroreaktoren
  - Unterstützung zur Optimierung industrieller Anwendungen

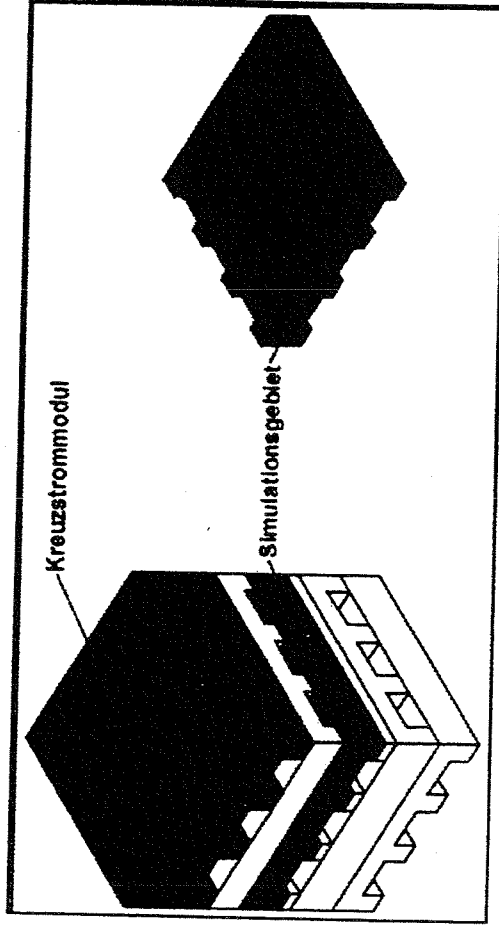


## **Strategie und erste Anwendungen**

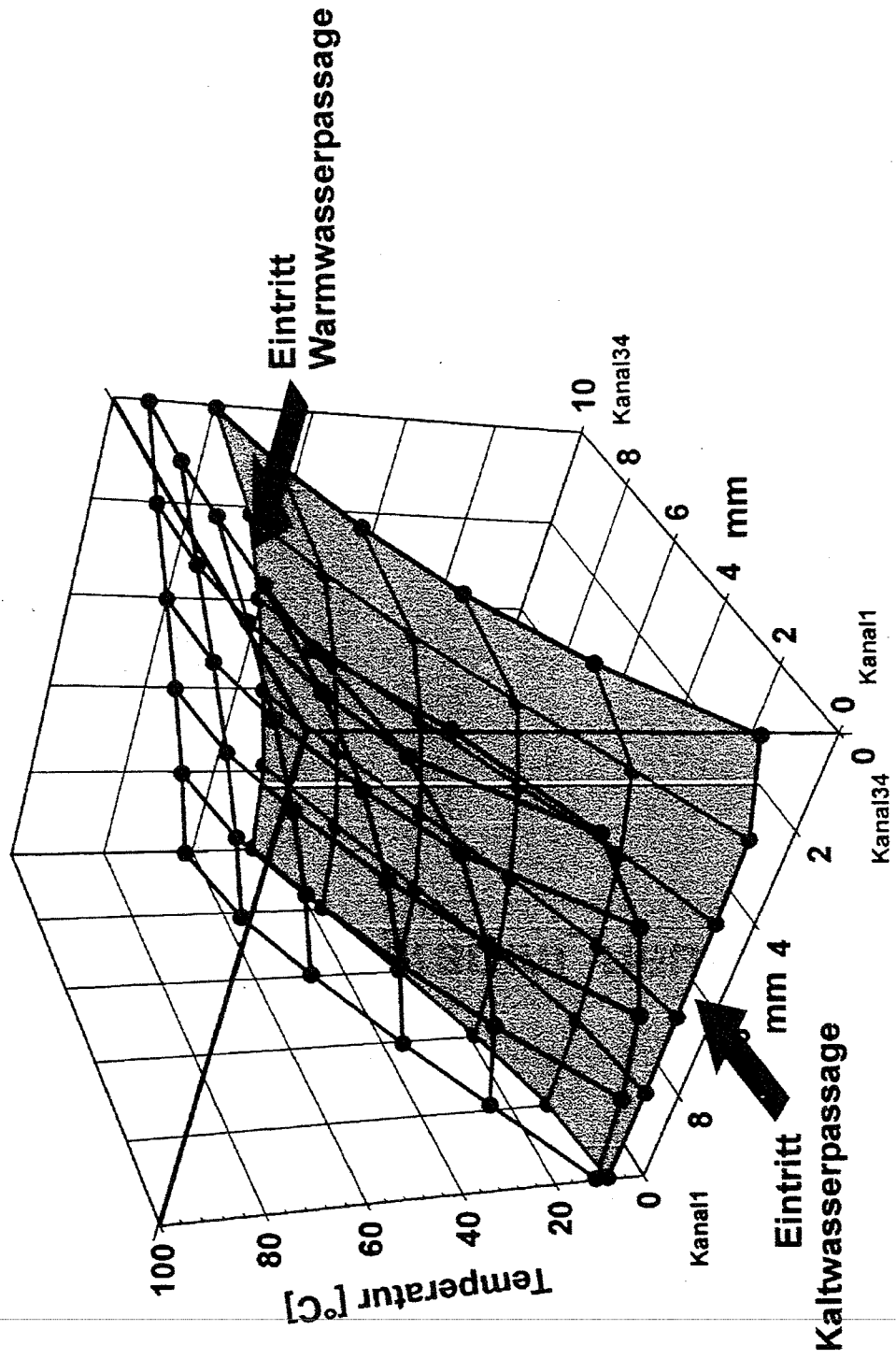
- **Detaillierte Berechnung von Einzelkanälen**
  - Zunächst Beschränkung auf Kontinuumsmechanik
  - Kreuzstrom-Mikrowärmetauscher von HVT (z.B. FLUENT)
  - Zweiphasenströmung im rechteckigen Mikrokanal (z.B. TURBIT-VoF )
- **Modellierung des Gesamtsystems**
  - Kreuzstrom-Mikrowärmetauscher von HVT: Modellierung auf Basis eines porösen Körpers (z.B. MC3D)
  - Zunächst Einsatz eines kommerziellen CFD-Programms (z.B. CFX oder FLUENT)

## **Untersuchungen zum Kreuzstrom- Mikrowärmetauscher**

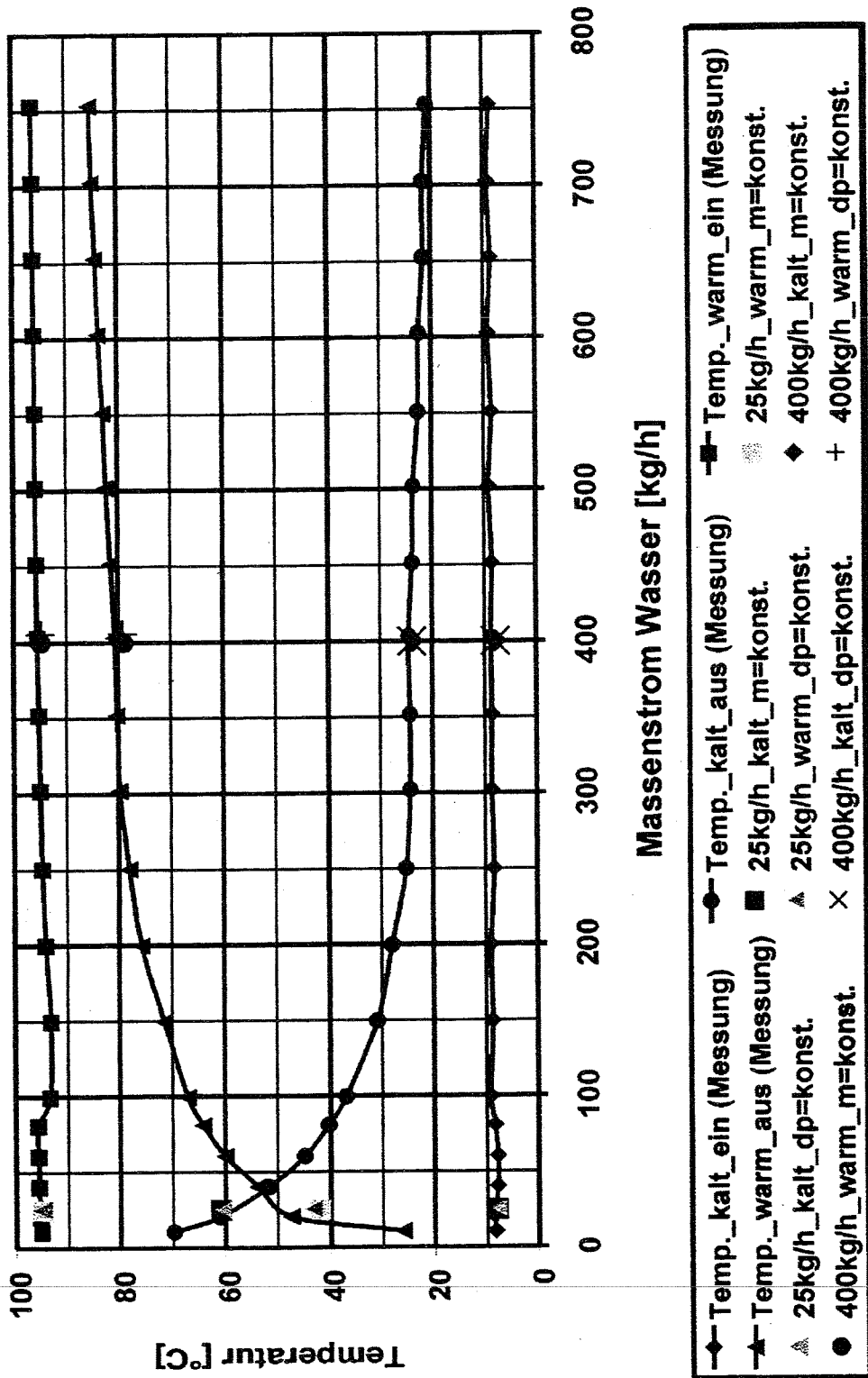
- Detaillierte Simulation eines Ausschnitts mit FLUENT: 470.400 Zellen (A. Wenka, HVT)
- Simulation des gleichen Ausschnitts auf Basis eines Porösen Körpers mit MC3D: 1.250 Zellen (U. Imke, IRS)



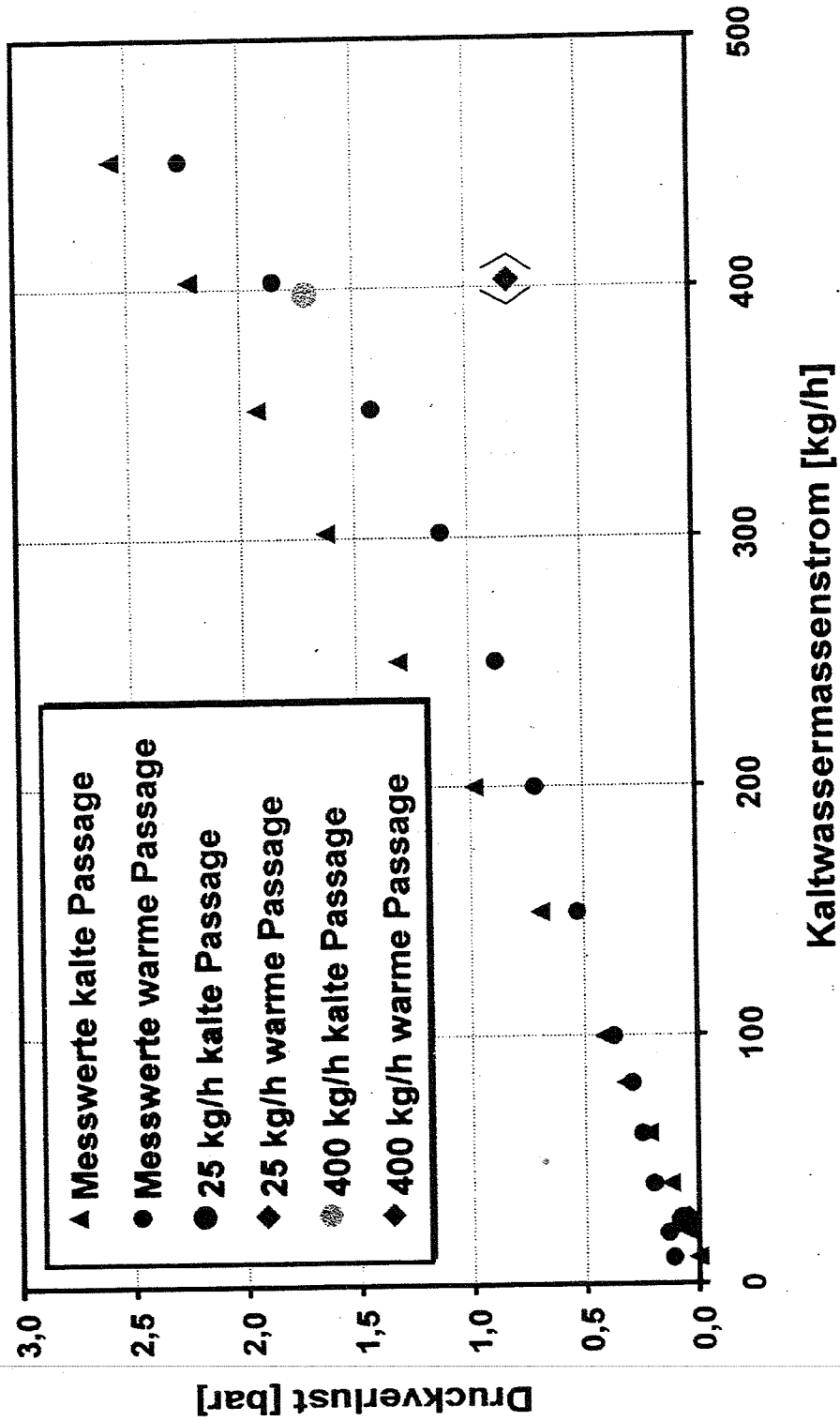
# Symmetrischer Wasserdurchsatz (25 kg/h)



## Vergleich Messdaten – Simulationsergebnisse



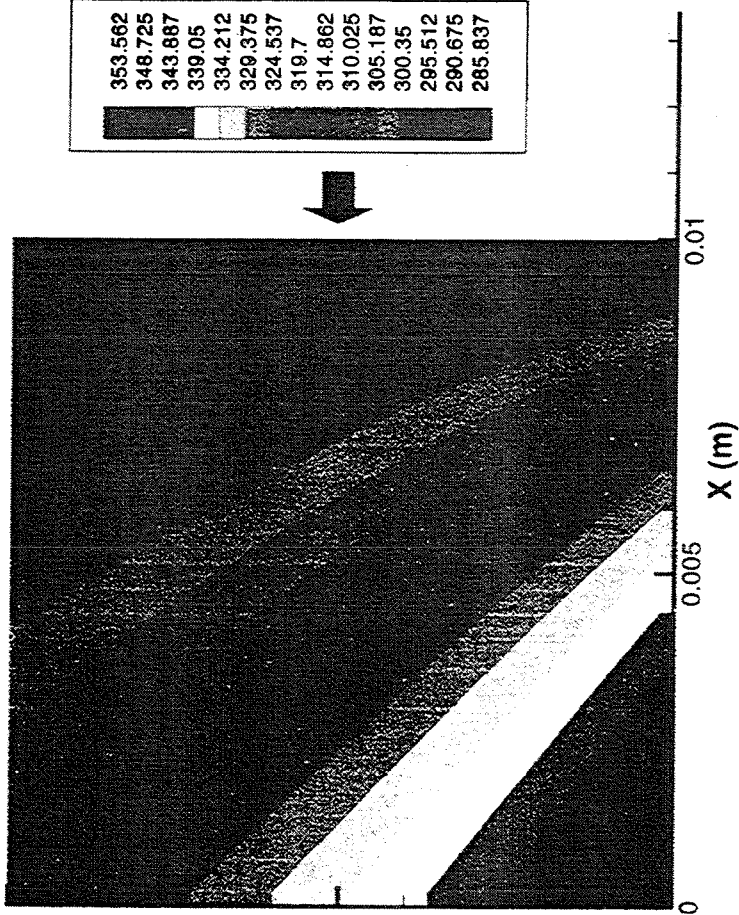
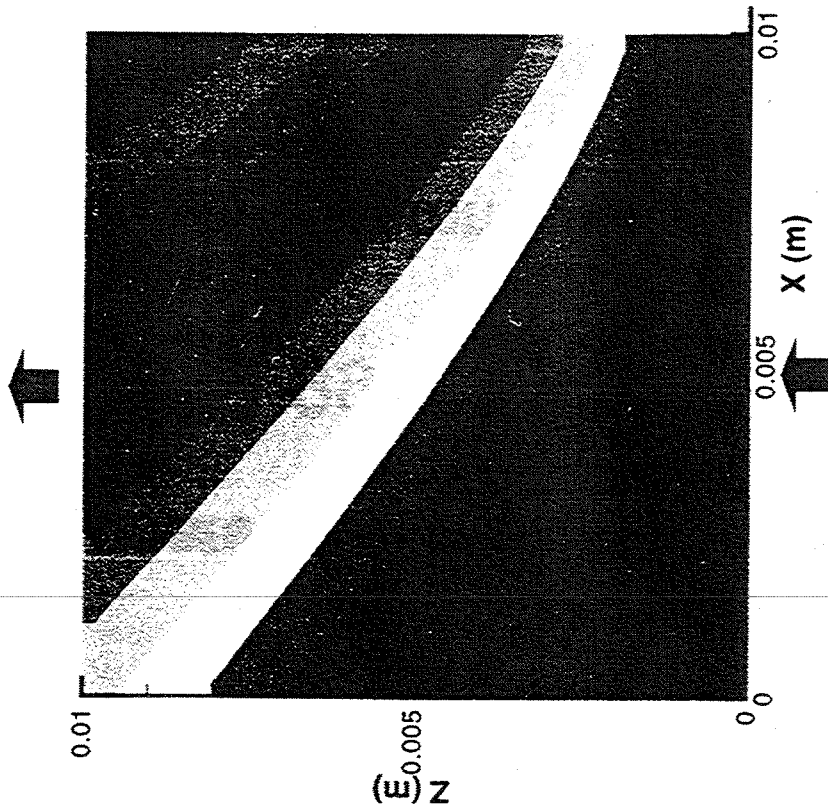
## Vergleich Druckverlust Experimentelle Daten - Simulationsergebnisse



Warmwasserpassage

Kaltwasserpassage

MC3D  
25 kg/h



353.562
348.725
343.887
339.05
334.212
329.375
324.537
319.7
314.862
310.025
305.187
300.35
295.512
290.675
285.837

## Berechnete Betragsdifferenz zur Eintrittstemperatur

25 kg/h, $k_{\text{eff}}=1,2$ W/m/K	FLUENT	MC3D
Warme Passage Max.	75 K	74 K
Warme Passage Min.	35 K	36 K
Kalte Passage Min.	37 K	34 K
Kalte Passage Max.	77 K	74 K
400 kg/h, $k_{\text{eff}}=3,0$ W/m/K	FLUENT	MC3D
Warme Passage Max.	25 K	25 K
Warme Passage Min.	15 K	20 K
Kalte Passage Min.	17 K	19 K
Kalte Passage Max.	20 K	24 K

⇒ Simulation auf der Grundlage von porösen Körpern ist bei geeigneten bestimmten Modellparameter sinnvoll und effizient

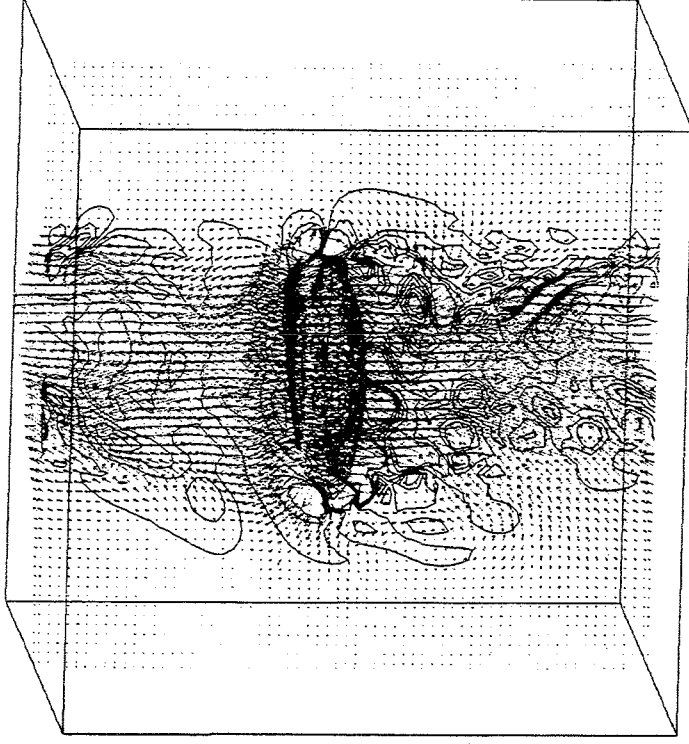
## **Strömungsform-Problematik bei Zweiphasenströmungen in Mikroapparaten**

- Auslegung von zweiphasigen betriebenen Mikrostruktur-Apparaten erfordert genaue Kenntnis der Strömungsform
  - Strömungskarten für Makrokanäle sind nicht auf Mini- und Mikrokanäle übertragbar
  - Experimentelle Bestimmung für Mikrokanäle ist aufwendig aber notwendig (Anm.: Ergebnisse sind nur bedingt verallgemeinerbar)
- ⇒ Theoretische Bestimmung von Strömungsform und spezifischer Phasengrenzfläche (z.B. DNS mit TURBIT-VoF)



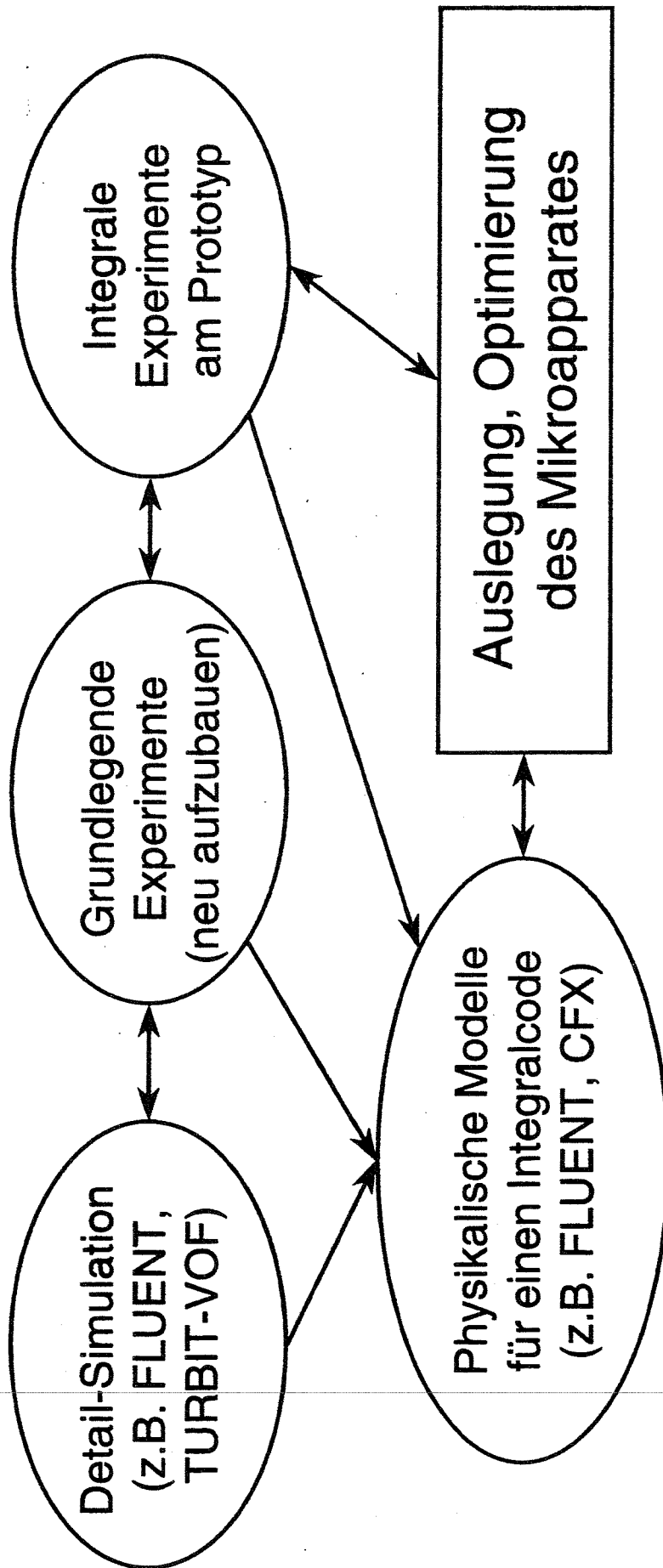
## **Weiterentwicklung von TURBIT-VOF für Zweiphasenströmung in Mikrokanälen**

- bisher: detaillierte Beschreibung von Blasenströmungen (s. Bild →)
- notwendige F&E-Arbeiten:
  - Erweiterung auf Wärmeübergang
  - Rechnungen zu Strömungsformen in Mini- und Mikrokanälen und experimentelle Qualifizierung
  - Weiterentwicklung für Stoffübergang und chemische Reaktion





## Schwerpunkte der F&E-Arbeiten



# **Simulation von dynamischen Systemen für den Einsatz in der Regelungstechnik**

W. Eppler, Hauptabteilung Prozessdatenverarbeitung u. Elektronik (HPE)

Ziel der Simulation dynamischer Systeme ist die Vorausberechnung einigermaßen optimaler Einstellungen eines realen Systems, ohne die das System schlecht funktioniert oder sogar Schaden anrichtet. Ein Modell dieses Systems kann entweder mit Differentialgleichungen, aber auch durch Regeln oder allgemeiner durch ein Computerprogramm beschrieben werden. Dafür verwenden wir MATLAB/SIMULINK. Mithilfe spezieller Neuronaler Netze sind wir in der Lage, von einem realen System automatisch ein Modell anzufertigen, das in der Simulation verwendet wird.





**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt

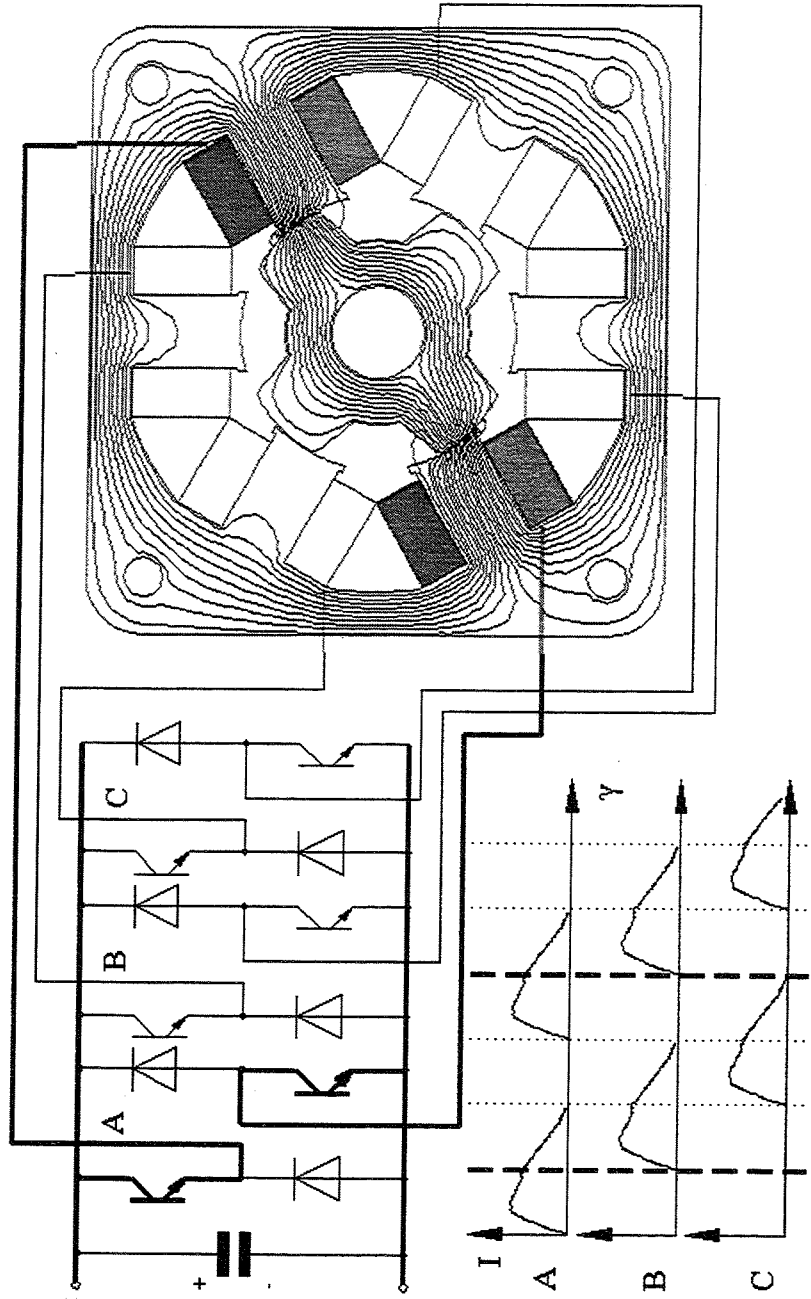
Hauptabteilung Prozessdatenverarbeitung und Elektronik (HPE)  
Leitung: Prof. Gemmeke

# **Simulation von dynamischen Systemen für den Einsatz in der Regelungstechnik**

Wolfgang Eppler



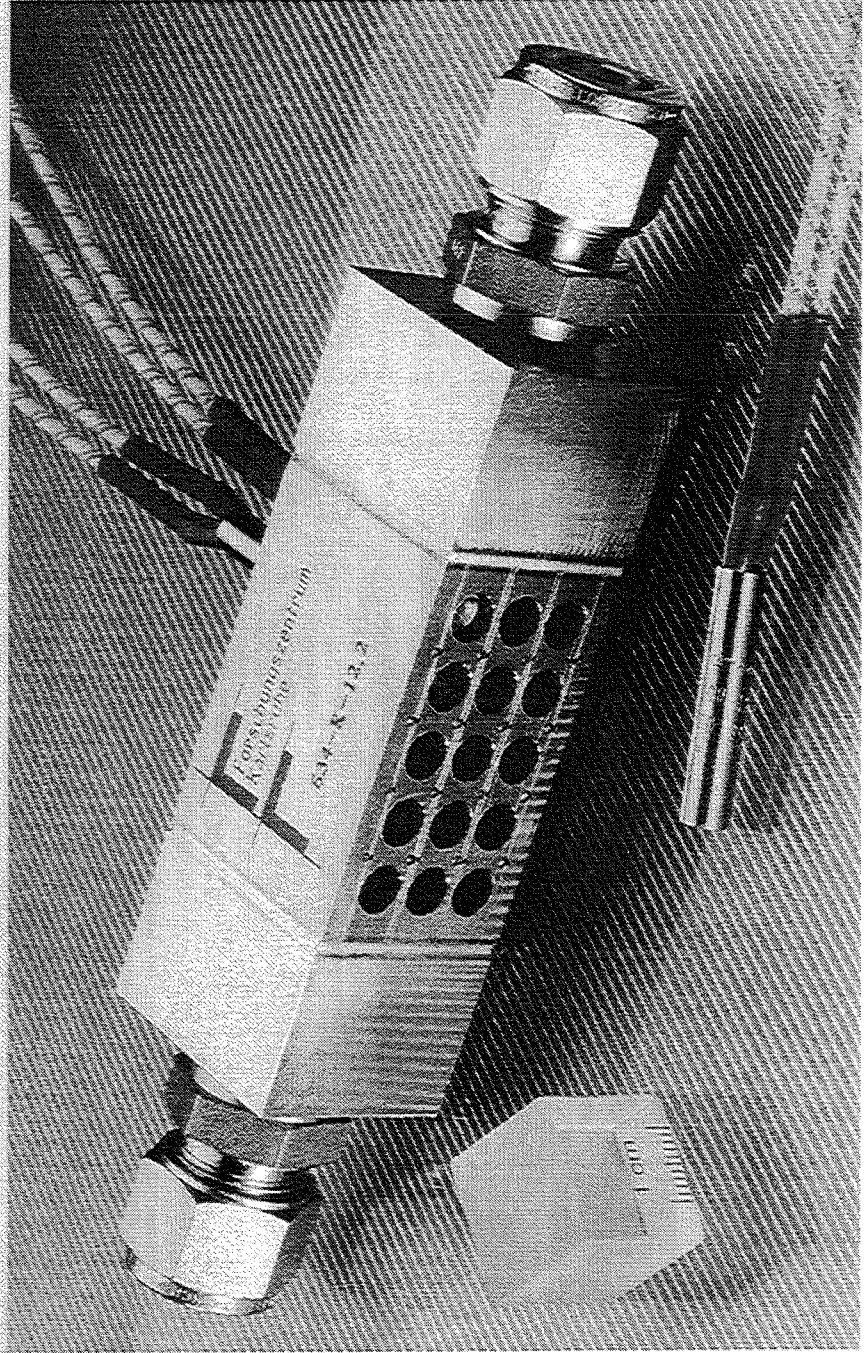
# Prinzip des Switched Reluctance Motors (SRM)



Forschungszentrum Karlsruhe  
Technik und Umwelt

Hauptabteilung Versuchstechnik (HVT)

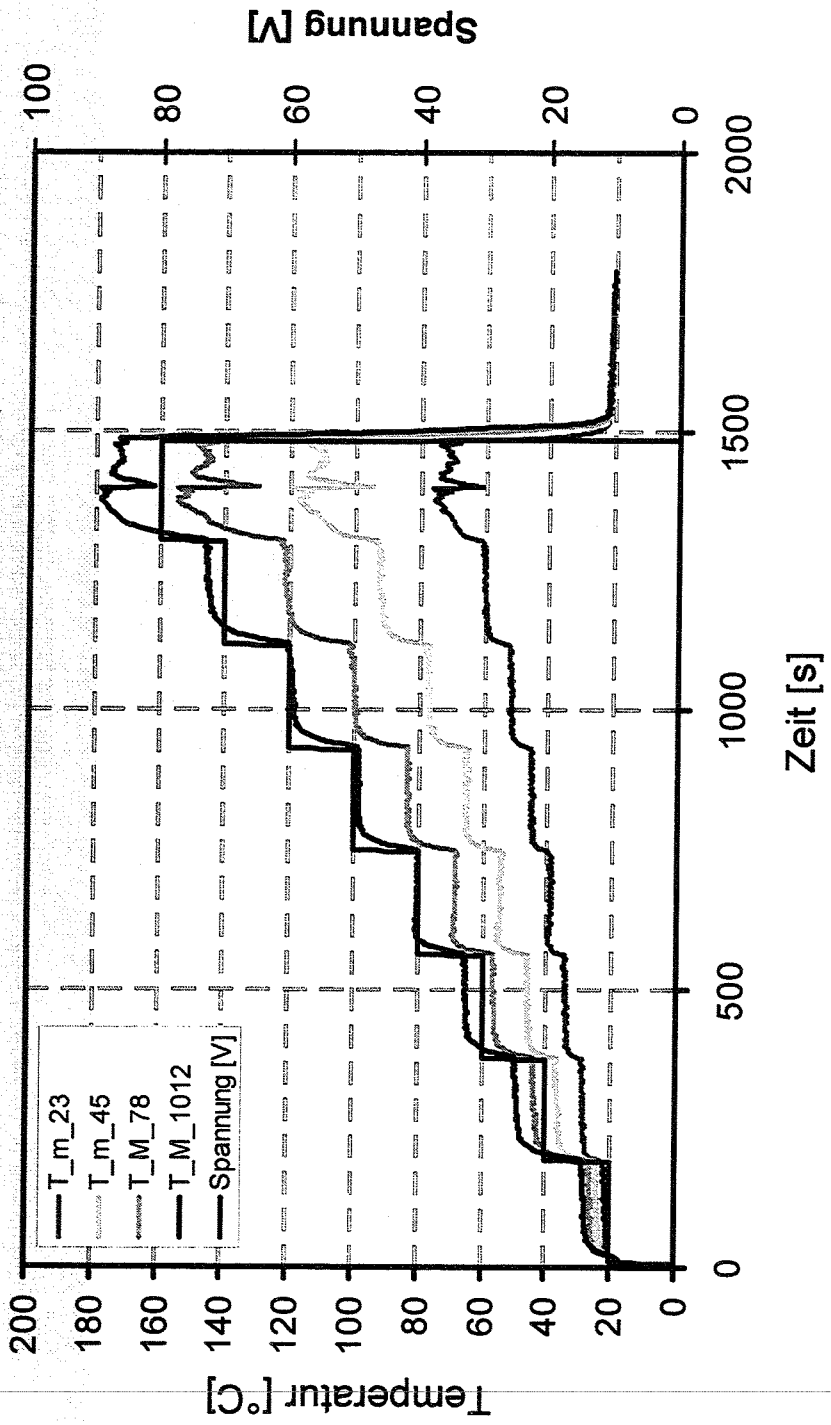
# Mikrostruktur-Wärmetauscher und -Reaktor



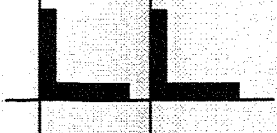
# Sprungantworten auf Spannungsänderungen

## Gemittelte Temperaturwerte

MSA 645-K-12.2; Dm = 5kg/h; D.Spengler, J. Brandner, 12.10.00

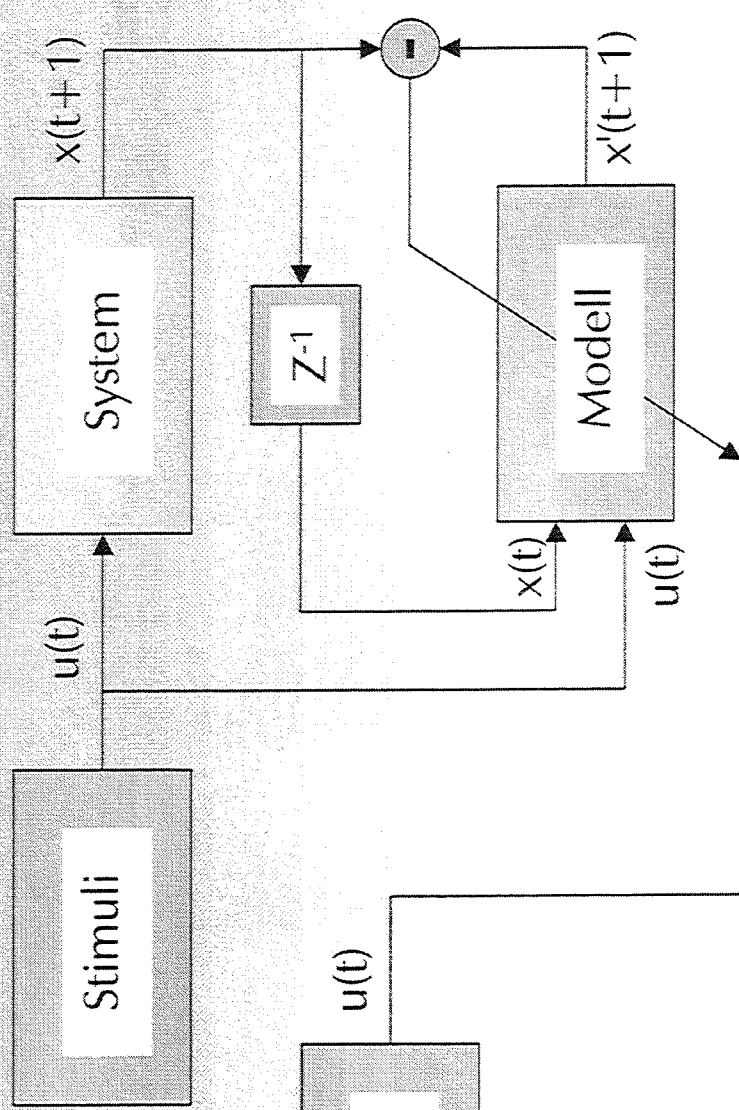




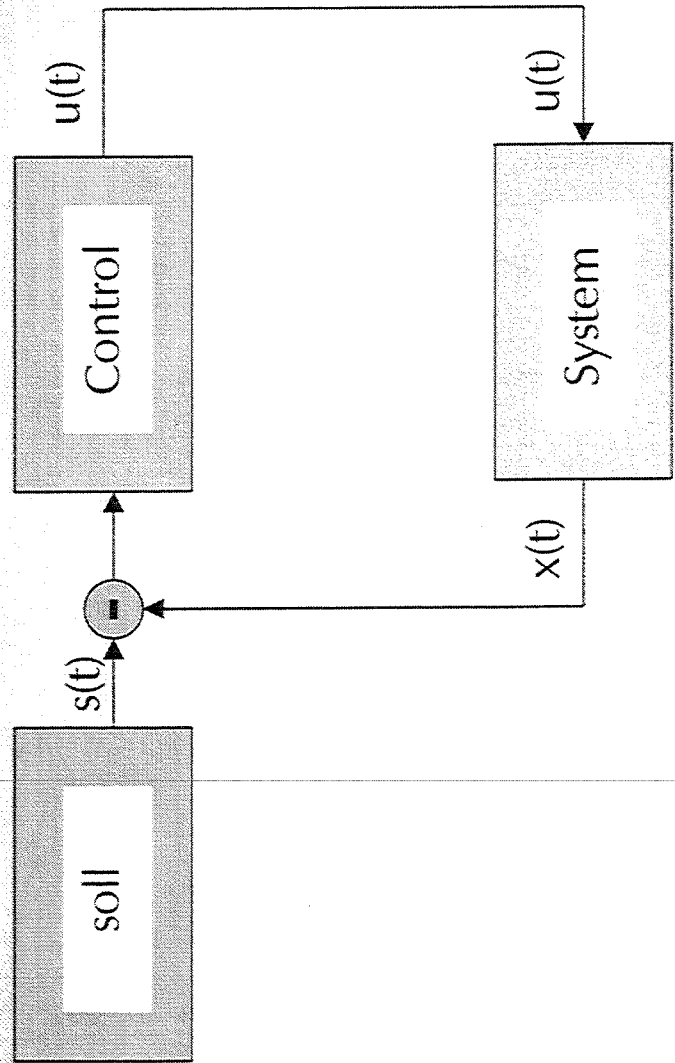


# Systemmodellierung und Regelung

## Systemidentifikation:

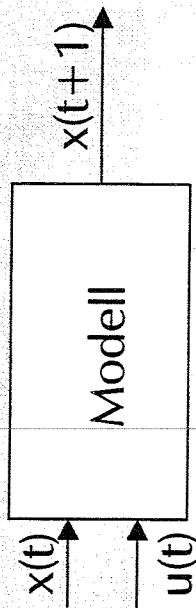


## Regelung:



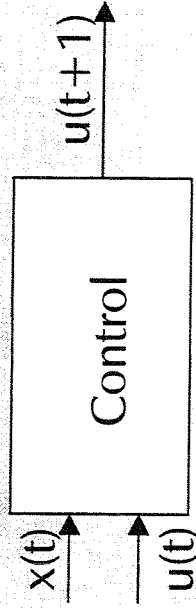
# Synthese der Regelung

Lineares System:



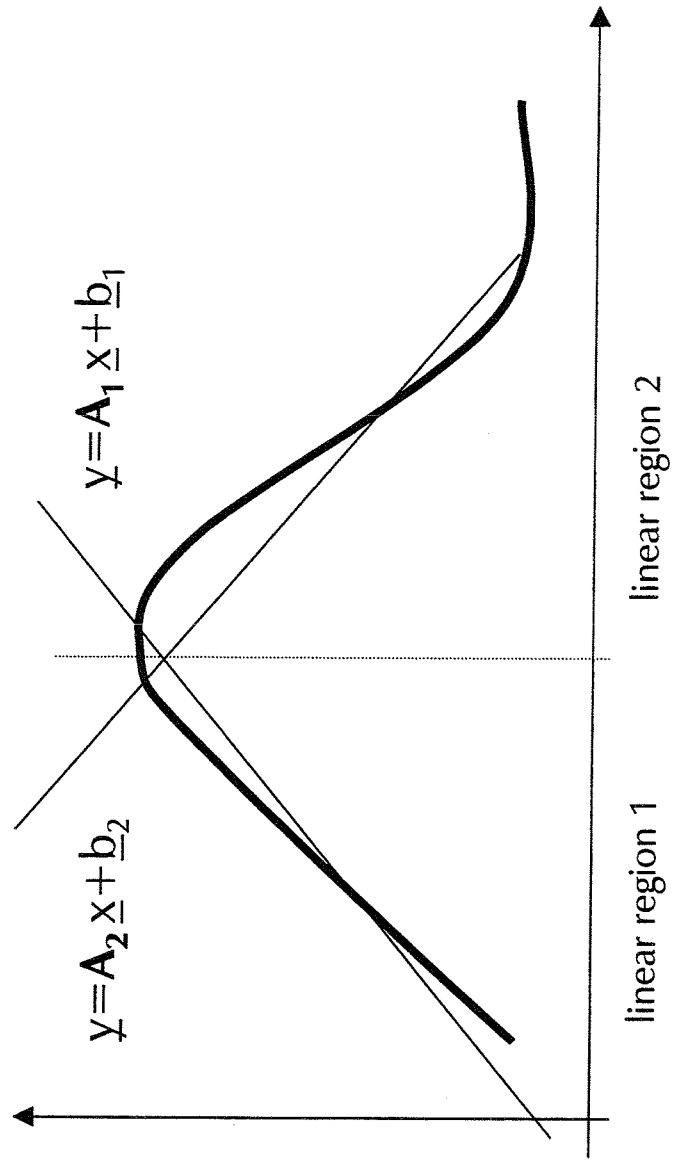
$$\underline{x}_{t+1} = A_i \underline{x}_t + b_i$$

**Riccati**

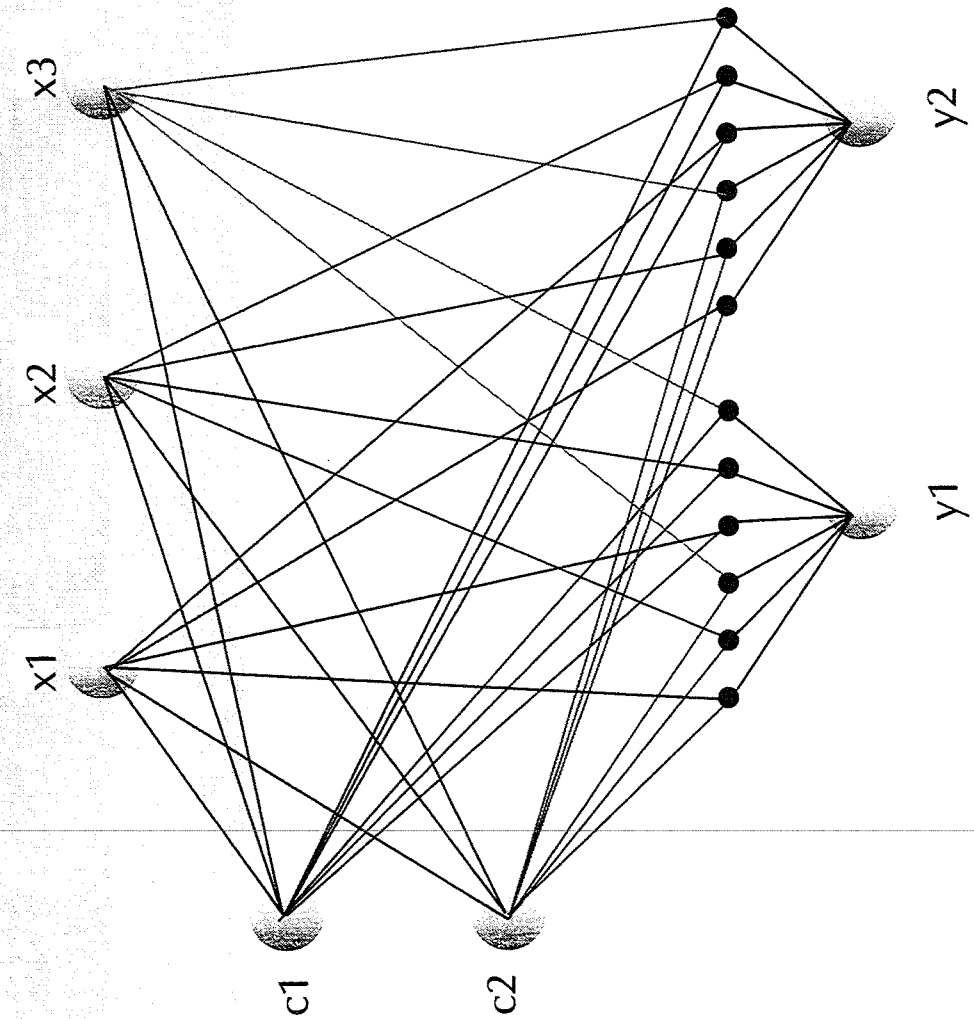


$$u_{t+1} = K_i \underline{x}_t + c_i$$

Nicht-lineares System:



# Piecewise Linear Network (PLN)



System-Gleichungen:

$$y_1 = A_1 \underline{x} + b_1$$

$$y_2 = A_2 \underline{x} + b_2$$

PLN-Gleichungen:

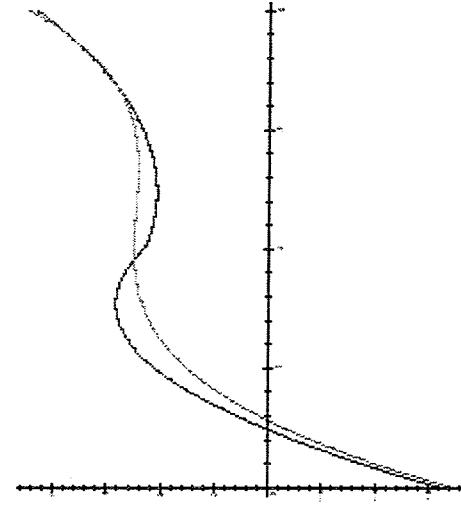
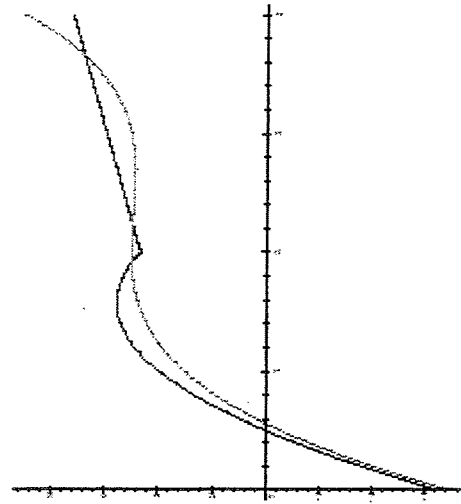
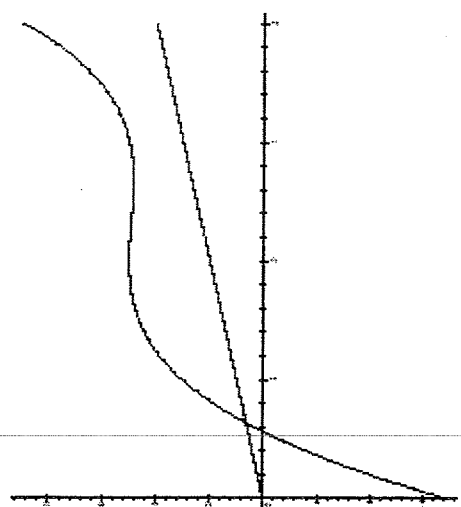
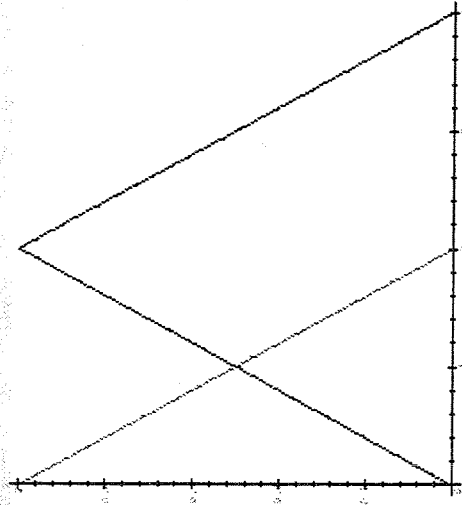
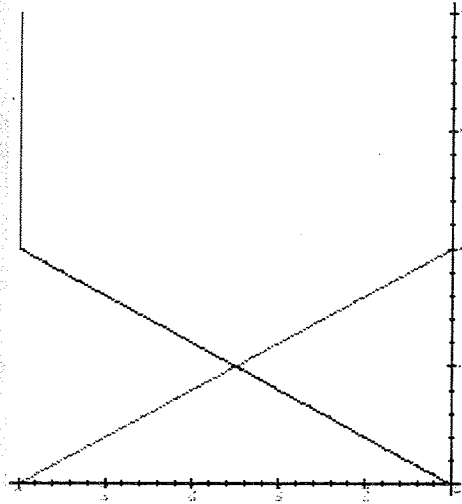
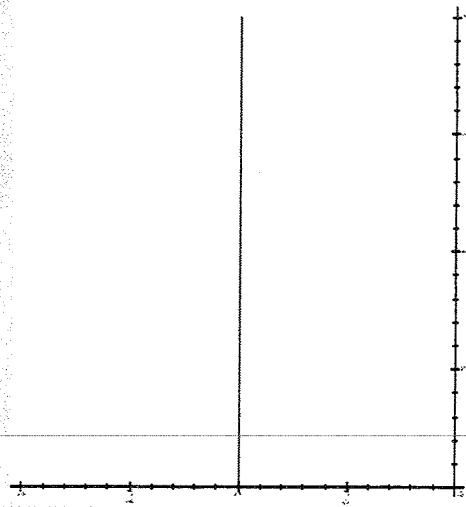
$$y_i = \sum_{j,k} c_j v_{ijk} x_k$$

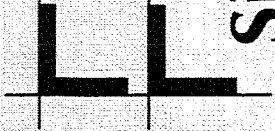
$$c_j = \frac{\sum_{k=1}^m \text{distance}(x, w_k) - \text{distance}(x, w_j)}{(m-1) \sum_{k=1}^m \text{distance}(x, w_k)}$$

$$\text{distance}(x, w_j) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - w_{ij})^2}$$

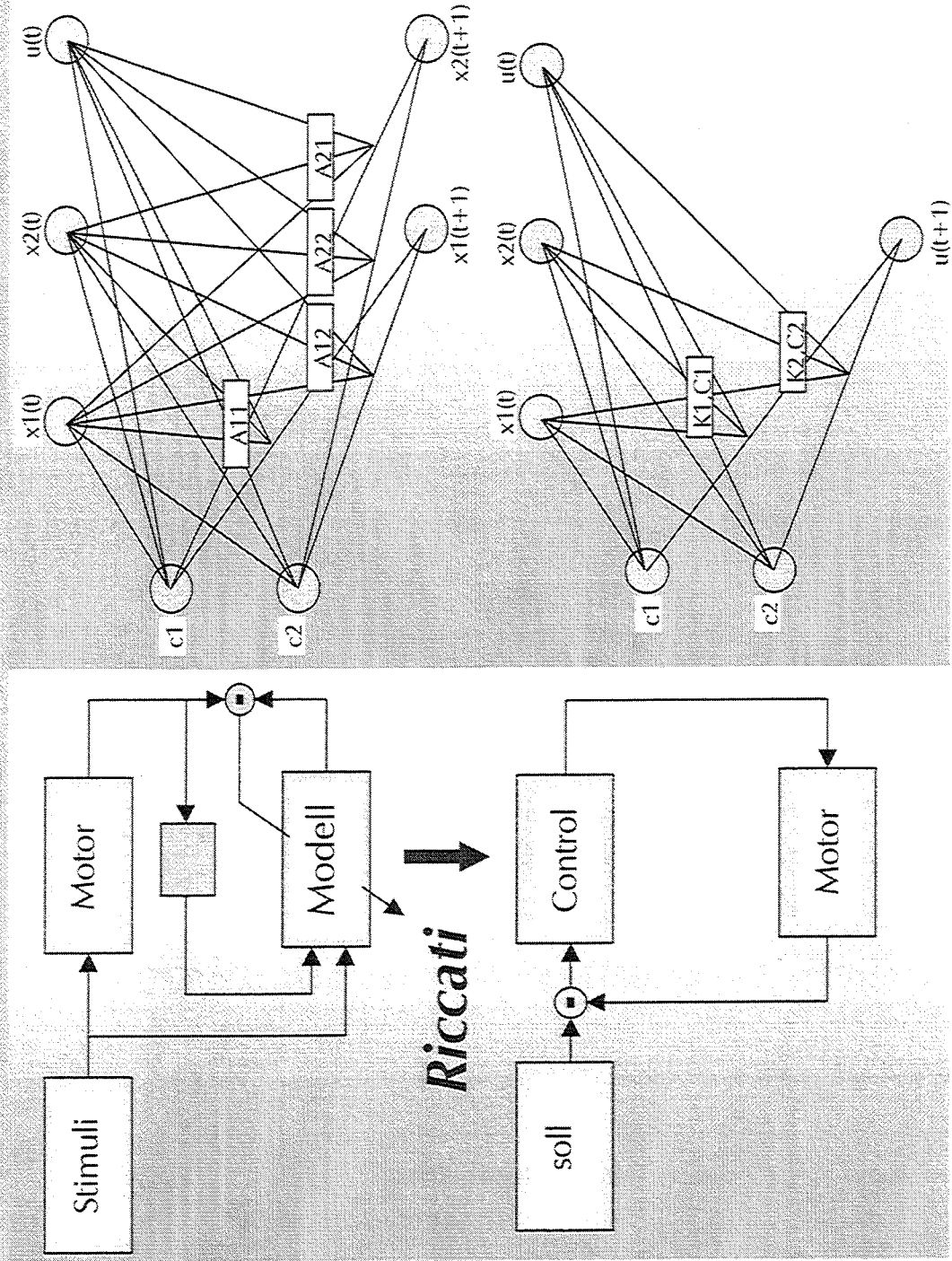
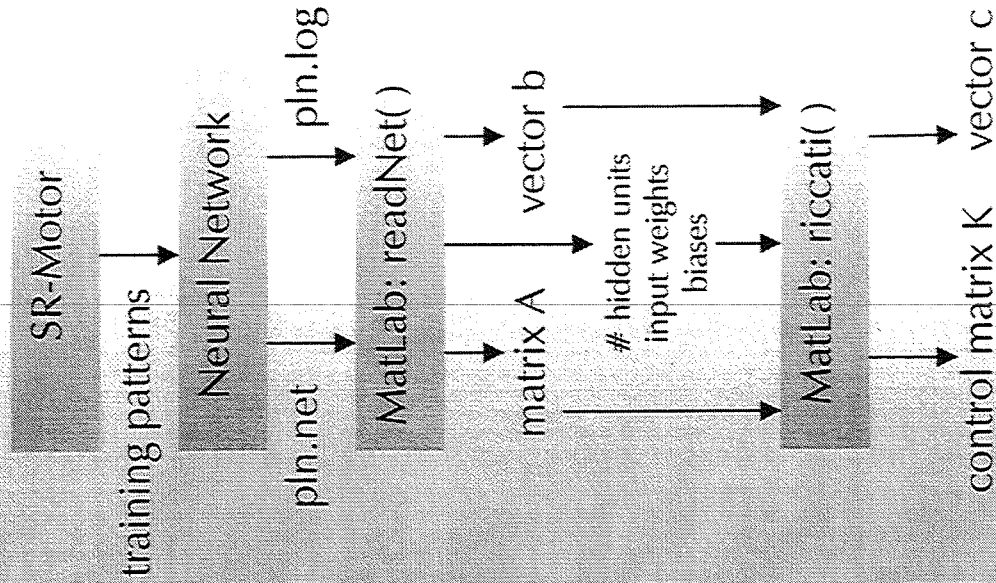


## erste 3 Trainingszyklen

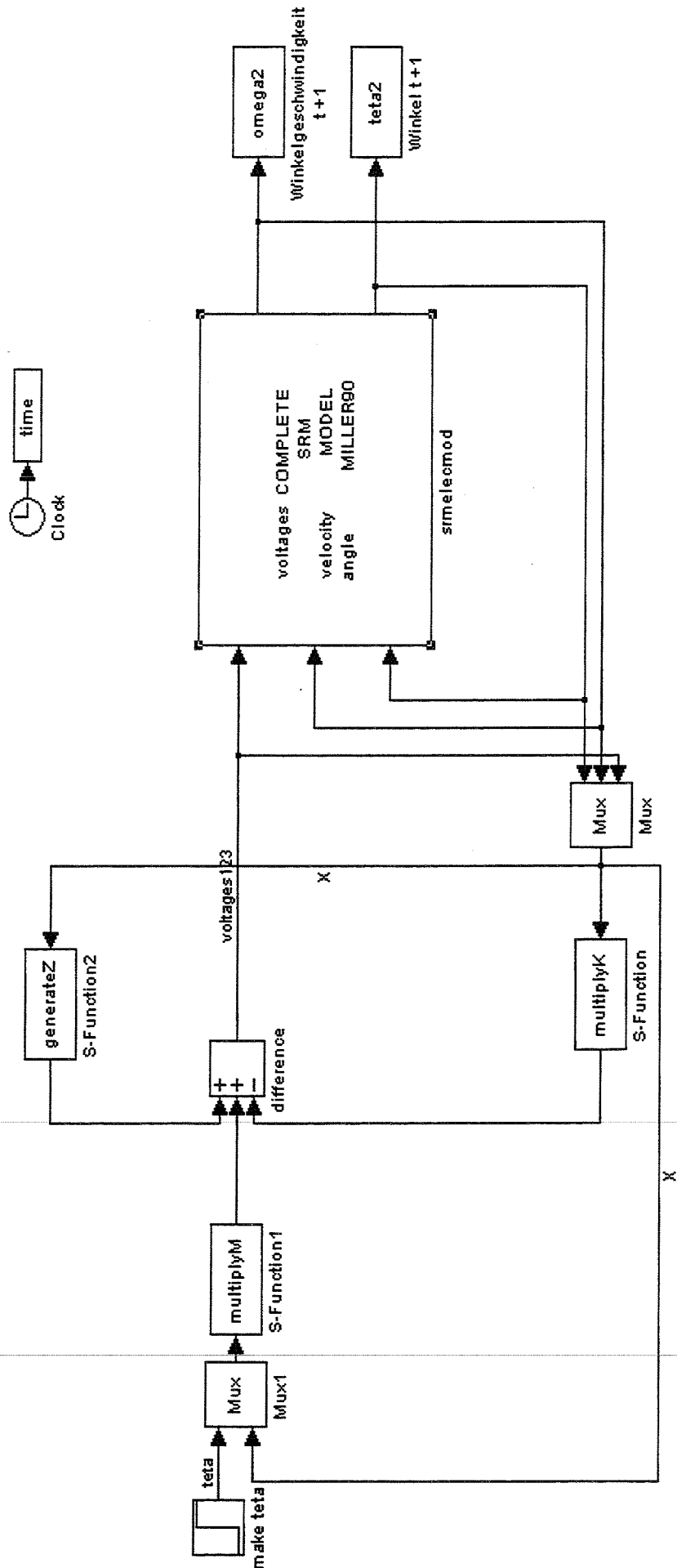




# Simulation der Motorregelung mit MATLAB/SIMULINK



# Simulation eines Motors mit MATLAB/SIMULINK

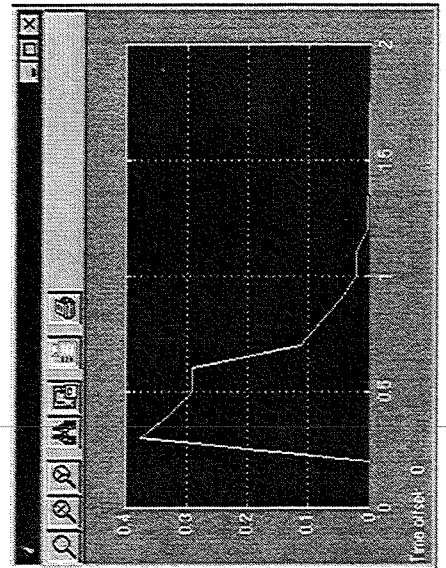


# Simulation eines Motors mit MATLAB/SIMULINK

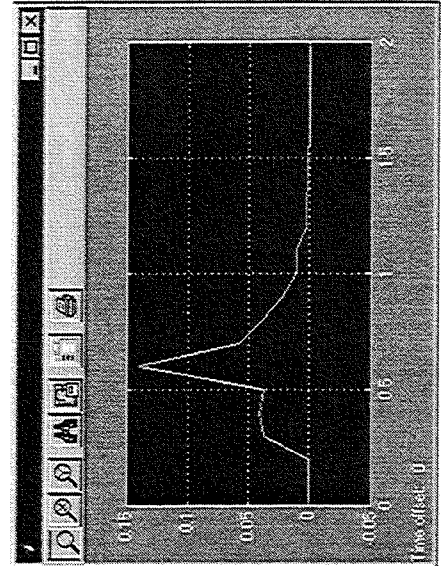
1 linear controller



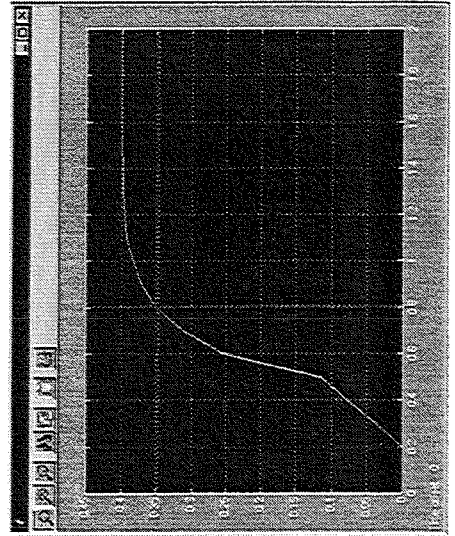
2 linear controllers input voltage



angle velocity



angle



## Zusammenfassung

### Ziel der Modellierung:

- nur ein freier Parameter
- konstruktiv
- sehr schnell
- gute Generalisierung bei wenigen Punkten

### Bewertung:

- Verbindung zwischen NN und klassischer Systemmodellierung
- Leichte Interpretierbarkeit der NN
- Komplexität der Aufgabe entspricht der Komplexität des Modells
- Extrem schnelle Konvergenz des Trainingsmechanismus
- Nützlich für System-Identifikation und Funktionsapproximation



## **Thermische Simulation von Gassensorchips**

T. Blank, Hauptabteilung Prozessdatenverarbeitung u. Elektronik (HPE)

Metalloxidische Gassensorchips werden bei Temperaturen um 300°C betrieben. Zur Optimierung des thermischen Verhaltens und zur Reduzierung des Energiebedarfs zum Erreichen der Betriebstemperatur wird das numerische FE-Simulationstool FLOTHERM eingesetzt, mit dem die thermodynamischen und strömungstechnischen Verhältnisse in beliebigen Räumen und Geometrien simuliert werden können.



**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt

# **Optimierung des thermischen Verhaltens von Metalloxidsensoren für die Gasanalyse**

**Flomerics User Meeting**

**26. Oktober 1999**

**Thomas Blank**

Abteilung für Prozessdatenverarbeitung und Elektronik

## Inhalt

Aufbau und Funktionsweise von Metalloxidsensoren zur Gasanalyse

Optimierung des Sensor- und Systemaufbaus anhand thermischer Simulationsdaten

Systemanalyse & Optimierungsziele

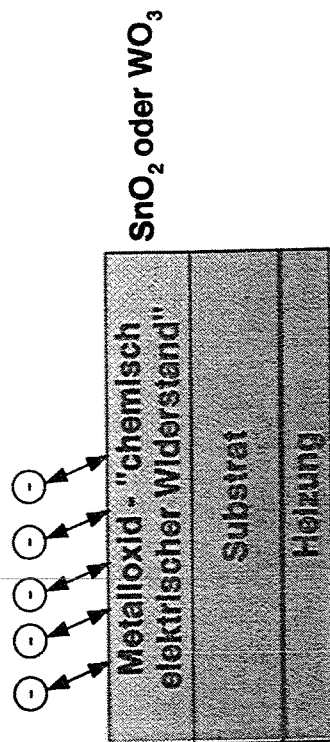
einfache Modelle - Simulation und Validierung

komplexe Modelle - Simulation

Ergebnisse und Ausblick

## Prinzipielle Auswertung und Regelungskonzepte zum Betrieb von einfachen Metalloxyd-Sensoren

### Sensorprinzip



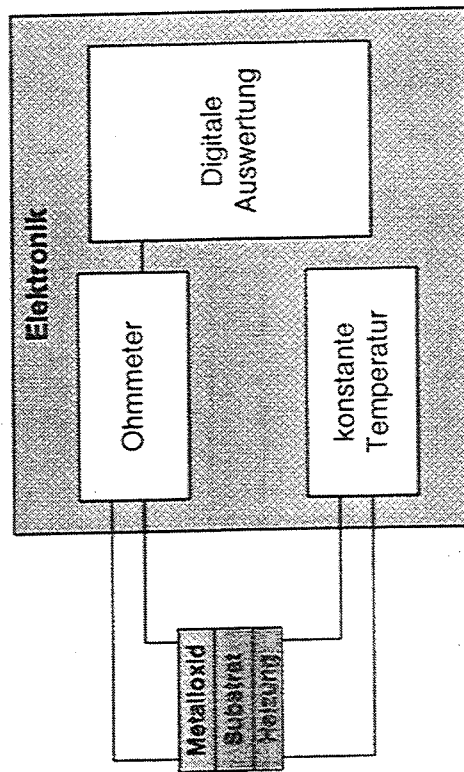
1. Redoxreaktion zwischen Gas und Metalloxyd.

2. Elektronen werden vom Gas ins halbleitende Material abgegeben oder aufgenommen.

Änderung des Widerstandes im Metalloxyd

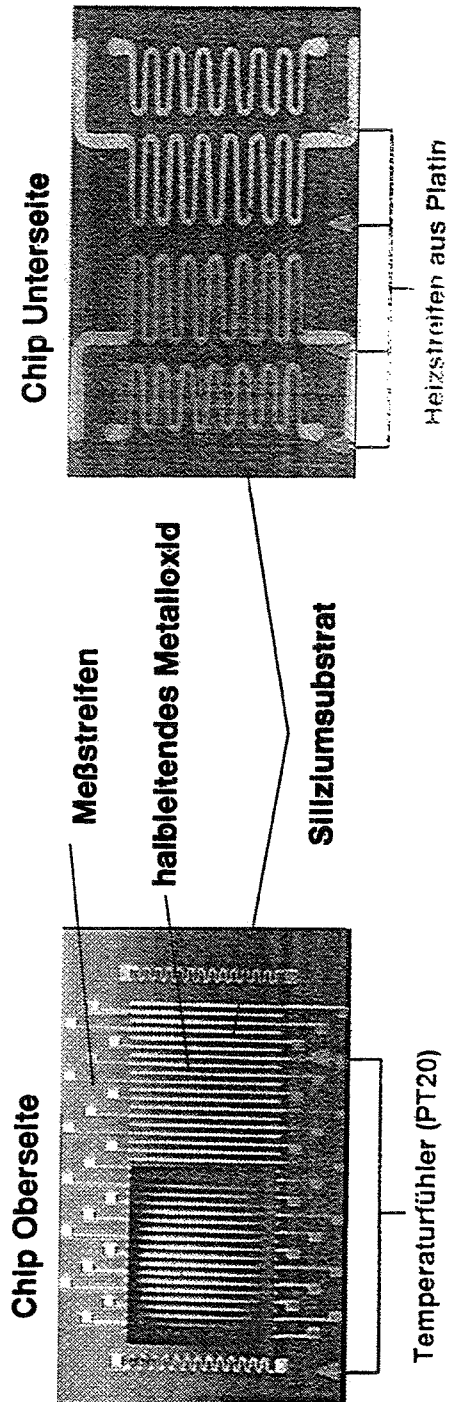
### Meß- und Regelaufgaben

- Erfassung des Widerstandes des Metalloxyds
- Einstellen einer konstanten Temperatur (ca. 300°C) im Metalloxyd

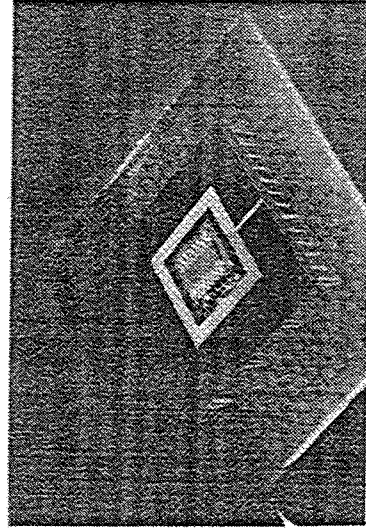


Hauptabteilung für Prozeßdatenverarbeitung und Elektronik

## Chipaufbau

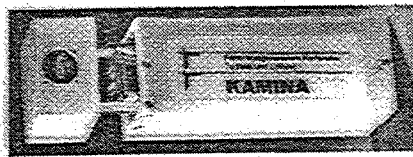


gehäuster Chip im 120 PGA-Gehäuse



## Thermische Analyse/Optimierung des Sensorverhaltens im System

### Systemanalyse



Leistungsbedarf bei 20°C ca. 8 Watt

Fehlende Informationen über Leistungsaufnahme bei -40°C Umgebungstemperatur

-> Leistungsreserve von 12 Watt (max. Ausgangsleistung der Elektronik 20 W)

Große Verlustleistung infolge der Leistungsreserve

-> Erhöhte Gehäusetemperatur

-> Erhöhte Temperatur der Elektronik

### Analyseziele

Ermittlung des maximalen Energiebedarfs des Sensors unter allen Betriebsbedingungen

Ermittlung des Einflusses der Luftströmung auf die Leistungsbilanz

Bestimmung der maßgeblichen thermischen Verlustwege

### Optimierungsziele

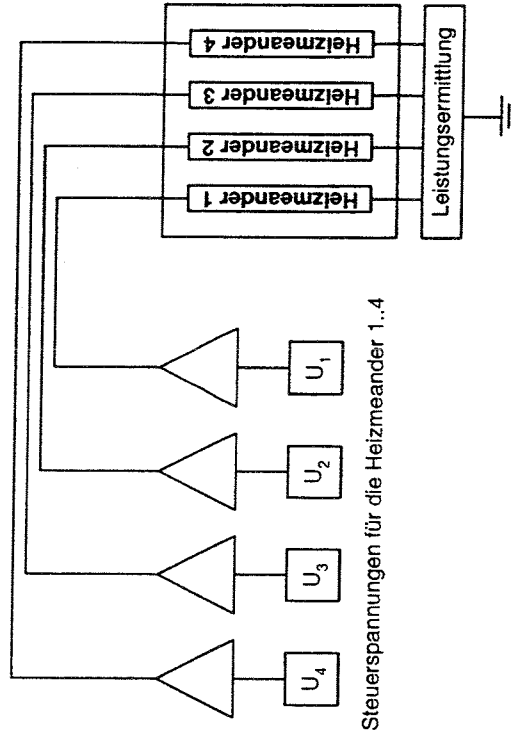
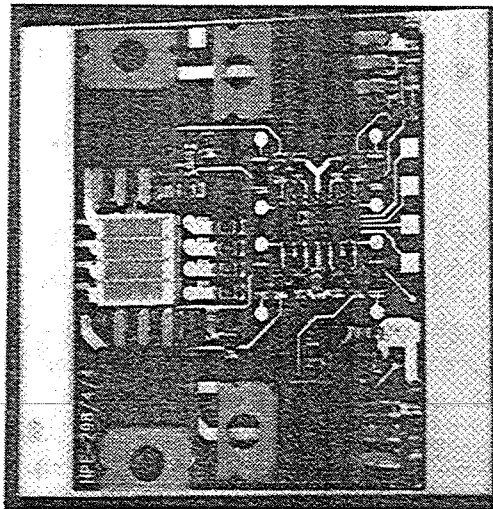
Energieaufnahme des Chips: Reduzieren !

Temperatur an den Bondstellen: Reduzieren !

Gehäusetemperatur: Verringern !

Hauptabteilung für Prozeßdatenverarbeitung und Elektronik

## Reales System als Simulationsgrundlage



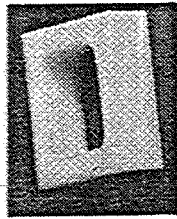
### Randbedingungen

- Auflage der Elektronik auf Aluminiumblock
- Keine Zwangskonvektion (Lüfter)
- Gehäuse nach oben geöffnet  
(Vergleichsmessung mit IR-Kamera)

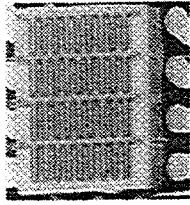
Hauptabteilung für Prozessdatenverarbeitung und Elektronik



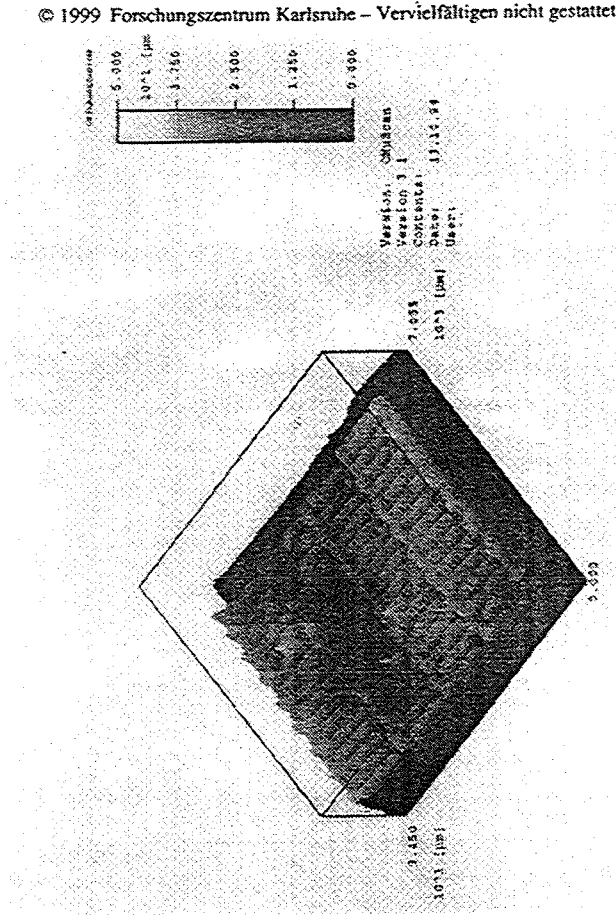
## Reale Chipgeometrie



Makorahmen, 3mm x 2 mm



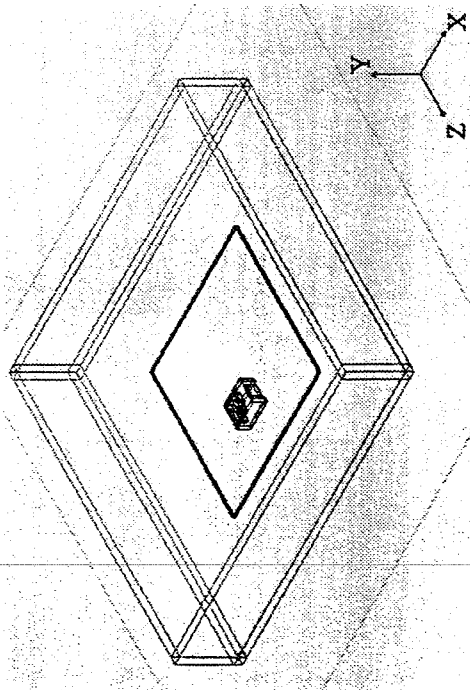
Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Chip  
100µm breite PT-Heizstrukturen  
Au-Bondpads 400µm x 400 µm



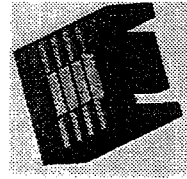
Strukturermittlung des Chips durch Oberflächenvermessung

	x [mm]	y [mm]	z [mm]	Material
Substrat	50	0,63	50	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Rahmen	8	3	9	Makor (Glaskeramik ähnlich Zirkonoxid)
Chip	8	0,25	9	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Heizung	2	0,02	0,64	Platin
Bondpad	0,4	0,02	0,4	Gold

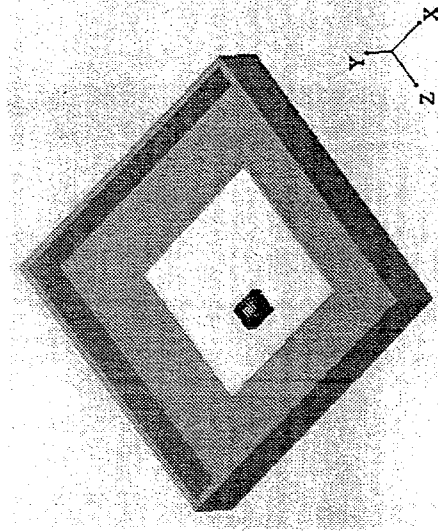
## Modellierung des Systems



Drahtmodell



optimierter Sensor



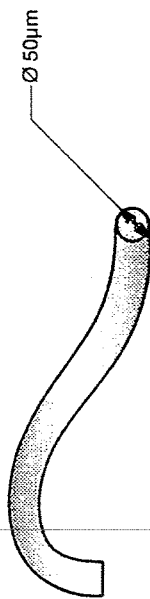
Visualisierung

### Nicht Simuliert

- Verlustleistung der Elektronik
- Höhe der Heizungs- und Glasstrukturen 50µm hoch anstelle von 20µm.
- Keine Belüftung oder Zwangskonvektion
- Grobes Gitter für den Lösungsraum

Hauptabteilung für Prozeßdatenverarbeitung und Elektronik

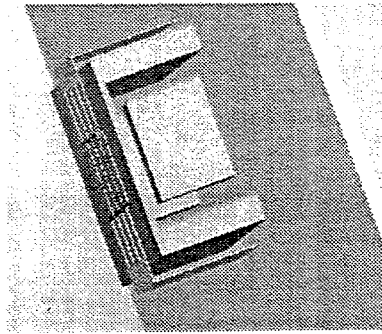
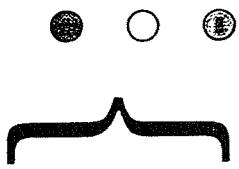
## Modellierung der Bonddrähte



100 Bonddrähte:  $d=50\mu\text{m}$

Ersatz der Bonddrähte durch ein Band mit gleicher Oberfläche  
Kompensation des Wärmedurchganges (Querschnittsfläche)  
durch Anpassung der Wärmeleitfähigkeit

Strahlung  
Leitung  
Konvektion  
Strömung



Chip mit Bondband

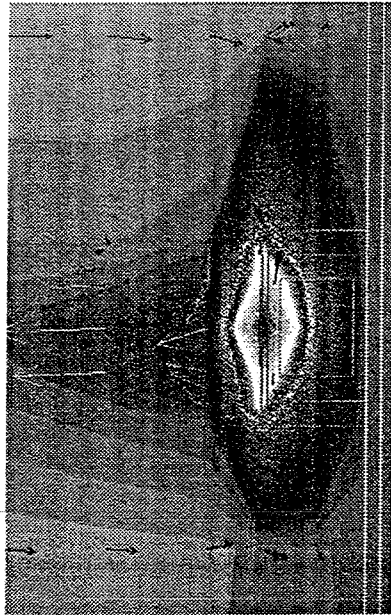
### Bestimmung der Dimensionen des Bondbandes

$$\begin{aligned}
 A_{\text{Bond-ges}} &= d_{\text{Bond}} \cdot \pi \cdot l_{\text{Bond}} \cdot n_{\text{Bond}} \\
 &= 50\mu\text{m} \cdot \pi \cdot 5\text{mm} \cdot 100 \\
 &= \underline{\underline{7,854 \cdot 10^{-5} \text{ m}}}
 \end{aligned}
 \quad
 \begin{aligned}
 h_{\text{Bond}} = 5\text{mm} &\Rightarrow b_{\text{Bond}} = \frac{A_{\text{Bond-ges}}}{h_{\text{Bond}}} = \underline{\underline{1,571 \text{ cm}}}
 \end{aligned}$$

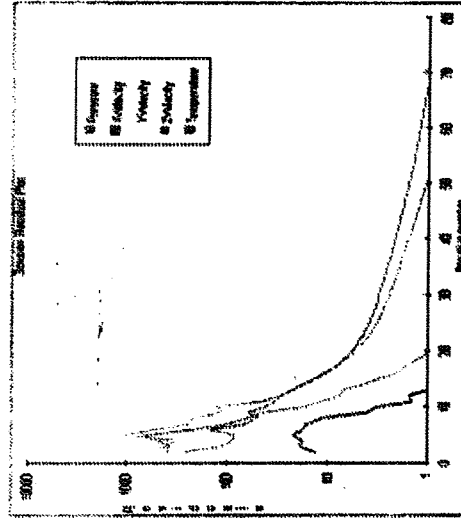
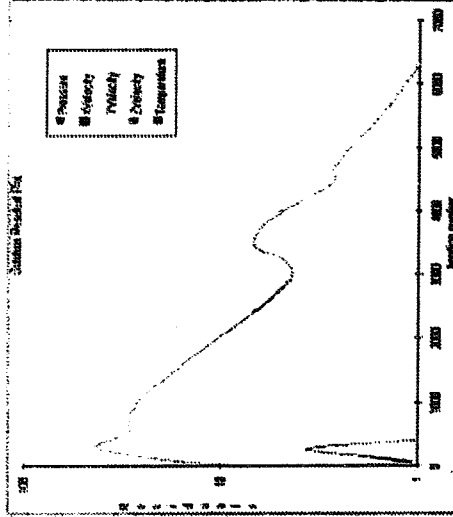
$$\begin{aligned}
 b_{\text{Bond}} &= \frac{b_{\text{Bond-ges}}}{4} = 2 \cdot d_{\text{Bond}} \cdot l_{\text{Bond}} \quad \text{und} \quad h_{\text{Bond}} = 5\text{mm} \\
 &= \underline{\underline{0,392 \text{ cm}}}
 \end{aligned}$$

, wobei die die Wärmeleitfähigkeit des Bondbandes um ca. 50% reduziert werden muß, um vergleichbare Werte zu den Bonddrähten zu erhalten.

## Verifikation der Simulation I



Temperatur und Strömungsverhalten



Konvergenzverhalten

### Check

Lufteintrittstemperaturen ok?

Strömungsrichtung ok?

Konvergenz?

Masse und Wärme Flüsse?

Anzahl Zellen:

ca. 4000 (23x10x17)

innere Iterationen:

P: 50, T25, automatic val.

Rechenzeit PIII 500 (128 MB):

ca. 3 h

Anzahl Zellen:

ca. 4000 (23x10x17)

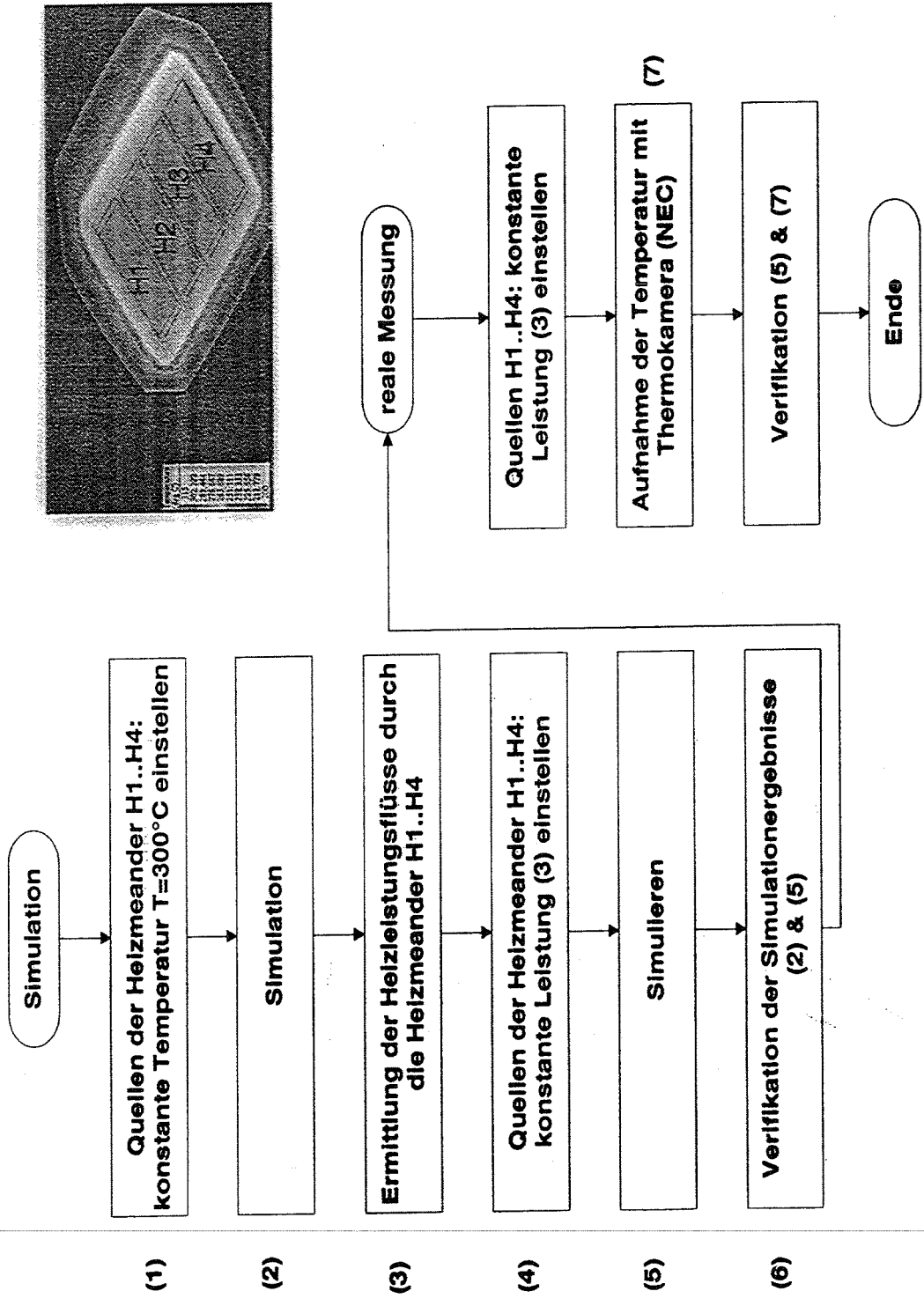
innere Iterationen:

P: 50, T100, auto. val./10

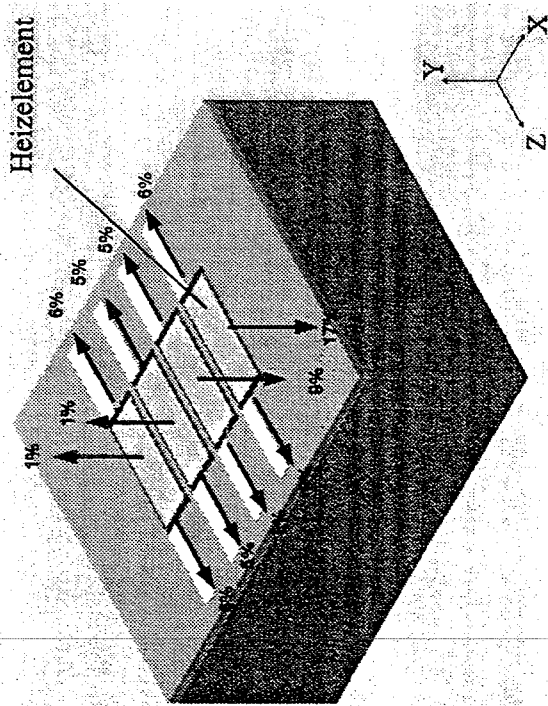
Rechenzeit PIII 500 (128 MB):

ca. 10min.

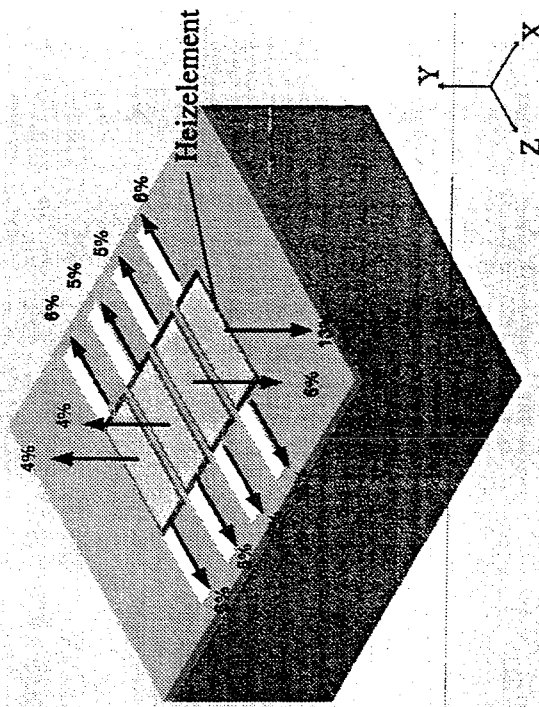
Verifikation der Simulation II



## Analyse der Verlustwege I



Leistungsverluste in den verschiedenen Regionen  
250µm ZrO-Chip ohne Glasabdeckung, alle Heizelemente T=300°C



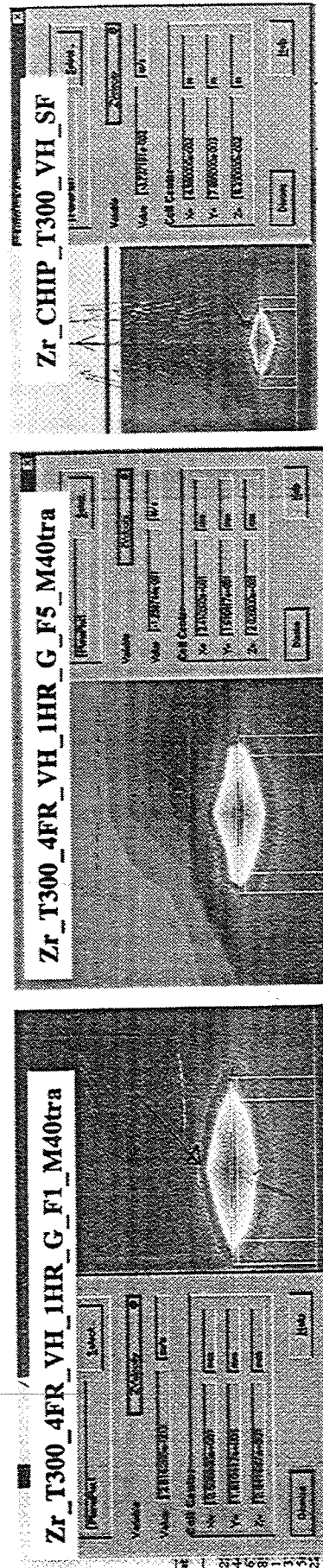
Leistungsverluste in den verschiedenen Regionen  
250µm ZrO-Chip mit Glasabdeckung, alle Heizelemente T=300°C

## Optimierung der Strömungsverhältnisse



Ohne Widerstand beträgt die Strömungsgeschwindigkeit mit Lüfter im Kanal ca. 75cm/s

- Widerstand (Öffnung 5%): 12 cm/s
- Widerstand (Öffnung 1%): 6 cm/s
- rein thermische Strömung: 3 cm/s



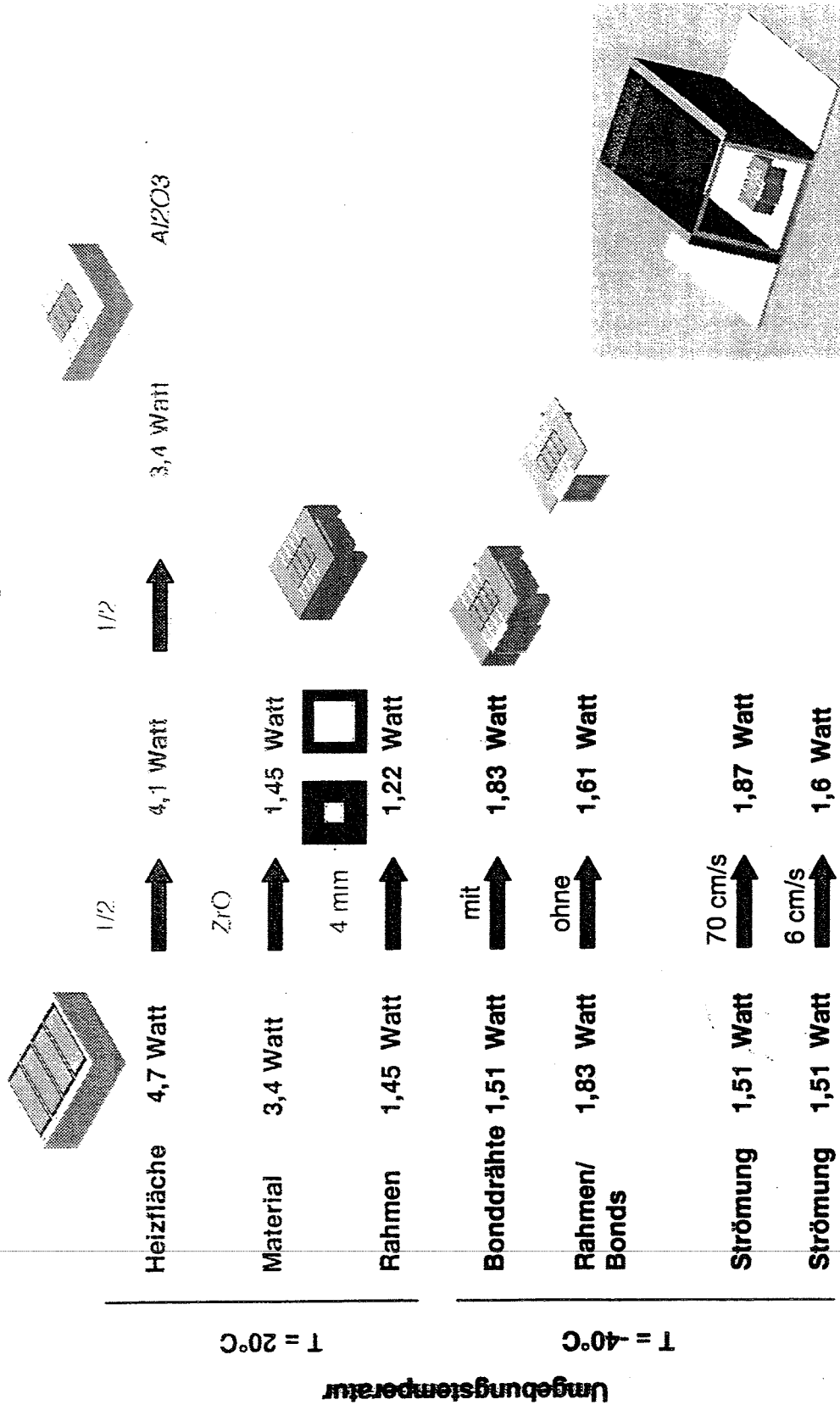
Widerstand (Öffnung 5%):

Widerstand (Öffnung 1%):

Thermische Strömung (z-Richtung)

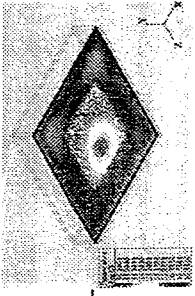
**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt

**Zusammenfassung Thermik**



Hauptabteilung für Prozessdatenverarbeitung und Elektronik





## Zusammenfassung & Ausblick

1. Nach der Simulation ist die Systemauslegung (Leistungsreserven) sehr genau möglich (Gesamtleistung bei gegenwärtigem Chipdesign 20 Watt -> 12 Watt).
  2. Durch Anpassung des Sensors kann der Energieverbrauch des Sensors um ca. 85% reduziert werden (12 Watt -> 2 Watt).
  3. Maßgebliche Verlustfaktoren sind die beheizte Fläche, die Bonddrähte, die Anbindung an das Substrat (Rahmen).
  4. Der Mini-Lüfter ist für Gasanwendungen überdimensioniert und ist nicht für die direkte Ventilation geeignet.
  5. Der Luftwiderstand (Filter) muß sehr hoch ausgelegt werden, um eine Gasgeschwindigkeit von 6 cm/s zu erreichen.
- ➔ Überarbeitung des Chipdesigns und Verifikation der Simulationsergebnisse.
- ➔ Entwicklung eines Gehäuses, das eine geeignete Gaszufuhr zum Sensor gewährleistet.

