

## Kapitel 2

# Analytische Beschreibung mikromechanischer Strukturen

### 2.1 Physikalische Beschreibungsebenen

Dieses Kapitel behandelt die grundlegenden physikalischen Beschreibungsweisen von mikromechanischen Strukturen. Zur gezielten Vorhersage des Verhaltens ist es notwendig, auf eine der Problemstellung angepaßte physikalische Beschreibungsweise zu achten. Daher müssen entsprechende physikalische Theorien und Näherungsmethoden im Entwurfsprozeß von Mikrostrukturen Anwendung finden, um eine effiziente Berechnung zu ermöglichen. Die Festkörperphysik beschreibt die Phänomene von Festkörpern durch die Untersuchung von mikroskopischen Vorgängen auf atomarer Ebene, während die Beschreibung des makroskopischen Verhaltens ausgedehnter Materie durch phänomenologische Theorien wie Kontinuumsmechanik oder Thermodynamik erfolgt. Bei der Vorhersage des mechanischen Verhaltens von Mikrostrukturen, bei der in der Regel von der Diskretheit des Kristallgitters abgesehen werden kann, hat die Elastizitätstheorie eine wichtige Bedeutung gewonnen. Für ausgewählte Grundgeometrien mikromechanischer Bauelemente wie Biegebalken und Membranen werden analytischen Methoden der Elastizitätstheorie vorgestellt. Diese ermöglichen das statische und dynamische Verhalten mikromechanischer Strukturen näherungsweise zu beschreiben. Die Untersuchung grundlegender physikalischer Einflußgrößen auf das Schwingungsverhalten mikromechanischer Strukturen erlaubt die Bewertung der Eignung für resonante Sensoranwendungen. Nichtlineares Bauelementeverhalten, hervorgerufen durch spannungsversteifende Effekte bei großen Deformationen, kann für bestimmte Spezialfälle näherungsweise in einer analytischen Form dargestellt werden. Die analytischen Berechnungen dienen neben der Grobdimensionierung der mikromechanischen Bauelemente als Startwerte für die Finite-Elemente-Simulationen zur sinnvollen Einschränkung des Parametervariationsraumes.

### 2.1.1 Mikroskopische Modelle

Das Verhalten mikromechanischer Systeme wird durch die mikroskopischen Eigenschaften des Festkörpers auf atomarer Ebene, d.h. durch den kristallinen Aufbau festgelegt. Die Festkörperphysik erlaubt durch die quantenmechanische Beschreibung, die atomistischen Phänomene des Kristallgitters durch mechanische, elektronische, thermische oder sonstige Anregungen und deren Wechselwirkung zu erklären. Die Elastizitätseigenschaften werden in der Gitterdynamik auf die Lage der Atome und den zwischen ihnen wirkenden Kräften, d.h. den zugrundeliegenden chemischen Bindungstypen der Kristalle zurückgeführt. Die Bindung der Atome ist hierbei abhängig von der elektrischen Wechselwirkung der Elektronen und der benachbarten Atomrümpfe, so daß die auftretenden elektrostatischen Kräfte für die Bindungsstärke der verschiedenen möglichen Bindungstypen<sup>1</sup> verantwortlich sind [Hellwege 88].

Zur Beschreibung der Dynamik eines dreidimensionalen Kristallgitters kann der Festkörper als eine unendlich ausgedehnte, periodische Anordnung von Atomen angesehen werden. In diesem einfachsten Fall kann das diskrete Gitter durch eine eindimensionale, unendlich lange Kette von gleichartigen Atomen angenähert werden (*Bornsche Näherung*). Beim Festkörper ist der interatomare Potentialverlauf für die Wechselwirkung zwischen den Atomen verantwortlich, wobei das resultierende elektrostatische Potential eine Überlagerung aus der *Coulombschen* Anziehung und der des Abstoßungspotentials ist. Der exakte asymptotische Potentialverlauf kann in der harmonischen Näherung durch einen quadratischen Potentialverlauf beschrieben werden. Der mittlere Atomabstand entspricht der Gleichgewichtslage und zeichnet sich durch das Potentialminimum aus. Die Kräfte, die auf die Atome wirken, ergeben sich aus dem Gradienten des Wechselwirkungspotentials und werden in linearer Näherung (*Hookesches Verhalten*) proportional zur Abstandsdifferenz der Atome angenommen.

Unter Zugrundelegung der Linearität der Gitterkräfte, wird bei der Quantisierung der elastischen Gitterschwingungen von der Annahme einzelner harmonischer Oszillatoren ausgegangen. Als Träger der diskreten Schwingungsenergie werden die Phononen (Schallquanten) eingeführt. Analog zu den quantisierten Energieeigenwerten des harmonischen Oszillators besitzt ein Phonon in der Schwingungsmode  $k$  mit der Frequenz  $\omega_k$  die Energie  $E_k = \hbar\omega_k$ . Die elastische Energie des Festkörpergitters stellt sich als eine Überlagerung aller Schwingungsmoden  $k$  dar, die ihrerseits mit  $n_k (= 0, 1, 2, \dots, \infty)$  Phononen besetzt sind. Die Gesamtenergie läßt sich daher als Summe der einzelnen Oszillatorbeiträge schreiben  $E = \sum_k \hbar\omega_k (n_k + \frac{1}{2})$ . Da  $n_k$  nur ganzzahlige Werte annehmen kann, entspricht dieses der Quantisierung der Energie elastischer Schwingungszustände in linearen Festkörpergittern. Insbesondere bleibt die Nullpunktsenergie endlich  $E(n_k = 0) = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ . Eine Abweichung vom linearen Kraftgesetz zwischen den Gitterteilchen tritt bei Amplitudenzunahme der Gitterschwingungen auf und es stellen sich anharmonische Effekte ein. Die Eigenschwingungen des Festkörpers sind nicht mehr entkoppelt (orthogonal) und im

<sup>1</sup>Ionenbindung, kovalente oder metallische Bindung, usw.

Phononen ergeben sich zusätzliche Wechselwirkungen zwischen den Phononen (z.B. Drei-Phononen-Prozesse). Es findet ein Energieaustausch statt und der Schwingungszustand wird durch Emission oder Absorption von Phononen verändert. Als Folge hiervon resultieren die thermische Ausdehnung und die endliche Wärmeleitfähigkeit in Kristallen [Kittel 88]. Eine zusätzliche Auswirkung ist, daß die adiabatischen und isothermen elastischen Konstanten nicht mehr gleich sind und von Druck oder Temperatur abhängig werden (siehe Kapitel 2.1.3). Durch Einführung weiterer „vermittelnder Teilchen“ werden zusätzliche Wechselwirkungen im Festkörper quantenmechanisch beschrieben. So führt die Elektronen-Phononen-Wechselwirkung<sup>2</sup> durch eine lokale Deformation des Kristallgitters zum elektrischen Widerstand, während Exzitonen für Polarisationswellen und Magnonen für Magnetisierungswellen verantwortlich sind [Paul 75].

Das Elektronenverhalten in periodischen Gitterstrukturen kann durch die Halbleiterphysik beschrieben werden, wobei mit Hilfe des Bändermodells die elektronischen Eigenschaften des Festkörpers erklärt werden können. Aufgrund des periodischen Verlaufs der potentiellen Energie der Atomrümpfe, spüren die Elektronen im Festkörper ein periodisches Gitterpotential. Die möglichen Energieeigenwerte der Elektronen werden im Rahmen des Bändermodells bestimmt und in quantenmechanisch erlaubte und verbotene Energiebänder eingeschränkt. Die Bandstruktur, die Besetzung der einzelnen Bänder und die Bandlücke (*Band-gap*), die das Leitungsband vom Valenzband trennt, ist dafür verantwortlich, ob es sich um einen Leiter, Halbleiter oder Isolator handelt. Die Energiebänder und die Bandlücke sind sowohl temperatur- als auch druckabhängig. Der bei mikromechanischen Sensoren wichtige *piezoresistive* Effekt, d.h. die druckabhängige Widerstands- bzw. Leitfähigkeitsänderung in Halbleitern, kann mikroskopisch durch eine Änderung der Bandlücke und der Besetzungswahrscheinlichkeit infolge eines äußeren mechanischen Druckes auf den Festkörper erklärt werden [Middelhoek 89].

### 2.1.2 Kontinuumsmechanische Beschreibung

Beim Übergang vom diskreten Kristallaufbau zum Kontinuum kann im klassischen Grenzfall die Quantisierung der mikroskopischen Feldgrößen vernachlässigt werden. Auf makroskopischer Ebene wird als phänomenologische Theorie die Kontinuumsmechanik bzw. Elastizitätstheorie zur Beschreibung elastomechanischer Festigkeitsprobleme eingesetzt. Ein schwingender elastischer Festkörper ist ein kontinuierliches System mit nahezu unendlich vielen Massenpunkten (Größenordnung:  $10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ) und besitzt somit unendlich viele Bewegungsfreiheitsgrade. Die vollständige Bewegung des Systems kann nur durch die Lagekoordinaten *aller* Punkte exakt beschrieben werden. Die in der klassischen Mechanik entwickelten *Lagrangeschen* und *Hamiltonschen* Formulierungen ermöglichen die Beschreibung der statischen (Deformationen) und dynamischen Vorgänge (z.B. Starrkörperbewegungen, elastische Schwingungen) sowohl diskreter als auch kontinuierlicher Systeme. Bei letzteren stellt die *Lagrange-Dichte* die Differenz zwischen kinetischer und potentieller

---

<sup>2</sup> Wechselwirkendes Teilchen: Polaron.

Energiedichte dar und ermöglicht unter Verwendung des *Hamiltonschen* Variationsprinzips die Ableitung der *Lagrangeschen* Bewegungsgleichungen. Durch diesen Formalismus wird die Aufstellung allgemeiner Bewegungsgleichungen auch bei nichtmechanischen Problemstellungen ermöglicht [Goldstein 78]. In Kapitel 3 wird die Formulierung der FE-Methode auf der Grundlage von Variationsprinzipien für elastomechanische und elektromechanische Kontinua dargestellt.

In der Kontinuumsmechanik ist die Existenz eines eindeutigen und stetigen Verschiebungsfeldes eine unabdingbare Voraussetzung. Es handelt sich hier um das geometrische Grundgesetz der Elastizitätstheorie. Die Bewegungs- bzw. Zustandsgleichungen des elastischen Festkörpers lassen sich aus einem Variationsprinzip, der Minimierung der potentiellen Energie<sup>3</sup> ableiten. Eine hierzu gleichwertige Methode ist es, die Bewegungsgleichungen direkt mit Hilfe des *Newtonschen* Gesetzes aus dem lokalen Gleichgewicht der am Festkörperelement wirkenden inneren und äußeren Kräfte aufzustellen. Unter Ausnutzung des *d'Alembertschen* Prinzips kann unter Einführung von zusätzlichen Trägheitskräften das dynamische Problem auf ein statisches reduziert werden [Sommerfeld 49]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.1)$$

wobei:

$$\begin{aligned} u_i &= x'_i - x_i : \text{Verschiebungsvektor} \\ \sigma_{ij} &: \text{allgemeiner Spannungs- bzw. Drucktensor} \\ f_i &: \text{externe Volumenkräfte} \\ \rho &: \text{homogene Materialdichte.} \end{aligned}$$

Die Gleichung (2.1) wird auch als „Spannungs-Divergenz-Theorem“ bezeichnet und beschreibt das Verhalten elastischer Kontinua. Bei rein statischen Problemstellungen verschwinden die Trägheitskräfte auf der linken Seite. Zur vollständigen Beschreibung des kontinuumsmechanischen Randwertproblems müssen zusätzlich die Verschiebungen bzw. Kräfte auf der Oberfläche des Körpers gewissen Randbedingungen genügen.

Die Festlegung des Spannungszustandes wird durch den Zusammenhang von Spannungen und Dehnungen geliefert und ist werkstoffabhängig. Zur Darstellung eines beliebigen Deformationszustandes sind drei Normalspannungen ( $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ ) sowie drei Schubspannungen ( $\sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx}$ ) erforderlich. Zu diesen Spannungen korrespondieren drei Dehnungen (Dilatationen bzw. Kontraktionen:  $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}$ ) und drei Scherungen (Torsion:  $\gamma_{xy}, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}$ ), durch deren Überlagerung ebenfalls jede beliebige Deformation eines Körpers erzeugt werden kann. Unter Verwendung des allgemeinen Materialgesetzes, auch Werkstoffgesetz genannt, gilt für den Zusammenhang zwischen den mechanischen Spannungen  $\sigma$  und den Dehnungen  $\varepsilon$  im Festkörper<sup>4</sup>:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad \text{bzw.} \quad \varepsilon_{ij} = \sum_{k,l} S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (2.2)$$

<sup>3</sup> Prinzip der virtuellen Arbeit bzw. virtuellen Verschiebungen.

<sup>4</sup> Im weitem gilt:  $x = 1, y = 2, z = 3$ .

wobei  $i, j, k, l \in \{1, 2, 3\}$ . Die elastischen Materialeigenschaften werden hierbei entweder durch den Tensor der Elastizitätsmoduln  $C_{ijkl}$  oder durch den der Elastizitätskoeffizienten  $S_{ijkl}$  beschrieben, wobei  $C_{ijkl} = S_{ijkl}^{-1}$  gilt. Die Spannungen und Dehnungen sind Tensoren 2. Stufe während die Materialeigenschaften durch Tensoren 4. Stufe beschrieben werden, was sich durch ihr Verhalten bei Koordinatentransformationen zeigt. Aufgrund der Gleichheit der Schubspannungen (Momentengleichgewicht) ist der Spannungstensor symmetrisch, d.h.  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ . Da der Spannungstensor von der Wahl des Koordinatensystems abhängig ist, ist es sinnvoll ihn in drei Hauptspannungsanteile  $\sigma_i^H$  ( $i = 1, 2, 3$ ) zu zerlegen, die invariant unter Koordinatentransformationen sind. Diese drei Hauptrichtungen des Spannungstensors sind orthogonal zueinander und erlauben Aussagen über die maximal zulässigen Bauelementebelastungen.

Die Definition des Dehnungstensors kann unabhängig von den Verschiebungen über die Änderung der „Quadrate des Abstandes“ zweier Massenpunkte bei einer Deformation erfolgen [Landau 74]:

$$ds'^2 - ds^2 =: 2 \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} dx_i dx_j \quad (2.3)$$

wobei:

$$ds^2 = \sum_{k,l} \delta_{kl} dx_k dx_l$$

Der kinematische Zusammenhang<sup>5</sup> zwischen dem Verschiebungsfeld  $u$  und den Dehnungen  $\varepsilon$  wird durch den *Green-Lagrangeschen* Dehnungstensor bei endlichen Deformationen beschrieben:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \underbrace{\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}}_{\text{linear}} + \sum_k \underbrace{\frac{\partial u_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_j}}_{\text{nichtlinear}} \right) \quad (2.4)$$

Wichtige Eigenschaften dieses Tensors sind seine Symmetrie ( $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ ) und seine Invarianz gegenüber Starrkörperrotationen. Das technische Dehnungsmaß vernachlässigt bei infinitesimalen Deformationen kleine Verschiebungsgradienten, so daß in linearer Näherung (*Hookesches* Elastizitätsverhalten) das gemischte quadratische Glied entfällt und es sich dann um den linearisierten *Cauchy-Greenschen* Dehnungstensor handelt. Bei endlichen Dehnungen korrespondiert zum nichtlinearen *Green-Lagrangeschen* Dehnungstensor (2.4) der symmetrische 2. *Piola-Kirchhoffsche* Spannungstensor [Bathe 82]. Auf die numerische Berücksichtigung des quadratischen Gliedes des Dehnungstensors wird in Kapitel 3 unter geometrischen Nichtlinearitäten eingegangen.

### 2.1.3 Thermodynamische Beschreibungsebene

Ein mikromechanisches System wechselwirkt fortwährend mit seiner Umgebung und steht im gegenseitigen Energieaustausch. Dieser Austausch von Energie führt zu einer physika-

<sup>5</sup> Auch Kompatibilitäts- bzw. Verträglichkeitsbedingung nach *Saint-Venant* genannt.

lischen Zustandsänderung des Systems. Hierbei ist jeder Energieform vom thermodynamischen Standpunkt aus eine unabhängige thermodynamische Zustandsgröße (Zustandsvariable) zugeordnet. Die intensiven Variablen können als „treibende Kräfte“ im Festkörper angesehen werden, die die extensiven Variablen als „Reaktionen“ zur Folge haben. In diesem Sinne kann jedes mikromechanische Bauelement als ein elektro-thermo-mechanisches System aufgefaßt werden. Das Gesamtmikrosystem läßt sich nach Wachutka hierbei aus seinen Teilsystemen, bestehend aus Kristallgitter und Ladungsträgern (Elektronen und Löcher) zusammengesetzt denken [Wachutka 92]. In **Abbildung 2.1** sind die allgemeinen intensiven Zustandsvariablen zur Beschreibung eines mikromechanischen Systems abgebildet. Die Zusammenhänge zwischen intensiven und extensiven Zustandsvariablen sind dabei

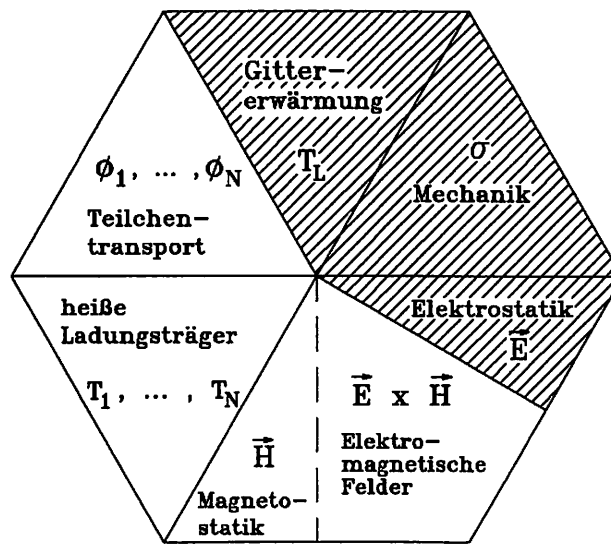


Abbildung 2.1: Allgemeine intensive Zustandsvariablen eines mikromechanischen Systems (nach [Wachutka 92])

durch die thermodynamischen Zustandsgleichungen gegeben, welche die entsprechenden physikalischen Wechselwirkungseffekte beschreiben. Die intensiven Zustandsvariablen eines Mikrosystems sind nach Abbildung 2.1 durch den mehrdimensionalen Zustandsvektor:

$$X = (\sigma, \vec{E}, \vec{H}, T_L, T_1, \dots, T_N, \phi_1, \dots, \phi_N) \quad (2.5)$$

gegeben. Hierbei ist  $\sigma$  der bereits oben definierte Spannungstensor<sup>6</sup>,  $\vec{E}$  und  $\vec{H}$  die elektrische und magnetische Feldstärke,  $T_L$  die Temperatur des Substrats (z.B. des Kristallgitters),  $T_1, \dots, T_N$  und  $\phi_1, \dots, \phi_N$  die Temperatur und das elektrochemische Potential der beweglichen Ladungsträger, die einen möglichen Massen- oder Ladungstransport im System verursachen können. Die entsprechend zugeordneten extensiven Zustandsvariablen sind durch den Zustandsvektor:

$$Y = (\varepsilon, \vec{D}, \vec{B}, s_L, s_1, \dots, s_N, c_1, \dots, c_N) \quad (2.6)$$

<sup>6</sup>Bei fluiden Medien handelt es sich um den Drucktensor.

gegeben. Hierbei ist  $\varepsilon$  die mechanische Dehnung,  $\vec{D}$  die dielektrische Verschiebung (Flußdichte) und  $\vec{B}$  die magnetische Induktion,  $s_L$  die Entropiedichte des Substratmediums,  $s_k$  und  $c_k$  die Entropiedichte und Ladungsträgerkonzentration der  $k$ -ten Teilchensorte ( $k = 1 \dots N$ ). Die Zustandsvariablen sind im allgemeinen orts- und zeitabhängig. Die intensiven und extensiven Zustandsvariablen sind durch Materialkonstanten verknüpft, die von den äußeren Randbedingungen des thermodynamischen Systems abhängig sind. Insbesondere unterscheiden sie sich bei isothermen (Temperatur:  $T = \text{const}$ ) und adiabatischen Prozessen (Entropie:  $S = \text{const}$ ). Die nachfolgenden Betrachtungen gehen in erster Näherung von linearen Abhängigkeiten, also Wechselwirkungseffekten erster Ordnung aus. Zusätzlich sollten für eine angepaßte Modellbildung die Zustandsgleichungen und -variablen auf den das Mikrosystem beschreibenden minimalen Parametersatz kondensiert werden.

In dieser Arbeit wird das Hauptaugenmerk auf die Interaktion des mechanischen Verschiebungsfeldes mit dem umgebenden Temperaturfeld und dem elektrischen Feld gelegt (in Abbildung 2.1 gestrichelt hinterlegt). Das Temperaturfeld führt infolge der temperaturabhängigen Materialeigenschaften und den unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten mikromechanischer Multilayersysteme zu thermisch induzierten Spannungen. Das elektrische Feld verursacht in piezoelektrischen Medien eine bidirektionale elektromechanische Kopplung, die zum direkten und reziproken piezoelektrischen Effekt führt. Auf die Behandlung anderer Wechselwirkungsmechanismen die bei Mikrosystemen Anwendung finden, z.B. elektronische, elektrothermische oder magnetische Effekte, sei auf Arbeiten von Wachutka [Wachutka 90, Wachutka 91] verwiesen.

In **Abbildung 2.2** sind die Zusammenhänge zwischen den intensiven und extensiven Zustandsvariablen bei elektro-thermo-mechanischer Wechselwirkung in linearer Näherung dargestellt [Nye 57]. Die Größen im äußeren Dreieck entsprechen den intensiven Zustandsvariablen ( $\sigma, \vec{E}, T$ ), die extensiven Zustandsvariablen ( $\varepsilon, \vec{D}, S$ ) befinden sich im inneren Dreieck. Die direkten Verbindungen zwischen intensiven und extensiven Zustandsvariablen, durch einen dicken Balken gekennzeichnet, entsprechen Vorgängen, die sich auf Wechselwirkungen innerhalb der drei Subsysteme beschränken. Sie beschreiben rein mechanische, thermische oder elektrische Effekte. Erst durch die Ankopplung der anderen Subsysteme treten Wechselwirkungen wie thermoelastische Effekte, die Piezo- und Pyroelektrizität in Erscheinung. Werden die intensiven Zustandsgrößen ( $\sigma, \vec{E}, T$ ) als unabhängige Variablen<sup>7</sup> verwendet, so lassen sich die elektro-thermo-mechanischen Kopplungseffekte durch die folgenden Zustandsgleichungen eindeutig beschreiben [Ikeda 90a, Nye 57]:

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{k,l} S_{ijkl}^{E,T} \sigma_{kl} + \sum_k d_{kij}^T E_k + \alpha_{ij}^E \delta T \quad (2.7)$$

$$D_n = \sum_{k,l} d_{nkl}^T \sigma_{kl} + \sum_k \epsilon_{nk}^{\sigma,T} E_k + p_n^\sigma \delta T \quad (2.8)$$

$$\delta S = \sum_{i,j} \alpha_{ij}^E \sigma_{ij} + \sum_k p_k^\sigma E_k + (c^{\sigma,E}/T) \delta T \quad (2.9)$$

<sup>7</sup>In den Gleichungen (2.7 – 2.9) sind ( $\varepsilon, \vec{D}, S$ ) die abhängigen Variablen.

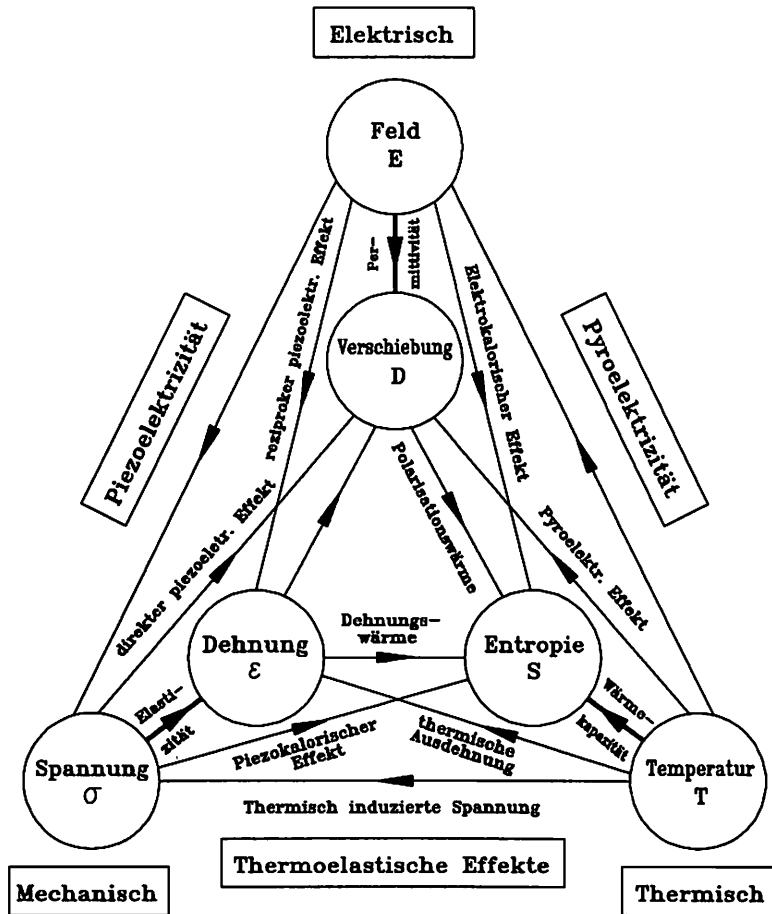


Abbildung 2.2: Wechselwirkung der intensiven und extensiven thermodynamischen Zustandsvariablen bei elektro-thermo-mechanischer Kopplung (nach [Nye 57])

wobei  $\delta T$  die Temperaturänderung und  $\delta S$  die Änderung der Entropiedichte bedeuten. Die Konstanten der jeweiligen Systeme sind durch:

- $S_{ijkl}^{E,T}$  : elastische Steifigkeitskoeffizienten
- $\epsilon_{nk}^{\sigma,T}$  : Permittivitäten (bzw. Dielektrizitätskonstanten)
- $c^{\sigma,E}$  : spezifische Wärmekapazität

gegeben und die Materialkonstanten  $d$ ,  $\alpha$  und  $p$  beschreiben die elektromechanische, thermomechanische und thermoelektrische Wechselwirkung:

- $d_{kij}^T$  : piezoelektrische Moduln
- $\alpha_{ij}^E$  : thermische Ausdehnungskoeffizienten
- $p_k^\sigma$  : pyroelektrische Koeffizienten.

Die Zustandsgleichungen lassen sich auch durch die Verwendung der extensiven Zustandsgrößen ( $\epsilon, \vec{D}, S$ ) auf der rechten Seite der Gleichungen (2.7–2.9) oder durch eine Kombination beider Variablentypen ausdrücken. Die Beziehungen zwischen den Zustandsgrößen



sind eindeutig, wenn die äußeren Bedingungen des thermodynamischen Systems festgelegt sind. Die Materialkonstanten werden hierzu mit dem jeweiligen konstant gehaltenen Parameter als hochgestellte Symbole, d.h.  $\sigma = \text{const}$  bzw.  $E = \text{const}$  bzw.  $T = \text{const}$ , gekennzeichnet. Bei kompakter Darstellung der Tensoren unter Weglassung der Indizes und der jeweiligen thermodynamischen Randbedingung der Materialkonstanten können obige Zustandsgleichungen durch das Kopplungsschema gemäß **Abbildung 2.3** übersichtlich dargestellt werden, wenn die vermittelnden Materialtensoren zu einer Gesamtmatrix<sup>8</sup> zusammengefaßt werden [Nye 57]:

	$\sigma$	$E$	$\delta T$
$\varepsilon$	$S$	$d^t$	$\alpha$
$D$	$d$	$\epsilon$	$p$
$\delta S$	$\alpha^t$	$p^t$	$c/T$

Abbildung 2.3: Gesamtmatrix der elektro-thermo-mechanischen Wechselwirkungseffekte in einem Festkörper (nach [Nye 57])

<sup>8</sup>Der Superskript t kennzeichnet die jeweils transponierte Materialmatrix, so daß die Gesamtmatrix wieder symmetrisch ist. T steht für die absolute Temperatur.

## 2.2 Materialeigenschaften mikromechanischer Werkstoffe

Als Substratmaterial wird in der Mikromechanik vorwiegend einkristallines Silizium eingesetzt. Silizium gehört der vierten Hauptgruppe des Periodensystems der Elemente an und besitzt gerichtete tetraedrisch-kovalente Atombindungen. Die Kristallstruktur weist ein kubisch flächenzentriertes Raumgitter auf. Die kubische Einheitszelle besitzt eine Kantenlänge von 0,543 nm und enthält acht Silizium-Atome. Kohlenstoff, Germanium und Zinn kristallisieren ebenfalls in dieser Diamantstruktur, die ein Inversionszentrum aufweist, so daß diese Elemente aufgrund der Kristallsymmetrie keine piezoelektrischen Eigenschaften besitzen. Als nicht zentrosymmetrische Kristalle sind hingegen Quarz ( $\text{SiO}_2$ ) und Zinkoxid ( $\text{ZnO}$ ) piezoelektrisch und weisen jeweils eine Vorzugsrichtung<sup>9</sup> auf. Einkristalliner Quarz spielt für die Frequenzstabilisierung und resonanten Sensoranwendungen bereits seit längerem in Form von verschiedenen Schwingergeometrien (z.B. Dicken- und Flächenschwinger) eine bedeutende Rolle [Büttgenbach 91b]. Hierbei hat lediglich die unterhalb von 573 °C stabile Modifikation, der sogenannte  $\alpha$ -Quarz, eine technische Bedeutung.

Um Siliziumstrukturen als piezoelektrisch angetriebene Sensoren oder Aktoren einsetzen zu können, bedarf es zusätzlicher aktiver Wandlerschichten, beispielsweise piezoelektrischer Dünnschichten wie Aluminiumnitrid oder Zinkoxid. In **Tabelle 2.1** sind für Silizium, Zinkoxid und Quarz grundlegende physikalische Eigenschaften im Vergleich zusammengestellt. Die Angaben zu den Materialeigenschaften wurden verschiedenen Literaturquel-

Tabelle 2.1: Vergleich der grundlegenden physikalischen Eigenschaften von Silizium, Zinkoxid und Quarz

Material:	Silizium	Zinkoxid	$\alpha$ -Quarz
Kristallart:	kubisch	hexagonal	trigonal
elastische Konstanten:	3	5	6
Schönflies:	T	$C_{6v}$	$D_3$
Hermann-Mauguin:	23	6mm	32
Gitterkonstante [nm]:	$a_0 = 0,543$	$a_0 = 0,325$ $c_0 = 0,521$	$a_0 = 0,491$ $c_0 = 0,540$
Charakter:	ind. Halbleiter	Halbleiter	Isolator
Bandlücke [eV]:	1,14	3,20	8,90
piezoelektrisch:	nein	ja	ja

len [Kittel 88, Landolt-Börnstein 82, Tichy 80] entnommen. Die Daten beziehen sich auf einkristalline ausgedehnte Festkörper, sogenanntes Bulk-Material, bei Zimmertemperatur ( $T = 300$  K). Aufgrund der unterschiedlichen Symmetrieeigenschaften des kubischen,

<sup>9</sup>Kristallographisch wird die Vorzugsrichtung als  $c$ -Achse und die dazu senkrechten Richtungen als  $a$ -Achsen bezeichnet.

hexagonalen und trigonalen Kristallgitters variiert die Anzahl der unabhängigen elastischen Konstanten. Die Bezeichnung der Symmetrieklassen ist an *Schönflies* und *Hermann-Mauguin* (Internationale Punktgruppen-Bezeichnung) angelehnt. Während Quarz ein ausgezeichneter Isolator<sup>10</sup> ist, werden Silizium und Zinkoxid den Halbleitern zugeordnet. Im Gegensatz zu Zinkoxid weist Silizium einen indirekten Bandübergang auf.

Das anisotrope elastische Verhalten von Festkörpern ist durch die Zusammenhänge in Gleichung (2.2) bestimmt. Zur physikalischen Beschreibung werden hierzu die Koordinatenachsen in die Symmetrieachsen des Kristalls gelegt. In Abhängigkeit der Symmetrieeigenschaften des Kristallgitters reduziert sich die Anzahl der unabhängigen Materialparameter des beschreibenden Materialtensors. Der Spannungs- und Dehnungstensor besitzen jeweils 36 Komponenten, die aufgrund der Symmetrie  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  und  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$  auf 21 unabhängige Komponenten reduziert werden. Dieser Fall entspricht der triklinen Kristallklasse  $C_1$ , die somit die maximale Unsymmetrie aufweist. Bei einkristallinem Quarz reduziert sich die Anzahl weiter auf sechs unabhängige Konstanten [Brice 85, Tichy 80]. In der technischen Literatur hat sich die einfachere Matrixschreibweise gegenüber der exakten Tensorschreibweise durchgesetzt, bei der die Komponenten des Spannungs- und Dehnungstensors durch sechs unabhängige Größen<sup>11</sup> ausgedrückt werden. Der Elastizitätstensor läßt sich daher durch eine symmetrische 6x6-Matrix darstellen, deren Koeffizienten die *Voigtschen* Elastizitätsmoduln  $C_{ij}$  sind. Das Materialgesetz ergibt sich dann in vereinfachter Matrixnotation zu:

$$\sigma_i = \sum_j C_{ij} \varepsilon_j \quad (2.10)$$

Das Besetzungsschema der symmetrischen Elastizitätsmatrix  $C_{ij}$  sieht bei kubischer Kristallsymmetrie des Festkörpers wie folgt aus:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix}$$

Die drei unabhängigen elastischen Konstanten von einkristallinem Silizium betragen bei Raumtemperatur  $C_{11} = 165,8$  GPa,  $C_{12} = 63,9$  GPa und  $C_{44} = 79,6$  GPa [Landolt-Börnstein 82]. Die Richtungen  $x$ ,  $y$  und  $z$  sind die kubischen Kristallrichtungen [100], [010] und [001]. Die Besetzung der  $S_{ij}$ -Matrix ist identisch, wobei für den Zusammenhang der Komponenten gilt [Nye 57]:

$$C_{11} = \frac{S_{11} + S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})}$$

<sup>10</sup>Die Leitfähigkeit beträgt bei Quarz weniger als  $10^{-21}$  S/m.

<sup>11</sup>Die Zuordnung der Matrixeinzeldizes zu den Tensordoppelindizes erfolgt nach dem Schema:  $ii \rightarrow i$  für  $i = 1-3$ ,  $23/32 \rightarrow 4$ ,  $13/31 \rightarrow 5$  und  $12/21 \rightarrow 6$ .

$$\begin{aligned}
C_{12} &= \frac{-S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})} \\
C_{44} &= \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = \frac{1}{S_{44}}
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Beim Übergang vom kubischen Kristall zum isotropen Körper ergibt sich aus Symmetriegründen eine Reduktion der Komponenten auf zwei. Die beiden unabhängigen Konstanten können durch den isotropen Elastizitätsmodul  $E$  (Youngscher Modul) und die Querkontraktionszahl  $\nu$  (Poissonsche Zahl) ausgedrückt werden. Zusätzlich ist der Schubmodul durch  $G = E/2(1+\nu)$  definiert. Da für erste Abschätzungen in der Regel eine grobe Näherung ausreichend ist oder die anisotropen Eigenschaften von Dünnschichtmaterialien nicht bekannt sind, kann mit isotropem Materialverhalten gerechnet werden [Heuberger 89]:

$$\begin{aligned}
E &= C_{11} = \frac{1}{S_{11}} \\
\nu &= -\frac{S_{12}}{S_{11}} \\
G &= \frac{1}{S_{44}}
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Unter Berücksichtigung der elektrischen und thermischen Wechselwirkung mit dem elastischen Verschiebungsfeld kommen zum Elastizitätstensor gemäß den Zustandsgleichungen (2.7–2.9) zusätzliche kopplungsbeschreibende Materialtensoren hinzu. In **Abbildung 2.4** ist das Besetzungsschema der Materialmatrizen bei elektro-thermo-mechanischer Wechselwirkung für ein hexagonales Kristallsystem (Punktsymmetrieklasse: 6mm) angegeben [Nye 57]. Hierbei bedeuten dicke Punkte die Besetzung eines Matrixplat-

	$\sigma$	$E$	$\delta T$
$\epsilon$			
$D$			
$\delta S$			

Abbildung 2.4: Besetzungsschema der Materialmatrizen bei hexagonaler Kristallsymmetrie (nach [Nye 57])

zes und die Verbindungslinien bedeuten Gleichheit der Komponenten. Das Kreuzsymbol bei der (6,6)–Komponente der Elastizitätsmatrix steht für  $2(S_{11} - S_{12})$  bzw.  $\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$ . Die symmetrische Gesamtmatrix besitzt maximal  $(6 + 3 + 1) \cdot (6 + 3 + 1) = 100$  Komponenten. Beim hexagonalen Kristallsystem kommen zu den fünf unabhängigen elastischen Koeffizienten (Tabelle 2.1) weitere drei piezoelektrische, zwei dielektrische Koeffizienten und jeweils ein pyroelektrischer, sowie ein thermischer Koeffizient hinzu. Diese insgesamt 14 unabhängigen Materialkennwerte charakterisieren das mechanische, thermische und elektrische Materialverhalten vollständig.

### 2.2.1 Strukturmaterialien

In **Tabelle 2.2** sind die mechanischen und thermischen Eigenschaften von einigen wichtigen Substratmaterialien bei Zimmertemperatur ( $T = 300\text{ K}$ ) zusammengestellt, die für die Realisierung mikromechanischer Bauelemente Verwendung finden. Neben den einkristallinen Werkstoffen Silizium und Quarz (siehe Tabelle 2.3) werden auch verschiedene Siliziumverbindungen, wie z.B. Siliziumoxid ( $\text{SiO}_2$ ) und Siliziumnitrid ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) eingesetzt. Als Ausgangsmaterial dienen Siliziumscheiben (Wafer), die je nach Spezifikation mit verschiedenen Orientierungen (100, 110, 111), Fremdatomdotierungen (Bor, Phosphor) und Oberflächenbeschaffenheit (z.B. einseitig oder doppelseitig poliert) mit unterschiedlichen Scheibendurchmessern (100–200 mm) bezogen werden können. Einkristalliner Quarz wird für mikromechanische Anwendungen in der Form quadratischer Quarzblanks mit 1,5" Kantenlänge und genau definierten Kristallorientierungen (z.B. AT-, Z-Schnitt) verwendet. Siliziumnitrid und poly-Silizium (*poly-Si*) können durch spezielle Prozeßverfahren, mit Hilfe von  $\text{SiO}_2$ -Opferschichten, als freitragende Strukturen hergestellt werden [Kamins 90]. Siliziumnitrid-Schichten können sowohl durch physikalische PVD-Verfahren (Sputtern), als auch durch chemische LPCVD- (= Low Pressure CVD) und PECVD-Verfahren (= Plasma Enhanced CVD) bei Temperaturen von 780–850 °C und etwa 350 °C aus der Gasphase abgeschieden werden. Siliziumoxid wird durch thermisches Oxidieren (trocken oder naß bei 950–1100 °C), als LTO (= Low Temperature Oxide) bei Temperaturen von 450–650 °C oder als PECVD-Oxid bei 300 °C hergestellt. Die Abscheideraten sind abhängig von den Prozeßparametern und betragen etwa 0,5–10 nm/min. Typische Schichtdicken liegen zwischen einigen hundert Nanometern und wenigen Mikrometern. Die nachfolgende Zusammenstellung gibt einen Überblick über die mechanischen Eigenschaften (E-Modul, Poisson-Zahl  $\nu$ , Dichte  $\rho$ ), Wärmeausdehnungskoeffizienten  $\alpha$  und die Größenordnung der prozeßbedingten inneren Spannungen [Bach, Büttgenbach 91a, Heuberger 89, Kamins 90, Petersen 79, Tabata 89, Wandt]. Neben der Anwendung als Mikrostruktur mit Dicken von 1–3  $\mu\text{m}$  werden die Schichten vor

Tabelle 2.2: Eigenschaften mikromechanischer Strukturmaterialien

Material	E-Modul [GPa]	$\nu$	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$\alpha$ [ppm/K]	Spannung [MPa]	Bemerkung:
c- $\text{Si}_{110}$	169	0,063	2329	2,62	86 bordot.	einkristallin
Dünnschichtmaterial						
<i>poly-Si</i>	160–175	0,23	2330	3,30	10	polykristallin, LPCVD
$\text{SiO}_2$	57–92	0,17	2220	0,3–0,6	10 bis 1000	therm. Naßoxid, LTO
$\text{Si}_3\text{N}_4$	140–320	0,3	3100	2,80	spannungsarm	PE-, LPCVD

allem als Passivierung mit Dicken von 100–300 nm eingesetzt. Da die Materialparameter mikrotechnisch hergestellter Schichtsysteme stark vom technologischen Herstellungsprozeß

beeinflusst werden, unterscheiden sie sich u.U. erheblich von denen des Bulk-Materials und weisen in der Regel prozeßtechnisch bedingte, innere Spannungen auf. Diese Spannungen sind i.a. nicht homogen über den Gesamtwafer verteilt und werden zusätzlich von einer anschließenden Strukturierung der Bauelemente beeinflusst. Die Materialeigenschaften mikrotechnisch hergestellter Schichten sind zusätzlich von der Schichtdicke abhängig. Die Gründe hierfür sind die veränderte Gitterstruktur an der Oberfläche, andere Schichtmorphologie (meist polykristalline Gefügestruktur) und herstellungsbedingte Fremdatomanteile aus der Restgasatmosphäre, die zu einer veränderten Stöchiometrie führen können. Die makroskopischen Schichteigenschaften ändern sich ab einer Dicke von 10 nm, dieses entspricht bereits etwa 100 Atomlagen. Neben der Änderung der morphologieabhängigen Materialeigenschaften treten zusätzlich innere Schichtspannungen auf. Diese sind auf die unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten der Schicht und des Substrates, sowie auf innere Spannungen, hervorgerufen durch Gitterverzerrungen infolge unterschiedlicher Gitterabstände zurückzuführen. Durch die mechanischen Spannungen kann die Haftfestigkeit der Dünnschichten stark herabgesetzt werden, so daß es im Extremfall zur Schichtablösung kommt. Aufgrund der größeren Defektdichte im kristallinen Aufbau weisen Dünnschichten in der Regel eine höhere Zugfestigkeit als Bulk-Material auf [Grabowski 91].

### 2.2.2 Piezoelektrische Dünnschichten

Piezoelektrische Dünnschichten können in mikromechanischen Anwendungen gleichzeitig als sensitive und aktive Wandlerschichten eingesetzt werden. Durch Ausnutzung des direkten piezoelektrischen Effektes (Abbildung 2.2) kann eine mechanische Spannung infolge einer Dehnung in der Schicht eine Ladungsverschiebung im Material hervorrufen, die über einen Ladungsverstärker als elektrische Spannung an geeignet angebrachten Elektroden abgegriffen werden kann. Hierdurch können mikromechanische Dünnschicht-Mikrophone [Franz 88, Kim 87] oder piezoelektrische Abtastelemente für schwingungsfähige Mikrostrukturen [Blom 90] realisiert werden. Der reziproke piezoelektrische Effekt erlaubt es durch Anlegen eines elektrischen Feldes die piezoelektrische Schicht einer Formänderung zu unterwerfen und bildet damit die Grundlage für statisch oder dynamisch angetriebene Sensoren und Aktoren. Das Ausnutzen der pyroelektrischen Aktivität von Zinkoxid erlaubt ferner Anwendungen als Wärmestrahlungsdetektor [Polla 84].

**Tabelle 2.3** zeigt einen Vergleich der Materialeigenschaften verschiedener Piezoelektrika [Franz 88, Ikeda 90a, Landolt-Börnstein 82, Tichy 80, VIBRIT-Datenblatt 81] für eine Bezugstemperatur von 300 K. Im Vergleich zu den in Dünnschichttechnologie, meist durch Sputterprozesse, hergestellten polykristallinen Materialien Aluminiumnitrid ( $AlN$ ) und  $ZnO$  zeichnen sich gesinterte  $PZT$ -Piezokeramiken (Blei-Zirkon-Titanat) durch extrem hohe piezoelektrische Koeffizienten<sup>12</sup>  $d_{ij}$  aus. Neben  $ZnO$  weisen auch  $AlN$  und  $PZT$  ein hexagonales Kristallgitter (Symmetrieklasse: 6mm) auf, so daß die Materialeigenschaften

<sup>12</sup> Analog zu Gleichung (2.10) werden die piezoelektrischen Koeffizienten  $d_{ijk}$  bzw. Moduln  $e_{ijk}$  in vereinfachter Matrixnotation als  $d_{ij}$  bzw.  $e_{ij}$  geschrieben.

direkt miteinander verglichen werden können. Einkristallines Quarz besitzt dagegen eine andere Kristallsymmetrie und zeichnet sich durch relativ niedrige piezoelektrische Koeffizienten aus.

Ein Maß für die Effizienz der Umwandlung von elektrischer in mechanische Energie stellt der elektromechanische Kopplungsfaktor dar. Bei Bimorphstrukturen setzt sich der effektive Kopplungsfaktor  $k_{eff}$  aus einem material- und einem geometrieabhängigen Anteil zusammen:

$$k_{eff} = k_{mat} \cdot k_{geo} \quad (2.13)$$

Bei komplexen Wandlergeometrien kann er nur mit Hilfe gekoppelter FE-Berechnungen unter Berücksichtigung der *mechanischen* und *elektrischen* Randbedingungen ermittelt werden (siehe Gleichung 3.43), weil die elastische und dielektrische Energieverteilung im Festkörper von der Wandlergeometrie, den Einspannbedingungen und den elektrischen Abschlußbedingungen abhängig ist. In der einfachsten Näherung läßt sich  $k_{eff}$  durch die Serienresonanzfrequenz  $f_s$  und die Parallelresonanzfrequenz  $f_p$  des elektrischen Ersatzschaltbildes<sup>13</sup> des piezoelektrischen Wandlerelementes ausdrücken [Lerch 90]:

$$k_{eff} = \sqrt{\frac{f_p^2 - f_s^2}{f_p^2}} \quad (2.14)$$

In Kapitel 5 werden verschiedene Bimorphwandler mit piezoelektrischen Dünnschichten numerisch und experimentell untersucht, um den Einfluß von Geometrie und Elektrodenform auf den effektiven elektromechanischen Kopplungsfaktor zu bestimmen.

Für den *materialabhängigen* Kopplungsfaktor  $k^{mat}$  gilt bei Transversal- oder Planarschwingern [VIBRIT-Piezokeramiken]:

$$(k_{31}^{mat})^2 = \frac{d_{31}^2}{S_{11}^E \cdot \epsilon_{33}^\sigma} \quad (2.15)$$

$$k_p^{mat} = \sqrt{\frac{2}{(1 - \nu)}} k_{31}^{mat} \quad (2.16)$$

Diese Werte sind von dem mechanischen Steifigkeitskoeffizienten  $S_{11}^E$ , der *Poisson-Zahl*  $\nu$  sowie den piezo- und dielektrischen Konstanten  $d_{31}$  und  $\epsilon_{33}^\sigma$  ( $\sigma = const$ ) der piezoelektrischen Schicht abhängig.

Im folgenden soll eine Abschätzung der Leistungsfähigkeit mikromechanischer Biege- und Wandler mit piezoelektrischem Antrieb in erster Näherung mit den *materialabhängigen* transversalen und planaren Kopplungsfaktoren  $k_{31}^{mat}$  und  $k_p^{mat}$  für reine Transversal- oder Planarschwinger erfolgen. Um einen Vergleich der elektromechanischen Kopplungsfaktoren mit Quarz vornehmen zu können, wird der Wert  $k_{Quarz} = d_{11}/\sqrt{S_{11}^E \cdot \epsilon_{11}^\sigma}$  verwendet. In Abhängigkeit der verschiedenen mechanischen Steifigkeiten, der piezo- und dielektrischen Eigenschaften ergeben sich für Aluminiumnitrid, Zinkoxid und PZT-Keramik (hier: VIBRIT420, [VIBRIT-Datenblatt 81]) unterschiedlich große Kopplungsfaktoren in der Größenordnung von etwa 18 %, 40 % und 60 %. Aufgrund des Einflusses der Querkontraktion ( $\nu$ ) unterscheidet sich der planare Kopplungsfaktor  $k_p$  um einen Faktor von 1,6

Tabelle 2.3: Materialeigenschaften von Piezoelektrika

Material	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$S_{11}^E, S_{12}^E$ [TPa <sup>-1</sup> ]	$d_{31}$ [pC/N]	$d_{33}$ [pC/N]	$\epsilon_{11}^T/\epsilon_0$	$\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$	$\alpha_{th}$ [ppm/K]	$k_p^{mat}$
Quarz	2649	12,78 -1,81	$d_{11} = 2,30$	$d_{14} = -0,67$	4,51	4,63	7,48 $\parallel c$ 13,7 $\perp c$	(0,1)
AlN	3260	3,53 -1,01	-2,00	5,53	9,04	11,4	4,15 $\parallel c$ 5,27 $\perp c$	0,18
ZnO	5675	7,91 -3,30	-5,12	12,3	9,26	8,20	2,92 $\parallel c$ 4,75 $\perp c$	0,40
PZT	7600	15,5 -5,70	-160	355	1600	1600	$\approx 7,0$	0,61

bis 1,9 vom transversalen Kopplungsfaktor  $k_{31}$ . In dieser Arbeit wird ein Schwerpunkt auf die Berechnung und Charakterisierung mikromechanischer Bimorphstrukturen gelegt, die aus Bulk-Silizium mit piezoelektrischen ZnO-Dünnschichten aufgebaut sind. Daher soll kurz auf die Eigenschaften von Zinkoxid eingegangen werden. Eine genaue Darstellung des Herstellungsverfahrens und der prozeßabhängigen Materialeigenschaften ist in [Wagner] zu finden.

Zinkoxid ist ein II-VI-Halbleiter, besitzt eine hexagonale Kristallstruktur und weist ein Gitter vom Wurtzit-Typ auf. Aufgrund der 6mm Kristallsymmetrie, sind die beiden  $x_1$ - und  $x_2$ -Koordinatenachsen ( $a$ -Kristallachsen) senkrecht zur  $x_3$ -Koordinatenachse ( $c$ -Kristallachse) und kristallographisch gleichwertig, so daß die mechanischen Eigenschaften in der  $x_1/x_2$ -Ebene gleich sind, d.h.  $C_{11} = C_{22}$ ,  $C_{13} = C_{23}$  und  $C_{44} = C_{55}$ . Für die piezoelektrischen Koeffizienten folgt aus den gleichen Symmetrieüberlegungen  $d_{31} = d_{32}$  und  $d_{15} = d_{24} = -8,3$  pC/N [Landolt-Börnstein 82]. Die durch Sputtern erzeugten polykristallinen Dünnschichten weisen eine starke Orientierung bezüglich der  $c$ -Achse auf. Das Aufwachsen der ZnO-Kristallite erfolgt entlang dieser Vorzugsrichtung senkrecht zur Silizium-Substratebene. Neben den mechanischen sind auch die piezoelektrischen Eigenschaften der ZnO-Schichten stark von den technologischen Prozeßparametern abhängig. Insbesondere hat die innere Schichtspannung einen großen Einfluß auf den elektromechanischen Kopplungsfaktor. Für den Einsatz als aktive Wandlerschicht in mikromechanischen Bauelementen muß das Schichtsystem passiviert werden. Zum einen müssen nachfolgende Prozesse vor einer Kontamination durch ZnO bewahrt werden, andererseits muß das ZnO vor Umwelteinflüssen geschützt werden. Hierzu sind im Rahmen des BMFT-Verbundprojektes vom Projektpartner Robert Bosch GmbH plasmaabgeschiedene und gesputterte dielektrische Schichten ( $SiO_2$ ,  $SiO_xN_y$ ,  $Si_3N_4$ ) entwickelt und untersucht worden, wobei eine Prozeßintegration des Zinkoxids mit der Silizium-Bulkmikromechanik erreicht werden konnte [ABV 93].

<sup>13</sup>Siehe hierzu Abbildung 5.2 in Kapitel 5.1.



## 2.3 Analytische Beschreibung von Mikroresonatoren

Mit Hilfe mikromechanischer Herstellungsverfahren lassen sich unterschiedliche Resonatorgeometrien realisieren, die in verschiedenen Schwingungsmoden angeregt werden können. Bei der Sensoranwendung beruht das Meßprinzip auf der Abhängigkeit der Ausbreitungscharakteristika elastischer Wellen im Festkörper von der Meßgröße oder auf der Änderung der Resonanzfrequenz des Mikroresonators. Für die in dieser Arbeit betrachteten Resonanzsensoren zur Erfassung der physikalischen Meßgrößen Kraft, Druck und Strömungsgeschwindigkeit kommen insbesondere Biegeschwinger auf der Basis von Balken- und Membranresonatoren in Frage. Bei einfachen Strukturen können die Eigenfrequenzen und Schwingungsformen exakt bzw. in einer ausreichenden Näherung analytisch berechnet werden. Unter der Annahme idealer Einspannbedingungen und homogener, isotroper Materialeigenschaften werden im folgenden die Resonanzfrequenzen und lastabhängigen Frequenzänderungen der Resonatoren analytisch abgeleitet. Durch eine geeignete Wahl der Sensorabmessungen kann der Arbeitspunkt der resonanten Sensoren, das sind die Resonanzfrequenz und die Empfindlichkeit gegenüber der Meßgröße, eingestellt werden.

### 2.3.1 Mikromechanische Resonatorstrukturen

Die elastischen Schwingungen, die sich in einem Festkörper ausbilden, sind von der Schwingergeometrie und den Randbedingungen abhängig. In **Abbildung 2.5** sind die verschiedenen Wellentypen dargestellt, die in elastischen Festkörpern auftreten können [White 70]. Der Festkörper kann longitudinale Kompressionsschwingungen (a), transversale Biege- (b) und Torsionsschwingungen, sowie Scherschwingungen (c), diese sind z.B. Dicken- oder Flächenscherschwingungen, ausführen. Die elastischen Raumwellen, die sich innerhalb des Festkörpers fortpflanzen, werden bei den sogenannten Eigenresonanzschwingern (*BAW* = *Bulk Acoustic Waves*) ausgenutzt. Die Wellenlängen sind von der gleichen Größenordnung wie die typischen Abmessungen des Schwingers ( $\lambda \approx d$ ), wobei die minimale Wellenlänge einer Biegeschwingung  $2d$  beträgt. Die typischen Resonanzfrequenzen liegen zwischen 10 kHz und 20 MHz. Beispiele hierfür sind Quarz-Resonatoren auf der Basis von Einfach- und Doppelstimmgabeln (Uhren-Quarze, Quarz-Kraftsensoren) und die in dieser Arbeit behandelten Resonanzsensoren auf Siliziumbasis.

Oberflächenwellen<sup>14</sup> (*SAW* = *Surface Acoustic Waves*) sind aufgrund ihrer geringen Eindringtiefe in den Festkörper an die freie Oberfläche des Festkörpers gebunden (d). Die Wellenlänge ist gegenüber der Resonatordicke  $d$  sehr klein, d.h.  $\lambda \ll d$ . Die Resonanzfrequenzen liegen im Bereich von 20 MHz bis 2 GHz. Hauptanwendungsgebiete sind Filter und Sensoren, die nach verschiedenen Funktionsprinzipien arbeiten. Die Frequenz der SAW-Resonatoren ändert sich infolge von Massenlagerung (akusto-gravimetrische Wechselwirkung), Leitfähigkeitsänderung (akusto-elektrische Wechselwirkung) und der Steifig-

<sup>14</sup> auch *Rayleigh*-Wellen genannt.

keitsänderung, die eine rein elastische Wechselwirkung darstellt. Zusätzlich führt die viskoelastische Wechselwirkung zu einer Geschwindigkeitsänderung und Abschwächung der Oberflächenwelle [Ricco 91]. Unter Verwendung selektiv sensitiver Grenzschichten können so chemische und biochemische Sensoren aufgebaut werden.

Plattenwellen<sup>15</sup> (*FPW = Flexural Plate Waves*) treten bei sehr dünnen Membranstrukturen auf, d.h.  $\lambda \gg d$ , und können sowohl in symmetrischen, als auch antisymmetrischen Schwingungsmoden angeregt werden (e). Die Resonanzfrequenzen liegen im mittleren Frequenzbereich von etwa 500 kHz bis 10 MHz [Büttgenbach 91b]. Diese Biege-Plattenwellen-Wandler werden als chemische und biologische Sensoren auf der Grundlage des akusto-gravimetrischen Wandlungsprinzips eingesetzt. Außer in gasförmigen Medien können sie auch in Flüssigkeiten aufgrund geringer Abstrahlungsverluste eingesetzt werden [Gieseler 92]. Die erreichbaren hohen Empfindlichkeiten beruhen auf dem großen Verhältnis von Membranoberfläche zu Volumen, das die Wechselwirkung von akustischer Energie mit den nachzuweisenden biochemischen Komponenten begünstigt. Weitere Anwendungen von *Lamb*-Wellen sind Sensoren für die Messung von Fluidichte und -viskosität, Differenzdrücken, Beschleunigungen, Temperatur und Wärmestrahlung [White 87, Wenzel 88].

---

<sup>15</sup> auch *Lamb*- bzw. *Love*-Wellen genannt.

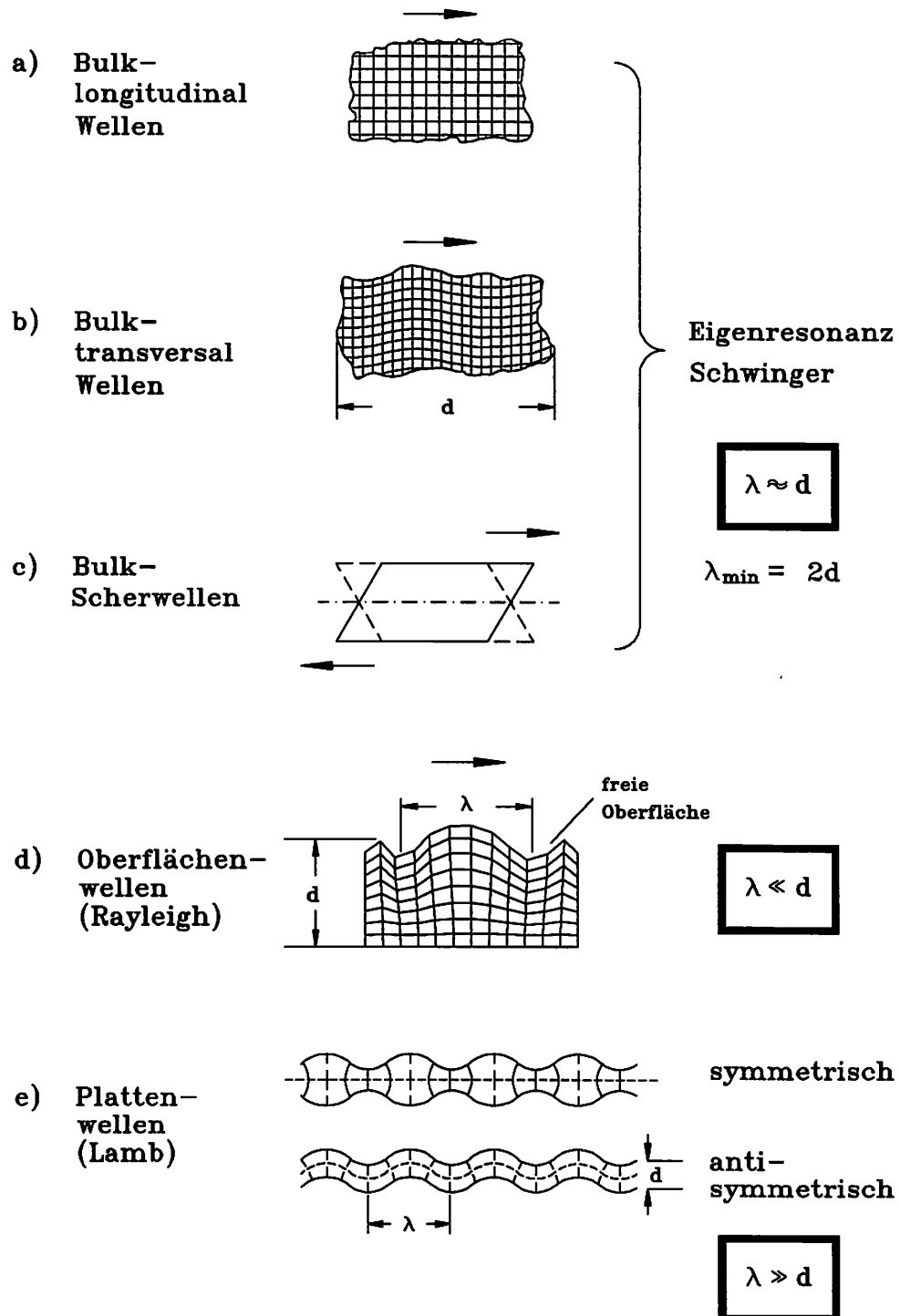


Abbildung 2.5: Wellentypen in elastischen Festkörpern

### 2.3.2 Balkenresonatoren

Um das dynamische Verhalten eines doppelseitig eingespannten Biegebalkens analytisch zu beschreiben, genügt es, den Balken in einer eindimensionalen Näherung als kontinuierliches System aufzufassen. Unter den Voraussetzungen, daß die Balkendicke wesentlich kleiner als die Balkenbreite und -länge ist (d.h.  $l \gg b > h$ ), der Balken homogen und ideal prismatisch<sup>16</sup> ist und auf den Balken eine axiale äußere Kraft einwirkt, können die Biegeschwingungen für kleine Amplituden durch die folgende eindimensionale partielle Differentialgleichung beschrieben werden [Weaver 90]:

$$\boxed{\hat{E}I \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4} - F \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \rho A \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} + c \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = f(x,t)} \quad (2.17)$$

mit den Randbedingungen an den Balkenenden:

$$u(x,t)|_{x=0,l} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial u(x,t)}{\partial x}|_{x=0,l} = 0$$

Hierbei bezeichnet  $u(x,t)$  die zeit- und ortsabhängige transversale Auslenkung des Balkens senkrecht zur Balkenausdehnung ( $x$ -Richtung). Die ersten beiden Terme sind Beiträge aus der Federsteifigkeit des Balkens, wobei  $\hat{E}I$  die Biegesteifigkeit des Balkens und  $F$  die äußere axiale Kraft darstellen. Der dritte Term entspricht dem Trägheitsbeitrag, hervorgerufen durch die homogene Massendichte  $\rho$ . Die viskosen, d.h. geschwindigkeitsproportionalen Dämpfungseffekte werden durch den Dämpfungskoeffizienten  $c$  beschrieben. Auf der rechten Seite der Gleichung stellt  $f(x,t)$  eine zeitlich, eventuell auch örtlich, variierende Anregungskraft dar. Das Materialverhalten wird als isotrop angenommen, wobei  $\hat{E} = E/(1 - \nu^2)$  für den reduzierten E-Modul steht und  $\nu$  die Poisson-Zahl ist. Die Balkenfläche  $A = b \cdot h$  wird als rechteckig<sup>17</sup> angenommen, so daß das äquatoriale Flächenträgheitsmoment  $I = b \cdot h^3/12$  ist. Bei der Beschränkung auf den homogenen Fall ohne Anregung (d.h.  $f(x,t) = 0$ ) und unter Vernachlässigung von Dämpfungseffekten ( $c = 0$ ) läßt sich die Lösung obiger Gleichung (2.17) durch einen Separationsansatz in der Form:

$$u(x,t) = \sum_n \Phi_n(x) \cdot (A_n \cos \omega_n t + B_n \sin \omega_n t) \quad (2.19)$$

darstellen, wobei  $f_n = \omega_n/2\pi$  die Eigenfrequenzen und  $\Phi_n(x)$  die ortsabhängigen Eigenschwingungsformen der  $n$ -ten Schwingungsmode sind. Die  $\Phi_n(x)$  lassen sich durch eine Überlagerung von trigonometrischen und hyperbolischen Funktionen ausdrücken und

<sup>16</sup> d.h. der Balkenquerschnitt und damit auch die Biegesteifigkeit bleiben über die Balkenlänge konstant.

<sup>17</sup> Die in der Mikromechanik in (100)-Silizium anisotrop geätzten Biegebalken weisen trapezförmige Balkenquerschnitte mit einem Winkel von  $54,74^\circ$  auf, deren äquatoriales Flächenträgheitsmoment sich nach:

$$I = h^3(B^2 + 4Bb + b^2)/36(B + b) \quad (2.18)$$

berechnet, wobei  $b$  die obere und  $B$  die untere Balkenbreite ist. In der Regel handelt es sich um sehr breite Balken, bei denen  $B \geq b \gg h$ , so daß in erster Näherung die Querschnitte als rechteckig angenähert werden können.

führen zu exakten Lösungen der homogenen Gleichung [Bouwstra 91]. Die lastabhängigen Eigenfrequenzen können durch:

$$f_n(F) = f_n(0) \sqrt{1 + \gamma_n \cdot \frac{Fl^2}{12\hat{E}I}} \quad (2.20)$$

angenähert werden, wobei:

$$\begin{aligned} f_n(0) &:= f_n(F=0) \\ \gamma_n &= 12(k_n - 2) / k_n^3 \end{aligned}$$

Außerdem gilt  $k_n = (n + \frac{1}{2})\pi$  für  $n \geq 3$  und  $k_1 = 4,730$  sowie  $k_2 = 7,853$ . Der Näherungsfehler beträgt weniger als 0,5 %, falls der Steifigkeitsbeitrag der Axialkraft kleiner als die Biegesteifigkeit des Balkens ist, d.h.  $\gamma_n Fl^2 < 12\hat{E}I$ . Als Annahme geht bei der Lösung der homogenen Gleichung ein, daß die Schwingungsamplituden klein gegenüber der Balkendicke  $h$  sind, d.h.  $(u_{max}/h)^2 < 1$ . Für das Verhältnis der Resonanzfrequenzen der Oberschwingungen bezogen auf die unbelastete Grundfrequenz  $f_0$  gilt:

$$\frac{f_n}{f_0} = \left( \frac{k_n}{4,73} \right)^2 \quad (2.21)$$

Die unbelastete Resonanzfrequenz  $f_1(F=0)$  der Grundbiegeschwingung berechnet sich nach:

$$f_1(0) = \frac{4,73^2}{2\pi} \sqrt{\frac{\hat{E}I}{\rho A l^4}} \approx 1,028 \cdot \frac{h}{l^2} \sqrt{\frac{\hat{E}}{\rho}} \quad (2.22)$$

Das statische und dynamische Verhalten eines beidseitig eingespannten Biegebalkens unter dem Einfluß einer Temperaturerhöhung wird in Kapitel 4.4 behandelt.

### 2.3.3 Membranresonatoren

Die in der Literatur für Membranen angegebenen analytischen Zusammenhänge für den Auslenkungs- und Spannungszustand, sowie die Resonanzfrequenzen beruhen auf der Kirchhoffschen Platten- und Schalentheorie und gehen von der Annahme ebener Objekte aus, deren laterale Abmessungen wesentlicher größer als deren Dicke ist [Timoshenko 87]. Bei der Ermittlung der Eigenfrequenzen und Schwingungsformen werden verschiedene Näherungsverfahren (siehe z.B. [Young 50]) verwendet. Für die Resonanzfrequenzen  $f_{ij}$  ebener Membranen gilt [Blevins 84]:

$$f_{ij} = \frac{\lambda_{ij}^2}{2\pi\sqrt{12}} \frac{h}{a^2} \sqrt{\frac{\hat{E}}{\rho}} \quad (2.23)$$

wobei  $a, h$  die Membranseitenlänge bzw. -dicke und  $i, j$  die Anzahl der Halbwellen in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung darstellen. Die Konstante  $\lambda_{ij}^2$  ist von den Einspannbedingungen und dem Seitenverhältnis der Membran abhängig und wird auch als normierte Eigenfrequenz für die jeweilige Schwingungsmode bezeichnet. In **Tabelle 2.4** ist eine Zusammenstellung der  $\lambda_{ij}^2$  für eine fest eingespannte, quadratische, homogene Membran gegeben. Die Werte

Tabelle 2.4: Normierte Eigenfrequenzen  $\lambda_{ij}^2$  einer ebenen Siliziummembran

Material:	isotrop	isotrop	anisotrop
Literatur:	[Blevins 84]	[Pons 91]	[Pons 91]
<b>Mode ij</b>			
1 11	35,99	35,99	35,16
2 21	73,41	73,39	71,91
3 12	73,41	73,39	71,91
4 22	108,30	108,22	104,35
5 31	131,60	131,78	130,09
6 13	132,20	132,41	130,67
7 32	165,15	165,16	159,73
8 23	165,15	165,16	159,73
9 33	—	220,32	211,34

für anisotropes Materialverhalten wurden [Pons 91] entnommen. Für die Ermittlung der Eigenfrequenzverschiebung als Folge einer Druckeinwirkung ergibt sich die Überlagerung eines statischen und dynamischen Problems. Im ersten Schritt wird die Membranmittenauslenkung als Funktion des einwirkenden Druckes ermittelt, im zweiten Schritt die Frequenzverschiebung als Funktion der Membranauslenkung. Die Überlagerung ergibt die Frequenzverschiebung als Funktion des einwirkenden Druckes. In der Literatur wird von verschiedenen Ansätzen ausgegangen, bei denen lineare Zusammenhänge für relativ dicke Membranen bei kleinen Auslenkungen bzw. nichtlineare Zusammenhänge für dünne Membranen bei großen Auslenkungen angegeben werden. Für quadratische, fest eingespannte Platten der Dicke  $h$  gilt für den nichtlinearen Zusammenhang zwischen einwirkendem Druck  $p$  und der Membranmittenauslenkung  $d$  nach [Chau 87]:

$$p = 16\hat{E} \left(\frac{h}{a}\right)^4 \left[ 4,19847 \frac{d}{h} + 1,5816 \left(\frac{d}{h}\right)^3 \right] \quad (2.24)$$

Diese Gleichung kann mit Hilfe der Lösungsformel nach *Kardan* aufgelöst und zur Berechnung der Resonanzfrequenzänderung in Abhängigkeit von der Auslenkung herangezogen werden  $f_0 = f(d=0)$  [Uttamchandi 87]:

$$f(d) = f_0 \sqrt{1 + c \left(\frac{d}{h}\right)^2} \quad (2.25)$$

Die Konstante  $c$  ist von der Einspannung und der Membranform abhängig. Für kreisförmige, fest eingespannte Membranen existiert eine analytisch exakte Lösung mit dem Wert  $c = 1,464$  [Uttamchandi 87].

## 2.4 Skalierungsverhalten dynamischer Größen

In der Mikromechanik werden im wesentlichen die in **Abbildung 2.6** dargestellten drei grundlegenden Strukturgeometrien für Sensor- und Aktoranwendungen realisiert. Die Re-

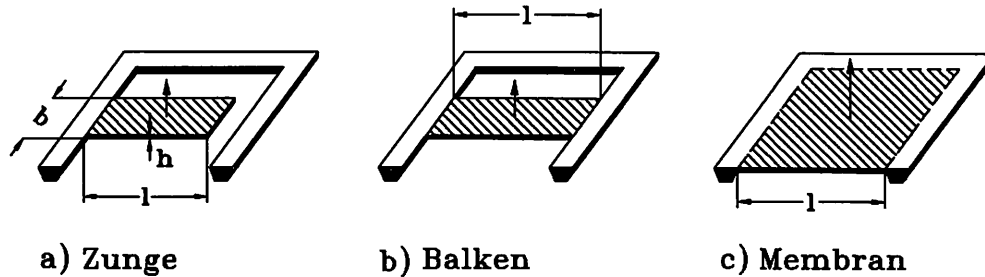


Abbildung 2.6: Mikromechanische Grundstrukturen

sonanzfrequenzen für die Biegeschwingungen dieser Strukturen sind von den geometrischen Abmessungen (d.h. Resonatorlänge  $l$  und -dicke  $h$ ), der Einspannungsart und den Materialparametern (bei isotropem Materialverhalten: Elastizitätsmodul  $E$ , Poisson-Zahl  $\nu$ , sowie Materialdichte  $\rho$ ) abhängig. Für die Resonanzfrequenz der Grundbiegeschwingung gilt unabhängig von der Geometrie:

$$f \approx \frac{h}{l^2} \sqrt{\frac{\hat{E}}{\rho}} = c_f \frac{h}{l^2} \sqrt{\frac{\hat{E}}{\rho}} = c_f \frac{h}{l^2} c_s, \quad (2.26)$$

Die Proportionalitätskonstante  $c_f$  ist von der Resonatorgeometrie und der Schwingungs-mode abhängig und  $c_s$  stellt die Schallgeschwindigkeit dar und hängt damit nur von den Materialeigenschaften des Festkörpers ab. Für die dargestellten drei mikromechanischen Grundstrukturen sind die geometrieabhängigen Frequenzkonstanten  $c_f$  der jeweiligen Grundbiegeschwingung in **Tabelle 2.5** zusammengefaßt (siehe Gleichungen (2.22) und (2.23)). Bei der einseitig eingespannten Zungegeometrie kann die Querkontraktion

Tabelle 2.5: Frequenzkonstanten  $c_f$  verschiedener Grundgeometrien

Geometrie	Einspannung	$c_f$
a) Zunge	einseitig	0,162
b) Balken	doppelseitig	1,028
c) Membran	allseitig	1,654

vernachlässigt werden, so daß in diesem Fall  $\hat{E} = E$  ist [Stemme 91a]. In **Tabelle 2.6** sind die Resonanzfrequenzen dieser Grundstrukturen bis auf die Konstante  $c_f$  zusammengestellt. Die jeweilige Resonanzfrequenz ist durch Multiplikation mit der entsprechenden Konstante zu erhalten. Da die Siliziumsensoren, die aus (100)-orientierten Wafern hergestellt werden, bei den Biegeschwingungen Dehnungen in  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung erfahren,

genügt es in erster Näherung die elastischen Eigenschaften isotrop anzusetzen. Für den Elastizitätsmodul  $E$  und die Poisson-Zahl  $\nu$  gilt nach [Heuberger 89]:

$$\begin{aligned} E_{110} &= 168,9 \text{ GPa} \\ \nu_{110} &= 0,063 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Die Dichte  $\rho$  von Silizium beträgt  $2329 \text{ kg/m}^3$ . Die angegebenen Materialdaten beziehen sich auf Zimmertemperatur. Unter Verwendung dieser Materialdaten beträgt die Schallgeschwindigkeit  $c$ , für einkristallines Silizium etwa  $8533 \text{ m/s}$ . Die Strukturdimensionen

Tabelle 2.6: Größenordnung der Resonanzfrequenzen von Grundbiegeschwingungen

$l/h$ Dicke $h$	$10^1$	$10^2$	$10^3$	$10^4$	Mikromechanik Technologie
<b>1 <math>\mu\text{m}</math></b>	<b>85,33 MHz</b> (10 $\mu\text{m}$ )	<b>853 kHz</b> (100 $\mu\text{m}$ )	<b>8,53 kHz</b> (1 mm)	<b>85 Hz</b> (10 mm)	OFM
10 $\mu\text{m}$	<i>8,53 MHz</i> (100 $\mu\text{m}$ )	<i>85,3 kHz</i> (1 mm)	<i>853 Hz</i> (10 mm)	8,5 Hz (10 cm)	BMM
100 $\mu\text{m}$	<i>853 kHz</i> (1 mm)	<i>8,53 kHz</i> (10 mm)	85 Hz (10 cm)	0,85 Hz (1 m)	

im oberen Teil der Tabelle (**fett** geschrieben) lassen sich nur durch die Technologien der Oberflächenmikromechanik (*OFM*) realisieren, während die *kursiv* gedruckten Werte im Bereich der heute *klassischen Mikromechanik*<sup>18</sup> liegen. Um die Kraftempfindlichkeiten von Balkenresonatoren abzuschätzen, genügt es den linearen Anteil<sup>19</sup> von Gleichung (2.20) zu berücksichtigen. Für die normierte relative Kraftempfindlichkeit  $\eta$  der Grundmode, bezogen auf die Grundresonanzfrequenz  $f_0 := f(F=0)$ , gilt:

$$\eta := \frac{1}{f_0} \cdot \frac{\partial f}{\partial F} \approx c_\eta \cdot \frac{1}{E} \left( \frac{l}{h} \right)^2 \frac{F}{b \cdot h} \quad (2.28)$$

wobei  $\partial f$  die Frequenzänderung und  $\partial F$  die Kraftänderung bedeuten. Die Kraftempfindlichkeit eines Balkenresonators ist demnach vom Längen-Dicken-Verhältnis  $l/h$  abhängig. Die Empfindlichkeit wird umso größer, je dünner der Resonatorbalken ist. Abhängig von der Wahl der Geometrieparameter  $l, b$  und  $h$  kann ein annähernd linearer Verlauf der Kennlinie<sup>20</sup> in einem bestimmten Kraftbereich erreicht werden. In obiger Gleichung (2.28) stellt der letzte Ausdruck auf der rechten Seite die mechanische Spannung  $\sigma_{mech}$  im Resonator dar. Diese kann die Bruchspannung  $\sigma_{Bruch}^{mat}$  des verwendeten Materials nicht übersteigen, so daß die theoretisch erreichbare maximale Frequenzänderung abgeschätzt werden

<sup>18</sup> Auch als Bulk-Mikromechanik (*BMM*) bezeichnet.

<sup>19</sup> Aus dem ersten Glied der Taylorentwicklung folgt für  $c_\eta$  der Wert  $0,148 \text{ N}^{-1}$ .

<sup>20</sup> Die Kennliniennichtlinearität kann bei einer günstigen Parameterwahl weniger als 1 % bei Vollast betragen.



kann:

$$\frac{F}{b \cdot h} = \sigma_{mech} \ll \sigma_{Bruch}^{mat} \quad (2.29)$$

Ersetzt man  $\sigma_{mech}$  durch  $\sigma_{Bruch}^{mat}$  und betrachtet das Verhältnis der Frequenzverschiebung  $\Delta f$  zur Kraftänderung  $\Delta F$ , so gilt unter Verwendung von Gleichung (2.26):

$$\frac{\Delta f}{\Delta F} = \eta \cdot f_0 = \left( \frac{c_\eta c_f}{\sqrt{\hat{E} \rho}} \right) \cdot \frac{\sigma_{mech}}{h} \ll const \cdot \frac{\sigma_{Bruch}^{mat}}{h} \quad (2.30)$$

Gleichung (2.30) sagt aus, daß das Verhältnis nur von der Balkendicke, d.h. der Abmessung des Balkens in Schwingungsrichtung, abhängt. Der Verkleinerung dieses Parameters stehen aber sowohl prozeßtechnische Grenzen (Balkendicke:  $h \approx \text{einige } \mu\text{m}$ ) als auch funktionstechnische Gesichtspunkte entgegen. Falls  $h$  zu klein wird, so nimmt bei Zugbelastung die Bruchgefahr, bei Druckbelastung die Knickgefahr enorm zu. Als Beispiel soll ein Siliziumbalken mit den typischen Abmessungen von  $l = 5,0 \text{ mm}$  und  $h = 20 \mu\text{m}$  betrachtet und die Materialparameter  $\hat{E} \approx 170 \text{ GPa}$ ,  $\rho \approx 2330 \text{ kg/m}^3$  und  $\sigma_{Bruch} \approx 200 \text{ MPa}$  verwendet werden. Für die maximal erreichbare Kraftempfindlichkeit  $\eta_{max}$  folgt:

$$\eta_{max}^{Si} \leq \frac{c_\eta}{\hat{E}} \left( \frac{l}{h} \right)^2 \sigma_{Bruch}^{Si} \approx 11 [N^{-1}] \quad (2.31)$$

Dieses entspricht bei einer Grundfrequenz von etwa 7 kHz einer theoretisch maximal erreichbaren Frequenzänderung von annähernd 77 kHz pro Newton.

## 2.5 Grenzen der analytischen Beschreibungsweise

Exakte analytische Lösungen physikalischer Problemstellungen existieren nur für wenige Spezialfälle, bei denen in der Regel vereinfachende Annahmen getroffen und idealisierte Randbedingungen verwendet werden. Bei der analytischen Beschreibungsweise werden daher durch die Annahmen gewisse Beschränkungen auferlegt:

- Einspannungseffekte werden nur angenähert berücksichtigt, so daß Randbedingungen bei der Lösung nur unvollständig berücksichtigt werden. Bei der Behandlung von Randwertproblemen haben aber gerade aus mathematischer Sicht die Randbedingungen einen erheblichen Einfluß auf das Lösungsverhalten.
- Das Materialverhalten wird linear elastisch und isotrop angesetzt, so daß die Richtungsabhängigkeit der Materialeigenschaften nicht berücksichtigt wird. Weiterhin wird von einer homogenen Materialverteilung ausgegangen, d.h. ortsabhängige Inhomogenitäten werden nicht berücksichtigt. Auch der Aufbau aus mehreren Materialien bei Multilayerstrukturen wird nicht genau erfaßt, sondern meist nur über eine Gewichtung der Materialeigenschaften entsprechend der Schichtdickenverhältnisse.
- Die Geometrie der Balken- und Membranschwinger wird als ideal vorausgesetzt, d.h. man geht von homogenen, nicht variierenden Abmessungen aus und setzt voraus, daß  $l \gg b \geq h$  hinreichend genau erfüllt ist.
- Bei Belastungen bleiben die Bauelementequerschnitte eben, so daß nur ein linearer Dehnungs- bzw. Spannungsverlauf über die Dicke der Bauelemente zugelassen wird. In der linearen Plattentheorie können daher nur „kleine“ Verformungen behandelt werden.
- Inhomogene Lastverteilungen und komplex überlagerte Bauelementebelastungen sind nur schwer zu erfassen. Daher werden die behandelten Berechnungsfälle oft auf einen homogenen Belastungsfall reduziert.
- Bei piezoelektrischer Kopplung werden nur eindimensionale Ersatzmodelle behandelt, die rein transversale bzw. rein longitudinale Effekte (entkoppelte Schwingungsmoden) beschreiben.

Die FE-Methode bietet als allgemeines Berechnungsverfahren die Möglichkeit, komplexe mikromechanische Strukturen unter Berücksichtigung von realen Randbedingungen, Einfluß von Nichtlinearitäten und gekoppelter Effekte zu berechnen, auch wenn keine analytisch geschlossenen Lösungen mehr angebbare sind.