FINITE-ELEMENTE – MODELLIERUNG IN DER MIKROMECHANIK

Im Rahmen der Modellierung von mikromechanischen Komponenten nimmt die Methode der Finiten Elemente eine wichtige Rolle bei der Bauteilsimulation und vermehrt im Bereich der Prozeßsimulation ein. Durch zunehmend komplexer werdende Strukturgeometrien, verschiedenartige Materialzusammensetzung und die Notwendigkeit, die Einflüsse von verschiedenen physikalischen Größen zu berücksichtigen, werden erhöhte Anforderungen an den Systementwurf gestellt. Die Lösung dieser Aufgaben bedingt den Einsatz entsprechender rechnergestützter, numerischer Simulationsverfahren.

Die Methode der Finiten Elemente (FE) wird in der makroskopischen Elastomechanik seit langem erfolgreich eingesetzt, um das mechanische Verhalten von Bauteilen zu berechnen. Das Prinzip beruht auf einer Unterteilung der Strukturgeometrie in Teilbereiche, aus denen die Gesamtstruktur durch eine diskrete Vernetzung approximiert wird (zu den Grundlagen siehe auch „MIKROPERIPHERIK" Nr. 5/1991).

Zur Vereinfachung der Berechnungen sowie zur Einsparung von Rechenzeit und Speicherbedarf werden weitgehend FE-Modelle mit Schalen- bzw. Plattenelementen unter Zugrundelegung isotroper Materialeigenschaften und eines linearen Bauteilverhaltens gewählt. Damit erhält man erste Näherungslösungen. Neben der Wahl der FE-Modellparameter, wie Elementansatz, -vernetzung und Randbedingungen, kann durch Variation der Geometrie- und Materialparameter das Strukturverhalten untersucht und approximiert werden.

Bei der Modellierung mikromechanischer Komponenten stellt die teilweise ungenaue Kenntnis und der oft schwierige meßtechnische Zugang wichtiger Materialeigenschaften ein erhebliches Problem dar. Neben den richtungsabhängigen Kristalleigenschaften (Anisotropie) und der Temperaturabhängigkeit der Materialdaten sind prozeßabhängige Effekte, wie zum Beispiel mechanische Verspannungen in Mehrschichtsystemen, zu berücksichtigen. Zusätzlich weichen beispielsweise die Elastizitätsmoduln von mikrotechnisch hergestellten dünnen Schichten erheblich von denen des Bulk-Materials ab.

Statische FE-Berechnungen

Gegenstand statischer Finite-Elemente-Berechnungen ist die Untersuchung des Strukturverhaltens unter stationären Belastungen, wobei die Art der Belastungen unterschiedlich sein kann. Mechanische Lasten können direkt durch Kraft- oder Druckbeaufschlagung, Beschleunigung (zum Beispiel Schockbelastung) oder Rotation (Fliehkräfte) auf die Mikrostrukturen einwirken. Unter Berücksichtigung der gültigen Symmetrie- und Randbedingungen (Einspannungen) werden die Bauteilverformungen sowie die auftretenden mechanischen Spannungen berechnet.

Mikromechanische Elemente, wie Membranen, Balken- und Paddelstrukturen, zeigen unterschiedliche, sich überlagernde, nichtlineare Effekte, die beim Entwurf berücksichtigt werden müssen. Hierzu bieten sich FE-Berechnungen als geeignetes Werkzeug an, da die Flexibilität der Methode auch die Erfassung kleiner Störungen gestattet.

Die durch einen anisotropen, naßchemischen Ätzvorgang hergestellten dreidimensionalen Bauteilstrukturen, zum Beispiel Membranen, werden durch die ätzstoppbegrenzenden Kristallebenen festgelegt. Bei <100>-orientierten Siliziumscheiben (Wafer) legen schräge {111}-Ebenen die Einspannungsgeometrie der Bauteile fest. Die Art der so definierten Membranbefestigung kann einen wesentlichen Einfluß auf den Spannungszustand haben, indem sie zu einer Verschiebung der Orte maximaler Spannungskonzentration führt. Bei Siliziummembranen, die etwa halb so dick wie die Siliziumwafer sind, wandern die Spannungsextreme infolge der flexiblen Einspannung bis zu drei Prozent der Seitenlänge von der Membranaußenkante nach innen.

Als weiterer Effekt treten geometrische Nichtlinearitäten auf. Darunter versteht man eine lastabhängige Spannungsversteifung, die bei zunehmender Bauteilbelastung durch die Rückstellkräfte verursacht wird. Abhängig vom Verhältnis der Membrandicke zur Seitenlänge führen diese bei hoher Druckbeaufschlagung zu einer deutlich geringeren Membranauslenkung infolge positiver Zugspannungen im Membraninnern.

Die Nichtlinearität der Auslenkungs-Druck- bzw. Spannungs-Druck-Kennlinie beträgt bei hohen Drücken typischerweise einige Prozent. Um das Linearitätsverhalten zu verbessern, müssen große Membranauslenkungen verhindert werden. Hierzu kann die Membran mit einem strukturierten Mittelteil verstärkt werden (Boss-Membran). Seine Dimensionierung wird mit Hilfe dreidimensionaler FE-Berechnungen optimiert.

Dynamische FE-Berechnungen

Dynamische Finite-Elemente–Berechnungen ermöglichen die Ermittlung der Eigenfrequenzen und der zugehörigen Eigenschwingungsformen (Modalanalyse) von mikromechanischen Strukturen. Unter Einwirkung zeitabhängiger Belastungen, die periodisch oder impulsartig sein können, kann das zeitliche Strukturverhalten berechnet werden.

Bei der Modalanalyse können aufgrund der verschiedenen Strukturgeometrien und der spezifischen Resonatorcharakteristika, wie Materialeigenschaften und Randbedingungen, unterschiedliche Schwingungsformen entstehen. Während bei Siliziummembranen nur Biegeschwingungen und deren Oberwellen auftreten können, sind bei Quarzmembranen aufgrund der Kristallstruktur auch überlagerte, komplexe Schwingungsformen (zum Beispiel Dickenscherschwingungen) möglich. Im Fall von Balkenresonatoren können bei beiden Materialien neben den Biegeschwingungen auch Längs- und Torsionsschwingungen sowie Überlagerungen dieser Schwingungsformen auftreten.

Generell nimmt mit höherer Ordnung der Moden die Anzahl der Knoten und die Wahrscheinlichkeit für überlagerte Schwingungsformen zu. Die Ermittlung beispielsweise der Biegeresonanzfrequenzen von Kraftsensoren auf der Basis von Quarz-Doppelstimmgabeln ist bereits mit einfachen, zweidimensionalen FE-Modellansätzen möglich. Abweichungen zu experimentell gemessenen Werten betragen hier weniger als zwei Prozent.

Die Modellierung komplexer Schwingungsformen setzt allerdings eine dreidimensionale Formulierung unter Berücksichtigung des anisotropen Materialverhaltens voraus. Als Beispiel hierfür ist in **Bild 1** ein typisches Modenspektrum einer Quarz-Doppelstimmgabel dargestellt. Im unteren Frequenzbereich dominieren unterschiedliche Biegeschwingungen (y-, z-Richtung), während mit steigender Frequenz die Torsions- und überlagerten xyz-Schwingungszustände zunehmen.

Mit Hilfe dieser dreidimensionalen Formulierung kann man auch die Einflüsse von Material- und Geometrieeffekten analysieren. So führt beispielsweise der Unterschied zwischen isotropem und anisotropem Materialansatz bei Siliziummembranen zu einer Abweichung von etwa drei Prozent für die Eigenfrequenzen der Grundbiegeschwingungen. Ein weiterer Effekt tritt durch die schräge Randeinspannung bei Membranen und Balkenresonatoren aus Silizium auf, die eine Reduzierung der Resonanzfrequenzen infolge verminderter Einspannungssteifigkeit bewirkt, die von etwa gleicher Größenordnung ist.

Über die Bestimmung der Eigenfrequenzen und -schwingungsformen hinaus ist vor allem die Verschiebung der Resonanzfrequenz in Abhängigkeit von der Änderung der sie bestimmenden Parameter von Interesse. Dieser Effekt kann zur Bestimmung eines physikalischen Parameters genutzt werden und stellt das Funktionsprinzip frequenzanaloger Sensoren dar. Die Resonanzfrequenzänderung kann beispielsweise durch eine Massenanlagerung oder durch eine Änderung der mechanischen Verspannung im Resonator hervorgerufen werden, die durch eine direkte Krafteinwirkung oder durch Temperatureinfluß entsteht.

Die Berechnung der Kraft-Frequenz-Kennlinie (Kraftempfindlichkeit) und der Temperaturempfindlichkeit erfolgt durch eine nichtlineare, statische FE-Rechnung, mit welcher die durch die Meßgröße hervorgerufene Steifigkeitsänderung des Gesamtsystems bestimmt wird. Diese kann dann zur Ermittlung der Eigenfrequenzen des vorgespannten Systems herangezogen werden.

Darüber hinaus kann der temperaturabhängige Resonanzfrequenzverlauf mit Hilfe nichtlinearer, dynamischer FE-Berechnungen für beliebige Kristallorientierungen (zum Beispiel bei Quarz-Schwingern), unter Berücksichtigung der temperaturabhängigen, anisotropen Materialeigenschaften, ermittelt werden.

Ein weiterer Gesichtspunkt bei der Auslegung der oben beschriebenen frequenzanalogen Sensoren ist die Wahl der günstigsten Resonatorhalterung, um die Strukturdämpfung des Schwingers möglichst gering zu halten. In Abhängigkeit von der Strukturierung der Resonatorbefestigung kann eine geeignete Schwingungsentkopplung erreicht werden, die zu einer erhöhten Schwingungsgüte und einer verbesserten Modenselektion (Unimodalität) des Resonatorsystems führt.

Mit Hilfe der Frequenzganganalyse wird das Amplitudenspektrum der Eigenschwingungen unter Einbeziehung von Dämpfungseffekten für eine zeitabhängige Strukturanregung berechnet. Ein generelles Problem stellt die genaue Kenntnis der einzelnen Dämpfungs- und effektiven Anregungsbeiträge dar. Um eine geeignete Modellbildung vornehmen zu können, bedarf es daher experimenteller Messungen zur Charakterisierung der dynamischen Eigenschaften mikromechanischer Komponenten.

Gekoppelte Feldberechnungen

Komponenten der Mikrosystemtechnik zeigen aufgrund der Miniaturisierung

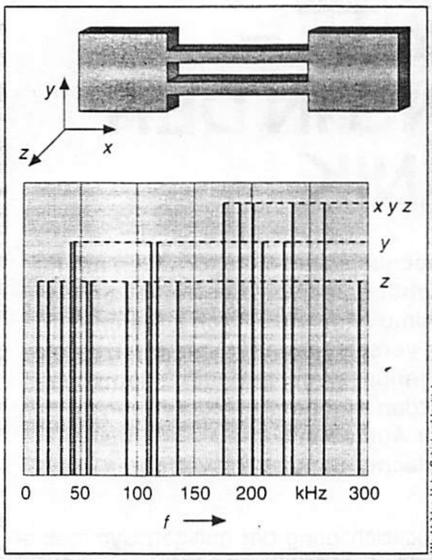


Bild 1: Modenspektrum einer Quarz-Doppelstimmgabel

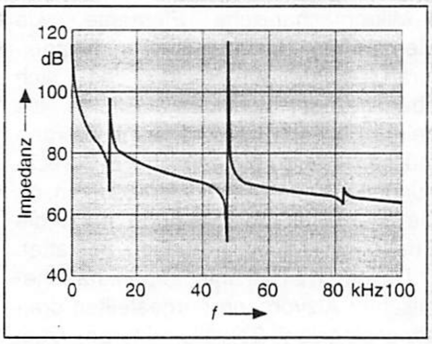


Bild 2: Frequenzabhängiger Impedanzverlauf eines Silizium-Piezokeramik-Hybrids

und des hohen Integrationsgrades eine starke Wechselwirkung verschiedener physikalischer Einflußgrößen und weisen meist unerwünschte Querempfindlichkeiten auf. Zudem werden mikromechanische Komponenten resistiv, thermisch, elektrostatisch oder piezoelektrisch ausgelesen bzw. angeregt, so daß die Kopplung verschiedener Felder in den FE-Berechnungen berücksichtigt werden muß (zum Beispiel Wärmefeld-Struktur, Piezoelektrizität).

Voraussetzungen dafür sind das Vorhandensein adäquater physikalischer Modellansätze sowie numerischer, nichtlinearer Lösungsverfahren im Simulationsprogramm. Die sogenannten Multi-Field-Elemente von ANSYS enthalten mehrere Freiheitsgrade für die unterschiedlichen Felder (Verschiebungen, Temperatur, elektrisches Potential und skalares Magnetpotential). Die Berechnung der gekoppelten Feldprobleme erfolgt iterativ oder durch die Berücksichtigung einer Wechselwirkung direkt auf der Elementebene, die die Kopplung beschreibt.

So kann bei mikrotechnischen Herstellungsprozessen, bei denen wärmeinduzierte Verspannungen entstehen (Ofenprozesse, Lasermaterialbearbeitung, Bondprozesse), die FE-Methode zur Prozeßsimulation eingesetzt werden. Im Gegensatz zu reinen Temperaturfeldberechnungen, bei denen die Temperaturverteilung unter Vorgabe der Anfangs- und Randbedingungen sowie der einwirkenden Wärmelasten ermittelt wird, ist es bei den gekoppelten Berechnungen möglich, die mechanischen Verspannungen in Multilayer-Schichten, hervorgerufen durch unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten und Temperaturabhängigkeit der Elastizitätsmoduln, zu bestimmen. Die Kopplung zwischen dem Wärmefeld und der Struktur erfolgt zwischen den Verschiebungsfreiheitsgraden der drei Raumrichtungen und der Temperatur.

Die Modellierung des piezoelektrischen Effektes, der Wechselwirkung zwischen den räumlichen Verschiebungen und dem elektrischen Feld, erfolgt durch eine Kopplung direkt auf der Elementebene. Der implementierte Ansatz erlaubt es, das statische und dynamische Verhalten von linear piezoelektrischen Medien mit anisotropen Materialeigenschaften zu untersuchen. Insbesondere kann die dielektrische Dämpfung durch einen komplexen Dielektrizitätstensor berücksichtigt werden.

So lassen sich beispielsweise mikromechanische Resonatoren, die durch piezoelektrische Dünnschichten angeregt werden, und piezokeramisch angesteuerte Komponenten der Aktorik modellieren. Im Gegensatz zu einer mechanischen Anregung erfolgt diese direkt durch die elektrischen Feldgrößen, so daß unter Berücksichtigung der elektromechanischen Wandlung das mechanische Strukturverhalten berechnet und verschiedene elektrische Kenngrößen abgeleitet werden können. Als Beispiel ist in **Bild 2** der frequenzabhängige Impedanzverlauf einer Siliziummembran dargestellt, die durch eine hybrid aufgeklebte Piezokeramik dynamisch angesteuert wird.

Zusammenfassung

Der Entwurf, die Simulation und die Optimierung von Komponenten der Mikrosystemtechnik ist nur durch eine gleichzeitige Berücksichtigung verschiedener Problemfelder möglich. Beispielsweise kann eine Optimierung mikromechanischer Resonatoren nur erreicht werden, wenn die statischen und dynamischen Eigenschaften gleichzeitig betrachtet und der Einfluß der Anregung und Abtastung berücksichtigt werden. Ziel zukünftiger Arbeiten ist daher die Entwicklung von angepaßten FE-Simulationsmodellen unter Einbeziehung der mikrotechnischen Anforderungen.

Thomas Fabula

Dipl.-Phys. Thomas Fabula ist wissenschaftlicher Mitarbeiter der Abteilung Systementwurf am Hahn-Schickard-Institut für Mikro- und Informationstechnik, Villingen-Schwenningen.

Tabelle 1: **Matrixgleichungen der FE-Modellierung**

(1) lineare Statik: $[K]\cdot\{u\} = \{F\}$

(2) nichtlineare Statik: $[K(u,T,\ldots)]\cdot\{u\} = \{F\}$

(3) lineare Modalanalyse: $[M]\cdot\{\ddot{u}\} + [K]\cdot\{u\} = 0$

(4) Modalanalyse mit Vorspannung: $[M]\cdot\{\ddot{u}\} + [K + S]\cdot\{u\} = 0$

(5) Frequenzganganalyse: $[M]\cdot\{\ddot{u}\} + [C]\cdot\{\dot{u}\} + [K]\cdot\{u\} = \{F(t)\}$

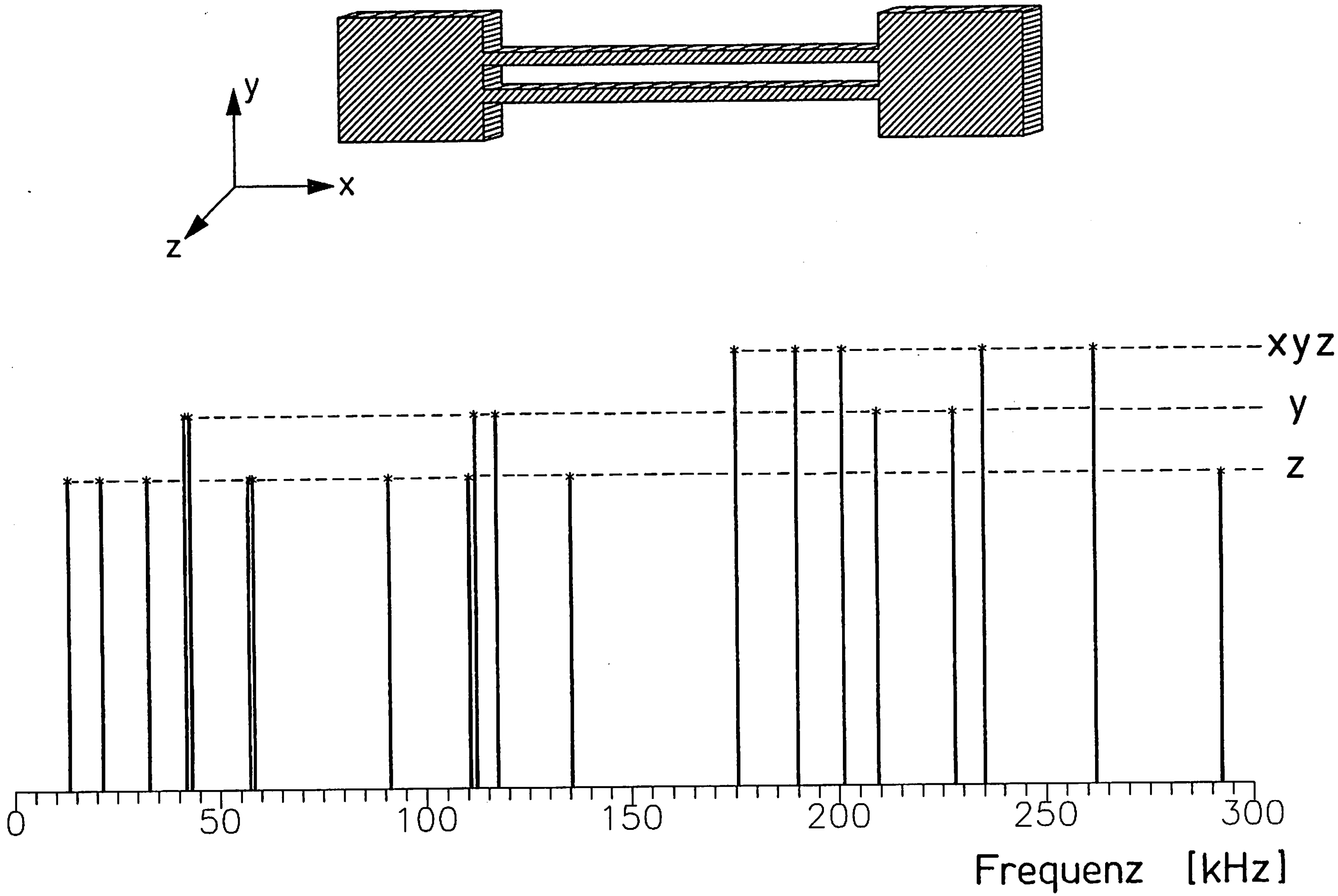
(6) Gekoppelte piezoelektrische Feldgleichung:

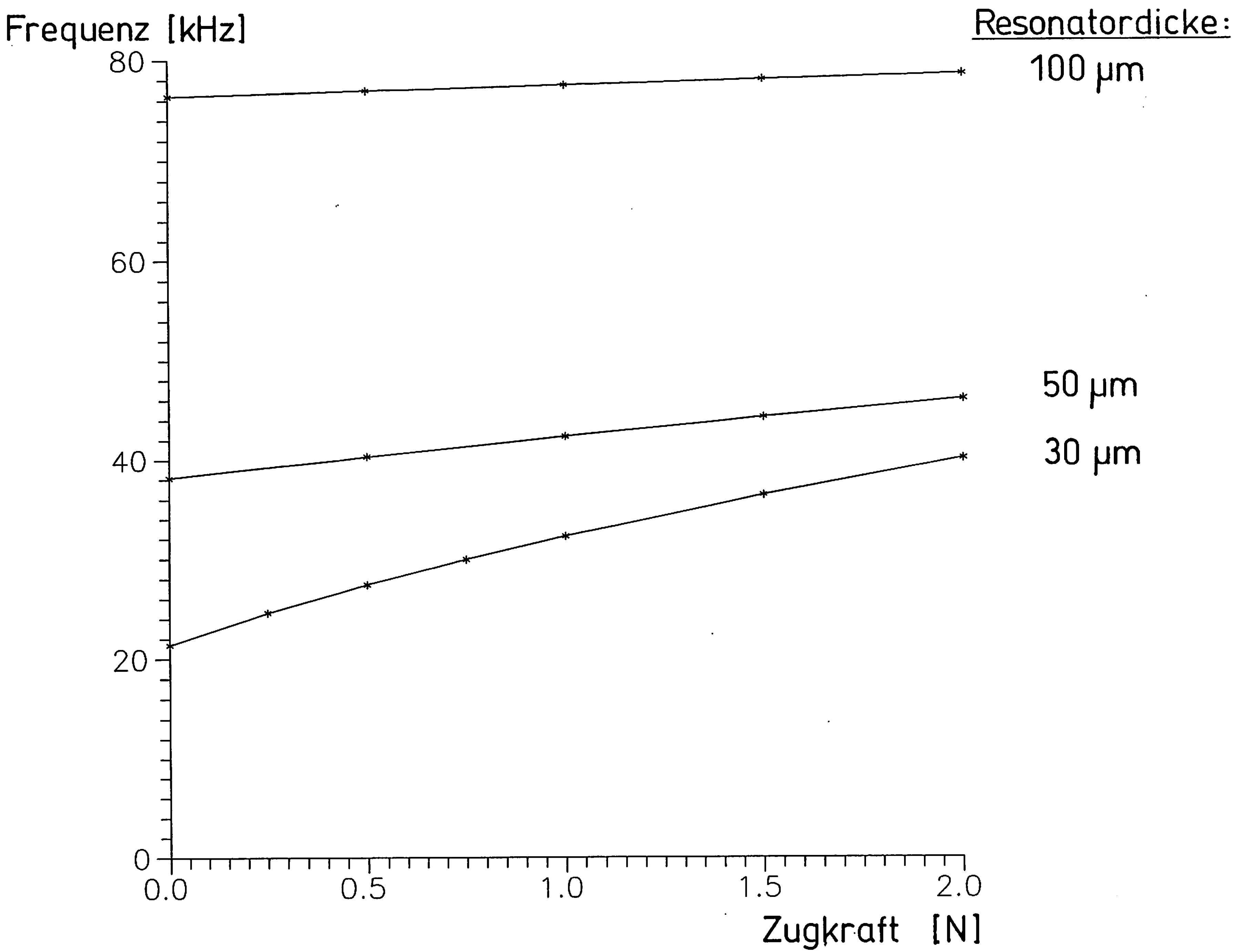
$$\begin{bmatrix} M & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\cdot\begin{Bmatrix} \ddot{u} \\ \ddot{\Phi} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & C_\phi \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \dot{u} \\ \dot{\Phi} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{uu} & K_{u\phi} \\ K_{u\phi}^{\,t} & K_{\phi\phi} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} u \\ \Phi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F \\ Q \end{Bmatrix}$$

M, C, K : Massen-, Dämpfungs-, Steifigkeitsmatrix
$\ddot{u}$, $\dot{u}$, u : Beschleunigungs-, Geschwindigkeits-, Verschiebungsvektor
$F(t)$, S : zeitabhängige Anregungskraft, Spannungsversteifungsmatrix
Φ, Q : elektrisches Potential, elektrische Ladung an den Knoten
C_ϕ : dielektrische Dämpfungsmatrix
K_{uu} : elastische Steifigkeitsmatrix (= K)
$K_{u\phi}$: piezoelektrische Kopplungsmatrix
$K_{\phi\phi}$: dielektrische Steifigkeitsmatrix
T : Temperatur

Abbildungsverzeichnis:

Bild 1





Frequenz [kHz]
Resonatordicke:
100 µm
50 µm
30 µm
80
60
40
20
0
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
Zugkraft [N]

Bild 2

Bild 3