

**Ein Konzept zur Modellierung und Simulation  
mikroelektromechanischer Systeme mit Anwendung auf ein  
elektrostatisches Kraftmikroskop**

Von der Fakultät für Elektrotechnik und Informatik  
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover  
zur Erlangung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur  
genehmigte Dissertation

von Dipl.-Ing. Michael Greiff  
geboren am 6. Juli 1970  
in Bonn

2010

1. Referent: Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Mathis
2. Referent: Prof. Dr.-Ing. Ludger Klinkenbusch
3. Referent: Prof. Dr.-Ing. Heyno Garbe

Tag der Promotion: 18.12.2009

*Für meine Eltern*

## Vorwort und Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für theoretische Elektrotechnik der Universität Hannover. Sie ist Teil einer im Rahmen des Graduiertenkollegs 615 durchgeführten und von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten interdisziplinären Kooperation verschiedener Fakultäten an der Universität Hannover.

Mein spezieller Dank gilt meinem Doktorvater Prof. Dr. Wolfgang Mathis, der das Thema initiierte und durch zahlreiche Diskussionen und kritische Anmerkungen sehr zum Gelingen der Arbeit beitrug. Für die Übernahme des Zweitgutachtens danke ich Prof. Dr. Ludger Klinkenbusch.

Besonders bedanke ich mich bei PD Dr. Matthias Maischak, der mit seinem fachlichen Rat wesentlich zum Gelingen des Teils über die numerische Feldberechnung beitrug und bei meinem Nachfolger Thomas Preisner für die vielen konstruktiven Diskussionen und die fachlichen Anregungen. Mein Dank gilt auch PhD Alain Bossavit für seine wertvollen Ratschläge zur Kraftberechnung.

Des Weiteren bedanke ich mich bei meinen Kollegen am Institut, insbesondere bei Dr. Uzzal Binit Bala für die gute Zusammenarbeit bei Gaby Gotzel und Dr. Martin Streitenberger für ihre besondere Kollegialität und Hilfsbereitschaft. Mein Dank gilt auch Dr. Oliver Schütte, der mir viele gute Ratschläge gab. Ein besonders herzliches Dankeschön richte ich an Kirstin Rasenack, die mir durch ihren Rückhalt diese Arbeit sehr erleichtert und durch ihre wertvollen sprachlichen und formalen Tipps entscheidend zum Gelingen beigetragen hat. Mein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern, die mich über all die Jahre immer unterstützt und ermutigt haben.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Mikroelektromechanische Systeme (MEMS)</b>	<b>4</b>
2.1	Grundlagen und Anwendungen . . . . .	4
2.2	Modellierung und Simulation . . . . .	5
2.3	Kraftmikroskopie . . . . .	9
2.4	Kraftwirkung im Nanobereich . . . . .	12
2.5	Das elektrostatische Kraftmikroskop (EFM) . . . . .	16
2.6	Messprinzip und Modellierung des EFM . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>24</b>
3.1	Elektrostatik . . . . .	24
3.2	Energie im elektrostatischen Feld . . . . .	28
3.3	Die Lagrangefunktion der Elektrostatik . . . . .	29
3.4	Das Prinzip der virtuellen Verschiebung . . . . .	32
3.5	Kraftdichte im elektrostatischen Feld . . . . .	36
3.6	Der Maxwellsche Spannungstensor . . . . .	39
<b>4</b>	<b>Numerische Feldberechnung</b>	<b>45</b>
4.1	Näherungsweise Lösung elektrostatischer Probleme . . . . .	45
4.2	Das Ritz-Galerkin-Verfahren . . . . .	47
4.3	Konvergenz des Ritz-Galerkinverfahrens . . . . .	49
4.4	Die Methode der finiten Elemente (FEM) . . . . .	51

---

4.5	Die Behandlung von Feldsingularitäten mit der FEM . . . . .	57
4.5.1	Ein stückweiser Ansatz . . . . .	57
4.5.2	Ein globaler Ansatz . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Numerische Kraftberechnung</b>	<b>70</b>
5.1	Numerische Anwendung des Prinzips der virtuellen Verschiebung . . . . .	74
5.2	Numerische Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors	79
5.3	Vergleichbarkeit beider Kraftberechnungsmethoden . . . . .	84
5.4	Test der numerischen Kraftberechnung . . . . .	87
5.4.1	Das Segment eines Zylinderkondensators in 2D . . . . .	87
5.4.2	Das Segment eines Kugelkondensators in 3D . . . . .	88
5.4.3	Ein EFM-Spitzenmodell in 2D . . . . .	90
5.4.4	Ein EFM-Spitzenmodell in 3D . . . . .	91
<b>6</b>	<b>Simulation des elektrostatischen Kraftmikroskops</b>	<b>96</b>
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>102</b>
<b>A</b>	<b>Die Jacobimatrix der FEM und ihre virtuelle Änderung</b>	<b>105</b>
<b>B</b>	<b>Gauß-Legendre Integration auf Dreiecken</b>	<b>107</b>
<b>C</b>	<b>Das Integral der Singulärfunktionen</b>	<b>110</b>
<b>D</b>	<b>Dritteln einer Dreiecksfläche</b>	<b>111</b>
<b>E</b>	<b>Energie, Impuls und Kraft im elektromagnetischen Feld</b>	<b>113</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>117</b>

## Kurzfassung

Diese Arbeit ist Teil einer Kooperation innerhalb des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Graduiertenkollegs 615. Die Kooperation ist der Simulation von mikroelektromechanischen Systemen gewidmet, wobei die spezifischen Untersuchungen und Simulationen am Beispiel des elektrostatischen Kraftmikroskops (EFM) erfolgen.

Die Funktionsweise mikroelektromechanischer Systeme basiert auf dem verkoppelten Wirken elektrischer und mechanischer Phänomene. So dient beim Messprozess des EFM die durch die elektrostatische Kraft bewirkte mechanische Auslenkung als Messgröße. Die Auslenkung wird hierfür in eine Spannung gewandelt und im Allgemeinen in eine grafische Darstellung des Probenprofils umgesetzt. Die Genauigkeit der Messung hängt davon ab, in welchem Maße Störungen erkannt und aus den gemessenen Daten herausgefiltert werden können. Hierfür wird im Rahmen dieser Arbeit ein Simulationsmodell entwickelt und implementiert. Dieses zeichnet sich im Vergleich zu anderen in der Literatur beschriebenen Modellen durch seine hohe Genauigkeit der physikalischen Modellierung aus. So wird bewusst auf das Zusammenfassen von räumlich verteilten Effekten in konzentrierten Elementen verzichtet. Die Modellierung erfolgt auf Basis der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungen. So können Störeffekte wie der Einfluss des Federbalkens auch im Modell erkannt und beurteilt werden. Nach Definition des physikalischen Modells erfolgt die numerische Umsetzung. Hier kommt für die Berechnung der elektrostatischen Felder ein Galerkinverfahren zum Einsatz, wobei die Methode der finiten Elemente mit speziellen Ansatzfunktionen im Bereich der Spitze des EFM gekoppelt wird. Bei der folgenden Berechnung der elektrostatischen Kräfte ist es wichtig, die Eigenschaften der im vorigen Schritt berechneten numerischen Feldlösung zu beachten, da sich durch die Numerik eingebrachte Fehler stark bemerkbar machen. So ist bei der Kraftberechnung mit Hilfe des Maxwellschen Spannungstensors die richtige Wahl des Integrationspfades wichtig. Die Kraftberechnung wird sowohl über den Maxwellschen Spannungstensor als auch die Methode der virtuellen Verschiebung realisiert. Anschließend werden die Ergebnisse beider Methoden miteinander verglichen. Die Berechnung der elektrostatischen Felder und Kräfte wird erfolgreich auf verschiedene Testanordnungen angewendet. Hierbei werden die Ergebnisse sowohl mit Hilfe analytischer Berechnungen als auch anderer numerischer Verfahren verifiziert. Den Abschluss der Arbeit bildet die Simulation des EFM mit Hilfe der entwickelten Methoden.

**Schlagwörter:** MEMS, EFM, FEM

## Abstract

This work is in cooperation with Graduiertenkolleg 615 which is sponsored by Deutsche Forschungsgemeinschaft. The cooperation is dedicated to the simulation of microelectromechanical systems applied to an electrostatic force microscope (EFM).

The working principle of microelectromechanical systems is based on the coupled action of electric and mechanic phenomena. During the process of measurement the EFM is mechanically deflected due to the electrostatic force. The deflection is transformed to an electric voltage which is used to generate a graphic image of the sample under investigation. The accuracy of the measurement depends on to what extent sources of error are known and can be filtered out from the measured data. For this purpose a simulation model is developed and implemented within this work. In comparison to other models found in literature the model is characterized by a high physical accuracy. Therefore, the use of lumped elements for the description of spacially distributed effects is avoided and the modeling is directly based on partial differential equations. Hence, parasitic effects such as the influence of the cantilever can be detected and rated in the simulation. In the subsequent numerical implementation of the model, a Galerkin method is used in which the finite element method is coupled with special ansatz functions near the tip of the EFM. The properties of the numerical field solution should be considered in the calculation of the forces, since numerical errors may have noticeable impact. Hence, use of the correct integration path for the application of the Maxwell stress tensor is fundamental. The force calculation is realized by using the Maxwell stress tensor as well as the principle of virtual work. The results of both methods are compared. The calculation of electrostatic fields and forces is successfully applied to various test set-ups. The results are verified by using analytic calculations as well as other numerical methods. At last the developed methods are applied to simulate the EFM.

**Catchwords:** MEMS, EFM, FEM

# Kapitel 1

## Einleitung

In den letzten Jahrzehnten sind mikroelektromechanische Systeme (MEMS) zu einem wichtigen Bestandteil moderner technischer Anwendungen geworden. Ihre geringe Größe und die damit verbundenen Vorteile wie Platzersparnis, geringer Stromverbrauch und preisgünstige Massenproduktion versprechen sie zu einer Schlüsseltechnologie des 21. Jahrhunderts zu machen. Bereits heute kommen MEMS in verschiedensten Bereichen zum Einsatz. So basieren die Druckköpfe handelsüblicher Tintenstrahldrucker auf MEMS-Technologie. Auch im Bereich Medizintechnik ermöglichen auf MEMS basierende Geräte vollkommen neue Methoden der Diagnostik und Therapie. Hierbei müssen die in vielen Fällen bereits in größerem Maßstab vorhandenen Technologien neu überdacht werden. So funktionieren Motoren größerer Bauweise zumeist auf Basis magnetischer Effekte. Bei Motoren im Mikrobereich ist jedoch die Ausnutzung elektrostatischer Effekte bei hohen Spannungen zweckmäßiger, da hier die durch Stromfluss verursachte Verlustwärme zu schwer beherrschbaren Problemen führen würde.

Auch im Bereich der Messtechnik eröffnen MEMS vollkommen neue Möglichkeiten. So können mit Hilfe des Atomkraftmikroskops (AFM) Oberflächen mit nahezu atomarer Genauigkeit analysiert werden. Seine Entwicklung und die darauf basierenden Spezialausführungen haben den Vormarsch der Nanotechnologie in den letzten Jahren erst möglich gemacht.

Die Entwicklung von MEMS erfolgt vielfach noch durch Versuche am Prototypen. Aufgrund des hohen Zeitaufwands und der damit verbundenen Kosten gewinnt die numerische Simulation hier zunehmend an Bedeutung. Die Basis einer solchen numerischen Simulation bildet ein geeignetes physikalisches Modell, für dessen Entwicklung ein breites physikalisches Wissen benötigt wird. Während sich viele technische Anwendungen sehr gut auf einen physikalischen Teilbereich reduzieren lassen, ist dies bei MEMS nicht ohne Weiteres möglich. So wird das Verhalten eines MEMS immer sowohl durch elektrische und mechanische Effekte als auch ihre Verkopplung bestimmt.

Des Weiteren kann je nach spezieller Ausführung die Berücksichtigung thermischer oder sogar atomarer bzw. quantenmechanischer Effekte sinnvoll sein. Diese Multiphysikalität macht die Entwicklung eines geeigneten physikalischen Modells zu einer komplexen Aufgabe. Unter Verwendung stark vereinfachender physikalischer Modelle ist es zuweilen möglich, analytische Berechnungen durchzuführen. Aufgrund der geringen Auflösung dieser Modelle können aber meist keine hohen Anforderungen an die Genauigkeit der Ergebnisse gestellt werden. Bei Verwendung genauerer Modelle stoßen analytische Berechnungsverfahren rasch an ihre Grenzen. Hier kommen meist numerische Verfahren zum Einsatz. Neben dem im Allgemeinen höheren Implementierungsaufwand ergeben sich hierdurch neue Schwierigkeiten. So müssen oft sogenannte Multiskaleneffekte berücksichtigt werden, die bei großen Dimensionsunterschieden innerhalb des Modells auftreten. Auch müssen die Ergebnisse der numerischen Simulation sehr kritisch hinterfragt werden, da diese die realen Verhältnisse nur näherungsweise wiedergeben. Aufgrund dieser Eigenschaft sind die Ergebnisse numerischer Simulationen in den meisten Fällen unphysikalisch. Es liegt dann am Benutzer zu beurteilen, ob die Ergebnisse der Simulation die Physik für seine Anwendung ausreichend genau abbilden. Neben rein analytischen oder rein numerischen Verfahren kann in einigen Fällen auch der Einsatz gemischt numerisch-analytischer Verfahren vorteilhaft sein.

Diese Arbeit ist Teil einer Kooperation, deren Ziel es ist, ein elektromechanisches Simulationsmodell eines MEMS zu erstellen. Als Beispiel dient ein elektrostatisches Kraftmikroskop (EFM), für das mit Hilfe der Simulation Störeinflüsse erkannt und aus der Messung herausgefiltert werden können. Hierfür wird ein physikalisches Modell erstellt, anhand dessen ein numerisches Berechnungsverfahren unter Berücksichtigung der oben genannten Aspekte entwickelt und implementiert wird. Zur Durchführung der Simulation soll ein geeignetes elektromechanisches Modell erstellt werden. Dabei werden die mechanischen und elektrischen Aspekte zunächst getrennt voneinander modelliert und während der Simulation über eine Schnittstelle gekoppelt. Während der mechanische Teil die Auslenkung des Messinstruments berechnet, soll der elektrische Teil die hierfür benötigte Kräfteberechnung zur Verfügung stellen.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit dem elektrischen Teil. Es soll ein numerisches Verfahren zur Berechnung der innerhalb des EFM auftretenden elektrostatischen Felder erarbeitet und implementiert werden. Aus diesen Feldern sind durch Anwendung geeigneter Methoden die resultierenden elektrostatischen Kräfte zu ermitteln. Hierfür werden in Kapitel 2 die physikalischen Grundlagen zu MEMS und dem EFM gelegt, wobei auf die im EFM wirkenden Kraftmechanismen besonders eingegangen wird. Darauf aufbauend erfolgt in Kapitel 3 die Entwicklung des physikalischen Gerüsts für die elektrostatische Feld- und Kraftberechnung. Auf dieser Grundlage wird in den Kapiteln 4 und 5 die numerische Umsetzung der Feldberechnung und

der darauf aufsetzenden Kraftberechnung beschrieben, wobei die Methoden anhand verschiedener Testbeispiele verifiziert werden. Die Anwendung der Verfahren auf das EFM erfolgt in Kapitel 6.

## Kapitel 2

# Mikroelektromechanische Systeme (MEMS)

### 2.1 Grundlagen und Anwendungen

Prinzipiell lassen sich MEMS in zwei Gruppen unterteilen. Die erste Gruppe stellt hierbei die Sensoren. Diese kommen in Bereichen zum Einsatz in denen mechanische Größen elektrisch erfasst werden sollen. Hier wird ein mechanisches Eingangssignal in ein elektrisches Ausgangssignal umgewandelt. Typische Beispiele hierfür sind Sensoren zur Beschleunigungsmessung, die beispielsweise Bestandteil jedes Airbag-Systemes sind. Des Weiteren gibt es Sensoren zur Bestimmung von Strömungsgeschwindigkeiten oder zur Messung mechanischer Spannungen. Auch das elektrostatische Kraftmikroskop (EFM) gehört in die Gruppe der Sensoren. Die zweite Gruppe sind die Aktoren, deren Aktionsrichtung in umgekehrter Richtung erfolgt. Ein elektrisches Eingangssignal wird in ein mechanisches Ausgangssignal umgewandelt, wie dies zum Beispiel bei den Mikrospiegeln in Projektoren der Fall ist. Auch die Druckköpfe in den Patronen eines Tintenstrahldrucker sind ein typisches Beispiel für MEMS. In [53] wird der Einsatz von Mikroaktoren zur Verringerung von Turbulenzen und damit zur Senkung des Luftwiderstandes und des Lärmpegels in Überschallflugzeugen untersucht.

Die Funktion eines MEMS wird durch die Wechselwirkung mechanischer und elektrischer Phänomene bestimmt. Je nach Ausführung können weitere physikalische Aspekte für ihre Funktion relevant sein. In Abbildung 2.1 ist der Aufbau eines Beschleunigungssensors zur Messung vertikaler Beschleunigungen zu sehen [11].

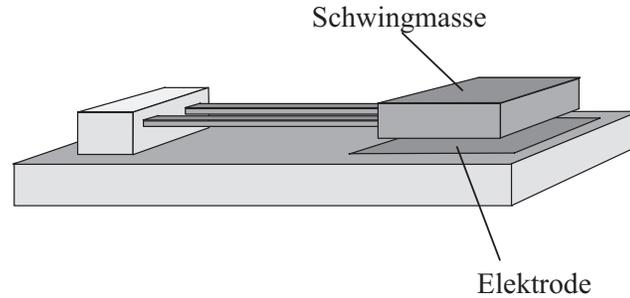


Abbildung 2.1: Beschleunigungssensor

Das Kernstück bildet eine an zwei Federbalken befestigte Masse, die zugleich die Elektrode eines elektrischen Kondensators ist. Aufgrund der auf die Masse wirkenden Beschleunigungskräfte wird der Federbalken verformt. Die sich dadurch ergebende Änderung der elektrischen Kapazität kann damit zur Messung der Beschleunigung verwendet werden. Eine weitere Anwendung für MEMS sind optische Schalter, bei denen Lichtsignale mit Hilfe kleiner Spiegel geschaltet werden [11]. Im Gegensatz zu den bisher noch meist verwendeten elektro-optischen Schaltern muss das optische Signal hier nicht in ein elektrisches umgewandelt werden. Neben den Wärmeverlusten werden hierdurch die Laufzeiten durch den Schalter erheblich reduziert. Auf einem ähnlichen Funktionsprinzip basieren die von Texas Instruments entwickelten Mikrospiegelarrays, die in Projektoren in DLP Bauweise für den Bildaufbau sorgen. Die einzeln elektronisch ansteuerbaren Mikrospiegel sorgen für eine wesentlich höhere Bildqualität bei verbesserter Helligkeit im Vergleich zu LCD Projektoren.

## 2.2 Modellierung und Simulation

Bei der Entwicklung mikroelektromechanischer Systeme spielt die numerische Simulation eine tragende Rolle, da mit ihrer Hilfe sowohl Entwicklungszeit als auch Kosten gespart werden können. Die Simulation hat die Aufgabe vor der Fertigung eines Prototyps das Verhalten eines MEMS durch Berechnung vorherzusagen. Der Lagrange-Formalismus bietet einen sehr guten Ansatzpunkt für die Berechnung gekoppelter elektromechanischer Systeme. Hierbei können über einen allgemeinen Energieansatz die mechanischen und elektrischen Phänomene und ihre Verkopplung sehr elegant gemeinsam modelliert werden. Zur Einführung dieses Formalismus wird das MEMS als ein energetisch abgeschlossenes System betrachtet. Aus den im System vorhandenen kinetischen Energien  $W_K$  und den potenziellen Energien  $W_P$  kann die

Lagrangefunktion

$$L(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n, t) = W_K(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n, t) - W_P(q_1, q_2, \dots, q_n, t) \quad (2.1)$$

berechnet werden [100]. Hierbei ist zu beachten, dass sowohl die kinetische als auch die potenzielle Energie über die Mechanik hinaus zu definieren sind. So sind im Rahmen der Elektrotechnik magnetische Phänomene der kinetischen Energie zuzuordnen, während in der potenziellen Energie die elektrostatischen Aspekte berücksichtigt werden. Die verallgemeinerten Koordinaten  $q_i$  und ihre Zeitableitungen  $\dot{q}_i$  sind als die mechanischen und elektrischen Freiheitsgrade des Systems zu verstehen. Aus der Lagrangefunktion lassen sich unter der Voraussetzung linearer Unabhängigkeit der  $q_i$  die Bewegungsgleichungen des betrachteten dynamischen Systems berechnen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0. \quad (2.2)$$

Die Freiheitsgrade  $q_i$  können in einem Vektor

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_m \\ \mathbf{q}_e \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

zusammengefasst werden, wobei  $\mathbf{q}_m$  die mechanischen und  $\mathbf{q}_e$  die elektrischen Freiheitsgrade sind [95]. Das Hamiltonsche Prinzip besagt, dass ein physikalischer Prozess immer so abläuft, dass das zeitliche Integral der Lagrangefunktion (2.1) minimal ist. Da dann die erste Ableitung nach den Freiheitsgraden des Systems verschwindet, kommt dies durch

$$\delta \int L(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n, t) dt = 0 \quad (2.4)$$

zum Ausdruck. Unter allen möglichen Verhaltensweisen eines Systems ist also nur diejenige physikalisch richtig, für die die Variation des Wirkungsintegrals von  $L$  verschwindet. Bei statischen Systemen entfällt die zeitliche Integration und es ergibt sich

$$\delta L(q_1, q_2, \dots, q_n) = 0. \quad (2.5)$$

In der Praxis erweist sich die geschlossene Lösung elektromechanischer Systeme mit Hilfe der Lagrangeformulierung oft als sehr kompliziert. Eine Alternative ist die Aufteilung des Gesamtsystems in seine mechanischen und elektrischen Eigenschaften (Abb. 2.2). Auf der mechanischen Seite muss hierbei der Einfluss des elektrischen Teils durch zusätzliche Terme berücksichtigt werden. So kann die Kraftwirkung zwischen den Platten eines elektrischen Kondensators als zusätzliche Feder im mechanischen System wirken. In [95] wird die Aufteilung eines elektromechanischen Systems beschrieben. Es wird

gezeigt, dass die gesamte und die getrennte Lagrangelösung zu identischen Ergebnissen führen.

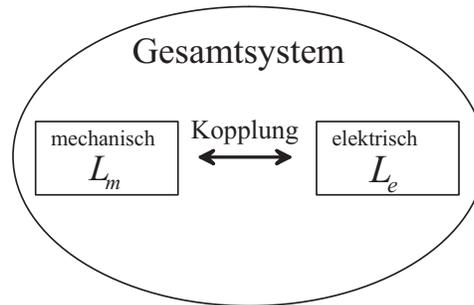


Abbildung 2.2: Zerlegung des Gesamtsystems

Dieser getrennte Ansatz für den mechanischen und den elektrischen Teil des Systems kam auch im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz. Als Kopplungsgrößen zwischen beiden Teilsystemen wurden die elektrischen Kräfte und die mechanischen Formänderungen verwendet (Abb. 2.3). So dienen die vom elektrischen Teil berechneten Kräfte dem mechanischen Teil als Eingangsgrößen zur Berechnung der Formänderung. Umgekehrt verwendet der elektrische Teil die vom mechanischen Teil berechnete Form als Eingabe zur Bestimmung der elektrischen Felder (Abb. 2.3). Da sich während der mechanischen Simulation im Allgemeinen eine Änderung der Geometrie und damit veränderte Randbedingungen für die elektrische Berechnung ergeben, muss die gesamte Simulation oft iterativ ausgeführt werden. Neben der Handhabung hat die Aufteilung in einen mechanischen und einen elektrischen Teil den Vorteil, dass, je nach Anforderung, Definition und Verfeinerung beider Teile unabhängig voneinander erfolgen können. Im Rahmen der Kooperation in der diese Arbeit entstanden ist wurde der mechanische Teil [51] vom Institut für Baumechanik und numerische Mechanik Hannover (ibnm) und der elektrische Teil vom Institut für theoretische Elektrotechnik Hannover (TET) in Zusammenarbeit mit dem Institut für angewandte Mathematik Hannover (IfaM) bearbeitet. Die Aufgabenteilung zwischen den Instituten ist in Abb. 2.3 durch eine grafische Hinterlegung veranschaulicht. Das Simulationsmodell für den elektrischen Teil, speziell die Berechnung der elektrischen Felder, ist wiederum als Zusammenarbeit mit [6] entstanden. Darüber hinaus ist die Berechnung der Kräfte aus den elektrischen Feldern Teil der vorliegenden Arbeit.

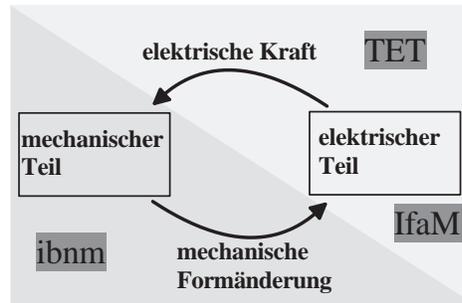


Abbildung 2.3: Grundlegendes Simulationsprinzip für MEMS

## 2.3 Kraftmikroskopie

Die Grundlage für die Kraftmikroskopie wurde 1981 mit der Erfindung des Rastertunnelmikroskops (RTM) (Abb. 2.4) durch Binnig und Rohrer [13] gelegt. Bei diesem Mikroskop wird zwischen der zu untersuchenden, leitfähigen Probe und der leitfähigen Messspitze eine Spannung  $U$  angelegt. Während der Messung wird die Messspitze kontaktlos in sehr kleinem Abstand über die Probe geführt. Trotz des sehr hohen Widerstandes kommt es zwischen Spitze und Probe zu einem Tunnelstrom. Dieser extrem empfindliche Effekt ermöglicht eine sehr genaue Messung der Abstandsänderung zwischen Spitze und Probe, da er stark mit dem Abstand variiert. Während der Messung wird der Tunnelstrom durch Variation der Höhe der Messspitze konstant gehalten, wodurch vertikale Auflösungen im einstelligen Pikometerbereich erreicht werden können.

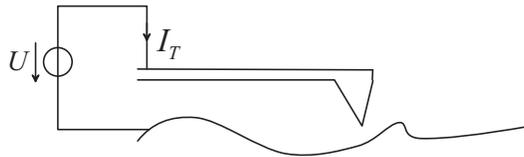


Abbildung 2.4: Funktionsprinzip des Rastertunnelmikroskops

Aufbauend auf dem Prinzip des RTM meldeten Binnig, Quate und Gerber im Jahre 1986 das Rasterkraftmikroskop (engl. AFM) (Abb. 2.5) zum Patent an.

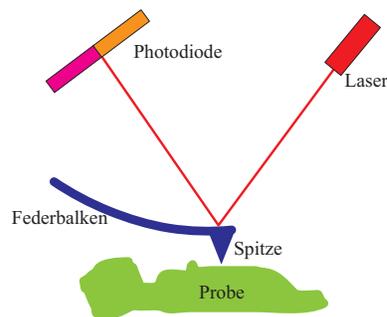


Abbildung 2.5: Funktionsprinzip des Rasterkraftmikroskops

Anders als beim RTM wird hierbei nicht mehr der Tunnelstrom, sondern direkt die Auslenkung der Messspitze gemessen. Hierfür wird ein Laserstrahl auf der Rückseite des Federbalkens in Richtung einer viersegmentigen Photodiode reflektiert. Damit steht die Ausgangsspannung der Dioden in direktem

Zusammenhang mit der Auslenkung der Messspitze. Mit der Erfindung des AFM konnten nun auch die Oberflächen nicht leitender Proben mit zum RTM vergleichbarer Auflösung gemessen werden. Dem vordergründig simplen Messprinzip liegt bei diesem Mikroskop eine äußerst komplizierte Physik zugrunde. Dies ist darin begründet, dass zum Verständnis der Wechselwirkung zwischen Probe und Messspitze zunächst die Art der Kraftwirkung ermittelt werden muss. Je nach Anwendung des AFM wird der Messprozess durch verschiedenste Kräfte dominiert. So existieren verschiedene Messmodi [34] wie z.B. der so genannte Kontaktmodus (Abb. 2.6), bei dem die Messspitze während der Messung im Kontakt über die Probe kratzt. Dieser Messmodus eignet sich jedoch nur für harte und stabile Proben, da es bei weichen Materialien leicht zu Beschädigungen der Oberflächenstruktur kommt.

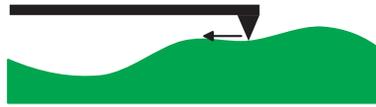


Abbildung 2.6: Kontakt-Modus

Zur Messung weicher Proben wurde der so genannte Tapping-Modus (Abb. 2.7) entwickelt, bei dem die Spitze oszilliert und während der Messung auf die Probe klopft [22].

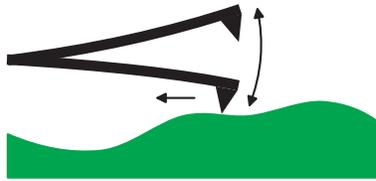


Abbildung 2.7: Tapping-Modus

Neben den genannten Messmodi, bei denen die Spitze zumindest zeitweise im Kontakt mit der Probe ist, existieren auch kontaktlose Messmodi. Hierbei kann während der Messung entweder der Abstand oder die Kraftwirkung zwischen Spitze und Probe konstant gehalten werden. Auch bei den kontaktlosen Messmethoden kann der Federbalken wieder im Liftmodus (Abb. 2.8) in Ruhe sein oder im Oszillationsmodus (Abb. 2.9) schwingen. Während im schwingungslosen Modus die Auslenkung des Federbalkens als Maß für die Kraftwirkung zwischen Spitze und Probe ausgewertet wird, werden beim Oszillationsmodus meist Frequenz und Phase der Federbalkenschwingung als Messgrößen verwendet.

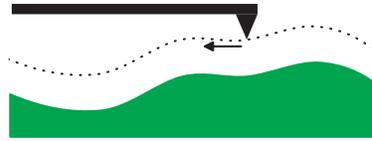


Abbildung 2.8: Lift-Modus

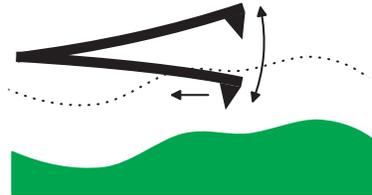


Abbildung 2.9: Oszillations-Modus

Es ist sicherlich keine Übertreibung, dass die Entwicklung des Rasterkraftmikroskops den rasanten Vormarsch der Nanotechnologie erst ermöglicht hat. Aufgrund seiner Vielfältigkeit können mit seiner Hilfe Messungen verschiedenster Materialeigenschaften mit bis zu atomarer Auflösung durchgeführt werden. Dennoch bereitet die Interpretation der Messergebnisse zuweilen Schwierigkeiten, da Vergleichsmöglichkeiten fehlen. Es hat sich daher etabliert die Messungen anhand theoretischer Berechnungen zu verifizieren, wobei die Art der verwendeten Modelle vielfältig ist. Aufgrund der begrenzten zur Verfügung stehenden Rechenleistung werden hier oft stark vereinfachte Modelle zugrunde gelegt. So werden die mechanischen Eigenschaften von Federbalken und Spitze oft durch ein gedämpftes Feder-Masse-System modelliert. Auch werden die elektrischen Eigenschaften in vielen Modellen mit Hilfe konzentrierter Elemente zusammengefasst. Solche vereinfachten Modelle haben den Vorteil, dass ihr Bedarf an Rechenleistung relativ gering ist. Dies wird aber durch den Nachteil bereits im Modell enthaltener physikalischer Fehler erkauft.

Seit einigen Jahren ist zu der Verwendung des AFM als Messinstrument die Anwendung als Hilfsmittel zur Produktion von Transistoren [38] und Schreib- und Lesegerät in hochkompakten Speichermedien hinzugekommen [27]. Im Rahmen dieser Arbeit wird der Messprozess eines elektrostatischen Kraftmikroskops betrachtet. Basierend auf dem AFM wird bei diesem Mikroskop die elektrisch leitfähige Spitze in einem gewissen Abstand zur Probe gehalten. Auf diese Weise kann die elektrische Kraftwirkung zwischen Spitze und Probe gemessen werden.

## 2.4 Kraftwirkung im Nanobereich

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Simulationsmodell eines elektrostatischen Kraftmikroskops (engl. EFM) erstellt. Ein solches Modell umfasst die Wechselwirkung zwischen Spitze, Federbalken und Probe. Diese wird anhand der Kräfte im Folgenden genauer beschrieben.

Es ist unmittelbar einsichtig, dass es bei Verringerung des Abstandes zwischen Messspitze und Probe irgendwann zum Kontakt zwischen beiden kommt. So sorgt die abstoßende Kontaktkraft zwischen einem Tisch und einem darauf abgestellten Glas dafür, dass das Glas nicht durch den Tisch fällt. Während dieser Umstand makroskopisch und intuitiv betrachtet trivial erscheinen mag, muss für das Verständnis atomar auflösender Messprozesse nach der physikalischen Natur dieser Kontaktkraft gefragt werden. Makroskopisch betrachtet kann das Glas entweder im Kontakt mit dem Tisch sein oder nicht. Nur im Kontaktfall gibt es zwischen beiden eine abstoßende Wechselwirkung. Der Kontakt tritt also bei verschwindendem Abstand plötzlich ein. Auf atomarer Ebene findet dieser Übergang stetig, jedoch mit sehr großem Gradienten statt. Bei genauerer Untersuchung zeigt sich, dass klassische Effekte zur Erklärung dieser Kraftwirkung nicht in Frage kommen. Vielmehr wird diese extrem starke Kraft dem quantenmechanischen Pauli Prinzip zugeordnet [58] [114]. Wenn zwei Atome sehr nah zusammenkommen sind die energetischen Zustände der äußeren Elektronen nicht mehr alleine von einem der Atomkerne abhängig, vielmehr bilden sich Mischzustände aus. Da Elektronen Fermiteilchen sind, können nicht zwei Elektronen in dem selben Zustand sein und müssen sich dementsprechend verteilen. Ist die Energie dieser Mischzustände nun geringer als die Energie der Zustände der getrennten Atome, so entsteht eine sehr starke, die so genannte kovalente Bindung. Hat der Mischzustand jedoch eine höhere Energie als die getrennten Atome, so kommt es zu einer sehr stark abstoßenden Kraft, die exponentiell vom Abstand der Atome abhängt. Aufgrund der sehr geringen Reichweite dieser Kraft spielt sie beim AFM nur bei der Wechselwirkung zwischen dem vordersten Teil der Messspitze und der Probe im Kontaktfall eine Rolle [80]. Im Idealfall ist dies ein einzelnes Atom am Ende der Spitze.

Wird die Messspitze weiter von der Probe entfernt, so wird eine anziehende Kraft zwischen Probe und Spitze zunehmend dominant. Dies ist die van der Waals Kraft, die auf die Dipolwirkung der Atome zurückzuführen ist. Wie die Elektronenverteilung innerhalb eines Atoms besitzt auch seine gesamte Ladungsverteilung eine Unschärfe. Mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit bildet ein Atom zu einem Zeitpunkt einen Dipol. Durch seinen Einfluss steigt dann die Wahrscheinlichkeit, dass die umliegenden Atome ebenfalls Dipole ausbilden. Die genaue Berechnung der resultierenden Dipolkräfte ist jedoch aufgrund der beschriebenen Wechselwirkung äußerst schwer durchzuführen. Die zwischen zwei einzelnen Atomen wirkende van der Waals Kraft wird

meist als mit  $r^{-7}$  abnehmend modelliert. Bei Abständen die größer als  $5\text{ nm}$  sind müssen für eine genaue Berechnung die Laufzeiten der Wechselwirkungen berücksichtigt werden, was einen abschwächenden Effekt bewirkt. Daher ergibt sich ab Abständen größer als  $5\text{ nm}$  eine schneller abklingende Kraft [58]. Im Lennard Jones Potenzial

$$W_{LJ} = W_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (2.6)$$

werden die Pauli und van der Waals Effekte zusammengefasst, wobei sich eine in radialer Richtung abstoßende Kraftwirkung ergibt

$$F_{LJ} = -\frac{\partial W_{LJ}}{\partial r} = \frac{12W_0}{r_0} \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{13} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^7 \right]. \quad (2.7)$$

Hierbei bezeichnet  $r_0$  den Abstand bei dem beide Kräfte im Gleichgewicht sind und  $-W_0$  das zugehörige Potenzial. Beim Buckingham Potenzial

$$W_B = Ae^{-\frac{r}{r_0}} - B \left( \frac{r}{r_0} \right)^6 \quad (2.8)$$

geht der Pauli-Anteil exponentiell ein, was physikalisch die genauere Formulierung ist. Dennoch wird in den meisten Modellen, aufgrund der besseren Handhabung, die Formel nach Lennard-Jones zugrunde gelegt.

Beim Übergang zur Berechnung der Wechselwirkung zwischen Körpern kommt das bereits oben genannte Problem der gegenseitigen Beeinflussung benachbarter Atome hinzu. Daher ist eine genaue Berechnung der Lennard-Jones Kraft zwischen Körpern äußerst aufwändig. Die Theory nach Hamaker vernachlässigt diesen Effekt und ermöglicht eine Abschätzung [119] [2]. Das gesamte Potenzial der Anordnung ergibt sich damit als Summe über alle beteiligten Atompaare

$$W_H = W_0 \sum_i \sum_{j>i} \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2.9)$$

womit für die resultierende Kraft

$$F_H = \frac{12W_0}{r_0} \sum_i \sum_{j>i} W_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{13} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^7 \right] \quad (2.10)$$

folgt [11] [80]. Da die Reichweite der durch das Lennard Jones Potenzial bewirkten Kraft relativ gering ist, reicht es bei ihrer Berechnung meist nur den vorderen Teil der Spitze und die Probe in unmittelbarer Umgebung der Spitze zu berücksichtigen [80].

Wird zwischen der Spitze und der Probe eine Spannung angelegt oder sind

in der Probe isolierte Ladungen vorhanden, so tritt als weitere Interaktion die Coulombkraft auf. Das zugehörige Coulombpotenzial zwischen zwei punktförmigen Ladungen  $Q_1$  und  $Q_2$  ist durch

$$W_C = A \frac{Q_1 Q_2}{r} \quad (2.11)$$

gegeben. Da die Coulombkraft wesentlich langsamer mit dem Abstand abfällt als die Kraft nach Lennard Jones, dominiert die Coulombkraft die Interaktion zwischen Probe und Spitze bei größeren Abständen (Abb. 2.10) [47] [109] [64] [9].

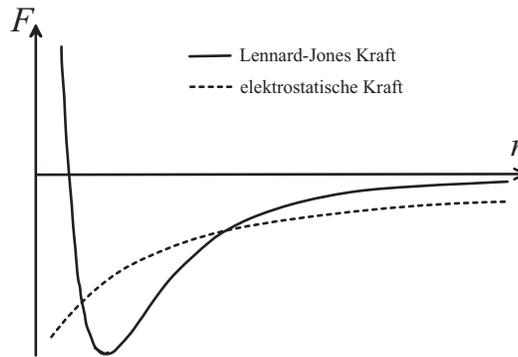


Abbildung 2.10: Qualitativer Vergleich der Lennard-Jones Kraft und der elektrostatischen Kraft zwischen zwei Teilchen

So fällt für eine Kugel im Nahbereich über einer leitenden Fläche die van der Waals Kraft quadratisch mit dem Abstand, während in diesem Fall die Coulombkraft nur linear vom Abstand abhängt [21]. Unter Ausnutzung dieser Tatsache können mit Hilfe der elektrostatischen Kraftmikroskopie die zwischen Kraftmikroskop und Probe wirkenden elektrostatischen Kräfte gemessen werden. Eine Trennung der elektrostatischen Kraft von der van der Waals Kraft gestaltet sich bei der Messung dennoch als schwierig [103] [74], da zum Erreichen hoher Auflösungen möglichst nah an der Probe gemessen werden muss und die elektrostatische Kraft im Nahbereich von einer starken van der Waals Kraft überlagert wird. Zwar ergibt eine Vergleichsrechnung für eine Kugel über einer Fläche in [94] bereits für Abstände im Bereich zwischen  $15 \text{ nm}$  und  $20 \text{ nm}$  eine ungefähr zehnmal größere elektrostatische Kraft im Vergleich zur van der Waals Kraft, jedoch ist der Vergleich beider Kraftwirkungen im Allgemeinen schwierig, da sie auch im Experiment nur schwer zu trennen sind. Während für die van der Waals Kraft die beteiligten Materialien eine große Rolle spielen, wird die elektrostatische Kraftwirkung in erster Linie durch isolierte Ladungen oder die zwischen Spitze und Probe anliegende Spannung bestimmt. Diese Abhängigkeit gibt dem Benutzer des EFM die Möglichkeit die elektrische Kraftwirkung durch Regelung der

Spannung in gewissen Grenzen zu verändern und damit einen besseren Kontrast zur van der Waals Kraft herzustellen.

Als letzte Kraft soll hier die magnetische Kraftwirkung erwähnt sein, deren Bestimmung die magnetische Kraftmikroskopie zum Ziel hat [83]. Die Quelle der zugehörigen magnetischen Felder stellen bewegte Ladungen dar, die entweder als makroskopische Ströme oder in magnetisierten Materialien als quantenmechanische Effekte auftreten können. Da beide Effekte innerhalb des EFM gegenüber den durch elektrostatische Ladungen hervorgerufenen Effekten vernachlässigbar sind, werden sie auch in den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Modellen nicht berücksichtigt.

Wie beschrieben ist das AFM in seinen verschiedenen Varianten an Vielfältigkeit als Messinstrument kaum zu übertreffen. Jedoch macht auch genau diese Eigenschaft seine Anwendung kompliziert, da bei der Messung einer bestimmten Kraft, z.B. der Coulombkraft, die Störung durch andere Kräfte berücksichtigt und gering gehalten werden sollte. Hinzu kommt, dass aufgrund der mangelnden Auflösung anderer Messinstrumente, im Allgemeinen keine Vergleichsmessungen gemacht werden können. Außerdem können parasitäre Effekte, wie die Kraftwirkung zwischen Federbalken und Probe, zu fehlerhaften Messergebnissen führen [113] [54]. Die Simulation kann hier helfen den Messprozess besser zu verstehen und dadurch die Genauigkeit der Messung wesentlich zu verbessern. Auch kann die Simulation zur effizienten und zielgerichteten Entwicklung von elektrostatischen Kraftmikroskopen eingesetzt werden [48].

## 2.5 Das elektrostatische Kraftmikroskop (EFM)

Wie im vorigen Kapitel beschrieben wurde, dominiert bei Einhaltung eines größeren Abstandes die elektrostatische Kraft die Interaktion zwischen Spitze und Probe. Ein in dieser Weise eingesetztes AFM wird als elektrostatisches Kraftmikroskop (engl. EFM) bezeichnet. Anwendungsbereiche sind z.B. die Fehlerdetektion in hochintegrierten Schaltungen [16] [36], die Charakterisierung von Transistorgrößen [90] oder die Messung von Dopantprofilen in Halbleitern [81] [52]. Der Messprozess setzt sich dabei aus zwei Schritten zusammen [64] [120]. Im ersten Schritt wird im Kontakt- oder Tappingmodus die Struktur der Oberfläche erfasst. Erst im zweiten Schritt erfolgt die eigentliche Messung der elektrischen Felder im kontaktlosen Modus. Im Allgemeinen beträgt der Abstand zwischen Spitze und Probe hierbei 50 bis 100 nm [64].

Während bei anderen Messmodi die Kraft nach Lennard Jones die hauptsächliche Messgröße darstellt, ist sie bei der kontaktlosen Messung elektrostatischer Felder als Störeinfluss zu betrachten und sollte aus diesem Grunde möglichst gering gehalten werden. Wie bereits erwähnt kann dies durch Einhaltung eines gewissen Abstandes zwischen Spitze und Probe erreicht werden. Wenn die Möglichkeit besteht die elektrische Spannung zwischen Spitze und Probe mit Hilfe einer Spannungsquelle einzustellen, ist auch dies eine Möglichkeit, die elektrostatische Kraft zu vergrößern und damit andere störende Einflüsse im Verhältnis zu verringern. Je nach Relevanz kann es dennoch sinnvoll sein, bei einer theoretischen Untersuchung verschiedene Störeinflüsse mit einzubeziehen. Derartige theoretische Betrachtungen werden im Allgemeinen für die Interpretation von Messungen herangezogen. Den Ausgangspunkt hierfür bildet die Erstellung eines physikalischen Modells anhand dessen der Messprozess mit ausreichender Genauigkeit beschrieben werden kann. Hauptsächliches Ziel ist es, mit Hilfe des Modells aus den der Messung zugänglichen Daten auf die zu untersuchenden Größen zu schließen. So muss beim EFM aus der messbaren Diodenspannung die Kraftwirkung auf die Spitze berechnet werden. Da ein hierfür geeignetes Modell stets von der Messmethode abhängt, ist für seine Erstellung eine gewisse Kenntnis des Messprozesses nötig. Im folgenden Kapitel werden die wichtigsten Messverfahren und deren Modellierung grundlegend beschrieben.

## 2.6 Messprinzip und Modellierung des EFM

Als Spezialfall eines MEMS kann auch das EFM in seine mechanischen und elektrischen Aspekte aufgeteilt werden. Ein gängiges, aber stark vereinfachtes Modell für die Mechanik ist in Abbildung 2.11 dargestellt.

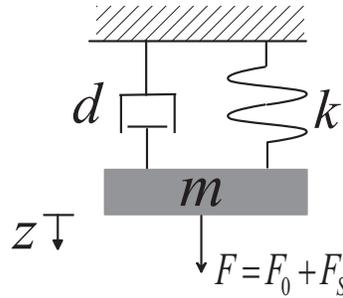


Abbildung 2.11: Mechanisches Ersatzmodell des EFM

Hierbei sind  $m$  die effektive Masse,  $k$  die effektive Federkonstante und  $d$  die effektive Dämpfung des Federbalkens [3] [94]. Die Kraft  $F$  ist die effektive auf den Federbalken wirkende Gesamtkraft. Neben der Wechselwirkungskraft  $F_S$  zwischen Spitze und Probe ist in ihr die den Federbalken im Oszillationsmodus anregende Kraft  $F_0$  enthalten. Die Auslenkung  $z$  wird durch die Differenzialgleichung

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} + d \frac{dz}{dt} + kz = F \quad (2.12)$$

beschrieben, womit für die Resonanzfrequenz des homogenen Systems ( $F = 0$ )

$$\omega_e = \sqrt{\frac{k}{m} - \left(\frac{d}{2m}\right)^2} \quad (2.13)$$

gilt [75].

Da zunächst der Lift-Modus ohne Oszillation betrachtet werden soll (vgl. Abb. 2.8), gilt für die folgenden Ausführungen  $F_0 = 0$ . Des Weiteren wird für die Kraftwirkung zwischen Spitze und Probe eine nicht lineare Beziehung nach Abbildung 2.12 zugrunde gelegt.

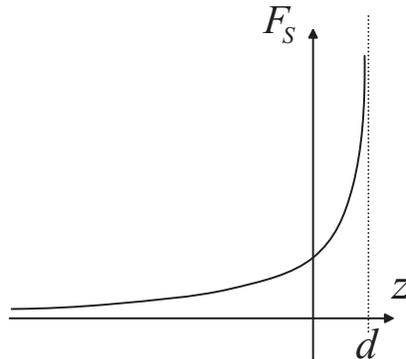


Abbildung 2.12: Kraftwirkung zwischen Spitze und Probe

Die Auslenkung  $z$  des Federbalkens wird derart gewählt, dass sie für  $F_S = 0$  verschwindet. Weiterhin soll vereinfachend angenommen werden, dass die Kraftwirkung zum Zeitpunkt  $t = 0$  eingeschaltet wird. Aufgrund der dann einsetzenden Kraft  $F_S$  wird die Masse in  $z$ -Richtung beschleunigt, wobei mit wachsender Auslenkung eine größer werdende Federkraft  $F_F$  entgegenwirkt. Es ergibt sich eine gedämpfte Schwingung, wobei für  $t \rightarrow \infty$   $F_S = F_F$  gelten muss, was dem Gleichgewichtszustand  $z_0$  (Abb. 2.13) entspricht.

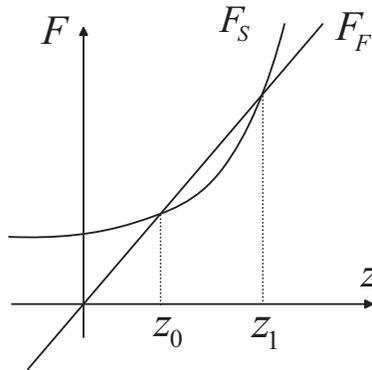


Abbildung 2.13: Gleichgewichtszustand  $z_0$

Da die linearisierte Anordnung regelungstechnisch betrachtet einem  $PT_2$ -Glied entspricht, ergibt sich ein der  $PT_2$ -Sprungantwort ähnlicher zeitlicher Verlauf der Auslenkung (Abb. 2.14) [75]. Aufgrund der nicht linearen Kraftkurve wird sich jedoch in der Praxis eine leichte Abweichung von der dargestellten Sprungantwort ergeben. Im Rahmen der hier gemachten prinzipiellen Ausführungen wird auf eine genauere Untersuchung verzichtet.

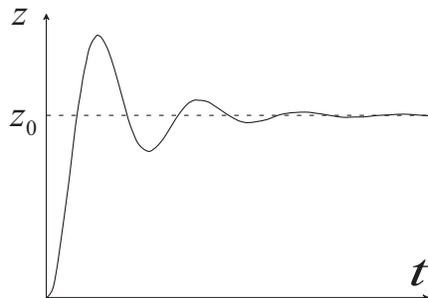


Abbildung 2.14: Sprungantwort

Die Steigung von  $F_F$  in Abb. 2.13 entspricht der Federkonstanten  $k$ . Damit kann aus der Abbildung unmittelbar entnommen werden, dass bei einer zu geringen Federsteifigkeit kein Schnittpunkt existiert. Es ergibt sich ein insta-

biles System, bei dem die Auslenkung  $z$  erst durch den Kontakt mit der Probe begrenzt wird. Ähnliches Verhalten ist zu erwarten wenn die Auslenkung  $z$  den Wert  $z_1$  übersteigt, da jenseits von  $z_1$  die durch die Probe bewirkte Kraft größer als die Federkraft ist. Dieser Effekt wird in der Kraftsondenmikroskopie mit dem englischen Begriff *jump to contact* bezeichnet.

Bei Betrieb des EFM im Oszillationsmodus (Abb. 2.9) wird der Federballen zusätzlich mit einer Kraft  $F_0 = A_0 \sin(\omega t)$  angeregt (Abb. 2.11). Es soll der stationäre Schwingvorgang ohne Berücksichtigung der Einschwingphase untersucht werden. Hierfür wird zunächst die Kraftfunktion (Abb. 2.12) in eine Taylorreihe entwickelt [75]. Des Weiteren wird angenommen, dass die Schwingungsamplitude derart klein ist, dass die Reihe ohne großen Fehler nach dem ersten Term abgebrochen werden kann. Im Arbeitspunkt  $z_A$  gilt damit

$$F_S(z) \approx F_S(z_A) + \left. \frac{\partial F_S}{\partial z} \right|_{z_A} (z - z_A) = F_S(z_A) - k_S (z - z_A), \quad (2.14)$$

was einer Linearisierung im Arbeitspunkt entspricht (Abb. 2.15) [85].

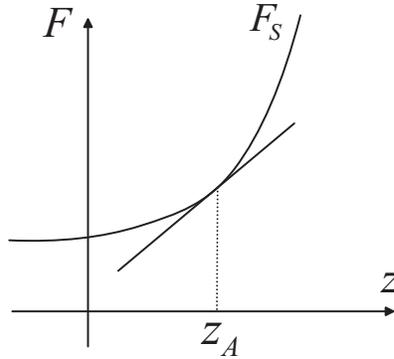


Abbildung 2.15: Linearisierung im Arbeitspunkt

Einsetzen von (2.14) in (2.12) und Herausstreichen der konstanten Terme führt mit  $F_0 = 0$  auf die homogene Schwingungsgleichung

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} + d \frac{dz}{dt} + (k + k_S) z = 0 \quad (2.15)$$

mit der Resonanzfrequenz

$$\omega_e = \sqrt{\frac{k + k_S}{m} - \left(\frac{d}{2m}\right)^2}. \quad (2.16)$$

Unter Vernachlässigung der Dämpfung  $d$  und durch Entwicklung der Wurzel in eine Reihe, wobei nach dem zweiten Term abgebrochen wird, folgt die

Frequenzverschiebung

$$\Delta\omega = \frac{\omega_0}{2k} k_S = -\frac{\omega_0}{2k} \left. \frac{\partial F_S}{\partial z} \right|_{z_A}, \quad (2.17)$$

mit der Resonanzfrequenz

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.18)$$

des ungedämpften und unbelasteten Schwingers [64]. Durch die Wechselwirkungskraft zwischen Spitze und Probe ergibt sich also eine zum unbelasteten Fall verschobene Resonanzfrequenz, was auch durch die Ersatzanordnung in Abb. 2.16 zum Ausdruck kommt [11].

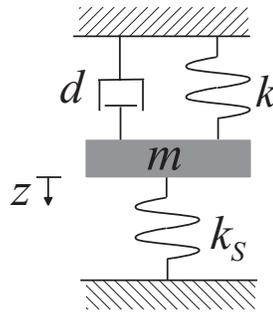


Abbildung 2.16: Ersatzanordnung des belasteten EFM

Aus den Gleichungen (2.16) bzw. (2.17) und (2.14) folgt, dass durch Auswertung der Resonanzfrequenz nicht die Kraft selber, sondern nur ihr Gradient im Punkt  $z_A$  ermittelt werden kann [11] [80]. Im Gegensatz zum unbewegten kontaktlosen Modus, bei dem die Messgröße die Auslenkung ist, kann bei Messung der Resonanzfrequenz im Oszillationsmodus also nicht direkt auf die Größe der Kraft geschlossen werden.

Auf die Berücksichtigung des nicht linearen Funktionsverlaufs  $F_S(z)$  soll im Rahmen dieser grundlegenden Beschreibung der Funktionsweise nicht näher eingegangen werden. Es sei aber erwähnt, dass dies die Schwingungsanalyse wesentlich verkompliziert, da nicht mehr von sinusförmigen Schwingungen ausgegangen werden kann [80] [92].

Neben der zuvor beschriebenen Messung des Kraftgradienten hat sich in den letzten Jahren eine weitere Messmethode etabliert, die eine sehr genaue Bestimmung des Oberflächenpotenzials ermöglicht. Bei der sogenannten Kelvin Kraft Mikroskopie wird zwischen Federbalken und einem Bezugspunkt auf der Probe eine Spannung

$$U = U_{dc} + U_{ac} \cos(\omega t) \quad (2.19)$$

angelegt. Mit dem Spannungsabfall  $U_S$  innerhalb der Probe ist die Spannung zwischen der Spitze und dem ihr nächsten Punkt auf der Probe durch

$$U_{SP} = U_{dc} + U_{ac} \cos(\omega t) - U_S \quad (2.20)$$

gegeben. Damit wird die zwischen Probe und Federbalken wirkende elektrostatische Kraft zu

$$F = \frac{1}{2} \frac{\partial C(z)}{\partial z} U_{SP}^2, \quad (2.21)$$

wobei  $C(z)$  die abstandsabhängige Kapazität ist [64] [60]. Durch Einsetzen der Spannung (2.19) in (2.21) ergeben sich für die Kraft ein zeitlich konstanter, ein mit  $\omega$  und ein mit  $2\omega$  zeitlich veränderlicher Term. Im Rahmen der Kelvin Kraft Mikroskopie wird nur der mit  $\omega$  oszillierende Term

$$F = \frac{\partial C(z)}{\partial z} (U_{dc} - U_s) U_{ac} \quad (2.22)$$

ausgewertet. Während der Messung wird durch Regelung der Spannungsamplitude  $U_{dc}$  diese Kraft zum Verschwinden gebracht. Aus (2.22) folgt, dass dann der Spannungsabfall  $U_S$  in der Probe der anliegenden Gleichspannung  $U_{dc}$  entsprechen muss. Mit Hilfe dieser Messmethode lassen sich Oberflächenpotenziale mit großer Genauigkeit bestimmen, da die Messung nicht indirekt über den Kraftgradienten erfolgt.

Die zuvor erläuterten Modelle beschreiben das Verhalten des EFM auf Basis konzentrierter Elemente. Aufgrund ihrer guten Handhabung kommen derartige Modelle oft zum Einsatz [11] [80]. Für eine genauere Analyse sind sie jedoch im Allgemeinen zu ungenau. So ist eine quantitative Untersuchung des Einflusses des Federbalkens auf die Messung kaum möglich, da hierfür Ansätze benötigt werden welche eine örtliche Auflösung ermöglichen. Zu einer besseren Auflösung gelangt man durch Einsatz feinerer Modelle [65]. So kann der Federbalken mit Hilfe der Balkentheorie modelliert werden [117]. Dieser Ansatz ermöglicht die Beschreibung ortsabhängiger Auslenkungen und Kraftverteilungen (Abb. 2.17), wobei durch Erweiterung des Balkenmodells neben der Auslenkung des Balkens auch seine Torsion berücksichtigt werden kann.



Abbildung 2.17: EFM als Balkenmodell

Eine weitere Verfeinerung des Modells ergibt sich durch die dreidimensionale kontinuumsmechanische Beschreibung des Federbalkens und der Spitze [30]. Der Nachteil dieser Modelle ist der im Vergleich zum Modell der

konzentrierten Elemente teilweise erheblich höhere Rechenaufwand. Je nach Anwendungsfall muss der Benutzer entscheiden welches Modell für ihn am geeignetsten ist. Spätestens beim Einsatz kontinuumsmechanischer Modelle ist eine analytische Berechnung nicht mehr möglich. In der Praxis müssen daher numerische Verfahren verwendet werden, wobei hier meist die Methode der finiten Elemente (FEM) zum Einsatz kommt [89] [117].

Im Rahmen der Kooperation, in der diese Arbeit entstanden ist, wurde vom Institut für Baumechanik und numerische Mechanik (ibnm), Hannover, ein mechanisches Modell des EFM entwickelt und implementiert [51]. Dieses Modell verwendet für die mechanische Beschreibung des Bereichs der Spitze und des vorderen Teils des Federbalkens eine kontinuumsmechanische Beschreibung. Für den Hauptteil des Federbalkens werden Balkenelemente mit einem zusätzlichem Torsionsfreiheitsgrad verwendet. Zur numerischen Lösung kommt in beiden Bereichen die FEM zum Einsatz.

Auch auf elektrischer Seite hat die Zusammenfassung der elektrischen Eigenschaften in einer Kapazität  $\frac{\partial C(z)}{\partial z}$  den Nachteil, dass die Berücksichtigung räumlich verteilter Störeinflüsse kompliziert ist. Mit derartigen Modellen kann daher die direkte Kopplung zwischen Federbalken und Probe nur ungenau aus der Messung extrahiert werden [9]. Ähnlich verhält es sich bei dem in [19] beschriebenen Modell eines elektromechanischen Oszillators. Obwohl die elektrische Kapazität hier nicht explizit in den Rechnungen enthalten ist wird dennoch angenommen, dass sich das elektrische Feld innerhalb der Anordnung wie das Feld innerhalb eines idealen Plattenkondensators verhält. Diese Näherung ist sicherlich nur für kleine Oszillationsamplituden und ausreichend große Elektroden gültig. Dies gilt auch für das in [23] beschriebene Modell eines elektromechanischen Aktors. Bei einem EFM ist zu erwarten, dass sowohl aufgrund der Unebenheit der Probe als auch ungleichmäßiger Potenzial- und Ladungsverteilungen die Annahme derart idealisierter Bedingungen zu großen Fehlern führen würde. Da dies ein prinzipielles Problem der ordnungsreduzierten Modellierung des EFM ist, kann eine Verbesserung nur durch Darstellung des EFM als räumliches Modell erfolgen, was einer Beschreibung des Verhaltens mit Hilfe der zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen entspricht. Zwar muss auch hier im Verlauf der Rechnung eine Ordnungsreduktion durchgeführt werden, jedoch erfolgt diese nicht zu Beginn der Analyse durch die Wahl des Modells. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein solches Modell entwickelt und implementiert. Zur Berechnung der elektrostatischen Kräfte wird dabei zunächst das elektrische Feld innerhalb der Anordnung bestimmt. Da der größte Teil der Wechselwirkung zwischen Probe und EFM über die Spitze statt findet, soll das Modell hier besonders fein aufgelöst werden. Auch kann aufgrund der hohen Feldstärken nicht lineares Materialverhalten einen Einfluss haben. Daher wird für diesen Bereich die Methode der finiten Elemente (FEM) verwendet. Da sich die Maße der Spitze und des Federbalkens im Allgemeinen um viele Größenordnungen unterscheiden, handelt es sich bei dem gesamten EFM um ein typisches Mul-

---

tiskalenproblem. Aus diesem Grund wird zur numerischen Berechnung die FEM mit der Methode der Randelemente gekoppelt. Hierdurch lassen sich die verschiedenen Größenordnungen und offenen Ränder gut einbeziehen. Da die Berechnung der elektrostatischen Felder und Kräfte zentrale Thema dieser Arbeit sind und für ihre Beschreibung einige theoretische Grundlagen benötigt werden, soll an dieser Stelle auf eine genauere Beschreibung des elektrostatischen Modells verzichtet werden. Vielmehr werden im Verlauf der nächsten Kapitel zunächst die theoretischen Grundlagen behandelt. Darauf aufbauend erfolgt die Entwicklung des elektrostatischen Modells an späterer Stelle.

## Kapitel 3

# Theoretische Grundlagen

### 3.1 Elektrostatik

Wie in Kapitel 2 beschrieben wurde dient der elektrische Teil des in dieser Arbeit verwendeten Modells für das EFM der Berechnung elektrostatischer Kräfte. Historisch wurden die ersten quantitativen Aussagen zur Kraftwirkung im elektrostatischen Feld von Coulomb gemacht. Er fand heraus, dass zwei Ladungen  $Q_1$  und  $Q_2$  an den Orten  $\mathbf{r}_1$  und  $\mathbf{r}_2$  aufeinander die Kraft

$$\mathbf{F} = \frac{Q_1 Q_2 (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{4\pi\epsilon_0 \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3} \quad (3.1)$$

ausüben, wobei sich Ladungen gleichen Vorzeichens abstoßen, während sie sich bei entgegengesetztem Vorzeichen anziehen. Hierbei ist  $\epsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante des Vakuums. Die von Coulomb beschriebene Kraftwirkung macht keinerlei Aussage über den Übertragungsweg. Daher wird diese Betrachtungsweise auch als das Fernwirkungsprinzip bezeichnet [101] [71]. Aus der Kraftwirkung

$$d\mathbf{F} = \frac{dQ_1 dQ_2 (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{4\pi\epsilon_0 \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3} = \frac{\rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) d\tilde{V}_1 d\tilde{V}_2}{4\pi\epsilon_0 \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3} \quad (3.2)$$

zwischen zwei infinitesimal kleinen Ladungen  $dQ_1$  und  $dQ_2$  ergibt sich durch Integration die Kraftwirkung

$$\mathbf{F} = \int_{V_1} \int_{V_2} \frac{\rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) d\tilde{V}_1 d\tilde{V}_2}{4\pi\epsilon_0 \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3} \quad (3.3)$$

zwischen zwei geladenen Volumen  $V_1$  und  $V_2$  [12]. Dies ist skizzenhaft in Abbildung 3.1 dargestellt. Bei elektrisch leitfähigen Materialien ist die Ladungsverteilung jedoch im Allgemeinen nicht bekannt. Aufgrund der Leitfähigkeit können die Ladungsträger wandern und werden sich je nach den

wirkenden elektrostatischen Kräften positionieren. Daher ist eine Beschreibung der Kraftwirkung des EFM über die Ladungen oft nicht zweckmäßig.

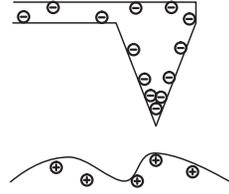


Abbildung 3.1: Skizze der Ladungsverteilung im EFM

Durch Normierung der Kraftwirkung (3.1) auf die Ladung  $Q_2$  ergibt sich eine nur noch von  $Q_1$  und dem vektoriellen Abstand  $\mathbf{r} - \mathbf{r}_1$  abhängige Funktion

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{Q_1 (\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)}{4\pi\epsilon_0 \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1\|^3}, \quad (3.4)$$

die als eine von  $Q_1$  im gesamten Raum erzeugte elektrische Feldverteilung gedeutet werden kann [71]. Hiermit ergibt sich die Kraftwirkung auf eine Ladung  $q$  am Ort  $\mathbf{r}$  nach Gleichung (3.1) zu

$$\mathbf{F}_q = q \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Da für das elektrostatische Feld (3.4)

$$\text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \quad (3.6)$$

gilt, kann es auch über den Gradienten eines Potenzialfeldes

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\text{grad } \varphi(\mathbf{r}) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}) \quad (3.7)$$

ausgedrückt werden. Damit folgt für das Potenzialfeld

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{Q_1}{4\pi\epsilon_0 \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1\|}, \quad (3.8)$$

wobei angenommen wurde, dass das Potenzial im Unendlichen verschwindet. Da innerhalb des leitfähigen Federbalkens keine elektrostatische Kraft existiert, muss das Potenzial dort konstant sein. Außerdem kann mit Hilfe der Maxwell'schen Gleichung [99]

$$\rho(\mathbf{r}) = \text{div } \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r})] \quad (3.9)$$

eine von der Ladungsverteilung  $\rho(\mathbf{r})$  abhängige elektrische Erregung  $\mathbf{D}$  des Raumes definiert werden. Das elektrische Feld folgt jetzt also nicht mehr aus der vom Aufpunkt entfernten Ladung, sondern aus der elektrischen Erregung am selben Ort. Daher wird diese Anschauung auch als Nahwirkungsprinzip

bezeichnet [71]. Mit Hilfe der Beziehungen (3.7) und (3.9) ergibt sich die Grundgleichung für das elektrostatische Potenzial

$$\nabla [\varepsilon(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r})] = -\rho(\mathbf{r}). \quad (3.10)$$

Ähnlich wie beim Federbalken können auch die Ladungen in der Probe durch Vorgaben des Potenzials ersetzt werden. Damit wird in unserem Modell  $\rho(\mathbf{r}) \equiv 0$ . Die eigentlichen Ursachen des Feldes, die Ladungen, können also hinter den Vorgaben für das Potenzial versteckt werden. Es ergibt sich das Modell des EFM nach Abbildung 3.2. Hierbei müssen auf dem gesamten Rand des Berechnungsbereichs Vorgaben für das Potenzial gemacht werden. Grundsätzlich gibt es zwei Arten solcher Randbedingungen. Die erste Art, die Dirichletrandbedingung (durchgezogene Linien in Abb. 3.2), gibt das Potenzial auf dem Rand  $\Gamma_D$  vor. Die zweite Art, die Neumannrandbedingung (gestrichelte Linien in Abb. 3.2), legt die Ableitung in Richtung der Normalen des Randes  $\Gamma_N$  fest. Ein elektrostatisches Problem ist also durch die Ladungsverteilung  $\rho(\mathbf{r})$  im Berechnungsbereich und die Randbedingungen

$$\varphi(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \text{ auf } \Gamma_D \quad (3.11)$$

und

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{r})}{\partial n} := \mathbf{n} \nabla \varphi(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \text{ auf } \Gamma_N \quad (3.12)$$

festgelegt. Die Berechnung des Potenzials kann durch Lösung der Poissongleichung (3.10) unter Berücksichtigung der Randbedingungen erfolgen [59] [71] [99] [8] [118].

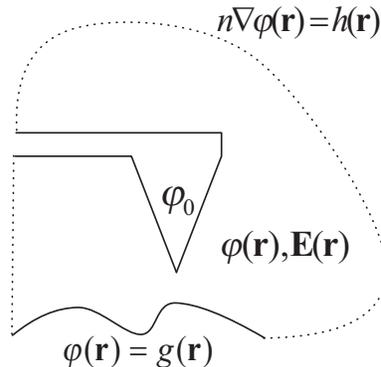


Abbildung 3.2: Skizze der Potenzialverteilung im EFM

Es sei noch angemerkt, dass die Anwendung der Poissongleichung zur Lösung eines elektrotechnischen Problems immer eine Approximation ist. So kann (3.10) aus den vollständigen Maxwell'schen Gleichungen unter Verwendung

---

der elektrostatischen Näherung abgeleitet werden [71]. Hierbei stellt sich die Frage nach der Gültigkeit für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Phänomene. Zunächst mag es verwunderlich erscheinen, dass elektrostatische Verhältnisse zu Grunde gelegt werden, da der Federbalken des betrachteten EFM-Modells je nach Anwendung Schwingungen mit bis zu 100 kHz vollführt. Wendet man auf diese Anordnung die vollständigen Maxwellschen Gleichungen an, ergeben sich bei jeder Bewegung des Federbalkens Ausgleichsvorgänge, die sich mit endlicher Geschwindigkeit, der Lichtgeschwindigkeit, ausbreiten. Da diese Ausgleichsvorgänge jedoch in sehr viel kürzerer Zeit ablaufen als sich der Federbalken nennenswert bewegt, kann die Bewegung des Federbalkens bei der Berechnung des elektromagnetischen Feldes vernachlässigt werden. Diese elektrostatische Näherung entspricht der Annahme, dass die elektromagnetischen Ausgleichsvorgänge in unendlich kurzer Zeit stattfinden. Aufgrund der Verhältnisse kann davon ausgegangen werden, dass hierdurch kein nennenswerter Fehler gemacht wird.

## 3.2 Energie im elektrostatischen Feld

Zur Herleitung eines Ausdrucks für die in einer Anordnung von  $n$  Punktladungen gespeicherte Energie geht man zunächst vom ladungsfreien und damit energiefreien Raum aus. Nacheinander werden dann die Ladungen  $Q_i$  an die Orte  $\mathbf{r}_i$  gebracht [8]. Zum Transport von  $Q_1$  nach  $\mathbf{r}_1$  ist keine Arbeit erforderlich, da sich noch keine andere Ladung im Raum befindet und damit keine Kraft benötigt wird. Für  $Q_2$  ergibt sich mit

$$W = \int_{\infty}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{F} ds, \quad (3.13)$$

der Coulombkraft (3.1) und  $r_{12} = \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|$  die Arbeit

$$W = -\frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^{r_{12}} \frac{ds}{s^2} = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \quad (3.14)$$

Hierbei drückt das negative Vorzeichen aus, dass die mechanische Kraft  $\mathbf{F}$  der Coulombkraft entgegengesetzt ist. Für  $n$  Ladungen wird die Arbeit

$$W = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{Q_1 Q_2}{r_{12}} + \frac{Q_1 Q_3}{r_{13}} + \frac{Q_2 Q_3}{r_{23}} + \dots \right) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=i, j \neq i}^n Q_j \varphi_i(\mathbf{r}_j), \quad (3.15)$$

wobei beim letzten Ausdruck Gleichung (3.8) verwendet wurde, um die Potentiale  $\varphi_i$  der bereits im Raum befindlichen Ladungen zu berechnen. Durch den Faktor  $1/2$  wird berücksichtigt, dass beim Einbringen einer Ladung nur die bereits im Raum befindlichen Ladungen eine Kraft bewirken. Beim Übergang zu infinitesimal kleinen Ladungen  $dQ = \rho dV$  wird die Energie [88] einer kontinuierlichen Ladungsdichteverteilung  $\rho(\mathbf{r})$  zu

$$W = \frac{1}{2} \int_V \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d\tilde{V}. \quad (3.16)$$

Unter Verwendung der Maxwell'schen Beziehung (3.9) und der Gleichung (3.7) folgt für die Energie

$$W = -\frac{1}{2} \int_V \nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r})] \varphi(\mathbf{r}) d\tilde{V}, \quad (3.17)$$

was sich mit Hilfe der Produktregel und des Gauß'schen Integralsatzes weiter zu

$$W = \frac{1}{2} \int_V \epsilon(\mathbf{r}) (\nabla \varphi)^2 d\tilde{V} - \frac{1}{2} \oint_A \epsilon(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r}) d\tilde{\mathbf{A}} \quad (3.18)$$

umformen lässt. Da (3.16) die Ausgangsgleichung für die Herleitung war, muss das Volumintegral alle Ladungen beinhalten. Durch Ausdehnung des Integrals über den unendlichen Raum kann das Oberflächenintegral über  $A$  zum Verschwinden gebracht werden. Die im elektrostatischen Feld gespeicherte Energie wird damit zu

$$W = \frac{1}{2} \int_V \epsilon(\mathbf{r}) (\nabla \varphi)^2 d\tilde{V} = \frac{1}{2} \int_V \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}^2 d\tilde{V} = \frac{1}{2} \int_V \mathbf{E} \mathbf{D} d\tilde{V}. \quad (3.19)$$

### 3.3 Die Lagrangefunktion der Elektrostatik

In der Mechanik gehören Energieprinzipien zu den Standards [37]. Sie ermöglichen eine sehr anschauliche Lösung von Problemen über das Prinzip der virtuellen Verschiebung. Hierfür müssen die bei einer virtuellen Verschiebung auftretenden Energieänderungen und die verrichteten Arbeiten der von außen angreifenden Kräften bilanziert werden. Leider ist diese Anschaulichkeit nicht auf die Elektrostatik übertragbar, da hier zum Abbilden der Randbedingungen Ladungen außerhalb des Berechnungsraumes benötigt werden. Aus diesem Grunde ist das physikalisch anschauliche Aufstellen einer Energiebilanz schwierig. Daher sind aus der elektrostatischen Energie abgeleitete Variationsformulierungen der Elektrostatik in der Literatur schwer zu finden. Statt dessen wird oft die Methode des gewichteten Residuums [70] [56] verwendet, die zwar zu den gleichen Ergebnissen kommt, aber aufgrund ihrer mathematischen Prägung keinen direkten Bezug zur Systemenergie herstellt. In anderen Büchern wird zwar die Minimierung eines Energiefunktional zu Grunde gelegt [59], aber auch hier wird meist auf seinen Zusammenhang mit der Energie nicht oder nur am Rande eingegangen. In anderen, mathematisch geprägten Veröffentlichungen [79] kann zwar die Herleitung des verwendeten Funktional gefunden werden, jedoch wird auch hier naturgemäß nicht physikalisch argumentiert. Im Folgenden wird aus der elektrostatischen Energie ein Lagrangefunktional abgeleitet aus dem im weiteren Verlauf mit Hilfe des Hamiltonschen Prinzips (2.5) ein Variationsansatz für die Elektrostatik hergeleitet wird. Ein Vorteil dieses physikalischen Ansatzes ist seine größere Nähe zum Erfahrungsbereich des im Allgemeinen physikalisch denkenden Ingenieurs. Auch ermöglicht der Ansatz auf direktem Wege eine physikalische Bewertung numerisch berechneter Lösungen, da bekannt ist, dass das Lagrangefunktional für die exakte Lösung seinen minimalen Wert annimmt.

Die Lagrangefunktion der Elektrostatik folgt durch Verwendung der potenziellen elektrostatischen Energie (3.16) in (2.1). Da die kinetische Energie  $W_K$  für den elektrostatischen Fall verschwindet, ergibt sich

$$L(\varphi) = -W_P = -\frac{1}{2} \int_V \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d\tilde{V}. \quad (3.20)$$

Durch Einsetzen der Poissongleichung (3.10) gelangt man zum Ausdruck

$$L(\varphi) = -\frac{1}{2} \int_V [\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) + 2\rho] \varphi \tilde{V} = -\frac{1}{2} \int_V \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) \varphi d\tilde{V} - \int_V \rho \varphi d\tilde{V}, \quad (3.21)$$

was der Formulierung in [79] entspricht. Zur Einbindung der Randbedingungen (3.11) und (3.12) wird angenommen, dass eine weitere Funktion  $\varphi_0(\mathbf{r})$  existiert, die sowohl die Dirichletschen als auch die Neumannschen Randbe-

dingungen erfüllt. Hiermit lässt sich eine Funktion

$$v(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \varphi_0(\mathbf{r}) \quad (3.22)$$

definieren, welche nach den Voraussetzungen auf  $\Gamma_D$  verschwinden muss. Laut (2.5) muss zusätzlich die Variation von (3.21) verschwinden, wenn die exakte Lösung eingesetzt wird. Die Lösung kann daher durch Variation von  $v$  gefunden werden, wobei  $\varphi_0$  konstant gehalten werden soll. Da die Funktion  $v$  ein elektrostatisches Problem beschreibt, muss

$$-\nabla(\varepsilon\nabla v) = \rho_v \quad (3.23)$$

mit

$$\rho_v = \rho + \nabla(\varepsilon\nabla\varphi_0) \quad (3.24)$$

gelten. Damit ist die Lagrangefunktion von  $v$  auf dem Berechnungsgebiet  $\Omega$

$$L(v) = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} \nabla(\varepsilon\nabla v) v \, d\Omega - \int_{\Omega} v \rho_v \, d\Omega = -\frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla v), v \rangle - \langle \rho_v, v \rangle. \quad (3.25)$$

Hier wurde zur Vereinfachung der Schreibweise das Skalarprodukt

$$\langle u, w \rangle = \int_{\Omega} uw \, d\Omega \quad (3.26)$$

eingeführt. Durch Einsetzen von (3.22) und (3.24) und Trennung von  $\varphi$  und  $\varphi_0$  erhält man

$$\begin{aligned} L(\varphi, \varphi_0) &= -\frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi), \varphi \rangle - \langle \varphi, \rho \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi), \varphi_0 \rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi_0), \varphi \rangle + \langle \varphi_0, \rho \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi_0), \varphi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.27)$$

wobei mit Hilfe des Gaußschen Satzes

$$\frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi), \varphi_0 \rangle - \frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi_0), \varphi \rangle = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_D \cup \Gamma_N} \left( \varphi_0 \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial n} - \varphi \varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial n} \right) d\Gamma \quad (3.28)$$

gesetzt werden kann. Auf  $\Gamma_D$  sind die Werte der Funktionen  $\varphi$  und  $\varphi_0$  bekannt, während auf  $\Gamma_N$  ihre Normalenableitungen gegeben sind. Daher ist es sinnvoll, das Randintegral in die beiden Anteile über  $\Gamma_D$  und  $\Gamma_N$  zu zerlegen. Damit geht das Randintegral (3.28) durch Einsetzen der Randbedingungen (3.11) und (3.12) in

$$\frac{1}{2} \int_{\Gamma_D} \left( g \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial n} - g \varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial n} \right) d\Gamma + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_N} (\varphi_0 \varepsilon h - \varphi \varepsilon h) d\Gamma \quad (3.29)$$

über. Die Verwendung von (3.29) in (3.27) führt schließlich auf den Ausdruck

$$\begin{aligned} L(\varphi, \varphi_0) &= \quad (3.30) \\ &- \frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi), \varphi \rangle - \langle \varphi, \rho \rangle + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_D} g \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial n} d\Gamma - \frac{1}{2} \int_{\Gamma_N} h \varepsilon \varphi d\Gamma \\ &+ \frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon\nabla\varphi_0), \varphi_0 \rangle + \langle \varphi_0, \rho \rangle - \frac{1}{2} \int_{\Gamma_D} g \varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial n} d\Gamma + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_N} h \varepsilon \varphi_0 d\Gamma. \end{aligned}$$

Da laut der oben gemachten Voraussetzung  $\varphi_0$  während der Variation konstant gehalten wird, bleiben auch die letzten vier Summenterme in (3.30) konstant und müssen daher zur Minimierung des Funktionals (3.25) nicht weiter betrachtet werden. Die Lösung der Poissongleichung mit Randbedingungen kann also durch Minimierung des neuen Funktionals

$$J(\varphi) = \quad (3.31)$$

$$- \frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon \nabla \varphi), \varphi \rangle - \langle \varphi, \rho \rangle + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_D} g \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial n} d\Gamma - \frac{1}{2} \int_{\Gamma_N} h \varepsilon \varphi d\Gamma$$

erfolgen. Aufgrund der im Allgemeinen unbekannt konstanten Anteile in (3.30) kann von  $J(\varphi)$  aber nicht auf den tatsächlichen Wert des Lagrangefunktionals  $L(\varphi, \varphi_0)$  geschlossen werden. Mit dem Gaußschen Satz folgt

$$-\frac{1}{2} \langle \nabla(\varepsilon \nabla \varphi), \varphi \rangle = \frac{1}{2} \langle \varepsilon \nabla \varphi, \nabla \varphi \rangle - \frac{1}{2} \int_{\Gamma_D \cup \Gamma_N} \varphi \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial n} d\Gamma. \quad (3.32)$$

Die Verwendung von (3.32) in (3.31) und Einsetzen der Randbedingungen auf  $\Gamma_D$  bzw.  $\Gamma_N$  führt auf

$$J(\varphi) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon (\nabla \varphi)^2 d\Omega - \int_{\Omega} \varphi \rho d\Omega - \int_{\Gamma_N} h \varepsilon \varphi d\Gamma, \quad (3.33)$$

wobei sich die Randintegrale auf  $\Gamma_D$  gegenseitig auslöschen während sie sich auf  $\Gamma_N$  verstärken. Es fällt auf, dass die Dirichletschen Randbedingungen aus der Formulierung verschwunden sind. Daher darf die Lösungsfunktion  $\varphi$  nur in der Menge der Funktionen, die die Dirichletschen Randbedingungen erfüllen, gesucht werden. Damit sind die Dirichletschen Randbedingungen immer exakt erfüllt und werden daher auch als erzwungene Randbedingungen bezeichnet. Dagegen sind die Neumannschen als sogenannte natürliche Randbedingungen des Funktionals noch in der Formulierung enthalten. Aus diesem Grunde dürfen bei der Suche nach der Lösungsfunktion  $\varphi$  auch Funktionen zugelassen werden, die die Neumannschen Randbedingungen nicht zwingend erfüllen. Dies hat insbesondere bei der numerischen Anwendung der Gleichung (3.33) zur Bestimmung von  $\varphi$  die Folge, dass die Neumannschen Randbedingungen im Allgemeinen nur näherungsweise erfüllt werden.

### 3.4 Das Prinzip der virtuellen Verschiebung

Die Erhaltung der Energie und des Impulses gehören zu den grundlegenden Prinzipien der Physik. Innerhalb eines Systems, über dessen Grenzen weder Energie noch Impuls transportiert werden, bleiben sowohl die Energie als auch der Impuls konstant. Innerhalb des Systems können aber Wechselwirkungen stattfinden, indem verschiedene Arten von Energie beziehungsweise Impuls ineinander umgewandelt werden. Da in mikroelektromechanischen Systemen mechanische Phänomene mit elektrischen wechselwirken, müssen zunächst sowohl mechanische als auch elektrische Energien und Impulse berücksichtigt werden. Aufgrund des wegen der vergleichsweise Langsamkeit der mechanischen Vorgänge vernachlässigbaren Impulses des elektromagnetischen Feldes, kann hier jedoch eine elektrostatische Näherung verwendet werden (vgl. Kap. 3.1). Die Energieänderung [31] eines Systems von  $n$  geladenen Körpern, die über ihr Feld wechselwirken, wird damit zu

$$\delta W = \mathbf{v}_1 \delta \mathbf{p}_1 + \mathbf{v}_2 \delta \mathbf{p}_2 + \dots + \mathbf{v}_n \delta \mathbf{p}_n - \mathbf{F}_1 \delta \mathbf{s}_1 - \mathbf{F}_2 \delta \mathbf{s}_2 - \dots - \mathbf{F}_n \delta \mathbf{s}_n = 0, \quad (3.34)$$

wobei  $\mathbf{v}_i$  die Geschwindigkeiten der Körper,  $\mathbf{F}_i$  die auf sie wirkenden Feldkräfte,  $\delta \mathbf{p}_i$  ihre Impulsänderungen und  $\delta \mathbf{s}_i$  ihre örtlichen Verschiebungen sind. Die Summe der  $\mathbf{v}_i \delta \mathbf{p}_i$  stellt die Bewegungsenergie dar, während die Summe der  $\mathbf{F}_i \delta \mathbf{s}_i$  als Verschiebungsenergie bezeichnet wird. Wie bereits in Kapitel 2.2 beschrieben wurde, erfolgt die MEMS-Modellierung im Rahmen dieser Arbeit durch getrennte Betrachtung des elektrischen und des mechanischen Teils. Der Vektor  $\mathbf{F}_i$  in (3.34) ist die auf den  $i$ -ten Körper wirkende Gesamtkraft. Durch Aufteilung der Gesamtenergieänderung  $\delta W$  in einen mechanischen Anteil  $\delta W_m$  und einen elektrischen Anteil  $\delta W_e$  kann auch (3.34) in einen mechanischen und einen elektrischen Anteil zerlegt werden. Da die Bewegungsenergie wegen der statischen Näherung ( $\mathbf{v}_i = 0$ ) verschwindet, ergibt sich für den elektrischen Anteil

$$\delta W_e = -\mathbf{F}_1 \delta \mathbf{s}_1 - \mathbf{F}^e \delta \mathbf{s}_2 - \dots - \mathbf{F}_n \delta \mathbf{s}_n. \quad (3.35)$$

Sind die  $\delta \mathbf{s}_i$  voneinander unabhängig, lässt sich jeder Körper einzeln verschieben, während alle anderen Körper fixiert sind. Damit ergibt sich für den  $i$ -ten Körper

$$\delta W = -\mathbf{F}_i \delta \mathbf{s}_i, \quad (3.36)$$

wobei zur Vereinfachung der Schreibweise auf den Index  $e$  verzichtet wurde, da ab jetzt ausschließlich die elektrischen Energien und Kräfte betrachtet werden. Die Gleichung (3.36) soll nun zur Berechnung der Kraftwirkung auf die Spitze eines EFM angewendet werden (vgl. Abbildung 3.3).

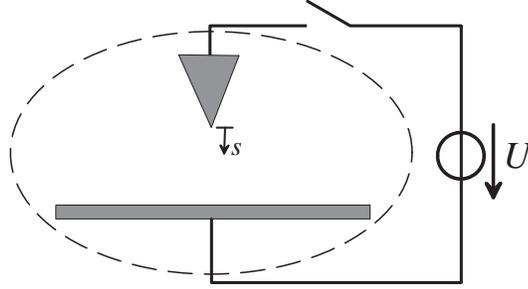


Abbildung 3.3: Spitze eines EFM über Probe

Nach dem Anlegen der Spannung  $U$  zwischen Spitze und Probe wird hierfür zunächst der Schalter geöffnet. Hierdurch wird verhindert, dass bei Verschiebung der Spitze ein Ladungsaustausch und damit ein Energieaustausch mit der Quelle stattfindet. Daher entspricht die gesamte Änderung der elektrischen Energie  $\delta W$  der Energieänderung des elektrischen Feldes. Die gesamte im elektrischen Feld der Anordnung gespeicherte Energie [71] ist

$$W = W_C = \frac{1}{2}QU = \frac{1}{2}U^2C = \frac{Q^2}{2C}, \quad (3.37)$$

wobei  $Q$  die Ladung auf der Spitze und  $C$  die Kapazität der Anordnung ist. Da die Ladung auf der Spitze bei der Verschiebung konstant ist, wird die Änderung der Energie zu

$$\delta W = \frac{Q^2}{2} \delta \left( \frac{1}{C(s)} \right) = -\frac{Q^2}{2C^2(s)} \delta C(s) \approx -\frac{Q^2}{2C^2(s)} \frac{\partial C(s)}{\partial s} \delta s, \quad (3.38)$$

wobei bei der letzten Umformung die Änderung der Kapazität linearisiert wurde, was bei genügend kleinem  $\delta s$  eine gute Approximation ist. Durch Verwendung der Energieänderung (3.38) in (3.36) und Division durch  $\delta s$  folgt

$$F_s = \frac{Q^2}{2C^2(s)} \frac{\partial C(s)}{\partial s} \quad (3.39)$$

als Kraftwirkung in Richtung  $s$ . Da die Verschiebung  $\delta s$  in (3.39) nicht mehr enthalten ist, muss zur Kraftberechnung keine wirkliche Verschiebung angesetzt werden. Daher wird sie auch als *virtuelle Verschiebung* bezeichnet.

Nun soll die Kraftwirkung auf die Spitze in der Anordnung bei geschlossenem Schalter berechnet werden. Da das elektrische Feld zwischen Spitze und Probe identisch mit dem bei geöffneten Schalter ist, muss auch die Kraftwirkung unverändert sein. Bei der Anwendung des Prinzips der virtuellen Verschiebung muss aber nun die von der Quelle aufgebraachte Energie

$$\delta W_Q = UI \delta t = U \delta Q = U^2 \delta C = U^2 \frac{\partial C}{\partial s} \delta s \quad (3.40)$$

berücksichtigt werden, wobei

$$Q = CU \quad (3.41)$$

verwendet wurde [71]. Da bei der virtuellen Verschiebung nun die Spannung konstant bleibt, ergibt sich mit (3.37) die Änderung der Energie des elektrischen Feldes zu

$$\delta W_C = \frac{U^2}{2} \delta C(s) = \frac{U^2}{2} \frac{\partial C(s)}{\partial s} \delta s. \quad (3.42)$$

Die Energie der Quelle wird bei der Verschiebung um (3.40) verringert. So ist die Änderung der gesamten Systemenergie

$$\delta W = \delta W_C - \delta W_Q = -\delta W_C = -\frac{U^2}{2} \frac{\partial C(s)}{\partial s} \delta s, \quad (3.43)$$

womit durch Einsetzen in (3.36) und Herauskürzen der virtuellen Verschiebung  $\delta s$  die Kraftwirkung zu

$$F_r = \frac{U^2}{2} \frac{\partial C(s)}{\partial s} \quad (3.44)$$

wird. Durch Anwendung von (3.41) kann (3.44) leicht in (3.39) überführt werden. Wie erwartet ergibt sich also mit geöffnetem und geschlossenem Schalter die gleiche Kraft auf die Spitze. Bemerkenswert ist auch, dass bei konstanter Spannung nach (3.43) die virtuelle Energieänderung der Quelle immer genau doppelt so groß ist wie die des Feldes. Daher kann zur Berechnung der Kraftwirkung auf die Auswertung der Änderung der Quellenenergie verzichtet werden. Hierbei muss beachtet werden, dass in (3.36) das negative Vorzeichen entfällt. Für die Kraftberechnung mit anliegender Spannungsquelle kann also auch

$$\delta W_C = \mathbf{F} \delta \mathbf{s} \quad (3.45)$$

verwendet werden, wobei die Energie der Quelle implizit berücksichtigt wird. Dieser physikalisch wichtige Aspekt bleibt bei der Anwendung von (3.45) meist unerwähnt [24] [25] [67]. Einige Autoren führen an dieser Stelle neben der Energie den Begriff der Co-Energie ein [49]. Dies kann leicht zu Verwirrung führen, da der Zusammenhang zwischen Energie und Co-Energie hierbei oft nur ungenau dargelegt wird. Bei angeschlossenen Quellen wird dann für die Kraftberechnung die Co-Energie verwendet, wodurch der oben beschriebene Vorzeichenwechsel bei der Kraftberechnung bewirkt wird. Hierbei bleibt jedoch der eigentliche Zweck ihrer Einführung, nämlich die Berücksichtigung im Modell vorhandener Quellen, meist unerwähnt.

Da in den oben gemachten Ausführungen keine spezielle Funktion  $C(s)$  angenommen wurde, gelten die hergeleiteten Gleichungen für beliebige Anordnungen, die sich durch eine Spannung beschreiben lassen. Oft stellt sich

---

aber das Problem, dass für  $C(s)$  kein analytischer Ausdruck gefunden werden kann. In diesen Fällen muss mit Näherungen gearbeitet werden. Ein weiteres Problem ist, dass die beschriebene Vorgehensweise nur zur Berechnung globaler Kräfte geeignet ist. Zur Erweiterung auf lokale Kräfte wird im folgenden Kapitel eine Formel für die Kraftdichte im elektrostatischen Feld entwickelt.

### 3.5 Kraftdichte im elektrostatischen Feld

Die Anwendung von (3.36) auf ein infinitesimal kleines Volumenelement  $d\tilde{V}$ , das virtuell um den infinitesimal kleinen Vektor  $\delta\mathbf{s}(\tilde{\mathbf{r}})$  verschoben wird, führt auf die virtuelle Energieänderung

$$d(\delta W) = -\mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}) \delta\mathbf{s}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{V}. \quad (3.46)$$

Zur Berechnung der gesamten Energieänderung im Volumen  $V$  muss (3.46) über  $V$  integriert werden

$$\delta W = - \int_V \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}) \delta\mathbf{s}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{V}, \quad (3.47)$$

was einer Erweiterung der Gleichung (3.35) auf kontinuierliche Verteilungen entspricht [8]. Gelingt es nun die Änderung der elektrischen Feldenergie auf der linken Seite in die Form der rechten Seite zu bringen, so kann durch Vergleich beider Seiten auf die Kraftdichte  $\mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}})$  geschlossen werden. Durch Verwendung der elektrostatischen Feldenergie (3.19) ergibt sich unter Ausschluss weiterer Energiequellen

$$\delta \int_V \frac{1}{2} \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}^2(\mathbf{r}) d\tilde{V} = - \int_V \mathbf{f}(\mathbf{r}) \delta\mathbf{s}(\mathbf{r}) d\tilde{V}. \quad (3.48)$$

Mit (3.9) gilt

$$\delta \int_V \frac{1}{2} \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}^2(\mathbf{r}) d\tilde{V} = \delta \int_V \frac{\mathbf{D}^2(\mathbf{r})}{2\varepsilon(\mathbf{r})} d\tilde{V}. \quad (3.49)$$

Da die Grenzen des Volumenintegrals von der virtuellen Verschiebung unabhängig sind, kann es durch Hereinziehen des  $\delta$ -Operators und Anwendung der Produkt- und der Kettenregel in

$$\int_V \frac{\mathbf{D}\delta\mathbf{D}}{\varepsilon} d\tilde{V} - \int_V \frac{\mathbf{D}^2\delta\varepsilon}{2\varepsilon^2} d\tilde{V} = \int_V \mathbf{E}\delta\mathbf{D} d\tilde{V} - \int_V \frac{\mathbf{E}^2\delta\varepsilon}{2} d\tilde{V} \quad (3.50)$$

umgeformt werden. Mit Hilfe von (3.7), (3.9) und der Produktregel kann der erste Term

$$\mathbf{E}\delta\mathbf{D} = -\nabla\varphi\delta\mathbf{D} = \varphi\nabla\delta\mathbf{D} - \nabla\cdot(\varphi\delta\mathbf{D}) = \varphi\delta\rho - \nabla\cdot(\varphi\delta\mathbf{D}) \quad (3.51)$$

geschrieben werden. Damit und dem Gaußschen Satz wird (3.48) zu

$$\int_V \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \delta\varepsilon - \varphi\delta\rho \right) d\tilde{V} + \oint_A \varphi\delta\mathbf{D} d\tilde{\mathbf{A}} = \int_V \mathbf{f}\delta\mathbf{s} d\tilde{V}, \quad (3.52)$$

wobei das über die unendlich ferne Fläche auszuführende Oberflächenintegral verschwindet, da der Integrand im Unendlichen mit mindestens  $r^{-3}$  abnimmt. Auf beiden Seiten der Gleichung steht jetzt ein Volumenintegral

über  $V$ . Zum Vergleich beider Seiten müssen jedoch noch  $\delta\epsilon$  und  $\delta\rho$  durch  $\delta\mathbf{s}$  ausgedrückt werden. Hierzu betrachten wir zunächst eine durch die Kontinuitätsgleichung [71]

$$\frac{\delta\rho(\mathbf{r})}{\delta t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot (\rho(\mathbf{r}) \mathbf{v}(\mathbf{r})) \quad (3.53)$$

beschriebene zeitliche Änderung der Ladungsdichte mit der Stromdichte  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  und der Transportgeschwindigkeit  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  der Ladungsdichte. Durch Multiplikation mit  $\delta t$  gelangt man zu

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot (\rho(\mathbf{r}) \mathbf{v}(\mathbf{r})) \delta t = -\nabla \cdot (\rho(\mathbf{r}) \delta\mathbf{s}(\mathbf{r})), \quad (3.54)$$

was das physikalische Grundprinzip der Ladungserhaltung ausdrückt. Bei der Herleitung wird die zeitliche Änderung als eine reine Hilfsgröße verwendet, die im letzten Ausdruck wieder herausfällt. Dies muss auch so sein, da die virtuelle Verschiebung  $\delta\mathbf{s}(\mathbf{r})$  kein zeitlicher Prozess ist und damit keine zugehörige Zeitspanne  $\delta t$  angegeben werden kann. Unter der Annahme, dass  $\epsilon(\mathbf{r})$  eine eindeutige Funktion der Massendichte  $\varrho(\mathbf{r})$  ist, kann

$$\delta\epsilon(\mathbf{r}) = \frac{d\epsilon}{d\varrho} \delta\varrho(\mathbf{r}) = -\frac{d\epsilon}{d\varrho} \nabla \cdot (\varrho(\mathbf{r}) \delta\mathbf{s}(\mathbf{r})) \quad (3.55)$$

geschrieben werden. Beim Ausdruck auf der rechten Seite wurde analog zu den Überlegungen für die Ladungsdichte in (3.54) die Änderung der Massendichte ersetzt. Durch Einsetzen von (3.54) und (3.55) in (3.52) gelangt man zu

$$\int_V \left( -\frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\epsilon}{d\varrho} \nabla \cdot (\varrho \delta\mathbf{s}) + \varphi \nabla \cdot (\rho \delta\mathbf{s}) \right) d\tilde{V} = \int_V \mathbf{f} \delta\mathbf{s} d\tilde{V}. \quad (3.56)$$

Mit Hilfe der Produktregel gelingt es, die veränderlichen Terme aus der Divergenz herauszuziehen

$$\int_V \left( \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\epsilon}{d\varrho} \right) \varrho - \nabla \varphi \rho \right) \delta\mathbf{s} d\tilde{V} - \oint_A \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\epsilon}{d\varrho} \varrho - \varphi \rho \right) \delta\mathbf{s} d\tilde{\mathbf{A}} = \int_V \mathbf{f} \delta\mathbf{s} d\tilde{V}, \quad (3.57)$$

wobei das Oberflächenintegral aus der Anwendung des Gaußschen Satzes resultiert. Da die virtuelle Verschiebung im Unendlichen verschwinden muss, liefert das Oberflächenintegral wiederum keinen Beitrag. Durch Vergleich der Integranden beider Seiten folgt die Kraftdichte

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{E}^2(\mathbf{r})}{2} \frac{d\epsilon}{d\varrho} \right) \varrho(\mathbf{r}) - \nabla \varphi(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}). \quad (3.58)$$

Unter Verwendung des Prinzips der virtuellen Verschiebung gelingt es also tatsächlich, einen Ausdruck für die Kraftdichte im elektrostatischen Feld

herzuleiten. Zur genaueren Untersuchung der in (3.58) auftretenden Anteile wird der Gradient des elektrischen Potentials mit Hilfe von (3.7) durch das elektrische Feld ersetzt. Durch Anwendung der Produktregel auf den ersten Term

$$\nabla \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right) \varrho = \nabla \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \varrho \right) - \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \nabla \varrho \quad (3.59)$$

folgt

$$\mathbf{f} = \rho \mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \nabla \varrho + \nabla \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \varrho \right). \quad (3.60)$$

Da nach Voraussetzung  $\varepsilon$  eine eindeutige Funktion von  $\varrho$  ist, gilt

$$\nabla \varepsilon = \frac{d\varepsilon}{d\rho} \nabla \varrho \quad (3.61)$$

und  $\nabla \varrho$  kann in (3.60) ersetzt werden. Als finaler Ausdruck für die Kraftdichte ergibt sich

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \frac{\mathbf{E}^2(\mathbf{r})}{2} \nabla \varepsilon(\mathbf{r}) + \nabla \left( \frac{\mathbf{E}^2(\mathbf{r})}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \varrho(\mathbf{r}) \right). \quad (3.62)$$

Der erste Anteil ist hierbei die bereits aus Gleichung (3.5) bekannte Kraftwirkung auf freie Ladung. Der zweite Anteil ist neu und beschreibt die Kraftwirkung auf ein inhomogenes Dielektrikum. So erklärt er z.B. die Kraftwirkung auf die Dielektrikumsschichten in einem geschichteten Kondensator. Der dritte Term beschreibt eine Kraft, die bestrebt ist, die Dichte eines Dielektrikums zu verändern.

Wie bereits bei der Berechnung der Kraftwirkung auf die EFM-Spitze muss die Berücksichtigung vorhandener Quellen zu dem gleichen Ergebnis für die Kraftdichte kommen. Daher ist der Ausdruck für die Kraftdichte auch bei Anordnungen mit Quellen gültig.

Unter der Voraussetzung, dass  $\mathbf{E}$  und  $\rho$  endlich bleiben, ist die Auswertung des ersten Terms der Kraftdichte unproblematisch. Da das elektrische Feld und die Ladungsdichte jedoch an Ecken und Kanten singulär werden, kommt es an diesen Stellen auch zu singulären Werten der Kraftdichte, was zu Problemen führen kann. Der zweite Term des Kraftausdrucks wird bei sprunghaften Änderungen der Dielektrizitätskonstanten singulär. Dies ist bei der Kraftberechnung auf eine Grenzfläche zwischen zwei Materialien der Fall. Aus diesen Gründen ist Gleichung (3.62) zur Berechnung der elektrischen Kraftwirkung nur bedingt geeignet, da sie insbesondere bei numerischen Berechnungen zu großen Fehlern führen kann. Abhilfe schaffen hier die Ausführungen im nächsten Kapitel.

### 3.6 Der Maxwell'sche Spannungstensor

Bereits auf Maxwell geht die Vorstellung zurück, dass die elektrostatische Kraftdichte nach (3.62) aus einer mechanischen Verspannung des felderfüllten Raumes resultiert. In diesem aus der Kontinuumsmechanik bekannten Modell wird der Spannungszustand des Raumes durch den sogenannten Spannungstensor [30] beschrieben, der in kartesischer Darstellung die Form

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{yx} & \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{zy} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_x \\ \boldsymbol{\sigma}_y \\ \boldsymbol{\sigma}_z \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

hat. In Abbildung 3.4 sind die in ihm enthaltenen neun Spannungsgrößen an einem Würfel dargestellt, wobei aus Gründen der Übersichtlichkeit nur die Größen der zweiten Spalte des Tensors namentlich eingetragen sind.

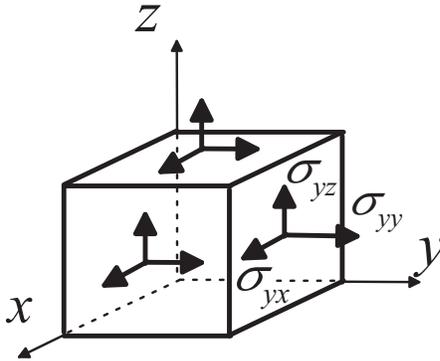
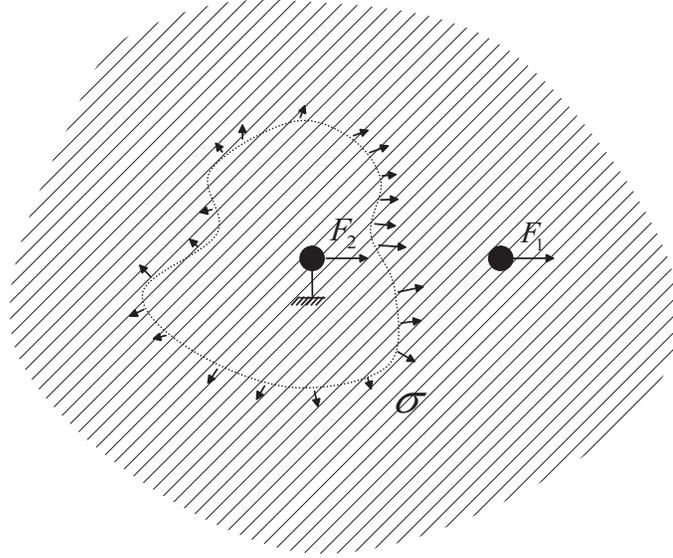


Abbildung 3.4: Spannungszustand in kartesischer Darstellung

Da der Spannungstensor (3.63) ein Funktion von  $\mathbf{r}$  ist, muss man sich den Würfel jeweils auf einen Punkt zusammengezogen denken. Der erste Index der Spannungsgrößen gibt die Richtung des Normalenvektors der Schnittfläche an, während der zweite Index die Richtung der an ihr angreifenden Spannung beschreibt. Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 3.5 zwei kugelförmige Körper in einem Medium dargestellt.

Abbildung 3.5: mechanischer Spannungszustand  $\sigma$  zwischen zwei Körpern

Aufgrund der auf den rechten Körper wirkenden Kraft  $\mathbf{F}_1$  bildet sich im Medium ein mechanischer Spannungszustand  $\sigma$  aus. Unter der Voraussetzung der Stationarität muss dieser Spannungszustand innerhalb jedes beliebigen Volumens mit den von außen angreifenden Kräften im Gleichgewicht sein. Daher gilt für das gestrichelt eingezeichnete Volumen  $V$  und seine Oberfläche  $A$  die Bedingung

$$\oint_A \sigma(\mathbf{r}) d\tilde{\mathbf{A}} = \int_V \mathbf{f}(\mathbf{r}) d\tilde{V} = \mathbf{F}_2, \quad (3.64)$$

wobei

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_x \\ f_y \\ f_z \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

die durch die mechanische Spannung bewirkte Volumenkraftdichte und  $\mathbf{F}_2$  die auf den linken Körper wirkende Kraft sind. Unter Verwendung des Gauß'schen Satzes erhält man

$$\operatorname{div} \sigma(\mathbf{r}) = \mathbf{f}(\mathbf{r}), \quad (3.66)$$

wobei

$$\operatorname{div} \sigma(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z} \\ \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

die Divergenz des Spannungstensors ist [96]. Aufgrund des Momentengleichgewichts gilt für  $\sigma(\mathbf{r})$  außerdem die Symmetriebedingung

$$\sigma(\mathbf{r}) = \sigma^T(\mathbf{r}). \quad (3.68)$$

Die Gleichungen (3.66) und (3.68) sind charakteristisch für ein mechanisches Spannungsfeld. Da der durch die elektrostatischen Felder erzeugte Spannungszustand  $\mathbf{T}(\mathbf{r})$  mechanischer Natur sein soll, muss er ebenfalls diese Gleichgewichtsbedingungen erfüllen. In Abbildung 3.6 ist der Spannungszustand für zwei ungleichnamige Ladungen im Vakuum skizziert.

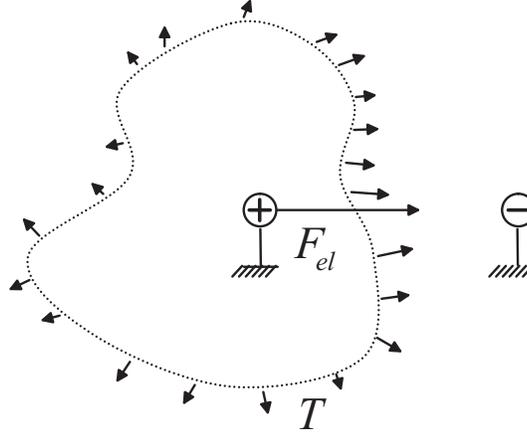


Abbildung 3.6: mechanischer Spannungszustand  $\mathbf{T}$  zwischen zwei Ladungen

Analog zu (3.66) ergibt sich mit der elektrostatischen Kraftdichte  $\mathbf{f}$  die Gleichgewichtsbedingung

$$\operatorname{div} \mathbf{T}(\mathbf{r}) = \mathbf{f}(\mathbf{r}). \quad (3.69)$$

Es muss also aus der elektrischen Feldstärke ein wegen (3.68) symmetrischer Tensor  $\mathbf{T}(\mathbf{r})$  berechnet werden, der für die Kraftdichte (3.62) die Gleichung (3.69) erfüllt. Bei komponentenweiser Betrachtung ergibt sich beispielsweise für die in  $x$ -Richtung wirkende elektrische Kraftdichte

$$f_x = \nabla \cdot \mathbf{T}_x = \frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial T_{zx}}{\partial z}. \quad (3.70)$$

Der in Richtung der  $x$ -Komponente wirkende Spannungsvektor  $T_x$  muss also so bestimmt werden, dass seine Divergenz der in Richtung der  $x$ -Komponente wirkenden Kraftdichte entspricht

$$\frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial T_{zx}}{\partial z} = \rho E_x - \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \rho \right). \quad (3.71)$$

Da der letzte Summenterm bereits als Ableitung in  $x$  gegeben ist, kann er sofort  $T_{xx}$  zugeordnet werden und zur Vereinfachung der folgenden Ausführungen kann

$$T_{xx}^* := T_{xx} - \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \rho \quad (3.72)$$

definiert werden. Mit Ausnutzung der Rotationsfreiheit (3.6) des elektrostatischen Feldes ergibt sich

$$\frac{\partial T_{xx}^*}{\partial x} + \frac{\partial T_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial T_{zx}}{\partial z} = \rho E_x - \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} \text{rot} \mathbf{E}. \quad (3.73)$$

Unter Verwendung von (3.9) und

$$E_x \nabla \cdot \mathbf{D} = \nabla \cdot (E_x \mathbf{D}) - \mathbf{D} \nabla E_x \quad (3.74)$$

erhält man die Gleichungen

$$\frac{\partial T_{xx}^*}{\partial x} = \left( E_x \frac{\partial (\varepsilon E_x)}{\partial x} - \frac{\mathbf{E}^2}{2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} - B \frac{\partial E_z}{\partial x} + C \frac{\partial E_y}{\partial x} \right), \quad (3.75)$$

$$\frac{\partial T_{yx}}{\partial y} = \left( E_x \frac{\partial (\varepsilon E_y)}{\partial y} + A \frac{\partial E_z}{\partial y} - C \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \quad (3.76)$$

und

$$\frac{\partial T_{zx}}{\partial z} = \left( E_x \frac{\partial (\varepsilon E_z)}{\partial z} - A \frac{\partial E_y}{\partial z} + B \frac{\partial E_x}{\partial z} \right), \quad (3.77)$$

aus denen mit

$$\frac{\partial (\varepsilon E_x E_y)}{\partial y} = E_x \frac{\partial (\varepsilon E_y)}{\partial y} + \varepsilon E_y \frac{\partial (\varepsilon E_x)}{\partial y} \quad (3.78)$$

und

$$\frac{\partial (\varepsilon E_x E_z)}{\partial z} = E_x \frac{\partial (\varepsilon E_z)}{\partial z} + \varepsilon E_z \frac{\partial (\varepsilon E_x)}{\partial z} \quad (3.79)$$

durch Koeffizientenvergleich

$$A = 0, \quad B = \varepsilon E_z, \quad C = -\varepsilon E_y \quad (3.80)$$

folgt. Unter Berücksichtigung von (3.72) wird  $\mathbf{T}_x$  damit zu

$$\mathbf{T}_x = \begin{pmatrix} \varepsilon E_x^2 - \frac{E^2}{2} \left( \varepsilon - \varrho \frac{d\varepsilon}{d\varrho} \right) \\ \varepsilon E_x E_y \\ \varepsilon E_x E_z \end{pmatrix}^T. \quad (3.81)$$

Wendet man diese Überlegungen auf alle drei Komponenten der Kraftdichte an, so folgt der Maxwellsche Spannungstensor

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \varepsilon E_x^2 - \frac{E^2}{2} \left( \varepsilon - \varrho \frac{d\varepsilon}{d\varrho} \right) & \varepsilon E_x E_y & \varepsilon E_x E_z \\ \varepsilon E_x E_y & \varepsilon E_y^2 - \frac{E^2}{2} \left( \varepsilon - \varrho \frac{d\varepsilon}{d\varrho} \right) & \varepsilon E_y E_z \\ \varepsilon E_x E_z & \varepsilon E_y E_z & \varepsilon E_z^2 - \frac{E^2}{2} \left( \varepsilon - \varrho \frac{d\varepsilon}{d\varrho} \right) \end{pmatrix} \quad (3.82)$$

der den mechanischen Spannungszustand im elektrischen Feld beschreibt. Analog zum aus der Kontinuumsmechanik bekannten Spannungstensor entsprechen die Diagonalelemente in (3.82) den Zug- und Druckspannungen, während die anderen Elemente als Schubspannungen bezeichnet werden. Im Vakuum ( $\varrho = 0$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_0$ ) vereinfacht sich der Maxwellsche Spannungstensor zu

$$\mathbf{T}_e = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} E_x^2 - \frac{1}{2}\mathbf{E}^2 & E_x E_y & E_x E_z \\ E_x E_y & E_y^2 - \frac{1}{2}\mathbf{E}^2 & E_y E_z \\ E_x E_z & E_y E_z & E_z^2 - \frac{1}{2}\mathbf{E}^2 \end{pmatrix}. \quad (3.83)$$

Aufgrund seiner Symmetrie kann  $\mathbf{T}$  diagonalisiert werden. Der Spannungszustand in jedem Punkt kann also durch eine geeignete Koordinatentransformation auf einen reinen Zug- und Druckspannungszustand zurückgeführt werden.

Analog zu (3.64) ergibt sich für alle drei Komponenten des elektrostatischen Spannungszustandes

$$\mathbf{F} = \int_V \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{V} = \int_V \operatorname{div} \mathbf{T}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{V} = \oint_A \mathbf{T}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{\mathbf{A}}. \quad (3.84)$$

Zur Berechnung der elektrostatischen Kraft muss nun nicht mehr ein Volumenintegral über die Kraftdichte ausgewertet werden. Vielmehr kann die Kraftberechnung auch durch Integration des Maxwellschen Spannungstensors  $\mathbf{T}(\tilde{\mathbf{r}})$  über eine beliebige die Kraftquelle oder -senke umschließende Oberfläche erfolgen [55]. Dies hat im Vergleich zur Kraftdichteformulierung (3.56) unter Anderem den Vorteil, dass um Bereiche singulärer Kraftdichte herum integriert werden kann.

Der Maxwellsche Spannungstensor ist, im Gegensatz zum kontinuumsmechanischen Spannungstensor, eine reine Modellgröße. Während die mechanische Spannung einen tatsächlich vorhandenen Zustand des im Raum verteilten Materials darstellt, stellt sich bei den Maxwellschen Spannungen im Vakuum die Frage nach dem Träger der Verspannung.

Zur Veranschaulichung des Maxwellschen Spannungstensors kann gesagt werden, dass die mechanischen Spannungen im elektrischen Feld stets so gerichtet sind, dass sie die elektrischen Feldlinien zu verkürzen und ihren Abstand voneinander zu vergrößern bestrebt sind [99]. Anhand des Beispiels in Abbildung 3.7 kann jedoch gesehen werden, dass der Kraftfluss schon bei dieser sehr einfachen Anordnung schwer intuitiv zu erfassen ist. Für diese Anordnung ist in Abbildung 3.8 a) der Kraftfluss zweier ungleichnamiger auf der  $z$ -Achse angebrachten Ladungen dargestellt. Die Ladungen ziehen sich an, wobei das Maximum des Kraftflusses zwischen den Ladungen offensichtlich auf direktem Wege erfolgt. In Abbildung 3.8 b) stoßen sich die gleichnamigen Ladungen ab. Hier ist jedoch zu erkennen, dass auf direktem Wege keine Interaktion stattfindet, während das Maximum auf einem Kreis um den Ursprung auftritt. Das alleinige Ändern des Vorzeichens der Ladungen zueinander bewirkt also ein völlig anderes Übertragungsverhalten. Dies

ist mit der Vorstellung eines echten mechanischen Spannungsfeldes schwer vereinbar.

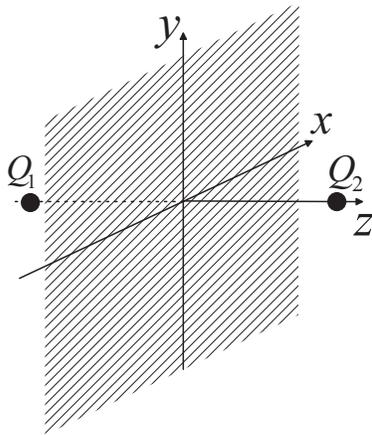
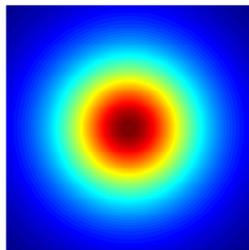
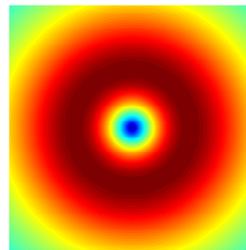


Abbildung 3.7: Zwei Ladungen symmetrisch zur  $xy$ -Ebene



(a)  $Q_1 = -Q_2$



(b)  $Q_1 = Q_2$

Abbildung 3.8: Kraftdichtefluss durch  $xy$ -Ebene

## Kapitel 4

# Numerische Feldberechnung

### 4.1 Näherungsweise Lösung elektrostatischer Probleme

Nach Kapitel 3.1 ist das elektrostatische Feld innerhalb eines Gebietes  $\Omega$  durch die Ladungsverteilung  $\rho(\mathbf{r})$  in  $\Omega$  und die Randbedingungen (3.11) bzw. (3.12) eindeutig festgelegt. Die Feldverteilung in  $\Omega$  kann dann durch Lösung der Poissongleichung (3.10) berechnet werden. Äquivalent hierzu ist die durch (2.5) beschriebene Minimierung des Lagrangefunktionals  $L$ , wobei für  $L$  das Ersatzfunktional  $J$  (3.33) verwendet werden kann. Während sich jedoch die durch (2.5) beschriebene Anordnung der  $n$  punktförmigen Massen problemlos mit Hilfe einer endlichen Anzahl von Freiheitsgraden erfassen lässt, ist dies bei der durch (3.33) beschriebene Potenzialverteilung im Allgemeinen nicht ohne Weiteres möglich. Für eine exakte Darstellung müssen hier unendlich viele Freiheitsgrade angesetzt werden. Da dies jedoch eine numerische Rechnung unmöglich machen würde, soll eine Darstellung gefunden werden, die mit einer endlichen Anzahl von Freiheitsgraden die exakte Potenzialverteilung gut approximiert. Zum besseren Verständnis wird der Begriff der guten Approximation zunächst an einem analogen Beispiel aus der Vektorrechnung erläutert. Die hierbei gewonnenen Erkenntnisse werden dann auf kontinuierliche Feldverteilungen erweitert.

Es soll eine gute Approximation des Vektors  $\mathbf{v}$  als Linearkombination

$$\mathbf{v} \approx \tilde{\mathbf{v}} = a_1 \mathbf{b}_1 + a_2 \mathbf{b}_2 \quad (4.1)$$

der Vektorbasis  $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$  gefunden werden. Eine exakte Darstellung ist nur möglich, wenn  $\mathbf{v}$  in der durch  $\mathbf{b}_1$  und  $\mathbf{b}_2$  aufgespannten Ebene liegt. Die Definition einer Vektornorm des Fehlers

$$e = \|\mathbf{e}\| = \sqrt{e_x^2 + e_y^2 + e_z^2} = \|\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}}\| = \|\mathbf{v} - (a_1 \mathbf{b}_1 + a_2 \mathbf{b}_2)\| \quad (4.2)$$

ermöglicht jedoch die Beurteilung der Qualität einer Approximation. Durch Minimierung dieser Norm ergibt sich, dass die beste Approximation in diesem Fall die Projektion des Vektors  $\mathbf{v}$  in die von  $\mathbf{b}_1$  und  $\mathbf{b}_2$  aufgespannte Ebene ist. Auch kann eine eindeutige Lösung für  $a_1$  und  $a_2$  nur gefunden werden, wenn  $\mathbf{b}_1$  und  $\mathbf{b}_2$  linear unabhängig sind, also die Gleichung

$$a_1 \mathbf{b}_1 + a_2 \mathbf{b}_2 = \mathbf{0} \quad (4.3)$$

nur durch  $a_1 = a_2 = 0$  erfüllt werden kann.

Während die beste Approximation des Vektors  $\mathbf{v}$  durch den minimalen Wert von (4.2) charakterisiert war, wird der besten Approximation des Potentials  $\varphi(\mathbf{r})$  der minimale Wert des Lagrangefunktionals (3.33) zugeordnet. Auch hier soll die Approximation des Potentials durch die Linearkombination

$$\varphi(\mathbf{r}) \approx \sum_{j=1}^N a_j \psi_j(\mathbf{r}) \quad (4.4)$$

einer linear unabhängigen Funktionenbasis  $(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N)$  erfolgen. Äquivalent zu (4.3) bedeutet lineare Unabhängigkeit hier, dass

$$\sum_{j=1}^N a_j \psi_j(\mathbf{r}) = 0 \quad \forall \mathbf{r} \quad (4.5)$$

nur durch den trivialen Fall  $a_1 = a_2 = \dots = a_N = 0$  erfüllt wird. Das im folgenden Kapitel beschriebene Ritz-Galerkin-Verfahren verwendet den Ansatz (4.4) zur Approximation der exakten Lösung.

## 4.2 Das Ritz-Galerkin-Verfahren

Beim Ritz-Galerkin-Verfahren wird eine Näherungslösung in Form der im vorigen Kapitel beschriebenen Linearkombination

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N a_j \psi_j(\mathbf{r}), \quad (4.6)$$

angesetzt, wobei die  $a_j$  die unbekanntenen Freiheitsgrade und die  $\psi_j(\mathbf{r})$  linear unabhängige, vor der Lösung festzulegende Ansatzfunktionen sind. Die Struktur der Potenzialverteilung wird zur Bestimmung der Lösung also vorgegeben und auf  $N$  Freiheitsgrade beschränkt. Durch Anwendung von (3.7) folgt näherungsweise das elektrische Feld

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = - \sum_{j=1}^N a_j \nabla \psi_j(\mathbf{r}). \quad (4.7)$$

Einsetzen von (4.6) in das Funktional (3.33) führt auf den Ausdruck

$$\begin{aligned} J(a_1, a_2, \dots, a_N) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon \left( \sum_{j=1}^N a_j \nabla \psi_j \right)^2 d\Omega \\ &- \int_{\Omega} \left( \sum_{j=1}^N a_j \psi_j \right) \rho d\Omega - \int_{\Gamma_N} h \varepsilon \left( \sum_{j=1}^N a_j \psi_j \right) d\Gamma, \end{aligned} \quad (4.8)$$

welcher zur Lösung nach den unbekanntenen Koeffizienten  $a_i$  minimiert werden soll. Aufgrund der vorausgesetzten linearen Unabhängigkeit der Ansatzfunktionen (4.5) kann die Minimierung einzeln in Richtung jeder Unbekannten erfolgen. Es ergeben sich  $N$  Gleichungen der Form

$$\frac{\partial J}{\partial a_i} = \int_{\Omega} \varepsilon \left( \sum_{j=1}^N a_j \nabla \psi_j \right) \nabla \psi_i d\Omega - \int_{\Omega} \psi_i \rho d\Omega - \int_{\Gamma_N} h \varepsilon \psi_i d\Gamma = 0. \quad (4.10)$$

Im Gegensatz zur Poissongleichung (3.10) ist die Gleichung (4.10) keine Forderung an jeden Raumpunkt. Vielmehr sind nur noch Integrale in der Formulierung enthalten. Das Herausziehen der Summe über die unbekanntenen Koeffizienten aus dem Integral führt auf das Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^N a_j \int_{\Omega} \varepsilon \nabla \psi_i \nabla \psi_j d\Omega = \int_{\Omega} \psi_i \rho d\Omega + \int_{\Gamma_N} h \varepsilon \psi_i d\Gamma, \quad i = 1..N, \quad (4.11)$$

das sich auch in Matrixform

$$\mathbf{K}\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad (4.12)$$

mit

$$K_{ij} = \int_{\Omega} [\varepsilon \nabla \psi_i \nabla \psi_j] d\Omega, \quad b_i = \int_{\Omega} [\psi_i \rho] d\Omega + \int_{\Gamma_N} [h \varepsilon \psi_i] d\Gamma \quad (4.13)$$

schreiben lässt. Die Berechnung der Matrixeinträge  $K_{ij}$  beinhaltet eine Integration über den Gradienten der Formfunktionen  $\psi_i$ . Daher müssen die Funktionen  $\psi_i$  auf  $\Omega$  in jede Raumrichtung mindestens einmal schwach differenzierbar und damit Teil des Sobolew-Raumes  $H^1$  sein [63].

### 4.3 Konvergenz des Ritz-Galerkinverfahrens

Als Qualitätskriterium einer numerischen Lösung  $\tilde{\varphi}(\mathbf{r})$  gehen wir von der Energie des Fehlers

$$F_n = \int_{\Omega} \varepsilon [\nabla(\varphi - \tilde{\varphi}_n)]^2 d\Omega = a(\varphi - \tilde{\varphi}_n, \varphi - \tilde{\varphi}_n) \quad (4.14)$$

aus, wobei die Abkürzung

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \varepsilon \nabla u \nabla v d\Omega \quad (4.15)$$

verwendet wurde. Eine Auswertung des Ausdrucks (4.14) ist leider nur für die wenigen Fälle möglich, bei denen die analytische Lösung  $\varphi(\mathbf{r})$  bekannt ist. Für eine darüber hinaus gehende Untersuchung der Konvergenz überführen wir Gleichung (4.14) durch Ausmultiplizieren, Subtraktion von  $2a(\varphi, \varphi) - 2a(\varphi, \varphi)$  und Zusammenfassen des gemischten Terms zunächst in

$$F_n = a(\tilde{\varphi}_n, \tilde{\varphi}_n) - a(\varphi, \varphi) + 2a(\varphi, \varphi - \tilde{\varphi}_n), \quad (4.16)$$

was mit Hilfe der Galerkinschen Variationsgleichung

$$a(u, v) = l(v), \quad l(v) = \int_{\Gamma_N} \varepsilon v h d\Gamma + \int_{\Omega} \rho v d\Omega \quad (4.17)$$

zu

$$F_n = a(\tilde{\varphi}_n, \tilde{\varphi}_n) - a(\varphi, \varphi) + 2l(\varphi - \tilde{\varphi}_n) = 2J(\tilde{\varphi}_n) - 2J(\varphi) \quad (4.18)$$

wird. Hierbei ist  $h = h(\mathbf{r})$  die Neumannsche Randbedingung nach Gleichung (3.12). In Kapitel 3.3 wurde gezeigt, dass das Funktional

$$J(u) = \frac{1}{2}a(u, u) - l(u) \quad (4.19)$$

für die exakte Lösung  $u = \varphi$  seinen minimalen Wert annimmt, daher muss wegen  $J(\tilde{\varphi}_n) \geq J(\varphi)$  auch  $F_n \geq 0$  gelten. Dies folgt auch direkt aus (4.14), da  $a(\varphi - \tilde{\varphi}_n, \varphi - \tilde{\varphi}_n)$  eine quadratische Form ist. Außerdem muss für eine in der Energienorm (4.14) konvergierende Lösung eine Konvergenz des Energiefunktionals  $J(\tilde{\varphi}_n)$  gegen  $J(\varphi)$  erkennbar sein. Da jedoch die exakte Lösung im Allgemeinen nicht bekannt ist, ist auch ihr Funktional  $J(\varphi)$  nicht zugänglich. Es kann aber eine gegen  $J(\varphi)$  konvergierende Reihe der  $J_n = J(\tilde{\varphi}_n)$  berechnet werden. Hierfür wird die Anzahl der Freiheitsgrade in jedem Berechnungsdurchlauf erhöht. Mit Hilfe der Konvergenzbeschleunigungsformel von Aitken und Richardson kann hieraus der Wert

$$S_n = \frac{J_{n-1}J_{n+1} - J_n^2}{J_{n+1} - 2J_n + J_{n-1}} \quad (4.20)$$

berechnet werden, der wesentlich schneller als  $J_n$  gegen  $J(\varphi)$  konvergiert. Bei der Anwendung der Konvergenzbeschleunigungsformel wird davon ausgegangen, dass der letzte berechenbare Wert von  $S_n = S_{n_{max}}$  eine sehr gute Näherung für  $J(\varphi)$  darstellt. Zur Bestimmung des Fehlers einer numerischen Lösung  $\tilde{\varphi}_n$  wird dieser als exakter Wert zugrunde gelegt. Gleichung (4.18) geht damit in den Fehler

$$F_n = 2J_n - 2S_{n_{max}} \quad (4.21)$$

über, der für wachsendes  $n$  gegen Null konvergieren muss.

## 4.4 Die Methode der finiten Elemente (FEM)

Die Methode der finiten Elemente (FEM) basiert auf dem Galerkinverfahren. Es wird eine Näherungslösung nach Gleichung (4.6) angesetzt, wobei die Ansatzfunktionen  $\psi_i(\mathbf{x})$  stückweise auf Teilgebieten definiert werden. Diese Teilgebiete werden auch finite Elemente genannt, können von nahezu beliebiger Form sein und verleihen der Methode ihren Namen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden für den zweidimensionalen Ansatz Dreieckselemente verwendet, während für den dreidimensionalen Fall Tetraederelemente zum Einsatz kamen. Diese Elementformen haben den Vorteil, dass sie auf mathematisch unaufwändige Weise große Flexibilität bei der Zerlegung auch geometrisch komplexer Berechnungsgebiete bieten. Da die grafische Darstellung der Gebietszerlegung für den dreidimensionalen Fall sehr unübersichtlich wäre, beschränken sich die nachfolgenden Abbildungen auf den ein- und den zweidimensionalen Fall.

Die beispielhafte Unterteilung eines Berechnungsgebietes  $\Omega$  (Abb. 4.1 bzw. Abb. 4.2) in finite Elemente ist jeweils für 1D und 2D in den Abbildungen 4.3 bzw. 4.4 dargestellt.

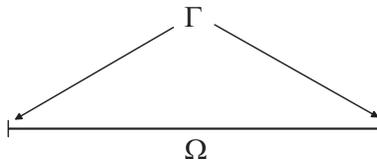


Abbildung 4.1: 1D Berechnungsgebiet  $\Omega$

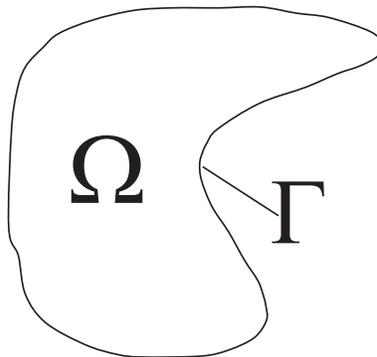
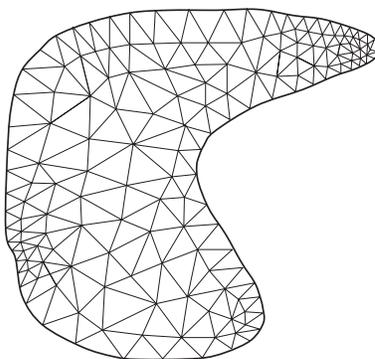


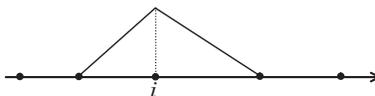
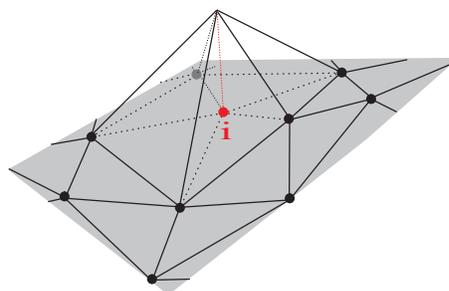
Abbildung 4.2: 2D Berechnungsgebiet  $\Omega$



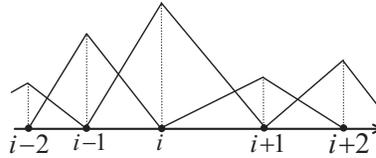
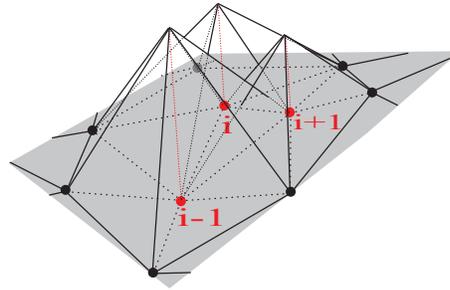
Abbildung 4.3: 1D Finite Element Zerlegung von  $\Omega$

Abbildung 4.4: 2D Finite Elemente Zerlegung von  $\Omega$ 

Jedem Knoten ist eine Ansatzfunktion  $\psi_i(\mathbf{x})$  zugeordnet, an dem sie den Wert Eins hat. Von dort fällt sie linear auf den Wert Null an den umliegenden Knoten ab. Die einem Knoten zugeordnete Ansatzfunktion hat also nur in den an den Knoten angrenzenden Elementen einen Wert ungleich Null. Damit ergeben sich für den eindimensionalen Ansatz die in Abbildung 4.5 dargestellten Hutfunktionen, während in 2D mit pyramidenförmigen Ansatzfunktionen approximiert wird (Abb. 4.6).

Abbildung 4.5: 1D Ansatzfunktion  $\psi_i(\mathbf{x})$ Abbildung 4.6: 2D Ansatzfunktion  $\psi_i(\mathbf{x})$ 

In den Abbildungen 4.7 und 4.8 ist die Zuordnung der Ansatzfunktion zu den Knoten dargestellt. Hierbei sind die Funktionen bereits mit den Koeffizienten  $u_i$  gewichtet, was einem Verändern der Spitzenhöhe bei gleichzeitigem Festhalten an den umliegenden Knoten auf dem Wert Null entspricht.

Abbildung 4.7: Gewichtete 1D Ansatzfunktionen  $\psi_{i-2}(\mathbf{x})$  bis  $\psi_{i+2}(\mathbf{x})$ Abbildung 4.8: Gewichtete 2D Ansatzfunktionen  $\psi_{i-1}(\mathbf{x})$  bis  $\psi_{i+1}(\mathbf{x})$ 

Die resultierende Approximationsfunktion ergibt sich nach (4.6) als gewichtete Summe der einzelnen Ansatzfunktionen (Abb. 4.9 bzw. Abb. 4.10). Sie nimmt offensichtlich an den Knoten  $i$  den Wert des zugeordneten Potenzialkoeffizienten  $u_i$  an. Ihr Verlauf zwischen den Knoten, also innerhalb der Elemente, ist linear. Sowohl die einzelnen Ansatzfunktionen als auch ihre gewichtete Summe sind Elemente des Sobolev-Raumes  $H^1$ .

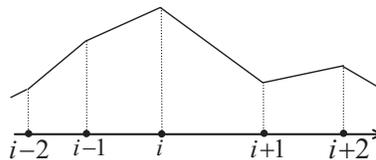


Abbildung 4.9: 1D Approximationsfunktion als Überlagerung

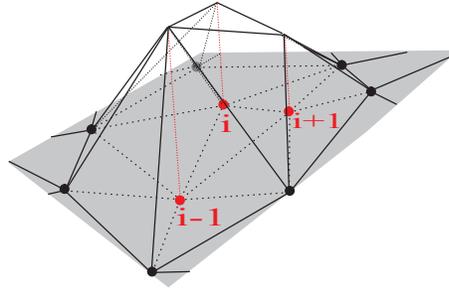


Abbildung 4.10: 2D Approximationsfunktion als Überlagerung

Nur in den wenigsten Fällen wird die gesuchte Lösungsfunktion einen derart linearen Verlauf aufweisen. Das auf diese Weise dargestellte Potenzial kann also meist nur eine Approximation des exakten Potenzialverlaufs sein. Insbesondere sind die Gradienten der verwendeten Ansatzfunktionen in orthogonaler Richtung zu den Elementgrenzen an den Elementübergängen unstetig. Daher springt die Normalkomponente  $E_n$  der elektrischen Feldstärke  $\vec{E}(\mathbf{x})$  zwischen den Elementen, während ihre Tangentialkomponente  $E_t$  einen stetigen Verlauf aufweist. Da wegen der Stetigkeitsbedingungen [99]

$$\varepsilon_1 E_{1,n} - \varepsilon_2 E_{2,n} = \sigma, \quad E_{1,t} - E_{2,t} = 0 \quad (4.22)$$

auch das exakte elektrische Feld ein solches Verhalten an Materialübergängen zeigt, ist der oben beschriebene Ansatz für die Approximationsfunktionen sinnvoll [70]. Mit diesem Ansatz können jedoch durch die numerische Lösung auch in eigentlich ladungsfreien und homogenen Materialien Ladungen suggeriert werden.

Um die Potenzialvorgabe am Dirichlettrand des Berechnungsgebietes zu erfüllen, werden die zugehörigen Potenzialkoeffizienten  $u_i$  vorgegeben. Hierdurch entfallen in (4.10) die Gleichungen, die aus den Ableitungen in Richtung der zugehörigen Potenzialkoeffizienten entstehen. Außerdem können die bekannten Knotenpotenziale auf die rechte Seite der Gleichung gebracht werden. Das resultierende Gleichungssystem ist quadratisch und hat die Dimension

$$n = N - N_D, \quad (4.23)$$

wobei  $N$  die Anzahl aller Knoten und  $N_D$  die Anzahl aller Knoten mit Dirichletbedingung sind. Die zugehörige Matrix  $K$  ist symmetrisch, positiv definit, schwach besetzt und diagonaldominant. Diese Matrixstruktur ist ein großer Vorteil des Verfahrens der finiten Elemente, da solche Systeme mit Hilfe spezieller Verfahren sehr effizient gelöst werden können [84].

Das Aufstellen des Gleichungssystems erfolgt elementweise. Hierfür müssen die den Knoten zugeordneten Ansatzfunktionen  $\psi_i(\mathbf{r})$  auf die anliegenden Elemente aufgeteilt werden. Der Übergang zu den lokalen Koordinaten  $\xi, \eta$  und  $\zeta$  der Elemente ermöglicht eine von der Elementgeometrie unabhängige

Formulierung. Jeder Knoten bekommt hierfür, neben seiner globalen Nummer, eine lokale Nummer innerhalb des Elements. Damit können die Knoten durch Angabe der Elementnummer und der lokalen Knotennummer identifiziert werden. Der Zusammenhang der lokalen mit den globalen Koordinaten  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  ist für den eindimensionalen Fall (Abb. 4.11) durch

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \xi, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad (4.24)$$

für 2D (Abb. 4.12) mit

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \xi + (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1) \eta, \quad 0 \leq \xi + \eta \leq 1 \quad (4.25)$$

und beim dreidimensionalen Ansatz (Abb. 4.13) durch

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \xi + (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1) \eta + (\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_1) \zeta, \quad 0 \leq \xi + \eta + \zeta \leq 1 \quad (4.26)$$

gegeben, wobei  $\mathbf{x}_1$  bis  $\mathbf{x}_4$  die Ortsvektoren zu den Eckpunkten des betrachteten Elements sind. Es ist zu beachten, dass die Ortsvektoren nur bei erfüllter Nebenbedingung für die lokalen Koordinaten innerhalb des betrachteten Elements liegen.

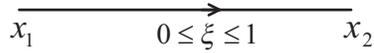


Abbildung 4.11: Lokale Linienelementskordinaten (1D)

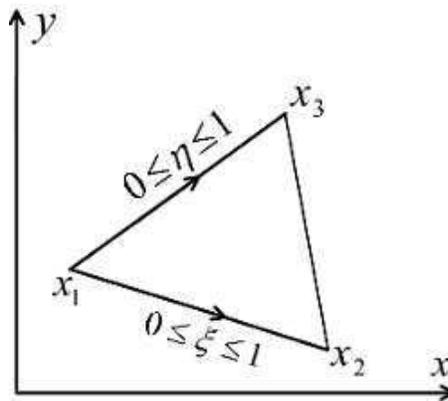


Abbildung 4.12: Lokale Dreieckselementskordinaten (2D)

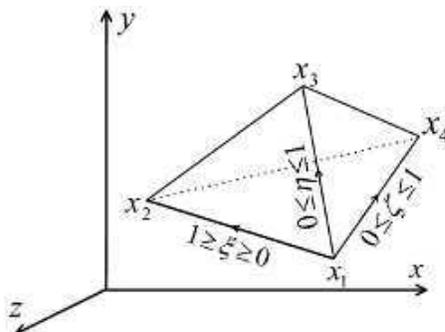


Abbildung 4.13: Lokale Tetraederkoordinaten (3D)

Damit werden die lokalen Ansatzfunktionen innerhalb der Elemente in 1D, 2D und 3D zu

$$\psi_1(\xi) = 1 - \xi, \quad \psi_2(\xi) = \xi \quad (4.27)$$

$$\psi_1(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta, \quad \psi_2(\xi) = \xi, \quad \psi_3(\xi) = \eta \quad (4.28)$$

$$\psi_1(\xi, \eta, \zeta) = 1 - \xi - \eta - \zeta, \quad \psi_2(\xi) = \xi, \quad \psi_3(\xi) = \eta, \quad \psi_4(\xi) = \zeta, \quad (4.29)$$

wobei die Indizes der Funktionen jetzt nicht mehr die globale, sondern die lokale Knotennummer innerhalb eines Elements angeben. Die auf die Knoten bezogenen Ansatzfunktionen  $\psi_i$  in (4.6) werden also stückweise aus lokal innerhalb der Elemente definierten Funktionen zusammengesetzt.

## 4.5 Die Behandlung von Feldsingularitäten mit der FEM

### 4.5.1 Ein stückweiser Ansatz

Die in Kapitel 4.4 beschriebene Methode der finiten Elemente mit linearen Approximationsfunktionen ist aufgrund ihrer Vielseitigkeit bei verhältnismäßig unaufwändiger Implementierung sehr populär. Für eine erfolgreiche Anwendung muss aber vorausgesetzt werden, dass der Lösungsverlauf innerhalb der Elemente durch lineare Funktionen approximiert werden kann. Im Bereich von Ecken oder Kanten des Berechnungsgebietes weicht die Potenzialverteilung jedoch stark vom linearen Verlauf ab. In solchen Fällen kann es sinnvoll sein, die linearen Ansatzfunktionen mit Hilfe spezieller Formfunktionen zu erweitern. Verschiedene Ansätze hierfür sind in der mathematischen Literatur zu finden [106] [123]. Die Implementierung ist jedoch meist nur ungenau dokumentiert.

Der prinzipielle Feldverlauf in der direkten Umgebung einer Spitze (Abb. 4.14) wird in erster Linie von ihrem äußeren Öffnungswinkel  $\beta$  bestimmt.

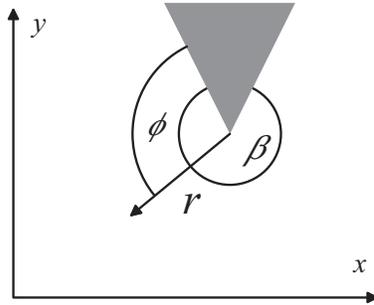


Abbildung 4.14: Spitzenkoordinaten

Damit kann bei Betrachtung eines genügend kleinen Bereiches um die Spitze der Lösungsverlauf gut durch das Potenzial der Spitze  $\varphi_0$  und eine gewichtete Summe

$$\tilde{\varphi}_S(\mathbf{x}) = \varphi_0 + \sum_{k=1}^{n_k} c_k f_k(\mathbf{x}) \quad (4.30)$$

der fundamentalen Basislösungen

$$f_k(\mathbf{x}) = f_k(r, \phi) = r^{\frac{k\pi}{\beta}} \sin\left(\frac{k\pi\phi}{\beta}\right) \quad (4.31)$$

einer unendlich ausgedehnten Spitze repräsentiert werden [59]. Man beachte, dass ihr Gradient für  $k = 1$  und  $\beta < \pi$  am Ort der Spitze ( $r = 0$ )

singulär wird. Aus diesem Grunde werden die verwendeten Ansatzfunktionen im Folgenden auch Singulärfunktionen genannt. Da sich im Nahbereich außerhalb der Spitze des EFM im Allgemeinen keine Ladung befindet, wird Ladungsfreiheit im Berechnungsgebiet vorausgesetzt. Die gesamte Approximationslösung  $\tilde{\varphi}(\mathbf{x})$  wird stückweise für  $\Omega_1$  und  $\Omega_2$  (Abb. 4.15) definiert

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \tilde{\varphi}_S(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega_1 \\ \tilde{\varphi}_F(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega_2 \end{cases}, \quad (4.32)$$

wobei  $\tilde{\varphi}_F(\mathbf{x})$  durch Gleichung (4.6) mit den Ansatzfunktionen  $\psi_j$  nach (4.28) und den lokalen Koordinaten nach (4.25) gegeben ist. Es ist zu beachten, dass sich beide Bereiche am Rand überlappen.

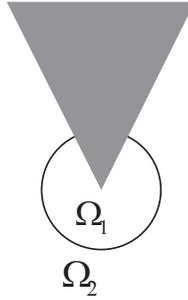


Abbildung 4.15: Integrationsgebiete

Um einen stetigen Übergang des Potentials an den Knoten des Kopplungsrandes zu gewährleisten, werden mit Hilfe der Beziehung (4.30) die Knotenpotenziale auf dem Kopplungsrand durch die Koeffizienten der Singulärfunktionen  $c_k$  ersetzt [123]. Die Berechnung des Gleichungssystems (4.10) erfolgt stückweise. Es gilt

$$\frac{\partial J}{\partial \varphi_i} = \frac{\partial J_{\Omega_1}}{\partial \varphi_i} + \frac{\partial J_{\Omega_2}}{\partial \varphi_i}, \quad \frac{\partial J}{\partial c_i} = \frac{\partial J_{\Omega_1}}{\partial c_i} + \frac{\partial J_{\Omega_2}}{\partial c_i}. \quad (4.33)$$

Da  $J_{\Omega_1}$  von den Knotenpotenzialen  $\varphi_i$  unabhängig ist, ergeben sich analytisch exakt

$$\frac{\partial J_{\Omega_1}}{\partial \varphi_i} = 0 \quad (4.34)$$

und

$$\frac{\partial J_{\Omega_1}}{\partial c_i} = \sum_{k=1}^{n_k} c_k \int_{\Omega_1} \varepsilon \nabla f_k \nabla f_i d\Omega = \frac{i\pi \varepsilon c_i}{2} R^{\frac{2i\pi}{\beta}}, \quad (4.35)$$

wobei  $R$  der Radius des Raumbereiches  $\Omega_1$  ist und  $\varepsilon$  als konstant angenommen wurde (s. Anhang C). Mit Hilfe der Beziehungen (4.6) und (4.30) werden das approximierte Potenzial und sein Gradient im FE-Bereich  $\Omega_2$  zu

$$\tilde{\varphi}_2(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_1} \varphi_j \psi_j(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{n_c} \left( \varphi_0 + \sum_{k=1}^{n_k} c_k f_k(\mathbf{x}_j) \right) \psi_j(\mathbf{x}) \quad (4.36)$$

und

$$\nabla \tilde{\varphi}_2(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_1} \varphi_j \nabla \psi_j(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{n_c} \left( \varphi_0 + \sum_{k=1}^{n_k} c_k f_k(\mathbf{x}_j) \right) \nabla \psi_j(\mathbf{x}). \quad (4.37)$$

Hierbei ist jeweils die erste Summe  $n_1$  über alle Knoten innerhalb  $\Omega_2$  mit Ausnahme der Kopplungsknoten auszuführen, während die zweite Summe  $n_c$  über alle Kopplungsknoten zwischen den beiden Gebieten läuft. Unter der Annahme verschwindender Neumannrandbedingungen ergeben sich

$$\frac{\partial J_{\Omega_2}}{\partial \varphi_i} = \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \tilde{\varphi}_2 \frac{\partial \nabla \tilde{\varphi}_2}{\partial \varphi_i} d\Omega \quad (4.38)$$

und

$$\frac{\partial J_{\Omega_2}}{\partial c_i} = \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \tilde{\varphi}_2 \frac{\partial \nabla \tilde{\varphi}_2}{\partial c_i} d\Omega. \quad (4.39)$$

Die auftretenden Ableitungen von  $\nabla \tilde{\varphi}_2(\mathbf{x})$  nach den Koeffizienten sind durch

$$\frac{\partial \nabla \tilde{\varphi}_2}{\partial \varphi_i} = \nabla \psi_i(\mathbf{x}) \quad (4.40)$$

und

$$\frac{\partial \nabla \tilde{\varphi}_2}{\partial c_i} = \sum_{j=1}^{n_c} f_i(\mathbf{x}_j) \nabla \psi_j(\mathbf{x}) \quad (4.41)$$

gegeben. Damit werden die beiden verbleibenden Terme in (4.33) zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_{\Omega_2}}{\partial \varphi_i} &= \sum_{j=1}^{n_1} \varphi_j \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_i d\Omega \\ &+ \sum_{k=1}^{n_k} c_k \sum_{j=1}^{n_c} f_k(\mathbf{x}_j) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_i d\Omega \\ &+ \varphi_0 \sum_{j=1}^{n_c} \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_i d\Omega \end{aligned} \quad (4.42)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_{\Omega_2}}{\partial c_i} &= \sum_{j=1}^{n_1} \varphi_j \sum_{l=1}^{n_c} f_i(\mathbf{x}_l) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_l d\Omega \\ &+ \sum_{k=1}^{n_k} c_k \sum_{j=1}^{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} f_k(\mathbf{x}_j) f_i(\mathbf{x}_l) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_l d\Omega. \\ &+ \varphi_0 \sum_{j=1}^{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} f_i(\mathbf{x}_l) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_l d\Omega \end{aligned} \quad (4.43)$$

In der Darstellung nach (4.12) wird die Schreibweise kompakter

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varphi} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix}, \quad (4.44)$$

wobei die Steifigkeitsmatrix in vier Anteile und der Vektor der rechten Seite in zwei Anteile aufgeteilt werden. Die Matrix  $\mathbf{A}$  verknüpft die Knotenpotenziale der FEM, während durch  $\mathbf{D}$  die Koeffizienten der Singulärfunktionen in Verbindung gesetzt werden. Die Kopplung dieser beiden Anteile wird durch die Matrizen  $\mathbf{B}$  und  $\mathbf{C}$  erreicht. Für die einzelnen Anteile ergeben sich

$$A_{ij} = \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_i \, d\Omega, \quad (4.45)$$

$$B_{ij} = \sum_{l=1}^{n_c} f_j(\mathbf{x}_l) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_l \nabla \psi_i \, d\Omega, \quad (4.46)$$

$$C_{ij} = \sum_{l=1}^{n_c} f_i(\mathbf{x}_l) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_l \nabla \psi_i \, d\Omega, \quad (4.47)$$

$$D_{ij} = \sum_{l=1}^{n_c} f_j(\mathbf{x}_l) \sum_{m=1}^{n_c} f_i(\mathbf{x}_m) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_l \nabla \psi_m \, d\Omega + \begin{cases} \frac{i\pi\varepsilon}{2} R^{\frac{2i\pi}{\beta}}, & i = j \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}, \quad (4.48)$$

$$a_i = -\varphi_0 \sum_{j=1}^{n_c} \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_i \, d\Omega \quad (4.49)$$

und

$$b_i = -\varphi_0 \sum_{j=1}^{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} f_i(\mathbf{x}_l) \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_l \, d\Omega. \quad (4.50)$$

Aufgrund der überlappenden Integrationsgebiete entsteht bei der Auswertung der Integrale ein Fehler, der durch Vergrößerung der Anzahl der Kopplungsknoten verringert werden kann. Da die beiden Berechnungsgebiete in der beschriebenen Methode ausschließlich über das Potenzial an den Kopplungsknoten gekoppelt sind, ist der Potenzialübergang zwischen den Kopplungsknoten im Allgemeinen unstetig. Auch ist das elektrische Feld am Kopplungsrand unstetig (Abb. 4.17). Außerdem ist eine starke Abhängigkeit der Lösung von der Wahl des Radius  $R$  zu beobachten. Da jedoch  $R$  ein allein durch die Numerik eingebrachter Parameter ist und somit nichts mit der physikalischen Beschreibung des Problems zu tun hat, lässt dies auf eine Instabilität der Lösung schließen. In Tabelle 4.1 und in Abb. 4.18 ist das Konvergenzverhalten des Funktionals  $J_N$  und des Fehlers  $F_N$  für eine Singulärfunktion dargestellt.

$N$	$n$	$J_1(u_N)$	$F_{N,1}$
1	30	1,6099	0,5033
2	137	1,4212	0,3146
3	497	1,2917	0,1851
4	1889	1,2269	0,1203
5	7361	1,1802	0,0736

Tabelle 4.1: Konvergenzstudie des lokalen Ansatzes mit einer Singulärfunktion

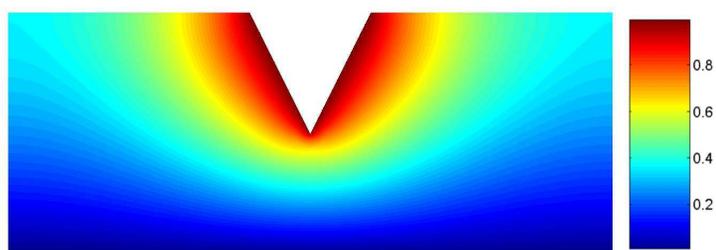


Abbildung 4.16: Elektrostatistisches Potenzial

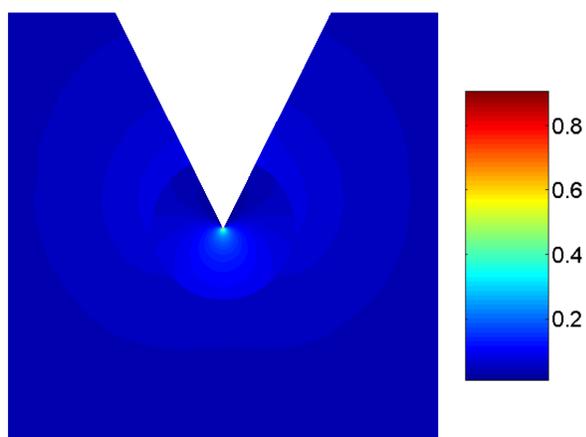


Abbildung 4.17: Elektrostatistisches Feld

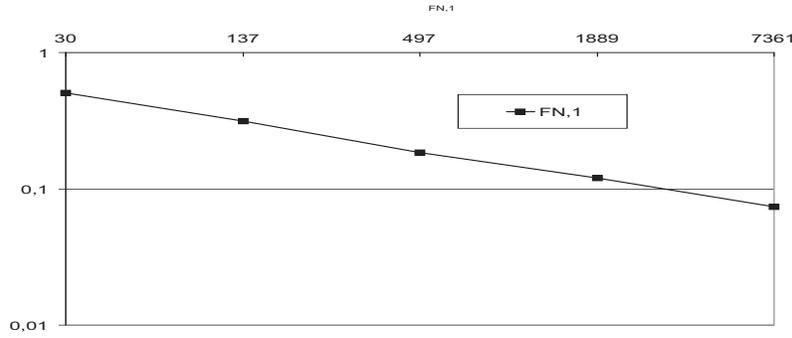


Abbildung 4.18: Fehler in Energienorm

### 4.5.2 Ein globaler Ansatz

Zur Verbesserung des im vorigen Kapitel beschriebenen Ansatzes soll die Methode dahingehend modifiziert werden, dass das Potenzial im Nahbereich der Singularität nicht mehr alleine durch die Singulärfunktionen approximiert wird. Vielmehr wird eine Kombination der Singulärfunktionen und der linearen Formfunktionen der finiten Elemente verwendet. Im Gegensatz zum im vorigen Kapitel beschriebenen stückweisen Ansatz soll die Potenzialvorgabe an der Spitze jetzt durch Vorgabe der Knotenpotenziale erreicht werden. Damit verschwindet  $\varphi_0$  in (4.30) und die Approximation des Potenzials wird global mit

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^n a_j \psi_j(\mathbf{r}) + G(\mathbf{r}) \sum_{k=1}^{n_k} c_k f_k(\mathbf{r}) \quad (4.51)$$

angesetzt, wobei die sogenannte Abschneidefunktion  $G(r)$  bei Vergrößerung des Abstandes zur Spitze ein Ausblenden der Singulärfunktionen aus der Gesamtlösung bewirkt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde

$$G(r) = \begin{cases} 1, & 0 \leq r \leq \frac{R}{2} \\ \frac{1}{2} \left( 1 + \cos \left( \frac{2}{R} r - 1 \right) \pi \right), & \frac{R}{2} < r < R \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.52)$$

gewählt (Abb. 4.5.2). Hierbei ermöglicht die spezielle Form der Abschneidefunktion einen glatten Übergang zwischen den einzelnen Bereichen und damit eine gute Konvergenz der Methode. Als Singulärfunktionen  $f_k(\mathbf{r})$  werden wieder die analytischen Lösungsbasen der Spitze (4.31) verwendet. Einsetzen des Ansatzes (4.51) in (4.10) führt auf das symmetrische Gleichungssystem

$$\frac{\partial J}{\partial \varphi_i} = \sum_{j=1}^n \varphi_j \int_{\Omega} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_i \, d\Omega + \sum_{k=1}^{n_k} c_k \int_{\Omega} \varepsilon (\nabla G f_k + G \nabla f_k) \nabla \psi_i \, d\Omega \quad (4.53)$$

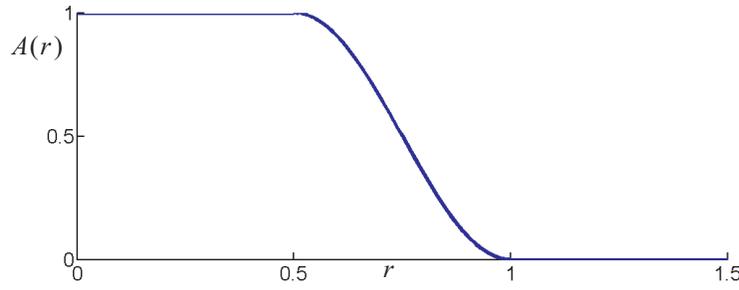


Abbildung 4.19: Abschneidefunktion

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial c_i} &= \sum_{j=1}^n \varphi_j \int_{\Omega} \varepsilon (G f_i + G \nabla f_i) \nabla \psi_j \, d\Omega \\ &+ \sum_{k=1}^{n_k} c_k \int_{\Omega} \varepsilon (\nabla G f_k + G \nabla f_k) (\nabla G f_i + G \nabla f_i) \, d\Omega. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Durch Aufteilung der Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{K}$  in Anteile der linearen und der nicht linearen Formfunktionen erhält man

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \quad (4.55)$$

mit

$$A_{ij} = \int_{\Omega_2} \varepsilon \nabla \psi_j \nabla \psi_i \, d\Omega, \quad (4.56)$$

$$B_{ji} = \int_{\Omega} \varepsilon (\nabla G f_j + G \nabla f_j) \nabla \psi_i \, d\Omega, \quad (4.57)$$

$$C_{ij} = \int_{\Omega} \varepsilon (G f_i + G \nabla f_i) \nabla \psi_j \, d\Omega \quad (4.58)$$

und

$$D_{ij} = \int_{\Omega} \varepsilon (\nabla G f_k + G \nabla f_k) (\nabla G f_i + G \nabla f_i) \, d\Omega. \quad (4.59)$$

Die linearen Formfunktionen  $\psi_i$  sind stückweise auf den Elementen des Gitters der finiten Elemente definiert. Daher müssen alle Integrale die die  $\psi_i$  enthalten numerisch auf dem FE Gitter gelöst werden. Die in  $\mathbf{A}$  auftretenden Integrale enthalten nur die linearen Formfunktionen. Weil damit die auftretenden Integranden konstant über jedem Element sind, ist bereits ein Integrationspunkt ausreichend um zu einem exakten Ergebnis zu gelangen. Die Berechnung von  $\mathbf{B}$  und  $\mathbf{C}$  ist aufwändiger, da die Integranden keine polynomialen Funktionen und daher mit dem Verfahren nach Gauß Legendre nicht exakt zu integrieren sind. Bei Erhöhung der Anzahl von Integrationspunkten konvergiert jedoch die numerische Lösung gegen den exakten Wert

des Integrals. Leider existieren keine Formeln zur direkten Berechnung von beliebig vielen Integrationspunkten auf Dreiecken. Es können jedoch für die Gauß Legendre Integration beliebig viele Stützstellen auf dem Standardquadrat berechnet werden. Daher müssen die Integrale zunächst, wie in Anhang B beschrieben, auf das Standardquadrat transformiert werden. Hierfür wird das Integral in (4.57) in die Einzelintegrale über die Elemente aufgeteilt

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_e} \varepsilon (\nabla G f_k + G \nabla f_k) \nabla \psi_i d\Omega \\ &= \int_{\Omega_e} \varepsilon \left( f_k \mathbf{J}_S^{-1} \nabla_S G + G \mathbf{J}_S^{-1} \nabla_S f_k \right) \mathbf{J}_e^{-1} \nabla_e \psi_i d\Omega, \end{aligned} \quad (4.60)$$

wobei  $\mathbf{J}_S$  die Jacobimatrix der Spitzenkoordinaten ist und jeweils in

$$\nabla_S := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix} \quad (4.61)$$

und

$$\nabla_l := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

die Ableitungen nach den Koordinaten der Singularität und den lokalen Elementskordinaten zusammengefasst sind. Die Jacobimatrix  $\mathbf{J}_e$  der finiten Elemente ist in (A.3) angegeben. Die Form des Integrals (4.60) entspricht nun schon fast dem in Anhang B besprochenen Ausdruck. Zur Anwendung des in Anhang B beschriebenen Integrationsverfahrens müssen noch die Funktionen  $G$  und  $f_k$  in globale Koordinaten transformiert und die Jacobimatrix  $\mathbf{J}_S$  der Singulärkoordinatendarstellung bestimmt werden. Aus Abbildung 4.20 folgt

$$r = \sqrt{(x - x_S)^2 + (y - y_S)^2} \quad (4.63)$$

$$\phi = \arctan_2(x_S - x, y - y_S) - \phi_0 \quad (4.64)$$

mit

$$\phi_0 = \frac{2\pi - \beta}{2}. \quad (4.65)$$

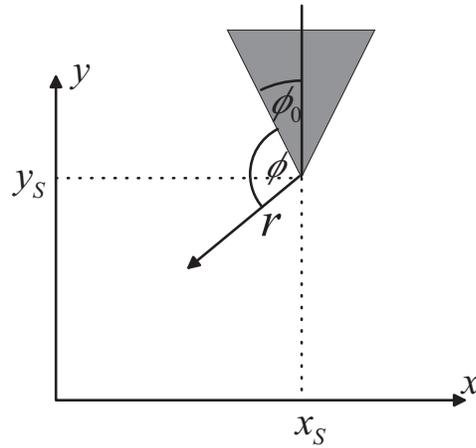


Abbildung 4.20: Zusammenhang der Koordinatensysteme

Hierbei ermöglicht die Funktion  $\arctan_2$  eine eindeutige Zuordnung zwischen den Koordinatensystemen. Mit den Transformationsvorschriften werden die Jacobimatrix und ihre Inverse zu

$$\mathbf{J}_S = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \phi} & \frac{\partial y}{\partial \phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(\phi + \phi_0) & \cos(\phi + \phi_0) \\ -r \cos(\phi + \phi_0) & -r \sin(\phi + \phi_0) \end{pmatrix} \quad (4.66)$$

und

$$\mathbf{J}_S^{-1} = \begin{pmatrix} -\sin(\phi + \phi_0) & \cos(\phi + \phi_0)/r \\ \cos(\phi + \phi_0) & -\sin(\phi + \phi_0)/r \end{pmatrix}. \quad (4.67)$$

Damit lässt sich die Gauß Legendre Integration (Anhang B) auf das Integral (4.60) anwenden. Aufgrund der Symmetrie des Gleichungssystems gilt  $\mathbf{C} = \mathbf{B}^T$  und (4.58) muss nicht explizit berechnet werden. Das Integral in (4.59) enthält ausschließlich die Singulärfunktionen und kann daher unabhängig vom FE Gitter berechnet werden. Hierfür ist es hilfreich das Integrationsgebiet in 3 Teilgebiete  $M_1$ ,  $M_2$  und  $M_3$  (Abb. 4.21) zu unterteilen.

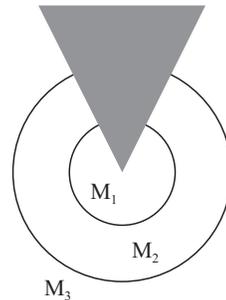


Abbildung 4.21: Integrationsbereiche

Da bei  $r \geq R$  für die Abschneidefunktion  $G(r) \equiv 0$  gilt, verschwindet das Integral über  $M_3$ . In  $M_1$  ist  $r \leq \frac{R}{2}$  und  $G(r) \equiv 1$ . Bei Annahme eines konstanten  $\varepsilon$  ergibt sich das Integral über  $M_1$  damit analytisch exakt zu

$$\int_{M_1} \varepsilon \nabla f_i \nabla f_k d\Omega = \int_{M_1} \varepsilon \mathbf{J}_S^{-1} \nabla_T f_i \mathbf{J}_S^{-1} \nabla_T f_k d\Omega = \begin{cases} \frac{i\pi\varepsilon}{2} \left(\frac{R}{2}\right)^{\frac{2\varepsilon i\pi}{\beta}}, & i = k \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.68)$$

Die zugehörige Rechnung ist in Anhang C zu finden. Innerhalb  $M_2$  muss die Integration numerisch erfolgen, was mit Hilfe der Gleichung (B.2) in Anhang B unter Verwendung von  $J_T = J_S$  erfolgt. Die Besetzung der resultierenden Steifigkeitsmatrix ist in Abbildung 4.22 skizziert. Sowohl die Teilmatrix der linearen Formfunktionen **A** als auch die Kopplungsmatrizen **B** und **C** sind schwach besetzt. Die Teilmatrix **D** ist aufgrund der Orthogonalität der Spitzenfunktionen diagonal. Die Gesamtmatrix ist symmetrisch, positiv definit, schwach besetzt und diagonaldominant.

Das Simulationsverfahren wurde auf das Testbeispiel in Abb. 4.23 angewendet. Die Ergebnisse für das elektrische Potenzial und Feld sind in Abb. 4.24 dargestellt.

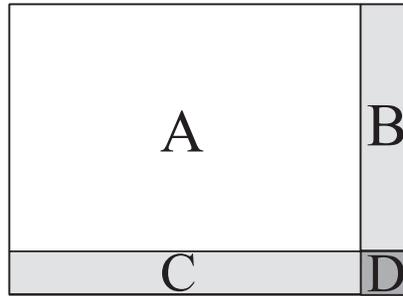


Abbildung 4.22: Struktur der Steifigkeitsmatrix

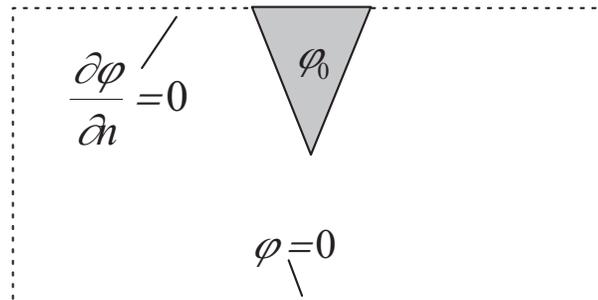


Abbildung 4.23: Testbeispiel

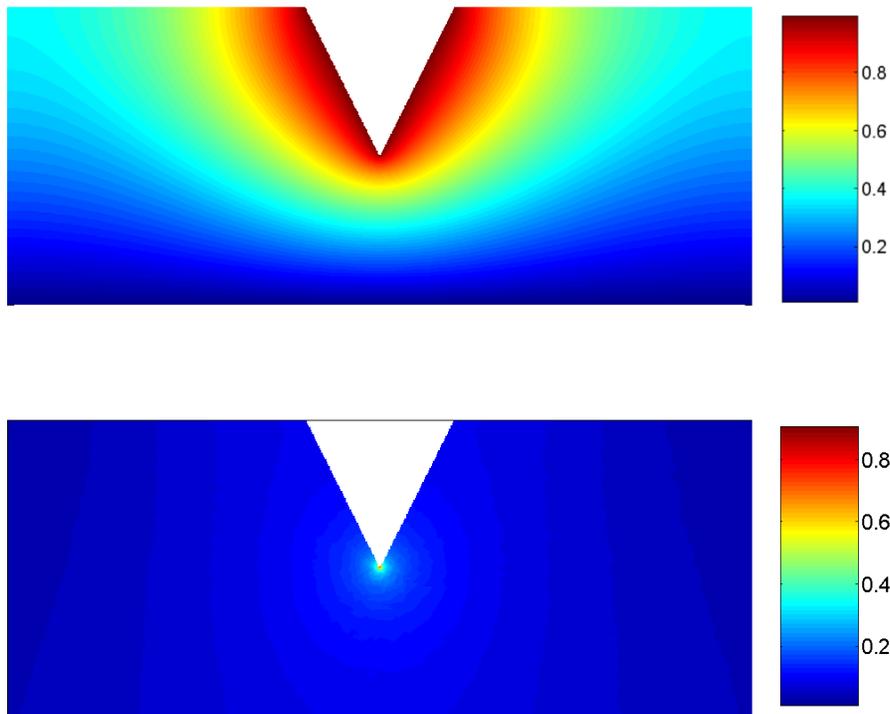


Abbildung 4.24: elektrisches Potenzial und elektrisches Feld

Bei der Konvergenzstudie (s. Kapitel 4.3) wurde das Gitter wie in den Abbildungen 4.25 und 4.26 dargestellt systematisch verfeinert.

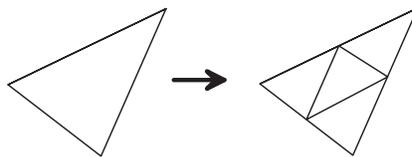


Abbildung 4.25: Elementverfeinerung

Das Konvergenzverhalten der Methode ist der Tabelle 4.2 zu entnehmen [46]. Hierbei ist  $n$  die Anzahl der Knoten und  $J_0(u_n)$  ist das Funktional  $J_n$  für die lineare FEM ohne Singulärfunktionen.  $J_1(u_n)$  und  $J_3(u_n)$  sind jeweils die Werte des Funktionals  $J_n$  für eine und drei Singulärfunktionen. Aufgrund der Symmetrie der Anordnung ergibt die Hinzunahme der unsymmetrischen zweiten Singulärfunktion keine Verbesserung. Daher wurde in der Tabelle auf  $J_2(u_n)$  verzichtet. An den zugehörigen Energiefehlern  $F_{N,0}$ ,  $F_{N,1}$  und  $F_{N,3}$  ist erkennbar, dass sich die Konvergenz der FEM bei Hinzunahme der ersten Singulärfunktion merklich verbessert, während das

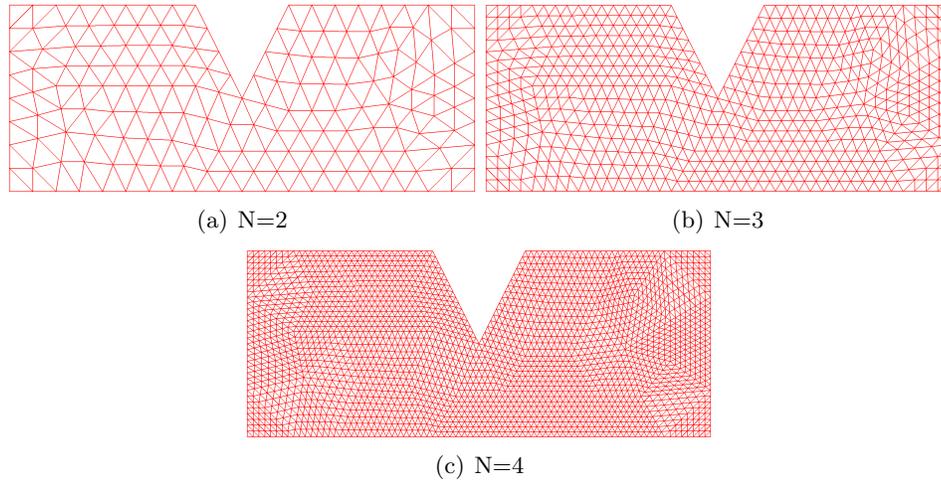


Abbildung 4.26: Gitterverfeinerung

$N$	$n$	$J_0(u_N)$	$F_{N,0}$	$J_1(u_N)$	$F_{N,1}$	$J_3(u_N)$	$F_{N,3}$
1	27	1,5733	0,46667	1,5422	0,43551	1,5416	0,43494
2	111	1,3912	0,28453	1,3821	0,27545	1,3821	0,27540
3	447	1,2844	0,1777	1,2787	0,17199	1,2784	0,17177
4	1791	1,2199	0,11321	1,2143	0,10764	1,2141	0,10744
5	7167	1,1798	0,07311	1,1740	0,06730	1,1738	0,06709
6	28671	1,1544	0,04768	1,1482	0,04156	1,1480	0,04135
7	114687	1,1380	0,03131	1,1318	0,02508	1,1316	0,02489
8	458751	1,1274	0,02069	1,1214	0,01469	1,1212	0,01453
9	1835007	1,1204	0,01376	1,1151	0,00840	1,1150	0,00829

Tabelle 4.2: Konvergenzstudie der FEM ohne und mit Singulärfunktionen

zusätzliche Hinzufügen der dritten Singulärfunktion nur noch zu einer geringfügigen Verbesserung führt (Abb. 4.27). Zur Erzielung guter Ergebnisse muss bei der Auswertung der die Singulärfunktionen enthaltenden Integrale mit sehr vielen Integrationspunkten gearbeitet werden, so wurden im Rahmen dieser Arbeit bis zu 100 Integrationspunkte pro Element verwendet. Dies bedeutet einen wesentlich höheren Rechenaufwand als bei der linearen FEM, die mit einem Integrationspunkt pro Element auskommt. Aufgrund dieses stark erhöhten Rechenaufwandes wird der Einsatz der linearen FEM mit besonders feiner Vernetzung im Bereich der Spitze in vielen Fällen bei vergleichbarer Genauigkeit effizienter sein. Es kann angenommen werden, dass sich dieses Verhalten bei der dreidimensionalen Implementierung verstärkt. Außerdem ist mit einem störenden Einfluss des sich nicht mit dem Spitzenrand überdeckenden Gitters zu rechnen. Aus diesen Gründen wurde auf eine Implementierung für den dreidimensionalen Fall verzichtet.

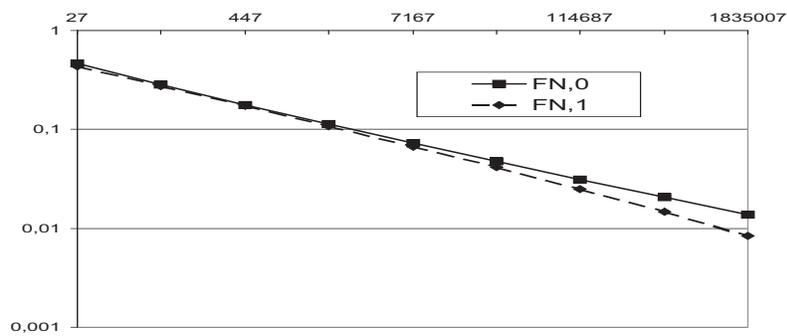


Abbildung 4.27: Fehler in Energienorm

## Kapitel 5

# Numerische Kraftberechnung

In Abschnitt 3 wurden verschiedene Methoden zur Kraftberechnung im elektrostatischen Feld beschrieben. Die erste dieser Methoden war die Berechnung nach Coulomb (3.1) beziehungsweise die sich aus der Einführung des elektrischen Feldes ergebende Kraft (3.5). Des Weiteren wurden aus der Methode der virtuellen Verschiebung eine Kraftdichte im elektrostatischen Feld und der Maxwellsche Spannungstensor hergeleitet. Alle genannten Methoden führen bei Anwendung auf analytisch exakte Ladungs- oder Feldverteilungen auf die exakte Kraftwirkung. In der numerischen Anwendung ist jedoch zu beachten, dass das numerisch berechnete elektrostatische Feld (4.7) nur eine Approximation der exakten Feldstärke  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  ist. In Abb. 5.1 ist eine solche Näherungslösung in 2D und Dreieckselementen dargestellt.

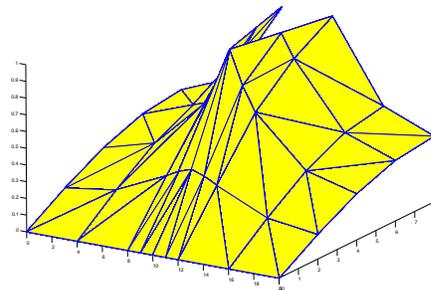


Abbildung 5.1: Eine FEM-Approximationslösung

Man erkennt deutlich, dass die Gesamtfunktion aus aneinander gesetzten Dreiecken besteht, die an den Ecken und Kanten verbunden sind (s. Kapitel 4.4). So folgt aus (4.6), (4.25) und (4.28), dass das Potenzial innerhalb eines

jeden Elements durch eine Funktion der Form

$$\tilde{\varphi}_e(\mathbf{r}) = a_e + b_e x + c_e y \quad (5.1)$$

approximiert wird, wobei die Parameter  $a_e$ ,  $b_e$  und  $c_e$  für jedes Element andere Werte haben. Obwohl das hieraus folgende elektrische Feld

$$\tilde{\mathbf{E}}_e(\mathbf{r}) = - \begin{pmatrix} a_e \\ b_e \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

ebenfalls eine Approximation ist, erfüllt es zumindest innerhalb der Elemente die zugrunde liegenden Maxwell'schen Gleichungen (3.6) und (3.9) bei Ladungsfreiheit. Wie verhält sich dies nun an den Grenzen der Elemente? Die Anwendung von (3.7) auf die Potenzialfunktion in Abb. 5.1 ergibt ein elektrisches Feld, das in Richtung der Kante beim Übergang zwischen den Elementen stetig ist. Durch Anwendung des Satzes von Stokes folgt hieraus, dass (3.6) erfüllt ist [99]. Anders verhält es sich mit dem elektrischen Feld in Normalenrichtung der Elementkanten, da die Lösungsfunktion an den Kanten einen Knick aufweist. Mit Anwendung des Gauß'schen Satzes auf (3.9) lässt sich zeigen, dass ein solches Verhalten bei einem Sprung der Dielektrizitätskonstanten  $\varepsilon(\mathbf{r})$  oder einem Ladungsbelag auf der Kante auftritt. Da aber das Springen der Normalkomponente der elektrischen Feldstärke im Gegensatz zu einer nicht verschwindenden Rotation des elektrischen Feldes immerhin physikalisch ist, eignen sich die hier verwendeten linearen Knodelemente gut zur Beschreibung elektrostatischer Felder. Weil die Lösung jetzt aber im eigentlich ladungsfreien Raum Ladungsverteilungen auf den Kanten suggeriert, kann es bei der weiteren Auswertung des elektrischen Feldes zu Problemen kommen. Aufgrund der besseren Anschaulichkeit wurde die Problematik für den 2D-Fall erläutert, die Ausführungen lassen sich jedoch ohne Weiteres auf den 3D-Fall übertragen.

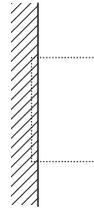
Zunächst soll die Anwendung der Coulombkraft (3.3) zur Berechnung der Kraftwirkung auf einen Körper skizziert werden, wobei zuerst aus dem nach Kapitel 4 berechneten elektrostatischen Feld die Ladungsverteilung auf den Rändern berechnet werden muss. Zur Berechnung der im Volumen  $V$  befindlichen Ladung  $Q$  wird von (3.9) in Integralform ausgegangen

$$Q = \int_V \rho(\mathbf{r}) d\tilde{V} = \oint_A [\varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r})] d\tilde{\mathbf{A}}, \quad (5.3)$$

wobei der Gauß'sche Satz zur Umformung des Volumenintegrals auf der rechten Seite verwendet wurde. In Abb. 5.2 ist die Anwendung auf ein Teilstück einer Grenzfläche skizziert. Da der äußere Raum ladungsfrei ist, kann das Oberflächenintegral bei exakter Feldverteilung über jede die betrachtete Ladung umschließende Hülle ausgeführt werden. Die daraus folgende Ladungsverteilung kann in (3.3) zur Kraftberechnung verwendet werden. Probleme können sich bei der Anwendung auf numerische Feldlösungen ergeben, da



(a) Integrationspfad 1



(b) Integrationspfad 2

Abbildung 5.2: Analytisch äquivalente Integrationspfade

die numerische Lösung physikalisch nicht vorhandene Ladungen im Raum suggeriert und das Oberflächenintegral damit nicht mehr wegunabhängig ist. Auch ist die Kraftberechnung wegen des über alle Ladungen auszuführende Doppelintegrals aufwändig.

Die zweite Möglichkeit der Kraftberechnung, die sich aus der Anwendung von (3.5) ergibt, soll hier nur mit Worten skizziert werden. Genau wie bei der Formel nach Coulomb ist hier zunächst die Ladung zu berechnen. Dazu wird das elektrische Feld am Ort der Ladung benötigt. Die erste Möglichkeit hierfür ist die direkte Verwendung der numerischen Feldwerte. Leider weisen diese im Allgemeinen am Rand der Elemente höhere Fehler als in der Elementmitte auf. Daher muss bei dieser Vorgehensweise mit systematischen Fehlern gerechnet werden.

Eine weitere Möglichkeit ist die Berechnung der  $\mathbf{D}$ -Feldstärke über die zuvor bestimmte Ladung, wobei zur Vermeidung einer singulären Kraft die Ladung flächenhaft verteilt werden muss. Aus der hieraus berechneten  $\mathbf{E}$ -Feldstärke und dem Normalenvektor kann der Kraftvektor berechnet werden, da an den in unserem Fall vorliegenden Randbedingungen die Kraft senkrecht auf der Oberfläche stehen muss. Dies macht jedoch die Kraftberechnung an Ecken und Kanten kompliziert, da hier die Oberfläche keinen eindeutigen Normalenvektor besitzt. Aus dem selben Grund wie bei der zuvor beschriebenen Methode besteht auch hier die Gefahr systematischer Fehler.

Die dritte Möglichkeit der Kraftberechnung ist die Verwendung der elektrostatischen Kraftdichte (3.62), die jedoch bei Anwendung auf numerisch berechnete Feldwerte ebenfalls zu großen Fehlern führt, da auch hier die Feldwerte am Rande des Berechnungsgebietes benötigt werden. Außerdem

wird sie bei in der Elektrostatik oft auftretenden Materialsprünge singulär. Zwei weitere Möglichkeiten der Kraftberechnung ergeben sich aus dem Prinzip der virtuellen Verschiebung (3.45) und der Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors (3.84). Beide haben sich in den letzten Jahren als die weitaus gebräuchlichsten Methoden zur Kraftberechnung in elektrischen und magnetischen Feldern etabliert. Im Gegensatz zu den vorher beschriebenen Methoden basieren diese beiden Ansätze nicht auf der Auswertung der Feldstärke an einzelnen Punkten der Oberfläche. Vielmehr tritt die Feldstärke nur innerhalb von Integralen auf, was unter anderem den Vorteil hat, dass singuläre Kraftdichten an Ecken und Kanten in den Integralen berücksichtigt werden können ohne numerische Probleme zu verursachen. Auch entstehen aufgrund der integralen Formulierung, im Gegensatz zu den anderen Methoden, keine systematischen Fehler. Die Literatur zum Thema Kraftberechnung in elektromagnetischen Feldern ist äußerst vielseitig. Da die Implementierung der Kraftberechnung mit dem Maxwell'schen Spannungstensor recht aufwändig ist, wird oft das Prinzip der virtuellen Verschiebung bevorzugt. Zu Verifikationszwecken werden im Rahmen dieser Arbeit beide Methoden angewendet. Ihre Implementierung ist in den folgenden Kapiteln beschrieben.

## 5.1 Numerische Anwendung des Prinzips der virtuellen Verschiebung

Da der Federbalken des EFM mit Hilfe einer Quelle auf konstantem Potenzial gehalten wird, muss bei der Kraftberechnung mit der Methode der virtuellen Verschiebung die Quellenenergie berücksichtigt werden (Kap. 3.4). Dies kann durch Anwendung von (3.45) implizit erreicht werden. Die naheliegendste Idee der numerischen Implementierung des Prinzips der virtuellen Verschiebung ist vermutlich die Annäherung der eigentlich infinitesimal kleinen Verschiebung durch zwei Simulationen [25]. Die Kraft in Richtung der Verschiebung wird dann durch den Differenzenquotienten

$$F_s = \frac{W_1 - W_0}{s_1 - s_0} \quad (5.4)$$

der Energiedifferenz  $W_1 - W_0$  und der Wegdifferenz  $s_1 - s_0$  angenähert. Diese Vorgehensweise erweist sich jedoch als äußerst unpraktikabel, da für die Berechnung dreier Kraftkomponenten mindestens vier Simulationen benötigt werden. Außerdem führt die Auswertung von (5.4) zu stark fehlerhaften Ergebnissen [25].

Eine bessere Möglichkeit der Kraftberechnung mit der Methode der virtuellen Verschiebung ergibt sich unter Ausnutzung der Lösungsstruktur. Den Ansatz hierfür bildet (3.47), wobei zur Berücksichtigung der vorhandenen Quellen das negative Vorzeichen auf der rechten Seite entfällt (vgl. Kap. 3.4). Durch Darstellung der Kraftdichte

$$\mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}) = \begin{pmatrix} f_x(\tilde{\mathbf{r}}) \\ f_y(\tilde{\mathbf{r}}) \\ f_z(\tilde{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

und der virtuellen Verschiebung

$$\delta \mathbf{s}(\tilde{\mathbf{r}}) = \begin{pmatrix} \delta s_x(\tilde{\mathbf{r}}) \\ \delta s_y(\tilde{\mathbf{r}}) \\ \delta s_z(\tilde{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

in kartesischen Komponenten und Ausführung des Skalarproduktes folgt

$$\delta W = \int_V (f_x(\tilde{\mathbf{r}}) \delta s_x(\tilde{\mathbf{r}}) + f_y(\tilde{\mathbf{r}}) \delta s_y(\tilde{\mathbf{r}}) + f_z(\tilde{\mathbf{r}}) \delta s_z(\tilde{\mathbf{r}})) d\tilde{V}. \quad (5.7)$$

Die virtuelle Änderung der gesamten Energie  $\delta W$  kann demnach in drei voneinander unabhängige Anteile

$$\delta W_x = \int_V f_x(\tilde{\mathbf{r}}) \delta s_x(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{V}, \quad (5.8)$$

$$\delta W_y = \int_V f_y(\tilde{\mathbf{r}}) \delta s_y(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{V} \quad (5.9)$$

und

$$\delta W_z = \int_V f_z(\tilde{\mathbf{r}}) \delta s_z(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{V} \quad (5.10)$$

aufgeteilt werden. Zur numerischen Auswertung muss die virtuelle Verschiebung  $\delta \mathbf{s}$  mit Hilfe endlich vieler Freiheitsgrade beschrieben werden. Ähnlich wie beim Galerkinverfahren wird für die virtuelle Verschiebung in  $x$ -Richtung

$$\delta s_x(\tilde{\mathbf{r}}) = \sum_{j=1}^N \delta s_{x,j} \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \quad (5.11)$$

angesetzt, wobei  $N$  die Anzahl der Knoten auf der betrachteten Oberfläche ist. Die virtuelle Verschiebung  $\delta s_x$  soll aus dreiecksförmigen Elementen zusammengesetzt werden. Damit entspricht die Form der virtuellen Verschiebung der Form der linearen FEM Approximationsfunktion in 2D. Im Rahmen dieser Arbeit werden Flächenkräfte auf Oberflächen berechnet. Da nur an diesen Oberflächen virtuelle Arbeit verrichtet wird, kann (5.8) in ein Oberflächenintegral

$$\delta W_x = \int_A f_{F,x}(\tilde{\mathbf{r}}) \left( \sum_{j=1}^N \delta s_{x,j} \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \right) d\tilde{A} = \sum_{j=1}^N \delta s_{x,j} \int_A f_{F,x}(\tilde{\mathbf{r}}) \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{A} \quad (5.12)$$

umgewandelt werden, wobei  $f_{F,x}$  die  $x$ -Komponente der Flächenkraftdichte ist und die konstanten Koeffizienten  $\delta s_{x,j}$  vor das Integral gezogen wurden. Unter der Voraussetzung linearer Unabhängigkeit kann die Summe in ihre Summanden

$$\delta W_{x,j} = \delta s_{x,j} \int_{A_j} f_{F,x}(\tilde{\mathbf{r}}) \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{A} \quad (5.13)$$

zerlegt werden. Da die  $\psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}})$  außerhalb ihrer Bereiche verschwinden, liefert hier das Integral keinen Anteil. Daher muss das Oberflächenintegral jeweils nur über den Bereich  $A_j$  der Funktion  $\psi_j$  ausgeführt werden. Unter Verwendung von (5.13) in (3.45) kann eine auf den Knoten  $j$  wirkende Kraftkomponente

$$F_{x,j} := \frac{\delta W_{x,j}}{\delta s_{x,j}} = \int_{A_j} f_{F,x}(\tilde{\mathbf{r}}) \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{A} \quad (5.14)$$

definiert werden. Die vorangegangenen Überlegungen lassen sich äquivalent auf die beiden anderen Kraftkomponenten übertragen. Damit wird die gesamte am Knoten  $j$  angreifende Kraft zu

$$\mathbf{F}_j := \begin{pmatrix} \frac{\delta W_{x,j}}{\delta s_{x,j}} \\ \frac{\delta W_{y,j}}{\delta s_{y,j}} \\ \frac{\delta W_{z,j}}{\delta s_{z,j}} \end{pmatrix} = \int_{A_j} \begin{pmatrix} f_{F,x}(\tilde{\mathbf{r}}) \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \\ f_{F,y}(\tilde{\mathbf{r}}) \psi_{y,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \\ f_{F,z}(\tilde{\mathbf{r}}) \psi_{z,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} d\tilde{A}. \quad (5.15)$$

Nach der numerischen Umsetzung der rechten Seite von (3.47) muss nun die linke Seite in eine numerisch berechenbare Form gebracht werden. Durch Einsetzen der elektrostatischen Feldenergie (3.19) gelangt man zu

$$\mathbf{F}_j \delta \mathbf{s}_j = \delta W = \delta \left( \int_V \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 d\tilde{V} \right), \quad (5.16)$$

wobei  $\mathbf{F}_j$  die Knotenkraft nach (5.15) und

$$\delta \mathbf{s}_j(\tilde{\mathbf{r}}) = \begin{pmatrix} \delta s_{x,j} \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \\ \delta s_{y,j} \psi_{y,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \\ \delta s_{z,j} \psi_{z,j}(\tilde{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

die virtuelle Verschiebung sind. Zur Berechnung aller Knotenkräfte muss (5.16) einzeln auf jeden Knoten angewendet werden. Wie bereits erwähnt, erfolgt die virtuelle Verschiebung des Knotens  $j$  bei konstantem Potenzial. Außerdem wird angenommen, dass sowohl die Potenziale als auch die Positionen der umliegenden Knoten bei infinitesimal kleiner virtueller Verschiebung unveränderlich bleiben. Daher findet eine Änderung der Feldenergie nur in den direkt am Knoten  $j$  anliegenden Elementen statt und die Integration über  $V$  kann wegen des  $\delta$ -Operators auf diese Elemente reduziert werden

$$\mathbf{F}_j \delta \mathbf{r}_j = \sum_{\Delta_j} \delta \left( \int_{\Omega_e} \frac{\varepsilon_0}{2} \tilde{\mathbf{E}}^2 d\Omega_e \right). \quad (5.18)$$

Hierbei wurde das Gesamtintegral als die Summe der Einzelintegrale über die Elemente ausgedrückt. Die Darstellung des Integrals in lokalen Koordinaten des jeweiligen Elements führt auf

$$\mathbf{F}_j \delta \mathbf{r}_j = \sum_{\Delta_j} \delta \left( \int_{\Omega_l} \frac{\varepsilon_0}{2} \tilde{\mathbf{E}}^2 J_e d\Omega_l \right), \quad (5.19)$$

wobei  $J_e$  die Determinante der Jacobimatrix des Elements ist. Da in der lokalen Darstellung die Integrationsgrenzen bei der virtuellen Verschiebung unverändert bleiben, kann der  $\delta$ -Operator in das Integral hineingezogen werden. Durch Anwendung der Produktregel folgt

$$\delta W = \sum_{\Delta_j} \int_{\Omega_l} \varepsilon_0 \left( \tilde{\mathbf{E}} \delta \tilde{\mathbf{E}} J_e + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{E}}^2 \delta J_e \right) d\Omega_l, \quad (5.20)$$

womit die Kraft zu

$$\mathbf{F}_j = \frac{\delta W}{\delta \mathbf{r}_j} = \sum_{\Delta_j} \int_{\Omega_l} \varepsilon_0 \left( \tilde{\mathbf{E}} \frac{\delta \tilde{\mathbf{E}}}{\delta \mathbf{r}_j} J_e + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{E}}^2 \frac{\delta J_e}{\delta \mathbf{r}_j} \right) d\Omega_l \quad (5.21)$$

wird. Die Gesamtkraft setzt sich aus der Summe zweier Anteile zusammen. Der erste Anteil folgt aus der sich mit der Verschiebung verändernden Feldstärke, während der zweite Anteil die Volumenänderung der beteiligten Elemente berücksichtigt. Mit den Knotenpotenzialen  $\varphi_j$  wird die Änderung der

elektrischen Feldstärke (4.7) in lokalen Elementskordinaten zu

$$\delta\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_l) = -\delta\left(\sum_{j=1}^{N_e}\varphi_j\mathbf{J}_e^{-1}\nabla_l\psi_j(\mathbf{r}_l)\right) = -\delta\left(\mathbf{J}_e^{-1}\right)\sum_{j=1}^{N_e}\varphi_j\nabla_l\psi_j(\mathbf{r}_l), \quad (5.22)$$

wobei in 3D

$$\nabla_l := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\xi} \\ \frac{\partial}{\partial\eta} \\ \frac{\partial}{\partial\zeta} \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

gilt. Die Auswertung von (5.22) ist wegen des auf die Inverse der Jacobimatrix angewendeten  $\delta$ -Operators sehr aufwändig. Zur Umformung kann unter Ausnutzung der Konstanz der Einheitsmatrix  $\mathbf{I}$  bei der virtuellen Verschiebung

$$0 = \delta\mathbf{I} = \delta\left(\mathbf{J}_e\mathbf{J}_e^{-1}\right) = \delta\mathbf{J}_e\mathbf{J}_e^{-1} + \mathbf{J}_e\delta\mathbf{J}_e^{-1} \quad (5.24)$$

geschrieben werden [67], woraus

$$\delta\mathbf{J}_e^{-1} = -\mathbf{J}_e^{-1}\delta\mathbf{J}_e\mathbf{J}_e^{-1} \quad (5.25)$$

folgt. Einsetzen in (5.22) führt auf

$$\delta\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_l) = \mathbf{J}_e^{-1}\delta\mathbf{J}_e\mathbf{J}_e^{-1}\sum_{j=1}^{N_e}\varphi_j\nabla_l\psi_j(\mathbf{r}_l), \quad (5.26)$$

wobei die  $\delta$ -Operation jetzt nur noch auf die Jacobimatrix, nicht auf ihre Inverse wirkt. Bei Verwendung von (5.26) in (5.21) werden neben der Jacobimatrix und ihrer Inversen auch noch die Ausdrücke  $\frac{\delta\mathbf{J}_e}{\delta\mathbf{r}_i}$  und  $\frac{\delta J_e}{\delta\mathbf{r}_i}$  benötigt. Ihre Berechnung ist in Anhang A beschrieben.

Die numerische Implementierung des Prinzips der virtuellen Verschiebung basiert darauf, dass die Änderung der Lösung, die durch Verschiebung eines Knotens auftritt, aus der numerischen Lösung der Feldverteilung berechnet werden kann. Wie dies für die FEM mit lokalen Ansatzfunktionen funktioniert, wurde oben beschrieben. Die Umsetzung auf die mit Singulärfunktionen angereicherte FEM (s. Kap. 4.5.2) scheitert jedoch daran, dass nicht bekannt ist, wie sich die virtuelle Feldänderung auf die linearen und die singulären Ansatzfunktionen verteilt. Für die Berechnung der Kräfte aus einer mit Hilfe der angereicherten Methode der finiten Elemente berechneten Feldlösung ist das Prinzip der virtuellen Verschiebung daher nicht geeignet. Im Rahmen dieser Arbeit werden bewegte Strukturen betrachtet. Mit Hilfe einer ALE-Formulierung (*arbitrary Lagrangian Eulerian*) wird dabei die Form des FE-Berechnungsgitters der Formänderung angepasst [6]. Hierbei werden die Koordinaten der Knotenpunkte angepasst, nicht jedoch der Zusammenhang der Elemente. Anschaulich ergibt sich die dabei auftretende Verformung des Gitters wie die eines elastischen und masselosen Mediums,

das durch die sich verändernde Geometrie des Berechnungsraumes gedehnt und gestaucht wird. Die Kraftberechnung benötigt die Knoten auf denen Kräfte berechnet werden und die an diesen anliegenden Elemente. Da sich diese wegen der ALE-Formulierung trotz des veränderlichen Gitters nicht ändern, kann die Extraktion dieser Informationen aus dem FE-Gitter vor der Simulation erfolgen und muss nicht in jedem Berechnungsschritt wiederholt werden. Daher wurde die Kraftberechnung in zwei Schritte unterteilt. Der erste Schritt ist die Extraktion der zur Kraftberechnung benötigten Knoten und Elemente vor der Simulation. Da dieser rechenaufwändige Schritt dann nicht mehr während der Simulation erfolgen muss, kann die eigentliche Kraftberechnung im zweiten Schritt effizient arbeiten. Die für die Initialisierung und die Kraftberechnung implementierten Funktionen heißen *VW\_KraftInit* und *VW\_GetKnotenKraft*.

## 5.2 Numerische Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors

In Kapitel 5 wurde erläutert, dass numerisch berechnete Felder bei der Kraftberechnung zu Problemen führen können, weil in der numerischen Lösung auch im eigentlich ladungsfreien Raum zwischen den Elementen implizit Ladungsverteilungen enthalten sind. Bei Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors hat dies zur Folge, dass für eine solche Näherungslösung das Integral (3.84) nicht mehr unabhängig vom Integrationsweg ist. Aufgrund dieser Problematik kommt es leicht zu Unsicherheiten bei der Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors, was auch ein Grund für die Bevorzugung des Prinzips der virtuellen Verschiebung sein kann. Ein Vorteil des Maxwell'schen Spannungstensors ist jedoch, dass zu seiner Berechnung ausschließlich die zuvor berechneten Feldwerte benötigt werden. Er kann daher auf die Ergebnisse beliebiger numerischer Verfahren angewendet werden, da, im Gegensatz zur Methode der virtuellen Verschiebung, die Darstellungsform der Felder unerheblich ist. Daher ist auch die Anwendung auf die in Kapitel 4.5.2 beschriebene mit Singulärfunktionen angereicherte FEM möglich.

Für die Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors zur Kraftberechnung muss zunächst ein Integrationsweg festgelegt werden (vgl. Kap. 3.6). Hierbei wird das Hüllenintegral innerhalb des leitenden Materials geschlossen, wo der Maxwell'sche Tensor wegen  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$  verschwindet (Abb. 5.3).

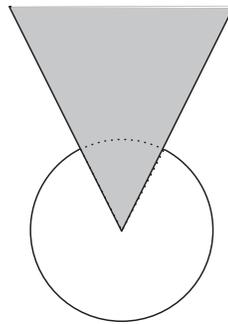


Abbildung 5.3: Integrationsweg zur analytischen Kraftberechnung in 2D

Aus diesem Grunde muss nur im Außenraum integriert werden. Dabei sollten Integrationen entlang oder in der Nähe von Elementübergängen vermieden werden, da die Feldwerte hier die größten Fehler aufweisen [107]. In Abb. 5.4 sind der im Rahmen dieser Arbeit gewählte Verlauf des Integrationsweges und die zugehörigen Normalenvektoren innerhalb eines Elements in 2D zu sehen.

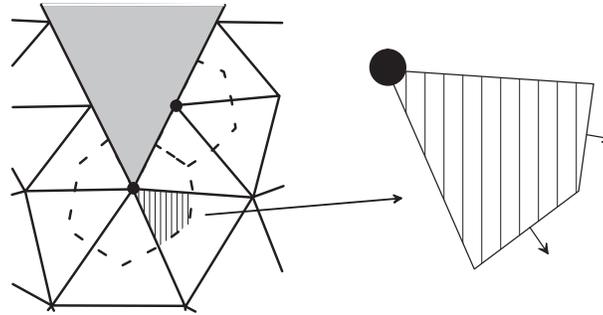


Abbildung 5.4: Integrationsweg und Normalenvektoren zur numerischen Kraftberechnung in 2D

Er verbindet den Elementmittelpunkt mit den Mittelpunkten der Elementkanten. Die weitere Berechnung für den zweidimensionalen Fall erfolgt am Beispiel des in Abb. 5.5 dargestellten Elements eines Gitters der FEM.

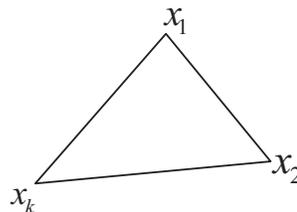


Abbildung 5.5: Mittelpunktsberechnung in 2D

Es soll die Kraft auf den Knoten  $\mathbf{x}_k$  berechnet werden. Der Mittelpunkt des Elements wird als Mittelwert

$$\mathbf{m} = \frac{\mathbf{x}_k + \sum_{i=1}^2 \mathbf{x}_i}{3} \quad (5.27)$$

aller Elementsknoten berechnet. Die Mittelpunkte der Kanten ergeben sich zu

$$\mathbf{k}_i = \frac{\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_i}{2}, \quad i = 1, 2. \quad (5.28)$$

Hieraus können Streckenvektoren der einzelnen Integrationsabschnitte

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{m} - \mathbf{k}_i, \quad i = 1, 2 \quad (5.29)$$

berechnet werden. Die Normalenvektoren  $\mathbf{n}_i$  werden durch Vertauschen und Negieren einer der Komponenten der Integrationskante gebildet [78]. Ist das Skalarprodukt

$$\left( \sum_{j=1}^2 \mathbf{x}_j - 2\mathbf{x}_k \right) \mathbf{n}_i, \quad i = 1, 2 \quad (5.30)$$

größer Null, so zeigt der betrachtete Normalenvektor nach außen. Andernfalls muss seine Richtung umgekehrt werden.

In 3D wird der Integrationspfad entsprechend aus Dreiecksflächen zwischen dem Mittelpunkt des Tetraederelements, einem Seitenflächenmittelpunkt und einem Kantenmittelpunkt gebildet (Abb. 5.6).

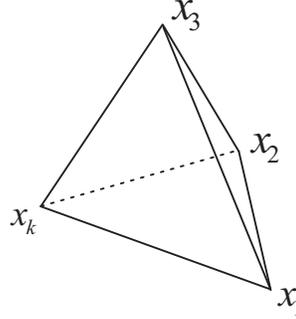


Abbildung 5.6: Mittelpunktsberechnung in 3D

Diese Vorgehensweise gewährleistet das lückenlose Anknüpfen der Integrationspfade nebeneinanderliegender Knoten. Nur so wird bei der Berechnung von Kräften auf zusammenhängenden Oberflächen die gesamte Fläche berücksichtigt. Analog zu der Vorgehensweise in 2D erfolgt die Berechnung des Elementmittelpunktes auch hier durch Bildung des Mittelwertes über alle Knotenkoordinaten des Elements

$$\mathbf{m} = \frac{\mathbf{x}_k + \sum_{i=1}^3 \mathbf{x}_i}{4}. \quad (5.31)$$

Genauso werden die Seitenflächenmittelpunkte und die Kantenmittelpunkte durch Mittelwertbildung der anliegenden Knoten mit

$$\mathbf{d}_i = \frac{\mathbf{x}_k + \sum_{j=1, j \neq i}^3 \mathbf{x}_j}{3}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.32)$$

und

$$\mathbf{k}_i = \frac{\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_i}{2}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.33)$$

berechnet. Die Integrationsflächen werden durch die Normalenvektoren

$$\mathbf{A}_n = \frac{(\mathbf{d}_i - \mathbf{m}) \times (\mathbf{k}_j - \mathbf{m})}{2}, \quad i = 1, 2, 3 \quad j = 1, 2, 3 \quad j \neq i \quad (5.34)$$

mit allen Permutationen  $i, j$  mit  $i \neq j$  gebildet. Die Integration innerhalb eines Elements wird also als Summe von sechs Integralen über ebene Flächen zusammengestellt. Mit Hilfe des Skalarproduktes

$$\left( \sum_{j=1}^3 \mathbf{x}_j - 3\mathbf{x}_k \right) \mathbf{A}_n, \quad n = 1, 2, \dots, 6 \quad (5.35)$$

wird geprüft, ob der jeweilige Normalenvektor nach außen zeigt. Eine typische aus Teilflächen gebildete Integrationsoberfläche ist in Abb. 5.7 dargestellt.

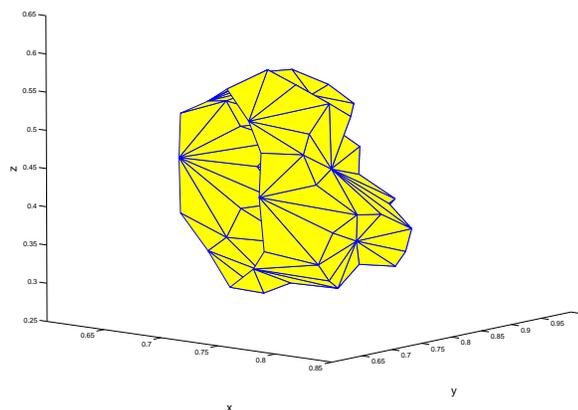


Abbildung 5.7: Integrationsoberfläche für eine Knotenkraft in 3D

Hier lässt sich die wesentlich aufwändigere Implementierung im Vergleich zum Prinzip der virtuellen Verschiebung erahnen, da für jede Teilfläche die Normalenvektoren berechnet und gespeichert werden müssen. In Abbildung 5.8 ist eine Integrationsoberfläche für die Berechnung einer Knotenkraft auf einer Kugel zu sehen. Die Abbildung 5.9 zeigt die Lage der Integrationsoberfläche innerhalb der Elemente der FEM.

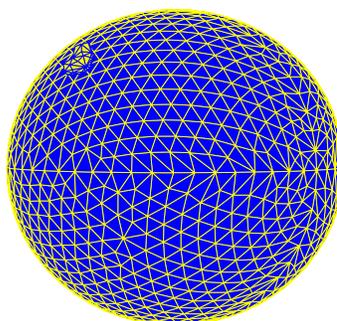


Abbildung 5.8: Integrationsoberfläche auf Kugel

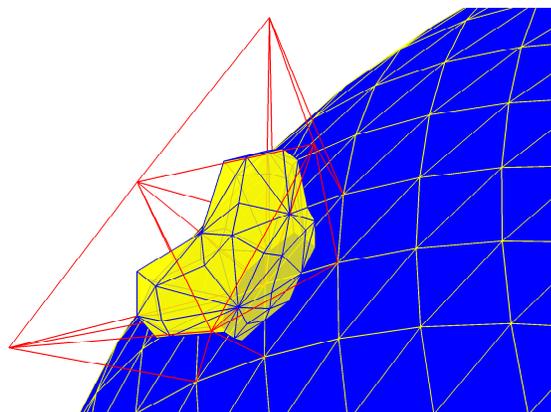


Abbildung 5.9: Verlauf der Integrationsoberfläche innerhalb der Elemente

Ähnlich wie bei der Implementierung der Methode der virtuellen Verschiebung wurden die Initialisierung und die eigentliche Kraftberechnung zur Reduzierung des Rechenaufwandes in zwei Teile unterteilt. Die Initialisierung wird dabei nur einmal vor Beginn der Simulation aufgerufen. Hierauf aufbauend wird dann die Kraftberechnung in jedem Rechenschritt nach der Berechnung der elektrischen Felder durchgeführt. Dies erfolgt mit Hilfe der Funktionen *MST\_KraftInit* und *MST\_GetKnotenKraft*.

### 5.3 Vergleichbarkeit beider Kraftberechnungsmethoden

Zum Zweck der Kontrolle wurden für die Kraftberechnung sowohl das Prinzip der virtuellen Verschiebung als auch die Berechnung über den Maxwell'schen Tensor implementiert. Hierfür muss sicher gestellt sein, dass beide Methoden bei richtiger Implementierung auf die gleichen Knotenkräfte führen. Aus den Ausführungen der Kapitel 5.1 und 5.2 geht hervor, dass es sich bei den Knotenkräften nicht um in der Realität vorhandene Kräfte handelt. Vielmehr sind in ihnen die auf die umliegenden Bereiche verteilten Kraftdichten zusammengefasst. Ein Vergleich ist nur möglich, wenn dies bei beiden Methoden in gleicher Weise geschieht. Im Folgenden soll dies für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Implementierungen untersucht werden.

Da bei der virtuellen Verschiebung eines Knotens alle anderen Knoten unverändert bleiben, ergibt sich für einen dreieckigen Teilbereich der Kraftfläche die in Abbildung 5.10 dargestellte Situation.

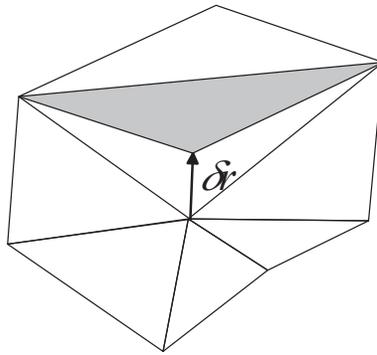


Abbildung 5.10: Virtuelle Verschiebung eines Knotens

Wegen der innerhalb eines Elements konstanten Feldstärke ist auch die Flächenkraftdichte über die Angriffsfläche homogen verteilt. Durch Herausziehen der Flächenkraftdichte  $f_{F,x}$  aus dem Integral wird die  $x$ -Komponente der Knotenkraft (5.14) zu

$$F_{x,j} = f_{F,x} \int_{A_j} \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{A}, \quad (5.36)$$

womit sich für den in Abb. 5.10 dargestellten Teilbereich

$$F_x = f_{F,x} \int_{A_D} \psi_{x,j}(\tilde{\mathbf{r}}) d\tilde{A} = f_{F,x} \int_0^1 \int_0^{1-\eta} \psi_i(\xi, \eta) J_D d\xi d\eta \quad (5.37)$$

ergibt. Hierbei ist die Determinante  $J_D$  der Jacobimatrix des Teilbereichs durch die Determinante der Jacobimatrix (A.3) gegeben. Die Erweiterung

auf alle drei Kraftkomponenten führt auf

$$\mathbf{F} = \mathbf{f}_F \int_0^1 \int_0^{1-\eta} \psi_j(\xi, \eta) J_e d\xi d\eta = \frac{J_e}{6} \mathbf{f}_F = \frac{\mathbf{F}_D}{3}. \quad (5.38)$$

Dabei ist der Wert des Integrals und damit die Knotenkraft vom Index  $j$  der Formfunktion  $\psi_j(\xi, \eta)$  unabhängig. Die gesamte auf den dreieckförmigen Oberflächenausschnitt wirkende Kraft  $\mathbf{F}_D$  wird also beim im Rahmen dieser Arbeit implementierten Prinzip der virtuellen Verschiebung gleichmäßig auf die drei anliegenden Knoten verteilt.

Zur Untersuchung der Kraftverteilung bei Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors wird der in Abbildung 5.11 dargestellte Teil einer Oberfläche betrachtet. Aufgrund der in Kapitel 5.2 beschriebenen Integrationspfade werden an den Knotenpunkten jeweils die Kraftdichteverteilungen innerhalb der sie umschließenden schraffierten Flächen zusammengefasst.

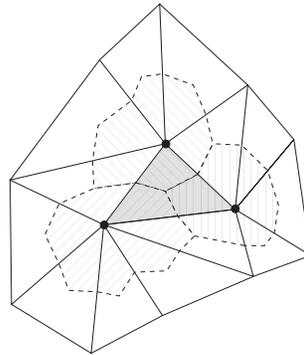


Abbildung 5.11: Verteilung der Kraftdichte auf die Knoten mit dem Maxwell'schen Spannungstensor

Damit ergibt sich für einen Knoten des grauen Dreiecks die in Abbildung 5.12 dargestellte Situation.

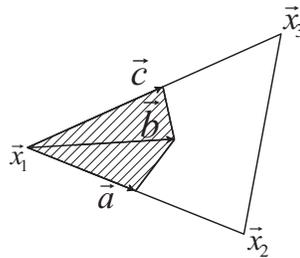


Abbildung 5.12: Teilfläche eines Elements

Mit den Vektoren  $\mathbf{x}_1$  bis  $\mathbf{x}_3$  zu den Eckpunkten des Dreiecks wird sein Mit-

telpunkt (5.32) zu

$$\mathbf{d} = \frac{\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3}{3}. \quad (5.39)$$

Die schraffierte Fläche ergibt sich mit den Vektoren

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1}{2}, \quad \mathbf{b} = \mathbf{d} - \mathbf{x}_1, \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1}{2} \quad (5.40)$$

zu

$$\mathbf{A}_1 = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{2} + \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{2} = \frac{\mathbf{b} \times (\mathbf{c} - \mathbf{a})}{2}. \quad (5.41)$$

Ausmultiplizieren führt auf

$$\mathbf{A}_1 = \frac{\mathbf{x}_1 \times \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \times \mathbf{x}_3 + \mathbf{x}_2 \times \mathbf{x}_3}{6} = \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \times (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1)}{2}, \quad (5.42)$$

was genau einem Drittel der Gesamtfläche des Dreiecks entspricht. Da die Kraftdichte innerhalb des Dreiecks konstant ist, wird dem Knoten  $\mathbf{x}_1$  die Kraft

$$\mathbf{F} = \mathbf{f}_F \|\mathbf{A}_1\| = \frac{\mathbf{F}_D}{3} \quad (5.43)$$

zugeordnet, was genau einem Drittel der gesamten auf das Dreieck wirkenden Kraft entspricht. Da keine Forderungen an die Geometrie des Dreiecks gestellt wurden, muss die Rechnung für jeden der drei Knoten zu dem selben Ergebnis kommen. Hieraus ergibt sich unmittelbar, dass die Gesamtkraft wie bei der virtuellen Verschiebung gleichmäßig auf alle drei Knoten verteilt wird.

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass der Mittelpunkt eines Dreiecks auf verschiedene Arten definiert werden kann. Der Schnittpunkt der Winkelhalbierenden oder der Mittelsenkrechten sind nur zwei Beispiele. Jedoch führt nur die Definition nach (5.32) zu einer gleichmäßigen Aufteilung der Kraft auf die Knoten.

Es wurde gezeigt, dass beide im Rahmen dieser Arbeit implementierten Kraftberechnungsmethoden theoretisch zu exakt identischen Knotenkräften führen. Da die Untersuchung des zweidimensionalen Falles trivial ist, wurden die Ausführungen in diesem Kapitel auf den dreidimensionalen Fall beschränkt. Aufgrund der festgestellten direkten Vergleichbarkeit konnten beide Methoden gut verifiziert werden. Es ergab sich auch bei den auf numerische Feldwerte angewendeten Kraftberechnungsmethoden in allen Fällen eine exakte Übereinstimmung der Knotenkräfte.

## 5.4 Test der numerischen Kraftberechnung

In diesem Kapitel werden die durchgeführten Implementierungen des Prinzips der virtuellen Verschiebung und des Maxwell'schen Spannungstensors anhand analytisch berechenbarer Beispiele in 2D und 3D getestet. Zunächst werden dabei Modelle verwendet, die nur Dirichlet- und verschwindende Neumannrandbedingungen enthalten, da sich derartige Randbedingungen auch bei einer reinen FEM-Formulierung ohne Ankopplung der Methode der Randelemente (BEM) berücksichtigen lassen. Aus diesem Grunde eignen sich diese Modelle gut zur ersten Erprobung der Kraftberechnung. Weitere Testbeispiele, die bereits als vereinfachte Modelle der Spitze des EFM verwendet werden können, beinhalten offene Randbedingungen. Hier kommt teilweise die FEM / BEM Formulierung zum Einsatz [7] [6].

### 5.4.1 Das Segment eines Zylinderkondensators in 2D

Als erste Testanordnung für 2D wird ein Viertel eines idealen Zylinderkondensators der Länge  $l$  betrachtet (Abb. 5.13). Die vorgegebenen Potenziale auf den Elektroden werden als Dirichletbedingungen ins Modell eingebracht, während die verschwindende Normalenkomponente des elektrischen Feldes auf den Seitenflächen durch Neumannrandbedingungen berücksichtigt werden.

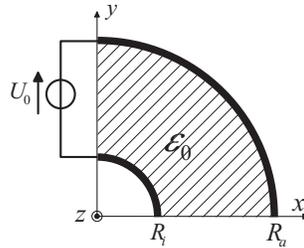


Abbildung 5.13: Zylinderkondensator in 2D

Das elektrische Potenzial  $\varphi(r, \phi)$ , die elektrische Feldstärke  $\mathbf{E}(r, \phi)$  und die auf die innere Elektrode wirkende Flächenkraftdichte  $\mathbf{f}_F(r = R_i, \phi)$  sind analytisch durch

$$\varphi(r, \phi) = \frac{U_0}{\ln \frac{R_a}{R_i}} \ln \frac{R_a}{r}, \quad (5.44)$$

$$\mathbf{E}(r, \phi) = \frac{U_0}{r \ln \frac{R_a}{R_i}} \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix} \quad (5.45)$$

und

$$\mathbf{f}_F(r = R_i, \phi) = \frac{\varepsilon_0}{2} \left( \frac{U_0}{R_i \ln \frac{R_a}{R_i}} \right)^2 \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix} \quad (5.46)$$

gegeben. Damit ergibt sich die gesamte auf die innere Elektrode wirkende Kraft pro Längeneinheit  $l_0$  zu

$$\mathbf{F}/l_0 = \frac{\varepsilon_0}{2R_i} \left( \frac{U_0}{\ln \frac{R_a}{R_i}} \right)^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.47)$$

Mit  $l = l_0 = R_i = 1$ ,  $R_a = 3$ ,  $U_0 = 1V$  wird die exakte Kraft zu  $F_x = F_y = 3,668 pN$ . In Abbildung 5.14 ist die  $x$ -Komponente der numerisch berechneten Gesamtkraft für verschiedene Berechnungsgitter über der Anzahl der Gitterknoten aufgetragen. Während der Fehler bei 45 Knotenpunkten noch ungefähr bei 20% liegt, beträgt er bei 6872 Knotenpunkten nur noch 0,8%. Mit feiner werdender Diskretisierung konvergiert die Kraft also sehr gut gegen den exakten Wert. Da sich die  $y$ -Komponente der Kraft praktisch identisch verhält, wurde auf ihre Darstellung verzichtet.

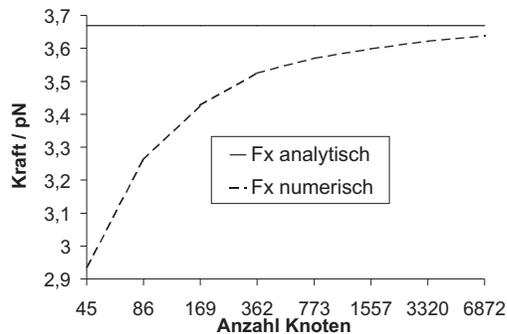


Abbildung 5.14: Kraftwirkung in Abhängigkeit der Knotenanzahl

### 5.4.2 Das Segment eines Kugelkondensators in 3D

Im zweiten Testbeispiel soll die dreidimensionale Kraftberechnung verifiziert werden. Hierfür wird ein Segment eines Kugelkondensators (Abb. 5.15) betrachtet.

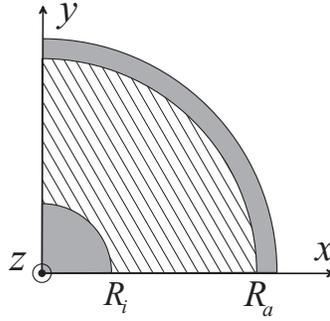


Abbildung 5.15: Segment eines Kugelkondensators

Die analytischen Ausdrücke für das elektrische Potenzial  $\varphi(r, \phi)$ , das elektrische Feld  $\mathbf{E}(r, \phi)$  und die auf die innere Elektrode wirkende Flächenkraftdichte  $\mathbf{f}_F(r = R_i, \phi)$  sind

$$\varphi(r, \theta, \phi) = \frac{U_0 R_i}{R_a - R_i} \left( \frac{R_a}{r} - 1 \right), \quad (5.48)$$

$$\mathbf{E}(r, \theta, \phi) = \frac{U_0 R_a R_i}{(R_a - R_i) r^2} \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (5.49)$$

und

$$\mathbf{f}_F(r = R_i, \theta, \phi) = \frac{\varepsilon_0}{2} \left( \frac{U_0 R_a}{(R_a - R_i) R_i} \right)^2 \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (5.50)$$

Damit ergibt sich die gesamte auf die innere Elektrode wirkende Kraft zu

$$\mathbf{F} = \frac{\varepsilon_0 \pi}{8} \left( \frac{U_0 R_a}{R_a - R_i} \right)^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.51)$$

Mit  $R_i = 1$ ,  $R_a = 3$ ,  $U_0 = 1V$  wird die exakte Kraft  $F_x = F_y = -F_z = 7,823 pN$ . In Abbildung 5.16 ist die  $x$ -Komponente der numerisch berechneten Gesamtkraft für verschiedene Berechnungsgitter über der Anzahl der Gitterknoten aufgetragen. Auch hier ist eine gute Konvergenz erkennbar, wobei der Fehler beim größten Gitter nun bei ca. 40% liegt und mit feinerer Vernetzung auf 3,5% zurückgeht.

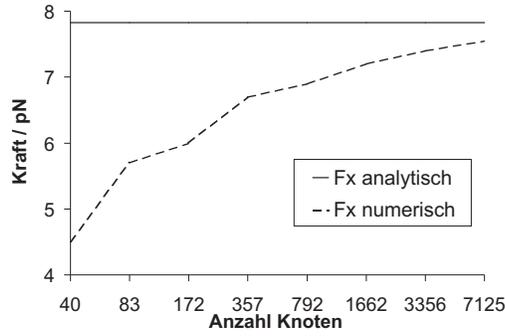


Abbildung 5.16: Kraftwirkung in Abhängigkeit der Knotenanzahl

### 5.4.3 Ein EFM-Spitzenmodell in 2D

Im dritten Testbeispiel (Abb. 5.17) wird die Kraftwirkung auf den unendlich in  $z$ -Richtung ausgedehnten Zylinder mit  $D = 2d$  und  $U_0 = 1V$  berechnet.

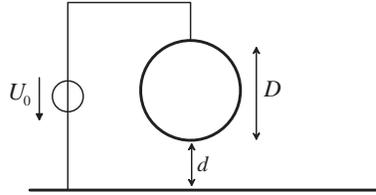


Abbildung 5.17: Zylinder über unendlich ausgedehnter Fläche in 2D

Dies kann bereits als einfaches zweidimensionales Modell der Spitze eines EFM verwendet werden. Mit Hilfe der Spiegelungsmethode erhält man die exakten Ausdrücke für das elektrostatische Potenzial und das elektrische Feld

$$\varphi(\mathbf{r}) = k \frac{r_2}{r_1} \quad (5.52)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = k \left( \frac{\mathbf{r}_1}{r_1^2} - \frac{\mathbf{r}_2}{r_2^2} \right) \quad (5.53)$$

mit

$$k = \frac{U_0}{\ln \frac{\sqrt{1+\frac{D}{d}}+1}{\sqrt{1+\frac{D}{d}}-1}}, \quad \mathbf{r}_1 = \mathbf{r} - \left( d\sqrt{1+\frac{D}{d}} \right), \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r} + \left( d\sqrt{1+\frac{D}{d}} \right). \quad (5.54)$$

Hieraus folgt als exakte Kraftwirkung auf den Zylinder

$$\mathbf{F}/l_0 = -\frac{\pi\epsilon_0 k^2}{d\sqrt{1+\frac{D}{d}}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.55)$$

Zur Berechnung dieses Beispiels mit der unverkoppelten FEM wird das Modell mit Neumannrandbedingungen begrenzt werden. Es zeigt sich eine sehr starke Abhängigkeit der berechneten Kraft von den gewählten Randbedingungen. So wird das elektrische Feld oberhalb des Zylinders durch die Neumannbedingungen geschwächt, wodurch die in diesem Bereich wirkende Zugspannung geringer wird. Auf Grunde dieses systematischen Fehlers sind die mit der FEM berechneten Werte für die Kraft zwischen Zylinder und Grundplatte deutlich zu groß. Dieses Problem kann durch Einsatz der gekoppelten FEM / BEM behoben werden [6]. So kann der Fehler der mit diesem Ansatz berechneten Kraft auf 1,7% bei 7210 Freiheitsgraden reduziert werden.

#### 5.4.4 Ein EFM-Spitzenmodell in 3D

Für das vierte Testbeispiel wird der Zylinder des vorigen Beispiels durch eine Kugel ersetzt (Abb. 5.18).

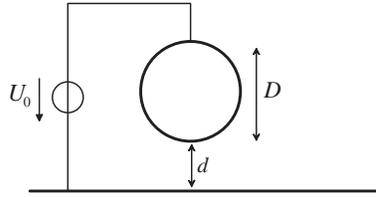


Abbildung 5.18: Kugel über unendlich ausgedehnter Fläche in 3D

Hierbei handelt es sich bereits um ein geläufiges dreidimensionales Modell für die Spitze eines EFM über einer ebenen und leitfähigen Probenoberfläche. Mit Hilfe der Spiegelungsmethode lassen sich das Potenzial und das elektrische Feld als unendliche Reihen

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} k_n \left( \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n\|} - \frac{1}{\|\mathbf{r} + \mathbf{r}_n\|} \right) \quad (5.56)$$

und

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} k_n \left( \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_n}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n\|^3} - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}_n}{\|\mathbf{r} + \mathbf{r}_n\|^3} \right) \quad (5.57)$$

mit

$$k_1 = \frac{U_0 D}{2}, \quad z_1 = d + \frac{D}{2}, \quad (5.58)$$

$$k_{n+1} = k_n \frac{D}{2(d + z_n) + D}, \quad z_{n+1} = d + \frac{D}{2} - \frac{D^2}{4(d + z_n) + 2D} \quad (5.59)$$

und

$$\mathbf{r}_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z_n \end{pmatrix} \quad (5.60)$$

schreiben. Als Kraft auf die Kugel ergibt sich damit

$$\mathbf{F} = -4\pi\varepsilon_0 \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_m k_n}{\|\mathbf{r}_m + \mathbf{r}_n\|^2}. \quad (5.61)$$

Alternativ kann auch

$$\mathbf{F} = \frac{\partial W}{\partial d} = \frac{U_0}{2} \frac{\partial Q}{\partial d} = \frac{U_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial q_n}{\partial d} \quad (5.62)$$

mit

$$q_n = 4\pi\varepsilon_0 k_n, \quad (5.63)$$

$$\frac{\partial k_1}{\partial d} = 0, \quad \frac{\partial k_{n+1}}{\partial d} = 1 + \frac{D^2 \left(1 + \frac{\partial z_n}{\partial d}\right)}{(2(d+z_n) + D)^2} \quad (5.64)$$

und

$$\frac{\partial k_1}{\partial d} = 0, \quad \frac{\partial k_{n+1}}{\partial d} = \frac{D \left(\frac{\partial k_n}{\partial d} - \frac{2k_n(1 + \frac{\partial k_n}{\partial d})}{2(d+z_n)+D}\right)}{2(d+z_n) + D} \quad (5.65)$$

verwendet werden, was dem in [29] gegebenen Ausdruck entspricht. Hierbei ist interessant, dass die Ausdrücke 5.61 und 5.62 nur für den Fall unendlich vieler Summenglieder identische Werte für die Kraft liefern. Der Grund hierfür ist, dass die Äquipotenzialfläche  $U_0$  (5.62) der Ersatzanordnung nur für unendlich viele Ladungen exakt der gewünschten Kugelform entspricht. Da die  $k_n$  aber sehr schnell gegen Null konvergieren, können die Reihen bereits nach wenigen Termen abgebrochen werden, ohne dass dabei ein großer Fehler entsteht. Die Gesamtkraft ergibt sich mit  $U_0 = 1V$ ,  $D = 40$  und  $d = 20$  zu  $13,426 pN$ . In Abbildung 5.19 ist die analytisch berechnete Kraftdichteverteilung auf der Kugel zu sehen.

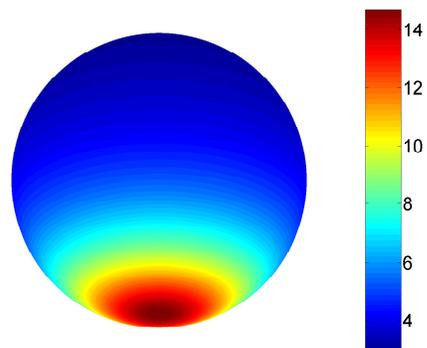


Abbildung 5.19: Analytische Kraftdichteverteilung

Aufgrund der Rotationssymmetrie ist die Kraftdichte unabhängig vom Azimutwinkel  $\phi$ . Das Minimum des Betrags der Kraftdichte tritt auf der von der Probe abgewandten Seite ( $\theta = 0$ ) auf, während das Maximum auf der der Probe zugewandten Seite ( $\theta = \pi$ ) erreicht wird.

Aus den numerisch berechneten Knotenkräften (Abb. 5.20) kann durch Interpolation eine Kraftdichteverteilung (Abb. 5.21) berechnet werden.

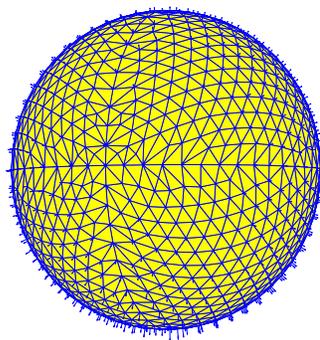


Abbildung 5.20: Numerische Knotenkräfte

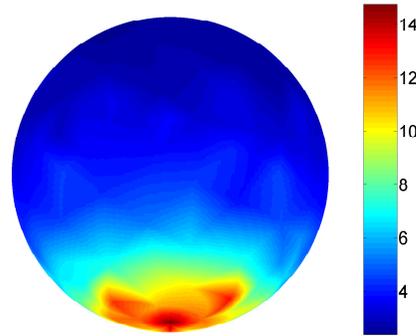
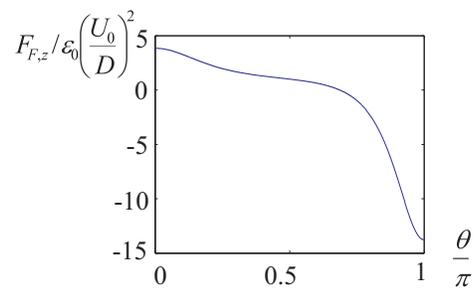
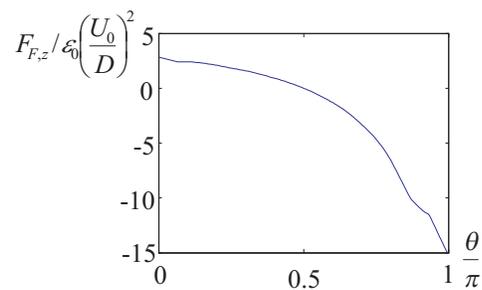
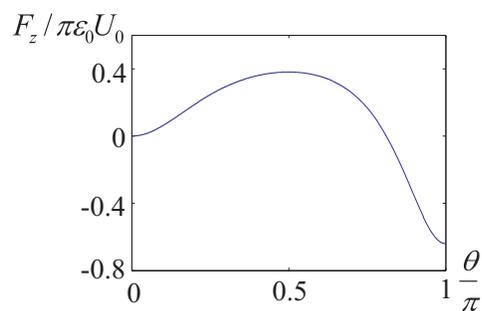


Abbildung 5.21: Numerische Kraftdichteverteilung

Es ist deutlich zu sehen, dass der numerisch berechnete Kraftdichteverlauf nicht rotationssymmetrisch ist, da das Gitter der FEM keine Rotationssymmetrie aufweist. Dennoch scheinen die prinzipielle Verteilung und die Größenordnung mit den analytisch berechneten Werten (Abb. 5.19) übereinzustimmen. In Abbildung 5.22 ist jeweils der Verlauf der  $z$ -Komponente der analytisch und der numerisch berechneten Kraftdichte vom oberen Pol ( $\frac{\theta}{\pi} = 0$ ) bis zum unteren Pol ( $\frac{\theta}{\pi} = 1$ ) dargestellt. Hierbei wurde die Kraftdichte aus der Mittelung entlang eines Streifens in azimuthaler Richtung bestimmt. Da die Kraftdichte orthogonal zur Kugeloberfläche wirkt, ergibt ihr Integral über die obere Kugelhälfte eine in positive  $z$ -Richtung wirkende Kraft, während die resultierende Kraft auf der unteren Kugelhälfte in negative  $z$ -Richtung wirkt. Aufgrund der Rotationssymmetrie verschwinden die anderen Kraftkomponenten. In Abbildung 5.24 ist die Gesamtkraft, die auf eine Teilkugel bis zum Winkel  $\theta$  wirkt, zu sehen. Hier wird deutlich, dass bei Vernachlässigung der auf die obere Kugelhälfte wirkende Kraftdichte bei der Berechnung der Gesamtkraft ein Fehler von ungefähr 60% gemacht werden würde. Vergleichsrechnungen mit der ungekoppelten FEM und Neumannrandbedingungen in Kugelnähe bestätigen diesen Wert, da hier Kraftwerte berechnet wurden die mehr als 50% zu groß waren. Dieser Fehler konnte klar auf die Neumannrandbedingungen zurückgeführt werden, da er auch bei feinerem Gitter erhalten blieb. Bei ausreichendem Abstand zu den Rändern und der Verwendung von 6180 Knoten wird die Kraft zu  $14,25 \text{ pN}$  berechnet. Dies entspricht einem Fehler von 6%.

Abbildung 5.22: Analytische Kraftdichte in Abhängigkeit des Winkels  $\Theta$ Abbildung 5.23: Numerische Kraftdichte in Abhängigkeit des Winkels  $\Theta$ Abbildung 5.24: Bis zum Winkel  $\Theta$  wirkende analytische Gesamtkraft

## Kapitel 6

# Simulation des elektrostatischen Kraftmikroskops

In diesem Kapitel werden die im Rahmen dieser Arbeit implementierten Methoden auf die Berechnung der an einem EFM wirkenden Kräfte angewendet. Zum Zweck des Vergleichs werden dabei zunächst einige Beispiele aus der Literatur verwendet. Da die Literatur im Allgemeinen den Einfluss des Federbalkens vernachlässigt, beschränken sich die Berechnungen zunächst auf die Spitze des EFM. Im letzten Beispiel wird der Federbalken in die Berechnung einbezogen.

In [54] wird ein analytischer Ausdruck für die Kraft zwischen einer Elektrode und einer unendlich ausgedehnten Ebene hergeleitet. Hierbei wird die Näherung verwendet, dass die elektrischen Feldlinien kreisförmig verlaufen und sich das Feld zwischen jeweils zwei Punkten auf der Spitze und der Probe wie innerhalb eines idealen Plattenkondensators verhält. Zur Validierung wird das Modell an dem auch in Kapitel 5.4.4 dieser Arbeit beschriebenen analytisch berechenbaren Beispiel einer Kugel über einer unendlich ausgedehnten leitenden Fläche getestet. Die mit Hilfe des vereinfachten Modells berechnete Kraftwirkung stimmt sehr gut mit der analytisch exakten Kraft überein. Hieraus schließen die Autoren, dass das Modell auch für eine konusförmige Spitze über einer unendlich ausgedehnten Ebene gute Ergebnisse bringt, was durch Vergleich mit anderen Veröffentlichungen validiert wird. Da das Modell jedoch Rotationssymmetrie voraussetzt, kann mit ihm nicht der Einfluss des Federbalkens berechnet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wird das Modell der konusförmigen Spitze (Abb. 6.1) über der unendlich ausgedehnten leitenden Ebene verwendet, um die implementierten numeri-

schen Verfahren zu verifizieren. Hierbei wurde

$$U = 1V, \quad H = 20 \mu m, \quad h = 100 nm, \quad \theta = 15^\circ \quad (6.1)$$

gewählt, wobei  $\theta$  der halbe Öffnungswinkel der Spitze ist. Die berechnete Kraft betrug  $29,6 pN$  was im Vergleich zu der in [54] angegebenen Näherung  $28,2 pN$  eine Abweichung von 5% bedeutet.

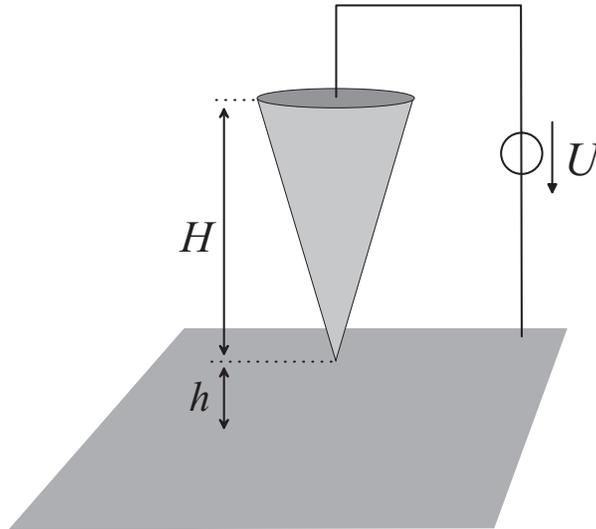


Abbildung 6.1: Konische EFM Spitze über leitender Ebene

In [9] wird die elektrostatische Kraftwirkung bei verschiedenen Spitzengeometrien untersucht. Die Spitzen werden hierbei mit den in Abbildung 6.2 gegebenen Parametern charakterisiert. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Geometrien nach Tabelle 6.1 bei  $d = 50 nm$ ,  $d = 100 nm$  und  $d = 1 \mu m$  untersucht, wobei zwischen Spitze und Probe die Spannung  $U_0 = 1V$  angenommen wurde.

Spitze	$R/nm$	$\theta/^\circ$	$L/\mu m$
$A_1$	10	10	4
$A_2$	20	10	4
$B_1$	50	35	4
$B_2$	100	35	4

Tabelle 6.1: Spitzenparameter

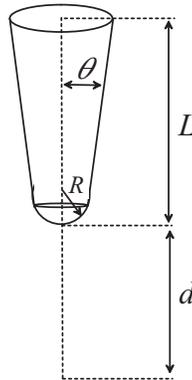
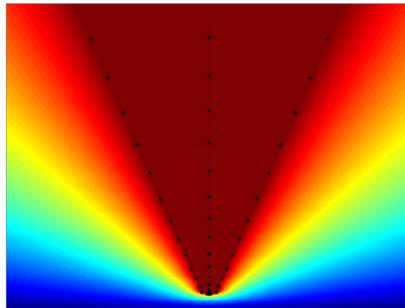


Abbildung 6.2: EFM-Spitze

Die in [9] angegebenen Kraftwirkungen ließen sich mit Hilfe der Methode der Ersatzladungen gut reproduzieren. Die Ersatzladungen  $q_i := q(\mathbf{r}_i)$  wurden dabei mit größer werdendem Abstand entlang der Spitzenachse angeordnet, während die Vorgabe des Potentials am Rand der Spitze ( $\varphi_n := \varphi(\mathbf{r}_n)$ ) erfolgte (Abb. 6.3).

Abbildung 6.3: Mit der Ersatzladungsmethode berechnete Potenzialverteilung für die Spitze  $A_1$

Spitze	$d = 50 \text{ nm}$	$d = 100 \text{ nm}$	$d = 1 \text{ } \mu\text{m}$
$A_1$	$19,1 \text{ pN}$	$14,2 \text{ pN}$	$3,7 \text{ pN}$
$A_2$	$22,7 \text{ pN}$	$20 \text{ pN}$	$3,8 \text{ pN}$
$B_1$	$74,6 \text{ pN}$	$56 \text{ pN}$	$15,8 \text{ pN}$
$B_2$	$107,6 \text{ pN}$	$63,6 \text{ pN}$	$20,6 \text{ pN}$

Tabelle 6.2: Mit der Ersatzladungsmethode berechnete Kräfte

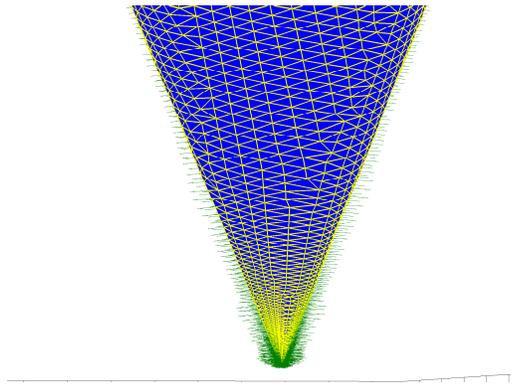
Hieraus folgt für jede Potenzialvorgabe eine Gleichung

$$U_0 = \varphi_n = \sum_{i=1}^N k_i \left( \frac{1}{\|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_i\|} - \frac{1}{\|\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_i\|} \right). \quad (6.2)$$

Aus diesem Gleichungssystem können die Koeffizienten  $k_i$  bestimmt werden können, wobei wegen (3.8)

$$k_i = \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0 U_0} \quad (6.3)$$

gilt. Hier wird die Nähe zur Spiegelungsmethode (Kap. 5.4) deutlich. Ein entscheidender Unterschied ist jedoch, dass bei der Methode der Ersatzladungen zum Erhalt der Koeffizienten  $k_i$  zunächst ein lineares Gleichungssystem gelöst werden muss. Auch ergeben sich im Gegensatz zur Spiegelungsmethode keine exakten Ausdrücke oder konvergierenden Reihen für das Potenzial [71] [122]. Außerdem werden die Vorgaben für das Potenzial nur in Punkten  $\mathbf{r}_n$ , nicht auf der gesamten Spitze erfüllt. Dies erschwert die Handhabung der Methode, da besonders bei Spitzen mit großem Öffnungswinkel und vielen Koeffizienten  $k_i$  das Gleichungssystem (6.2) schlecht konditioniert sein kann. Dennoch konnten die in [9] gegebenen Kräfte für die in Tabelle 6.1 aufgelisteten Spitzen sehr gut reproduziert werden (Tabelle 6.2). Mit Hilfe der Methode der virtuellen Verschiebung bzw. des Maxwellschen Spannungstensors wurden die in Abbildung 6.4 dargestellten Knotenkräfte berechnet. Die Anwendung auf die in Tabelle 6.1 aufgelisteten Spitzen führt auf die Kräfte in Tabelle 6.3.

Abbildung 6.4: Numerisch berechnete Knotenkräfte für die Spitze  $A_1$

Spitze	$d = 50 \text{ nm}$	$d = 100 \text{ nm}$	$d = 1 \text{ } \mu\text{m}$
$A_1$	$20,2 \text{ pN}$	$15,0 \text{ pN}$	$3,7 \text{ pN}$
$A_2$	$24,1 \text{ pN}$	$18,8 \text{ pN}$	$4 \text{ pN}$
$B_1$	$70,3 \text{ pN}$	$59,7 \text{ pN}$	$16,1 \text{ pN}$
$B_2$	$116,8 \text{ pN}$	$68,8 \text{ pN}$	$18,1 \text{ pN}$

Tabelle 6.3: Numerisch berechnete Kräfte

Für alle Spitzen zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der Berechnung mit der FEM und der Methode der Ersatzladungen (Tab. 6.2). Der maximale Fehler der Kraftberechnung liegt bei knapp 9% bei der Spitze  $B_2$  im Abstand  $50 \text{ nm}$ . Bemerkenswert ist auch, dass die berechneten Kräfte, besonders bei den Spitzen mit kleinem Rundungsradius, bereits bei geringer Dichte des FE Gitters sehr gut sind. Auch kann die in [9] getroffene Aussage, dass der Einfluss des Spitzenendes bei kleinem Rundungsradius geringer wird, bestätigt werden. Im Gegensatz zur reinen Atomkraftmikroskopie wird also die Genauigkeit der Messung unter Verwendung einer besonders scharfe Spitze nicht unbedingt besser, da dann der Einfluss des weiter entfernt liegenden Spitzenteils und des Federbalkens im Verhältnis größer werden. Als letztes Beispiel werden die implementierten Berechnungsverfahren auf den in Abbildung 6.5 dargestellten vorderen Teil des EFM angewendet. Es ergibt sich die in Abb. 6.6 dargestellte Knotenkraftverteilung.

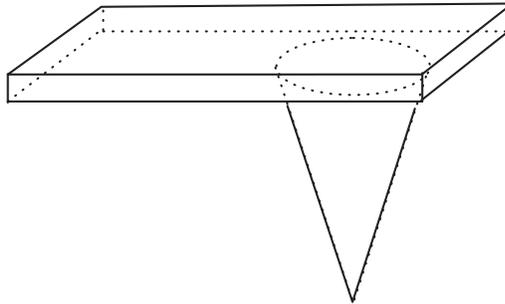


Abbildung 6.5: FEM-Teil des EFM-Modells

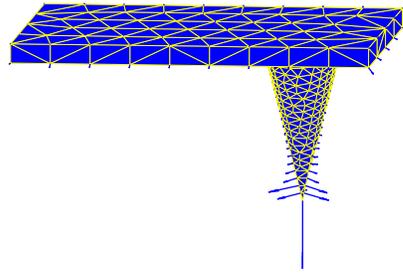


Abbildung 6.6: Kraftwirkung auf das EFM

Wie bereits in den vorangegangenen Beispielen kann auch hier aus den gezeigten Knotenkräfte nicht direkt auf die Kraftdichteverteilung geschlossen werden, da die Größe der Kraftflächen um die Knoten berücksichtigt werden müssen. Dennoch ist deutlich zu erkennen, dass die größte Knotenkraft an der Spitze auftritt. In der Literatur wird immer wieder auf den Einfluss des Federbalkens auf die Messung hingewiesen [9] [113]. Dies wird auch durch die Kraftverteilung in Abb. 6.6 bestätigt. Offensichtlich spielen die Kräfte an den Ecken und Kanten des Federbalkens hierbei eine entscheidene Rolle. Die in [51] durchgeführte gekoppelte mechanisch-elektrische Berechnung führt auf die in Abb. 6.7 gezeigten Verformungen.

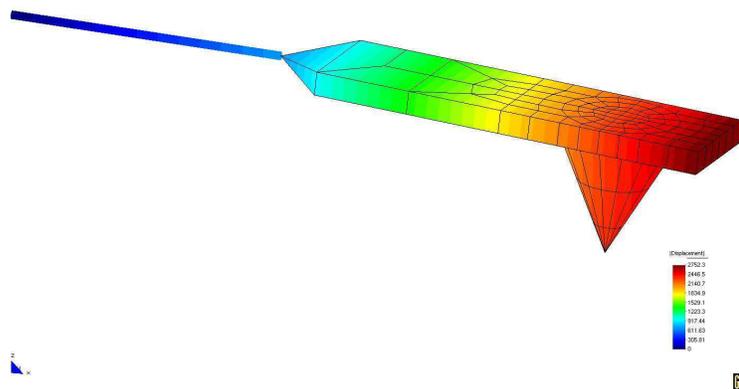


Abbildung 6.7: Verformung des Federbalkens

## Kapitel 7

# Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit ist Teil einer im Rahmen des Graduiertenkollegs geführten Kooperation zwischen dem Institut für theoretische Elektrotechnik (TET), dem Institut für Baumechanik und numerische Mechanik (IBNM) an der Leibniz Universität Hannover. Ziel der Zusammenarbeit ist die Entwicklung und Implementierung eines Simulationsmodells für mikroelektromechanische Systeme, wobei als Beispiel ein elektrostatisches Kraftmikroskop (EFM) dient. Das EFM ermöglicht die Messung elektrischer Felder und Kräfte mit extrem hoher Auflösung. Zur Auswertung wird die Auslenkung eines Federbalkens in eine elektrische Spannung umgesetzt und im Allgemeinen als grafische Darstellung des Probenprofils ausgegeben. Die Genauigkeit der Messung hängt hierbei nicht unwesentlich davon ab, in welchem Maße Störeffekte erkannt und aus den Messdaten herausgefiltert werden können. So werden die Messungen üblicherweise durch physikalische Modelle des Messprozesses verifiziert. Die erreichbare Genauigkeit steht damit im direkten Zusammenhang mit den verwendeten Modellen. Da die Funktion des EFM auf dem verkoppelten Wirken mechanischer und elektrischer Phänomene beruht, bestehen im Allgemeinen auch die Modelle aus einem elektrischen und einem mechanischen Teil. Üblicherweise werden bei ihrer Modellierung starke Vereinfachungen getroffen. So wird im elektrischen Modell meist nur die Wechselwirkung der Spitze mit der Probe, nicht aber der Einfluss des Federbalkens, berücksichtigt. Vielfach wird hierbei sowohl das mechanische als auch das elektrische Verhalten mit Hilfe von konzentrierten Elementen beschrieben. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Simulationsmodell beschreibt den Messprozess sehr genau, da das EFM durch die zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen beschrieben wird, wobei auf elektrischer Seite die elektrostatische Näherung verwendet wird. Zur Berechnung der Feldverteilung wird ein auf das Problem angepasstes Galerkinverfahren verwendet.

Hierfür wurde in der vorliegenden Arbeit ein Ansatz untersucht, mit dem der nicht lineare Verlauf des elektrischen Potentials und der Feldstärke im Bereich der extrem scharfen Spitze besser numerisch dargestellt werden kann. Das Verfahren kombiniert lineare Formfunktionen im überwiegenden Teil des Berechnungsgebietes mit speziellen Ansatzfunktionen in Spitzennähe. Durch eine Wichtungsfunktion werden die Spitzenfunktionen mit wachsender Entfernung zur Spitze aus der Lösung ausgeblendet. Mit diesem Ansatz konnte für den zweidimensionalen Fall eine Verbesserung der Genauigkeit und der Konvergenz im Vergleich zur rein linearen FEM erreicht werden. Aufgrund der wesentlich höheren benötigten Rechenleistung wurde jedoch auf eine Implementierung für den dreidimensionalen Fall verzichtet. Die mechanischen und elektrischen Aspekte des EFM werden im Rahmen der Kooperation getrennt modelliert und durch eine Schnittstelle gekoppelt. Über diese Schnittstelle werden die vom elektrischen Teil berechneten Kräfte an den mechanischen Teil übergeben. Während in der Literatur vielfach nur eine am Ende der Spitze angreifende Kraft berücksichtigt wird, berechnet das im Rahmen dieser Arbeit erstellte elektrische Simulationsmodell die Kraftverteilung auf dem gesamten EFM. Basierend auf dem physikalischen Grundprinzip der Energieerhaltung wurde hierfür die Entwicklung zweier Methoden zur Berechnung elektrostatischer Kraftverteilungen aus numerischen Feldlösungen aufgezeigt. Sowohl bei der Anwendung der Methode der virtuellen Verschiebung als auch bei der Integration des Maxwell'schen Spannungstensors müssen hierbei die speziellen Eigenschaften des Verfahrens zur numerischen Feldberechnung beachtet werden. So werden die Maxwell'schen Gleichungen durch die Galerkinmethode nur näherungsweise erfüllt. Dies hat unter anderem zur Folge, dass das Integral des Maxwell'schen Spannungstensors nicht mehr, wie im analytischen Fall, vom Weg unabhängig ist. Aus diesem Grund wird vielfach die Methode der virtuellen Verschiebung bevorzugt. Während jedoch die numerische Formulierung der Methode der virtuellen Verschiebung speziell auf die FEM angepasst ist, funktioniert die Kraftberechnung über den Maxwell'schen Spannungstensor weitestgehend unabhängig von der numerischen Methode der Feldberechnung. Daher ist sie gut auf die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Kombination von linearen und speziellen Ansatzfunktionen in Spitzennähe anwendbar. Da es jedoch an lückenlosen Beschreibungen zur Vorgehensweise bei der numerischen Kraftberechnung mit dem Maxwell'schen Spannungstensor mangelt und die richtige Anwendung Gegenstand zahlreicher Diskussionen ist, wurde im Rahmen dieser Arbeit parallel das Prinzip der virtuellen Verschiebung implementiert. Hierbei gelang es die Ergebnisse beider Verfahren zur Deckung zu bringen. Weitere Kontrollen der Kraftberechnung erfolgten durch Vergleich mit analytischen und numerischen Berechnungen an verschiedenen Testanordnungen. Sie ergaben in allen Fällen eine sehr gute Übereinstimmung. Mit der Untersuchung und Ausführung der genannten Aspekte ist die vorliegende Arbeit ein wichtiger Teil der Kooperation zur Simulation

des EFM.

Nachdem die Ergebnisse dieser Arbeit erfolgreich mit Hilfe analytischer Rechnungen und Angaben aus der bekannten Literatur verifiziert wurden, wäre im Rahmen weiterführender Arbeiten eine Anwendung auf den praktischen Messprozess des EFM sinnvoll. So ist es denkbar, für zunächst einfache Anordnungen, wie das EFM über einer möglichst ebenen leitenden Fläche die Messung mit der Simulation zu vergleichen. In weiteren Schritten wäre dann eine Erweiterung auf kompliziertere Probenstrukturen möglich. Eine Erhöhung der Genauigkeit der im Rahmen dieser Arbeit als Prototypen auf der Basis von Matlab implementierten Programme könnte hierfür durch eine Umsetzung in eine Hardware nähere Sprache wie C erreicht werden.

## Anhang A

# Die Jacobimatrix der FEM und ihre virtuelle Änderung

Bei der Methode der finiten Elemente müssen Transformationen zwischen den globalen Koordinaten und den lokalen Elementkoordinaten durchgeführt werden. Für den zweidimensionalen Fall (Abb. A.1) gilt

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)\xi + (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1)\eta. \quad (\text{A.1})$$

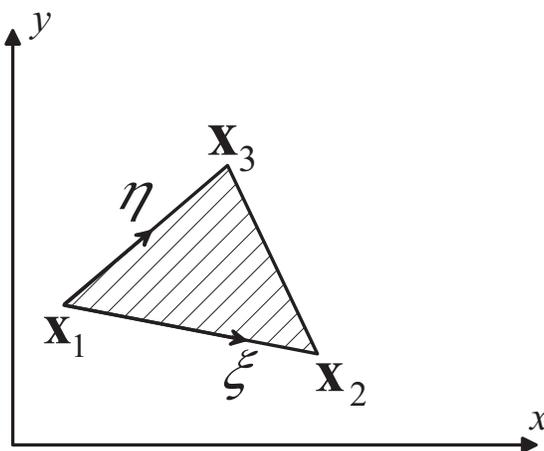


Abbildung A.1: Lokale und globale Koordinaten in 2D

Die Ableitungen einer Funktion  $f(x, y)$  nach den lokalen Koordinaten sind

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ \frac{\partial f}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix} = \mathbf{J}_e \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

mit der Jacobimatrix

$$\mathbf{J}_e = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & y_2 - y_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X} & \mathbf{Y} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Analog ergibt sich für die Jacobimatrix in 3D

$$\mathbf{J}_e = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & y_2 - y_1 & z_2 - z_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 & z_3 - z_1 \\ x_4 - x_1 & y_4 - y_1 & z_4 - z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X} & \mathbf{Y} & \mathbf{Z} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

Im Rahmen der numerischen Implementierung der Methode der virtuellen Verschiebung (Kap. 5.1) treten die Terme  $\frac{\delta \mathbf{J}_e}{\delta \mathbf{r}_i}$  und  $\frac{\delta J_e}{\delta \mathbf{r}_i}$  auf, die komponentenweise ausgewertet werden müssen. In 2D führt die Differenzierung der Jacobimatrix auf

$$\frac{\partial \mathbf{J}_e}{\partial x_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_i} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbf{J}_e}{\partial y_i} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial y_i} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Mit der Determinante

$$J_e = \mathbf{X} [\mathbf{A}\mathbf{Y}], \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

gelangt man zum Ausdruck für die Ableitung der Determinanten der Jacobimatrix

$$\frac{\partial J_e}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_i} [\mathbf{A}\mathbf{Y}], \quad \frac{\partial J_e}{\partial y_i} = \mathbf{X} \left[ \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial y_i} \right]. \quad (\text{A.7})$$

Im dreidimensionalen Fall gilt [25]

$$\frac{\partial \mathbf{J}_e}{\partial x_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_i} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbf{J}_e}{\partial y_i} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial y_i} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbf{J}_e}{\partial z_i} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial z_i} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Mit der Determinante der Jacobimatrix

$$J_e = \mathbf{X} [\mathbf{Y} \times \mathbf{Z}] = \mathbf{Y} [\mathbf{X} \times \mathbf{Z}] = \mathbf{Z} [\mathbf{X} \times \mathbf{Y}] \quad (\text{A.9})$$

gelangt man zu der komponentenweisen Darstellung von  $\frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{r}_i}$

$$\frac{\partial J_e}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_i} [\mathbf{Y} \times \mathbf{Z}], \quad \frac{\partial J_e}{\partial y_i} = \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial y_i} [\mathbf{X} \times \mathbf{Z}], \quad \frac{\partial J_e}{\partial z_i} = \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial z_i} [\mathbf{X} \times \mathbf{Y}]. \quad (\text{A.10})$$

## Anhang B

# Gauß-Legendre Integration auf Dreiecken

Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Integrationen wurde die Gauß-Legendre Quadratur verwendet. Dieses Verfahren basiert auf der Approximation eines Integrals durch eine Summe

$$\int_{\xi_0}^{\xi_1} g(\xi) d\xi = \int_{-1}^1 g(\xi(s)) J_T ds \approx \sum_i w_i g(\xi(s_i)) J_T = \sum_i w_i g(\xi_i) J_T, \quad (\text{B.1})$$

wobei der Zwischenschritt der Transformation des Integrals auf die Gauß Legendre Standardform mit den Grenzen  $-1$  und  $1$  und der Jacobimatrix  $\mathbf{J}_T$  entspricht. Die Wichtungsfaktoren an den Stützstellen  $i$  ergeben sich dabei aus den Nullstellen der Legendrepolynome und werden mit Hilfe des in [26] gegebenen Algorithmus berechnet. Die Methode ist für polynomiale Integranden bis maximal zum Grad der Anzahl der Stützstellen bzw. Summenterme minus Eins exakt. Für anders geartete Funktionen ergibt sich ein Fehler, der mit zunehmender Anzahl der Stützstellen geringer wird. Daher muss für die Integration nicht-polynomialer Funktionen auf die Verwendung einer ausreichenden Anzahl von Stützstellen geachtet werden. Die Erweiterung der Methode auf Doppelintegrale führt auf die Approximationsformel

$$\begin{aligned} \int_{\eta_0}^{\eta_1} \int_{\xi_0(\xi)}^{\xi_1(\xi)} g(\xi, \eta) d\xi d\eta &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 g(\xi(s, t), \eta(s, t)) J_T ds dt \quad (\text{B.2}) \\ &\approx \sum_i \sum_j w_{ij} g(\xi_{ij}, \eta_{ij}) J_T \end{aligned}$$

mit

$$w_{ij} = w_i w_j. \quad (\text{B.3})$$

Zur Anwendung der Gleichung (B.2) muss zunächst die Matrix  $\mathbf{J}_T$  berechnet werden. In den Kapiteln 4.5 und 5.2 werden Integrale von Funktionen auf

Dreiecksflächen berechnet. Allgemein hat ein solches Integral die Form

$$I = \int_{\Omega_e} g(\mathbf{r}) dA = \int_0^1 \int_0^{1-\eta} g(\xi, \eta) J_e d\xi d\eta, \quad (\text{B.4})$$

wobei im rechten Ausdruck die globalen Koordinaten durch die lokalen (Abb. B.1) ersetzt wurden und  $J_e$  die Determinante der Jacobimatrix  $\mathbf{J}_e$  des Dreieckelements ist.

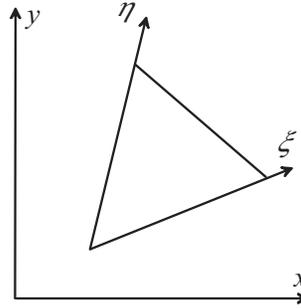


Abbildung B.1: Dreieckförmiger Integrationsbereich in lokalen Koordinaten

Zur Transformation auf den quadratischen Standardbereich der Gauß Legendre Integration in Abb. B.2 muss

$$\xi = \frac{(1+s)(1-t)}{4}, \quad \eta = \frac{t+1}{2} \quad (\text{B.5})$$

und damit für die zugehörige Jacobimatrix  $\mathbf{J}_T$

$$\mathbf{J}_T = \begin{pmatrix} \frac{1-t}{4} & 0 \\ -\frac{1+s}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad J_T = \frac{1-t}{8} \quad (\text{B.6})$$

gelten.

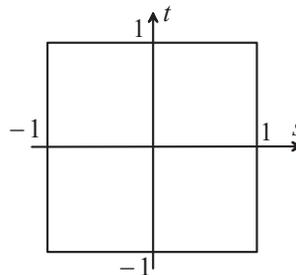


Abbildung B.2: Quadratischer Integrationsbereich

Das auf das Standardquadrat transformierte Integral (B.4) ergibt sich damit zu

$$I = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 g(\xi(s, t), \eta(t)) J_e J_T ds dt \approx \sum_i \sum_j w_{ij} g(\xi(s_{ij}, t_{ij}), \eta(t_{ij})) J_e J_T. \quad (\text{B.7})$$

Um anschaulich zu verstehen, was bei der Transformation zwischen Dreieck und Quadrat passiert, ist es hilfreich zu verfolgen, wie sich die Seiten des Dreiecks auf das Quadrat transformieren. Hierbei stellt man fest, dass die  $\xi$ -Achse auf die Quadratkante  $s = -1..1$ ,  $t = -1$ , die  $\eta$ -Achse auf die Kante  $s = -1$ ,  $-1 \leq t \leq 1$  und die dritte Dreiecksseite auf die Kante  $s = 1$ ,  $-1 \leq t \leq 1$  abgebildet wird. Der Knoten  $\mathbf{x}_3$  des Dreiecks wird auf die gesamte Kante  $-1 \leq s \leq 1$ ,  $t = 1$  transformiert.

## Anhang C

# Das Integral der Singulärfunktionen

In Kapitel 4.5 wurde die analytische Lösung des Integrals

$$\int_{\Omega} \nabla f_i \nabla f_j d\Omega = \int_0^a \int_0^{\beta} \nabla f_i(r, \phi) \nabla f_j(r, \phi) r d\phi dr \quad (\text{C.1})$$

mit den Singulärfunktionen

$$f_k(r, \phi) = r^{\frac{k\pi}{\beta}} \sin\left(\frac{k\pi}{\beta}\phi\right), \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{C.2})$$

verwendet. Zur Auswertung dieses Integrals wird zunächst

$$\nabla f_k(r, \phi) = \frac{k\pi}{\beta} r^{\frac{k\pi}{\beta}-1} \left[ \sin\left(\frac{k\pi}{\beta}\phi\right) \mathbf{e}_r + \cos\left(\frac{k\pi}{\beta}\phi\right) \mathbf{e}_{\phi} \right] \quad (\text{C.3})$$

berechnet [78]. Damit wird (C.1) zu

$$\frac{ij\pi^2}{\beta^2} \int_0^a \int_0^{\beta} r^{\frac{(i+j)\pi}{\beta}-1} \left[ \sin\left(\frac{i\pi}{\beta}\phi\right) \sin\left(\frac{j\pi}{\beta}\phi\right) + \cos\left(\frac{i\pi}{\beta}\phi\right) \cos\left(\frac{j\pi}{\beta}\phi\right) \right] d\phi dr. \quad (\text{C.4})$$

Die Zerlegung des Integrals in  $r$  und  $\phi$  ergibt für den radialabhängigen Anteil

$$\int_0^a r^{\frac{(i+j)\pi}{\beta}-1} dr = \frac{\beta}{(i+j)\pi} a^{\frac{(i+j)\pi}{\beta}}, \quad (\text{C.5})$$

wobei der Faktor vor dem Integral zunächst nicht beachtet wurde. Mit Hilfe trigonometrischer Identitäten [78] kann der winkelabhängige Anteil zu

$$\int_0^{\beta} \cos\left(\frac{(i-j)\pi}{\beta}\phi\right) d\phi = \begin{cases} \beta, & i = j \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

umgeformt werden. Insgesamt ergibt sich damit

$$\int_0^a \int_0^{\beta} \nabla f_i(r, \phi) \nabla f_j(r, \phi) r d\phi dr = \begin{cases} \frac{i\pi}{2} a^{\frac{2i\pi}{\beta}}, & i = j \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}. \quad (\text{C.7})$$

## Anhang D

# Drittung einer Dreiecksfläche

In Kapitel 5.3 wurde gezeigt, dass mit der im Rahmen der Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors durchgeführten Teilung eines Dreiecks nach (5.32) zu drei Teilen gleicher Fläche führt. Tatsächlich kann (5.32) aus der Forderung nach drei identisch großen Teilflächen der geteilten Gesamtfläche hergeleitet werden. Hierzu wird das in Abb. D.1 dargestellte Dreieck betrachtet.

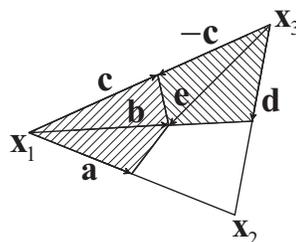


Abbildung D.1: Zwei Teilflächen eines Elements

Seine Gesamtfläche ist

$$\mathbf{A}_g = \frac{2\mathbf{a} \times 2\mathbf{c}}{2} = 2\mathbf{a} \times \mathbf{c}. \quad (\text{D.1})$$

Die beiden schraffierten Flächen  $\mathbf{A}_1$  und  $\mathbf{A}_2$  können

$$\mathbf{A}_1 = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b} + \mathbf{b} \times \mathbf{c}}{2} = \frac{(\mathbf{a} - \mathbf{c}) \times \mathbf{b}}{2} \quad (\text{D.2})$$

und

$$\mathbf{A}_2 = \frac{\mathbf{e} \times \mathbf{c} + \mathbf{e} \times \mathbf{d}}{2} = \frac{(\mathbf{b} - 2\mathbf{c}) \times \mathbf{a}}{2} \quad (\text{D.3})$$

berechnet werden. Aus der Bedingung der Drittelung der Gesamtfläche folgen die beiden Gleichungen

$$\mathbf{A}_1 = \frac{\mathbf{A}_g}{3} \quad (\text{D.4})$$

und

$$\mathbf{A}_2 = \frac{\mathbf{A}_g}{3}. \quad (\text{D.5})$$

Eine weitere Bedingung für die Restfläche führt zu einer linear abhängigen Gleichung und kann daher entfallen. Da der gesuchte Vektor  $\mathbf{b}$  in der Dreiecksebene liegen muss, kann er als Linearkombination

$$\mathbf{b} = b_a \mathbf{a} + b_c \mathbf{c} \quad (\text{D.6})$$

mit den unbekanntem Koeffizienten  $b_a$  und  $b_c$  angesetzt werden. Damit werden (D.4) und (D.5) zu

$$3(b_a + b_c) \mathbf{a} \times \mathbf{c} = 4\mathbf{a} \times \mathbf{c} \quad (\text{D.7})$$

und

$$(6 - 3b_c) \mathbf{a} \times \mathbf{c} = 4\mathbf{a} \times \mathbf{c}. \quad (\text{D.8})$$

Da  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{c}$  nicht parallel und ihre Längen größer Null sind, gilt  $\mathbf{a} \times \mathbf{c} \neq \mathbf{0}$ . Damit können (D.7) und (D.8) auf ihren skalaren Faktor reduziert werden. Es ergeben sich die Gleichungen

$$3(b_a + b_c) = 4 \quad (\text{D.9})$$

und

$$(6 - 3b_c) = 4 \quad (\text{D.10})$$

und damit die Lösung

$$b_a = b_c = \frac{2}{3}. \quad (\text{D.11})$$

Einsetzen in (D.6) liefert

$$\mathbf{b} = \frac{2\mathbf{a} + 2\mathbf{c}}{3} \quad (\text{D.12})$$

für den Vektor  $\mathbf{b}$ . Hieraus folgt für den Vektor  $\mathbf{d}$  vom Koordinatenursprung zum Mittelpunkt in Abhängigkeit der Knotenvektoren  $\mathbf{x}_1$ ,  $\mathbf{x}_2$  und  $\mathbf{x}_3$  die Beziehung

$$\mathbf{d} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{b} = \mathbf{x}_1 + \frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1}{3} = \frac{\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3}{3}, \quad (\text{D.13})$$

was dem Ausdruck (5.32) entspricht.

## Anhang E

# Energie, Impuls und Kraft im elektromagnetischen Feld

Im Rahmen der Arbeit wurde der Maxwellsche Spannungstensor zur Berechnungen von Kräften innerhalb statischer Felder angewendet. Darüber hinausgehend stellt sich die Frage, ob die verwendete Kraftberechnung auch für schnell veränderliche elektromagnetische Felder funktioniert, oder ob sie gegebenenfalls modifiziert werden müsste. Zur Beantwortung dieser Frage wird in diesem Abschnitt der Maxwellsche Spannungstensor innerhalb der Energie- und Impulserhaltung im elektromagnetischen Feld skizziert. Die Ausführungen sind dabei sehr kurz gehalten. Für eine ausführliche Darstellung sei auf [17] verwiesen.

Der typischerweise im Rahmen der relativistischen Elektrodynamik auftretende Energie-Impuls-Tensor des elektromagnetischen Feldes

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} -w_{em} & -\frac{1}{c}\mathbf{S}^T \\ -\frac{1}{c}\mathbf{S} & \mathbf{T} \end{pmatrix} \quad (\text{E.1})$$

fasst die elektromagnetische Energiedichte

$$w_{em} = \frac{1}{2} \left( \varepsilon \mathbf{E}^2 + \frac{1}{\mu} \mathbf{B}^2 \right), \quad (\text{E.2})$$

den Poyntingschen Vektor

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (\text{E.3})$$

und den Maxwellschen Spannungstensor

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_e + \mathbf{T}_m \quad (\text{E.4})$$

mit

$$\mathbf{T}_e = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} E_x^2 - \frac{1}{2}\mathbf{E}^2 & E_x E_y & E_x E_z \\ E_x E_y & E_y^2 - \frac{1}{2}\mathbf{E}^2 & E_y E_z \\ E_x E_z & E_y E_z & E_z^2 - \frac{1}{2}\mathbf{E}^2 \end{pmatrix} \quad (\text{E.5})$$

und

$$\mathbf{T}_m = \frac{1}{\mu_0} \begin{pmatrix} B_x^2 - \frac{1}{2}\mathbf{B}^2 & B_x B_y & B_x B_z \\ B_x B_y & B_y^2 - \frac{1}{2}\mathbf{B}^2 & B_y B_z \\ B_x B_z & B_y B_z & B_z^2 - \frac{1}{2}\mathbf{B}^2 \end{pmatrix} \quad (\text{E.6})$$

zusammen. Sowohl die Energiedichte als auch der Maxwell'sche Spannungstensor wurden im Vergleich zum elektrostatischen Fall um einen magnetischen Anteil erweitert. Man beachte, dass bei Verschwinden des magnetischen Feldes ( $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ ) die entsprechenden elektrostatischen Ausdrücke aus (E.2) und (E.4) hervorgehen. So verschwindet der magnetische Anteil des Maxwell'schen Spannungstensors  $\mathbf{T}_m$  bei  $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ . Die Komponenten der Minkowski-Kraftdichte  $\mathbf{k}$  berechnen sich aus der Viererdivergenz des Energie-Impuls-Tensors

$$k^i = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} P^{i0} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} P^{ki}. \quad (\text{E.7})$$

Die Anwendung auf die Nullkomponente, also die erste Zeile des Energie-Impuls-Tensors (E.1), führt auf

$$k^0 c = -\frac{\partial}{\partial t} w_{em} - \nabla \cdot \mathbf{S}. \quad (\text{E.8})$$

Da hier nur das Prinzip dargestellt werden soll und eine genauere Betrachtung des Terms  $k^0$  diesen Rahmen sprengen würde, soll Quellenfreiheit angenommen werden. Damit verschwindet  $k^0$ . Die Integration über ein Volumen  $V$  ergibt dann

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V w_{em} dV = - \oint_A \mathbf{S} d\mathbf{A}, \quad (\text{E.9})$$

wobei das Oberflächenintegral aus der Anwendung des Satzes von Gauß resultiert. Die linke Seite der Gleichung lässt sich sofort als die zeitliche Änderung der im Volumen  $V$  gespeicherten Feldenergie identifizieren. Damit kann die rechte Seite als Energiefluss in das Volumen interpretiert werden. Für  $i = 0$  entspricht (E.7) also einer Energiebilanz im elektromagnetischen Feld.

Die Anwendung von (E.7) auf die Komponenten 1 bis 3 des Energie-Impuls-Tensors (E.1) führt auf

$$\mathbf{f} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{S} + \text{div } \mathbf{T}. \quad (\text{E.10})$$

Hier wurde bereits berücksichtigt, dass die Komponenten 1 bis 3 der Minkowski-Kraftdichte der mechanischen Kraftdichte  $\mathbf{f}$  entsprechen. Die Integration über ein Volumen  $V$  ergibt

$$\int_V \left( \mathbf{f} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{S} \right) dV = \oint_A \mathbf{T} \mathbf{A}, \quad (\text{E.11})$$

wobei auf die rechte Seite wiederum der Satz von Gauß angewendet wurde. Mit Hilfe der Beziehung

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \quad (\text{E.12})$$

kann die linke Seite als zeitliche Änderung des im Volumen  $V$  vorhandenen Impulses interpretiert werden. Es folgt

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{p}_m + \mathbf{p}_{em}) = \oint_A \mathbf{T} \mathbf{A}, \quad (\text{E.13})$$

mit

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_m = \int_V \mathbf{f} dV \quad (\text{E.14})$$

und

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_{em} = \frac{1}{c^2} \int_V \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{S} dV. \quad (\text{E.15})$$

Offensichtlich beschreibt (E.15) die zeitliche Impulsänderung des elektromagnetischen Feldes im Volumen  $V$ . Zur Veranschaulichung ist in Abb. E.1 der Impulsfluss zwischen zwei Ladungen durch Pfeile skizziert.

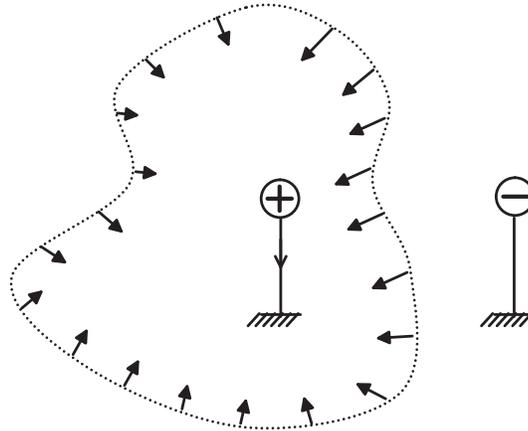


Abbildung E.1: Impulsfluss bei festgehaltener Ladung

Von der negativen Ladung fließt Impuls über die gestrichelte Begrenzung zur positiven Ladung. Der gesamte der positiven Ladung zugeführte Impuls fließt jedoch wieder über die Festhaltevorrichtung ab. Hierdurch bleibt der gesamte Impuls innerhalb des die positive Ladung umschließenden Volumens erhalten. Wird die Festhaltevorrichtung der positiven Ladung entfernt, so ergibt sich die in Abb. E.2 skizzierte Situation. Die positive Ladung wird beschleunigt. Unter der Voraussetzung, dass sie eine Masse besitzt erhöht sich damit ihr mechanischer Impuls. Des Weiteren kommt es durch die Ladungsbewegung zu einem veränderlichen elektromagnetischen Feld und

damit nach (E.15) zu einer Änderung des elektromagnetischen Impulses im Volumen.

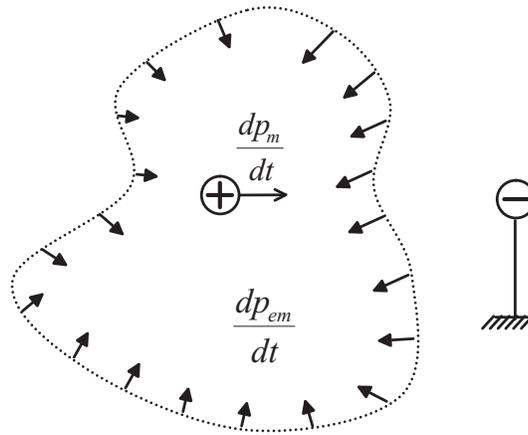


Abbildung E.2: Impulsfluss bei loser Ladung

Abschließend lässt sich feststellen, dass die Anwendung des Maxwell'schen Spannungstensors dem Aufstellen einer Impulsbilanz unter Berücksichtigung des mechanischen und des elektromagnetischen Impulses entspricht. In stationären oder stationären Feldern gilt  $\frac{d}{dt}\mathbf{p}_{em} = 0$ . Bei der Kraftberechnung in schnell veränderlichen elektromagnetischen Feldern gilt  $\frac{d}{dt}\mathbf{p}_{em} = 0$  nicht mehr. In diesem Fall muss bei der Kraftberechnung die zeitliche Änderung des elektromagnetischen Impulses (E.15) berücksichtigt werden.

# Literaturverzeichnis

- [1] ALBRECHT, T.R.; AKAMINE, S.; CARVER, T.E.; QUATE, C.F. *Micro-fabrication of cantilever styli for the atomic force microscope* Journal of Vacuum Science and Technology A-Vacuum Surfaces and Films 8 (4): 3386-3396 Jul-Aug 1990
- [2] ARGENTO, C.; FRENCH, R. H. *Parametric Tip Model and Force-Distance Relation for Hamaker Constant Determination from AFM* Journal of Applied Physics, Volume 80, 1996, pp. 6081-6090
- [3] ARMINGER, B.; ADAMSMAIR, F.; KIENBERGER, P.; HINTERDORFER, B.; ZAGAR, G. *Piezo-Aktoren und -Sensoren in der Rastersondenmikroskopie* e & i Elektronik und Informationstechnik, Volume 125, Number 3, Seiten 86-91, Springer Verlag, 03/2008
- [4] BALA, U. B.; GREIFF, M.; MATHIS, W. *Hybrid Numerical Simulation of Electrostatic Force Microscopes in 3D*, Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS), 02-05 August, 2006, Tokyo, Japan
- [5] BALA, U. B.; GREIFF, M.; MATHIS, W. *Hybrid Numerical Simulation of Electrostatic Force Microscopes Considering Charge Distribution*, Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS), 26-30 March, 2007, Beijing, China
- [6] BALA, U. B. *Hybrid Numerical Modelling and Simulation of Electrostatic Force Microscope* Dissertation, VDE Verlag GmbH, Berlin 2008
- [7] BALA, U. B.; GREIFF, M.; PREISNER, T.; MATHIS, W. *Numerical modelling of electrostatic force microscopes considering charge and dielectric constant*, COMPEL, Volume 28, pp. 109–119, November 2009
- [8] BECKER, R.; SAUTER, F. *Theorie der Elektrizität* B. G. Teubner Stuttgart, 21. Auflage, 1973
- [9] BELAIDI, S.; GIRARD, P.; LEVEQUE, G. *Electrostatic forces acting on the tip in atomic force microscopy: Modelization and comparison with analytic expressions* , J. Appl. Physics, Volume 81 (3), 02/1997

- 
- [10] BELAIDI, S.; LEBON, F.; GIRARD, P.; LEVEQUE, G.; PAGANO, S. *Finite element simulations of the resolution in electrostatic force microscopy*, Applied Physics A Materials Science & Processing, Volume 66, 1998, pp. 239- 243
- [11] BHUSHAN, B. *Springer Handbook of Nanotechnology* Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1.Auflage, 2004
- [12] BIENTINESI, P.; PELLEGRINI, M. *Electrostatic fields without singularities: Implementations and experiments* Tech. Rep. IMC B4-97-16. Istituto di matematica computazionale del CNR, Via Santa Maria 46, Pisa, Italy
- [13] BINNING, G.; ROHRER, H.; GERBER, CH.; WEIBEL, E. *Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy*, Phys. Rev. Lett., Volume 49, pp. 57-61, 1982
- [14] BINNIG, G.; QUATE, C.F.; GERBER, CH. *Atomic force microscope* Phys. Rev. Lett. 56, 930-933
- [15] BIRO, O. *Numerische Aspekte von Potentialformulierungen in der Elektrodynamik*. TU Graz, Habilitationsschrift, 1993
- [16] BÖHM, C.; ROTHS, C.; MÜLLER, U.; BEYER, A.; KUBALEK, E. *Electrical characterization of integrated circuits by scanning force microscopy* Materials Science and Engineering B24, 218 (1994)
- [17] BRANDT, S.; DAHMEN, H. D. *Elektrodynamik* Springer Verlag, 4. Auflage, 2004
- [18] BRONSTEIN, I.N.; SEMENDJAJEW, K.A.; MUSIOL, G.; MÜHLIG, H. *Taschenbuch der Mathematik* Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, 5.Auflage, 2000
- [19] BUCHER, I.; ELKA, A.; BALMES, E. *On the dynamics and modelling of a micro electro-mechanical structure (MEMS)* International Modal Analysis Seminaler, Leuven, 09/2002
- [20] BURNHAM, N. A.; COLTON, R. J.; POLLOCK H.M. *Work-Function Anisotropies as an Origin of Long-Range Surface Forces* Phys. Rev. Lett. 69, 144 - 147 (1992)
- [21] BURNHAM, N. A.; COLTON, R. J.; POLLOCK, H. M. *Interpretation of force curves in force microscopy* Nanotechnology, Vol. 4, pp. 64-80, 1993
- [22] BURNHAM, N. A.; BEHEREND, O. P.; OULEVEY, F.; GREMAUD, G.; GALLO, P. J.; GOURDON, D.; DUPAS, E.; KULIK, A.J.; POLLOCK, H.M.; BRIGGS, G. A. D. *How does a tip tap?* Nanotechnology, Vol. 8, pp. 67-75, 1997

- [23] CHENG, J.; ZHE, J.; XINGTAO, W.; FARMER, K. R.; MODI, V., FRECHETTE, L. *Analytical and FEM Simulation Pull-in Study on Deformable Electrostatic Micro Actuators* Technical Proceedings of the 2002 International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, Vol. 1, pp. 298-301, Columbia University, 2002
- [24] COULOMB, J. L. *A methodology for the determination of global electro-mechanical quantities from a finite element analysis and its application to the evaluation of magnetic forces, torques and stiffness*, Transactions on Magnetics, Volume 19, 1983, pp. 2514- 2519
- [25] COULOMB, J. L. *Finite element implementation of virtual work principle for magnetic or electric force and torque computation*, Transactions on Magnetics, Volume 20, NO. 5, 1984, pp. 1894- 1896
- [26] DAVIS, P. J.; RABINOWITZ, P. *Methods of Numerical Integration* Academic Press, 1975
- [27] DESPONT, M.; BRUGGER, J.; DRECHSLER, U.; DURIG, U.; HABERLE, W.; LUTWYCHE, M.; ROTHUIZEN, H.; STUTZ, R.; WIDMER, R.; ROHRER, H.; BINNING, G.; VETTIGER, P. *VLSI-NEMS chip for AFM data storage*, Sensors and Actuators A: Physical, Volume 80, Issue 2, pp. 100-107, 03/2000
- [28] DEUFLHARD, P.; HOHMANN, A. *Numerische Mathematik 1* de Gruyter Lehrbuch, Berlin, New York, 3.Auflage, 2002
- [29] DURAND, E. *Electrostatique II, Problèmes Généraux Conducteurs* Masson et C<sup>ie</sup>, Paris 1966
- [30] ESCHENAUER, H.; SCHNELL, W. *Elastizitätstheorie* BI Wissenschaftsverlag, 3. Auflage, 1993
- [31] FALK, G.; RUPPEL, W. *Mechanik Relativität Gravitation* Springer, 3. Auflage, 1983
- [32] FANO, R. M.; CHU, L. J.; ADLER, R. B. *Electromagnetic Fields, Energy, and Forces* John Wiley & Sons, Inc. New York, 1973
- [33] FEYNMAN, R. P., LEIGHTON, R. B., SANDS, M. *Feynman Vorlesungen über Physik, Band II: Elektromagnetismus und Struktur der Materie*, Oldenbourg Verlag, 3. Auflage, 2001
- [34] FRÉTIGNY, C. *Atomic Force Microscopy* Springer, 2007
- [35] GILBERT, J. R.; LEGTENBERG, R.; SENTURIA, S. D. *3D Coupled Electro-mechanics for MEMS: Application of CoSolve-EM* Micro Electro Mechanical Systems, Proceedings IEEE, pp. 122-127, 1995

- [36] GIRARD, P. *Electrostatic force microscopy: principles and some applications to semiconductors* Nanotechnology, Volume 12, 2001, pp. 485-490
- [37] GOLDSTEIN, H.; POOLE, C. P.; SAFKO, J. L. *Klassische Mechanik* Wiley-VCH, Weinheim 2006
- [38] GOTOH, Y. F.; MATSUMOTO, K.; MAEDA, T.; COOPER, E. B.; MANALIS, S. R.; FANG, H.; MINNE, S. C.; HUNT, T.; DALI, H.; HARRIS, J.; QUATE, C. F. *Experimental and theoretical results of room-temperature single-electron transistor formed by the atomic force microscope nano-oxidation process* Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces and Films, Vol. 18, Issue 4, pp. 1321-1325, 07/2000
- [39] GOTSZALK, T. P.; GRABIEC, P.; RANGELOW, I. W. *Application of electrostatic force microscopy in nanosystem diagnostics* Materials Science, Vol. 21, No. 3, 2003
- [40] GOTSZALK, T. P.; CZARNECKI, P.; GRABIEC, P.; DOMANSKI, K.; ZABOOWSKI, M.; RANGELOW, I. W. *Microfabricated cantilever with metallic tip for electrostatic and capacitance microscopy and its application to investigation of semiconductor devices* Journal of vacuum science & technology b, Vol. 22, issue 2, pp. 506-509, 03/2004
- [41] GREIFF, M.; BALA, U. B.; MATHIS, W. *Numerical Modeling of Electrostatic Force Microscopes*, Proc. of ASIM, Erlangen 12-15 September 2005
- [42] GREIFF, M.; BALA, U. B.; MATHIS, W. *Hybrid Numerical Simulation of Micro Electro Mechanical Systems*, Progress in Electromagnetics Research Symposium, pp. 270-274, Cambridge 2006
- [43] GREIFF, M.; BALA, U. B.; FREITAG, J.; MATHIS, W. *Numerical Computation of Electrostatic Forces in Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*, PRZEGLĄD ELEKTROTECHNICZNY, pp. 18-20, November 2007
- [44] GREIFF, M.; BALA, U. B.; MATHIS, W. *A Dynamic Simulation Approach for Electrostatic Force Microscopy on Inhomogeneous Sample Material*, Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS), Prague, Czech Republic, 27-30 August, 2007
- [45] GREIFF, M.; MAISCHAK, M.; BALA, U. B.; MATHIS, W.; STEPHAN, E. P. *Numerical computation of electric fields including singularities in Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*, PRZEGLĄD ELEKTROTECHNICZNY, pp. 47-49, November 2007

- [46] GREIFF, M.; MAISCHAK, M.; BALA, U. B.; MATHIS, W.; STEPHAN, E.P. *An Augmented Finite Element Approach for the Simulation of Micro Electro Mechanical Systems*, Archiv für Elektrotechnik, Springer Verlag (eingereicht)
- [47] GUERRET-PIÉCOURT, C.; BEC, S.; SÉGAULT, F.; JUVÉ, D.; TRÉHEUX, D.; TONCK, A. *Adhesion forces due to nanotriboelectrification between similar materials* Eur. Phys. J. Appl. Phys., Vol. 28, pp. 65-72, 2004
- [48] GUPTA, A.; BASHIR, R.; NEUDECK, G. W.; ELFRESH, M. *Design of Piezoresistive Silicon Cantilevers with Stress Concentration Region (SCR) for Scanning Probe Microscopy (SPM) Applications* Technical Proceedings of the 2000 International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, pp. 617-620, 2000
- [49] HADWICH, V.; PFEIFFER, F. *The principle of virtual work in mechanical and electromechanical systems*, Archive of Applied Mechanics, Volume 65, pp. 390-400, 1995
- [50] HAMEYER, K.; JOHANSSON, T. B. *Finite element simulations for the design of electro-mechanical systems*, Proceedings of Engineering Science and Education journal, Issue 00/013, 2000
- [51] HELMICH, T. *Elektromechanische Kontaktmodellierung auf Mikroebene* Dissertation, Leibniz Universität Hannover, Berlin 2007
- [52] HENNING, A. K.; HOCHWITZ, T. *Two-dimensional surface dopant profiling in silicon using scanning Kelvin probe microscopy* Journal of Applied Physics, Volume 77, Issue 5, March 1, 1995, pp.1888-1896
- [53] HUANG, C.; NAJAFI, K.; NAGIB, H. *A microactuator system for the study and control of screech in high speed jets*, Proc. 9th Annual Int. Workshop on MEMS, pp. 19-24
- [54] HUDLET, S.; SAINT JEAN, M.; GUTHMANN, C.; BERGER, J. *Evaluation of the capacitive force between an atomic force microscopy tip and a metallic surface*, Eur. Phys. J. B 2, 5-10, 1998
- [55] HUI, C.-Y.; YEH, J. L. A.; TIEN, N. C. *Calculation of electrostatic forces and torques in MEMS using path-independent integrals* J. Micro-mech. Microeng. Vol. 10, pp. 477-482, 2000
- [56] HUNTER, P. *FEM/BEM NOTES* Department of Engineering Science, The University of Auckland, New Zealand, 2003
- [57] IBEN, H. K. *Tensorrechnung* B. G. Teubner Leipzig, 1995

- [58] ISRAELACHVILI, J. *Intermolecular & Surface Forces* Academic Press, London, 2nd edition, 1991
- [59] JACKSON, J.D. *Classical Electrodynamics* John Wiley and Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, 2. Auflage, 1975
- [60] JACOBS, H. O.; KNAPP, H.F.; MÜLLER, S.; STEMMER, A. *Surface potential mapping: A qualitative material contrast in SPM*, *Ultramicroscopy*, Vol. 69, pp. 39-49, 1997
- [61] JACOBS, H. O.; LEUCHTMANN, P.; HOMAN, O. J.; STEMMER, A. *Resolution and contrast in Kelvin probe force microscopy*, *Journal of Applied Physics* – August 1, 1998 – Volume 84, Issue 3, pp. 1168-1173
- [62] JIANG, J.; KRAUSS, T. D.; BRUS, L. E. *Electrostatic Force Microscopy Characterization of Trioctylphosphine Oxide Self-assembled Monolayers on Graphite*, *J. Phys. Chem. B*, Vol. 104 (50), pp. 11936-11941, 10/2000
- [63] JUNG, M.; LANGER, U. *Methode der finiten Elemente für Ingenieure*, Teubner Verlag, 2001
- [64] KALININ, S. V. *Nanoscale Electric Phenomena at Oxide Surfaces and Interfaces by Scanning Probe Microscopy* Dissertation 2002
- [65] KALININ, S. V.; BONNELL, D. A. *Electric scanning probe imaging and modification of ferroelectric surfaces* *Condensed Matter*, 2003
- [66] KALTENBACHER, M.; LANDES, H.; LERCH, R. *Software Package for the Numerical Simulation of Coupled Field Problems* Software for Electrical Engineering Analysis and Design IV, Wessex Institute of Technology, United Kingdom, 1999
- [67] KALTENBACHER, M. *Numerical Simulation of Mechatronic Sensors and Actuators* Springer-Verlag, 2nd edition, 2007
- [68] KASPER, M. *Mikrosystementwurf* Springer Verlag Berlin, Heidelberg, 1. Auflage, 2000
- [69] KNORRENSCHILD, M. *Numerische Mathematik* Fachbuchverlag Leipzig, München, Wien, 1. Auflage, 2005
- [70] KOST, A. *Numerische Methoden in der Berechnung elektromagnetischer Felder* Springer Verlag Berlin, Heidelberg, 1. Auflage, 1994
- [71] KÜPFMÜLLER, K.; MATHIS, W.; REIBIGER, A. *Theoretische Elektrotechnik* Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 17. Auflage, 2006
- [72] LEHNER, G. *Elektromagnetische Feldtheorie* Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 4. Auflage, 2004

- [73] LEHR, H.; ABEL, S.; DOPPLER, J.; EHRFELD, W.; HAGEMANN, B.; KAMPER, H.P.; MICHEL, F.; SCHULZ, CH.; THURIGEN, CH. *Microactuators as driving units for microrobotic systems* SPIE Proc. Microrobotics: Components and Applications 2906 (1996) 202-210
- [74] LIVSHITS, A. I.; SHLUGER, A. L.; ROHL, A. L. *Model of noncontact scanning force microscopy on ionic surfaces* Physical Review B, Vol. 59, No. 3, 1999
- [75] LUTZ, H.; WENDT, W. *Taschenbuch der Regelungstechnik* Verlag Harry Deutsch, Frankfurt am Main, 6. Auflage, 2005
- [76] LYNESS, J. N.; COOLS, R. *A survey of numerical cubature over triangles* Proc. of Symposia in Applied Mathematics, Vol. 48, pp. 127-150, 1994
- [77] LYSHEVSKI, S.E. *Nano- and Micro-Electromechanical Systems* CRC Press, Boca Raton, London, New York, Washington, D.C., 2.Auflage, 2005
- [78] MERZIGER, G.; WIRTH, T. *Repititorium der höheren Mathematik* Bionomi Verlag, 1993
- [79] MIKHLIN, S. G. *Variational Methods in Mathematical Physics* Pergamon Press, New York 1964
- [80] MORITA, S.; WIESENDAGER, R.; MEYER, E. *Noncontact Atomic Force Microscopy* Springer Verlag, 2002
- [81] NELSON, M. W.; SCHROEDER, P. G.; SCHLAF, R.; PARKINSON, B. A. *Two-Dimensional Dopant Profiling of an Integrated Circuit Using Bias-Applied Phase-Imaging Tapping Mode Atomic Force Microscopy* Electrochemical and Solid-State Letters, Vol. 2 (9), pp. 475-477, 1999
- [82] OSTERGAARD, D. F.; GYIMESI, M. *Finite Element Based Reduced Order Modeling of Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)* Technical Proceedings of the 2000 International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, pp. 684-687, 2003
- [83] PREISNER, T.; GREIFF, M.; BALA, U. B.; MATHIS, W. *Numerical computation of magnetic fields applied to magnetic force microscopy*, COMPEL, Volume 28, pp. 120–129, November 2009
- [84] PRESS, W. H.; SEUL, A. T.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes in C++, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 2. Auflage, 2002

- [85] RABE, U.; AMELIO, S.; KESTER, E.; SCHERER, V.; HIRESKORN, S.; ARNOLD, W. *Quantitative determination of contact stiffness using atomic force acoustic microscopy*, Ultrasonics, Vol. 38, pp. 430-437, 2000
- [86] RABE, U.; KOPYCINSKA, M.; HIRESKORN, S.; ARNOLD, W. *Evaluation of the contact resonance frequencies in atomic force microscopy as a method for surface characterisation*, Ultrasonics, Vol. 40, pp. 49-54, 2002
- [87] RAMASWAMY, D.; WHITE, J. *Automatic Generation of Small-Signal Dynamic Macromodells from 3-D Simulation* Technical Proceedings of the Fourth International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, pp. 27-30, 2000
- [88] REBHAN, E. *Theoretische Physik I* Spektrum Akademischer Verlag, 1999
- [89] REDDY, J. N. *An Introduction to the Finite Element Method* McGraw-Hill, New York, 2. Auflage, 1993
- [90] ROSENTHAL, P. A.; YU, E. T.; PIERSON, R. L.; ZAMPARDI, P. J. *Characterization of  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  heterojunction bipolar transistor structures using cross-sectional scanning force microscopy* Journal of Applied Physics, Vol. 87, No. 4, 2000
- [91] SACHA, G. M.; VERDAGUER, A.; MARTINEZ, J.; SÁENZ, J. J.; OGLE-TREE, D. F.; SALMERON, M. *Effective tip radius in electrostatic force microscopy* Applied Physics Letters, Vol. 86, Issue 12, 03/2005
- [92] SADER, J. E.; JARVIS, S. P. *Accurate formulas for interaction force and energy in frequency modulation force spectroscopy* Applied Physics Letters, Vol. 84, No. 10, 03/2004
- [93] SADIKU, M. *Numerical Techniques in Electromagnetics* CRC Press, Boca Raton, London, New York, Washington D.C., 2.Auflage, 2001
- [94] SARID, D. *Scanning Force Microscopy* Oxford University Press, New York, revised edition, 1994
- [95] SASS, L. *Symbolic Modeling of Electromechanical Multibody Systems* Dissertation 2004
- [96] SCHADE, H.; NEEMANN, K. *Tensoranalysis*, de Gruyter, 2. Auflage, 2006
- [97] SCHINNERL, M.; KALTENBACHER, M.; LANGER, U.; LERCH, R.; SCHÖBERL, J. *An efficient method for the numerical simulation of magneto-mechanical sensors and actuators*, European Journal for Applied Mathematics, 18:233-271, 2007

- [98] SCHWARZ, H. R. *Methode der finiten Elemente* Teubner Stuttgart 2. Auflage, 1984
- [99] SIMONYI, K. *Theoretische Elektrotechnik* VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften Berlin, 9. Auflage, 1977
- [100] SOMMERFELD, A. *Vorlesungen über Theoretische Physik, Mechanik*, Band 1, Verlag Harry Deutsch, Nachdruck der 8. Auflage, 1994
- [101] SOMMERFELD, A. *Vorlesungen über Theoretische Physik, Elektrodynamik*, Band 3, Verlag Harry Deutsch, Nachdruck der 4. Auflage, 2001
- [102] SOUNILHAC, S.; BARTHEL, E.; CREUZET, F. *Simultaneous atomic force microscopy measurement of long range forces and adhesion energy between tungsten and oxide surfaces under ambient atmosphere and ultrahigh vacuum* Journal of Applied Physics, Vol. 85, No. 1, 1999
- [103] SOUNILHAC, S.; BARTHEL, E.; CREUZET, F. *The electrostatic contribution to the long-range interactions between tungsten and oxide surfaces under ultrahigh vacuum* Applied Surface Science, Vol. 140, pp. 411-414, 1999
- [104] SPICKERMANN, D. *Werkstoffe der Elektrotechnik und Elektronik J.* Schlembach Fachverlag, Weil der Stadt, 1. Auflage, 2002
- [105] STARK, R. W.; DROBEK, T.; HECK, W. M. *Tapping-mode atomic force microscopy and phase-imaging in higher eigenmodes* Applied Physics Letters, Vol. 74, No. 22, pp. 3296-3298, 05/1999
- [106] STRANG, G.; G. J. FIX *An Analysis of the Finite Element Method* Prentice Hall, 1973
- [107] TÄRNHUVUD, T.; REICHERT, K. *Accuracy problems of force and torque calculation in FE-systems* ,IEEE Transactions on Mafnetics – January 1988 – Volume 24, Issue 1, pp. 443-446
- [108] TAI, Y. C.; FAN, L. S.; MULLER, R. S. *IC-processed micromotors: Design, technology and testing* Proc. IEEE Micro Electro Mechanical Systems 1989, 1-6
- [109] TAKAHASHI, T.; ONO, S. *Tip-to sample distance dependence of an electrostatic force in KFM measurements* Ultramicroscopy, Vol. 100, pp. 287-292, 2004
- [110] TANG, Z.; YANG, X.; GANG, L.; ALRU, N. R. *Physical models for coupled electromechanical analysis of silicon nanoelectromechanical systems* Journal of Applied Physics 97, 05/2005

- [111] TÖRNIG, W. *Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker* Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1.Auflage, 1979
- [112] VALDRE, G. *Electric Force Microscopy Imaging & Microscopy* 8, 01/2007
- [113] Wittpahl, V.: *Entwicklung eines neuartigen elektrischen Rasterkraftmikroskopie-Tests zur quantitativen Bestimmung von Gleich- und Wechselspannungen bis über 100 GHz in integrierten mikroelektronischen Schaltungen*, Dissertation, University of Duisburg, VDI Verlag, 2000
- [114] WOLF, E. L. *Nanotechnics and Nanotechnology* Wiley-VCH, Weinheim, 2nd edition, 2006
- [115] WOLFF, I. *Maxwellsche Theorie* Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 4. Auflage, 1997
- [116] WOLTER, O.; BAYER, TH.; GRESCHNER, J.; *Micromachined silicon sensors for scanning force microscopy* Journal of Vacuum Science and Technology B 9 (2): 1353-1357 Part 2, Mar-Apr 1991
- [117] WUNDERLICH, W.; PILKEY, W. D. *Mechanics of Structures, Variational and Computational Methods* CRC Press, 2nd edition, 2003
- [118] WUNSCH, G.; SCHULZ, H. G. *Elektromagnetische Felder* Verlag Technik Berlin, 2. Auflage, 1996
- [119] XIE, H. Y.; SUN, X.; NING, G. L. *Hamaker theory for atom-tip interactions of non-reactive surface in non-contact AFM* Applied Surface Science, Vol. 239, pp. 129-131, 2005
- [120] YAN, M.; BERNSTEIN, G. H. *Apparent height in tapping mode of electrostatic force microscopy* Ultramicroscopy, Vol. 106, pp. 582-585, 2000
- [121] YANG, Y.; MAYER, K. M.; HAFNER, J. H. *Quantitative Membrane Electrostatics with the Atomic Force Microscope* Biophys J. BioFAST, Vol. 92, pp. 1966-1974, 2007
- [122] ZHOU, P. B. *Numerical Analysis of Electromagnetic Fields*, Springer Verlag 1993
- [123] Zi Cai Li, *Numerical Methods for Elliptic Problems with Singularities*, World Scientific, 1990
- [124] ZIENKIEWICZ, O. C. *Methode der finiten Elemente* Carl Hanser Verlag München, 2. Auflage, 1984

# Symbolverzeichnis

$\beta$	äußerer Öffnungswinkel einer Spitze in 2D
$\sigma$	mechanischer Spannungstensor
$\mathbf{T}$	Maxwellscher Spannungstensor
$\delta$	virtuelle Änderung
$\dot{q}_i$	zeitliche Ableitung der verallgemeinerten Koordinaten
$\Gamma$	Rand des Gebietes $\Omega$
$\Gamma_D$	Dirichlet-Rand
$\Gamma_N$	Neumann-Rand
$\mathbf{B}$	magnetisches Feld
$\mathbf{D}$	elektrische Erregung
$\mathbf{E}$	elektrisches Feld
$\mathbf{f}$	Volumenkraftdichte
$\mathbf{J}$	Jacobimatrix
$\mathbf{K}$	Steifigkeitsmatrix
$\mathbf{p}$	Impuls
$\mathbf{r}$	Ortsvektor
$\mathbf{S}$	Poyntingvektor
$s$	Weg
$\mathbf{T}_x, \mathbf{T}_y, \mathbf{T}_z$	Zeilenvektoren des Maxwellschen Spannungstensors $\mathbf{T}$
$\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}$	Spaltenvektoren der Jacobimatrix $\mathbf{J}$

---

$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4$	Ortsvektoren zu den Knoten eines Elements
$\Omega$	Berechnungsgebiet
$\omega$	Kreisfrequenz
$\omega_0$	Resonanzkreisfrequenz
$\omega_e$	ungedämpfte Resonanzkreisfrequenz
$\psi$	Approximationsfunktion
$\rho$	Ladungsdichte
$\tilde{\mathbf{E}}$	Näherung für das elektrische Feld $\mathbf{E}$
$\tilde{\varphi}$	Näherung für das elektrische Potenzial $\varphi$
$\varepsilon$	Dielektrizitätskonstante
$\varepsilon_0$	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
$\varphi$	elektrisches Potenzial
$\varrho$	Massendichte
$\xi, \eta, \zeta$	lokale Koordinaten
$A$	Oberfläche von Volumen $V$
$C$	elektrische Kapazität
$d$	Dämpfung
$F$	Kraft
$F$	Kraft
$f_F$	Flächenkraftdichte
$F_n$	Fehler in Energienorm
$F_{LJ}$	Lennard-Jones-Kraft
$G$	Abschneidefunktion
$g(\mathbf{r})$	Dirichlet-Randbedingung
$h(\mathbf{r})$	Neumann-Randbedingung
$I$	elektrischer Strom
$J$	Ersatzfunktional für Lagrangefunktional $L$

---

$k$	Federkonstante
$L$	Lagrangefunktional
$m$	Masse
$N$	Gesamtanzahl der Gitterknoten
$N_D$	Anzahl der Gitterknoten mit Dirichletbedingung
$Q$	Ladung
$q_e$	elektrische Freiheitsgrade
$q_i$	verallgemeinerte Koordinaten
$q_m$	mechanische Freiheitsgrade
$r_0$	Gleichgewichtsabstand zweier Atome nach Lennard-Jones
$t$	Zeit
$U$	elektrische Spannung
$V$	Volumen
$v$	Geschwindigkeit
$W$	Energie oder Potenzial
$W_0$	Gleichgewichtspotenzial zweier Atome nach Lennard-Jones
$W_B$	Buckingham-Potenzial zweier Atome
$W_C$	Coulomb-Potenzial zweier Punktladungen
$W_H$	Hamaker Potenzial
$W_K$	kinetische Energie
$W_P$	potenzielle Energie
$w_{em}$	elektromagnetische Energiedichte
$W_{LJ}$	Wechselwirkungspotenzial zweier Atome nach Lennard-Jones

# Lebenslauf

## Persönliche Daten

### Michael Greiff

geboren am 6. Juli 1970  
in Bonn

## Werdegang

- 09/1980 – 06/1990** **Amos Comenius Gymnasium, Bonn - Bad Godesberg**
- 10/1992 – 07/2000** **Studium der Elektrotechnik, Universität Hannover**  
Abschluss: Diplom-Ingenieur  
Schwerpunkt: Hochfrequenztechnik
- 10/2000 – 02/2002** **Radio Frequency Systems, Hannover**  
Entwicklungsingenieur für Antennen
- 02/2002 – 05/2003** **Radio Frequency Systems, Trignac (Frankreich)**  
Projektleitung in der Antennenentwicklung
- 09/2003 – 08/2007** **Institut für theoretische Elektrotechnik, Universität Hannover**  
Wissenschaftlicher Mitarbeiter
- Seit 08/2008** **Wabco, Hannover**  
Entwicklungsingenieur Automotive