Simulation des Einspannmechanismus von Nanobrücken

Bachelorarbeit

vorgelegt von

Tobias Kemmer

an der Universität Konstanz im Fachbereich Physik



Erstgutachter: Herr Prof. Dr. Peter Nielaba Zweitgutachterin: Frau Prof. Dr. Eva Weig

Abgabetermin:

02.07.2014

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Prof. Dr. Peter Nielaba und der gesamten Arbeitsgruppe seines Lehrstuhls bedanken, die jederzeit bei Fragen und Problemen hilfsbereit zur Verfügung standen.

Gesonderter Dank gilt zusätzlich meinem Betreuer Kristian Scholz, der durch Bereitstellung seiner Daten und durch Einführen in sein Programm und die Thematik einen erheblichen Beitrag zum Gelingen dieser Arbeit geleistet hat.

Ferner danke ich allen, die meine Ausarbeitung – oder auch nur Teile davon – gegengelesen haben und mir mit kritischer Rückmeldung dabei halfen, sie zu verbessern.

Schließlich sei auch meinen Eltern dafür gedankt, mich jederzeit in jeglicher Hinsicht unterstützt zu haben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung		1					
2	Phy	Physikalische Grundlagen							
	2.1	Comp	utersimulation in der Molekulardynamik	3					
		2.1.1	Bewegungsgleichungen	3					
		2.1.2	Numerische Berechnung	4					
		2.1.3	Thermostate	7					
	2.2	Siliciu	m	9					
		2.2.1	Struktur und Oberfläche	9					
		2.2.2	Potential	10					
	2.3	Balker	ntheorie	12					
		2.3.1	Euler-Bernoulli Theorie	13					
		2.3.2	Rayleigh-Modell	14					
		2.3.3	Shear-Modell	15					
		2.3.4	Timoshenko-Modell	16					
3	Sim	ulation		19					
	3.1	Verwe	ndete Einheiten	19					
	3.2	Progra	amme	20					
		3.2.1	LAMMPS	20					
		3.2.2	SEEVN Modifikation	21					
		3.2.3	Weitere Programme	22					
	3.3	Simula	ationsschritte	23					
		3.3.1	Kristallerstellung	23					
		3.3.2	Rekonstruktion	24					
		3.3.3	Thermalisieren	24					
		3.3.4	Auslenkung	24					
		3.3.5	Schwingung	25					

4	Aus	iswertung						
4.1 Auslenkung								
		4.1.1	Linearität	27				
		4.1.2	Auslenkung bei verschiedenen Geometrien	29				
		4.1.3	Form der Nanobrücken	31				
	4.2	Freque	enzen	32				
		4.2.1	Breitenvariation	32				
		4.2.2	Längenvariation	33				
		4.2.3	Blockform	34				
		4.2.4	Krafteinwirkung auf Einspannmechanismus	35				
		4.2.5	Balkentheorien im Vergleich	36				
	4.3	Fehler	quellen	39				
5	Zusa	ammen	fassung	41				
6	Anh	ang		43				
	Übe	rsicht ü	ber simulierte Nanobrücken	43				
	Abb	ildungs	verzeichnis	45				
	Tab	ellenver	zeichnis	46				
	Lite	raturve	rzeichnis	47				

1 Einleitung

Nanoresonatoren werden an der Universität Konstanz derzeit von mehreren Gruppen untersucht. Einerseits werden in der Gruppe von Frau Prof. Dr. Eva Weig Nanoresonatoren experimentell erzeugt, vermessen und gezielt manipuliert [17]. Gleichzeitig werden von Kristian Scholz in der Gruppe von Herrn Prof. Dr. Peter Nielaba ebensolche Nanoresonatoren, wenngleich deutlich kleiner, mit Methoden der Molekulardynamik simuliert [21]. Dies zeigt bereits, welch großes Interesse auch hier vor Ort besteht, Nanoresonatoren besser zu verstehen und anwenden zu können. Auf lange Sicht erhofft man sich neben grundlegenden Erkenntnissen zu physikalischen Phänomenen wie beispielsweise quantenmechanischen Effekten, wenn ein Nanoresonator in seinen Grundzustand versetzt wird, insbesondere auch die Anwendung von Nanoresonatoren als Sensoren, um etwa Kräfte oder Massen zu bestimmen, die äußerst gering sind, aber dennoch die Eigenschaften des Resonators messbar beeinflussen [5].

Mit der vorliegenden Bachelorarbeit soll nun ein Beitrag dazu geleistet werden, die Computersimulation von Nanoresonatoren, speziell solcher aus Silicium in Brückengeometrie, näher an reale Experimente heranzuführen. Da eine Simulation der Nanobrücken in experimentell realisierbarer Größe nicht möglich ist – der dazu nötige Rechenaufwand bei einer Molekulardynamik-Simulation wäre, im Gegensatz zu solchen mit der Finite-Elemente-Methode, enorm –, werden noch deutlich kleinere Nanobrücken verwendet. Die simulierten Brücken sind ungeachtet des zusätzlichen Einspannmechanismus nur 40 Einheitszellen ($\approx 22 \text{ nm}$) lang und 6 Einheitszellen ($\approx 3.3 \text{ nm}$) breit mit quadratischem Querschnitt.

Bisher wurden bei allen Simulationen an Nanobrücken die Enden der Brücke als fix definiert, sodass diese nicht mitschwingen konnten. Jedoch wurde bereits experimentell gezeigt [17], dass sich Frequenz und Dämpfung einer Nanobrücke durch Krafteinwirkung auf den Einspannmechanismus manipulieren lassen. Damit ist zu erwarten, dass die Brücke nicht vollständig getrennt vom Einspannmechanismus betrachtet werden kann. Daher war es Ziel dieser Bachelorarbeit, den Einspannmechanismus der Nanobrücken explizit mitzusimulieren und anschließend zu analysieren, wie die Schwingungseigenschaften von der Form und Größe desselbigen abhängen, um damit die bisher gewonnen Ergebnisse besser einordnen zu können und die Simulation vergleichbarer mit dem Experiment zu machen.

Hierfür werden Nanobrücken aus Silicium simuliert, da Silicium sowohl experimentell gut handhabbar als auch aufgrund seiner regelmäßigen Kristallstruktur mit empirischen Potentialen einfach simulierbar ist. Als Einspannmechanismus werden verschiedene Quader an die eigentliche Brücke angesetzt, die somit in beschränktem Ausmaße noch mitschwingen können. Die Form wird in Breite, Höhe und Länge variiert, um so ein möglichst allgemeines Bild der Abhängigkeiten zu bekommen. In der Simulation und Auswertung wird dabei zunächst eine Unterscheidung zwischen planaren Einspannmechanismen gemacht, die genau so hoch sind wie die Brücke selbst und solchen in Blockform, die in jede Richtung über die Nanobrücke hinausgehen.

2 Physikalische Grundlagen

2.1 Computersimulation in der Molekulardynamik

In einer Simulation mittels Molekulardynamik wird jedes einzelne Atom beschrieben und dessen Bewegung numerisch berechnet. Damit unterscheidet sie sich stark von anderen numerischen Methoden wie der Finite-Elemente-Methode, die einen makroskopischen Körper in endlich viele Elemente aufteilt. Da die Berechnung der Bewegung numerisch exakt erfolgt, ermöglichen die Ergebnisse aus Molekulardynamik-Simulationen eine Validierung des zugrunde liegenden Modells anhand von experimentellen Daten oder liefern, sofern das Modell als gesichert angenommen werden kann, gute Vorhersagen für Experimente [7]. Damit stellt die Computersimulation ein wichtiges Bindeglied zwischen Modell, Theorie und Experiment dar. Jedoch finden in der Molekulardynamik quantenmechanische Effekte, wie sie auf atomarer Ebene auftreten können, keine Berücksichtigung.

Bedingt durch den immensen Rechenaufwand, der für große Körper notwendig wäre, ist die Molekulardynamik auf kleinere Systeme mit geringerer Teilchenzahl – einige Tausende – beschränkt, sodass simulierte Systeme und experimentelle Systeme nicht immer dieselbe Größenordnung besitzen.

2.1.1 Bewegungsgleichungen

In der Molekulardynamik werden die klassischen Bewegungsgleichungen für jedes Teilchen gelöst:

$$m_i \cdot \ddot{\vec{r}_i} = \vec{F}_i = -\vec{\nabla}V \tag{2.1}$$

Dabei bezeichnet der Index *i* die für das *i*-te Atom zutreffenden Größen. Die auftretenden Kräfte $\vec{F_i}$ werden durch Gradientenbildung aus einem entsprechenden Potential *V* berechnet und beinhalten jegliche externe Krafteinwirkung sowie Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Atomen.

Entsprechend erhält man ein System von 3N (gekoppelten) gewöhnlichen li-

nearen Differentialgleichungen, wobei N die Gesamtanzahl der simulierten Atome ist. Da ein solches System deterministisch ist, legt ein entsprechender Satz von Anfangsbedingungen die Lösung eindeutig fest [6, S. 227].

2.1.2 Numerische Berechnung

Zur Lösung der Differentialgleichung können verschiedene numerische Verfahren eingesetzt werden, die unterschiedlich genau und schnell sind. Von besonderer Bedeutung sind dabei symplektische Verfahren, da bei diesen – innerhalb eines entsprechenden Rahmens – Energieerhaltung gegeben und meist eine Zeitumkehr möglich ist. Neben der reinen Berechnungsgeschwindigkeit ist für einen Algorithmus auch wichtig, bei welcher Schrittgröße Δt die Berechnung noch hinreichend genau ist, da der Hauptteil der Zeit für die Berechnung der Kräfte aufgewendet werden muss und dieser Aufwand durch möglichst wenige Integrationsschritte minimiert wird [7]. Entsprechend sind Algorithmen, bei denen pro Zeitschritt mehr als einmal Kräfte berechnet werden müssen, a priori ungeeignet.

2.1.2.1 Verlet-Verfahren

Es hat sich gezeigt, dass der Verlet-Algorithmus bzw. seine Variation Velocity-Verlet in den meisten Fällen eine sehr gute Wahl ist. Dieser wird auch von dem verwendeten Simulationsprogramm LAMMPS standardmäßig verwendet. Um den normalen Verlet-Algorithmus zu erhalten (vgl. [7]), wird der Ort sowohl in positiver als auch in negativer zeitlicher Richtung durch eine Taylorentwicklung angenähert.

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \dot{r}(t) \cdot \Delta t + \frac{\ddot{r}(t)}{2} \Delta t^2 + \frac{\ddot{r}(t)}{6} \Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$
$$r(t - \Delta t) = r(t) - \dot{r}(t) \cdot \Delta t + \frac{\ddot{r}(t)}{2} \Delta t^2 - \frac{\ddot{r}(t)}{6} \Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

Werden diese beiden Gleichungen addiert, eliminieren sich alle Anteile mit ungeraden Potenzen und es bleibt zunächst übrig:

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2 \cdot r(t) + \ddot{r}(t)\Delta t^{2} + \mathcal{O}(\Delta t^{4})$$

Darin kann noch $\ddot{r} = f = \frac{F}{m}$ ersetzt werden, wobei m die Masse des Teilchens bezeichnet, und nach $r(t + \Delta t)$ aufgelöst werden. Verwendet man zusätzlich die Schreibweise $r_n := r(t_n)$ mit $t_n = n\Delta t$ und vernachlässigt den Fehler $\mathcal{O}(\Delta t^4)$, erhält man die bekannte Form des Verlet-Verfahrens:

$$r_{n+1} = 2 \cdot r_n - r_{n-1} + \frac{F_n}{m} \Delta t^2$$
(2.2)

Nachteil des Verlet-Verfahrens ist, dass die Geschwindigkeit $v_n = \dot{r}_n$ zusätzlich berechnet werden muss, sofern diese gewünscht oder benötigt wird, um beispielsweise die kinetische Energie zu berechnen. Dies lässt sich mit etwas niedrigerer Genauigkeit annähern durch:

$$v_n = \frac{r_{n+1} - r_{n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$
 (2.3)

2.1.2.2 Velocity-Verlet-Verfahren

Alternativ dazu kann jedoch auch die Variante des Velocity-Verlet-Algorithmus verwendet werden, da diese die Geschwindigkeit in die Berechnung mit einbezieht und daher automatisch zur Verfügung stellt. Dieser kann hergeleitet werden [23], indem man definiert

$$z_n := \frac{r_{n+1} - r_n}{\Delta t}$$

Damit können die Geschwindigkeit und Beschleunigung neu dargestellt werden als

$$v_n = \frac{z_n + z_{n-1}}{2}$$
$$f_n = \frac{z_n - z_{n-1}}{\Delta t}$$

Durch Einsetzen und Umformen können die Gleichungen des Verlet-Verfahrens schließlich in ihre Geschwindigkeitsform überführt werden:

$$r_{n+1} = r_n + \Delta t \cdot v_n + \frac{\Delta t^2}{2} f_n \tag{2.4}$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{f_{n+1} + f_n}{2} \Delta t \tag{2.5}$$

Nachteil des Velocity-Verlet-Verfahrens gegenüber dem normalen Verlet-Verfahren ist ein marginaler Mehrverbrauch an Speicher, der in den meisten Fällen jedoch vernachlässigbar ist. Ferner ist die hier dargestellte Form nur möglich, wenn die neue Beschleunigung f_{n+1} unabhängig von der Geschwindigkeit v_{n+1} berechnet wird. Die berechneten Bahnen sind – von Rundungsfehlern abgesehen – äquivalent zu denen des Verlet-Verfahrens. In der Molekulardynamik hat das Velocity-Verlet-Verfahren den zusätzlichen Vorteil, dass durch das Einbeziehen der Geschwindigkeit in die Rechnung die Temperatur einfach über eine Manipulation der Geschwindigkeiten variiert werden kann.

2.1.2.3 Abschneideradius und Nachbarschaftslisten

Da, wie bereits in Abschnitt 2.1.2 erwähnt, die Kraftberechnung die Primärquelle des Rechenaufwandes ist, ist es erstrebenswert, die Anzahl der zu berechnenden Kräfte zu minimieren. Eine effektive Methode, dies zu erreichen, sind Abschneideradien in Verbindung mit Nachbarschaftslisten. Die meisten zwischenmolekularen (Paar-)Potentiale streben für große Atomabstände recht schnell gegen Null, sodass ein Atom i an der Position r_i von einem weit entfernten Atom vernachlässigbar wenig beeinflusst wird. Aus diesem Grund definiert man mit einem Abschneideradius r_c eine Kugel um die Position r_i und betrachtet nur die Wechselwirkung von Atom i mit solchen Atomen, die sich innerhalb dieser Kugel befinden. Für alle Atome außerhalb dieser Kugel wird die Kraft auf F = 0 gesetzt. Abhängig vom Potential kann bzw. muss anschließend noch eine Korrektur zur resultierenden Kraft dazuaddiert werden [1, 7]. Dies ist beispielhaft in Abbildung 2.1 dargestellt. Für die Position 1 wären in diesem Fall nur die Atome an den Positionen 2 bis 6 von Bedeutung, was sich jedoch zeitlich ändern kann, wie durch die grauen Markierungen angedeutet ist. Um zusätzlich aber auch nicht in



Abbildung 2.1: Abschneideradius und Nachbarschaftsliste um Atom 1. Graue Namen bezeichnen mögliche Grenzüberschreitungen, bevor eine neue Nachbarschaftsliste notwendig wird. Angelehnt an [1].

jedem Integrationsschritt überprüfen zu müssen, für welche Atome eine Berechnung notwendig ist und für welche nicht, wird zusätzlich ein Nachbarschaftsradius $r_n > r_c$ definiert [1]. Zu Beginn einer Simulation wird für jedes Atom $\vec{r_i}$ eine Liste aller Atome erstellt, die sich innerhalb der Kugel $B(\vec{r_i}, r_n)$ befinden. Im Integrationsschritt werden dann nur diese Atome zur Überprüfung und Kräfteberechnung herangezogen, da für alle außerhalb der Kugel festgelegt ist, dass diese auch außerhalb des Cutoff-Radius liegen. Aufgrund der Dynamik des Systems kann es jedoch passieren, dass Atome in die Kugel eintreten und letztendlich auch den Abschneideradius unterschreiten. Daher muss die Nachbarschaftsliste regelmäßig aktualisiert werden und sichergestellt sein, dass in diesem Zeitraum kein Atom eine Strecke $s > r_n - r_c$ zurückgelegt hat. Dies bedeutet, dass in Abbildung 2.1 die Nachbarschaftsliste aktualisiert werden muss, bevor das Atom mit der Nummer 8 die äußere Schale durchdrungen hat.

2.1.3 Thermostate

Da in einer MD-Simulation prinzipiell nur Positionen und Geschwindigkeiten berechnet werden, muss zunächst ein Ausdruck für die Temperatur gefunden werden, der nur von selbigen abhängt. Eine übliche Definition basiert auf dem Gleichverteilungssatz [7]. Es gilt $\langle \frac{1}{2}mv_{\alpha}^2 \rangle = \frac{1}{2}k_bT$ mit α Freiheitsgraden. Eine Simulation findet mit $N_f = 3N - 3$ Freiheitsgraden statt, sofern 3 für die Schwerpunktsbewegung des Objekts reserviert sind, wodurch sich die Gleichung umschreiben lässt zu

$$T = \frac{1}{k_b \cdot N_f} \sum_{i=1}^{N_f} m_i \cdot v_i^2$$
(2.6)

Um nun die Temperatur des Modells zu kontrollieren, werden Thermostate verwendet. Je nach Bedarf stehen dabei verschiedenste zur Auswahl, wobei die Grundidee in den meisten Fällen die gleiche ist: Es werden die Geschwindigkeiten der einzelnen Atome skaliert, bis diese der Verteilung entsprechen, wie sie in einem dieser Temperatur entsprechenden Ensemble anzutreffen wäre.

2.1.3.1 Andersen-Thermostat

Der Andersen-Thermostat stellt eine sehr einfache Möglichkeit dar, die Temperatur zu skalieren. Es wird dafür ein Wärmebad simuliert, das durch zufällige Stöße auf die Teilchen die Geschwindigkeiten an eine Maxwell-Boltzmann Verteilung anpasst und somit die gewünschte Temperatur auf stochastische Weise erzeugt [2, 7, 1].

Die Häufigkeit der Stöße wird dabei über einen Kopplungsparameter ν bestimmt. Während jedem Zeitschritt Δt wird dann für jedes Teilchen eine Zufallszahl $z \in [0, 1]$ berechnet und anschließend überprüft, ob $z < \nu \Delta t$ zutrifft. Falls dem so ist, erfährt das Teilchen einen Stoß und wird in seiner Geschwindigkeit angepasst.

Nachteil des Andersen-Thermostats in einer MD-Simulation ist, dass die entstehenden Trajektorien aufgrund der stochastischen Stöße nicht mehr deterministisch sind und somit nicht die Realität abbilden. Solange der Thermostat allerdings nur in vorbereitenden Schritten verwendet wird und anschließend eine gewisse Relaxationsphase erfolgt, stört dies in einer Simulation mit abgetrenntem Thermostat nicht.

2.1.3.2 Langevin-Thermostat

Während ein Andersen-Thermostat die Geschwindigkeit zufällig reskaliert, folgt ein Langevin-Thermostat einem anderen Ansatz bei der Simulation des Wärmebads. Es wird ebenfalls der Kontakt mit einem Wärmebad, bestehend aus leichten Teilchen, die die angestrebte Temperatur besitzen, simuliert, welche über Stöße mit zufälliger Richtung und Stärke Energie auf das zu kontrollierende Objekt übertragen. Hierfür wird die in der Integration auftretende Kraft nach dem Muster

$$F = F_c + F_f + F_r \tag{2.7}$$

umgeschrieben [13], wobei F_c die aus dem ausgewählten Potential erhaltene Kraft bezeichnet, F_f einen Reibungsterm und F_r die aus Stößen resultierende Kraft [20, 13]:

$$F_f = -\Gamma m v \tag{2.8}$$

$$F_r \propto \sqrt{k_B T m \Gamma \Delta t^{-1}} \tag{2.9}$$

Hierin bezeichnet m die Masse des gestoßenen Teilchens, Γ eine frei wählbare Dämpfungskonstante, k_B die Boltzmann-Konstante und T die angestrebte Temperatur. Die Stöße werden zusätzlich durch eine Zufallszahl in Richtung und Betrag variiert. Dabei verwendet LAMMPS [13] im Gegensatz zur ursprünglichen Variante [20] keine Gaußverteilung, sondern gleichmäßig verteilte Zufallszahlen. Dies beschreibt die Stoßinteraktion mit einem zufälligen Teilchen und wird anschließend in gewöhnlicher Weise numerisch integriert.

2.2 Silicium

Silicium ist eines der häufigsten Materialien der Welt und spielt in der Halbleitertechnologie eine zentrale Rolle. Daher besteht großes Interesse daran, möglichst kleine Siliciumstrukturen herstellen und manipulieren zu können. Da es sich experimentell durch Lithografie geschickt bearbeiten lässt, ist Silicium auch für Nanoresonatoren und -brücken häufig das Grundmaterial [9]. Im Folgenden wird daher die Struktur des Siliciums etwas näher betrachtet und ein empirisches Potential vorgestellt, um die Wechselwirkung zu beschreiben, welches auch für Computersimulationen geeignet ist.

2.2.1 Struktur und Oberfläche

Silicium befindet sich im Grundzustand in einer klassischen Diamantstruktur, wie sie für Elemente der Hauptgruppe IV üblich ist. Daneben können unter bestimmten äußeren Bedingungen aber auch weitere Kristallstrukturen auftreten [12]. Die einfachste Variante, die Diamantstruktur zu beschreiben, ist ein fcc-Gitter mit zweiatomiger Basis an den Positionen (0, 0, 0) und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, wobei für Silicium die Gitterkonstante 5.43 Å beträgt. Für Richtungen entlang der [100]-, [010]- und [001]-Achsen betragen der Youngsche Modul E = 130 GPa und die Poissonzahl $\nu = 0.28$ [11].

Neben der Struktur innerhalb des Kristalls ist bei Silicium die Oberfläche gesondert zu betrachten, da sie nicht dem entspricht, was bei einem Schnitt durch den Kristall zu erwarten wäre. In der späteren Simulation werden ausschließlich [100]-Oberflächen verwendet, weshalb auch hier nur auf diese eingegangen wird. Da die Oberflächenatome jeweils nur in eine Richtung in die Kristallstruktur eingebunden sind, fehlen Atombindungen, die zu einer Potentialminimierung führen würden. Daher ist es für die Oberflächenatome energetisch günstiger, sich nicht an ihren theoretischen Kristallpositionen zu befinden (vgl. Abb. 2.2a), sondern sich wie in Abbildung 2.2b dargestellt jeweils zu Dimeren zusammenzuschließen.

Experimentell werden sowohl Dimere als auch "buckled" Dimer-Rekonstruktionen beobachtet. Frühere Studien [4, 30] haben sich ausführlich damit beschäftigt, welche Oberflächenrekonstruktion unter welchen Umständen auftreten. In defektfreier Umgebung, wie sie in einer Simulation am einfachsten herzustellen ist, dominieren symmetrische Dimere die Oberfläche [3, 30], während experimentell häufiger asymmetrische Dimere bzw. in defektreicher Umgebung "buckled" Dimere beobachtet werden können. In Simulationen ist die auftretende Oberfläche auch



(a) Silicium-[100]-Oberfläche bei einfa- (b) Silicium-[100]-Oberfläche mit Oberchem Schnitt durch den Kristall

flächenrekonstruktion mit symmetrischen Dimeren

Abbildung 2.2: Vergleich der Oberflächenrekonstruktion von Silicium mit Kristallschnitt

abhängig vom verwendeten Potential. Während ein Tight-Binding-Modell asymmetrische Bindungen bevorzugt, liefert das hier verwendete Stillinger-Weber-Potential [22] eine symmetrische Oberflächenrekonstruktion.

2.2.2 Potential

Um die zwischenatomaren Kräfte in Silicium zu beschreiben, wird das Stillinger-Weber-Potential verwendet, da dieses für Silicium bereits gut getestet ist und angemessene Ergebnisse liefert. Zwar besitzt das Potential Schwächen, was die Oberflächenrekonstruktion zu einer (a)symmetrischen wie 'buckled' 2x1-Dimer-Oberfläche angeht [3, 30], bildet jedoch die elastischen Konstanten, die einen außerordentlichen Einfluss auf das Schwingverhalten haben, von Silicium recht gut ab [3].

Bei dem Stillinger-Weber-Potential handelt es sich um ein Mehrkörperpotential, das neben einem klassischen Zweikörperpotential zusätzlich ein Dreikörperpotential beinhaltet, welches die für die Diamantstruktur typischen Winkel von 109.47° bevorzugt, um so diese Struktur als stabilste zu erzwingen [22]. Es lässt sich daher schreiben als

$$\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i < j} v_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i < j < k} v_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$$
(2.10)

Darin bezeichnen v_2 und v_3 einen Zwei- bzw. Dreikörperanteil, die jeweils von den Atompositionen von zwei bis drei der N Atome abhängen, über die summiert wird. Der Zweikörperanteil v_2 kann dargestellt werden durch

$$v_2(\vec{r_i}, \vec{r_j}) = \varepsilon f_2\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right) \quad \text{mit}$$
 (2.11)

$$f_2(r) = \begin{cases} A \left(B \cdot r^{-p} - r^{-q} \right) \exp\left[\frac{1}{r-a}\right] & r < a \\ 0 & r \ge a \end{cases}$$
(2.12)

und ist in Abbildung 2.3 abgebildet.



Abbildung 2.3: Paaranteil des Stillinger-Weber-Potentials gemäß Gleichung 2.12 mit den Konstanten aus [22]

Der Dreikörperanteil, der die Winkelabhängigkeit beinhaltet, wird beschrieben durch

$$v_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = \varepsilon f_3\left(\frac{\vec{r}_i}{\sigma}, \frac{\vec{r}_j}{\sigma}, \frac{\vec{r}_k}{\sigma}\right)$$
(2.13)

mit

iit
$$f_3(\vec{r_i}, \vec{r_j}, \vec{r_k}) = h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \Theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \Theta_{ikj})$$

(2.14)

und
$$h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{jik}) = \begin{cases} \lambda \exp\left[\frac{\gamma}{r_{ij}-a} + \frac{\gamma}{r_{ik}-a}\right] \cdot \left(\cos\Theta_{jik} + \frac{1}{3}\right)^2 & r < a \\ 0 & r \ge a \end{cases}$$
 (2.15)

Darin sind A, B, p und a positive Konstanten, die von Stillinger und Weber bestimmt wurden und in Tabelle 2.1 zusammen mit den übrigen Konstanten q, λ , γ , ε und σ aufgelistet sind. Die Konstanten wurden so auch in der Simulation verwendet. Die beiden Konstanten ε und σ sind so gewählt, dass das Paarpotential ein Minimum mit der Tiefe -1 besitzt und zusätzlich $f'_2(2^{1/6}) = 0$ gilt. Neben der Diamantstruktur wurden auch die Schmelztemperatur und die flüssige Phase bei der Bestimmung der Parameter berücksichtigt [22].

Parameter	Wert
A	7.049556277
В	0.6022245584
p	4.0
q	0.0
a	1.80
λ	21.0
γ	1.20
ε	2.1683
σ	2.0951

Tabelle 2.1: Parameter des Stillinger-Weber-Potentials. Entnommen aus [22, 14]

Vorteil dieser Funktionsdefinition ist, dass der Abschneideradius a bereits so integriert ist, dass stetige, differenzierbare Übergänge an r = a auftreten. Dies ermöglicht es auch, die Wechselwirkung von Atomen, deren Abstand größer als aist, direkt zu verwerfen. Daher ist auch die Implementierung eines Abschneideradius mit Nachbarschaftsliste ohne weiteres möglich und benötigt keine zusätzliche Abschneidekorrektur.

2.3 Balkentheorie

Um die Schwingungen von Balken und Brücken zu beschreiben, wurden über die Jahre viele Theorien entwickelt, die auf Basis unterschiedlicher Annahmen und unter Berücksichtigung verschiedener Phänomene Näherungen für einige Systeme bieten. Einige dieser Theorien werden im Folgenden gemäß [10] und [29] hergeleitet.

Alle Theorien, die nachfolgend vorgestellt werden, besitzen zunächst einen Satz gleicher Annahmen [10]:

- Der Balken sollte schlank sein.
- Der Balken verhält sich gemäß dem Hookschen Gesetz.
- Der Balken besitzt einen symmetrischen Querschnitt.

- Flächen, die orthogonal auf der Achse stehen, stehen auch nach einer Deformation noch senkrecht auf dieser.
- Die Kleinwinkelnäherung greift bei Verdrehungen.
- Das Auftreten von Querkontraktionen wird vernachlässigt.

Insbesondere der erste Punkt wiegt jedoch in den verschiedenen Theorien unterschiedlich schwer, wie sich zeigen wird, und ist für die zu simulierende Brücke auch nur eingeschränkt erfüllt.

2.3.1 Euler-Bernoulli Theorie

Die Balkentheorie nach Euler und Bernoulli stellt eine einfache Theorie für isotrope Balken dar und wird daher häufig verwendet, um erste Abschätzungen durchzuführen. Hierfür werden gemäß Abbildung 2.4 die aufgrund von Biegung und Scherung auftretenden Kräfte eines Brückensegments dx betrachtet [29]. Aus diesen lassen sich zwei Gleichgewichtsbedingungen ableiten:

$$-\frac{\partial V}{\partial x}dx = \rho A dx \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}$$
(2.16)

$$Vdx \approx \frac{\partial M}{\partial x}dx$$
 (2.17)

Hierin bezeichnet V die Scherkraft, M das Biegemoment, A die Querschnittsfläche und v die Auslenkung. Durch einiges Umformen und Ansetzen von Lösungen, wie es beispielsweise in [29] beschrieben wird, lässt sich für die räumliche Komponente von v die allgemeine Lösung finden

$$X = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx + C_3 \sinh kx + C_4 \cosh kx$$
(2.18)
= $C_1 (\cos kx + \cosh kx) + C_2 (\cos kx - \cosh kx)$
+ $C_3 (\sin kx + \sinh kx) + C_4 (\sin kx - \sinh kx)$ (2.19)

Dabei wurde die zusätzliche Größe $k^4 = \omega^2 \frac{\varrho A}{EI}$ eingeführt mit dem Elastizitätsmodul *E* und dem Flächenträgheitsmoment *I*.

Um schließlich eine Frequenz zu erhalten, ist es notwendig, die Randbedingungen zu berücksichtigen. So muss für einen beidseitig fest eingespannten Stab gelten:

$$X(0) = 0 X'(0) = 0 X(l) = 0 X'(l) = 0 (2.20)$$



Abbildung 2.4: Geometrische Anordnung und Kräfte im Euler-Bernoulli-Modell. Angelehnt an [29].

Dies führt nach weiterem Umformen schließlich zur Bedingung

$$\cos kl \cosh kl = 1, \tag{2.21}$$

womit (für k > 0) gelten muss $k_1 l = 4.73$, $k_2 l = 7.853$, usw. Damit lässt sich die Kreisfrequenz bestimmen durch:

$$\omega_i = k_i^2 \sqrt{\frac{EI}{\varrho A}} \tag{2.22}$$

$$\stackrel{i=1}{=} \frac{4.73^2}{l^2} \sqrt{\frac{EI}{\varrho A}} \tag{2.23}$$

Anwendungsbereich der Euler-Bernoulli-Balkentheorie sind insbesondere lange, schmale Balken mit nicht zu großer Frequenz [10]. Bei dicken Balken und hohen Frequenzen treten systematische Fehler auf, die zu einer deutlich überhöhten Frequenzvorhersage führen können.

2.3.2 Rayleigh-Modell

Eine Erweiterung des Euler-Bernoulli-Modells stammt von Lord Rayleigh, der zusätzlich zur Verbiegung auch noch die Trägheit berücksichtigt [10, 29]. Dies wird dadurch erzielt, dass in Gleichung 2.17 ein zusätzlicher Term $-\varrho I \frac{\partial^3 v}{\partial x \partial t^2} dx$ für das Trägheitsmoment eingebracht wird. Mit dem Ansatz $v(x,t) = W(x) \cdot T(t)$ lässt sich erneut eine Gleichung für den räumlichen Anteil finden, die zu einer allgemeinen Lösung W(x) führt

$$W = C_1 \sin ax + C_2 \cos ax + C_3 \sinh bx + C_4 \cosh bx$$
(2.24)

Wesentlicher Unterschied zur Euler-Bernoulli-Theorie ist, dass hier zwei Wellenzahlen a und b auftreten, die gekoppelt sind über die Gleichung

$$b = as\sqrt{\frac{1}{a^2 + s^2}}\tag{2.25}$$

Dabei bezeichnet $s = l\sqrt{\frac{A}{I}}$ die Schlankheit des Balkens. Damit geht aufgrund von $\lim_{s\to\infty} b(a,s) = a$ das Rayleigh-Modell für sehr lange Balken in das Euler-Bernoulli-Modell über. Die Bestimmungsgleichung für a (und b) lautet für einen fixierten Balken:

$$(b^{2} - a^{2})\sin a \sinh b - 2ab\cos a \cosh b + 2ab = 0$$
(2.26)

und kann numerisch nach $a(\frac{1}{s})$ gelöst werden. Die Schwingungsfrequenz kann dann bestimmt werden aus

$$w = \frac{ab}{sl}\sqrt{\frac{E}{\varrho}} = \frac{ab}{l^2}\sqrt{\frac{EI}{\varrho A}}$$
(2.27)

2.3.3 Shear-Modell

Das Shear-Modell stellt eine andere Erweiterung des Euler-Bernoulli-Modells dar, bei dem die Scherkräfte (engl: shear) berücksichtigt werden [10]. Hierfür wird die Neigung $\frac{\partial v}{\partial x} = \alpha + \beta$ des Balkens beschrieben durch die aufgrund des Biegemoments und der Scherung auftretenden Winkel α und β . Zusätzlich wird ein Formfaktor k' für die Querschnittsfläche eingeführt, der über die Poissonzahl berechnet wird und für einen rechteckigen Querschnitt folgendermaßen dargestellt werden kann

$$k' = \frac{10(1+\nu)}{12+11\nu} \tag{2.28}$$

Es ergeben sich schlussendlich Bewegungsgleichungen, ähnlich der im Rayleigh-Modell, allerdings mit zwei räumlichen Funktionen:

$$\begin{bmatrix} W(X) \\ \Psi(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1 \\ D_1 \end{bmatrix} \sin ax + \begin{bmatrix} C_2 \\ D_2 \end{bmatrix} \cos ax + \begin{bmatrix} C_3 \\ D_3 \end{bmatrix} \sinh bx + \begin{bmatrix} C_4 \\ D_4 \end{bmatrix} \cosh bx$$
(2.29)

und der Bestimmungsgleichung für a und b bei fixierten Enden

$$(b^6 - a^6)\sin a \sinh b + 2a^3b^3\cos a \cosh b - 2a^3b^3 = 0$$
(2.30)

wobei $b = \frac{as}{\gamma} \sqrt{\frac{1}{a^2 + \frac{s^2}{\gamma^2}}}$ mit $\gamma^2 = \frac{2(1+\nu)}{k'}$. Dies entspricht, bei Ersetzung von $s' = \frac{s}{\gamma}$ gerade einem anderen Fall des Rayleigh-Modells, namentlich dem der freien Enden. Die Kreisfrequenz kann anschließend bestimmt werden durch die Gleichung

$$\omega = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{\gamma l} \sqrt{\frac{E}{\varrho}} \tag{2.31}$$

2.3.4 Timoshenko-Modell

Als letztes und präzisestes Modell soll hier nun noch das Timoshenko-Modell vorgestellt werden, welches sowohl Trägheit als auch Schubverformung berücksichtigt und von S. P. Timoshenko [25, 24] vorgestellt wurde.

Die Herleitung erfolgt in [10] ähnlich der der Shear-Theorie und führt zu den gleichen Lösungen. Jedoch treten unterschiedliche Koeffizienten auf, abhängig davon, ob die noch zu bestimmende Wellenzahl einen kritischen Wert $a_c = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{1}{\gamma^2}+1}$ überschreitet. Entsprechend ergeben sich für die beiden Wellenzahlen a und b bzw. $\tilde{b} = ib$ auch zwei Bestimmungsgleichungen für einen beidseitig eingespannten Balken:

$$\frac{(a^2 - b^2)(\gamma^2 a^2 + \gamma^2 b^2 + \gamma^2 a b - a b)(\gamma^2 a^2 + \gamma^2 b^2 - \gamma^2 a b + a b)}{2ab(b^2 + \gamma^2 a^2)(a^2 + \gamma^2 b^2)}\sin a \sinh b$$

- \cos a \cos h b + 1 = 0 (2.32)

für $a < a_c$ und für $a > a_c$:

$$\frac{\left(a^2 + \tilde{b}^2\right)\left(\left(\gamma^2 a^2 - \gamma^2 \tilde{b}^2\right)^2 + \left(a\tilde{b}\left(\gamma^2 - 1\right)\right)^2\right)}{2a\tilde{b}\left(-\tilde{b}^2 + \gamma^2 a^2\right)\left(a^2 - \gamma^2 \tilde{b}^2\right)} \sin a \sin \tilde{b}$$

$$-\cos a \cos \tilde{b} + 1 = 0$$
(2.33)

Daraus ergibt sich schließlich die Kreisfrequenz der Grundmode:

$$\omega = \frac{1}{l} \sqrt{\frac{a^2 - b^2}{1 + \gamma^2}} \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$
(2.34)

$$=\frac{1}{l}\sqrt{\frac{a^2+\tilde{b}^2}{1+\gamma^2}}\sqrt{\frac{E}{\rho}}$$
(2.35)

3 Simulation

Im folgenden Abschnitt wird auf die Vorgehensweise während der Vorbereitung und Durchführung der Simulationen eingegangen, um so auch die Grundlage für eine mögliche Wiederholung oder Erweiterung der Untersuchungen zur Verfügung zu stellen.

3.1 Verwendete Einheiten

Da es sich bei den zu simulierenden Brücken um winzige Objekte handelt, deren Abmessungen sich im Bereich einiger weniger Nanometer bewegen, empfiehlt es sich für die Simulation nicht in den üblichen Einheiten wie Meter, Sekunde und Joule zu rechnen, sondern ist es ratsam, die Einheiten auf die Dimension anzupassen. Eine übliche Herangehensweise wäre, einige Einheiten in angepasster Form zu wählen und alle anderen in deren Abhängigkeit darzustellen, sodass sich auch verschiedene Systeme durch den gleichen Satz Variablen ausdrücken ließen [7]. Ebenfalls gebräuchlich – und in dieser Arbeit umgesetzt – ist es, lediglich die Dimension der Einheit auf das entsprechende System anzupassen. So wurden für die Simulation die in Tabelle 3.1 aufgelisteten Einheiten verwendet.

Größe	reduzierte Einheit	in SI-Einheiten
Zeit	[t] = 1 ps	$= 10^{-12} \mathrm{s}$
Strecke	[s] = 1 Å	$= 10^{-10} \mathrm{m}$
Masse	[m] = 1 u	$= 1.66 \cdot 10^{-27} \mathrm{Kg}$
Energie	$[E] = 1 \mathrm{eV}$	$= 1.602 \cdot 10^{-19} \mathrm{J}$
Kraft	$[F] = 1 \frac{eV}{\AA}$	$= 1.602 \cdot 10^{-9} \mathrm{N}$
Geschwindigkeit	$[v] = 1 \frac{A}{ps}$	$= 10^2 \frac{m}{s}$
Temperatur	[T] = 1 K	$= 1 \mathrm{K}$

Tabelle 3.1: Verwendete Einheiten

Die Einheiten waren dabei primär durch die Konfiguration der Software *LAMMPS* vorgegeben und wurden, da kein Bedarf bestand, nicht weiter verändert. Als Zeit-

schritt wurde, da es sich bereits in früheren Bachelorarbeiten [16, 19, 27] bewährt hat, dann $\Delta t = 0.001$ gesetzt, was gemäß der verwendeten Einheiten also einer Femtosekunde entspricht.

Sinn und Zweck solcher Einheiten ist es, die Größenordnung der berechneten Größen in einem zweckmäßigen Rahmen zu halten. Dies hat insbesondere den Vorteil, dass numerische Fehler, die mangels Rechengenauigkeit vor allem bei Zahlen sehr nahe an Null auftreten können, so minimiert werden, was sich positiv auf die Gesamtgenauigkeit der Simulation auswirkt.

3.2 Programme

Für die Simulation wurden insgesamt zwei verschiedene Programme verwendet. Zunächst wurde das von Kristian Scholz im Rahmen seiner Diplomarbeit [21] geschriebene – und bereits mehrfach in anderen Bachelorarbeiten modifizierte [16, 19, 27] – Programm *SEEVN* verwendet und erweitert, um die gewünschte Brückengeometrie zu erstellen.

Anschließend wurde das quelloffene Projekt *LAMMPS* [14] dazu verwendet, die zeitliche Entwicklung des Systems zu simulieren.

Für die anschließende Auswertung wurde auf weitere Programme zurückgegriffen, um Fits und Grafiken zu erstellen.

3.2.1 LAMMPS

LAMMPS, kurz für "Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator", ist ein Molekulardynamik-Programm, das an den Sandia National Laboratories entwickelt wurde und speziell für die parallele Simulation auf mehreren Prozessoren ausgelegt ist [14].

LAMMPS verwendet standardmäßig einen Velocity-Verlet-Integrator, wie er in Abschnitt 2.1.2 beschrieben wurde, und bietet eine Vielzahl von verschiedenen Möglichkeiten, die ein breites Anwendungsfeld von LAMMPS ermöglichen. Für die vorliegende Arbeit war allerdings nur ein kleiner Teil des Funktionsumfangs tatsächlich von Bedeutung. Neben dem Standardintegrationsverfahren wurden zusätzlich noch der Langevin-Thermostat sowie das Skalieren der Geschwindigkeiten für die Temperaturkontrolle verwendet.

In weiten Simulationsteilen wurde außerdem davon Gebrauch gemacht, einzelne Atome oder vorher definierte Atomgruppen festhalten zu können, um so ein Mitbewegen oder gar Schwingen zu unterbinden. Neben verschiedenen Ausgabemöglichkeiten bietet *LAMMPS* auch die Möglichkeit Checkpoints in Form von Restart-Files zu erstellen und diese später wieder einzulesen, um Simulationen an dieser Stelle fortzusetzen.

3.2.2 SEEVN Modifikation

Das Programm SEEVN wurde dazu eingesetzt, die Diamantstruktur des Siliciums zu erstellen. Dabei wird insbesondere auch eine symmetrische Dimer-Oberflächenrekonstruktion durchgeführt, um so den Rekonstruktionsaufwand während der Simulation etwas zu verringern, da die meisten Potentiale, so auch das Stillinger-Weber-Potential, nur eingeschränkt in der Lage sind, diese durchzuführen [3]. In seiner ursprünglichen Version war SEEVN jedoch noch nicht in der Lage, an den Enden der Brücke externe Einspannmechanismen aus Silicium anzubringen. Hierfür musste das Programm entsprechend erweitert werden.

Zu diesem Zwecke wurde wiederum auf einige Programmzeilen von Kristian Scholz zurückgegriffen, die Teil des bisherigen Codes zur Erstellung der Kristallstruktur waren. Diese wurden so angepasst und erweitert, dass an beiden Enden der Brücke beliebige quaderförmige Siliciumblöcke angeschlossen werden können. Speziell wurde dabei berücksichtigt, dass die Oberflächen in den entsprechenden Überschneidungsbereichen korrekt gehandhabt werden, sodass weder Atome fehlen, noch einzelne Plätze doppelt belegt sind. Die erweiterte Version von SEEVN erlaubt daher nun zusätzlich folgende Konstruktionen:

- Anbringen von quaderförmigen Siliciumblöcken an den Enden der Brücke
- beliebige Ausdehnung der Blöcke in alle 3 Raumrichtungen
- asymmetrische Anbringung von Blöcken, sodass die Enden an unterschiedliche Blöcke angeschlossen sind
- Festlegung der Brückenrichtung, damit verbunden auch Festlegen der Begrenzungsflächen, an denen der Einspannmechanismus angreift (wahlweise auch automatisch bestimmt)

Der Einspannmechanismus wird dabei, sofern möglich, symmetrisch an die Begrenzungsfläche angebracht. Eine Abweichung tritt nur auf, wenn die spezifizierte Größe des Einspannmechanismus eine symmetrische Positionierung unmöglich macht. In diesem Fall wird, um dennoch ein durchgängiges Gitter zu ermöglichen, eine Seite um eine Einheitszelle länger als ihre Gegenseite.



Abbildung 3.1: Brücke mit 6x12x4 Einheitszellen Einspannmechanismus¹

Eine entsprechende Darstellung einer Brücke mit Einspannmechanismus, die bereits die ersten Phasen der Simulation durchlaufen hat, ist in Abbildung 3.1 zu sehen.

3.2.3 Weitere Programme

Für die spätere Auswertung wurden schließlich mehrere Programme verwendet, die zumeist nur für eine Funktion verwendet wurden.

Matlab

MATLAB von Mathworks [15] ist ein umfangreiches Softwarepaket für numerische Berechnungen, das auf Matrizenrechnungen spezialisiert ist. Verwendet wurden MATLABs interne Fitfunktionen, die speziell zum CFTool (*curve fitting tool*) gehören, um Fitparameter für die Oszillationen zu bestimmen. Ferner wurden eigene Skripts geschrieben um die Bestimmungsgleichungen der Balkentheorien zu lösen. Verwendet wurden die Versionen 2013a und 2013b.

Gnuplot

Gnuplot [8] ist ein kostenloses, kommandozeilenbasiertes Programm zur grafischen Aufbereitung und Darstellung von Messwerten. Der Verwendungszweck von Gnuplot war die Erstellung der Diagramme für die Auswertung und zusätzlich die Bestimmung der Maxima während der Auslenkung.

VMD

VMD (Visual Molecular Dynamics [26]) ist ein Visualisierungsprogramm für die Molekulardynamik und wurde verwendet, um die Darstellungen der Brücken zu

 $^{^1\}mathrm{D.h.}$ 6 Einheitszellen in x-Richtung, 12 in y-Richtung und 4 in z-Richtung. Siehe dazu auch Abschnitt 3.3.1 Kristallerstellung.

erzeugen. Zu Beginn wurde VMD zusätzlich dazu eingesetzt, eine optische Kontrolle durchzuführen, um grobe Fehler bei der Erstellung oder Simulation erkennen zu können.

3.3 Simulationsschritte

Die Simulation besteht aus mehreren einzelnen Abschnitten, wobei nach jedem der Schritte ein Checkpoint erstellt wird, der das Fortsetzen der Simulation ab dieser Stelle ermöglicht und so erlaubt, gewisse Abschnitte gegebenenfalls neuzustarten oder in abgeänderter Form erneut laufen zu lassen. Dies ist besonders für die Verwendung bei mehreren Temperaturen wie auch den verschiedenen Auslenkungsrichtungen relevant, um so lange andauernde Vorgänge wie die Rekonstruktion und Thermalisierung nur jeweils einmal durchführen zu müssen.

3.3.1 Kristallerstellung

Zur Vorbereitung wird zunächst eine Brücke mit gewünschtem Einspannmechanismus über das erweiterte Programm SEEVN erstellt. Als grundlegende Brückengeometrie und Referenz wurde dabei eine Brücke gewählt, die aus 6x6x40 Einheitszellen² besteht; also 6 Einheitszellen in x- und y-Richtung sowie 40 Einheitszellen in z-Richtung. Das entspricht einer Länge von etwa 22 nm und einer Breite von jeweils etwa 3.3 nm. Diese Geometrie diente auch früher bereits häufig als Ausgangsmodell und bietet daher die besten Vergleichsmöglichkeiten [21]. An diese Brücke wurden dann symmetrisch Blöcke variierender Größe angebracht, die zwischen 6x6x1 und 6x16x6 liegen. Der eigentliche Einspannmechanismus wird dann zusätzlich an den festzuhaltenden Seiten von einer weiteren Haut umgeben, die 3 Einheitszellen dick ist und in der Simulation fixiert wird. Dies ist in Abbildung 3.1 durch eine Rotfärbung der entsprechenden Atome hervorgehoben. Eine vollständige Liste mit allen getesteten Einspannungen findet sich im Anhang 6 und beinhaltet zusätzliche Informationen. Hierbei wurden sowohl Reihen mit konstanter Tiefe z durchgeführt, bei denen nur die Breite y des Einspannmechanismus variiert wurde, als auch solche mit konstanter Breite und variabler Tiefe. Zunächst wurde in allen Fällen die Höhe x der Blöcke konstant auf gleichem Level mit der Brücke gehalten. Später wurden auch Blöcke getestet, bei denen in beide Richtungen, x und y, über die Brücke hinausgehende Zellen vorhanden waren.

²Von der Angabe der Einheit "Einheitszellen" wird fortan abgesehen, da alle Formangaben, sofern nicht ausdrücklich anderes erwähnt wird, in dieser Darstellung erfolgen.

3.3.2 Rekonstruktion

Nach der Erstellung der Geometrie erfolgt zunächst eine Rekonstruktionsphase, in der die Brücke erst aufgeheizt und anschließend wieder abgekühlt wird, um genügend Energie zur Verfügung zu stellen, damit sich Oberflächen- und insbesondere Kantenatome an die Positionen bewegen können, an denen sie sich in einem Potentialminimum befinden. Zusätzlich werden zu Beginn dieses Schrittes die Atome in Gruppen eingeteilt, um so gezielt später einzelne Atomgruppen festzuhalten oder einer Krafteinwirkung auszusetzen. Für die Heiz- und Kühlprozesse wurde dabei sowohl auf Langevin-Thermostate als auch auf einfaches Skalieren der Geschwindigkeiten zurückgegriffen. Insgesamt erfolgt diese Prozedur innerhalb von etwa 1 Millionen Zeitschritten, was etwa einer Nanosekunde entspricht.

3.3.3 Thermalisieren

Als Nächstes werden die Brücken einer Thermalisierung unterzogen, die sich weitestgehend auf ein Equilibrieren bei 0K beschränkt, da in allen Simulationen, um zusätzliche Einflüsse auszuschließen, dies als Zieltemperatur gewählt wurde. Anschließend werden Teile der Haut des Einspannmechanismus, die zusätzlich angebracht wurden, um als feste Wände zu dienen, entfernt und fortan festgehalten.

3.3.4 Auslenkung

Im nächsten Schritt wird die Brücke ausgelenkt, indem auf die Brücke selbst, nicht jedoch auf den Einspannmechanismus, eine Kraft ausgeübt wird. Um nichtlineare Effekte und Atomverschiebungen auszuschließen, wird die Brücke für Oszillationen nur geringfügig ausgelenkt. Gesonderte Testreihen, siehe dazu Abschnitt 4.1.1, bei denen die Kraft innerhalb eines großen Intervalls variiert wurde, ergaben, dass bei einer Auslenkung von etwa 1% (\cong 0.33Å) die Auslenkung noch linear verläuft. Daher muss für jede Geometrie die Kraft und Einwirkungsdauer entsprechend angepasst werden. Ferner wird die Brücke sowohl in x-Richtung als auch in y-Richtung ausgelenkt. Dies hat den Sinn, bei einer Brückenkonstruktion die Schwingung orthogonal zur Ausrichtung des Einspannmechanismus (in x-Richtung) wie auch parallel dazu zu testen. Daher erlaubt eine Geometrie das Verhalten zweier unterschiedlicher Einspannungen zu simulieren, bzw. die im Experiment als "in-plane" und "out-of-plane" bezeichneten Moden zu erzeugen[18]. Zur Referenz wurde dies auch mit der Grundstruktur 6x6x40 ohne externen Einspannmechanismus gemacht.

3.3.5 Schwingung

Da sich die Brücke ohne aktive Kraft nicht in einem Gleichgewichtszustand befindet, kommt es in den weiteren Simulationsschritten zu einer Schwingung. Da zu diesem Zeitpunkt auch keine weiteren Kollisionen mit anderen Teilchen aus einem Wärmebad simuliert werden, entspricht dies einer Schwingung im Vakuum ohne Thermostat. Die Oszillation wird nach 1 Millionen Schritte vorzeitig beendet, jedoch mit der Möglichkeit, später an dieser Stelle fortzusetzen. Dies entspricht, da für den Zeitschritt $\Delta t = 0.001$, also 1 fs, gewählt wurde, genau 1 Nanosekunde. In dieser Zeit werden jedoch hinreichend viele Perioden durchlaufen, um die Schwingung auswerten zu können.

4 Auswertung

4.1 Auslenkung

Um erste Informationen über das Verhalten beim Auslenken der Brücken zu erhalten, wurde zunächst für ein paar Einspannmechanismen, 6x12x4, 6x12x2, 6x8x4 und als Referenz auch 6x6x0, getestet, wie sich die Brücke unter Einwirkung zunehmender Kräfte verhält, um anschließend in einem möglichst linearen Bereich die tatsächliche Auslenkung durchführen zu können. Im Anschluss wird unter allen verwendeten Formen verglichen, welche Kraft nötig ist, um die gewünschte Auslenkung zu erreichen.

4.1.1 Linearität

Zunächst wurde die Brücke mit Kräften zwischen etwa 8 und 1600 fN ausgelenkt und jeweils die zugehörige Auslenkung notiert; diese sind in Abbildung 4.1a abgebildet. In 4.1b befindet sich der Abschnitt bis 100 fN nochmals vergrößert, da in diesem Bereich zusätzliche Simulationen durchgeführt wurden. Aus der Auslenkung und Kraft lässt sich mit $D = \frac{F}{s}$ die Richtgröße des Systems berechnen, welche in den Simulationseinheiten die Dimension $[D] = 1 \frac{eV}{A^2} = 16.02 \frac{N}{m}$ besitzt. Diese ist gegenüber der prozentualen Auslenkung in Abbildung 4.2 aufgetragen.



Abbildung 4.1: Auslenkung der Brücke mit einem 6x12x4 Einspannmechanismus gegen die einwirkende Kraft.



Die Auslenkungen in Abbildung 4.1 zeigen zunächst einen sehr linearen Verlauf, wie man ihn von einer Hookschen Feder erwarten würde. Betrachtet man

Abbildung 4.2: Richtgröße des Systems mit Einspannmechanismus über prozentualer Auslenkung

jedoch die Richtgröße in Abbildung 4.2 – unter Berücksichtigung der logarithmischen Skala – stellt man fest, dass diese zwar in x-Richtung bis ungefähr 5% beinahe konstant etwa $D_x = 1.254 \frac{mN}{m}$ beträgt, danach jedoch deutlich zunimmt. Ein völlig anderes Bild zeichnet sich bei Auslenkung in y-Richtung ab. Zunächst ist die Richtgröße ebenfalls konstant und liegt bei etwa $D_y = 1.748 \frac{mN}{m}$ bereits deutlich über D_x . Dies gilt insbesondere im Bereich kleiner Kräfte (< 100 fN), die zu Auslenkungen von weniger als 3% der Brückendicke führen. Bei 7% fällt die Richtgröße jedoch sprunghaft ab und steigt anschließend wieder langsam an.

Ein beinahe identisches Verhalten zeigt sich auch bei den beiden anderen Einspannmechanismen, 6x8x4 und 6x12x2; lediglich die Absolutwerte verändern sich. Die Reihenfolge deutet bereits die Frequenzänderungen an, die in Abschnitt 4.2 betrachtet werden. Auch der Sprung bei einer Auslenkung in *y*-Richtung lässt sich erneut bei etwa 7-8% beobachten. Auffällig ist zusätzlich, dass beim 6x8x4-Einspannmechanismus ein weiterer Sprung auftritt, der der simulierten Kraft von 1586 fN zugeordnet werden kann. Auch bei dem 6x12x4-Einspannmechanismus sind bei etwa 11% und 12% Auslenkung weitere kleine Sprünge zu sehen, die 961 fN und 1586 fN entsprechen. Die Richtgröße beginnt in allen Fällen nach dem Absinken wieder anzusteigen.

Die Referenzsimulation an einer Brücke ohne Einspannmechanismus ist in Abbildung 4.3 zu sehen. Der Verlauf ähnelt sehr denen, die bei vorhandenen Einspannmechanismen in x-Richtung aufgezeichnet wurden, umfasst jedoch ein geringeres Intervall bei der Richtgröße und ist absolut nochmals deutlich größer als bei einem 6x12x2-Einspannmechanismus, der von den vorher getesteten Geometrien die höchste Richtgröße aufwies. Dies legt die Vermutung nahe, dass die



Abbildung 4.3: Richtgröße des Systems ohne externen Einspannmechanismus über prozentualer Auslenkung.

auftretende Nichtlinearität eine inhärente Eigenschaft der Brücke ist und nicht vom Einspannmechanismus abhängt. Im Gegensatz zur Form hängt jedoch der absolute Wert der Federkonstante deutlich von dem gewählten Einspannmechanismus ab.

Um die Untersuchungen in einem möglichst linearen Bereich durchzuführen, wurde für die späteren Simulationen stets die Kraft so angepasst, dass die Auslenkung der Brücke 1% der Dicke beträgt.

4.1.2 Auslenkung bei verschiedenen Geometrien

Da für das Auslenken der Brücke in jeder Geometrie und Richtung andere Kräfte notwendig waren, sind diese in den Figuren 4.4 bis 4.5 dargestellt. Dabei zeigt Abbildung 4.4a die Entwicklung der notwendigen Kraft in Abhängigkeit von der Breite des Einspannmechanismus bei Auslenkung in x-Richtung. Der Übersichtlichkeit halber befindet sich die Entwicklung für die Auslenkung in y-Richtung in Abbildung 4.4b dargestellt. Analog hierzu finden sich die entsprechenden Kräfte in Abhängigkeit der Länge des Einspannmechanismus in den Abbildungen 4.5a und 4.5b.

Sofern nicht anders angemerkt, sind alle Einspannmechanismen an den Enden in z- und y-Richtung fixiert.

Für die Auslenkung ohne externen Einspannmechanismus war eine Kraft von etwa 70.75 fN notwendig. Eine ähnliche Kraft ist für die Auslenkung der Brücken in y-Richtung bei einer Breite von 6 Einheitszellen notwendig. Bei Auslenkung in x-Richtung ist bereits bei einer Breite von 6 EZ eine deutlich geringere Kraft notwendig. Wird der Einspannmechanismus verbreitert, reduziert sich damit auch die notwendige Kraft, bis sie schließlich eine Untergrenze, die abhängig von der



Abbildung 4.4: Notwendige Kraft zur Auslenkung der Brücken auf 1% ihrer Dicke bei verschiedenen Einspannmechanismen abhängig von deren Breite.

Tiefe ist, erreicht. Der Effekt ist bei Auslenkungen in x-Richtung deutlicher ausgeprägt und hängt auch stärker von der Länge des Einspannmechanismus ab.



Abbildung 4.5: Notwendige Kraft zur Auslenkung der Brücken auf 1% ihrer Dicke bei verschiedenen Einspannmechanismen abhängig von deren Länge.

Über der Tiefe aufgetragen zeigt sich für die meisten Einstellungen ein ähnliches Verhalten wie für die Breite. Mit zunehmender Tiefe nimmt die notwendige Kraft für eine 1%ige Auslenkung ab, bis eine Untergrenze erreicht wurde. Einen Sonderfall stellt hier die Reihe mit einer Breite von 6 EZ dar, bei der die Kraft etwa konstant bleibt anstatt abzufallen. Insgesamt ist der Effekt wieder bei Auslenkung in x-Richtung deutlich stärker ausgeprägt als in y-Richtung.

Dies zeigt insgesamt, dass, wenn kein externer Einspannmechanismus simuliert wird, die Atome unverhältnismäßig stark in ihrer Bewegung eingeschränkt werden, da die Randatome sich nicht mitbewegen. Daher ist es auch nicht verwunderlich, dass bei Auslenkung in y-Richtung der Effekt weniger ausgeprägt ist, da hier die zusätzlichen Atome die Bewegung in diese Richtung blockieren und ihrerseits durch die immer noch vorhandene Fixierung eingeschränkt sind. Dagegen steht bei einer Auslenkung in x-Richtung der Bewegung der Atome nichts entgegen, wodurch diese sich deutlich leichter auslenken lassen. Auch hier ist zu beobachten, dass bei zunehmender Breite der Einfluss eine Grenze erreicht, was vermutlich dann der Fall ist, wenn die Einschränkung primär durch die Tiefe gegeben ist – wenn beispielsweise der Einspannmechanismus nur 2 EZ tief ist – oder die Bewegung als im Kontinuum stattfindend angenommen werden kann.

4.1.3 Form der Nanobrücken

Eine weitere Eigenschaft, die bereits bei der Auslenkung überprüft werden kann, ist, in welcher Form die Brücke in den Einspannmechanismus übergeht. Dies ist daher interessant, da hiervon abhängt, um was für eine Art der Einspannung es sich in den Balkentheorien handelt.

Zu diesem Zwecke zeigt Abbildung 4.6 die Auslenkung der Schwerpunkte von 16 Scheiben der Brücke, die jeweils eine Einheitszelle dick sind und die gleiche Querschnittsfläche wie die Brücke selbst besitzen. Die Scheiben befinden sich am linken



Abbildung 4.6: Brückenform im Übergangsbereich zum Einspannmechanismus

Übergang in den Einspannmechanismus, welche etwa bei z = -109 Å beginnt. Daher sind bei den Simulationen ohne Einspannmechanismus nur zwei weitere Werte mit z < -109 Å vorhanden, die allerdings aufgrund ihrer Fixierung keine Auslenkung erfahren. Existiert jedoch ein Einspannmechanismus, hier 6x10x6, kann auch für weitere Scheiben im Einspannmechanismus der Schwerpunkt berechnet werden. Bei Auslenkung in *y*-Richtung deckt sich deren Auslenkung im Wesentlichen mit der ohne Einspannmechanismus, wie 4.6b zeigt. Hingegen bei Auslenkung in *x*-Richtung (vgl. Abbildung 4.6a) wird die Kurve insgesamt etwas flacher und nähert sich der Nulllinie deutlich langsamer an. Da in beiden Auslenkungsrichtungen die Form im Wesentlichen unabhängig von dem Einspannmechanismus und lediglich verschoben sowie gestreckt ist, wird angenommen, dass sich eine Brücke mit Einspannmechanismus mit den gleichen Randbedingungen beschreiben lässt, wie ohne Einspannmechanismus, jedoch mit variierender Länge.

4.2 Frequenzen

Von großer Bedeutung für die Beschreibung von Nanoresonatoren ist die Eigenfrequenz. Diese hängt selbstverständlich von Material und Größe der Brücke selbst ab, wie bereits eingehend studiert wurde [21]. Darüber hinaus wird in diesem Abschnitt nun überprüft, wie die Eigenfrequenz der Brücken von deren Einspannmechanismus abhängt. Dafür wurden mehrere Simulationsreihen durchgeführt, in denen jeweils die Breite oder die Länge des Einspannmechanismus festgehalten wurden. Alle Simulationen fanden wie bisher bei 0 K statt. Anschließend werden noch die Frequenzvorhersagen der im Grundlagenteil angesprochenen Balkentheorien berechnet und mit der Simulation verglichen.

4.2.1 Breitenvariation

Zunächst wurde für drei Längen des Einspannmechanismus – 2, 4 und 6 Einheitszellen – jeweils die Breite variiert, um so Rückschlüsse auf das allgemeine Verhalten zu erhalten. Es wurden jeweils die Breiten 6-16 Einheitszellen simuliert, wobei in jedem Schritt eine Schicht Einheitszellen in beide Richtungen der Symmetrieachse hinzukamen. Die Ergebnisse für Auslenkung in x- und y-Richtung sind in Abbildung 4.7 zu sehen. Es ist klar die Tendenz zu erkennen, dass mit größerem



Abbildung 4.7: Schwingungsfrequenz in Abhängigkeit der Breite des Einspannmechanismus.

Einspannmechanismus die Frequenz abnimmt, wobei dieser Effekt bei Auslenkung in x-Richtung stärker ausgeprägt ist als in y-Richtung. Dabei scheinen die Kurven jeweils einem Grenzwert entgegen zu streben.

Die Diagramme lassen jedoch keine eindeutige Festlegung zu, welchem Funktionsverlauf sie folgen. Sowohl eine Exponentialfunktion als auch beispielsweise eine $\frac{1}{l^2}$ -Abhängigkeit lassen sich problemlos fitten. In Anbetracht der Balkentheorien, die allesamt diese $\frac{1}{l^2}$ -Abhängigkeit aufweisen, und der Ergebnisse aus Abschnitt 4.1.3 erscheint jedoch diese plausibel, da dies einer effektiven Verlängerung der Brücke entspräche. Da im Einspannmechanismus zusätzliche Atome mitschwingen können, wenngleich durch ihre Umgebung deutlich stärker gebunden, scheint dies eine geeignete Annahme zu sein.

4.2.2 Längenvariation

Ähnlich zu den im vorigen Abschnitt vorgestellten Simulationsreihen wurde auch bei festgehaltener Breite – 6 und 14 Einheitszellen – der Brücke die Länge derselben variiert. Dabei wurden die Simulationen so gewählt, dass sie sich mit denen aus der vorherigen Reihe ergänzen, um so ein möglichst genaues Bild für die beiden getesteten Breiten zu erreichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.8 zu sehen. Es ist ein ähnlicher Verlauf zu sehen wie bei einer variablen Breite. Bei



Abbildung 4.8: Schwingungsfrequenz in Abhängigkeit der Länge des Einspannmechanismus.

einer Breite von 6 Einheitszellen und Auslenkung in y-Richtung ist auffällig, was sich bereits in Abbildung 4.7b angedeutet hat, dass die Frequenz nur sehr geringfügig sinkt, während bei einer Breite von 14 Einheitszellen bereits ein deutliches Absinken zu beobachten ist. Dies bestätigt erneut die Bedeutung der zusätzlichen Bewegungsfreiheit der Teilchen im Einspannmechanismus. Dabei können sich Atome bei einer Schwingung in y-Richtung natürlich weniger frei bewegen als in x-Richtung, da in dieser Richtung immer noch Atome fixiert sind, die der freien Bewegung Grenzen setzen.

4.2.3 Blockform

Weiterhin wurden einige Blockformen getestet, bei denen der Einspannmechanismus in beiden Richtungen über die Brücke hinaus steht und somit auch in beide Richtungen jeweils am Ende fixiert wird. Aufgrund der deutlich größeren Atomanzahl, die dadurch zu simulieren war, wurden nur wenige Blöcke simuliert, deren Ergebnisse zusammen mit der Kraft, die für die Auslenkung auf 1% nötig war, in Tabelle 4.1 aufgelistet sind. Auffällig ist zunächst, dass die Frequenzen

Geometrie	Kraft [fN]		Frequenz [GHz]		
[EZxEZxEZ]	Х	У	Х	у	
8x8x4	65.63	69.11	39.63	40.43	
8x12x4	72.11	76.27	39.76	40.49	
10x10x4	65.78	69.05	39.68	40.43	
10x12x4	65.79	69.14	39.66	40.43	

Tabelle 4.1: Frequenz und Kraft für Einspannmechanismus in Block-Form mit beidseitiger Einspannung

deutlich näher an den 40.52 GHz ohne Einspannmechanismus sind. Dies liegt zum einen vermutlich daran, dass nun unabhängig von der Schwingungsrichtung immer eine Fixierung in dieser Richtung vorliegt und somit zu keinem Zeitpunkt eine freie Bewegung wie bei planen Einspannmechanismen in *x*-Richtung vorliegt. Zusätzlich wird aber auch im Vergleich zu einer "in-plane"-Schwingung die Bewegung der Atome zusätzlich durch Bindungen orthogonal zur Bewegungsrichtung unterdrückt, sodass die wirkenden Kräfte nochmals ansteigen.

Weiter auffällig ist, dass trotz quadratischen Querschnittes sowohl bei dem 8x8x4- als auch bei dem 10x10x4-Einspannmechanismus die Kräfte und Frequenzen nicht unabhängig von der Auslenkungsrichtung sind. Dies war ohne Einspannmechanismus nicht zu beobachten. Eine mögliche Ursache hierfür könnte die Oberfläche darstellen, da die Orientierung der 2x1-Dimere auf der x-z-Ebene nicht identisch ist mit jenen auf der y-z-Ebene.

Zum Vergleich wurde für die gleichen Einspannmechanismen auch eine Schwingung simuliert, bei der die Fixierung nur in eine Richtung stattfand. Die *x-y*-Begrenzungsflächen wurden daher in dieser Simulation nicht festgehalten, weshalb auch die entsprechenden Haltewände entfernt wurden. Die resultierenden Frequenzen sind in Tabelle 4.2 dargestellt. Erwartungsgemäß sinkt die Frequenz wieder etwas ab, bleibt jedoch im Vergleich zu den flacheren Einspannmechanismen weiterhin erhöht.

Geometrie	Kraf	t [fN]	Freque	enz [GHz]
[EZxEZxEZ]	х	У	Х	У
8x8x4	53.03	64.83	38.02	40.12
8x12x4	60.78	72.07	38.13	40.15
10x10x4	56.53	64.38	38.12	40.17
10x12x4	58.59	61.89	38.12	40.15

Tabelle 4.2: Frequenz und Kraft für Einspannmechanismus in Block-Form mit einseitiger Einspannung

4.2.4 Krafteinwirkung auf Einspannmechanismus

In einer weiteren Studie wurde exemplarisch untersucht, ob sich in den Simulationen eine messbare Frequenzverschiebung ergibt, wenn der Einspannmechanismus an bestimmten Stellen einer Kraft ausgesetzt wird. Hierfür wurde zunächst an mehreren Bereichen eines 6x12x6-Einspannmechanismus eine Kraft angesetzt, um durch den Auslenkungsvorgang eine Vorauswahl zu treffen. Die Positionen, an denen dies getestet wurde, sind in Abbildung 4.9 skizziert. Es handelt sich dabei jeweils um 6x2x2 Einheitszellen große Ausschnitte, die demnach über die gesamte x-Achse ausgedehnt sind. In Tabelle 4.3 ist zu sehen, wie die Krafteinwirkung die Auslenkung jeweils beeinflusste.



Abbildung 4.9: Gruppenanordnung für Krafteinwirkung auf Einspannmechanismus

Gruppe\Kraft	16 fN	32 fN	48 fN	64 fN	320 fN
Gruppe 1	-13	-26	-39	-52	-259
Gruppe 2	-23	-46	-68	-91	-456
Gruppe 3	-26	-53	-79	-105	-526
Gruppe 4	-23	-46	-69	-92	-458
Gruppe 5	-13	-26	-39	-53	-263
Gruppe 6	-8	-16	-24	-32	-158
Gruppe 7	-10	-19	-29	-38	-191
Gruppe 8	-8	-16	-24	-31	-157

Tabelle 4.3: Unterschied in der Auslenkung in fm bei Krafteinwirkung auf Einspannmechanismus. Gruppenzuordnung entspricht der in Abbildung 4.9.

Aus der Tabelle können mehrere Erkenntnisse gewonnen werden. Im Bereich der getesteten Kräfte ist die Differenz in der Auslenkung etwa proportional zur einwirkenden Kraft. Zusätzlich ist deutlich zu erkennen, dass ein Einwirken der Kraft an zentraler Stelle eine deutlich größere Wirkung erzielt als in den Randbereichen. Daher wurde für den Frequenztest die Gruppe 3 ausgewählt und nach der Auslenkung 320 fN ausgesetzt.

Es ergab sich keine messbare Frequenzveränderung, sondern lediglich eine geringfügige Verschiebung der Ruhelage. Auch bei einer deutlich größeren Kraft von 1586 fN blieb die Frequenz weiterhin konstant und nur die Ruhelage erfuhr eine weitere Verschiebung. Dies entspricht der Wirkung einer konstanten Kraft, die auf die gesamte Brücke einwirkt. Möglicherweise würde sich dies ändern, wenn die Kraft nur auf eine oberflächliche Schicht ausgeübt würde oder zeitabhängig wäre.

4.2.5 Balkentheorien im Vergleich

Im Grundlagenteil wurden vier Balkentheorien angesprochen, die verschiedene Eigenschaften des Balkens bzw. der Brücke berücksichtigen, um so möglichst präzise Vorhersagen für die Schwingungsfrequenz zu machen. In allen Berechnungen wurden $E = 130 \text{ GPa}, \nu = 0.28 \text{ [11]}$ und $\varrho = 2333 \frac{kg}{m^3}$ verwendet.

4.2.5.1 Euler-Bernoulli-Theorie

Als Erstes wurde das Euler-Bernoulli-Modell beschrieben, welches in Gleichung 2.23 mit $\omega = \frac{4.73^2}{l^2} \sqrt{\frac{EI}{\varrho A}}$ die Grundfrequenz aus einfach zu erhaltenden System-

größen berechnet. Mit 4.73 wurde bereits die Grundwellenzahl $a_{EB} = 4.73$ eines doppelt eingespannten Balkens eingesetzt, da dies dem simulierten Fall entspricht. Darin bezeichnet A die Querschnittsfläche des Balkens, die in der Simulation etwa $A \approx 11.41 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ beträgt und I das Flächenträgheitsmoment bezüglich der neutralen Achse. Als neutrale Achse tritt in der Simulation nur die z-Achse auf, als Schwingungsachsen die x- und y-Achsen; da jedoch in der Balkentheorie der Einspannmechanismus vernachlässigt wird, wird dies auch an dieser Stelle getan, wodurch die x- und y-Richtungen identisch werden und $I \approx 1.1 \cdot 10^{-35} \text{ m}^4$ gilt. Die Länge l beträgt, wie bereits an früherer Stelle angemerkt, $l \approx 21.8 \text{ nm}$.

Insgesamt ergibt sich daher nach dem Euler-Bernoulli-Modell eine Grundfrequenz $f_{EB} = \frac{\omega}{2\pi} = 55.1 \,\text{GHz}$, was deutlich größer ist als das Simulationsergebnis von 40.5 GHz. Die Euler-Bernoulli Theorie ist daher ungeeignet, die Schwingung dieser Brücken zu beschreiben. Dies liegt vornehmlich daran, dass die simulierten Balken nur eingeschränkt als "schlank" zu bezeichnen sind, während die Euler-Bernoulli Theorie primär für solche schlanken Balken gute Näherungen liefert.

4.2.5.2 Rayleigh-Theorie

Gleichung 2.27 liefert die Grundfrequenz im Rayleigh-Modell, welches die Trägheit zusätzlich berücksichtigt, in Abhängigkeit von zwei Wellenzahlen a_R und b_R , welche über Gleichung 2.26 bestimmt werden müssen. Gemäß [10] wurde diese Gleichung in eine Differentialgleichung für $a_R(\frac{1}{s})$ überführt und mit der Adams-Bashforth-Methode gelöst. Für s = 22.2 und $k := \frac{1}{s} = 0.045$ ergeben sich damit:

$$a_R = 4.754$$

 $b_R = 4.648$
 $f_{EB} \approx 54.4 \, GHz$

Im Vergleich zur Euler-Bernoulli-Theorie ist die Frequenz bereits etwas kleiner, jedoch nur geringfügig näher an der simulierten Frequenz.

4.2.5.3 Shear-Theorie

An die Shear-Theorie wurde auf die gleiche Weise herangegangen wie an die Rayleigh-Theorie. Gleichung 2.31 ermöglicht eine Berechnung der Frequenz in Abhängigkeit von a_S und b_S welche über Gleichung 2.30 zusammenhängen. Erneut wurde daraus eine Differentialgleichung für $a_S(\frac{\gamma}{s})$ gewonnen und numerisch gelöst. An der Stelle $\frac{\gamma}{s} = 0.078$ ergibt sich dann:

$$a_S = 4.560$$

 $b_S = 4.294$
 $f_S \approx 48.2 \, GHz$

Das Shear-Modell, welches Scherkräfte berücksichtigt, stellt eine weitere deutliche Verbesserung des Euler-Bernoulli-Modells dar. Für präzise Vorhersagen ist im vorliegenden Falle jedoch auch das Shear-Modell nicht ausreichend genau.

4.2.5.4 Timoshenko-Theorie

Als letzte Theorie wurde die Balkentheorie von Timoshenko auf die Daten der Brücke angewandt. Erneut wurde anhand von [10] die Bestimmungsgleichung 2.32 gelöst, um die Koeffizienten a_T und b_T zu bestimmen. In diesem Fall wurde hierzu b_T zunächst in Abhängigkeit von a_T und s ausgedrückt, um anschließend die Nullstelle der Bestimmungsgleichung für das gegebene s numerisch zu bestimmen. Um zu verhindern, dass die Wellenzahl einer höheren Ordnung gefunden wird, wurde erneut bei $s \to \infty$ begonnen, da sich im Grenzfall für sehr schlanke Balken die Euler-Bernoulli-Theorie ergibt, und jeweils der im vorigen Schritt berechnete Wert für a_T als Startwert für die Suche verwendet. Für die simulierte Brücke ergibt sich daraus schließlich:

$$a_T = 4.582$$

 $b_T = 4.233$
 $f_T \approx 47.8 \, GHz$

Mit $f_T = 47.8 \text{ GHz}$ ist die Theorie von Timoshenko am nächsten an den Simulationsergebnissen, aber immer noch etwas zu hoch. Dass die Thoerie das beste Ergebnis liefert, ist wenig überraschend, da sie sowohl Rotationsträgheit als auch Scherkräfte in die Berechnung einbezieht und somit die Vorteile der Rayleigh-Theorie mit der Shear-Theorie vereint.

4.2.5.5 Vergleich der Theorien

In Tabelle 4.4 sind nochmals alle Frequenzen aus den Theorien zusammen mit dem Ergebnis aus der Simulation aufgelistet. Als Referenz wurde dabei die Schwingung ohne Einspannmechanismus verwendet, da diese einem beidseitig fixierten Balken entspricht. In Abschnitt 4.1.3 wurde bereits angemerkt, dass sich die Form der Einspannung im Grunde nicht ändert, sondern es sich primär um eine Verschiebung und Streckung handelt. Da jedoch nicht festgelegt werden kann, welcher Längenänderung dies entspricht, wird darauf verzichtet, eine der Brücken mit Einspannmechanismus mit den Theorieergebnissen zu vergleichen.

Modell	Frequenz [GHz]	Rel. Abweichung [%]	
Simulation	40.52	-	
Euler-Bernoulli	55.1	36	
Rayleigh	54.4	34	
Shear	48.2	19	
Timoshenko	47.8	18	

Tabelle 4.4: Vergleich der Balkentheorien mit Simulation einer 6x6x40 EZ Brücke.

Keine der Theorien liefert eine adäquate Vorhersage für das Simulationsergebnis, jedoch ist deutlich ersichtlich, dass die für viele Balkenprobleme zunächst verwendete Euler-Bernoulli Theorie nicht geeignet ist, eine Nanobrücke in dieser Größenordnung zu beschreiben. Dies lässt den Schluss zu, dass Trägheit und insbesondere die Scherung einen gravierenden Einfluss auf die Bewegung der Brücke haben. Auch die Theorie nach Timoshenko weicht noch deutlich von der Simulation ab, weist aber bereits in die richtige Richtung. Daher sollte es das Ziel sein, weitere Berechnung auf dieser Theorie aufbauend durchzuführen, anstatt auf Euler-Bernoulli.

Einen solchen Ansatz wählten Wang et al. [28] indem sie die Timoshenko-Balkentheorie mit nichtlokaler Elastizitätstheorie verbinden, wodurch ein zusätzlicher Koeffizient für die geringe Größe einfließt, um so den "small scale effect"[28] zu berücksichtigen. Darin könnten entsprechend auch Oberflächeneigenschaften mit einfließen, die bei kleinen Proben einen zunehmenden Effekt haben können. So muss berücksichtigt werden, dass nicht eindeutig ist, welchen Einfluss die von der Kristallstruktur abweichende Oberfläche in Form der Dimere auf das Schwingverhalten bzw. allgemein die Elastizitätskonstanten besitzt. Zusätzlich kann damit eine Veränderung der Elastizitätskonstanten aufgrund der Größe einbezogen werden.

4.3 Fehlerquellen

Auch wenn bei einer Computersimulation keine Messungenauigkeiten im eigentlichen Sinne auftreten, sollte man dennoch bedenken, dass alle Ergebnisse, die durch Simulationen erzielt werden, nur Näherungen darstellen, da sie einer Vielzahl von Fehlerquellen unterliegen.

Bereits bei der Wahl des Algorithmus und der Schrittgröße führt man erste Ungenauigkeiten ein, die sich im Falle des Ortes beim Verlet-Verfahren proportional zu Δt^4 verhalten. Zusätzlich kommt es aufgrund der Rechengenauigkeit zu Rundungsfehlern, die zwar durch das Anpassen der Einheiten reduziert, aber nicht verhindert werden. Da die gewählten Zeitschritte sehr klein sind, sollten diese Fehler allerdings nur einen geringen Einfluss auf das Ergebnis haben.

Einen wesentlich größeren Einfluss dürfte hingegen die Wahl des Potentials haben. Wie bereits an entsprechender Stelle angemerkt wurde, handelt es sich beim Stillinger-Weber-Potential um ein empirisches Potential, welches Vor- und Nachteile hat. Da dies auf alle empirischen Potentiale zutrifft, kann hier nur versucht werden, eine zu dem Problem passende Wahl zu treffen. Insbesondere die Modellierung der Elastizitätskonstanten und der Oberfläche dürften merkliche Auswirkungen auf die Kräfte und Frequenzen haben.

Ein davon abzugrenzender, möglicher Fehler besteht in der Zuordnung der Atome in Gruppen. Diese erfolgte in den meisten Fällen bereits sehr früh in der Rekonstruktionsphase, wodurch es bis zum Abschluss der Thermalisierung zu einigen geringen Verschiebungen kommen kann. Dadurch entspricht die Anzahl der in der Brücke befindlichen Atome unter Umständen nicht der Menge, die dort erwartet würde. Dies wurde auch festgestellt, als bei einigen Brücken die Zuordnung erst direkt vor der Auslenkung stattfand. Vermutlich ist dieser Effekt dafür verantwortlich, dass beispielsweise in Abbildung 4.8b gewisse Sprünge vorhanden sind.

5 Zusammenfassung

Ziel dieser Bachelorthesis war es, den Einspannmechanismus mitzusimulieren und Erkenntnisse über dessen Auswirkung auf die Schwingungseigenschaften zu gewinnen. Hierfür wurden Brücken der Form 6x6x40 Einheitszellen aus Silicium mit angrenzenden Blöcken als Einspannmechanismus erstellt und bei 0K untersucht.

Zunächst wurde überprüft, in welchem Bereich sich die Brücken näherungsweise linear auslenken lassen. Es zeigte sich, dass bei einer Auslenkung des Schwerpunkts um 1% der Dicke eine gute Linearität gewährleistet ist, während dies bei Auslenkungen von 10% oder mehr nicht mehr zutrifft. In diesem Bereich verhalten sich "in-plane"- und "out-of-plane"-Auslenkungen sehr unterschiedlich. Die Brücken wurden daher alle um 1% der Dicke ausgelenkt.

Bereits bei der Auslenkung der Brücken zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit der notwendigen Kraft von dem Einspannmechanismus. Diese verhält sich ähnlich wie anschließend die Schwingungsfrequenz, die mitunter stark durch den Einspannmechanismus beeinflusst wird. Insbesondere ist dies bei "out-of-plane"-Schwingungen bei planaren Einspannungen der Fall. Hier sind gravierende Einbrüche in der Frequenz zu beobachten, die bei "in-plane"-Schwingungen nur in abgeschwächter Form auftreten, da hierbei die zusätzlichen Atome nur eingeschränkt mitschwingen können. In beiden Situationen ist eine Simulation mit fixierten Enden nur mäßig als Näherung geeignet. Besitzt der Einspannmechanismus jedoch die Form eines größeren Blocks, der in alle Raumdimensionen über die Brücke hinausgeht, so bleibt die Frequenz etwa auf dem Niveau eines fixierten Endes. Bei der Beurteilung von Simulationsergebnissen mit fixierten Brückenenden scheint es daher nötig zu sein, zu bedenken, welcher experimentelle Fall tatsächlich simuliert werden soll, um dann entscheiden zu können, ob eine Fixierung der Enden angebracht ist.

Eine präzise Vorhersage der Frequenzen auf Basis der vorgestellten Balkentheorien ist leider nicht möglich und bedarf vermutlich der Berücksichtigung zusätzlicher Effekte. Daher kann auch keine Beschreibung der auftretenden Frequenzverschiebung durch den Einspannmechanismus erfolgen.

Innerhalb weiterer Studien könnte man zur genaueren Analyse des Problems

zusätzlich andere Brückenformen verwenden oder die Brücke in ihrer Länge variieren. Ferner war es im Rahmen dieser Bachelorthesis nicht möglich die Auswirkung bei höheren Temperaturen zu untersuchen. In einer solchen Studie wäre zu erwarten, dass sich neben den Frequenzen auch Auswirkungen auf die Dämpfungskonstanten beobachten lassen. Dafür müssten die Simulationen jedoch einen längeren Zeitraum abdecken, was aufgrund der Atomanzahl zu einer deutlich längeren Rechenzeit führen würde. Eine weitere Möglichkeit, die sich auch ohne einen weiteren Anstieg der Simulationszeit durchführen ließe, ist die gezielte Manipulation des Einspannmechanismus, wie es bereits exemplarisch in Abschnitt 4.2.4 durchgeführt wurde.

6 Anhang

Übersicht über simulierte Nanobrücken

Bei allen Brücken wurde eine 6x6x40 Brücke verwendet und an die in der Tabelle aufgelisteten Einspannmechanismen angekoppelt. Die notierten Kräfte beschreiben jeweils die Kraft, die notwendig war, um den Brückenschwerpunkt um 1% der Brückendicke auszulenken.

Geometrie	Kraft [fN]		Frequenz [GHz	
[EZxEZxEZ]	х	у	Х	У
6x6x0	69.96	69.96	40.52	40.52
6x6x2	56.61	68.92	37.18	40.09
6x8x2	51.52	62.86	35.78	38.61
6x10x2	50.27	61.39	35.4	38.21
6x12x2	50.29	61.28	35.33	38.15
6x14x2	50.5	61.44	35.33	38.13
6x16x2	50.77	61.77	35.35	38.13
6x6x4	53.11	67.86	36.22	39.82
6x8x4	45.51	60.67	34.01	38.05
6x10x4	42.39	58.09	33.02	37.4
6x12x4	40.83	56.97	32.48	37.07
6x14x4	40.18	56.63	32.28	36.99
6x16x4	39.83	56.49	32.12	36.9
6x6x6	53.28	68.13	36.27	39.9
6x8x6	44.49	60.51	34.47	38.01
6x10x6	40.15	57.37	32.29	37.19
6x12x6	37.74	55.89	31.45	36.78
6x14x6	36.13	55.16	30.86	36.56
6x16x6	35.2	54.98	30.48	36.46
6x6x1	59.99	69.4	38.5	40.47

6x6x3	53.44	67.06	36.57	39.92
6x6x5	52.26	67.03	36.24	39.9
6x6x7	52.21	66.87	36.22	39.87
8x8x4	65.63	69.11	39.63	40.43
8x12x4	72.11	76.27	39.76	40.49
10x10x4	65.78	69.05	39.68	40.43
10x12x4	65.79	69.14	39.66	40.43
8x8x4 ¹	53.03	64.83	38.02	40.12
$8x12x4^{1}$	60.78	72.07	38.13	40.15
$10x10x4^{1}$	56.53	64.38	38.12	40.17
$10x12x4^{1}$	58.59	61.89	38.12	40.15

Tabelle 6.1: Übersicht über alle getesteten Einspannmechanismen an einer 6x6x40 Brücke sowie der aus Fits bestimmten Frequenz

¹Einseitig in y-Richtung eingespannt

Abbildungsverzeichnis

2.1	Abschneideradius und Nachbarschaftsliste	6
2.2	Vergleich der Oberflächenrekonstruktion von Silicium mit Kristall-	
	schnitt	10
2.3	Paaranteil des Stillinger-Weber-Potentials	11
2.4	Geometrische Anordnung und Kräfte im Euler-Bernoulli-Modell $% \mathcal{A}$.	14
3.1	Brücke mit 6x12x4 Einheitszellen Einspann mechanismus $\ .\ .\ .$.	22
4.1	Auslenkung der Brücke gegen Kraft	27
4.2	Richtgröße des Systems mit Einspannmechanismus	28
4.3	Richtgröße des Systems ohne externen Einspannmechanismus . . $$.	29
4.4	Notwendige Kraft zur Auslenkung der Brücken auf 1% gegen die	
	Breite	30
4.5	Notwendige Kraft zur Auslenkung der Brücken auf 1% gegen die	
	Länge	30
4.6	Brückenform im Übergangsbereich	31
4.7	Schwingungsfrequenz in Abhängigkeit der Breite des Einspannme-	
	chanismus	32
4.8	Schwingungsfrequenz in Abhängigkeit der Länge des Einspannme-	
	chanismus	33
4.9	Gruppenanordnung für Krafteinwirkung	35

Tabellenverzeichnis

2.1	Parameter des Stillinger-Weber-Potentials	12
3.1	Verwendete Einheiten	19
4.1	Einspannmechanismus in Block-Form mit beidseitiger Einspannung	34
4.2	Einspannmechanismus in Block-Form mit einseitiger Einspannung	35
4.3	Auslenkung bei Krafteinwirkung auf Einspannmechanismus	36
4.4	Vergleich der Balkentheorien mit Simulation	39
6.1	Übersicht über alle getesteten Einspannmechanismen mit Ender-	
	gebnissen	44

Literatur

- M. P. Allen und D. J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- Hans C. Andersen. "Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature". In: *The Journal of Chemical Physics* 72 (1980), S. 2384 –2393.
- [3] H. Balamane u. a. "Comparative study of silicon empirical interatomic potentials". In: *Physical Review B* 46 (4 1992), S. 2250 –2279.
- [4] P. Bokes u. a. "Ground-state reconstruction of the Si(0 0 1) surface: symmetric versus buckled dimers". In: *Chemical Physics Letters* 362 (5 6 2002), S. 559–566.
- [5] M. Chu u. a. "The Role of Reconstructed Surfaces in the Intrinsic Dissipative Dynamics of Silicon Nanoresonators". In: arXiv:0705.0015v1 (2007).
- [6] Robert Denk und Reinhard Racke. Kompendium der Analysis Band 1: Differential- und Integralrechnung, Gewöhnliche Differentialgleichungen.
 1. Aufl. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2011.
- [7] Daan Frenkel und Berend Smit. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. 2. Aufl. London: Academic Press, 2002.
- [8] Gnuplot. URL: http://www.gnuplot.info.
- Ya. S. Greenberg u. a. "Nanomechanical resonators". In: *Physics-Uspekhi* 55 (4 2012), S. 382 –407.
- Seon M. Han u. a. "Dynamics of transversely vibrating beams using four engineering theories". In: *Journal of Sound and Vibration* 225 (5 1999), S. 935 –988.
- [11] Matthew A. Hopcroft. "What is the Young's Modulus of Silicon". In: Journal of Microelectromechanical Systems 19 (2 2010), S. 229 –238.
- [12] Charles Kittel. Introduction to Solid State Physics. 7. Aufl. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1996.
- [13] Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, Manualpage: fix langevin. URL: http://lammps.sandia.gov/doc/fix_langevin.html.
- [14] Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. Version 1. Februar 2014. URL: http://lammps.sandia.gov/.

- [15] MATLAB. Version 2013a. URL: http://www.mathworks.de/products/ matlab/.
- [16] Thomas Möller. "Numerische Studien zur Dynamik von Nanobrücken spezieller Siliziumverbindungen". In: *Universität Konstanz* (2013).
- [17] Johannes Rieger u. a. "Energy losses of nanomechanical resonators induced by atomic force microscopy-controlled mechanical impedance mismatching". In: *Nature Communications* 5.3345 (2014).
- [18] Johannes Rieger u. a. "Frequency and Q factor control of nanomechanical resonators". In: *Applied Physics Letters* 101.103110 (2012).
- [19] Ralf Schmid. "Computersimulation von Nanobrücken mit Fehlstellen". In: Universität Konstanz (2011).
- [20] T. Schneider und E. Stoll. "Molecular-dynamics study of a three-dimensional one-component model for distortive phase transitions". In: *Physical Review* B 17 (3 1978), S. 1302 –1322.
- [21] Kristian Scholz. "Simulation elastischer Eigenschaften von Nanobrücken". In: Universität Konstanz (2011).
- [22] Frank H. Stillinger und Thomas A. Weber. "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon". In: *Physical Review B* 31 (8 1985), S. 5262 –5271.
- [23] William C. Swope u. a. "A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters". In: *The Journal of Chemical Physics* 76 (1982), S. 637–649.
- [24] S. P. Timoshenko. "On the Transverse Vibrations of bars of uniform crosssection". In: *Philosophical Magazine Series* 6 43 (253 1922), S. 125 –131.
- [25] S. P. Timoshenko. "On the correction for shear of the differential equation for transverse vibrations of prismatic bars". In: *Philosophical Magazine Series 6* 41 (245 1921), S. 744 –746.
- [26] VMD. URL: http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/.
- [27] Martin Vögele. "Computersimulation von Nanobrücken aus binären Legierungen". In: *Universität Konstanz* (2011).
- [28] C. M. Wang u. a. "Vibration of nonlocal Timoshenko beams". In: Nanotechnology 18.105401 (2007).

- [29] W. Weaver u. a. Vibration Problems in Engineering. New York: John Wiley & Son, 1990.
- [30] J. H. Wilson u. a. "Modelling of silicon surfaces: a comparative study". In: Journal of Physics: Condensed Matter 2 (51 1990), S. 10259-10288.