



Statusgespräch 8 (Berlin): Projektfortschritte im Bereich Modellierung und Simulation

Jürgen Geiser und Meraa Arab
Humboldt Universität zu Berlin, Institut für Mathematik
Unter den Linden 6, D-10099 Berlin, Deutschland.

October 1, 2009

Übersicht

Arbeiten und Projektfortschritte des Arbeitspaketes der Modellierungs- und Simulationsgruppe

- 0) Modellierung: Elektrische Felder, Gasdurchlässe (Geometrie mit einspringenden Ecken).
- 1) Austausch mit Beschichtergruppe Prof. Buck, Duisburg
- 2) Austausch mit Beschichtergruppe Dr. Fenker, Schwäbisch Gmünd
- 3) Simulationsergebnisse (M. Arab)
- 4) Weitere Arbeiten im Projekt
- 5) Ausblick

Modellierung

- Elektrische Felder: Modellierung von schichtabhängigen Parametern
- Gasdurchlässe: Modellierung von einspringenden Ecken und deren Beschichtungsproblemen
- Modellierung der Reaktionen und Flüsse für das CVD Verfahren
- Modellierung der Partikelbewegung für des PVD Verfahren

Elektrische Felder

Bei der Modellierung der Gasteilchen im Reaktor wird die Konvektion-Diffusion-Reaktions Gleichung hergenommen. Ein Einfluss des Elektrischen Feldes kann durch einen zusätzlichen Term im Flussvektor berücksichtigt werden [Rudnik 98].

Transport-Gleichung für die Gasteilchen im Reaktor

$$\frac{\partial}{\partial t} c_i + \nabla F - R_g = 0, \text{ in } \Omega \times [0, t] \quad (1)$$

$$F = \mathbf{v}c_i - D\nabla c_i + \eta E c_i,$$

$$c_i(x, t) = c_{i0}(x), \text{ on } \Omega, \quad (2)$$

$$c_i(x, t) = c_{i1}(x, t), \text{ on } \partial\Omega \times [0, t], \quad (3)$$

- c_i ist die Partikelkonzentration (Dichte) mit $i = 1, \dots, N$.
- F der Fluss im Reaktor, wobei \mathbf{v} die Flussgeschwindigkeit, D die Partikeldiffusion und η die Ionenmobilität und E das elektrische Feld
- $c_{i0}(x)$ die Anfangsbedingungen, $c_{i1}(x, t)$ die Randbedingungen

Modellierung des Elektischen Feldes (Verteilung)

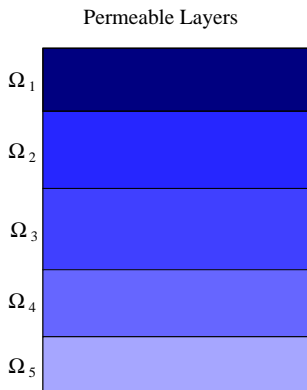
$$\nabla E \approx \frac{e}{\epsilon_0} c, \quad (4)$$

wobei e ost die Elementladung, ϵ_0 die Dielektrizität (permittivity) und $c = \sum_{i=1}^n c_i$ die Partikelkonzentration (Dichte).

Annahmen im Plasma:

- Partikelkonzentrationen bleiben nahezu konstant und sind im Verhältnis zu der ionisierten Argonatmosphäre gering, so kann E als eine Konstante angenommen werden, die man messen kann (physikalische Experimente)
- Das Elektrische Feld ist dann approximierbar durch permeable Schichte im Gebiet
- Ein Multiphysik-System mit Transport- und Kinetischen Prozessen mit eingebettetem elektrischen Feld ist möglich

Permeable Schichten in einem Abschnitt der Anlage mit unterschiedlichen elektrischen Feldstärken (experimentelle Daten)



Modellierung der Gasdurchlässe: Einspringende Ecken

In der Modellierung der Gasdurchlässe wurde die Geometrie entsprechend angepasst.

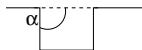
Dabei sind numerisch sogenannte Benchmark Probleme bekannt. Die singulare Bereich werden auch einspringende Ecken genannt, die numerisch problematisch sind und man in der Diskretisierung einen Aufwand hat, da die Lösungen nichtmehr differenzierbar sind.

Die wurde mit der bestehenden Diskretisierung gelöst, vgl. [Eymard 2000].

Die Geometrien der Durchlässe sind wie folgt gegeben:

Geometry of the Outlets

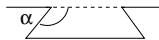
Perpendicular Outlet
 90°



Obtuse Outlet
 45°



Sharp Outlet
 135°



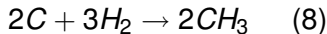
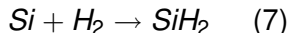
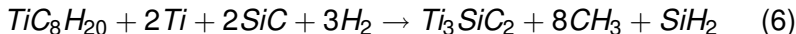
Arbeit und Austausch mit Gruppe Prof. Buck

Mit Herrn Neubert wurden die kinetischen Reaktionen mit den Precusorgasen besprochen und deren Einfluss auf das Modell. Erste chemische Umwandlungen werden umgesetzt und auf das Programm UG übertragen.

Makroskopisches Modell (CVD)

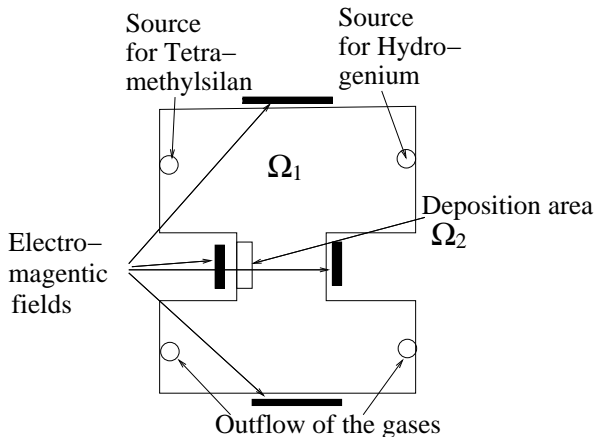
Kinetik des Precursors:

Reactions and Aggregatephases [NIST 2008]:



Hierbei können die Reaktionsraten ermittelt werden aus Tabellen.

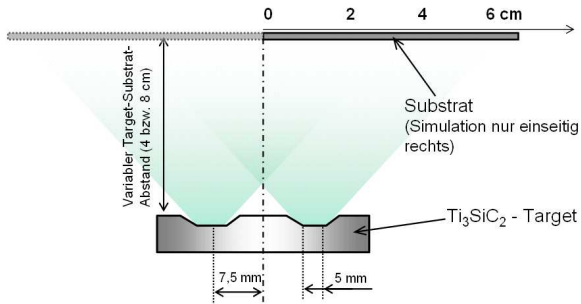
Geometrie der Anlage mit der Einwirkung vom elektrischen Feld in Comsol berechnet:



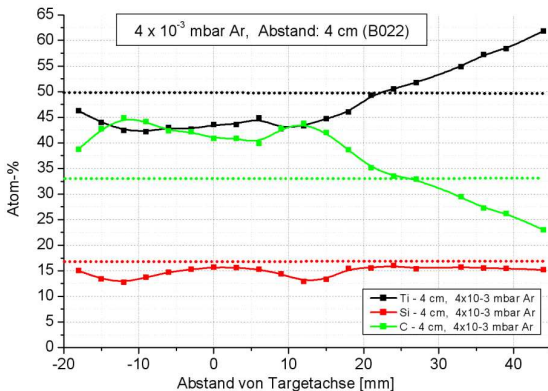
Arbeit und Austausch mit Gruppe Dr. Fenker

Ein vereinfachtes Teilchenmodell basierend auf einem Kugelmodell (Ballistisches Modell ohne Temperatureinwirkung) wurde und mit Monte-Carlo Methode simuliert. Damit werden nun die Stöchiometrie von den Messungen von Herrn Balzer simuliert.

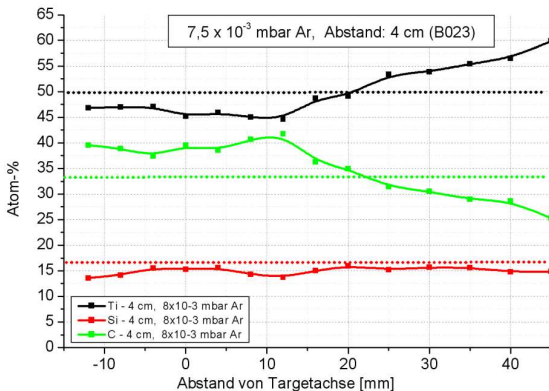
Geometrie der Real-Life Anlage bei FEM:



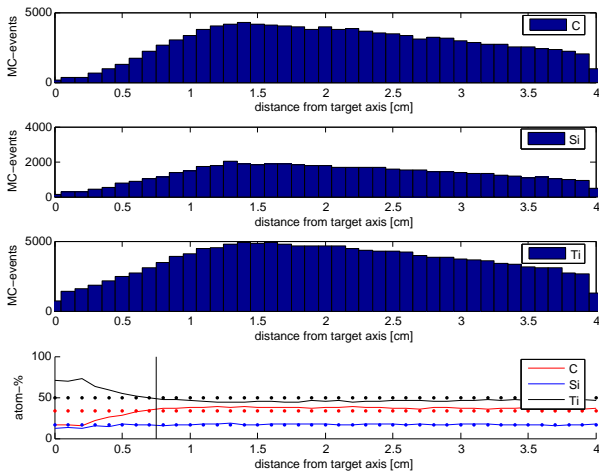
Real-life Experimente bei FEM durchgeführt:



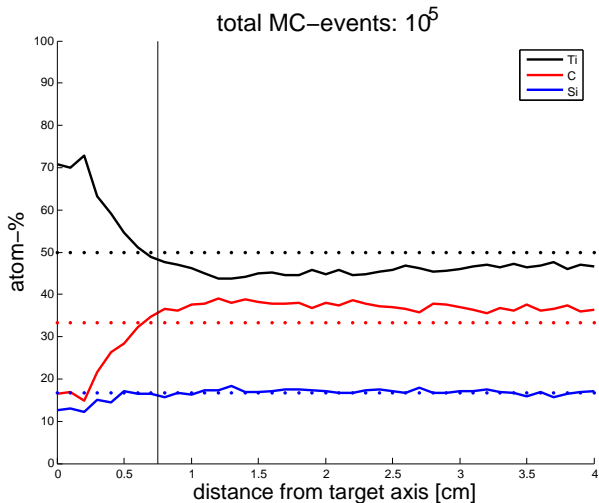
Real-life Experimente bei FEM durchgeführt:



Monte-Carlo Simulationen mit Matlab durchgeführt



Monte-Carlo Simulationen:



Geometry

Geometrical results

electric field

electric field results

Weitere Arbeiten

Nächste Arbeiten

- 0) Modellierung: Mehrfach elektrische Felder, Kinetik der CVD Prozesse, Temperatur und Anfangsverteilung bei PVD (Verteilung im Compound)
- 1) Simulation CVD: Elektromagnetisches Feld mit den Daten von Prof. Buck
- 2) Simulation PVD: Freie Weglänge in Abhängigkeit der Temperatur, Daten von Dr. Fenker
- 3) Artikel in Richtung Modellierung Mikro- und Makroebene.