

Modellierung von Transportprozessen neutraler und ionisierter Spezies in mikro- und nanostrukturierenden Ätzprozessen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur

(Dr.-Ing.)

vorgelegt der Fakultät für Elektrotechnik
und Informationstechnik der Technischen Universität Ilmenau

von

Dipl.-Inf. Maik Hauguth

geboren am 12.06.1975

in Pößneck

vorgelegt am 12. September 2011

- 1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Ivo W. Rangelow
- 2. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Gerhard Franz
- 3. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Volker Zerbe

Verteidigung am: 25. Juli 2012

angefertigt am

FACHGEBIET MIKRO- UND NANOELEKTRONISCHE SYTEME

ILMENAU, 2010

Selbstständigkeitserklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder anderer Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ich bin darauf hingewiesen worden, dass die Unrichtigkeit der vorstehenden Erklärung als Täuschungsversuch angesehen wird und den erfolglosen Abbruch des Promotionsverfahrens zu Folge hat.

(Ort, Datum)

(Unterschrift)

Abstract

The present work focuses on the distribution of neutral and electrically charged particles in plasma etch reactors under process conditions.

A detailed knowledge of the particle transport within the microstructures is required. Up to now, only simulation models can shed light into these structures. Therefore the purpose of this work is the development of simulation models for an efficient and exact calculation of particle transport within microstructures.

The first part of this work presents the physical properties, the creation of plasma species and their transport at very low pressure within etch reactors.

Reactions of particles with surfaces that leads to etching of substrates or deposition of films, is analysed thereafter and practical application in etch reactors as well as typical processes are presented.

For the virtual investigation of processes in the reactor, transport simulation methods for substances and energy as well as the current state of research in plasma and topography simulations are sketched. Advantages and drawbacks of different simulation techniques are analysed and special requirements of integrated plasma-topography simulations identified. The main part of this work is a completely new approach to model particle transport by analogy with the distribution of radiance in virtual scenes. A general transport model is developed which describes the distribution of species in microstructures. By specialisation of the general transport model, more detailed models for charged and neutral species are deduced thereafter. For efficient calculation of neutral species transport, the radiosity method is adopted from the field of computer graphics and a completely new iterative calculation scheme is developed for the calculation of ion fluxes.

The third part discusses the implementation of models, their integration into a joined plasma-topography simulation software, and compares results of simulations with performed experiments. Verification and calibration of simulated models is argued by etch and deposition experiments done in different etch reactors. The work closes with a conclusion about the results and refers to future prospects and challenges of integrated plasma etch simulations.

plasma etch, simulation

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Ausbreitung von elektrisch neutralen und geladenen Teilchenspezies in Plasmaätzreaktoren unter Prozessbedingungen.

Bis heute sind nur Simulationen in der Lage, detaillierte Erkenntnisse über den Speziestransport in Mikrostrukturen zu erlangen. Deshalb ist das Ziel dieser Arbeit die Entwicklung von Simulationsmodellen, mit denen die Ausbreitung der Spezies im Innern von Mikrostrukturen effizient und genau berechnet werden kann. Im ersten Teil der Arbeit werden die physikalischen Eigenschaften, die Erzeugung des Plasmas und der Transport von Spezies bei sehr niedrigem Druck im Reaktor betrachtet. Zur virtuellen Untersuchung der Vorgänge im Reaktor werden Möglichkeiten der Simulation von Stoff- und Energieflüssen sowie der Stand der Technik auf dem Gebiet der Plasma- und Topografiesimulation umrissen. Die Vor- und Nachteile verschiedener Simulationstechniken werden analysiert und die besonderen Anforderungen an eine integrierte Plasma-Topografiesimulation diskutiert.

Der Hauptteil der Arbeit ist ein vollkommen neuer Ansatz zur Modellierung der Ausbreitung von Spezies, der seine Analogie in der Ausbreitung von Strahlung in virtuellen Szenen hat. Darin wird ein allgemeines Transportmodell entwickelt, welches die Ausbreitung von Reaktanden in Mikrostrukturen und die zeitliche Evolution von Profilen beschreibt.

Durch Spezialisierungen des Transportmodells werden im Anschluss detaillierte Modelle für geladene und ungeladene Reaktanten hergeleitet. Das aus der Computergrafik bekannte Radiosity-Verfahren wird für die effiziente Berechnung des Transports von neutralen Reaktanden adaptiert und eine gänzlich neue Iterationsmethode zur Berechnung von Ionenflüssen entwickelt.

Der abschließende Teil befasst sich mit der Implementierung der Modelle in einer integrierten Plasma-Topografie-Simulation und vergleicht die Simulationsergebnisse mit den durchgeführten Experimenten. Die Verifikation und Kalibrierung von Simulationsmodellen wird mithilfe von Ätz- und Depositionsexperimenten an verschiedenen Reaktoren im Anschluss erläutert.

Die Arbeit schließt mit einem Überblick der gewonnenen Erkenntnisse und verweist auf zukünftige Perspektiven und Herausforderungen für eine integrierte Plasmaätzsimulation.

Inhaltsverzeichnis

Zielstellung und Aufbau der Arbeit	1
1 Plasma	5
1.1 Übersicht verschiedener Plasmen	5
1.2 Eigenschaften	6
1.3 Erzeugung von Plasmen für Oberflächenprozesse	16
2 Physikalische Eigenschaften von Gasen im Hochvakuum	25
2.1 Teilchenbewegung	25
2.2 Geschwindigkeitsverteilung	26
2.3 Kennzahlen von Gasen im Hochvakuum	28
3 Transportmechanismen der Reaktanten	39
3.1 Winkel- und Energieverteilungsdichtefunktion	40
3.2 Ungeladene Reaktanten	41
3.3 Ionen	46
3.4 Ätzrate und Aspektverhältnis	52
4 Oberflächenreaktionen	57
4.1 Sputtern	57
4.2 Chemisches Ätzen	59
4.3 Ionenunterstütztes Ätzen	60
4.4 Plasma-Polymer Deposition	64
5 Simulation	67
5.1 Überblick	68
5.2 Topografische Oberflächenmodelle	76
6 Entwicklung des allgemeinen Teilchentransportmodells	89

6.1	Analogie zur Optik	90
6.2	Das globalen Transportmodell (Rendering-Gleichung)	96
6.3	Zusammenfassung	100
7	Transportsimulation ungeladener Reaktanten	101
7.1	Globales Transportmodell bei diffuser Reflexion	101
7.2	Finite Elemente-Methode zur Berechnung der Emission	104
7.3	Formfaktoren	109
7.4	Sichtbarkeit	112
7.5	Reflektivität der Oberfläche	117
7.6	Lösung des LGS	118
8	Transportsimulation von Ionen	123
8.1	Globales Strahlungsmodell bei spekularer Reflexion	124
8.2	Monte Carlo-Simulation	125
8.3	Iterative Vorwärtsreflexion	127
9	Software	135
9.1	Integrierte Ätzsimulation	135
9.2	Softwarearchitektur	137
9.3	Plug-In-Konzept	138
9.4	Interaktive Simulation	141
9.5	Skriptsimulation	142
10	Experiment und Simulation	147
10.1	Ätzexperimente und -simulationen	147
10.2	Vergleich von Simulation und Experiment	155
10.3	Deposition	158
10.4	Gas-Chopping	171
10.5	Zusammenfassung	176
11	Zusammenfassung und Ausblick	179

Abbildungsverzeichnis

1.1	Elektronendichte für verschiedene Plasmen	7
1.2	Nahordnung von Ionen und Elektronen im Plasma	10
1.3	Potenzialverlauf eines kapazitiv angeregten Plasmas	12
1.4	Potenzialverlauf in der Randschicht	14
1.5	Parallelplattenreaktor	18
1.6	SCREAM Prozess (Technologieablauf)	19
1.7	Induktiv angeregter Plasmareaktor	20
1.8	Plasmaanregung in einem induktiv angeregtem Plasma	21
2.1	MB-Geschwindigkeitsverteilung verschiedener Gase (T const.)	27
2.2	MB-Geschwindigkeitsverteilung bei verschiedenen Temperaturen . .	28
2.3	Strömungsregimes für verschiedene Knudsen-Zahlen	30
2.4	Adsorption von Molekülen	33
2.5	Langmuir Isotherme für verschiedene K_L	36
3.1	$\mathcal{EDF}_{neutral}$ des idealen Gases	42
3.2	Raumwinkelbeziehungen im Lambertschen Kosinus-Gesetz	43
3.3	Abschattung und Reflexion bei Lambertscher Kosinus-Verteilung . .	44
3.4	Geometrie rotationssymmetrischer Strukturen	45
3.5	Abschattung in rotationssymmetrischen Strukturen und Gräben . . .	45
3.6	Simulierte Konzentration von Ionen und Neutralen in elektronegati- vem Plasma (SF_6) und elektropositivem Plasma (C_4F_8)	47
3.7	Bimodale Ionenenergieverteilungsfunktion \mathcal{IEDF}	49
3.8	Abschattung und Reflexion bei Gausscher-Winkelverteilung	49
3.9	Aufladung durch verschiedene Winkelverteilungen der Ladungsträger	52
3.10	approximierte Abnahme der Teilchenflussdichte	54
4.1	Stöße von Ionen und Substratatomem beim Sputtern	58
4.2	Si Ätzzraten mit und ohne Ionenbeschuss	61

4.3	Ätzung und Deposition in C_xF_y Plasmen	65
4.4	Deponierter Polymerfilm an der Seitenwand eines zylindrischen Ätz- profiles	66
5.1	FEM Approximation einer unbekanntem Funktion	72
5.2	Module des Hybrid Plasma Equipment Model (HPEM) Simulator	74
5.3	Hierarchische Aufteilung einer Fläche in rechteckige Elemente	79
5.4	Flächennetz mit gemischten Elementen (Drei- und Vierecke)	80
5.5	Flächennetz eines Grabens und 2D Projektion der Schnittfläche	81
5.6	Delaunay-Triangulation mit zugehörigen Umkreisen	82
5.7	2D Approximierung der Probenoberfläche durch geradenLinienzug	83
5.8	Selbstüberschneidung des Strings nach Ätzschritt	84
5.9	Sweepverfahren zum Entfernen von Schleifen bei der Profilevolution	85
5.10	Adaptive Verteilung der Stringknoten	86
6.1	Anzahl der Teilchen, die eine Fläche dA in $v dt$ durchdringen.	94
6.2	Veranschaulichung der spezifischen Intensität	94
6.3	Gleichheit der Flüsse von emittierter und empfangender Fläche	95
7.1	Flächen mit gleichem Formfaktor bezüglich der Fläche A_i	111
7.2	Nusselt Analogon	112
7.3	Konstruktion eines Binärbaums durch Halbraumzerlegung	113
7.4	Clipping von projizierten Flächen auf der Einheitshalbkugel	114
7.5	Sichtbarkeitspolygon eines Punktes p im Polygon P	116
8.1	Verlauf eines Strahls beim Raytracingverfahren	128
8.2	Vorwärtsreflexion von Ionen an einem Oberflächenelement	132
9.1	Module des integrierten Ätzsimulators	136
9.2	Softwarearchitektur der implementierten Simulationssoftware	138
9.3	Plug-In-Konzept zur Integration von Benutzermodellen	139
9.4	Graphische Oberfläche der WinSimEtch Anwendung	141
9.5	Verkettung von Softwarewerkzeugen zur Simulationsauswertung	144
9.6	Speicherung und Extraktion von Simulationsdaten in einer Datenbank	146
10.1	Vergleich verschiedener Ätzmodelle mit geätztem Profil	151
10.2	Druckabhängigkeit der Ätzrate bei abgeschalteter Elektrodenanregung	154

10.3	Temperaturabhängigkeit der Ätzrate bei abgeschalteter RF-Leistung	155
10.4	Veränderung der Ätzrate bei ab- und eingeschalteter RF-Leistung	156
10.5	Simulierte Auswirkung des effektiven Verbrauchskoeffizienten von Fluor	157
10.6	Plasmakonzentrationen und mittlere Ätzraten	158
10.7	Vergleich der Äztiefen von Experimenten und Simulationen	159
10.8	Verhältnis der Unterätzung zur Tiefe als Maß für die Anisotropie	160
10.9	Simulation und Experiment der Polymerdeposition in Grabenprofil	161
10.10	Experiment und Simulation Langzeitdeposition	162
10.11	Verhältnis der Depositionsraten von Boden und Oberseite in Gräben	163
10.12	Querschnitt eines Profiles mit unerwarteter Verteilung der Polymerdicke	164
10.13	Plasmakonzentrationen und mittlere Depositionsraten	164
10.14	Vergleich der Polymerdicke zwischen Experiment und Simulation	168
10.15	Gemessene und simulierte Polymerfilme auf und in Gräben	170
10.16	Gas-Chopping bei verschiedenen Strukturbreiten	172
10.17	Simulationsstudie Zeitverhältnis Gaschopping	173
10.18	Vergleich von Gaschopping auf SOI mit und ohne Aufladung	175
10.19	Vergleich Aufladungssimulation und Experiment	176

Tabellenverzeichnis

2.1	Mittlere freie Weglängen für verschiedene Drücke bei Normaltemperatur	29
2.2	Thermische Wellenlänge ausgewählter Spezies bei 20°C nach Gl. (2.15)	32
4.1	Häufig verwendete Material-Ätzgas Systeme beim Plasmaätzen	64
5.1	Beispiele für Problemklassen in der Simulation	69
10.1	Koeffizienten und ihre Bedeutung im Ätzmodell	149
10.2	Parameter der Ätzexperimente bei OIPT und in Ilmenau	153
10.3	Parameter der Depositionsexperimente an der ICP-Anlage bei OIPTB	160

Zielstellung und Aufbau der Arbeit

Seit der Erfindung der integrierten Schaltung im Jahre 1949 durch Werner Jacobi und unabhängig davon durch Jack S. Kilby und Robert N. Noyce [1] durch vollzog sich eine beispiellose Entwicklung der Halbleitertechnologie, die geprägt war von einer exponentiellen Entwicklung der Integrationsdichte und damit einer Miniaturisierung von Bauelementen bis in Größenordnungen von wenigen Nanometern. Die Entwicklung der Integrationsdichte wurde bereits von Gordon Moore im Jahre 1965 zutreffend vorhergesagt.

Mit der Entwicklung und Integration mechanischer, optischer und biologischer Systeme wurde diese Entwicklung in der Mikrosystemtechnik fortgeführt und bietet das Potenzial für völlig neuartige Anwendungen im Mikro- und Nanometerbereich.

Zur Realisierung kleinster Strukturen auf Halbleitermaterialien spielt die Technologie der Oberflächenstrukturierung im Plasma eine zentrale Rolle. Die Technologie des Plasmaätzens und der Deposition von dünnen Schichten im Plasma gestattet die massenhafte Fertigung von Mikrosystemen und integrierten Schaltungen mit kleinsten Strukturen. Die Weiterentwicklung der Technologie und der immer schnelleren Miniaturisierung erfordern das genaue Verständnis der Prozesse im Inneren von Plasmaätzsystemen.

In der vorliegenden Arbeit soll die und Simulation der wesentlichen Prozesse während des Plasmaätzens im Feinvakuum vorgestellt und eine neue Methode zur Simulation von Transportprozessen reaktiver Spezies¹ in Mikrostrukturen entwickelt werden.

In den vergangenen Jahren wurden durch verschiedene Forschergruppen [2–4] große Fortschritte in der Simulation von Plasmaätzprozessen erreicht. Die daraus hervorgegangene Software lässt sich im Wesentlichen in Plasma-, Prozess- und Topografiesimulatoren klassifizieren. Wegen der Komplexität der physikalischen Effekte und

¹Mit Spezies sind die unterschiedlichen Sorten von Atomen, Molekülen, Ionen und Elektronen gemeint, die in ihrer Gesamtheit das Plasma bilden.

chemischen Prozesse sind die meisten Ansätze jedoch entweder auf die Simulation des makroskopischen Plasmas oder der mikroskopischen Topografie der Strukturen beschränkt.

Im Rahmen des NanoPlasma²-Projektes, in dem diese Arbeit entstanden ist, wurde durch unsere Forschungsgruppe am Fachgebiet Mikro- und Nanoelektrische Systeme unter Leitung von Prof. Ivo W. Rangelow ein integrierter Simulator entwickelt, der die makroskopische Plasmasimulation mit der mikroskopischen Topografiesimulation verbindet und somit die Ausführung virtueller Ätzexperimente gestattet. Das NanoPlasma-Projekt wurde aufgrund der vorangegangenen Forschungsarbeiten der Arbeitsgruppe um Prof. Rangelow und den daraus entstandenen Diplomarbeiten und Promotionsschriften [4] von der Europäischen Union bewilligt und sehr erfolgreich abgeschlossen.

Der besondere Schwerpunkt dieser Arbeit ist die Entwicklung von genauen und effizienten Verfahren zur Modellierung und der Simulation des Transportes der Reaktanden von ihrem Entstehungsort im Plasma zur Oberfläche der Probe und insbesondere im Innern der geätzten Strukturen.

Der erste Teil dieser Dissertation stellt zunächst die physikalischen und chemischen Vorgänge und die daraus erwachsenden Probleme der Modellierung dar. In den Kapiteln 1 und 2 werden dafür die Erzeugung sowie die physikalischen Eigenschaften von Niederdruckplasmen zur Mikrostrukturierung und der Transport von Spezies an der Randschicht des Plasmas umrissen. Anschließend sind in Kapitel 3 die Transportmechanismen erläutert, die den Fluss von Reaktanten innerhalb von Mikrostrukturen bestimmen. Die Reaktion der Spezies aus dem Plasma an und mit den Atomen der festen Probenoberfläche führt schließlich zum Ätzen oder zur Deposition von dünnen Schichten. Die stattfindenden Oberflächenreaktionen sind im Kapitel 4 mit ihren typischen Anwendungen qualitativ dargestellt.

Im zweiten Teil der Dissertation wird zunächst ein allgemeiner Überblick über die Möglichkeiten der Simulation von Stoff- und Energieflüssen gegeben. In Kapitel 5 werden darüber hinaus die Resultate anderer Forschergruppen vorgestellt und die Vor- und Nachteile sowie die algorithmische Umsetzung verschiedener Simulationsansätze diskutiert.

²NanoPlasma – "Plasma etching for desired nano-feature shape and nanotexture: An advanced reactor and simulation software for feedback-loop plasma control", finanziert durch die Europäische Kommission – Sixth framework programme (Projektnr 016424)

Im 6. Kapitel wird die Ähnlichkeit des Transportproblems von Spezies in verdünnten Gasen mit dem Beleuchtungsproblem von komplexen Szenen in der Computergrafik gezeigt. Aus der Analogie beider Probleme wird ein allgemeines Transportmodell hergeleitet, welches eine grundlegend neue Herangehensweise an die Simulation von Speziesflüssen in Mikrostrukturen darstellt. In den nachfolgenden Kapiteln 7 und 8 wird das allgemeine Transportmodell für den Transport von ungeladenen Reaktanden und Ionen jeweils spezialisiert. Im 7. Kapitel wird außerdem die Finite-Elemente-Methode (FEM) zur effizienten Simulation des Neutralentransportes vorgestellt. Weil sich die FEM nicht zur Simulation des Transports von Ionen eignet, wird im Kapitel 8 die ebenfalls neu entwickelte Methode der iterativen Vorwärtsreflexion von Ionen vorgestellt.

Der letzte Teil der Arbeit geht auf die praktische Umsetzung der Modelle in Computersimulationen und die Verifikation durch Experimente von nanostrukturierenden Ätzprozessen ein. Im Kapitel 9 wird die im Rahmen der Forschungsarbeit entwickelte Simulationssoftware dafür kurz vorgestellt, und in Kapitel 10 sind die Experimente und Prozeduren erläutert, die zur Parametrisierung der Simulation und der Verifizierung von Simulationsergebnissen durchgeführt wurden.

Ein abschließendes Kapitel fasst noch einmal kurz die Ergebnisse der Arbeit zusammen und liefert einen Ausblick auf die Schwerpunkte der zukünftigen Weiterentwicklung der Simulation von Plasmaätzprozessen.

Kapitel 1

Plasma

Als Plasma bezeichnet man ein Gas, das gänzlich oder teilweise aus frei beweglichen Ladungsträgern, wie Elektronen und Ionen, besteht [5]. Der Begriff wurde von Irvin Langmuir (1928) eingeführt und wird in diesem Sinne auch als vierter Aggregatzustand der Materie bezeichnet [6; 7]. Man schätzt, dass sich circa 99% der sichtbaren Materie im Universum im Plasmazustand befindet.

1.1 Übersicht verschiedener Plasmen

Der Plasmazustand wird in vielfältigen technischen Anwendungen genutzt: In der Beleuchtungstechnik werden Gasentladungslampen, unter anderem Energiesparlampen, Leuchtstofflampen und Bogenlampen [8] verwendet, die Gase im Plasmazustand enthalten. Plasmabildschirme dienen zur Bildwiedergabe [9].

In der Oberflächentechnik und Halbleitertechnologie wird Plasma zum Ätzen und zur plasmainduzierten Materialabscheidung (PECVD) [10] verwendet.

In der Beschichtungstechnik werden Funktionsschichten, wie z. B. Verspiegelungen oder Anti-Haft-Schichten, aufgebracht. In der Werkstofftechnik werden Plasmen zur Oberflächenmodifizierung (Aufrauen), zur plasmainduzierten Materialabscheidung (PECVD und Plasmapolymerisation), zur Oberflächenhärtung, Reinigung oder Plasmaoxidation eingesetzt.

Zur Materialanalyse wird Plasma zum Aufschließen von Probenmaterialien (Plasmaveraschung) und in Messgeräten zum Spurennachweis von Metallen [7] verwendet. Beim Lichtbogen-Schweißen und Plasmaschneiden wird die Leitfähigkeit des ioni-

sierten Gases ausgenutzt [11].

In der Fusionsforschung befindet sich der Brennstoff in einem Fusionsexperiment mit magnetischem Einschluss ebenfalls im Plasmazustand [12].

1.2 Eigenschaften

Ein Plasma ist im Normalfall ein Gemisch aus neutralen und positiv sowie negativ geladenen Teilchen. In speziellen Fällen vollständig ionisierter Plasmen liegen auch nur geladene Teilchen, Elektronen und Ionen und/oder geladene Moleküle vor.

Charakteristisch für Plasmen ist ihr typisches Leuchten, das durch Strahlungsemission angeregter Gasatome, Ionen oder Moleküle verursacht wird [8].

Ein Plasma wird charakterisiert durch die vorhandenen Spezies (Elektronen, positive und negative Ionen, neutrale Atome, neutrale und geladene Moleküle), deren Dichten und Temperaturen (die nicht gleich sein müssen) und räumliche Struktur, insbesondere Ladung und Ströme bzw. elektrische und magnetische Felder.

Plasmen sind normalerweise quasineutral, die Netto-Ladungsdichte ist sehr klein im Vergleich zur Elektronendichte, bzw. die Differenz aus den Ladungen der negativ und positiv geladenen Teilchensorten ist näherungsweise Null [6]. Ausnahmen beschränken sich auf Regionen von der Größe der Debye-Länge und der Randschicht [6] des Plasmas. Durch das Vorhandensein freier Ladungen lässt es sich jedoch durch elektrische und magnetische Felder beeinflussen und ist somit leitfähig, jedoch nach außen hin neutral [6; 8; 13].

Das Verhältnis zwischen Ionenmasse und Elektronenmasse ist groß, mindestens 1836 (bei einem Wasserstoffplasma). Viele Eigenschaften von Plasmen lassen sich daraus ableiten.

1.2.1 Temperatur und Dichte

Weil sich die Plasmadichte in technischen Plasmen durch verschiedene Verlustmechanismen, wie Rekombination, Abstrahlung elektromagnetischer Strahlung, Diffusion von Ladungsträgern aus dem Plasmakörper hin zu Umgebungswänden und Wandreaktionen verringert, ist eine ständige Zufuhr von Energie aus einer externen Quelle nötig, um das Plasma im Gleichgewichtszustand zu halten [8].

Die Ladungsträger im Plasma sind fast ausschließlich Elektronen und die positiven

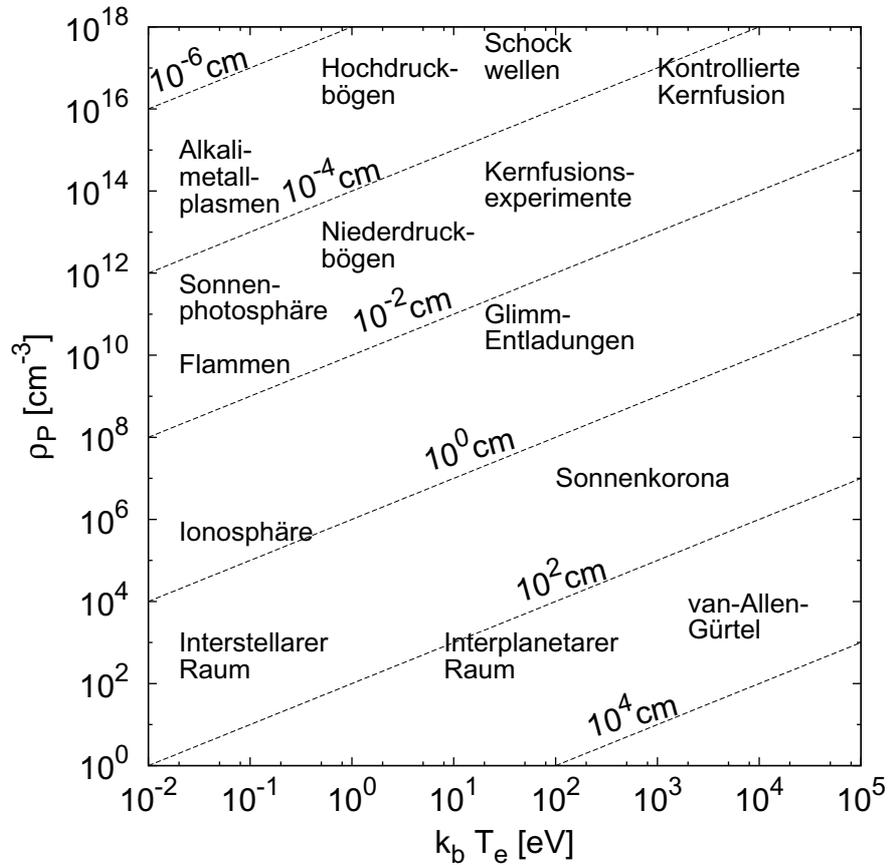


Abbildung 1.1 Elektronendichte für verschiedene Plasmen in Abhängigkeit von der Elektronentemperatur in eV. eingezeichnet sind die Debye-Längen. (Bild entnommen aus [8])

Ionen des eingeleiteten Gases. Die Energie, die ins Plasma eingeleitet wird, wird als mechanische Arbeit $W = e_0 E x$ mit $x = \frac{1}{2} a t^2$ an den Ladungsträgern verrichtet. Weil die Beschleunigung $a = e_0 E / m$ eines einfach geladenen Teilchens umgekehrt proportional zu dessen Masse ist, wird die Energie fast ausschließlich an die Elektronen übertragen Gl. (1.1) [8]:

$$W = \frac{(e_0 E t)^2}{2m}. \quad (1.1)$$

Nimmt man eine Maxwell-Boltzmann-Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen an, so erhält man deren mittlere Geschwindigkeit nach Gl. (2.7). Die Stromdichte $j = \rho \bar{v} / 4$, mit ρ der Dichte der Ladungsträger, ist für die Elektronen wegen ihrer viel geringeren Masse im Vergleich zu den Ionen um etwa drei Größenordnungen höher als die der Ionen.

1.2.2 Heiße und kalte Plasmen

Plasmen bei einem Gasdruck von weniger als circa 10^4 Pa (Niederdruckplasmen), befinden sich nicht mehr im thermodynamischen Gleichgewicht. Ionen und Elektronen besitzen stark unterschiedliche Temperaturen, weil wegen der großen mittleren Weglänge der Energietransfer zwischen Elektronen und Ionen praktisch vernachlässigbar ist. [8]. In einem Ätzreaktor liegt die mittlere Energie der Elektronen bei mehr als 2 eV, was umgerechnet einer Temperatur von mehr als 20 000 K entspricht. Die Temperatur der Ionen steigt hingegen nur wenig über die Gastemperatur (athermisches Plasma) mit einer mittleren Energie von nur circa 0,05 eV. Man spricht hier von einem kalten Plasma. Die Plasmadichte eines kalten Plasmas liegt bei etwa $10^9 \dots 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ [8; 14].

Bei höheren Drücken erhöht sich die Stoßzahl der Teilchen im Plasma quadratisch zur Druckänderung und es kommt zu einem effektiverem Energietransfer von den Elektronen zu Ionen und neutralen Teilchen. In diesem Falle wird das Plasma "heißer" und man spricht von einem thermischen Plasma. Das Ergebnis ist ein Plasma, das sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, in dem also alle Teilchen annähernd die gleiche Energieverteilung besitzen [13].

1.2.3 Plasmafrequenz

In einem Plasma herrscht im Allgemeinen immer Elektroneutralität, die Anzahl von Elektronen und Ionenladungen ist gleich. Ist das Plasma einem elektrischen Feld ausgesetzt, fließt jedoch wegen der Beweglichkeit der Ladungsträger ein Strom gemäß dem Ohmschen Gesetz. Bei niedrigen Frequenzen verhält sich das Plasma wie ein elektrischer Leiter. Bei höheren Frequenzen bewegen sich die Ionen und Elektronen aufgrund ihrer unterschiedlichen trägen Massen unabhängig voneinander und es kommt zu einer Ladungstrennung. Dadurch entstehen im Inneren des Plasmas starke elektrische Felder und es kommt zu elektrischen Schwingungen. Bei noch höheren Frequenzen können die Ionen den periodischen Richtungsänderungen des Feldes nicht mehr folgen und bilden nur noch einen Hintergrund positiver Ladungen, während die Elektronen unter dem Einfluss des elektrischen Wechselfeldes schwingen [6; 8].

Die Plasmafrequenz ergibt sich aus dem zweiten newtonschen Gesetz, wenn man die Bewegung eines Elektrons im Feld der als ruhend angenommenen Ionen betrachtet.

Aus Symmetriegründen und zur Vereinfachung wird ein Plasma mit einfach geladenen Ionen und die Bewegung der Elektronen in einer Raumdimension angenommen. Das Feld der Ionen erhält man aus dem Gaußschen Gesetz mit der Elektronendichte $n_e = n_I$, der Ladungsdichte $\rho = e_0 n_e$ und der eindimensionalen Divergenz $\text{div } E = dE/dx = \rho/\epsilon_0\epsilon_{Gas}$. Durch Integration erhält man

$$E(x) = \frac{e_0 n_e}{\epsilon_{Gas} \epsilon_0} x. \quad (1.2)$$

Die Bewegungsgleichung der Elektronen lautet demnach

$$\ddot{x} = \frac{F}{m_e} = -\frac{e_0 E}{m_e} = -\frac{e_0^2 n_e}{\epsilon_0 \epsilon_{Gas} m_e} x. \quad (1.3)$$

Gl. (1.3) ist die Gleichung einer harmonischen Schwingung mit der Eigenfrequenz

$$\omega_P = \sqrt{\frac{n_e e_0^2}{\epsilon_0 \epsilon_g m_e}}. \quad (1.4)$$

Diese Frequenz ω_P wird Plasmafrequenz genannt und ist nur von der Elektronendichte n_e abhängig.

1.2.4 Debyelänge

In Gemischen freier Ladungsträger, wie es in Plasmen oder Elektrolyten der Fall ist, unterliegen die Ladungsträger der elektrostatischen oder Coloumbkraft. Da sich gleiche Ladungen abstoßen und entgegengesetzte anziehen, bildet sich eine gewisse Nahordnung aus, in der die positiven Ladungsträger vorzugsweise von negativen umgeben sind und umgekehrt. Dies führt zu einer Abschirmung von Ladungen, wie es in Abb. 1.2 durch die Kreise angedeutet ist. Die Elektroneutralität bleibt dabei gewahrt. Im Gegensatz zum Ionengitter können sich die Ladungsträger jedoch nicht vollkommen regelmäßig anordnen, weil die neutralen Gasmoleküle als Dielektrikum wirken und die elektrostatische Wechselwirkung abschwächen. Die Ladungsträger unterliegen außerdem einer starken thermischen Bewegung. Im zeitlichen Mittel befinden sich jedoch positive Ionen in einer Wolke aus Elektronen. Diese Modellvorstellung findet sich in der Debye-Hückel-Theorie wieder [15; 16].

Als Debyelänge λ_D (nach Peter Debye) bezeichnet man die charakteristische Länge, auf welcher das Potential eines elektrischen Feldes in einem Gemisch von Ladungsträgern unterschiedlicher Polarität auf das 1/e-fache abfällt. In kalten Plasmen, bei

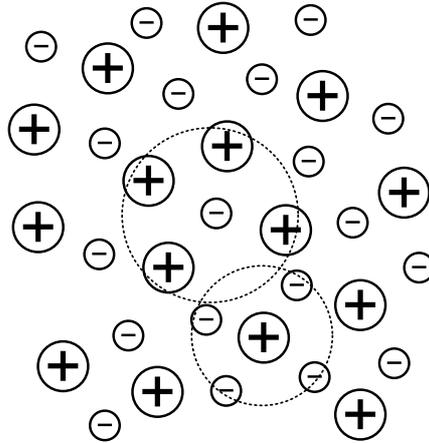


Abbildung 1.2 *Nahordnung von Ionen und Elektronen im Plasma*

denen die Debye-Länge durch die mittlere Energie der Elektronen bestimmt wird, gilt näherungsweise

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}}. \quad (1.5)$$

Die typischen Debye-Längen verschiedener Plasmen sind in Abb. 1.1 gezeigt. Wenn man von einem Plasma im engeren Sinne spricht, so ist Debye-Länge klein gegenüber den Abmessungen und die Anzahl von Teilchen in einer Kugel mit Radius gleich der Debye-Länge ist groß, so dass die statistische Betrachtung Gültigkeit besitzt [13].

1.2.5 Plasmapotential

Um die Energie der Ionen in Prozessplasmen zu ermitteln, ist es nötig, das elektrische Potenzial des Plasmas V_P gegenüber der im Normalfall geerdeten Reaktorwandung zu kennen.

Wie stark sich das Plasma auflädt, hängt entscheidend von der Elektronentemperatur und den geometrischen Verhältnissen, insbesondere von der Fläche der Elektroden und Reaktorwandungen ab. Ist die Fläche der aktiven Elektrode klein im Vergleich zur geerdeten Elektrode, so ist auch das Plasmapotenzial entsprechend niedrig (10 – 50 V). Wenn die Fläche der aktiven Elektrode jedoch vergleichbar mit den geerdeten Flächen im Reaktor ist, so kann das Plasmapotenzial bis zur Amplitude der angelegten RF-Spannung anwachsen [17]. Die direkte Messung des Plasmapotenzials ist schwierig, kann aber mithilfe einer Langmuirsonde im Plasma durchgeführt werden.

Für Gase, bei denen der negative Ladungsstrom fast ausschließlich durch Elektronen verursacht wird, erhält man eine Schätzung des Plasmapotenzials aus der Messung der DC-Bias-Spannung V_{DC} und der Amplitude der angelegten RF-Spannung V_{RF} . Das Plasmapotenzial ist nach [17] näherungsweise

$$V_P \approx \frac{1}{2}(|V_{\text{RF}}| - |V_{\text{DC}}|), \quad (1.6)$$

wobei V_{RF} die Amplitude der angelegten RF-Spannung bezeichnet und V_{DC} negativ ist.

Der schematisierte Verlauf des Plasmapotenzials ist in Abb. 1.3 dargestellt.

Das Plasmapotenzial kann durch verschiedene Parameter beeinflusst werden. Wenn die Periode der Anregungsfrequenz geringer als die Durchgangszeit der Ionen durch die Randschicht ist (s. Abschnitt 1.2.7), so können genug positive Ionen das Plasma während der negativen Halbwelle verlassen und die DC-Spannung ganz oder teilweise kompensieren [18]. Nach Gl. (1.6) steigt dadurch das Plasmapotenzial unabhängig vom Verhältnis der Elektrodenflächen an. Das Plasmapotenzial kann durch den Kontakt mit einer weiteren Elektrode mit positivem Potenzial beeinflusst werden. Für Plasmen, in denen die negativen Ladungsträger vorwiegend Elektronen sind, folgt das Plasmapotenzial dem positivstem Potential, mit dem das Plasma in Kontakt kommt [17]. In [19] wurde gezeigt, dass – wenn die Elektronen eine Maxwell-Boltzmann Verteilung besitzen – Plasma- und Schwebepotenzial (s. Abschnitt 1.2.6) um einen festen Wert T_e/e_0 differieren. Die eingebrachte Leistung, die sich auf die Elektronentemperatur auswirkt, hat somit ebenfalls Auswirkung auf die Potenzialverteilung.

1.2.6 Schwebepotenzial

Bringt man eine isolierte Probe mit dem Plasma in Berührung, so ist der Strom aus Elektronen wegen ihrer weitaus höheren Beweglichkeit zunächst größer als der Strom der Ionen. Die Probe lädt sich daher gegenüber dem Plasma negativ auf, was zu einer Abstoßung weiterer Elektronen führt. Wegen der negativen Aufladung werden positive Ionen aus dem Plasma zur Probe hin beschleunigt. Ein stationärer Zustand stellt sich ein, wenn Ionenstrom und der Elektronenstrom gleich groß sind. Das Potenzial, auf dem sich die Probe dann befindet, heißt Schwebepotenzial (engl. floating potential) V_f [8; 18].

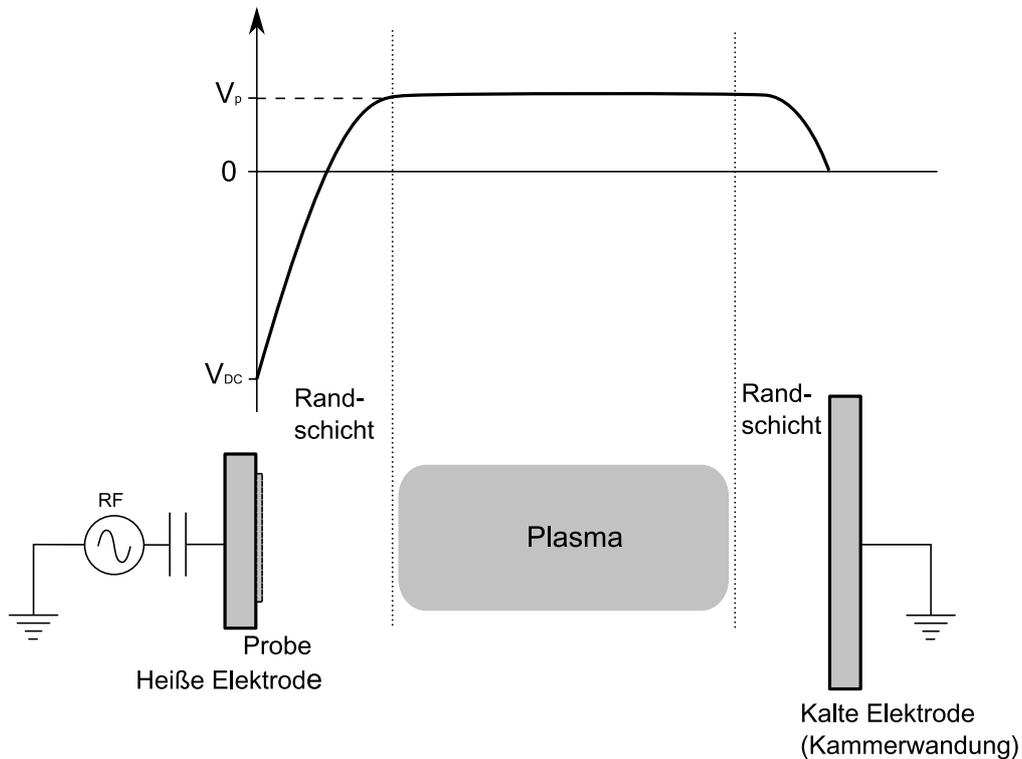


Abbildung 1.3 Räumliche Verteilung des zeitlich gemittelten Potentials in einem kapazitiv angeregten Plasma. Die Kathode (links) wird durch einen RF Generator angeregt. Ein Kondensator verhindert das Abfließen eines Gleichstromes. Die geerdeten Reaktorwände sind durch die (größere) rechte Elektrode schematisch dargestellt. Das negativste Potenzial, bezogen auf die geerdeten Reaktorwände, besitzt die Kathode, das positivste das Plasma. Der größte Potentialunterschied bildet sich zwischen Plasma und Kathode aus, während der Potentialunterschied zwischen Plasma und Reaktorwänden sehr viel geringer ist (nach J. W. Coburn [17]).

1.2.7 Randschicht

Die Randschicht ist ein lokales elektrisches Feld, welches das Plasma von den umgebenden Reaktorwänden und Elektroden abgrenzt. Sie sorgt dafür, dass die Elektronen im Plasma verbleiben. Nur Elektronen, deren kinetische Energie ausreicht, um den Potentialunterschied der Randschicht zu überwinden, können das Plasma verlassen. Die positiven Ionen werden durch den Potentialunterschied aus dem Plasma heraus beschleunigt [6].

Die Erforschung der Randschichtphänomene ist eines der ältesten und wichtigsten Probleme in der Plasmaphysik, weil die Interaktionen von Plasmen und Oberflächen in vielen Anwendungen eine zentrale Rolle spielen.

Es wurden viele Modelle zur Charakterisierung entwickelt, die von einfachen analytischen Näherungen wie dem Langmuir-Child-Gesetz [20] bis hin zu komplexen kinematischen Simulationen reichen [21].

Ein weit verbreitetes und in vielen Fällen ausreichendes Modell, das die Potentialverteilung $V(x)$ in einer ebenen Randschicht in Abhängigkeit vom Abstand zur Wandung (siehe [22]) beschreibt, soll hier kurz vorgestellt werden.

Vereinfachend soll angenommen werden, dass die Randschicht keinen zeitlichen Veränderungen unterliegt und kein magnetisches Feld längs der Wandung existiert. Es kann somit eine eindimensionale, zeitunabhängige Betrachtung der Vorgänge durchgeführt werden.

Für die Reaktorwandung oder die Elektrode wird angenommen, dass sie sich auf einem Wandpotential $V(0) = V_W$ befindet. Das Plasma sei quasineutral und für einen weit entfernten Punkt im Innern des Plasmas sei das Potential $V(x \gg \lambda_D) = V_P := 0$ V. Die Dichte der Elektronen und positiven Ionen ist in diesem Falle gleich $n_e = n_I = n_0$. Zwischen Plasma und Wandung gibt es einen Punkt $x=D$ (bei eindimensionaler Betrachtung), bei dem das Plasma vom quasineutralen Zustand in den nichtneutralen Zustand übergeht. Ein schematischer Verlauf des Potentials in der Randschicht ist in Abb. 1.4 dargestellt.

Weiterhin soll die Temperatur der Ionen vernachlässigbar im Vergleich zur Elektronentemperatur sein und es sollen keine Stöße der Teilchen in der Randschicht stattfinden, d. h. die Randschicht soll quellen- und senkenfrei sein. Aus dieser Annahme kann sofort geschlussfolgert werden, dass die Ionendichte der Kontinuitätsgleichung Gl. (1.7) genügt

$$n_I(x) = n_0 \frac{u_0}{u(x)}. \quad (1.7)$$

Darin sind $u_0, u(x)$ die Geschwindigkeit der Ionen bei Eintritt in die Randschicht, bzw im Abstand x von der Wandung. n_0 ist die Ionendichte an der Grenze von Plasma und Randschicht. Weil angenommen wurde, dass die Ionen relativ kalt sind (kaltes Plasma), bilden sie einen näherungsweise monoenergetischen Strom durch die Randschicht. Damit die Ionen die Randschicht überhaupt durchqueren können, müssen sie an der Grenze zum Plasma mindestens Schallgeschwindigkeit c_s besitzen (sog. Bohmkriterium)

$$c_s = \sqrt{\frac{k_B T_e}{m_I}}. \quad (1.8)$$

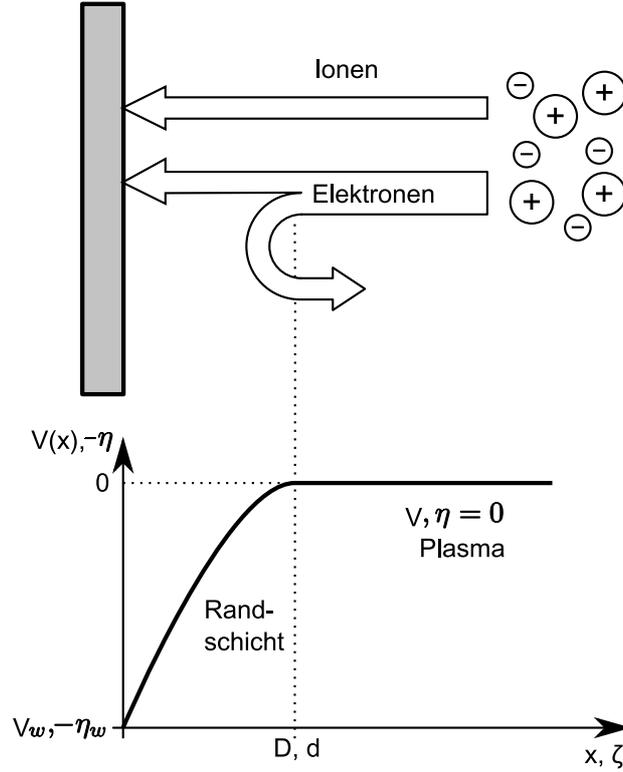


Abbildung 1.4 In der Randschicht verliert das Plasma seine Quasineutralität. Elektronen müssen zum Verlassen des Plasmas die Potentialbarriere der Randschicht überwinden. Positive Ionen werden beim Durchqueren der Randschicht zur Wand/Elektrode beschleunigt.

Weil die Randschicht als kollisionsfrei angenommen wird, gilt die Erhaltungsgleichung Gl. (1.9) der Energie für die Ionen

$$m_I u(x)^2 = m_I u_0^2 - 2e_0 V(x). \quad (1.9)$$

Aus der Kontinuitätsgleichung Gl. (1.7) und der Energieerhaltungsgleichung Gl. (1.9) folgt die ortsabhängige Ionendichte in der Randschicht zu

$$n_I(x) = \frac{n_0}{\sqrt{1 - \frac{2e_0 V(x)}{m_I u_0^2}}}. \quad (1.10)$$

Die Ionengeschwindigkeit ergibt sich zu

$$u(x) = \sqrt{u_0^2 - \frac{2e_0 V(x)}{m_I}}. \quad (1.11)$$

Nimmt man weiterhin an, dass sich die Elektronen untereinander im thermischen Gleichgewicht befinden, dann genügt die Elektronendichte im Plasma der Boltzmann-

Statistik

$$n_e = n_0 e^{-\frac{e_0 V(x)}{k_B T_e}} \quad (1.12)$$

Das Potential muss die Poissongleichung Gl. (1.13) erfüllen.

$$\frac{d^2 V}{dx^2} = -\frac{e_0}{\epsilon_0} (n_I - n_e) = -\frac{e_0 n_0}{\epsilon_0} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2e_0 V(x)}{m_I u_0^2}}} - e^{-\frac{e_0 V(x)}{k_B T_e}} \right) \quad (1.13)$$

Zur Vereinfachung kann man die Gleichungen durch folgende Transformationen dimensionslos machen

$$\eta = -\frac{e_0 V(x)}{k_B T_e} \quad (1.14)$$

$$\zeta = \frac{x}{\lambda_D} = \frac{x}{\sqrt{\frac{n_0 e_0^2}{\epsilon_0 k_B T_e}}} \quad (1.15)$$

$$\mathcal{M} = \frac{u_0}{c_s} = \frac{u_0}{\sqrt{k_B T_e m_I}} \quad (1.16)$$

wobei η für das dimensionslose Potential mit umgekehrten Vorzeichen steht, ζ ist der Abstand von der Elektrode in Vielfachen der Debyelänge und \mathcal{M} ist die Machzahl. Die Poissongleichung Gl. (1.13) lässt sich somit schreiben als

$$\frac{\delta^2 \eta}{\delta \zeta^2} = \sqrt{\frac{1}{1 + 2\eta/\mathcal{M}^2}} - e^{-\eta} \quad (1.17)$$

Der erste Term der rechten Seite entspricht der dimensionslosen Ionendichte und der zweite Term der Elektronendichte. Als Randbedingungen gelten $\eta(0) = \eta_w$ an der Elektrode und $\eta(\zeta \rightarrow \infty) = 0$ im Plasma. Die Kontinuitätsgleichung Gl. (1.7) und die Energieerhaltungsgleichung Gl. (1.9) können ebenfalls mit den dimensionslosen Größen umgeschrieben werden zu

$$\frac{n_I(\zeta)}{n_0} = \frac{\mathcal{M}}{\sqrt{\mathcal{M}^2 + 2\eta}} \quad (1.18)$$

und

$$\frac{\nu(\zeta)}{c_s} = \sqrt{\mathcal{M}^2 + 2\eta}. \quad (1.19)$$

Damit das Bohm-Kriterium erfüllt ist, muss $\mathcal{M} \geq 1$ sein. Mithilfe von Gl. (1.19) und Gl. (1.18) lassen sich die Ionendichte und -energie in der Randschicht bestimmen, wenn das dimensionslose Potential η bekannt ist. Leider existiert für Gl. (1.18) keine analytische Lösung, so dass numerische Lösungsverfahren oder Näherungslösungen

verwendet werden müssen. Eine analytische Approximation ist das Raumladungsgesetz (Langmuir-Child-Gesetz), welches das Potential in der Randschicht beschreibt. Mit den Vereinfachungen in [23] und den Potenzialen $\eta(0) = \eta_w$ und $\eta(d) = 0$ ergibt sich als Lösung

$$\eta(\zeta) = \begin{cases} \left[\frac{9}{4}(\mathcal{M}\sqrt{2}) \right]^{\frac{2}{3}} (d - \zeta)^{\frac{4}{3}}, & \zeta < d \\ 0, & \zeta > d \end{cases} \quad (1.20)$$

und für die Dicke der Randschicht

$$d = \frac{4}{3} \left(\frac{\eta_w}{2} \right)^{\frac{3}{4}} \sqrt{\mathcal{M}}. \quad (1.21)$$

1.3 Erzeugung von Plasmen für Oberflächenprozesse

Die bahnbrechenden Fortschritte in der Strukturierung von Materialien in der Mikroelektronik und Mikrosystemtechnik wären ohne die Technologie des Plasmaätzens unmöglich gewesen.

Plasmen, wie sie in der Mikrostrukturierung von Halbleitern und zum Bearbeiten von Oberflächen verwendet werden, sind Niederdruckplasmen, die im Vakuum eines Ätzreaktors erzeugt werden. Je nach Anwendungszweck existieren verschiedene Prinzipien zur Erzeugung des Plasmas im Reaktor.

Entscheidend für die Durchführung von Oberflächenprozessen ist neben den Reaktanten, die im Plasma gebildet werden, auch die kinetische Energie der Ionen beim Auftreffen auf die Substratoberfläche. Ionen erhalten ihre Bewegungsenergie durch elektrische Felder, die durch Potenzialunterschiede zwischen Plasma und Probe entstehen.

Plasmareaktoren zum Ätzen von Materialien bestehen im wesentlichen aus einer Vakuumkammer, in die die Prozessgase bei einem sehr niedrigen Druck von wenigen Millitorr¹ eingeleitet werden. Durch eine Hochfrequenz- oder elektrodenlose Mikrowellenentladung wird das Prozessgas ionisiert und somit ein hochreaktives Plasma erzeugt. Die Anregung des Plasmas erfolgt in gebräuchlichen Reaktoren entweder induktiv oder kapazitiv [25].

¹Die SI-Einheit für den Druck ist Pascal (Pa). In der Mikrosystemtechnik wird der Druck bei Plasmaprozessen häufig in Millitorr (mTorr) angegeben. Es gilt $1 \text{ Pa} \approx 7,5 \text{ mTorr}$ [24]

1.3.1 Kapazitive Anregung im Parallelplattenreaktor (CCP)

Ein typischer Parallelplattenreaktor zum reaktiven Ionenätzen besteht aus einer zylindrischen Vakuumkammer, in der sich die zu ätzende Probe auf einer Elektrode am Boden der Vakuumkammer befindet (Abb. 1.5). Die Probe ist vom Rest der Vakuumkammer elektrisch isoliert. Die Kammer selbst hat Massepotenzial [8; 17].

Das Ätzgas strömt durch kleine Öffnungen im oberen Teil der Reaktorkammer ein und verlässt die Kammer gemeinsam mit den Reaktionsprodukten unten durch ein Vakuumpumpsystem. Dabei wird ein Druck von einigen wenigen bis zu einigen hundert Millitorr in der Kammer aufrechterhalten.

Das Plasma wird durch das Anlegen eines starken elektrischen Feldes im Radiofrequenzbereich (typisch 13.56 MHz) gezündet. Dabei wird eine Leistung von einigen hundert Watt in das Plasma eingebracht [8; 26]. Die Oszillation des elektrischen Feldes führt zur Ionisierung des Ätzgases (vgl. Abschn. 1.2.3). Die beweglicheren Elektronen folgen dem elektrischen Feld und erreichen die Reaktorwände und die Probenoberfläche, während die Bewegung der schwereren Ionen durch das elektrische Wechselfeld nahezu unbeeinflusst bleibt. An den geerdeten Reaktorwänden fließen die Elektronen ab und werden an der isolierten Probe akkumuliert. Die Probe erhält dadurch ein negatives Potenzial von bis zu einigen hundert Volt gegenüber dem Plasma, welches sich durch den Verlust von Elektronen auf das Plasmapotential auflädt. Daraus resultiert ein starkes elektrisches Feld zwischen dem Plasma und der Probenoberfläche, was zu einer Beschleunigung der Ionen zur Probenoberfläche führt. Die Ionen reagieren chemisch mit der Materialoberfläche oder lösen Oberflächenatome durch Transfer ihrer kinetischen Energie aus dem Material heraus (Sputtern, vgl. Abschn. 4.1) [20]. Weil die Ionen vertikal stark beschleunigt werden, kann beim reaktiven Ionenätzen eine sehr hohe Anisotropie erzielt werden. Prozessparameter wie Druck und RF-Leistung beeinflussen die Anisotropie maßgeblich [8].

Das reaktive Ionenätzen findet typischerweise bei einem Druck von 5–150 *mathrmmTorr* statt und einer RF-Leistung von einigen hundert bis wenigen tausend Watt. Unter diesen Umständen liegt die Plasmadichte in der Größenordnung von $10^9 \dots 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ [25; 26] und die Energie der auftreffenden Ionen bei 30 – 1000 eV [20; 25]. Ein weiteres Verfahren, welches sich in Parallelplattenreaktoren durchführen lässt, ist das Plasmaätzen (PE), bei dem sich die Proben auf einer geerdeten Elektrode befinden. Beim Plasmaätzen erfahren die Ionen deshalb nur eine geringe Beschleunigung zur Probenoberfläche hin, so dass die Ätzreaktion meist isotrop ist [17; 20].

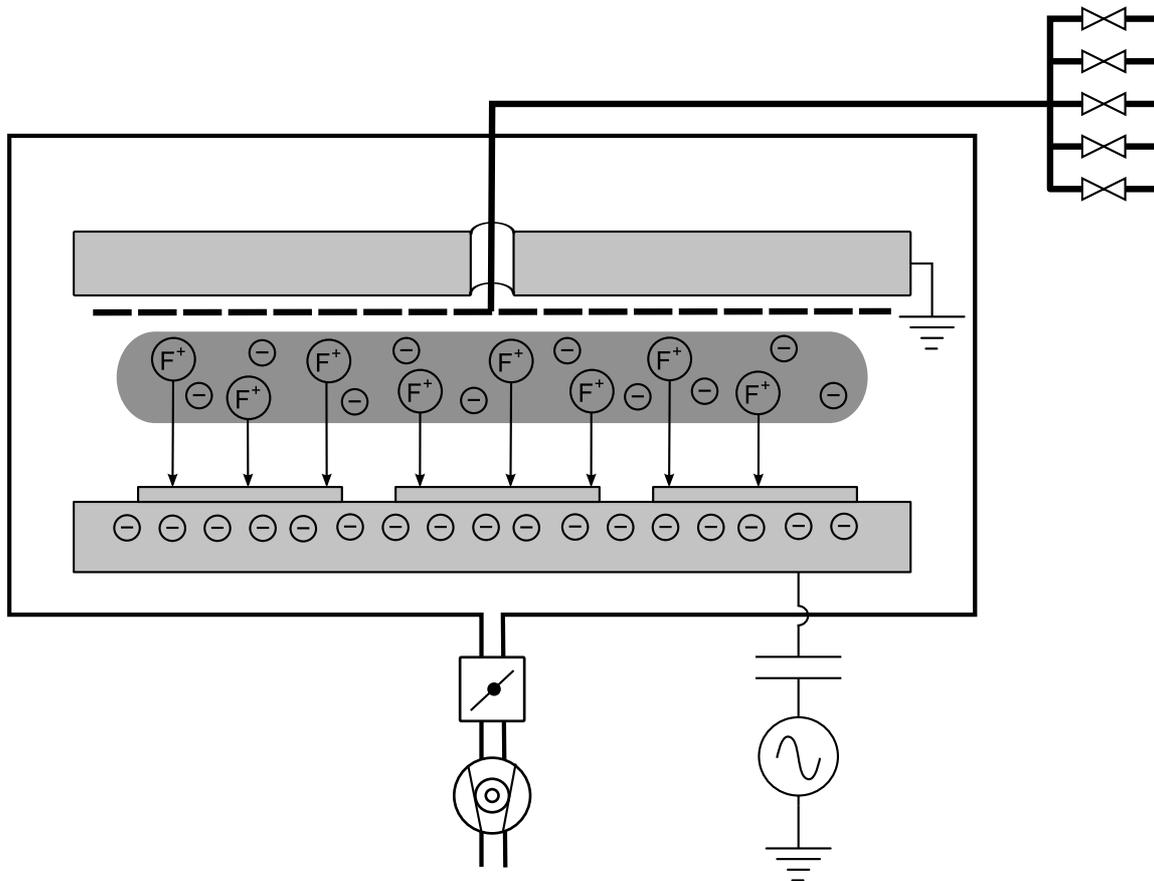


Abbildung 1.5 *Parallelplattenreaktor. Durch kapazitive Anregung wird das Plasma zwischen den Elektroden erzeugt. Positive Ionen (hier beispielhaft einfach geladene Fluorionen) werden durch die Randschicht auf die negativ geladene angeregte Elektrode beschleunigt. Die Prozessgase werden oben durch kleine Öffnungen eingeleitet und zusammen mit den Reaktionsprodukten unten durch ein Pumpsystem aus dem Reaktor entfernt.*

Typische RIE-Prozesse

Reaktives Ionenätzen ist das Standardverfahren für viele Anwendungen. Bedingt durch die hohe Energie der auftreffenden Ionen können stark anisotrope Profile geätzt werden.

Anwendung findet dieses Verfahren z. B. beim Ätzen von freistehenden Balken [27] und dem Ätzen von Gläsern für mikrofluidische Anwendungen. Ein typisches Verfahren, bei dem das reaktive Ionenätzen zur Anwendung kommt, ist der SCREAM-Prozess² [27]. Mit dem Verfahren können durch die Kombination überwiegend aniso-

²SCREAM – Single-crystal reactive etching and metallization

tropen Trockenätzprozesse (RIE) und isotroper Trockenätzschritte mit nur einer photolithographischen Maske komplexe dreidimensionale Strukturen mit hohem Aspektverhältnis erzeugt werden [28]. Abb.1.6 stellt den Prozessablauf dar, bei dem die Waferorientierung ohne Bedeutung ist. Nach der Strukturierung einer SiO_2 -Schicht,

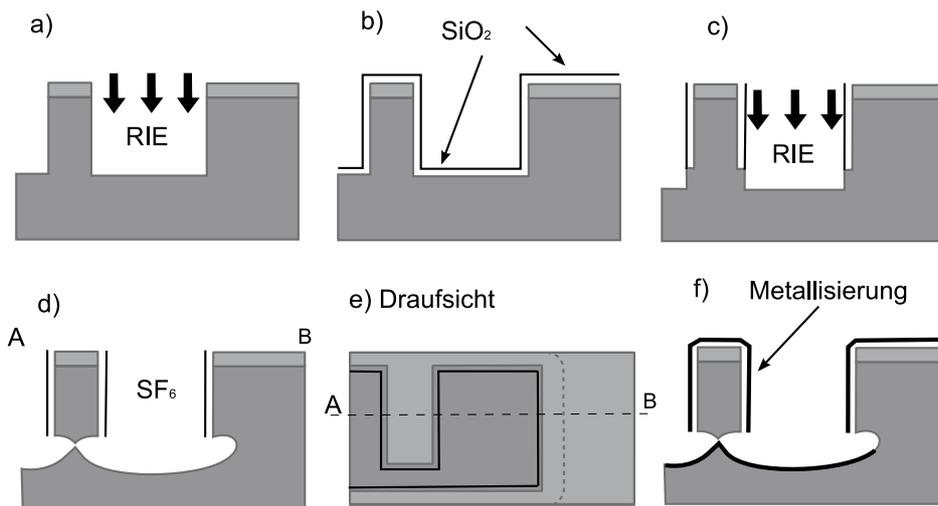


Abbildung 1.6 SCREAM Prozess (Technologieablauf) (reproduziert aus [28])

die im PECVD Verfahren aufgebracht wird und als Maskierung für den ersten Trockenätzschritt dient, wird dieser als RIE-Prozess z.B. mit den Gasen Bortrichlorid und Chlor ausgeführt (Abb. 1.6 a)). Die Ätztiefen betragen bis zu $4\text{--}20\ \mu\text{m}$ bei einem Aspektverhältnis von $1:20$. Nach einem weiteren CVD-Schritt, der eine Oxidschicht auf der Struktur aufbringt (Abb. 1.6 b)) und einem anisotropen RIE-Ätzschritt mit CF_4 verbleiben nur die passivierten Seitenwände (Abb. 1.6 c)). Im letzten Schritt wird der Boden mit SF_6 isotrop geätzt (Abb. 1.6 d)), bis eine freistehende teilbewegliche Balkenstruktur übrig bleibt (Ansicht von oben Abb. 1.6 e)). Durch Sputtern wird anschließend eine Metallisierung aufgebracht, so dass die Struktur als Basis für Sensoren und Aktoren genutzt werden kann (Abb. 1.6 f)) [28].

1.3.2 Induktiv angeregtes Plasma (ICP)

Der Bedarf an großflächigen Plasmaquellen mit hoher Plasmadichte für die plasmaunterstützten Produktionsprozesse in der Halbleiterindustrie führte Mitte der 1980iger Jahre zu einem neuerlichen Interesse an induktiv gekoppelten Plasmen

(ICP). Die Vorteile von induktiv gekoppelten Plasmen sind ihre hohe Uniformität über Durchmesser von mehr als 20 cm, niedrige und steuerbare Ionenenergien bei gleichzeitig hohen Plasmadichten sowie eine vernachlässigbare Kontamination durch das Abspattern von Reaktorwänden[29].

Beim konventionellen RIE sind Ionendichte im Plasma und Ionenenergie gekoppelte Parameter und die Ionenenergie hängt von der eingekoppelten Leistung und vom Druck ab. In induktiv angeregten Plasmen wird hingegen das elektrische Wechselfeld zur Ionisierung des Gases und zur Aufrechterhaltung der Plasmaentladung durch Induktion aus dem Magnetfeld einer Spule erzeugt [30].

In ICP-Reaktoren befindet sich eine Spule normalerweise außerhalb um eine zylindrische Plasmakammer, durch die das Ätzgas mithilfe eines leistungsfähigen Vakuumpumpsystems hindurchgeleitet wird (Abb. 1.7). Durch Anlegen einer starken Wechselspannung im Radiofrequenzbereich (typisch 13,56 MHz) entsteht im Innern der Plasmakammer ein starkes zeitlich veränderliches magnetisches Feld. Durch Induktion wird ein elektrisches Feld im Innern der Plasmakammer hervorgerufen, welches das eingeleitete Gas ionisiert [20]. Im Gegensatz zu Parallelplattenreaktoren sind

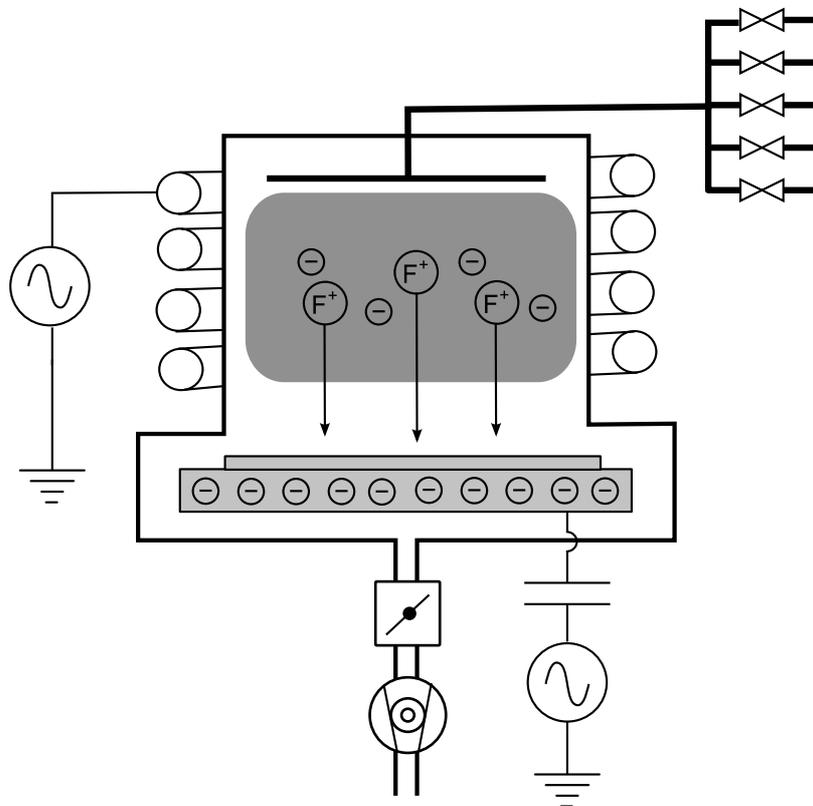


Abbildung 1.7 Prinzip eines induktiv angeregten Plasmareaktors

die elektrischen Feldlinien geschlossen (Abb.1.8), d.h. es entsteht ein elektrisches Wirbelfeld mit lokalen Wirbeldichte

$$\operatorname{rot}E = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} \quad (1.22)$$

Die konkrete Berechnung des elektrischen Feldes ist im Allgemeinen nur numerisch

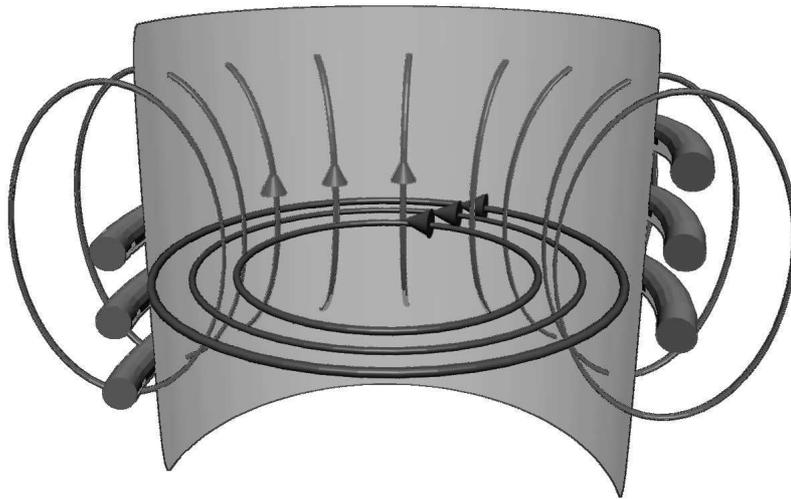


Abbildung 1.8 Plasmaanregung in einem induktiv angeregtem Plasma (ICP). Das magnetische Wechselfeld der Spule ruft ein elektrisches Wirbelfeld im Plasma hervor.

durch aufwändige Simulation (vgl. Abschnitt 5.1.2) möglich.

Um die Energie der auf die Probe auftreffenden Ionen zu steuern, wird die Probe auf einer Elektrode platziert, die mit einer Wechselspannung im Radiofrequenzbereich betrieben wird. Mit jeder positiven Halbwelle werden Elektronen aus dem Plasma zur Probe hin beschleunigt, wodurch diese auf ein negatives Potential aufgeladen wird. Das Potenzial der Probe wird als DC-Bias V_{DC} bezeichnet. Ionen aus dem Plasma werden somit durch das elektrische Feld, welches sich aus der Überlagerung aus DC-Bias, Amplitude der angelegten RF-Spannung und dem Schwebepotenzial ergibt, zur Probe hin beschleunigt. Die Energie der Ionen lässt sich somit unabhängig von der Plasmadichte (Ionenstromdichte) steuern [8; 20].

Die typische Plasmadichte in induktiv angeregten Plasmen liegt bei $10^{10} \dots 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ und ist damit um circa zwei Größenordnungen höher als in Parallelplattenreaktoren.

Die Grenze für eine effiziente induktive Plasmaanregung liegt bei etwa 10^{13} cm^{-3} [20]. Die Plasmadichte steigt in den meisten Fällen linear mit der eingekoppelten Leistung bis hin zu Leistungswerten von 2000 W [31; 32].

Elektronentemperatur

Durch mehrere Gruppen [33; 34] wurden umfangreiche Messungen zur Temperatur der Elektronen verschiedener Gase im induktiv angeregtem Plasma durchgeführt. In [33] wurde die mittlere kinetische Energie der Elektronen in einem induktiv angeregten Cl-Ar-Plasma bei ICP Leistungen von 250 bis 800 W und 18 mTorr Druck im Bereich von 3 bis 7 eV bestimmt. Das entspricht der Temperatur eines idealen Gases von etwa $\approx 20\,000 \dots 50\,000 \text{ K}$. Die kinetische Gastemperatur des Plasmas blieb jedoch im Bereich von 300 bis $\approx 1\,000 \text{ K}$ für hohen Argonanteil und bis $\approx 2\,500 \text{ K}$ für hohen Chloranteil am Gasgemisch vergleichsweise niedrig.

DC-Bias

Bedingt durch die Bauweise von ICP Reaktoren und die Trennung von Plasmaanregung und Probenanregung (Abb. 1.7) lässt sich die DC-Bias-Spannung durch Variation der Elektrodenanregung weitgehend unabhängig von der ICP Leistung einstellen.

Typische ICP-Prozesse

Wegen der hohen Plasmadichte und der Möglichkeit, die Energie der Ionen in weiten Bereichen und unabhängig von der ins Plasma eingebrachten Energie zu steuern, ergeben sich vielfältige Einsatzmöglichkeiten von ICP-Reaktoren. Die meisten Prozesse finden in ICP-Reaktoren bei Drücken von $1 \dots 100 \text{ mTorr}$ statt. Es können jedoch auch Drücke von bis zu 500 mTorr realisiert werden [25]. Typische Ätzprozesse in ICP-Reaktoren sind

- anisotropes Ätzen von Silizium für MEMS Anwendungen mit hohen Ätzraten,
- Ätzen von SiO_2 mit hohen Ätzraten,
- Ätzen von III-V-Halbleitern mit geringer Schädigung der Kristallstruktur [31],
- Sputterätzen von Gold und Platin.

Darüber hinaus lassen sich ICP-Reaktoren auch zur plasmaunterstützten chemischen Deposition von dünnen Schichten (PECVD) verwenden. Dabei werden Ionen mit geringer Energie zur Abscheidung verwendet. Der Druck im Reaktor liegt bei der Filmdeposition bei 1...10 mTorr. Typische Depositionsprozesse in ICP-Reaktoren sind [25]

- Niedertemperatur Abscheidung für die Lift-Off-Technologie,
- Niedertemperatur Abscheidung von hochqualitativem SiO₂,
- Niedertemperatur Abscheidung von polykristallinem Silizium,
- Abscheidung von CF_x Filmen zur Oberflächenpassivierung von Si.

Weil die Temperatur für den Ablauf der Oberflächenreaktionen eine wichtige Rolle spielt, wird die Substratelektrode in solchen Reaktoren mittels Kühl- oder Heizsystemen auf einer definierten Temperatur gehalten [35].

Kapitel 2

Physikalische Eigenschaften von Gasen im Hochvakuum

Die kinetische Gastheorie ist ein Teilgebiet der statistischen Mechanik und erklärt die Gasgesetze und die Eigenschaften von Gasen durch Bewegungsvorgänge ihrer Teilchen. Im Allgemeinen wird dabei ein ausgedehntes Gas angenommen, in dem sich eine extrem große Anzahl von Teilchen befindet, die miteinander in Wechselwirkung stehen. Erstmals wurde diese Theorie von Daniel Bernoulli 1738 aufgestellt. Für stark verdünnte Gase bewegen sich jedoch die Teilchen über Entfernungen, die mit denen der Gefäßgröße vergleichbar sind, ohne miteinander wechselzuwirken. Die dadurch auftretenden Erscheinungen wurden erstmals am Anfang des 20. Jahrhunderts durch Wissenschaftler wie Martin Knudsen und Ludwig Boltzmann grundlegend untersucht [36].

Im folgenden sollen die wichtigsten physikalischen Eigenschaften von verdünnten Gasen kurz vorgestellt werden, weil sie von grundlegender Bedeutung für die Ausbreitung von Reaktanten und Reaktionsprodukten in geätzten Mikrostrukturen sind. Die Darstellung dieses Kapitels folgt im Wesentlichen den Ausführungen in [37].

2.1 Teilchenbewegung

Die einzelnen Atome oder Moleküle eines Gases oder Gasgemisches bewegen sich deterministisch chaotisch¹ im Volumen, welches vom Gas ausgefüllt wird. Teilchen

¹physikalischen Gesetzen folgend, aber ähnliche Anfangszustände führen nicht zu ähnlichen Wirkungen, d.h sie sind nicht der starken Kausalität unterworfen.

können dabei mit anderen Teilchen physikalisch wechselwirken und dabei ihren Impuls in Richtung und Betrag ändern. Die chemische Reaktion von Molekülen wird in diesem Zusammenhang nicht betrachtet.

2.2 Geschwindigkeitsverteilung

In einem ruhenden idealen Gas bewegen sich die Moleküle nicht alle mit der gleichen Geschwindigkeit, sondern unterliegen einer Geschwindigkeitsverteilung. Dabei wird keine Raumrichtung bevorzugt - es handelt sich also um eine Brownsche Molekularbewegung. Die einzelnen Komponenten des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} sind in einem idealen Gas unabhängig voneinander normalverteilt mit den Parametern

$$\mu = 0, \sigma = \sqrt{\frac{k_B T}{m_g}}, \quad (2.1)$$

wobei T die Temperatur des Gases bezeichnet und m_g die Masse der Gasteilchen. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(v_i)$ für jede Komponente $i \in \{x, y, z\}$ ist

$$p(v_i) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{v_i-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad (2.2)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Geschwindigkeit ist - wegen der statistischen Unabhängigkeit der Größen - das Produkt der Wahrscheinlichkeitsdichten der Komponenten

$$p(\vec{v}) = p(v_x)p(v_y)p(v_z) = \left(\frac{m_g}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m_g(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}{2k_B T}}. \quad (2.3)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist in Abb. 2.1 für verschiedene Gase bei konstanter Temperatur und in Abb. 2.2 exemplarisch in für Stickstoff bei verschiedenen Temperaturen abgebildet.

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Molekül eine betragsmäßig geringere Geschwindigkeit als v besitzt, ist gegeben durch

$$P(\|\vec{v}\| \leq v) = \int_{B_v} p(x) dx \quad (2.4)$$

$$= 4\pi \int_0^v r^2 p(r) dr. \quad (2.5)$$

Die Integration erfolgt dabei über das Volumen der Kugel B_v mit dem Mittelpunkt im Ursprung und dem Radius v . Weil im Integranden nur der Betrag des Vektors eine Rolle spielt, kann die Integration über das Volumen der Kugel leicht in das

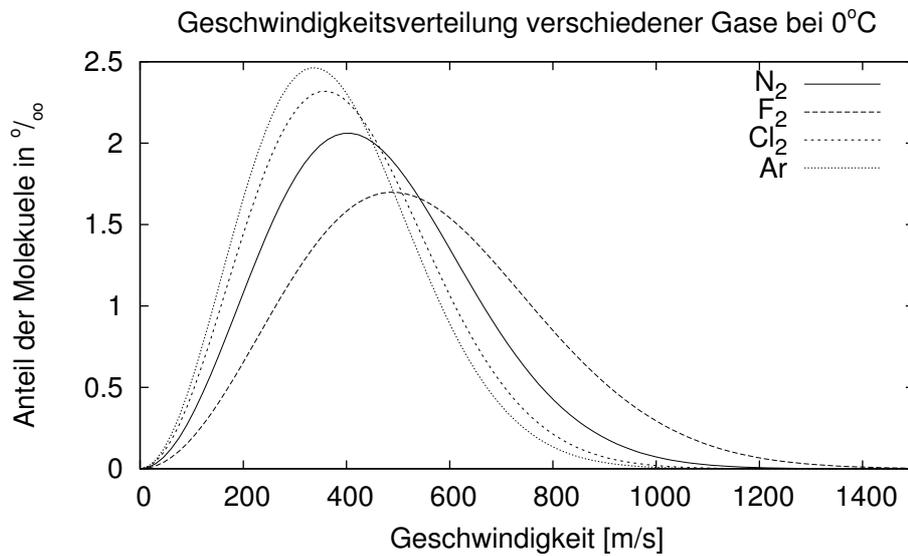


Abbildung 2.1 Maxwell-Boltzmannsche-Geschwindigkeitsverteilung der Gasmoleküle verschiedener Gase bei konstanter Temperatur nach Gl. (2.6).

einfache Integral (2.5) über den Radius überführt werden.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der betragsmäßigen Geschwindigkeit v ergibt sich durch Ableiten von $P(\|\vec{v}\| \leq v)$ nach v zu

$$p(v) = 4\pi \left(\frac{m_g}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{m_g v^2}{2k_B T}}. \quad (2.6)$$

Erstmals abgeleitet wurde diese Verteilung 1860 von James Clerk Maxwell und später von Ludwig Boltzmann fundamental begründet, denen sie auch ihren Namen - Maxwell-Boltzmann-Verteilung - verdankt [38].

Ein wichtiger Kennwert der Maxwell-Boltzmann-Verteilung ist der mittlere Geschwindigkeitsbetrag der Gasmoleküle

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v P(v) dv = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_g}}. \quad (2.7)$$

Für geringe Drücke und hohe Temperaturen gilt die Maxwell-Boltzmann-Verteilung in sehr guter Näherung auch für reale Gase.

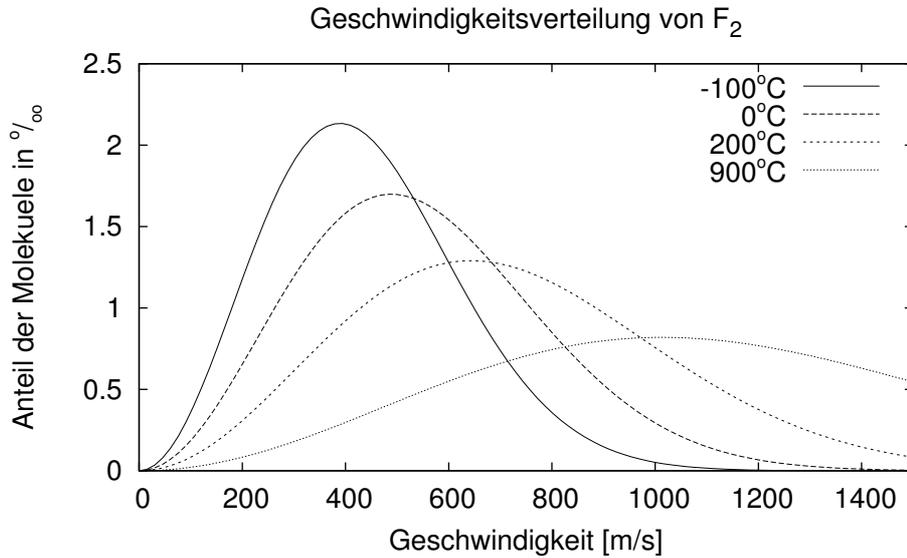


Abbildung 2.2 Maxwell-Boltzmannsche-Geschwindigkeitsverteilung der Gasmoleküle von F₂ für ausgewählte Temperaturen nach Gl. (2.6).

2.3 Kennzahlen von Gasen im Hochvakuum

2.3.1 Mittlere freie Weglänge

Die mittlere freie Weglänge² λ_{MFP} eines Teilchens ist die durchschnittliche Länge, die es ohne Wechselwirkung mit anderen Teilchen zurücklegt. Unter Wechselwirkung versteht man in diesem Zusammenhang jedwede Änderung der Energie oder des Impulses. Die mittlere freie Weglänge hängt dabei entscheidend von der Teilchendichte n sowie dem Wirkungsquerschnitt σ_A ab. Die mittlere freie Weglänge kann abgeschätzt werden, indem man ein zylindrisches Volumenelement mit der Grundfläche σ_A , in welchem sich ein weiteres Teilchen befindet, in Bewegungsrichtung aufgespannt wird. Somit ergibt sich für ein einfaches Gas unter der Voraussetzung einer Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung

$$\lambda_{MFP} = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi d^2 P} \quad (2.8)$$

Dabei ist d der Durchmesser des Wirkungsquerschnitts der Moleküle und P der Druck. In Tabelle 2.1 sind typische Werte für die mittleren freien Weglängen von Gasen bei verschiedenen Drücken bei Normaltemperatur gelistet.

Für Bedingungen, wie sie in Plasmareaktoren herrschen, ergeben sich somit mittlere

²MFP - (engl. mean free path) mittlere freie Weglänge

<i>Druckbereich</i>	<i>Druck P [Pa]</i>	<i>Teilchendichte n [cm^{-3}]</i>	λ_{MFP}
Normaldruck	1.013×10^5	2.7×10^{19}	$\approx 70 \text{ nm}$
Großvakuum	$3 \times 10^4 \dots 10^2$	$10^{19} \dots 10^{16}$	$0.1 \dots 100 \mu\text{m}$
Feinvakuum	$100 \dots 0.1$	$10^{16} \dots 10^{13}$	$0.1 \dots 100 \text{ mm}$
Hochvakuum (HV)	$0.1 \dots 10^{-5}$	$10^{13} \dots 10^9$	$10 \text{ cm} \dots 1 \text{ km}$
Ultrahochvakuum (UHV)	$10^{-5} \dots 10^{-10}$	$10^9 \dots 10^4$	$1 \text{ km} \dots 10^5 \text{ km}$
extr. Ultrahochv. (EHV)	$< 10^{-10}$	$< 10^4$	$> 10^5 \text{ km}$

Tabelle 2.1 Größenordnung der mittlere freie Weglängen für verschiedene Drücke bei Normaltemperatur nach Gl. (2.8). Durchmesser der Wirkungsquerschnitte entnommen aus [39]

freie Weglängen von Gasmolekülen in der Größenordnung von einigen Zentimetern. Für Gasgemische, welche aus mehreren Arten von Teilchen bestehen oder Gase, die sich nicht im thermischen Gleichgewicht befinden, kann die Ermittlung der Wirkungsquerschnitte [39] und der mittleren freien Weglänge sehr aufwändig sein.

2.3.2 Knudsen-Zahl

Die Knudsen-Zahl Kn beschreibt das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge der Gasmoleküle und einer charakteristischen geometrischen Länge L , wie z. B. den Durchmesser eines durchströmten Rohres. Benannt wurde die Kenngröße nach Martin Knudsen (1871-1949), einem dänischen Physiker. Sie ist ein Maß für die Dichte einer Gasströmung

$$Kn = \frac{\lambda_{MFP}}{L} = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi \sigma_A^2 P L}. \quad (2.9)$$

Für $Kn \ll 1$ können - wegen der sehr großen Teilchendichte - die Gesetze der Gasdynamik kontinuierlicher Medien zur Untersuchung herangezogen werden. Im Falle einer großen Knudsen-Zahl ($Kn \gg 1$) gelten hingegen die kinetischen Gesetze der Gastheorie stark verdünnter Medien. Je nach Größe der Knudsen-Zahl unterscheidet man die in Abb. 2.3 dargestellten Strömungsregimes.

Für typische Strukturen beim Plasmaätzen mit charakteristischen Längen zwischen 10 nm und 1000 μm liegen die Knudsen-Zahlen bei weit über einhundert. Zur Modellierung von Transportphänomenen innerhalb solcher Strukturen müssen deshalb die Gesetze der kinetischen Gastheorie in stark verdünnten Medien herangezogen werden.

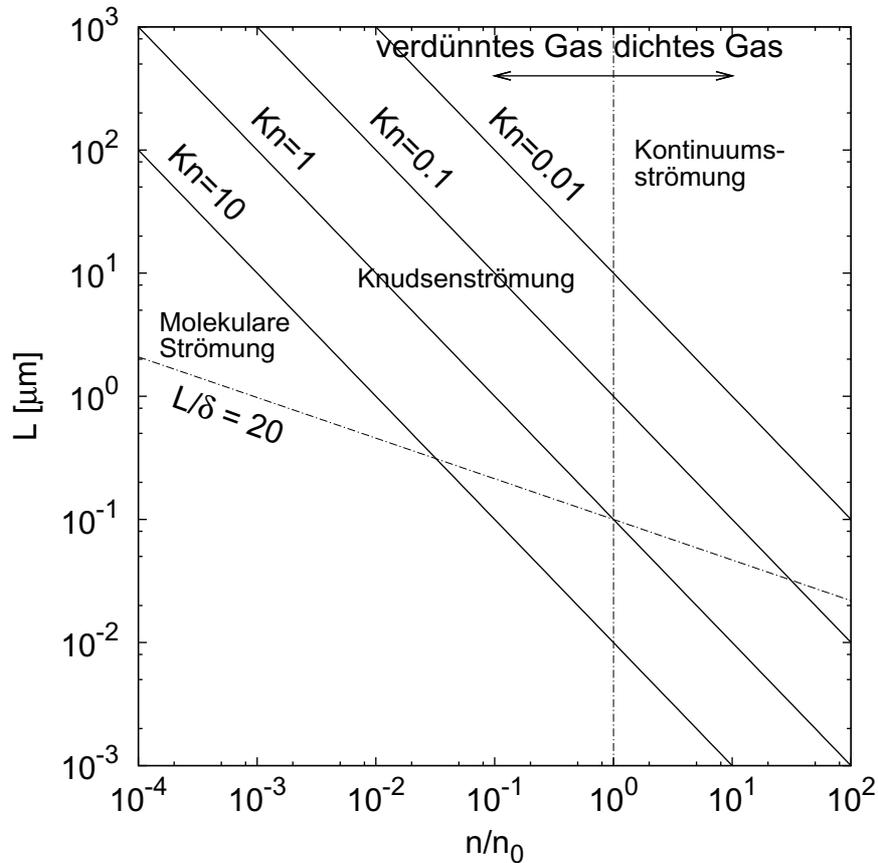


Abbildung 2.3 Strömungsregimes für verschiedene Knudsen-Zahlen und Grenzen der Gültigkeit von Gasflussmodellen. L ist die charakteristische Größe von Strukturen und n/n_0 die Teilchendichte bezogen auf die Teilchendichte bei Normalbedingungen. Die Linien der Knudsen-Zahlen gelten für Luft. Statistische Abweichungen der Teilchenbewegung spielen unterhalb der Linie $L/\delta = 20$ bei der Modellierung eine Rolle. (reproduziert nach [40])

2.3.3 Diffusion

Diffusion in Gasen und Gasgemischen wird durch die thermische Eigenbewegung der Moleküle oder Atome und gelegentlichen Stößen untereinander hervorgerufen. Es findet im mesoskopischen Bereich ein Stofftransport entlang des Konzentrationsgradienten $\frac{\partial n}{\partial x}$ statt. Die Teilchenstromdichte ϕ in Gasen wird durch das erste Ficksche Gesetz (Gl. (2.10)) beschrieben, wobei der Diffusionskoeffizient D einen stoffspezifischen - nicht notwendigerweise konstanten - Wert darstellt

$$\phi = D \frac{\partial n}{\partial x}. \quad (2.10)$$

Unter Zuhilfenahme der Kontinuitätsgleichung von der Erhaltung der Masse [6] (Gl. (2.11))

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.11)$$

und dem Ersten Fickschen Gesetz (Gl. (2.10)) erhält man die Diffusionsgleichung (Gl. (2.12))

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial n}{\partial x} \right) \quad (2.12)$$

bzw. für konstante Diffusionskoeffizienten

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}. \quad (2.13)$$

Die Diffusionsgleichung (Gl. (2.12)) wird auch 2. Ficksches Gesetz genannt und beschreibt im Gegensatz zu (Gl. (2.10)) instationäre, d. h. zeitlich und räumlich veränderliche, Diffusionsflüsse [41].

Die Diffusionsgesetze gelten unter den Voraussetzungen, dass sich die Gasteilchen im mikroskopischen Bereich zufällig bewegen und das Gas im mesoskopischen Bereich als Kontinuum betrachtet werden kann. Anders ausgedrückt, gelten die Diffusionsgesetze nur, wenn sich innerhalb des betrachteten Volumens in dem Diffusion stattfindet, genügend Teilchen vorhanden sind und diese genügend oft wechselwirken. Das ist nur bei kleinen Knudsen-Zahlen ($Kn < 0.1$) der Fall.

2.3.4 Molekulare Strömung

Im Fall kleiner Drücke sind die Stöße von Gasteilchen praktisch zu vernachlässigen und es stellt sich eine molekulare Strömung ein. Die Voraussetzungen für die Anwendung der Diffusionsgleichungen sind in diesem Falle nicht mehr erfüllt [37]. In abgegrenzten Volumina bewegen sich die Teilchen praktisch unabhängig voneinander und Interaktionen finden fast ausschließlich mit den Gefäßwänden statt.

2.3.5 Reflexion an Oberflächen

Bei der Interaktion von Gasteilchen mit festen Oberflächen ändert sich i.A. der Impuls oder die Energie der auftreffenden Teilchen oder beides³.

Eine detaillierte Untersuchung des Energie- und Impulstransfers an Oberflächen ist

³Die chemische Reaktion von Gasmolekülen mit dem Festkörper soll in diesem Zusammenhang noch keine Rolle spielen.

extrem aufwändig und erfordert die genaue Untersuchung der Streufunktionen [40, Seite 63]. Meist ist es ausreichend, die durchschnittlichen Parameter der Reflektionsseigenschaften zu kennen.

Experimentelle Untersuchungen des Wandstoßes haben ergeben, dass bei technischen Oberflächen die Emission in guter Näherung diffus ist [37]. Diffuse Reflexion tritt auf, wenn die Rauigkeit einer Oberfläche in der gleichen Größenordnung wie die Wellenlänge der Strahlung liegen. Aufgrund des Welle-Teilchen-Dualismus von Materie lässt sich den Atomen oder Molekülen eines Gases, eine entsprechende Wellenlänge - die de-Broglie-Wellenlänge - zuordnen [42]. Die de-Broglie-Wellenlänge eines Teilchens (Gl. (2.14)) mit dem Impuls p ergibt sich zu

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}, \quad (2.14)$$

wobei h das Plancksche Wirkungsquantum darstellt. Im Falle großer Teilchengeschwindigkeiten muss der relativistische Impuls in Gl. (2.14) verwendet werden.

Für ein Gas der Temperatur T sind die Teilchengeschwindigkeiten annähernd Maxwell-Boltzmann verteilt und es lässt sich eine mittlere thermische de-Broglie-Wellenlänge angeben

$$\lambda_{therm} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}}. \quad (2.15)$$

In Tabelle 2.2 sind die thermischen Wellenlängen für ausgewählte Spezies, wie sie in Plasmaätzreaktoren vorkommen, aufgeführt. Sie liegen nur eine Größenordnung unter dem Gitterparameter von Silizium ($\approx 543,1$ pm). Bereits 1933 wurde eine Abhängigkeit der Reflexion von Materiestrahlen an Kristalloberflächen von der de-Broglie-Wellenlänge beobachtet [43].

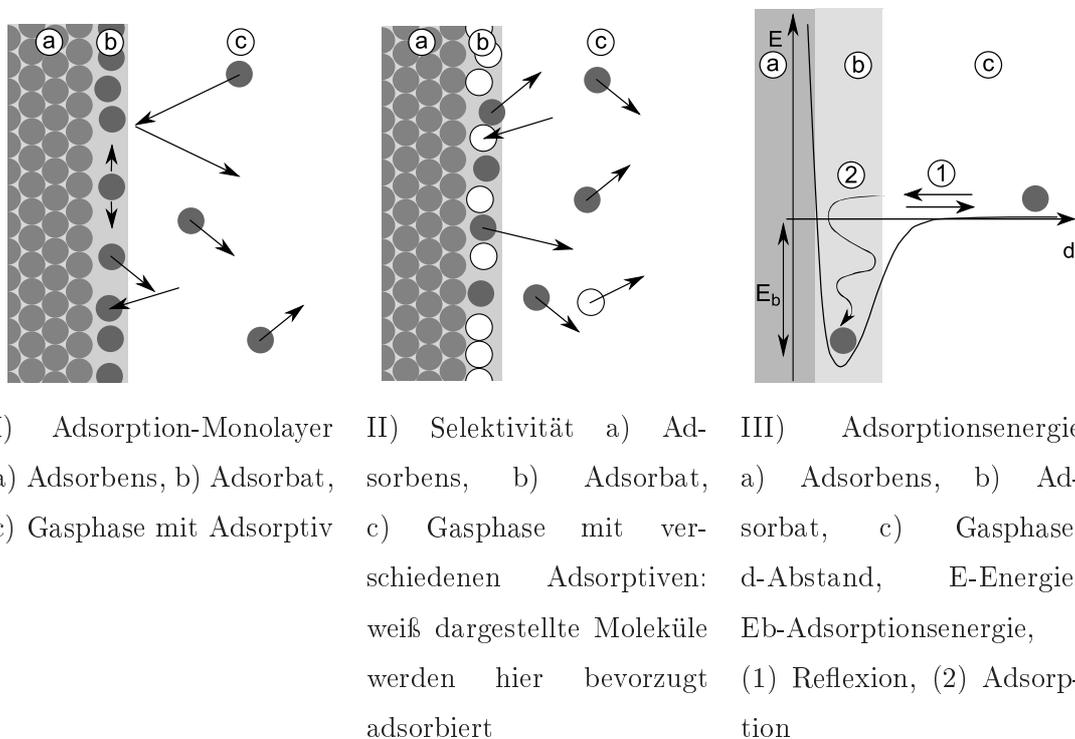
Eine weitere Theorie, die die diffuse Reflexion neutraler Partikel an Oberflächen

Gas	Molekülmasse [u]	λ_{therm} [pm]
Argon	39.95	16.13
F	19.00	23.39
Cl	35.45	17.12
C ₄ F ₈	200.03	7.21
SF ₆	146.06	8.44
CF ₂	50.01	14.42

Tabelle 2.2 Thermische Wellenlänge ausgewählter Spezies bei 20° C nach Gl. (2.15)

erklärt, geht von einer dominierenden physikalischen Adsorption⁴ und Desorption von Gasteilchen an der Oberfläche aus. Physikalische Adsorption und Desorption streben dabei ein Gleichgewicht an (stationärer Prozess) [44]. Adsorbierte Teilchen bilden im Gegensatz zu chemischen Reaktionen keine chemischen Bindungen mit Oberflächenatomen, sondern werden größtenteils durch van-der-Waals-Kräfte an die Oberfläche gebunden [37].

Wenn Gasteilchen die Oberfläche treffen, so werden diese entweder reflektiert oder adsorbiert (Abb. 2.4a). Bei der Adsorption geben die Teilchen ihre kinetische Energie und die Adsorptionsenergie E_b ab, die in Form von Wärme frei wird (Abb. 2.4c). Bei



I) Adsorption-Monolayer II) Selektivität III) Adsorptionsenergie
a) Adsorbens, b) Adsorbat, a) Adsorbens, b) Ad- sorbat, a) Adsorbens, b) Ad- sorbat, c) Gasphase mit Adsorptiv, c) Gasphase mit ver- schiedenen Adsorptiven: d-Abstand, E-Energie, weiß dargestellte Moleküle werden hier bevorzugt adsorbiert (1) Reflexion, (2) Adsorp- tion

Abbildung 2.4 Adsorption einer einlagigen Molekülschicht aus der Gasphase. Vereinfacht nach [37]

der Desorption verlassen die Teilchen mit ähnlich viel Energie die Oberfläche wieder, weil diese Reaktionen in der Regel nicht durch Übergangszustände gehemmt werden. Die Aktivierungsenergie E_a der Reaktion ist daher gleich der Adsorptionsenergie E_b . Beim Verlassen der Oberfläche haben die Teilchen allerdings jede Information über

⁴Adsorption ist die Anlagerung von Teilchen aus Flüssigkeiten oder Gasen an der Oberfläche von eines Festkörpers

die ursprüngliche Richtung des Impulses verloren. Die Desorption folgt dem Lambertschen Gesetz, d. h. die Strahldichte ist in alle Richtungen gleich [37].

Adsorbierte Teilchen besitzen keinen festen Bindungsort an der Oberfläche und können sich nahezu frei bewegen. Dieser Umstand führt zu einer Oberflächendiffusion von Teilchen entlang ihres Konzentrationsgradienten.

Der Gleichgewichtszustand hängt stark von der Temperatur und dem Partialdruck des Gases ab. Bei Normaltemperatur und niedrigem Druck bildet sich im Idealfall eine monomolekulare Schicht aus.

Für die Adsorption monomolekularer Schichten ist der Belegungsgrad Θ , definiert als Verhältnis von der Zahl der adsorbierten Moleküle N und der maximalen Anzahl von belegbaren Oberflächenplätzen N_{max} (Gl. (2.16))

$$\Theta = \frac{N}{N_{max}}. \quad (2.16)$$

Messtechnisch wird der Belegungsgrad im Allgemeinen durch Verwendung von Adsorptionsisothermen ermittelt, bei denen die Temperatur konstant gehalten wird [45; 46]

$$\Theta = f(p, T) |_{T_{const}}. \quad (2.17)$$

Die einfachste Beschreibung von Adsorptionsisothermen für nichtporöse Oberflächen ist die im folgenden Abschnitt vorgestellte Langmuir-Isotherme [47].

2.3.6 Langmuir-Isotherme

Sobald ein Gas in Kontakt mit der Oberfläche eines festen oder flüssigen Körpers kommt, etabliert sich ein Gleichgewicht zwischen den Teilchen, die sich frei im Gas bewegen mit denen die an der Oberfläche gebunden sind.

Die Langmuir-Isotherme wurde 1916 von Irving Langmuir [48] entwickelt, um die Oberflächenbedeckung eines adsorbierten Gases in Abhängigkeit vom Druck des Gases an der Oberfläche bei konstanter Temperatur zu beschreiben. Neben der Langmuir-Isotherme gibt es einige weitere Typen von Isothermen (Temkin, Freundlich) die sich in den Annahmen über die Beschaffenheit der Oberfläche unterscheiden. Obwohl die Langmuir-Isotherme eine der einfachsten ist, können grundlegende Abhängigkeiten der Oberflächenbedeckung vom Druck des Gases abgeleitet werden. Die Ableitung der Langmuir-Isotherme in diesem Abschnitt folgt, soweit nicht anders angegeben, den Ausführungen in [Masel 49].

Die Idee, welche zum Bedeckungsmodell von Langmuir führte, ist die Bedeckung der Oberfläche durch eine einlagige (monomolekulare) Schicht von Gasmolekülen oder -atomen. Weiterhin wird angenommen, dass nur ein Gas adsorbiert wird.⁵ Bei vorgegebener und konstanter Temperatur wird angenommen, dass ein Teil der Oberfläche mit Gasmolekülen bedeckt ist und der Rest nicht. Zwischen den Gasteilchen im freien Gas und denen an der Oberfläche stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht ein, so dass im Mittel pro Zeiteinheit gleich viele Teilchen von der Oberfläche adsorbiert, wie desorbiert werden. Eine mathematische Beschreibung der Adsorption und Desorption an einer Oberfläche liefert Gl. (2.18). Darin sind die Gasmoleküle mit Q , die freien Oberflächenplätze mit \circ und die belegten Oberflächenplätze mit \bullet bezeichnet



Für das Gleichgewicht der Adsorptions- und Desorptionsraten r_{ad}, r_{des} gilt dann Gl. (2.19), wobei n_Q die Konzentration, d.h. Anzahl der Gasmoleküle pro Volumeneinheit an der Grenzfläche, H_\circ die freien und H_\bullet die belegten Plätze pro Einheitsfläche an der Oberfläche des Festkörpers darstellen

$$\begin{aligned} r_{ad} &= r_{des} \\ k_1 n_Q H_\circ &= k_2 H_\bullet. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Nach Umstellung ergibt sich mit $K = \frac{k_1}{k_2}$

$$\frac{H_\circ}{H_\bullet} = \frac{k_2}{k_1 n_Q} = \frac{1}{K n_Q}. \quad (2.20)$$

Die Gesamtzahl der Adsorptionsplätze pro Fläche ist $H = H_\bullet + H_\circ$ und der Bedeckungsgrad Θ_Q

$$\Theta_Q = \frac{H_\bullet}{H} = \frac{H_\bullet}{H_\circ + H_\bullet} = \frac{1}{1 + \frac{H_\circ}{H_\bullet}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{K n_Q}} = \frac{K n_Q}{K n_Q + 1} \quad (2.21)$$

Setzt man weiterhin ein ideales Gas voraus und nimmt eine feste Grenzfläche an, so gilt das allgemeine Gasgesetz (Gl. (2.23)) und es ergibt sich die Konzentration n_Q

$$P V = N k_B T \quad (2.22)$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{P}{k_B T} \quad \Longrightarrow \quad n_Q = \frac{N_Q}{V} = \frac{P_Q}{k_B T}. \quad (2.23)$$

⁵Die Adsorption eines Gasgemisches lässt sich durch adequate Linearkombination der Parameter ableiten

Die druckabhängige Langmuir-Isotherme (Gl. (2.24)) erhält man durch Einsetzen von Gl. (2.23) in Gl. (2.21) und dem Langmuir-Koeffizienten $K_L = \frac{K}{k_B T} \Big|_{T=\text{const.}}$

$$\Theta_Q = \frac{K_L P_Q}{K_L P_Q + 1}. \quad (2.24)$$

Der Verlauf der Langmuir Isotherme für verschiedene Werte von K_L ist in Abb. 2.5 dargestellt.

Die Langmuir-Isotherme geht von einigen Vereinfachungen aus, die an realen Ober-

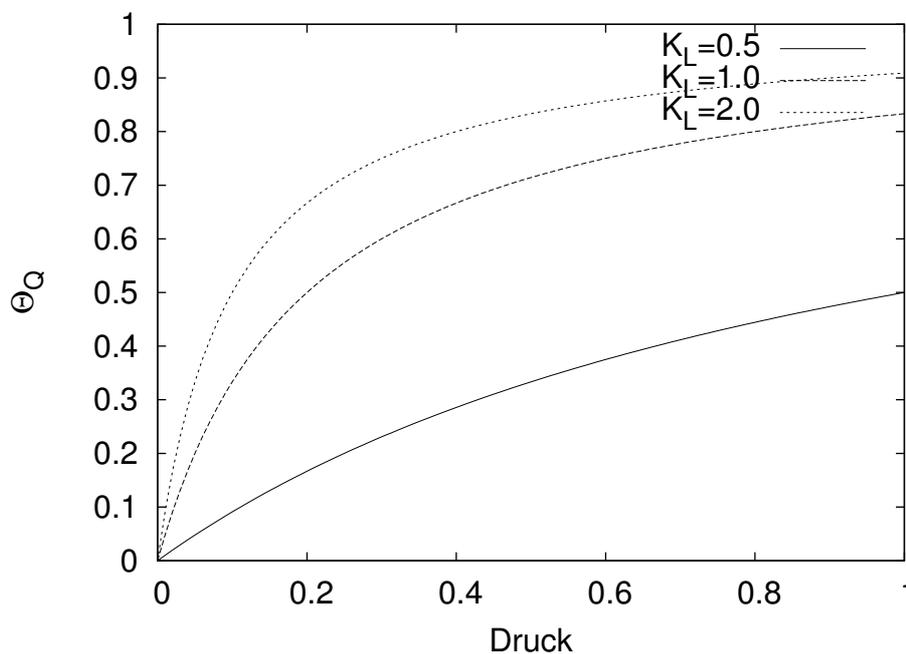


Abbildung 2.5 Verlauf der Langmuir-Isotherme für verschiedene K_L

flächen nur näherungsweise zutreffen. Eine der Hauptannahmen ist, dass alle Adsorptionsplätze gleich “aktiv” sind. Für ausgedehnte reale Oberflächen trifft dies im Allgemeinen nicht zu. Ein verbessertes Modell müsste ein spezifisches K_L für die verschiedenen Zonen berücksichtigen.

Weiterhin findet der Einfluß von bereits adsorbierten Molekülen auf die freien Adsorptionsplätze in deren Umgebung keine Berücksichtigung. Große Gasmoleküle, wie z. B. Fragmente von Kohlenwasserstoffketten, belegen unter Umständen mehr als einen Adsorptionsplatz auf der Oberfläche. Ebenso müssen die adsorbierten Moleküle nicht notwendigerweise den Molekülen in der Gasphase entsprechen. Beispielsweise adsorbiert Nickel Wasserstoff als Atom, während der Wasserstoff in der Gasphase als Molekül auftritt. Die Annahme, dass die Gasmoleküle in einer Monolage auf der

Oberfläche adsorbiert werden, ist ebenfalls nur unter bestimmten Umständen, wie z.B. im Falle geringen Druckes, zutreffend.

Kapitel 3

Transportmechanismen der Reaktanten

In Niederdruckplasmen, wie sie in Ätzreaktoren zum Einsatz kommen, werden die eingeleiteten verdünnten Gase durch Energieeintrag ionisiert und Gasmoleküle in Fragmente zerlegt. Im Plasma sind deshalb in der Regel viele verschiedene Spezies von geladenen und ungeladenen Atomen und Molekülen vorhanden. Diese lassen sich nach ihrer Ladung einteilen in

- ungeladenen Atome, Moleküle und Molekülfragmente,
- einfach oder mehrfach positiv geladenen Ionen,
- negativ geladene Ionen,
- Elektronen (mit einfacher negativer Elementarladung).

In Plasmen, wie sie für die Prozesse der Mikrostrukturtechnik verwendet werden, dominieren in der Regel die positiven Ionen [8] und enthalten nur, i. d. R. vernachlässigbar wenige, negative Ionen [50]. Wegen der Quasineutralität des Plasmas, entspricht die Anzahl der freien Elektronen in etwa dem der positiven Ladungen der Ionen.

Die Bewegung der Spezies im Plasma, in der Randschicht und im Innern der geätzten Strukturen sind bestimmt durch

- die thermische Bewegung und Stöße der Teilchen mit Impulstransfer,
- elektrische und magnetische Felder im Fall von geladenen Spezies,

- magnethydrodynamisches Verhalten des Plasmas.

Wegen der unterschiedlichen Ladung und Temperatur¹ der Spezies im Reaktor üben die bestimmenden Mechanismen unterschiedlich starken Einfluss auf die verschiedenen Arten von Spezies aus.

3.1 Winkel- und Energieverteilungsdichtefunktion

In einem ruhenden idealen Gas bewegen sich die Gasmoleküle ungeordnet mit gleicher Wahrscheinlichkeit in alle Raumrichtungen und mit einer Maxwell-Boltzmannschen-Geschwindigkeitsverteilung, die von der Temperatur des Gases abhängig ist (s. Abschn. 2.2).

In Niederdruckplasmen, wie sie für die Mikrostrukturierung von Oberflächen eingesetzt werden, befinden sich die Spezies jedoch nicht mehr im thermodynamischen Gleichgewicht und werden außerdem durch elektrische und magnetische Kraftfelder aus der Ruhelage gebracht.

Eine statistische Beschreibung der Teilchenbewegungen in Plasmen liefern die Winkel- und Energieverteilungsdichtefunktionen² der jeweiligen Spezies. Die Richtung in der sich ein Teilchen bewegt, ist eine Zufallsgröße, deren Wahrscheinlichkeit vom Raumwinkel $\vec{\omega}$ abhängt. Die Winkelverteilungsdichtefunktion³ $\mathcal{ADF}(\vec{x}, \vec{\omega})$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der Zufallsvariable. Aus ihr lässt sich die Wahrscheinlichkeit berechnen, dass sie ein Teilchen in einem Raumwinkel Ω bewegt

$$P(\vec{x}, \Omega) = \int_{\Omega} \mathcal{ADF}(\vec{x}, \vec{\omega}) d\omega. \quad (3.1)$$

Die Energieverteilungsdichtefunktion⁴ $\mathcal{EDF}(\vec{x}, E)$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der kinetischen Teilchenenergie. Mit ihr lässt sich die Wahrscheinlichkeit, dass die Energie eines Teilchens zwischen zwei Werten a und b liegt, berechnen. Im allgemeinen Fall hängt die Winkelverteilung der Spezies auch von deren Energie ab. Zu einer vollständigen Beschreibung aller Teilchen einer Spezies ist somit eine Winkel-Energie-Verteilungsdichtefunktion $\mathcal{AEDF}(\vec{x}, \vec{\omega}, E)$ notwendig. In vielen Fällen ist

¹Im Plasma herrscht kein thermisches Gleichgewicht.

²oftmals wird von Winkel- und Energieverteilungsfunktionen gesprochen. Mathematisch handelt es sich jedoch um die Wahrscheinlichkeitsdichten der jeweiligen Zufallsgrößen

³aus dem Englischen: \mathcal{ADF} angular distribution function

⁴aus dem Englischen: \mathcal{EDF} energy distribution function

jedoch die Beschränkung auf Teilchen bestimmter Energien (z. B. der mittleren Teilchenenergie) ausreichend und sinnvoll.

Durch die Ausnutzung von Symmetrien oder die Projektion auf Schnittflächen kann die \mathcal{ADF} vielfach auf ebene Winkel anstelle von Raumwinkeln vereinfacht werden. In den nachfolgenden Erläuterungen wird der Ortsparameter \vec{x} weggelassen, sofern das betrachtete Raumgebiet aus dem Kontext ersichtlich ist.

3.2 Ungeladene Reaktanten

Der überwiegende Teil von Partikeln in einem Plasma zur Mikrostrukturierung besteht aus neutralen Gasmolekülen oder deren Fragmenten. Weil der Ionisierungsgrad in ICP Plasmen typischerweise nur $10^{-3} \dots 10^{-6}$ ist, hat die Konzentration dieser Atome und Moleküle eine große Auswirkung auf die lokale Ätzrate. Neutrale Reaktanten im Plasma entstehen durch Dissoziation und bei höheren Drücken auch durch Neutralen- und Ionenrekombination [51; 52].

3.2.1 Winkel- und Energieverteilungsfunktionen

Die Bewegung neutraler Atome und Moleküle wird durch die elektrischen und magnetischen Felder im Reaktor nicht beeinflusst. Die Geschwindigkeit der Gaströmung im Reaktor, die durch die Einleitung und das Vakuumpumpsystem hervorgerufen wird, ist gegenüber den Teilchengeschwindigkeiten (vgl. Abschnitt 2.2) mit wenigen cm/s vernachlässigbar gering. Auch der äußerst schwache Einfluss des Gravitationsfeldes der Erde kann im Allgemeinen vernachlässigt werden.

Die Bewegungsrichtung von neutralen Atomen und Molekülen im Plasma ist somit gleich verteilt (isotrop) in allen Raumrichtungen. Die \mathcal{ADF} ist unter den angenommenen Näherungen deshalb konstant

$$\mathcal{ADF}_{neutral}(\vec{\omega}) = \frac{1}{4\pi} \quad (3.2)$$

In kalten Plasmen, wie sie in Mikrostrukturierungsprozessen verwendet werden, wird die eingebrachte Energie fast ausschließlich auf die Elektronen übertragen (vgl. Abschn. 1.2.2) und aufgrund einer geringen Stoßwahrscheinlichkeit kommt es nur zu einer geringen Temperaturerhöhung der Ionen und neutralen Spezies. In guter Näherung kann daher die Maxwell-Boltzmannsche Geschwindigkeitsverteilung für den

Betrag der Teilchengeschwindigkeiten angenommen werden. Die Energieverteilungsfunktion unter der Annahme, dass die Gasteilchen lediglich kinetische Energie besitzen, lässt sich aus der Maxwell-Boltzmann-Geschwindigkeitsverteilung (Gl. (2.6)) ableiten zu Gl. (3.3) [53]

$$\mathcal{E}DF_{neutral}(E_{kin}) = 2\sqrt{\frac{E_{kin}}{\pi(k_B T)^3}} e^{-\frac{E_{kin}}{k_B T}} \quad (3.3)$$

Die Energieverteilungsdichtefunktion des idealen Gases ist für ausgewählte Temperaturen in Abb. 3.1 dargestellt. Allerdings gibt es einen kleinen Teil der neutralen

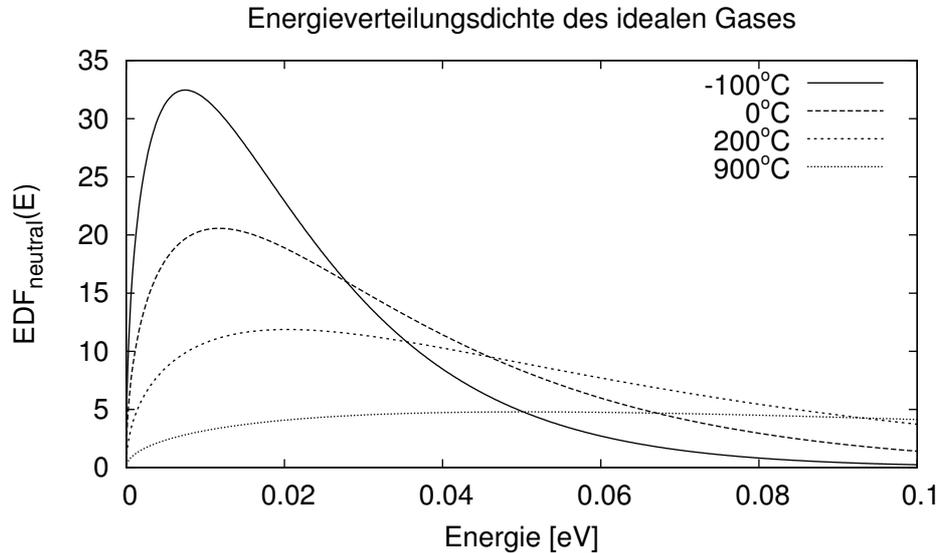


Abbildung 3.1 Energieverteilungsdichtefunktion $\mathcal{E}DF_{neutral}$ des idealen Gases nach Gl. (3.3) für ausgewählte Temperaturen.

Teilchen, die aus Ionen durch Elektroneneinfang oder -abgabe entstanden sind. Diese können durch elektrische und magnetische Felder während ihrer Ionisierung stark abweichende Energie- und Winkelverteilungsdichtefunktionen besitzen.

3.2.2 Diffuse Reflexion

In Ätzreaktoren herrscht mit guter Näherung das Knudsen-Flussregime (vgl. Abschn. 2.3.2), bei dem die mittlere freie Weglänge der Teilchen groß gegenüber den charakteristischen Abmessungen der geätzten Strukturen ist und somit Teilchenkollisionen innerhalb dieser Strukturen nur äußerst selten stattfinden.

Treffen neutrale Teilchen auf feste Oberflächen, so können sie physikalisch adsorbiert werden, chemisch mit Reaktionspartnern auf der Oberfläche reagieren oder – insbesondere an chemisch inaktiven Oberflächen – reflektiert werden. Schon in den grundlegenden Arbeiten von Knudsen wurde festgestellt [54], dass die Reflexion von neutralen Teilchen an chemisch inaktiven Oberflächen mit sehr guter Näherung dem Lambertschen Kosinus-Gesetz folgt. In [55; 56] wurde diese Hypothese ausführlich untersucht und sowohl empirisch als auch theoretisch bestätigt (s. Abschn. 2.3.5). Das Lambertsche Kosinus-Gesetz besagt, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte f_d der Richtung der reflektierten Teilchen kosinusverteilt und unabhängig vom Einfallswinkel der Teilchen ist. Die Wahrscheinlichkeit ds , dass ein Teilchen die Oberfläche im Raumwinkel $d\omega$ im Winkel θ_\perp zur Normalenrichtung verlässt, ist nach dem Lambertschen Kosinusgesetz [56]

$$ds = \frac{\cos \theta_\perp}{\pi} d\omega. \quad (3.4)$$

Die geometrischen Verhältnisse sind in Abb.3.2 skizziert. In [56] wird die diffuse

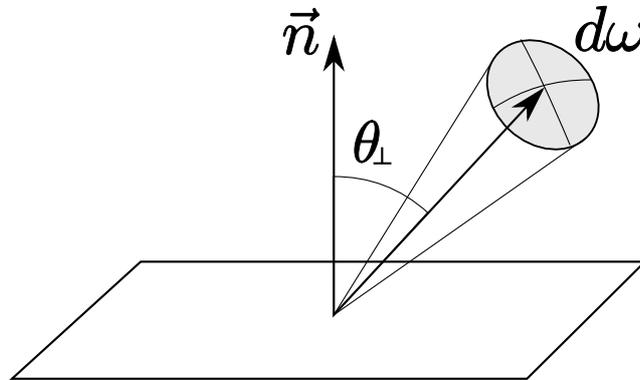


Abbildung 3.2 $d\omega$ ist der Raumwinkel in Lamberts Kosinusgesetz. Die Winkelverteilungsfunktion der reflektierten Teilchen ist unabhängig von der Einstrahlungsrichtung

Reflexion aus der fraktalen Mikrostruktur der Oberfläche abgeleitet. Die Annahme einer diffusen Reflexion von neutralen Teilchen an Oberflächen wird ebenfalls von Coburn und Winters [44] zur Abschätzung von Flussverteilung innerhalb geätzter Strukturen vorausgesetzt.

Die diffuse Reflexion von Neutralen an Oberflächen bildet die Grundlage der in dieser Arbeit abgeleiteten Methode zur Flussverteilung in geätzten Strukturen.

3.2.3 Abschattung

Aufgrund der gegenüber den Dimensionen der Mikrostrukturen großen Ausdehnungen des Plasmas und des Substrates, ist praktisch die gesamte Hemisphäre über einem kleinen Gebiet des Substrates vom Plasma bzw. dessen Randschicht bedeckt. Die neutralen Atome und Molekülen erreichen die Oberfläche diffus aus dem Plasma und besitzen somit eine Lambertsche-Kosinusverteilung an der Oberfläche des Substrates (Abb. 3.3 links). Der gesamte Fluss von Teilchen aus dem Plasma erreicht somit die Oberfläche. Innerhalb von geätzten Strukturen ist der Raumwinkel unter

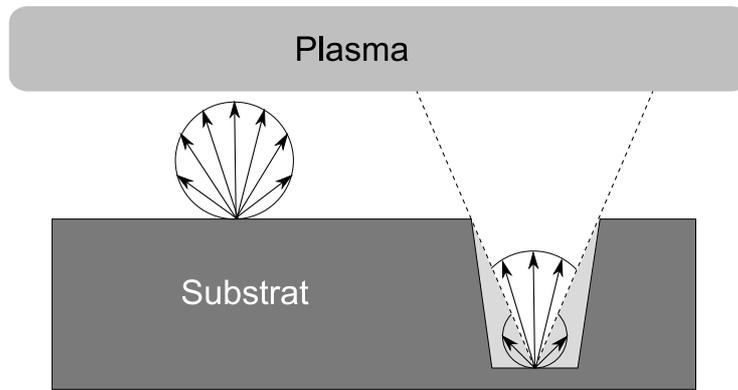


Abbildung 3.3 *Lambertsche-Kosinusverteilungsfunktion der einfallenden Teilchen (links) auf der Oberseite des Substrates. Innerhalb der Struktur (rechts) ist der direkte Teilchenfluss aus dem Plasma durch die Seitenwände begrenzt. Ein geringerer Anteil des Teilchenflusses in abgeschatteten Bereichen entsteht durch Reflexion an den Seitenwänden. Die Pfeile zeigen die Teilchenflussdichte in der jeweiligen Richtung an.*

dem das Plasma erscheint, durch die Seitenwände der Struktur selbst eingeschränkt. Der direkte Fluss von Teilchen ist deshalb durch den Raumwinkel den die Plasmaoberfläche einnimmt, reduziert (Abb. 3.3 rechts).

Für spezielle Geometrien, wie z. B. den Mittelpunkt am Boden eines kreisrunden Loches, lässt sich der Grad der Abschattung sh , d. h. der Anteil des abgeschatteten Raumwinkels an der gesamten sichtbaren Hemisphäre, direkt aus der Raumwinkelbeziehung (Abb. 3.4) errechnen

$$\begin{aligned}
 sh_{\circ, \text{Boden}}(A) &= \frac{\int_{\Omega_{\circ}} d\omega}{\int_{\Omega_{HK}} d\omega} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega_{\circ}} d\omega \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\arctan \frac{A}{2}} \sin \theta_{\perp} d\theta_{\perp} d\phi \\
 &= 1 - \frac{2}{\sqrt{4+A^2}}
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Darin ist $A = D/W$ das so genannte Aspektverhältnis, welches die Ätztiefe D zur kleinste Breite oder dem kleinsten Durchmesser W ins Verhältnis setzt. Für

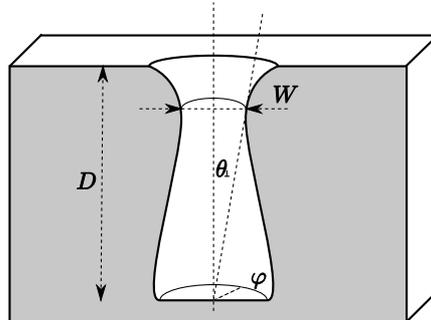


Abbildung 3.4 Geometrische Beziehungen an einer rotationssymmetrischen geätzten Struktur. W ist der kleinste Durchmesser der Struktur, D die Tiefe.

(unendlich) lange Gräben erhält man durch äquivalente Betrachtung den Grad der Abschattung zu

$$\begin{aligned}
 sh_{\perp, \text{Boden}}(A) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega_{\perp}} d\omega \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\arctan \frac{A}{2}}^{\arctan \frac{A}{2}} \int_0^{\pi} \sin \theta_{\perp} d\theta_{\perp} d\phi \\
 &= \frac{2 \arctan \frac{A}{2}}{\pi}
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Der Grad der Abschattung für die beiden Spezialfälle ist in Abb. 3.5 dargestellt.

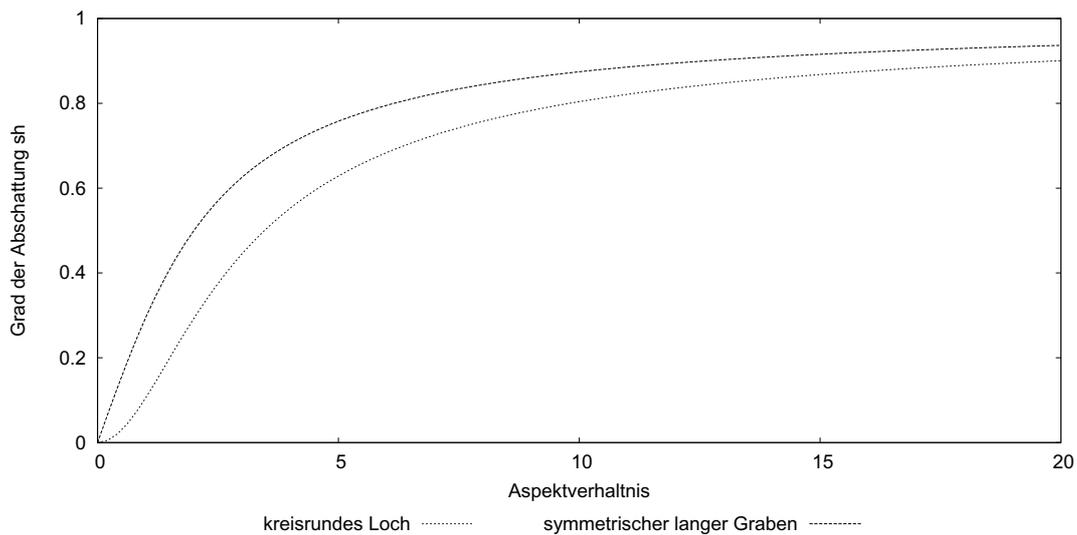


Abbildung 3.5 Abschattung am Mittelpunkt rotationssymmetrischer Löcher nach Gl. (3.5) und an der Symmetrielinie von langen Gräben nach Gl. (3.6)

Im Allgemeinen existieren jedoch keine geschlossenen Formen und die Abschattung

muss numerisch bestimmt werden.

Durch Reflexion an anderen Teilen der Oberfläche erreichen den betrachteten Ort jedoch auch Teilchen aus anderen Raumrichtungen. Der Anteil des indirekten Teilchenflusses ist anteilig umso größer, je kleiner der Raumwinkel ist, den die Plasmaoberfläche einnimmt.

Die Selbstabschattung von Strukturen und die damit verbundene Reduzierung der Teilchenflussdichte ist eine wichtige Ursache für unterschiedliche Ätzraten an verschiedenen Orten der Substratoberfläche.

3.3 Ionen

Niederdruckplasmen zur Mikrostrukturierung enthalten in der Regel fast ausschließlich einfach positiv geladene Ionen [8].

Eine der wenigen Ausnahmen bildet SF_6 , in dem negativ geladene Fluorionen (F^-) eine wesentliche Rolle spielen. In Abb. 3.6 sind die Konzentrationen von ionisierten und neutralen Spezies in einem elektronegativen SF_6 und in einem elektropositivem C_4F_8 Plasma berechnet. Die Berechnung basiert auf dem Volumenreaktionsmodell, welches im NanoPlasma-Projekt entwickelt und zur Simulation herangezogen wird.

3.3.1 Winkel- und Energieverteilungsfunktionen

Im Innern des Plasmas herrscht in Größenordnungen oberhalb der Debyelänge Quasineutralität und bei hohen Plasmafrequenzen bleiben die Ionen aufgrund ihrer gegenüber den Elektronen viel höheren Masse unbeeinflusst vom elektrischen Anregungsfeld (vgl. Kap. 1).

Unter den genannten Voraussetzungen besitzen die Ionen im Innern des Plasmas eine isotrope Winkelverteilungsdichte.

Beim Eintritt von Ionen in die Randschicht des Plasmas kommt es zu einer starken Beschleunigung durch das anliegende elektrische Feld und infolgedessen zu einer Anisotropie in der Winkelverteilung der Ionen auf der Oberfläche des Substrates. Unter der Voraussetzung, dass die Anregungsfrequenz der Elektrode sehr viel größer als die Plasmafrequenz

$$\omega_{p,I} = \sqrt{\frac{n_0 e_0}{\epsilon_0 m_I}} \quad (3.7)$$

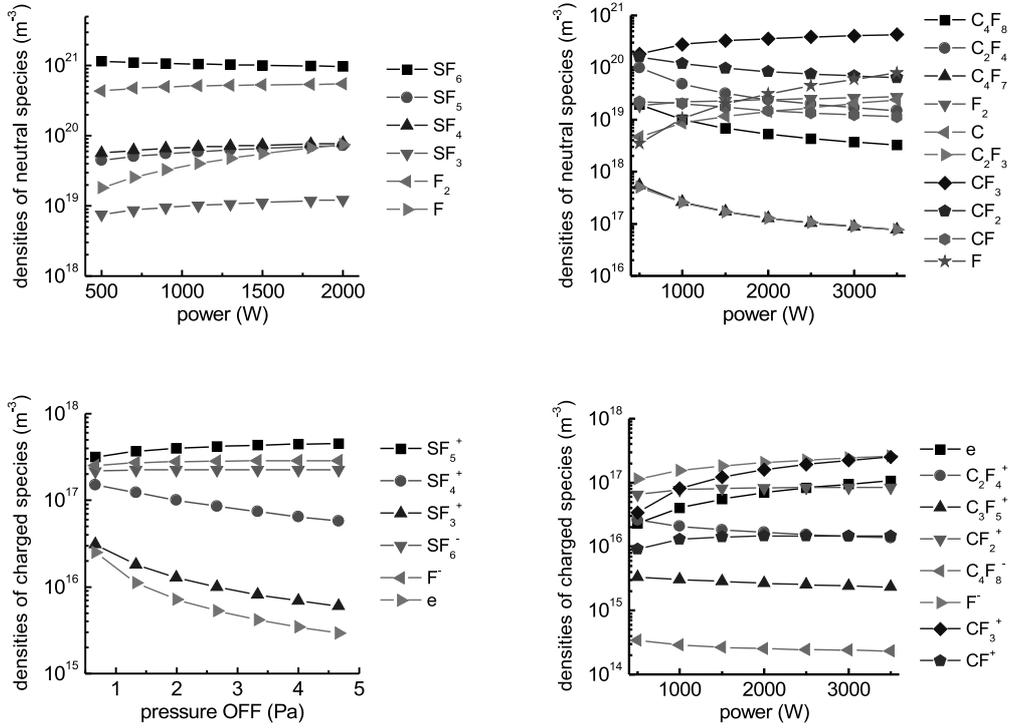


Abbildung 3.6 Simulierte Konzentration von Ionen und Neutralen in elektronegativem Plasma (SF_6) und elektropositivem Plasma (C_4F_8)

der Ionen ist, benötigen die Ionen viele Zyklen, um die Randschicht zu durchqueren [18]. Zur Berechnung der Winkelverteilungsfunktion kann deshalb der zeitliche Mittelwert des elektrischen Feldes verwendet werden. Weiterhin soll vorausgesetzt werden, dass die Ionen in die Randschicht mit Maxwell-Boltzmannscher Geschwindigkeitsverteilung eintreten und keine Stöße von Ionen in der Randschicht stattfinden.

Die mittlere Geschwindigkeit, die ein Ion durch die Beschleunigung durch das elektrische Feld der Randschicht erhält, ist

$$\bar{v}_y = \sqrt{\frac{2e_0 V_{\text{DC}}}{m_I}}. \quad (3.8)$$

Unter den vereinfachenden Annahmen und bei Energien über 5 eV besitzen die Ionen an der Grenzfläche von Randschicht und Substrat eine annähernd normal verteilte Winkelverteilungsdichte mit dem Mittelwert zentriert um die Randschichtnormale [57]

$$\mathcal{IADF}(\vec{\omega}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma} e^{-\frac{\theta_{\perp}^2}{2\sigma^2}}, \quad (3.9)$$

darin ist θ_{\perp} die der Winkel von $\vec{\omega}$ zum Normalenvektor der Grenzfläche. Die Varianz σ hängt von den konkreten Prozessparametern wie Druck und Temperatur des Plasmas sowie der Teilchenmassen ab und wurde von [Liu 58] experimentell und simulativ untersucht.

Unter Berücksichtigung von Stößen der Ionen in der Randschicht und bei kleineren Anregungsfrequenzen als der Ionenplasmafrequenz (Gl. (3.7)) hängt die \mathcal{IADF} vom Phasenwinkel der RF-Anregung der Elektrode ab und kann im Allgemeinen nur experimentell bestimmt werden. Genaue Messungen der \mathcal{IEDF} in N_2 -Plasmen wurden durch F. Becker und I. W. Rangelow unter Verwendung eines Quadrupol-Massenspektrometers, integriert in der Kathode eines Plasmareaktors, durchgeführt [59].

In Randschichten, wie sie typischerweise beim reaktiven Ionenätzen auftreten, bei hohen Plasmadrücken von wenigen hundert mTorr und großen Randschichtpotentialen müssen die Stöße der Ionen mit neutralen Teilchen in der Randschicht berücksichtigt werden. Die \mathcal{IEDF} besitzt dann eine Reihe von Maxima und die Ionenenergie wird über einen weiten Bereich gestreut. Für solche Fälle existieren keine geschlossenen Ausdrücke und die Berechnung der \mathcal{IEDF} muss numerisch oder experimentell durchgeführt werden [18; 59]. Bei Drücken im Bereich um 10 mTorr oder darunter, wie sie z. B. in ICP-Anlagen beim ionenunterstützten Plasmaätzen vorkommen, kann die Randschicht hingegen als nahezu stoßfrei angesehen werden. Im Falle hoher Anregungsfrequenzen, bei denen die Ionen viele Zyklen benötigen um die Randschicht zu durchqueren, entspricht deren Energie beim Austritt aus der Randschicht $\approx e_0 V_{DC}$ und die Ionen sind nahezu monoenergetisch [18].

Ist die Anregungsfrequenz hingegen klein oder das Randschichtpotential so groß, dass Ionen die Randschicht in wenigen Anregungszyklen durchqueren können, bilden sich zwei Maxima der Ionenenergiedichtefunktion heraus [18]. In Abb. 3.7 ist die Form der bimodalen Ionenenergieverteilungsdichtefunktion skizziert. In [Benoit-Cattin 60] wurde eine analytische Lösung der \mathcal{IEDF} hergeleitet (Abb. 3.7). Vereinfachend wurde darin eine stoßfreie Randschicht und ein uniformes Randschichtfeld angenommen. Anstelle der beiden Maxima treten Singularitäten in der Funktion auf, weil weiterhin eine monoenergetische Energieverteilung der Ionen beim Eintritt in die Randschicht angenommen wurde [18; 60].

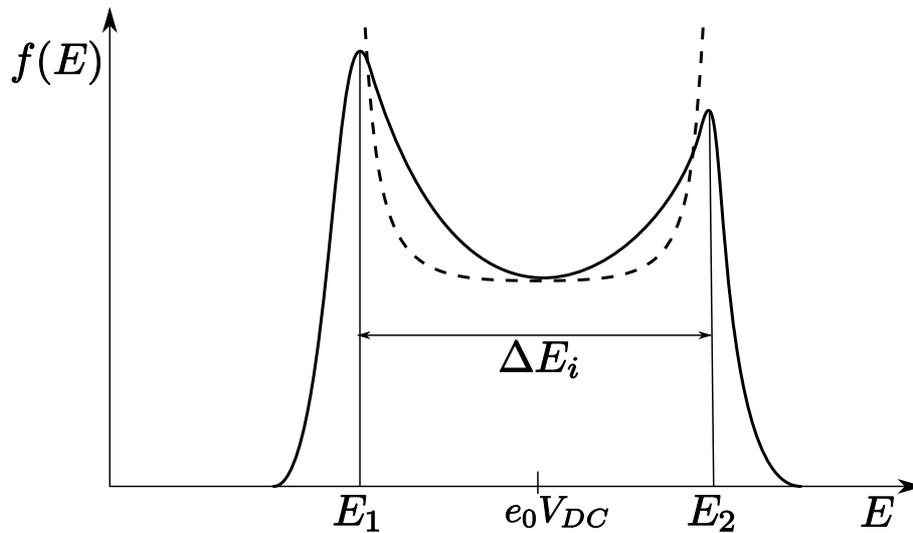


Abbildung 3.7 Bimodale $\mathcal{I}EDF$. Der Abstand der beiden Maxima hängt von der Anregungsfrequenz der Substratelektrode ab und verschwindet bei hohen Frequenzen. Gestrichelt ist die analytische $\mathcal{I}EDF$ nach Benoit-Cattin [60] skizziert.

3.3.2 Abschattung

In Abschn. 3.2.3 wurde bereits auf die Reduzierung des effektiven Flusses durch die Selbstabschattung innerhalb von geätzten Strukturen hingewiesen.

Die gleichen geometrischen Gegebenheiten sind für die Reduzierung des Ionenflusses im Innern der Strukturen verantwortlich. Aufgrund der starken Anisotropie der $\mathcal{I}ADF$ ist die Abnahme des Teilchenflusses am Boden geätzter Strukturen jedoch weitaus geringer als die der Neutralteilchen.

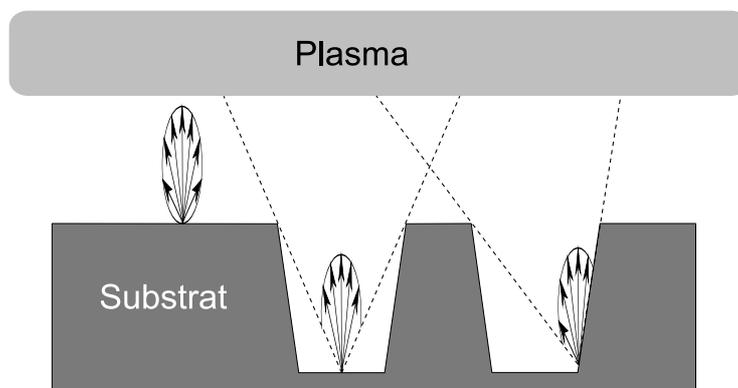


Abbildung 3.8 Abschattung des Ionenflusses in geätzten Strukturen. Der Effekt der Abschattung am Boden ist geringer als bei Neutralen (vgl. Abb. 3.3).

3.3.3 Reflexion

Die Reflexion von Ionen an Substratoberflächen wurde von Wilson [61] eingehend untersucht und als Funktion des Einfallswinkels beschrieben. Nach seiner Theorie lassen sich drei Reflexionsregimes zwischen 0° (senkrecht) und 90° (streifend) unterscheiden. Im ersten Bereich zwischen 0° und einem Winkel θ_1 findet keine Reflexion statt und alle Ionen werden von der Oberfläche absorbiert. Im mittleren Bereich, der die Winkel von θ_1 und θ_2 umfasst, steigt die Reflektivität linear von 0 auf 1 an. Für Winkel im dritten Bereich von θ_2 bis 90° werden alle Ionen reflektiert.

Die Winkel für θ_1 und θ_2 sind im allgemeinen nicht bekannt und differieren für verschiedene Materialien, Ionenmassen und -energien. Sie können jedoch experimentell aus physikalischen Sputterexperimenten ermittelt werden. Für Silizium wurden in [57] ungefähre Winkel von $\theta_1 = 60^\circ$ und $\theta_2 = 90^\circ$ geschätzt.

Eingehende Untersuchungen beim Ionenstrahlätzen von Gold-, Chrom- und Titanschichten in Argon/Sauerstoffplasmen zeigen ebenfalls eine deutliche Verringerung der Ätzrate bereits bei Einfallswinkeln von 30° gegenüber der Oberflächennormalen [62], was unter anderem durch eine erhöhte Reflexion von Ionen erklärt werden kann.

In [57] wurde darüber hinaus eine weitestgehend spekulare⁵ Reflexion von Ionen angenommen, wie sie bei Ionenenergien von wenigen niedrigen Ionenenergien von weniger als 1 keV plausibel ist. Bei höheren Energien können die Ionen in das Material eindringen und mehrfach zufällig ihre Richtung ändern, bevor sie das Substrat wieder verlassen [63]. Die Reflexion unterliegt dann einer breiten Streuung (vgl. Abschn. 4.1).

Reflexionsgesetz

Für die Simulation von ionenunterstützten Ätzprozessen in der Mikrostrukturtechnik sind die Ionenenergien in einem Bereich, in dem die Reflexion bei flachem Einfallswinkel als spekulär und unabhängig von der Orientierung der Oberfläche betrachtet werden kann. Für die spezifische Intensität (vgl. Abschn. 6.1.3) der reflektierten Ionen an einem Punkt der Oberfläche gilt daher [64]

$$L_r(\theta_r, \phi_r) = S(\theta_i) L_i(\theta_i, \phi_i), \quad (3.10)$$

⁵Bei spekularer Reflexion sind Ein- und Ausfallswinkel zur Oberflächennormalen gleich groß.

in der L_i und L_r den Anteil der einfallenden und reflektierten Ionen pro Raumwinkel und pro Zeiteinheit pro projizierter Fläche senkrecht zum Strahl darstellen. Die Winkel θ_i, θ_r sind in Gl. (3.10) die Einstrahlungs- und Reflexionswinkel zur Flächennormalen und ϕ_i, ϕ_r die Azimutwinkel der Ein- und Ausfallsrichtung. Für sie gilt

$$\begin{aligned}\theta_r &= \theta_i \\ \phi_r &= \phi_i \pm \pi.\end{aligned}\tag{3.11}$$

Der Anteil spekulär reflektierter Ionen hängt wie im vorangegangenen Abschnitt erläutert, vom Einfallswinkel θ_i ab

$$S(\theta_i) = \begin{cases} 0 & : & 0 < \theta_i \leq \theta_1 \\ \frac{\theta_i - \theta_1}{\theta_2 - \theta_1} & : & \theta_1 < \theta_i \leq \theta_2 \\ 1 & : & \theta_2 < \theta_i \leq \frac{\pi}{2} \end{cases}\tag{3.12}$$

3.3.4 Aufladung

Beim Beschuss von Proben mit elektrisch geladenen Teilchen kann es zu einer lokalen Aufladung von Teilen der Probe gegenüber anderen kommen. Insbesondere bei SOI⁶ Wafern kommt es zu solchen lokalen Aufladungen, wenn bis zur eingebetteten Oxidschicht geätzt wird (Abb. 3.9). Wenn eine (teilweise) isolierte Probe von Ionen und Elektronen bombardiert wird, sammeln sich elektrische Ladungen auf der Probe an, die wegen des hohen Widerstandes der Isolatoren nicht abfließen können. Als Konsequenz entstehen daraus zusätzlich zum Randschichtfeld lokale elektrische Dipolfelder, die die Flugbahnen der Ionen und Elektronen verändern [65].

Die Akkumulierung von Ladungen auf der Oberfläche und die dadurch hervorgerufene Ablenkung der Ionen bewirkt eine lokale Änderung der Ätzrate und beeinflusst somit die Form des geätzten Profils. Insbesondere für den so genannten Notching-Effekt⁷ der z. B. an der Grenze von Silizium und eingebetteter Oxidschicht auftritt, wird die Aufladung als Ursache betrachtet [65].

Die unterschiedlichen Geschwindigkeitsverteilungen der massereicheren Ionen und der leichteren Elektronen und ihre verschiedenen Winkelverteilungsfunktionen \mathcal{ADF} verursachen eine inhomogene Aufladung der Probenoberfläche.

⁶SOI - Silicon on insulator; Silizium auf isolierendem Material

⁷to notch - (engl.) einkerben

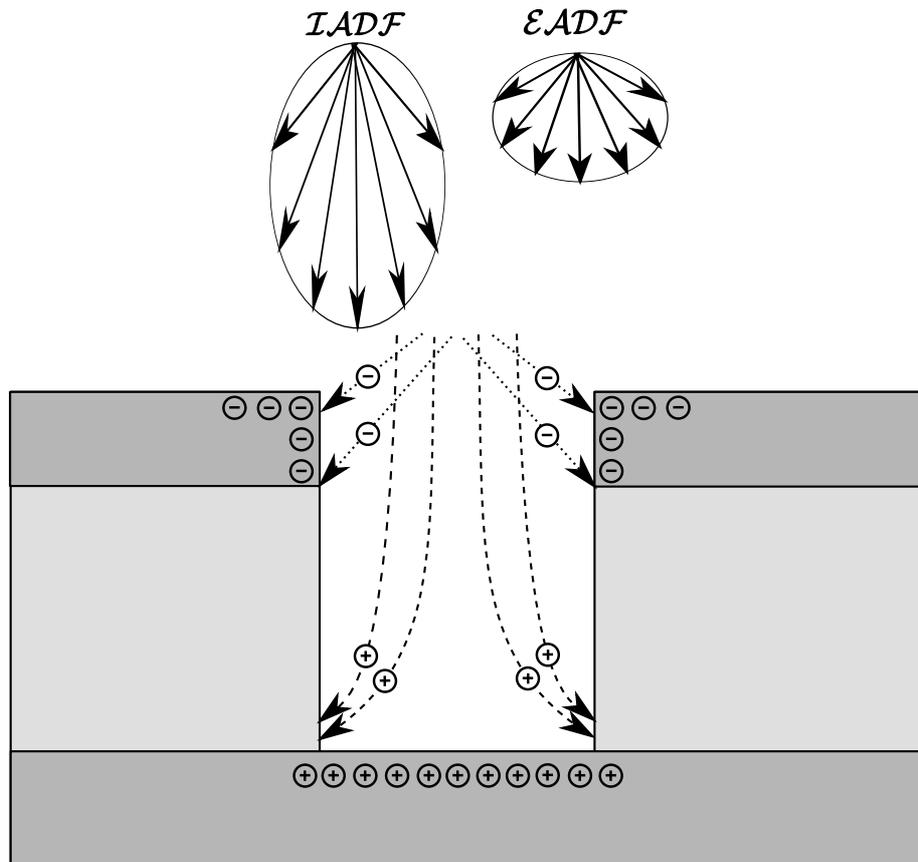


Abbildung 3.9 Aufladung durch verschiedene Winkelverteilungen von Elektronen und Ionen. Weil Ionen aufgrund ihrer \mathcal{IADF} den Boden von Strukturen häufiger erreichen als Elektronen, sammeln sich positive Ladungen im Dielektrikum an. Dementsprechend laden Elektronen das obere Dielektrikum negativ auf. Das elektrische Feld im Innern der Struktur bewirkt eine Ablenkung der Trajektorien. [65]

Die Modellierung und Simulation der elektrischen Aufladung unter Verwendung von FEM und Monte-Carlo Methoden ist zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit noch Forschungsgegenstand einer parallel laufenden Dissertation. Im weiteren sollen die Aufladungseffekte unberücksichtigt bleiben, da sie in vielen Fällen in guter Näherung vernachlässigt werden können.

3.4 Ätzrate und Aspektverhältnis

Das Verhältnis aus Ätztiefe zum kleinsten Durchmesser (engl. critical dimension, CD) einer Struktur wird als Aspektverhältnis bezeichnet und ist unabhängig von der absoluten Größe einer Struktur.

Beim Ätzen von Strukturen mit verschiedenen Aspektverhältnissen, ist in der Regel bei schmalen Gräben und Löchern mit kleineren Durchmesser eine geringere Ätzrate als bei breiteren Gräben und Löchern mit großen Durchmessern zu beobachten. Dies wurde in RIE-Prozessen für Silizium, Oxide, Polymere, Metalle und III-V-Halbleiter festgestellt [66].

Als Gründe für dieses Phänomen wurden in [66] hauptsächlich vier Mechanismen identifiziert:

- Knudsen-Transport von neutralen Reaktanden [44],
- Abschattung von Ionen [67],
- Abschattung von Neutralen [68],
- Aufladung von isolierten Mikrostrukturen.

Wie später im Abschn. 4.3 noch genauer gezeigt wird, hängt die Ätzrate von der Flussdichte neutraler und ionisierter Spezies, sowie der Bedeckung der Oberfläche mit adsorbierten Radikalen ab (Gl. (4.6)). Aus den Betrachtungen in den Abschn. 3.2.3 und 3.3.2 ist unmittelbar einzusehen, dass sich das Verhältnis der direkten Teilchenflüsse von Neutralen und Ionen aufgrund ihrer verschiedenen \mathcal{ADF} mit dem Aspektverhältnis ändert.

Nach diesem Modell gibt es für die Ätzrate zwei Grenzfälle, die sehr gut mit den beobachteten Ergebnissen von Experimenten übereinstimmen: Wenn die Oberfläche vollständig mit neutralen Radikalen bedeckt ist (vgl. Abschn. 2.3.6), so hängt die Ätzrate ausschließlich vom Ionenfluss und nicht mehr vom Fluss neutraler Reaktanden ab.

Im gegenteiligen Fall, wenn die Oberfläche nahezu gänzlich unbedeckt von neutralen Radikalen ist, wird die Reaktionsrate nur durch den instantanen Zufluss von neutralen Spezies bestimmt.

Die Flussdichte der Ionen am Boden von geätzten Strukturen ist dabei im Wesentlichen vom Grad der Abschattung festgelegt. Für die Flussdichte des direkten, d. h. nicht reflektierten Ionenflusses, ergibt sich nach Gl. (3.9) und der Abschattung sh für einen Punkt im Innern der geätzten Struktur

$$\phi_{Ion,shadow} = \phi_0 \int_{\Omega} \mathcal{IADF}(\vec{\omega}) sh \cos \theta_{\perp} d\omega. \quad (3.13)$$

Darin ist Ω der Raumwinkel, in dem das Plasma nicht abgeschattet ist, und θ_{\perp} der Winkel der Flächennormalen zur Einfallrichtung der Ionen. In Abb. 3.10 ist die Abnahme der Ionenflussdichte für verschiedene Varianzen der \mathcal{LADF} am Boden eines symmetrischen langen Profiles nach Gl. (3.13) skizziert.

Die Flussdichte von Neutralteilchen wird hingegen im Wesentlichen durch mehr-

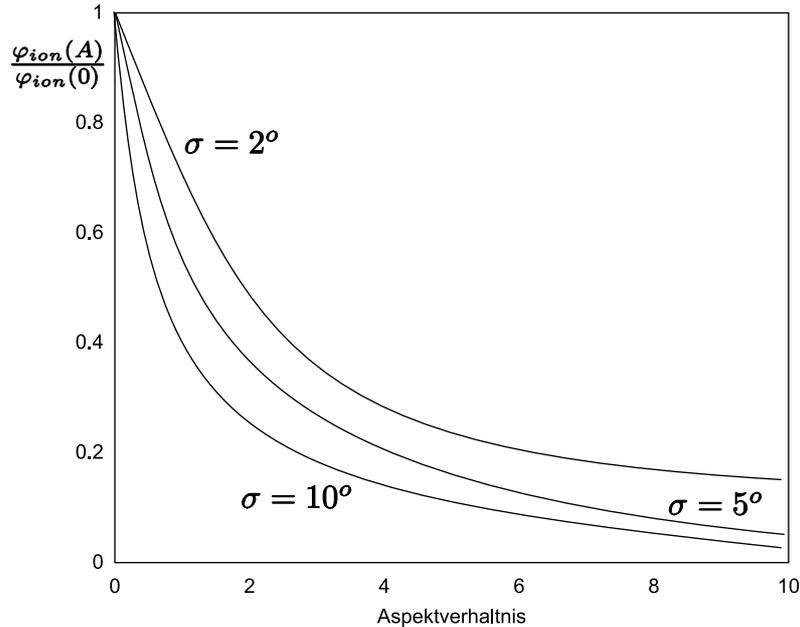


Abbildung 3.10 Nach Gl. (3.13) approximierte Abnahme der Flussdichte für verschiedene Varianzen der \mathcal{LADF} .

fache diffuse Reflexion an Oberflächen bestimmt (sog. Knudsen-Transportregime, Coburn und Winters [44]).

Außerdem findet bei manchen Spezies-Material-Systemen, wie z. B. SF_6 und Silizium, chemisches Ätzen der Seitenwände statt und verringert durch Verbrauch der Spezies deren Flussdichte am Boden. Die genaue theoretische Betrachtung dieser Vorgänge ist jedoch extrem komplex [66] und für beliebige Geometrien nur durch Simulationen zu ermitteln.

Somit ergibt sich ein nichtlinearer Zusammenhang der instantanen Ätzrate vom Aspektverhältnis und den Oberflächeneigenschaften der Strukturen. Diese Nichtlinearität ist der wahrscheinliche Grund dafür, dass kleinere Strukturen beim Ätzen eine geringere Ätztiefe erreichen, als größere (sog. ARDE⁸) [66].

Einen alternativen Erklärungsversuch lieferten Coburn und Winters in [44], wobei

⁸ARDE – (engl.) aspect ratio dependent etching

sie vermuteten, dass durch die Entstehung von Reaktionsprodukten ein gradueller Anstieg des Druckes am Boden von Strukturen entsteht, der den weiteren Transport von Neutralen zur Oberfläche hin unterbindet. Dieser Effekt ist jedoch selbst bei großen Ätzraten um Größenordnungen geringer, als er zur Erklärung des ARDE notwendig wäre [66].

Kapitel 4

Oberflächenreaktionen

4.1 Sputtern

Der physikalische Abtrag von Atomen aus der Oberfläche eines Festkörpers oder einer Flüssigkeit (Target) durch Ionenbeschuss wird Sputtern¹ genannt.

4.1.1 Mechanismus

Bei diesem Prozess werden Ionen mit kinetischen Energien im Bereich $0.1 \dots 1000$ keV auf das Target beschleunigt. Beim Zusammenstoß mit Targetatomen kommt es zu einer Impulsübertragung vom Ion auf Oberflächenatome. Die Oberflächenatome können den gewonnenen Impuls auf weitere angrenzende Atome kaskadenförmig übertragen. Wenn ein Atom des Targets genügend Impuls in Richtung der Oberfläche zur Überwindung der Bindungsenergie des Targets erhält, kann es das Target verlassen. Die Theorie des Sputterns wurde unter anderem von Sigmund detailliert untersucht [69] und Computersimulationen über die Wechselwirkung von Ionen und Festkörpern von Eckstein durchgeführt [70].

In Abb.4.1 ist die Impulsübertragung für das Sputtern zweier Targetatome dargestellt. Das Ion oder neutrale Teilchen kann durch Stöße mit Oberflächenatomen ebenfalls die Richtung des Impulses ändern und das Target wieder verlassen. In diesem Fall spricht man von Rückstreuung oder Reflexion [70].

Die Ausbeute S definiert die Anzahl der gesputterten Targetatome pro Ionen-

¹engl. to sputter - herausspritzen

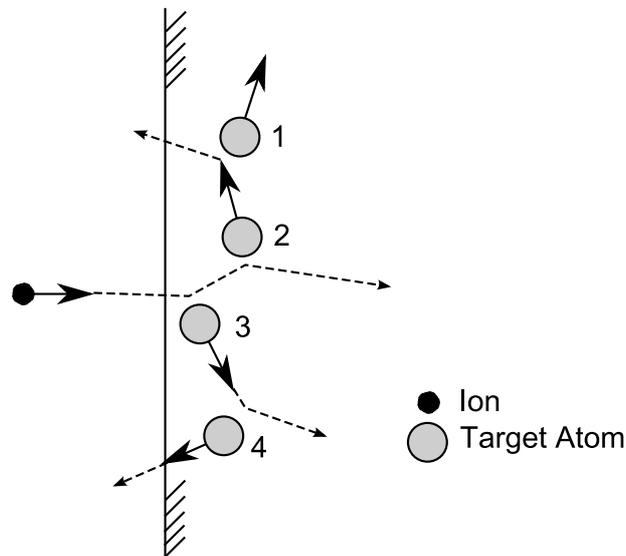


Abbildung 4.1 Serie von Kollisionen zwischen Ion und Atomen, die zum Sputtern der Atome 2 und 4 führen. (Bild entnommen aus [69])

einschlag. Sie hängt wesentlich vom Massenverhältnis der Ionen und Targetatome, von der Ionenenergie, der Oberflächenenergie, der Teilchenzahldichte sowie ganz wesentlich vom Wechselwirkungspotenzial der beteiligten Teilchen ab. Detaillierte Berechnungen und Erläuterungen zur Abhängigkeit der Ausbeute von verschiedenen Parametern finden sich in [8; 69–72].

Typischerweise besitzen die gesputterten Atome sehr geringe Energien, wenn sie die Oberfläche verlassen, weil die kaskadenförmige Impulsübertragung die Ionenenergie auf viele umliegende Atome verteilt und das Bindungspotenzial des Targets überwunden werden muss. In der Gasphase kommt es zu einer weitgehenden Thermalisierung der gesputterten Atome durch Stöße mit den Gasmolekülen [8].

4.1.2 Typische Prozesse und Anwendungen

Atome können immer dann aus einem Target gesputtert werden, wenn die Energie der auftreffenden Teilchen mindestens die Bindungsenergie der Oberflächenatome des Targets erreicht.

In Sputteranlagen wird ausgenutzt, dass sich die aus dem Target heraus gelösten Atome an anderen Oberflächen wieder anlagern und dünne Schichten bilden. Durch Einbringen eines Substrats, welches nicht unmittelbar dem Ionenbeschuss ausgesetzt

ist, können Schichten von Metallen, wie z. B. Kupfer, Gold oder Platin, abgeschieden werden. Die typischen Sputterraten dieser Metalle liegen bei 50 . . . 150 nm/min. Typische Sputterprozesse zur Schichtabscheidung werden zwischen 15 und 100 mTorr [8] durchgeführt.

4.2 Chemisches Ätzen

Es war lange bekannt, dass Atome und Radikale chemisch viel reaktiver sind als die meisten Moleküle. Bis zum Beginn der 1960iger Jahre wurde diese Erkenntnis jedoch kaum zum Ätzen von Festkörpern genutzt. Ab dieser Zeit wurden erstmals Sauerstoffplasmareaktoren gebaut, die zur Oxidation von kohlenstoffhaltigen Rückständen dienen [17]. Im Veraschungsprozess (≈ 100 Pa) dient das Plasma dazu, reaktive Sauerstoffatome zu erzeugen:



Der Ätzprozess besteht in einer chemischen Reaktion neutraler Radikale (Spezies mit ungepaarten Elektronen) mit den organischen Verbindungen (hier: zu flüchtigem Kohlendioxid) auf dem Substrat. Ein bekannter Prozess in der Si-Technologie ist das Ätzen von SiO_2 oder Si_3N_4 mit CF_4 , bei dem im ersten Schritt freie Fluor-Radikale gebildet werden:



die ihrerseits mit den Siliziumverbindungen u.a. zu flüchtigem SiF_4 reagieren [73]. Ähnliche Reaktionen führen zur Zerlegung von SF_6 in Molekülfragmente und freie Fluor-Radikale die z. B. zum Ätzen von Silizium verwendet werden.

4.2.1 Mechanismus

In Plasmen entstehen chemisch hochreaktive neutrale oder ionisierte Spezies aus relativ inerten Molekülen (wie z. B. SF_6), die sonst nur durch thermische Dissoziation bei sehr hohen Temperaturen gebildet werden können. Durch chemische Reaktion mit den Atomen oder Molekülen der Oberfläche des Festkörpers entstehen flüchtige Reaktionsprodukte, die vom Vakuumsystem aus dem Reaktor entfernt werden können [8; 17].

4.3 Ionenunterstütztes Ätzen

Durch Kombination beider Verfahren, Sputterätzen und chemischen Plasmaätzen, entstand das Verfahren des ionenunterstützten Plasmaätzens. Man unterscheidet dabei zwischen reaktivem Ionenätzen (RIE, vgl. Abschn. 1.3.1), bei dem das Substrat auf einer angeregten Elektrode platziert wird, und Plasmaätzen, bei dem sich das Substrat auf einer geerdeten Elektrode befindet.

Seit langem ist bekannt, dass die chemische Reaktion von neutralen Spezies an Oberflächen schneller verläuft, wenn gleichzeitig ein Fluss von energetischen Ionen die Oberfläche trifft [17]. Die Anisotropie der Ätzrichtung erschließt sich aus der Tatsache, dass Ionen normalerweise fast senkrecht auf die Substratoberfläche einfallen. Geneigte oder gänzlich abgeschattete Bereiche (siehe auch Abschn. 3.2.3) innerhalb von geätzten Strukturen erhalten einen geringeren Ionenfluss. Folglich ist auch die Ätzrate in solchen Bereichen geringer als in exponierten Bereichen. Allerdings zeigt die Sputterausbeute ein Maximum bei mittleren Winkeln – typisch um 30° von der Normalen, so dass sich die Sputterrate aus dem Produkt aus Sputterausbeute und Ionenfluss ergibt. In Abb. 4.2 sind die unterschiedlichen Ätzraten für Silizium in einem XeF_2 Plasma abhängig von der Flussrate dargestellt.

4.3.1 Mechanismus

Obwohl die Tatsache, dass ein Ionenbeschuss zur Erhöhung der Ätzrate beiträgt, seit längerem bekannt ist, gibt es keine breite Übereinstimmung, auf welche Weise der Ionenbeschuss tatsächlich die Oberflächenchemie beeinflusst.

Ionenunterstützte Ätzprozesse bestehen immer aus den drei Schritten

1. Adsorption der Spezies,
2. Formation von Reaktionsprodukten,
3. Desorption von Reaktionsprodukten.

Der Beschuss durch energetische Ionen kann jeden der drei Schritte beschleunigen, ist jedoch stark abhängig vom verwendeten chemischen System [17]. Am besten wurde der Einfluss des Ionenbeschusses für das Ätzen von Silizium mit Fluor untersucht. Es wird vermutet, dass die Fluoratome eine relativ stabile einlagige Schicht

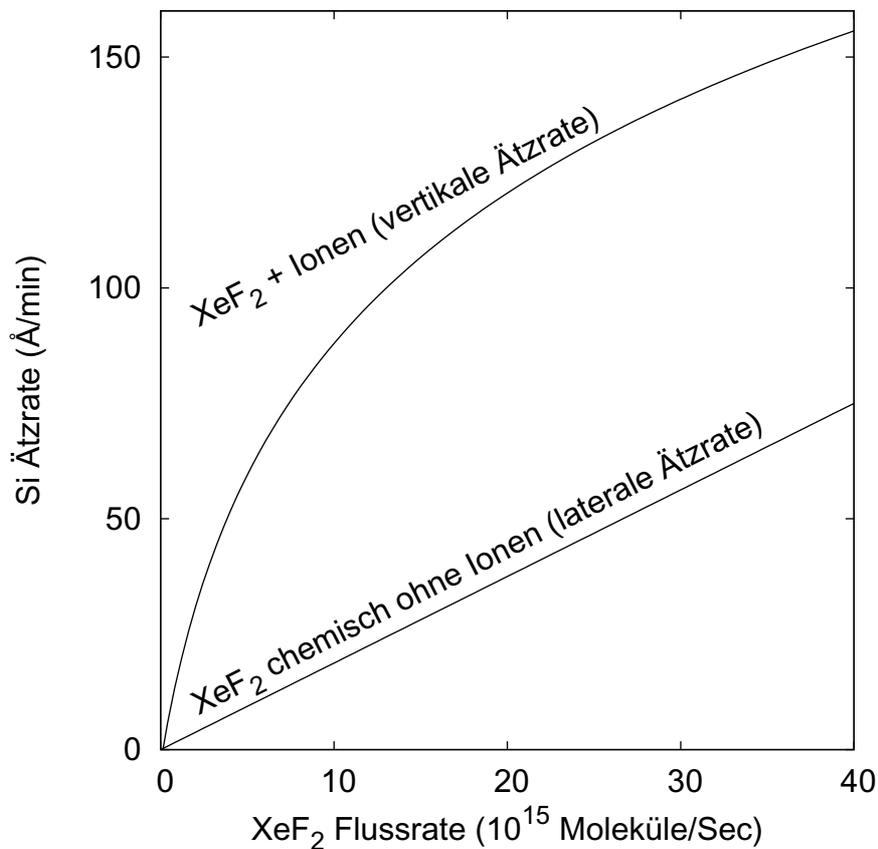


Abbildung 4.2 Si-Ätzzraten in Abhängigkeit des XeF₂ Gasflusses mit und ohne 1 keV Ne⁺-Ionenbeschuss. (Entnommen aus [17])

von fluoridiertem Silizium (SiF_x) auf dem Substrat bilden, wenn kein Ionenbeschuss stattfindet. Diese Schicht verbleibt auch, wenn die Quelle der Fluoratomatome abgeschaltet wird. Um das Ätzen zu ermöglichen, ist die Reaktion dieser fluoridierten Schicht mit den einfallenden Fluoratomaten nötig. Die Reaktionswahrscheinlichkeit dafür liegt in der Größenordnung von 0,001 [74].

Vermutlich führt der Beschuss dieser Schicht mit energetischen Ionen dazu, dass sie in den gasförmigen Zustand übergeht. Der Ionenbeschuss führt somit zu einer "Säuberung" der Oberfläche, so dass reines Silizium freigelegt wird. Die Reaktionswahrscheinlichkeit von Fluor mit reinem Silizium ist weit höher als mit fluoridiertem Silizium. Die Ätzzrate wird deshalb durch den Ionenbeschuss deutlich gesteigert, wenn der Ionenfluss groß genug ist, um die Bedeckung der Oberfläche mit fluoridiertem Silizium zu reduzieren.

Ein einfaches Modell zur Berechnung der Ätzzrate wird in [66] und in [4] im Zu-

sammenhang mit der Abhängigkeit der Ätzrate vom Aspektverhältnis (vgl. Abschn. 3.4) vorgestellt. Die Ätzrate ER ist demnach

$$ER = k\Theta E_{kin}\phi_I. \quad (4.3)$$

Darin ist k das Volumen pro Energieeintrag, welches bei einer vollständig bedeckten Oberfläche entfernt würde, Θ der Bedeckungsgrad der Oberfläche, E_{kin} die mittlere Ionenenergie und ϕ_I die Ionenflussdichte an der Oberfläche.

Weiterhin wird darin angenommen, dass die Wahrscheinlichkeit, dass ein neutrales Teilchen von der Oberfläche adsorbiert wird, proportional zum Anteil der unbedeckten Oberfläche ist. Die Ätzrate kann deshalb auch in Abhängigkeit der Flussdichte ϕ_N von Neutralteilchen geschrieben werden als

$$ER = V_0 S_0 (1 - \Theta) \phi_N, \quad (4.4)$$

wobei V_0 das Volumen, welches durch ein einzelnes reagierendes Neutralteilchen entfernt wird und S_0 die Reaktionswahrscheinlichkeit eines Neutralteilchens an der unbedeckten Oberfläche ist.

Durch Gleichsetzen von Gl. (4.3) und Gl. (4.4) erhält man für den Bedeckungsgrad der Oberfläche

$$\Theta = \frac{1}{1 + \frac{kE_{kin}\phi_I}{V_0 S_0 \phi_N}}. \quad (4.5)$$

Durch erneutes Einsetzen in Gl. (4.4) erhält man die Abhängigkeit der Ätzrate von den Flussdichten der neutralen und ionisierten Spezies

$$ER = \frac{kE_{kin}\phi_I}{1 + \frac{kE_{kin}\phi_I}{V_0 S_0 \phi_N}}. \quad (4.6)$$

Die Berechnung der Ätzrate (Gl. (4.6)) ist von zentraler Bedeutung für die Simulation der Ätzprofile.

Die Mechanismen, die zum Übergang der fluoridierten Schicht in den gasförmigen Zustand führen sind nicht mit Sicherheit geklärt. Es wird vermutet, dass der Energieeintrag eines auftreffenden Ions die Formierung von SiF_4 begünstigt. Diese Reaktion ist auf eine Disproportionierung der ansonsten aus abgesättigten SiF_2 -Einheiten bestehenden Oberfläche zurückzuführen, weswegen keine weiteres Fluor aus der Gasphase benötigt wird.

Für andere Systeme aus Ätzgasen und Materialien wird ein ähnlicher Wirkmechanismus bei der Beteiligung von energetischen Ionen beim Ätzprozess vermutet [17].

Ionenunterstützte Ätzprozesse hängen von vielen Prozessparametern ab, die sich teilweise gegenseitig beeinflussen und sich auf mehrere Zielgrößen, wie z. B. Ätzrate und Oberflächenrauigkeit, auswirken.

Die Reaktorgeometrie spielt eine sehr wichtige Rolle für die Zusammensetzung der Plasmaspezies und dem Transport der Reaktanten auf die Oberfläche des Substrates. Schon geringe Unterschiede in Plasmareaktoren können signifikante Auswirkungen auf die Ätzresultate haben [17]. Auch das Flächenverhältnis der Elektroden spielt eine große Rolle bei der Ausbildung des Bias-Potenzials (vgl. Abschn. 1.2.5). Ein wichtiger Parameter, der die erzielbare Ätzrate beeinflusst, ist die Substrattemperatur. Temperaturen von über 120°C sind zumeist bei ionenunterstützten Plasmaätzprozessen nicht erwünscht, weil ab dieser Temperatur die meisten Photolacke degradieren. Höhere Substrattemperaturen erfordern temperaturbeständige Maskierungsmaterialien wie z. B. SiO₂. Die ioneninduzierten Reaktionen hängen nur in sehr geringem Maße von der Substrattemperatur ab. Die chemischen Reaktionen, als Prozesse vom Aktivierungstyp hingegen, sind deutlich temperaturabhängig. Insbesondere zur Steigerung der Anisotropie werden Substrate daher in der Regel gekühlt [75]. Hohe Substrattemperaturen werden hingegen z. B. beim Ätzen von GaAs-Substraten zur Steigerung der Ätzrate genutzt. [76]

Weitere wichtige Prozessparameter sind der Gasdruck und die RF-Leistung, die beide das Bias-Potential und somit die ionenunterstützte Ätzrate und die Anisotropie der Ätzung beeinflussen. Je größer der Gasdruck im Reaktor ist, umso größer ist die Bildungsrate der aktiven Spezies und somit auch der Strom dieser Partikel auf die Substratoberfläche. Die Stromdichte an der Oberfläche steigt proportional zum Quadrat des Druckes an. Allerdings nimmt das Bias-Potenzial mit steigendem Druck ab und das Stoßpotenzial der Ionen erhöht sich. Dies führt dazu, dass die Anisotropie der Ätzung abnimmt. Die Erhöhung der RF-Leistung führt grundsätzlich zu einer Steigerung des Bias-Potenzials. Für praktische Anwendungen ist die RF Leistung jedoch begrenzt, weil sowohl die Maske als auch das Substrat selbst durch energiereiche Ionenstrahlung beschädigt werden. In ICP-Anlagen ist der Zusammenhang zwischen kapazitiv an der Elektrode eingekoppelter Leistung und Bias Potenzial nahezu linear [8].

4.3.2 Typische Prozesse

Das ionenunterstützte Plasmaätzen wird in vielen verschiedenen Prozessen der Mikrostrukturtechnik verwendet. In [17] werden eine Reihe von verwendeten Ätzgasen für verschiedene Materialien aufgelistet.

Die wichtigsten Anwendungsgebiete des ionenunterstützten Plasmaätzens sind in Tabelle 4.1 aufgeführt.

Substratmaterial	Prozessgase
Silizium	CF_4 , $\text{CF}_4\text{-O}_2$, $\text{CF}_4\text{-H}_2$, CCl_4 , Cl_2 , SF_6 , ...
SiO_2 , Glas	CF_4 , $\text{CF}_4\text{-O}_2$, $\text{CF}_4\text{-H}_2$, $\text{CF}_4\text{-C}_2\text{H}_4$, C_2F_6 , C_3F_8 , CHF_3 , CCl_4 , SF_6 , ...
Si_3N_4	CF_4 , $\text{CF}_4\text{-O}_2$, C_2F_6 , $\text{C}_2\text{F}_6\text{-C}_2\text{H}_4$, ...
Photoresists, organische Materialien	O_2 , CF_4 , $\text{CF}_4\text{-O}_2$, $\text{C}_2\text{F}_6\text{-CF}_3\text{Cl}$, CCl_4 , ...
Aluminium	CCl_4 , BCl_3 , Cl_2
Al-Legierungen Al:Si, Al:Cu, Al:Cu:Si	CCl_4
Al_2O_3	CCl_4 , $\text{CCl}_4\text{-O}_2$, BCl_3 , Cl_2
GaAs	CCl_2F_2 , Cl_2 , $\text{CCl}_2\text{F}_2\text{-O}_2$, CCl_4
Cr	$\text{Cl}_2\text{-O}_2$, $\text{CCl}_4\text{-O}_2$

Tabelle 4.1 Häufig verwendete Material-Ätzgas Systeme beim ionenunterstützten Plasmaätzen. (Extrahiert aus [17])

4.4 Plasma-Polymer Deposition

Bei der Ätzung von Silizium und seinen Verbindungen mit CF_4 dissoziiert dieses im Plasma zu CF_3^+ , CF_3 , F , CF_3^- und F^- [77]. Die negativen Ionen werden vom Potentialunterschied in der Randschicht am Erreichen der Oberfläche gehindert. CF_3^+ und CF_3 reagieren deutlich langsamer mit Silizium als F . Als Endprodukt der Ätzung mit CF_3^+ und CF_3 verbleibt der enthaltene Kohlenstoff verschieden gebunden auf der Oberfläche. Es entsteht somit eine Konkurrenz aus Fluor-induzierter Ätzung und der Abscheidung eines Fluorocarbon-Films. Durch geeignete Wahl der Prozessparameter kann man die Oberflächenreaktion zu einer der beiden Seiten hin beeinflussen. Eine

Erhöhung der Wasserstoffkonzentration im Plasma bewirkt z. B. eine Verringerung der Ätzreaktion von Si und eine Steigerung der Deposition. Eine Zugabe von O_2 hingegen bewirkt eine Oxidation des entstehenden Kohlenstoffes und verringert somit die Bildung des Fluorocarbon-Filmes [8]. In Abb. 4.3 ist der Verlauf der Grenze zwischen Ätzen und Polymerisation qualitativ dargestellt.

Die exakten Mechanismen, die zur Polymerisierung des Filmes an der Oberfläche führen, sind hingegen noch nicht abschließend geklärt. Umfangreiche Untersuchungen mit weiteren Fluorkohlenstoffen und Fluorkohlenwasserstoffverbindungen wurden in [78] durchgeführt. Im Gegensatz zu Coburn und Winters [77] wird allerdings vermutet, dass hauptsächlich CF und CF_2 für die Filmbildung verantwortlich sind und CF_3 nur eine untergeordnete Rolle spielt.

Eine sehr ausführliche Darstellung von Polymerisationsprozessen in Fluorkohlen-

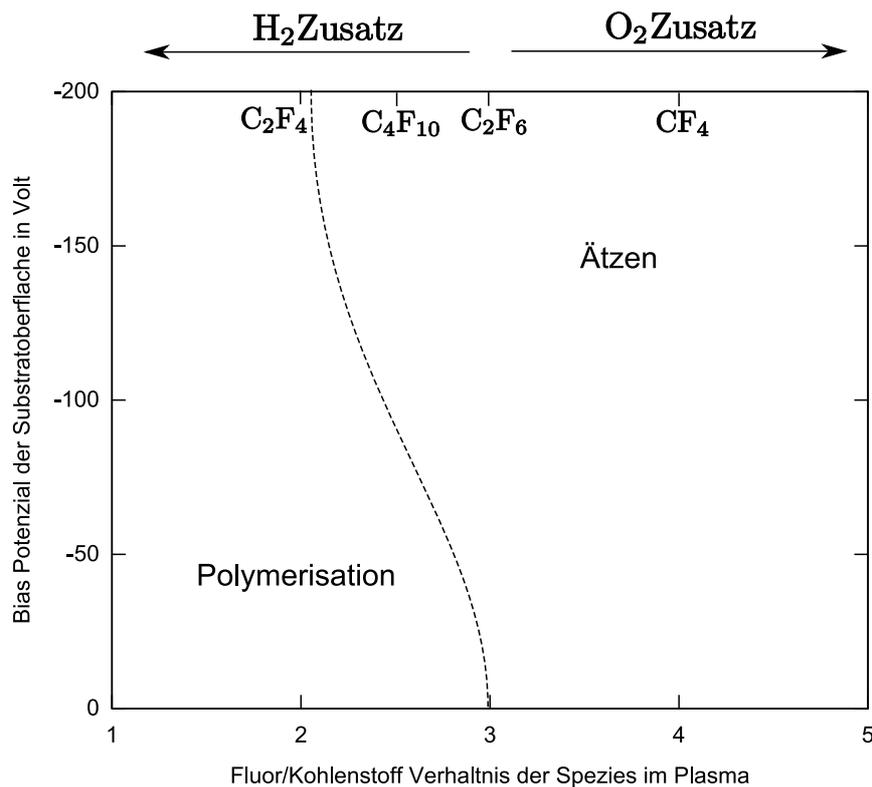


Abbildung 4.3 Die Grenze zwischen Ätzen und Deposition von Polymerfilmen wird durch das Fluor/Kohlenstoffverhältnis der reaktiven Spezies und dem Biaspotential der Probe bestimmt. (entnommen aus [17])

stoffplasmen findet sich in [79].

Ein Polymerfilm, wie er zur Seitenwandpassivierung beim Ätzen von Strukturen mit

Hilfe des Gaschopping-Verfahrens verwendet wird, ist in Abb. 4.4 gezeigt.

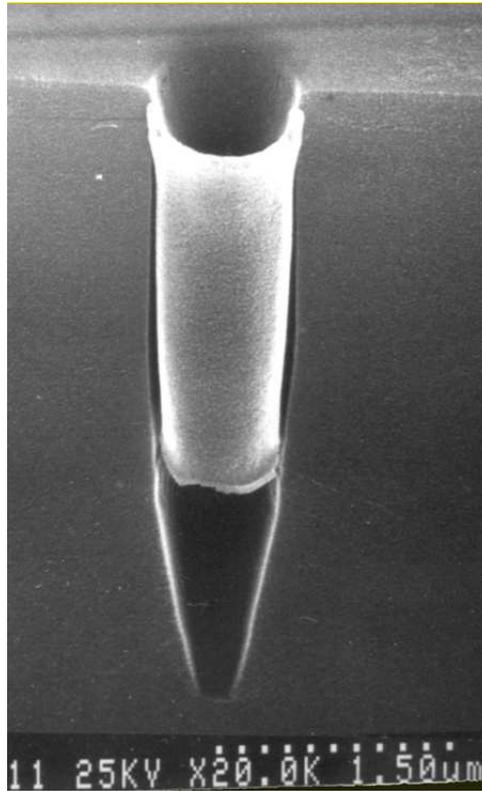


Abbildung 4.4 *Deponierter Polymerfilm an der Seitenwand eines zylindrischen Ätzprofiles (Quelle: Prof. I. W. Rangelow)*

Kapitel 5

Simulation

Die physikalischen Vorgänge im Inneren eines Plasmareaktors sind aufgrund der vielfältigen Einflüsse, die die Eigenschaften des Plasmas und die Reaktionsbedingungen an der Oberfläche der Probe bestimmen, äußerst komplex und bisher noch immer nicht vollständig durch genaue Modelle erklärt.

Ein wichtiges Mittel, um Modelle dieser Vorgänge zu verifizieren sowie Vorhersagen über die Auswirkungen von geänderten Prozessbedingungen machen zu können, sind Computersimulationen.

Computersimulationen werden in nahezu allen Bereichen von Wissenschaft und Technik angewendet. Sie sind besonders geeignet, um solche Systeme, die analytisch zu komplex oder noch unvollständig charakterisiert sind, zu untersuchen. Simulationsmodelle sind Abstraktionen der in der Realität stattfindenden, komplexen Prozesse. Sie sind immer idealisiert und nur innerhalb ihrer vorgegebener Grenzen gültig. Voraussagen von Modellen sind stets kritisch unter diesen Aspekten zu bewerten und können außerhalb der Modellgrenzen schlichtweg falsch sein [80].

Die Ausführung von Modellen in Computersimulationen gestattet die Durchführung von virtuellen Experimenten. Damit verbunden ist oftmals eine erhebliche Zeit- und Kostenersparnis im Vergleich zu realen Experimenten. Darüber hinaus gestatten Computersimulation auch die Ermittlung von Prozesszuständen und physikalischen Größen, deren Messung in realen Experimenten unmöglich oder nur mit sehr großen Aufwand zu bewerkstelligen ist.

Simulationen liefern im Allgemeinen sehr viele Informationen über die simulierten Prozesse. Das Management dieser Daten beinhaltet das Speichern, Verteilen, Suchen, sowie die statistische Vor- und Aufbereitung von Daten und ist ein wichtiger

Faktor für den Erfolg von Simulationssoftware in akademischen und kommerziellen Anwendungsbereichen.

Durch Anwenden analytischer und statistischer Auswertungsmethoden lassen sich Computersimulationen für die Optimierung von Prozessen einsetzen. In technischen Prozessen erfolgt diese Optimierung meist indirekt durch wiederholte Interpretation der Simulationsergebnisse und Reparameterisierung des Modells.

5.1 Überblick

Die Modellierung von Prozessen in Computersimulationen kann auf vielfältige Weise erfolgen. Besonders signifikant ist die Unterscheidung von statischen Modellen, bei denen die Zeit keine Rolle spielt und dynamischen Modellen, bei denen die zeitliche Änderung von Prozessgrößen von Interesse ist. In dynamischen Modellen können sowohl kontinuierliche zeitliche Abläufe als auch zeitdiskrete Ereignisse abgebildet werden. Beispiele für solche Simulationen finden sich in Tabelle 5.1.

Modelle können außerdem in stochastische und deterministische Modelle unterschieden werden. In stochastischen Modellen spielen diskrete oder kontinuierliche Zufallsgrößen eine entscheidende Rolle. In der Regel werden in stochastischen Modellen die Kenngrößen von statistisch verteilten Zufallsgrößen durch eine sehr große Anzahl von Zufallsexperimenten ermittelt. Sie sind somit eine Anwendung des Gesetzes der großen Zahlen. Im Gegensatz zu den stochastischen Modellen treffen deterministische Modelle Vorhersagen auf der Basis von vorgegebenen mathematischen Beziehungen oder algorithmischen Vorschriften zur Verarbeitung der Eingabedaten und Modellparameter [81].

5.1.1 Simulationsarten

Monte Carlo–Simulation

Zur Simulation stochastischer Modelle wird sehr häufig die Monte Carlo–Methode verwendet, weil sie intuitiv, einfach zu realisieren und stabil ist.

Sie basiert auf einer großen Anzahl von Zufallsexperimenten, deren Ausgang zur Berechnung der gesuchten Zufallsgröße aufgerechnet wird. Angewendet wird damit das Gesetz der großen Zahlen (Gl. (5.1)), welches in seiner einfachsten Form besagt, dass sich die relative Häufigkeit des Ausgangs eines unabhängigen Zufallsexperimentes X_i

		stochastisch	deterministisch
statisch		Integration durch Monte Carlo-Methode	Konzentration von Ionen im Plasma
dynamisch	diskret	Warteschlangensimulation in Industrieprozessen	Game of Life
	kontinuierlich	Positionsbestimmung GPS	Bauelementesimulation mittels Differentialgleichungen

Tabelle 5.1 *Beispiele für Problemklassen in der Simulation. Simulationen unterscheiden sich in der Berücksichtigung der Zeit (statisch/dynamisch) und der Verwendung von Zufallsgrößen (stochastisch/deterministisch)*

für sehr viele Experimente der Wahrscheinlichkeit für diesen Ausgang annähert. Für alle positiven Zahlen ϵ gilt daher

$$\begin{aligned} \bar{X}_n &= \sum_{i=1}^n ((X_i - E(X_i))/n), \\ \lim_{n \rightarrow \infty} P(\bar{X}_n | > \epsilon) &= 0. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Das Verfahren erhielt seinen Namen wegen dem zufälligen Element und der Nähe zum Glücksspiel nach dem Casino im monegassischen Stadtteil Monte Carlo.

Mathematisch gesehen, ist ein stochastisches System ein wahrscheinlichkeitsgewichteteter Weg im Phasenraum [80]. Die Methode ist geeignet, den Erwartungswert einer Zustandsgröße $\langle \mathcal{A} \rangle$

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_{x \in \Omega} P(x) A(x) \quad (5.2)$$

oder hochdimensionale Integrale numerisch näherungsweise zu berechnen.

$$I_A = \int_{x \in \Omega} P(x) A(x) d^n x. \quad (5.3)$$

Darin ist $P(x)$ ein normiertes statistisches Gewicht oder einfacher die Wahrscheinlichkeit für den Zustand x . $\langle \mathcal{A} \rangle$ ist der Wert der Größe \mathcal{A} im Zustand x . Die Summation im diskreten oder Integration im kontinuierlichen Fall erfolgt über den Phasen- oder Zustandsraum Ω des Systems [80].

Häufig ist der Zustandsraum so groß, dass eine vollständige Summation oder Integration nicht möglich ist. Statt die gesamte Summation durchzuführen, wird eine

Markovkette aus Zuständen $x_1, x_2, x_3, \dots \in \Omega$ so erzeugt, dass deren Häufigkeit wie das vorgegebene Gewicht $P(x)$ verteilt ist [82]. Das führt dazu, dass diejenigen Teile des Zustandsraumes Ω mit höherem Gewicht auch häufiger vertreten sind als jene mit niedrigerem. Dieses Vorgehen wird gewichtete Abtastung (engl. importance sampling) genannt.

Der Erwartungswert ergibt sich dann, gemäß dem Gesetz der Großen Zahlen (Gl. (5.1)), aus dem arithmetischen Mittelwert der Größe \mathcal{A} in diesen Zuständen

$$\langle \mathcal{A} \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{A}(x_i). \quad (5.4)$$

Die Genauigkeit der Näherung ist ausschließlich vom Umfang der Stichprobe und nicht von der Anzahl der Parameter abhängig. Daraus ergibt sich im Allgemeinen ein großer Rechenaufwand, um ausreichend viele Terme zu berechnen. Die Monte Carlo-Methode ist somit gut geeignet, analytisch schwer lösbare Probleme zu berechnen. Allerdings bestehen auch gravierende Nachteile, die gegen den Einsatz der Monte Carlo-Methode sprechen. Zum einen ist es je nach physikalischem System sehr schwierig, die Markovkette so zu generieren, dass die Verteilung der Zustände der tatsächlichen Wahrscheinlichkeit entspricht und dass der gesamte Zustandsraum abgedeckt wird. Der Algorithmus zur Generierung der Zustände x_i muss daher ergodisch¹ sein [80].

Ein weiterer Nachteil der Methode ist die häufige Berechnung von Funktionswerten $\mathcal{A}(x_i)$, die unter Umständen sehr zeitaufwändig sein kann. Gleichzeitig bietet sich darin ein großes Potenzial, die Berechnung durch Parallelisierung wesentlich zu beschleunigen.

Ein konkrete Anwendung der Methode für die Berechnung des Teilchenflusses in geätzten Strukturen ist die Simulation von Teilchenbahnen durch Monte Carlo-Raytracing. Als Zustände x_i werden die Orts- und Impulsvektoren der Teilchen im Plasma gewählt. Die Verteilung dieser Vektoren ist durch die Konzentration der Teilchen im Plasma sowie deren Winkel- und Energieverteilungsfunktionen gegeben. Die Funktion \mathcal{A} entspricht der Flussdichte von Teilchen an der Grenzfläche von

¹Ein System heißt ergodisch in Bezug auf eine Eigenschaft, wenn das Scharmittel (der Mittelwert aus vielen Elementen zu einem Zeitpunkt) gleich dem Zeitmittel (dem Mittelwert eines Elementes über einen langen Zeitraum) ist. Beispielsweise ist der Mittelwert der Augenzahl von 1000 gleichzeitig geworfenen Würfeln annähernd gleich dem Mittelwert von 1000 nacheinander ausgeführten Würfeln mit einem Würfel.

Probe und Gasphase. Sie wird berechnet, indem der Weg von Teilchen entlang ihrer Bewegungsrichtung verfolgt wird. Dabei kann es beim Auftreffen an Oberflächen zu einer oder mehrfacher Reflexion kommen.

Finite Elemente-Methode

Ein weiteres Verfahren zur näherungsweise numerischen Berechnung von Zustandsgrößen eines Systems ist die Finite Elemente-Methode (FEM). Sie dient insbesondere zur Approximation von elliptischen Differentialgleichungen und Integralgleichungen mit Randbedingungen [41]. Viele komplexe dynamische Systeme in den Ingenieur- und Naturwissenschaften lassen sich so modellieren. Beispiele sind das Fließverhalten von Fluiden, die Verformung von Materialien und die Wärmeleitung in Festkörpern. In der Finiten Elemente Methode wird das Lösungsgebiet der gesuchten Differentialgleichung zunächst in eine beliebig große Anzahl von Elementen endlicher (finiter) Größe aufgeteilt. Auf den Elementen werden sogenannte Basisfunktionen definiert. Die Besonderheit dieser Basisfunktionen besteht darin, dass sie lokalen Support haben, d. h. nur auf dem eigentlichen und wenigen anderen umliegenden Elementen verschieden von Null sind. In der Regel werden als Basisfunktionen Polynome niedrigen Grades gewählt oder ihre Struktur wird bereits durch die physikalischen Problemstellung impliziert. Die gesuchte Lösung der Differentialgleichung wird durch eine Linearkombination der Basisfunktionen approximiert [64].

In Abb. 5.1 ist die Finite Elemente-Methode schematisch für die Approximation einer eindimensionalen Funktion durch lineare Basisfunktionen mit lokalem Support dargestellt. Durch Linearkombination der einzelnen Basisfunktionen in einem Element erhält man für jedes Element eine Elementmatrix. Die Elementmatrizen der einzelnen Elemente werden zu einer sogenannten Steifigkeitsmatrix zusammengefasst und entsprechend ihrem Support über benachbarte Elemente überlappend aufaddiert. Die Steifigkeitsmatrix spiegelt die Beziehung der Elemente untereinander wider.

Die einzelnen Basisfunktionen werden mit Testfunktionen, die ebenfalls lokalen Support besitzen, multipliziert und mit den Randbedingungen in die Differentialgleichung als Lösungsansatz eingesetzt. Die Differentialgleichungen werden in der Regel numerisch integriert. Die Tatsache, dass die Basisfunktionen nur lokalen Support besitzen, führt dazu, dass statt der Integration eine Summation über die einzelnen Elemente durchgeführt werden kann. Aus der numerischen Integration und den Elementen der Steifigkeitsmatrix ergeben sich die Koeffizienten für ein großes lineares

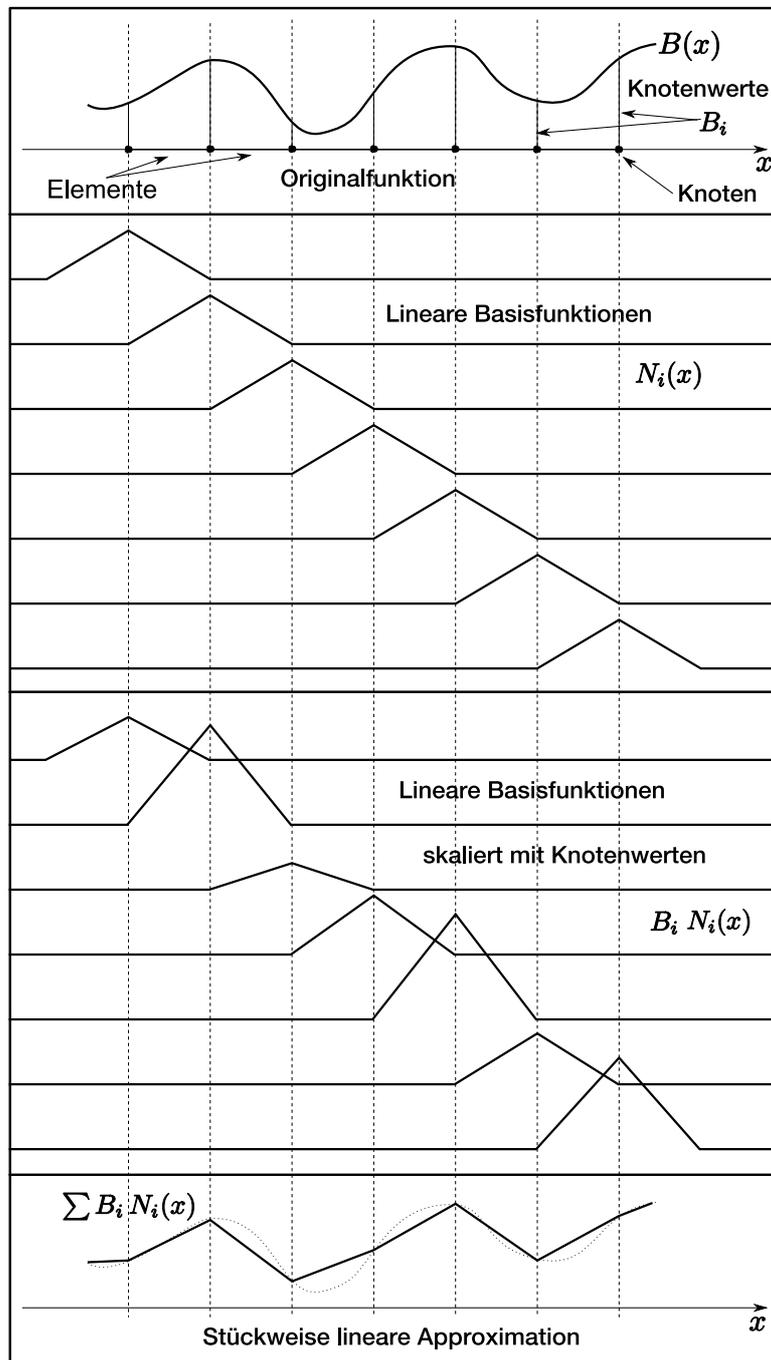


Abbildung 5.1 *Finite Elemente-Approximation einer unbekannt Funktion durch lineare Basisfunktionen mit lokalem Support. Die unbekannt Knotenwerte B_i werden als Lösung eines linearen Gleichungssystems berechnet, dessen Koeffizienten sich durch gewichtete numerische Integration der unbekannt Funktion $B(x)$ ermitteln lassen. (Bild nach Cohen [64])*

Gleichungssystem, dessen Lösung die gesuchten Linearkoeffizienten sind.

Die Finite Elemente-Methode hat gegenüber anderen Simulationsverfahren eine Reihe von Vorzügen, aber auch einige Nachteile. Prinzipiell lässt sich die Methode auf nahezu alle Systeme anwenden, die sich durch partielle Differentialgleichungen modellieren lassen. Die Exaktheit der Lösung ist nur bestimmt durch die Anzahl der Elemente, in die das Lösungsgebiet unterteilt wird, sowie dem Funktionsraum der gewählten Basisfunktionen. Man kann zeigen, dass die Finite Elemente-Methode die optimale Lösung innerhalb des durch die Basisfunktionen aufgespannten Funktionsraumes liefert [64].

Nachteilig ist der hohe Berechnungsaufwand, der sich insbesondere bei der Lösung sehr großer Systeme ergibt. Die Methode ist jedoch gut parallelisierbar.

5.1.2 Plasma- und Ätzsimitatoren

Die Simulation von Plasmaätzprozessen ist wegen der Vielzahl an Parametern äußerst komplex und aufwändig. Insbesondere die Verbindung von makroskopischen Plasmasimulationen und Ätzsimulationen der Topografie in mikroskopischen Größenordnungen ist in der Praxis schwierig zu realisieren [2]. Die meisten Simulatoren sind daher auf die eine oder andere Simulation ausgerichtet.

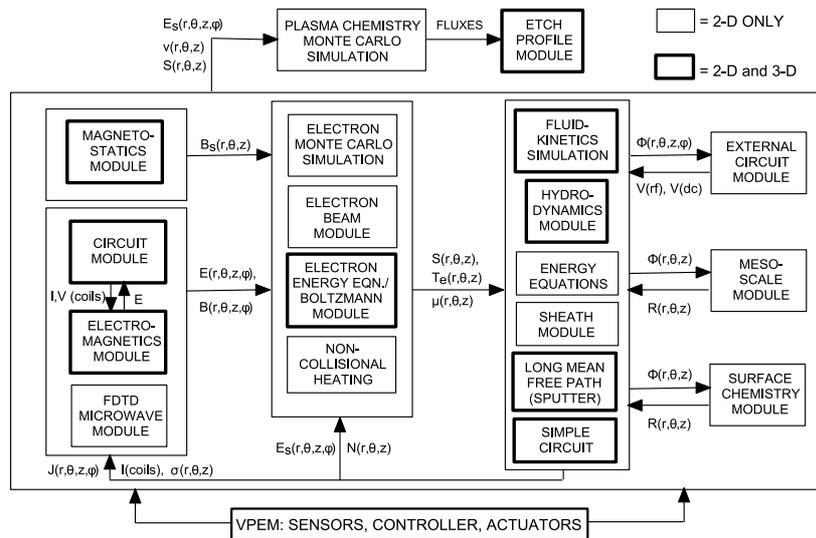
Makroskopische Plasmasimulationen

Makroskopische – d. h. in der Größenordnung der Reaktorgeometrie angesiedelte – Plasmamodelle sind ein wichtiger Bestandteil einer integrierten Plasmaprozesssimulation. Sie berechnen den Fluss aller Reaktanten, welche die Probenoberfläche aus dem Plasma erreichen. Diese Flüsse lassen sich nachfolgend in Oberflächenmodellen im mikroskopischen Bereich in der Topologiesimulation zur Berechnung lokaler Ätzraten verwenden.

Um die Flüsse der Reaktanten an der Oberfläche zu berechnen, müssen makroskopische Plasmamodelle die elektromagnetischen Vorgänge, den Energietransport durch Elektronen und die Ionisationsvorgänge im Plasma zusammenhängend modellieren. In den letzten Jahren wurden für diese Herausforderung einige Softwarepakete entwickelt und erfolgreich für die Simulation von Plasmareaktoren eingesetzt [83–85]. In diesen Simulatoren werden die partiellen Differentialgleichungen, die sich aus den Erhaltungsgleichungen der Masse, des Impulses und der Energie ergeben, numerisch

für Elektronen, positive und negative Ionen sowie neutrale Reaktanten gelöst. Außerdem sind darin die Maxwellgleichungen zur Berechnung des elektrischen Feldes und die Poissongleichung zur Ermittlung des elektrostatischen Potentials enthalten. Als hervorragendes Beispiel einer makroskopischen Plasmasimulation ist das Hybrid Plasma Equipment Model (HPEM) zu nennen, das an der Universität von Illinois entwickelt wurde [3]. Mit diesem Simulator lassen sich komplexe Reaktorgeometrien, Plasmaquellen und verschiedene Material-Gas-Systeme simulieren. Das HPEM besteht aus drei wesentlichen Modulen: dem elektromagnetischen Modul (EMM), dem Elektronen-Energie-Modul (EEM) und einem Gaskinetik-Chemie Modul (GK-CM). Die induktiv eingekoppelten elektromagnetischen Felder werden durch das

SCHEMATIC OF THE HYBRID PLASMA EQUIPMENT MODEL



University of Illinois
Optical and Discharge Physics

Abbildung 5.2 Schema des HPEM - Hybrid Plasma Equipment Model Simulators (entnommen aus *INTRODUCTION TO THE HYBRID PLASMA EQUIPMENT MODEL*, M. J. Kushner, University of Illinois)

EMM berechnet und im EEM verwendet, um die Elektronentemperatur und die Elektronenreaktionskoeffizienten ortsabhängig zu ermitteln. Aus diesen Ergebnissen wird im GKCM die Dichte der Reaktanten sowie das Plasmapotenzial berechnet. Die Dichten, Ionisierungsgrad und Potenziale des GKCM dienen in einem iterativen Verfahren dem EMM und EEM zur schrittweisen Konvergenz hin zu einer stabilen Lösung.

Randschichtsimulationen

Die Randschicht (engl. sheath) formiert sich zwischen dem Plasma und den umgebenden Oberflächen. Innerhalb dieser Schicht bildet sich ein starkes elektrisches Feld aus, welches die beweglicheren Elektronen daran hindert, das Plasma zu verlassen und positive Ionen aus dem Plasma heraus beschleunigt. Auf ihrem Weg durch die Randschicht erfahren die Ionen, abhängig von ihrer mittleren freien Weglänge und der Dicke der Randschicht, Stöße mit anderen Gasteilchen. Die Randschicht hat somit einen großen Einfluss auf die Winkel- und Energieverteilung der Ionen.

Ein Randschichtmodell, welches in vielen Plasmaätzsimulatoren implementiert wurde, ist das Godyak-Sternberg-Modell [86]. Das relativ große Netz, welches bei der Simulation der elektrischen Felder im Plasma verwendet wird, kann die Randschicht nur unzulänglich abbilden. Außerdem basieren die Plasmasimulationen zumeist auf den Gleichungen der Fluidodynamik, was einen direkten Zugriff auf die Winkel- und Energieverteilungsfunktionen der Ionen verhindert. Aus diesem Grund basieren die meisten Simulationen der Randschicht auf der Monte Carlo-Methode, um die Winkel- und Energieverteilung der Ionen an der Probenoberfläche zu ermitteln. Eine Implementation dieser Methode findet sich im Softwarepaket IONTRANS-The Ion ED&AD-Simulator, welches im SPEEDIE² Profilsimulator [87] integriert wurde.

Ein weiterer Simulator, der die Randschichtsimulation mithilfe der Monte Carlo-Methode implementiert, ist PCMCM³ [88], welches wie HPEM an der University of Illinois entwickelt wurde. Es verwendet die Ausgaben der HPEM Module und simuliert Pseudo-Partikel aller Reaktanten, um die Energie- und Winkelverteilungsfunktionen an der Probenoberfläche zu bestimmen.

Oberflächenreaktionen

Die Evolution geätzter Strukturen ist durch die lokale Ätzrate festgelegt. Um sie zu bestimmen, müssen alle maßgeblichen physikalischen Details im Oberflächenreaktionsmodell berücksichtigt werden. Besonders der Transport von Neutralen und Ionen innerhalb von Strukturen, inklusive der Reflexion, Sputtern und Redeposition von Material, diffuse Reemission von Neutralen, Oberflächendiffusion spielen eine wichtige Rolle bei der realistischen Modellierung [2; 89].

²SPEEDIE - Stanford Profile Emulator for etching and deposition in IC engineering

³PCMCM - Plasma Chemistry Monte Carlo-Model

Die am meisten genutzte Simulationstechnik ist die Monte Carlo-Simulation, um die lokale Flussdichte und die Verteilung von Neutralen und Ionen in Strukturen zu simulieren. Sie kann mit der Simulation der Randschicht gekoppelt sein. Diese Technik wird beispielsweise in SPEEDIE umgesetzt.

5.1.3 Kritik/Unzulänglichkeiten

Die Entwicklung von Plasmasimulationen und Oberflächenmodellen hat in den letzten Jahren große Fortschritte zu verzeichnen. Allerdings ist eine vollständige Integration von makroskopischen Plasmamodellen und mikroskopischen Oberflächenmodellen immer noch nicht zufriedenstellend realisiert. Besonders der Übergang von FEM und semi-analytischen Lösungen in Plasmamodellen zur Monte Carlo-Methode in Topografiesimulationen reduziert die erreichbare Genauigkeit und die Geschwindigkeit von Simulationen. Die erreichbare Genauigkeit der Plasmasimulation werden durch das statistische Rauschen, welches aus der Monte Carlo-Methode resultiert, nicht optimal genutzt.

5.2 Topografische Oberflächenmodelle

Das Ätzen und Deponieren von Materialien im Plasma findet stets an der Grenzfläche von ionisiertem Gas und der Probe statt. Während des Prozessablaufes unterliegt die Probenoberfläche dynamischen Veränderungen und lokalen räumlichen Verschiebungen, die durch die lokalen Ätz- und Depositionsraten hervorgerufen werden. Die Topografie des betrachteten Probengebietes ist demzufolge ständigen Veränderungen unterlegen.

Die geometrische Modellierung solcher beweglicher Grenzflächen ist seit langem Gegenstand der Forschung. Wiederum gab die Entwicklung und Verbreitung von leistungsfähigen Grafikprozessoren in Computern der Modellierung und Darstellung von dreidimensionalen Oberflächen einen gewaltigen Vorschub [90].

Die numerischen Methoden und Algorithmen, die die Bewegung der Oberfläche ermitteln, spielen eine ganz entscheidende Rolle bei der Wahl geeigneter Topographiemodelle, weil von ihnen die Genauigkeit, Stabilität und Effizienz eines Simulators abhängen [90]. Für die Topographiesimulation in Plasmaätz- und Depositionsprozessen existieren im Wesentlichen zwei Arten von topographischen Oberflächenmodellen - die Volumenzellalgorithmen und die Flächennetzalgorithmen [90; 91].

Darüber hinaus wurden sogenannte netzfreie Algorithmen entwickelt, die jedoch noch Gegenstand aktueller Forschung sind [92].

5.2.1 Level-Set-Methode

Die Level-Set- oder Niveaumengen-Methode ist ein numerisches Verfahren, um Kurven oder Oberflächen von Objekten und deren Bewegungen zu approximieren. Das Verfahren wurde seit den 1980iger Jahren vor allem von den amerikanischen Mathematikern Stanley Osher und James Sethian [93] entwickelt und wird auf verschiedenen Anwendungsgebieten zur Simulation eingesetzt.

Bei der Level-Set-Methode muss die Topologie, wie z. B. die Anzahl nicht zusammenhängender Gebiete, a priori nicht bekannt sein, und sie kann sich während der Berechnung ändern. Dies erlaubt die einfache Verfolgung der Ränder beweglicher Objekte.

In der Level-Set-Methode wird im dreidimensionalen Raum ein zweidimensionaler Rand Γ (eine Kurve) als Nullstellenmenge (Niveaumenge) einer dreidimensionalen Hilfsfunktion $\phi(\vec{x})$ beschrieben⁴.

$$\Gamma(\vec{x}) = \{\vec{x} | \phi(\vec{x}) = 0\} \quad (5.5)$$

Die Hilfsfunktion wird auf dem ganzen betrachteten Gebiet definiert, und zwar mit positiven Werten auf der einen und negativen Werten auf der anderen Seite von Γ . Bei einem zeitlich veränderlichen Rand kann analog eine zeitabhängige Hilfsfunktion $\phi(\vec{x}, t)$ definiert werden. Bewegt sich solch ein Rand entlang seiner Normalenrichtung mit einer Geschwindigkeit $\vec{v}(\vec{x}, t)$ in Richtung positiver $\phi(\vec{x}, t)$, kann man diese Bewegung mittels einer so genannten Hamilton-Jacobi-Gleichung für die Hilfsfunktion darstellen

$$\frac{\delta\phi}{\delta t} = -\vec{v} \cdot |\nabla\phi| \quad (5.6)$$

Diese partielle Differentialgleichung kann mit Hilfe von numerischen Näherungsmethoden (z. B. Finiten Differenzen) auf einem numerischen Gitter berechnet werden. Um die Kurve Γ zu verschiedenen Zeitpunkten der Bewegung darzustellen, muss nun die Nullstellenmenge der Funktion ϕ verfolgt werden [93; 94].

⁴Das Verfahren ist auch auf mehr oder weniger als drei Dimensionen anwendbar

5.2.2 Volumenzell-Methode

Bei den Volumenzellmethoden [95; 96] wird das gesamte Raumgebiet der untersuchten Probe durch ein Gitter in kleine quaderförmige Volumenelemente (Voxel) zerlegt. Jedem Element im Gitter werden die Materialeigenschaften zugewiesen, sowie der Anteil des geätzten Materials in diesem Volumenelement. Die Ätzung erfolgt durch das sukzessive Entfernen von Volumenelementen, abhängig von der ermittelten lokalen Ätzrate und der Anzahl der exponierten Quaderflächen.

Mit Volumenzell-Methoden können beliebige geometrische Strukturen, wie z. B. mit Löchern oder unzusammenhängende Volumina, modelliert werden.

Ein wesentlicher Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass kein Selbstüberschneidung oder Schleifenbildung der Oberfläche auftreten kann.

Allerdings bedingt die Zerlegung in kleine Volumenelemente einen sehr hohen Speicherplatzbedarf. Dieser kann durch die Verwendung effizienter Datenstrukturen in der Simulation stark verringert werden. Üblicherweise werden Oct-Trees oder Quad-Trees⁵ eingesetzt, um Suchen und Modifikationen der Voxeldaten effizient zu ermöglichen. In Abb. 5.3 ist die Aufteilung eines zweidimensionalen Gebietes dargestellt. Die Unterteilung in kleinere Elemente erfolgt hierarchisch, solange ein Teilgebiet verschiedene Materialeigenschaften enthält oder ein Grenzwert für die Kantenlänge der Elemente erreicht ist.

Der Volumenzell-Methode ist eine Ungenauigkeit der Darstellung inhärent, die durch die minimale Kantenlänge der Voxel gegeben ist. Außerdem werden durch die Verwendung von Quadern, bestimmte Ätzrichtungen bevorzugt [90].

Die Volumenzell-Methode ist deshalb für die Topographiesimulation von Ätz- und Depositionsprozessen nur bedingt geeignet.

5.2.3 Flächennetze

Im Gegensatz zur Volumenzell-Methode wird bei den Flächennetzen nur die Grenzfläche zwischen Festkörper und Gasphase modelliert. Punkte auf der Oberfläche werden dabei durch Kanten verbunden, aus denen wiederum zusammenhängende Flächenelemente entstehen. Die Lage der Punkte, sowie die Form und Größe der Flächenelemente sind abhängig vom gewählten Teilungsverfahren und müssen nicht notwendigerweise gleich sein. Üblich sind Aufteilungen in Dreiecke, Rechtecke oder

⁵Bäume, deren Elemente entweder 8(4) oder gar keine Elemente enthalten

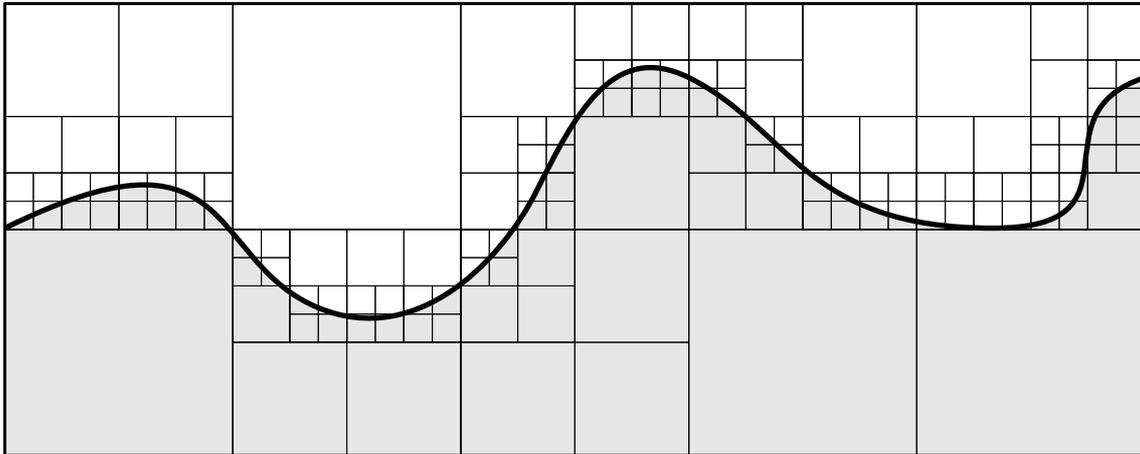


Abbildung 5.3 Hierarchische Aufteilung eines zweidimensionalen Raumgebietes in rechteckige Flächenelemente. Eine Aufteilung eines Flächengebietes findet nur statt, solange ein Teil der Grenzfläche im Gebiet enthalten ist und eine minimale Größe nicht unterschritten wird. Die Daten können sehr effizient in Quad-Trees oder k - d -Bäumen [97] gespeichert und verarbeitet werden.

gemischte Teilungen wie in Abb. 5.4. Es existieren verschiedene Algorithmen, bei denen entweder die Punkte oder die Flächen entlang eines Vektors entsprechend der lokalen Ätzrate bewegt werden. Im Allgemeinen liefern Simulationen, die auf Flächennetzen basieren, sehr exakte Ergebnisse. Es ist jedoch notwendig, während der Topologiesimulation das Netz ständig zu verwalten, weil topologische Instabilitäten, wie Selbstüberschneidungen und Partitionierung auftreten können. Diese Effekte müssen lokalisiert und durch das Netzmanagement korrigiert werden, um die Effizienz und Korrektheit des Simulators zu erhalten. In Abb. 5.5 ist die Konfiguration eines Flächennetzes vor und nach einem Ätzschritt dargestellt. Im umrandeten Bereich kommt es zu einer Selbstüberschneidung von Flächen, die korrigiert werden muss.

Die Generierung hochqualitativer Netze ist entscheidend für die Effizienz und Genauigkeit der darauf angewandten Simulationsalgorithmen. Sowohl die Anzahl von Punkten als auch deren Verteilung innerhalb des Simulationsgebietes beeinflussen beide Faktoren.

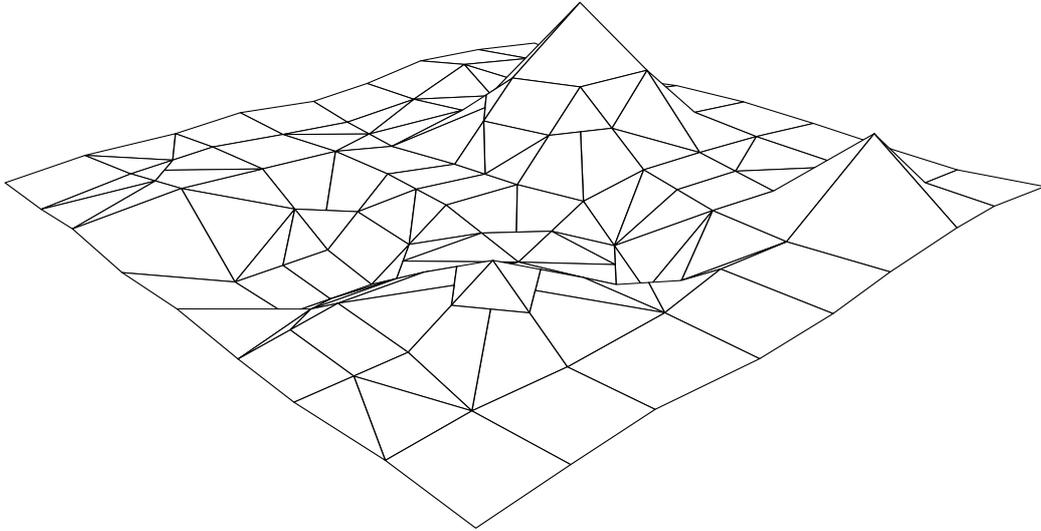


Abbildung 5.4 *Flächennetz mit gemischten Elementen (Drei- und Vierecke)*

Delaunay-Triangulation

Zur effizienten Erzeugung von Dreiecksnetzen wird in verschiedensten Bereichen der Simulation und Visualisierung von Oberflächen die Delaunay-Triangulation angewendet.

In einer Delaunay-Triangulation wird erreicht, dass die Dreiecke des Netzes möglichst große Innenwinkel aufweisen. Der kleinste Innenwinkel im gesamten Netz wird maximiert. Diese Eigenschaft wird durch die Erfüllung der Umkreisbedingung erreicht, in welcher kein anderer Eckpunkt im Umkreis eines Dreieckselementes vorhanden sein darf. Dadurch werden annähernd gleichseitige Dreiecke im Netz erzeugt, was vorteilhaft zur Maximierung der Genauigkeit für zahlreiche Algorithmen ist.

Die Delaunay-Triangulation ist nicht eindeutig und es können weitere Bedingungen an die Größe und Form der erzeugten Elemente gestellt werden, die eine weitere Steigerung der Genauigkeit oder Reduzierung des Berechnungsaufwandes bewirken. Im Abb. 5.6 ist die Zerlegung eines Gebietes mittels Delaunay Triangulation und die Umkreise der Dreiecke dargestellt. Im dreidimensionalen Raum wird statt der Umkreisbedingung die analoge Umkugelbedingung verwendet, welche dann aus jeweils vier Punkten einen Tetraeder erzeugt.

Es gibt mehrere Ansätze zur Konstruktion von Delaunay-Triangulationen [97–100]. Der beste erreichte Ansatz erreicht eine Laufzeitkomplexität⁶ von $\mathcal{O}(n \log n)$ [97].

⁶Die O-Notation oder Landausymbole werden in der Informatik bei der Analyse von Algorithmen verwendet und geben ein Maß für die Anzahl der Elementarschritte in Abhängigkeit von der

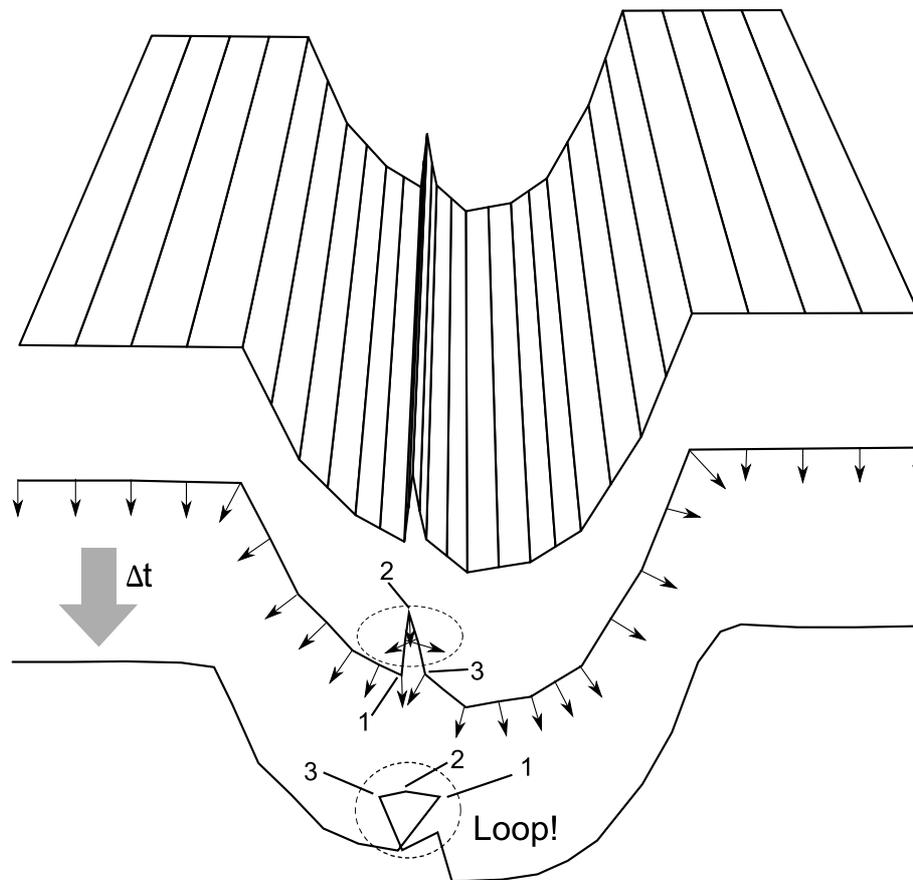


Abbildung 5.5 Flächennetz einer langen parallelen Grabenstruktur und zweidimensionale Projektion der Schnittfläche. Die eingezeichneten Vektoren beschreiben das Vordringen der Ätzfront in der Zeit Δt . Durch die Verschiebung der Knoten 1, 2 und 3 tritt im umrandeten Bereich Selbstüberschneidung auf und das Netz muss korrigiert werden.

Stringalgorithmus

Ein Spezialfall der Flächennetze ist die Reduktion der Oberfläche auf nur eine Dimension [101].

Für viele geätzte Strukturen ist es ausreichend, Profilquerschnitte zu simulieren. Dies trifft insbesondere immer dann zu, wenn es sich um rotationssymmetrische Löcher oder lange gerade Gräben handelt. In diesen, sehr häufig auftretenden Fällen, reicht es aus, die Oberfläche in der Schnittebene durch eine gekrümmte linienförmige

Größe der Eingangsvariablen an.

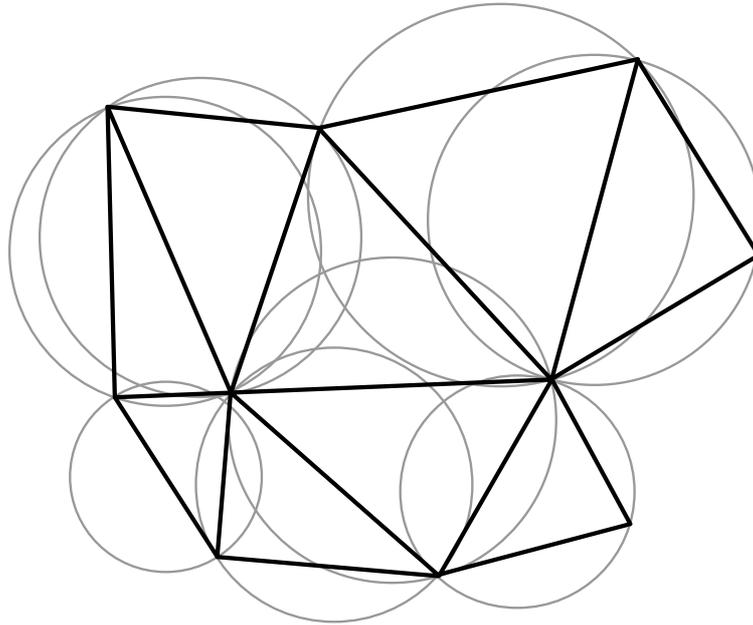


Abbildung 5.6 *Delaunay-Triangulation mit zugehörigen Umkreisen. Innerhalb eines Umkreises dürfen sich keine weiteren Eckpunkte von Dreiecken befinden (Umkreisbedingung).*

Grenze (engl. String) zwischen Material und Gasphase zu modellieren. Aus Symmetriegründen liegt die Ätzrichtung in diesen Fällen immer in der Schnittebene. Die Verschiebung der Oberfläche kann somit auf zwei Dimensionen reduziert werden, allerdings muss der Einfluss der Tiefendimension in der Berechnung der Ätzrate berücksichtigt werden.

Im Stringalgorithmus wird die Oberfläche durch Knoten diskretisiert, zwischen denen durch gerade Linien interpoliert wird (Abb. 5.7). Die Orientierung der Linien wird dabei so gewählt, dass ihr Normalenvektor in Richtung der Gasphase zeigt. Eine Glättung der interpolierten Oberfläche in der Darstellung kann durch die Verwendung von B-Splines erreicht werden. Jeder Knoten i mit dem Ortsvektor \vec{p}_i erhält einen normierten Bewegungsvektor \vec{d}_i , der in die entgegengesetzte Richtung der Winkelhalbierenden der beiden Normalenvektoren \vec{n}_{i-1}, \vec{n}_i der angrenzenden Linienelemente zeigt [95]

$$\vec{d}_i = -\frac{\vec{n}_{i-1} + \vec{n}_i}{|\vec{n}_{i-1} + \vec{n}_i|}. \quad (5.7)$$

Während der Simulation werden die Knoten entlang ihres zugewiesenen Bewegungsvektors \vec{v}_i um den Betrag, der sich aus der lokalen Ätzrate $ER(\vec{p}_i)$ und der Simula-

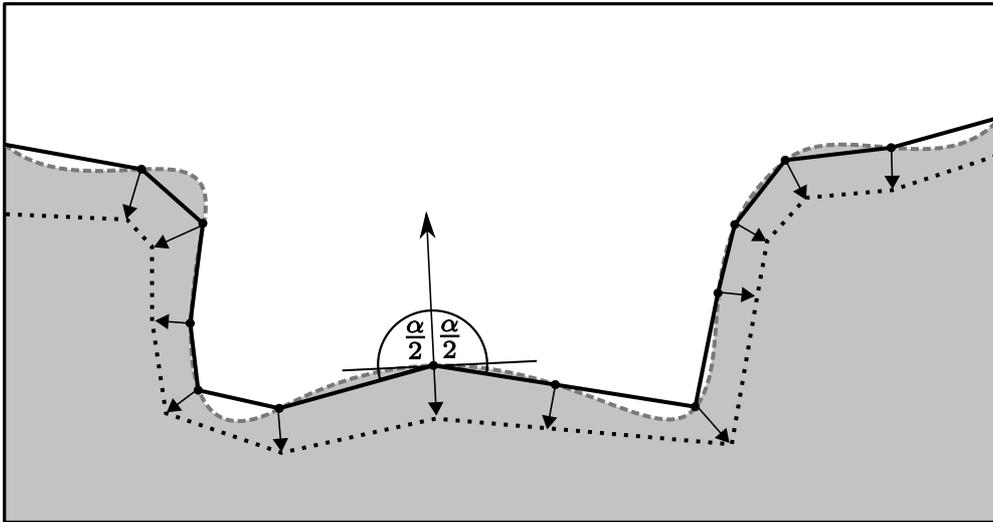


Abbildung 5.7 Approximation der Probenoberfläche durch linear interpolierten Linienzug und Voranschreiten der Ätzfront in einem Simulationsschritt

tions schrittweite Δt ergibt, verschoben

$$\vec{p}_{i|t+\Delta t} = \vec{p}_{i|t} + ER(\vec{p}_i) \cdot \vec{d}_i. \quad (5.8)$$

Nach dem Verschieben der Knoten im String kann es passieren, dass sich Teile der Oberfläche überschneiden und eine Korrektur des Strings notwendig wird. Die Bildung einer solchen Schleife ist in Abb. 5.8 dargestellt. Normalerweise wird der, durch die Überschneidung abgetrennte Teil der Probe aus der Simulation entfernt.

In einer der ersten Beschreibungen des Stringalgorithmus in Ätzsimulationen durch Jewett [101] wurde ein sehr simpler Algorithmus zum Auffinden der Schleifen vorgestellt, der auch in den meisten anderen Implementierungen [4] eingesetzt wird. Dabei werden die einzelnen Abschnitte des Strings nacheinander auf einen Schnittpunkt mit (fast) allen nachfolgenden Abschnitten getestet. Offensichtlich ist die Komplexität dieses Algorithmus $\mathcal{O}(n^2)$. Je kleiner die Strukturen, die durch den String abgebildet werden, sind, um so dichter müssen die Knoten auf dem String verteilt sein. Bei einer Stringlänge von 1000 Knoten müssen also nahezu 500 000 Schnittpunkttests durchgeführt werden.

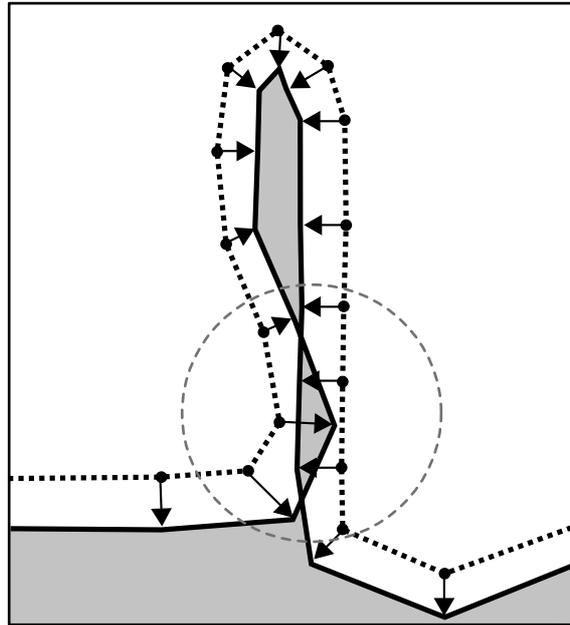


Abbildung 5.8 *Selbstüberschneidung des Strings nach Ätzschritt*

Verbesserung des Stringalgorithmus

Weil die quadratische Erhöhung des Rechenaufwandes für die Abbildung sehr detaillierter Strukturen, die viele Knoten erfordern, nicht hinnehmbar ist, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein neues Verfahren entwickelt, welches eine entscheidende Verringerung des Berechnungsaufwandes mit sich bringt.

Der String, welcher die Oberfläche repräsentiert, kann als Abfolge von zusammenhängenden Streckenabschnitten aufgefasst werden. Die einzelnen Strecken werden entsprechend ihrer Abfolge im String nummeriert.

Im ersten Schritt des Verfahrens werden die echten Schnittpunkte der Strecken mithilfe des Sweep-Algorithmus [97] ermittelt. Dafür werden zunächst die Anfangs- und Endpunkte der Streckenabschnitte nach ihren x -Koordinaten sortiert und in aufsteigender Reihenfolge in eine Ereignisstruktur eingefügt. Die imaginäre Sweep-Linie überstreicht von links nach rechts parallel zur y -Achse das Gebiet (siehe Abb. 5.9) des Strings und führt an den Ereignispunkten Operationen aus. Wird ein Anfangspunkt einer Strecke erreicht, so wird diese in eine, nach der Reihenfolge der Strecken in y -Richtung sortierten, Statusstruktur eingefügt. Beim Einfügen wird ein Schnittpunkttest mit den darüber und darunterliegenden Strecken durchgeführt und – wenn vorhanden – in die Ereignisstruktur eingefügt. Auf diese Weise können alle k echten Schnittpunkte von n Strecken in der Zeit $\mathcal{O}((n+k)\log n)$ gefunden werden (Beweis

in [97]). Sowie ein echter Schnittpunkt aufgefunden wurde, werden die beteiligten Indizes der Strecken paarweise notiert. Aus Abb. 5.9 ist leicht zu erkennen, dass die Selbstüberlappungen des Strings durch Entfernen der an den Schnittpunkten ermittelten Bereiche, beseitigt werden können. Die entsprechenden Abschnitte werden aus dem String gelöscht und am Schnittpunkt wird ein neuer Knoten in den String eingefügt.

In Topografiesimulationen ist die Anzahl k der Schnittpunkte im Normalfall klein.

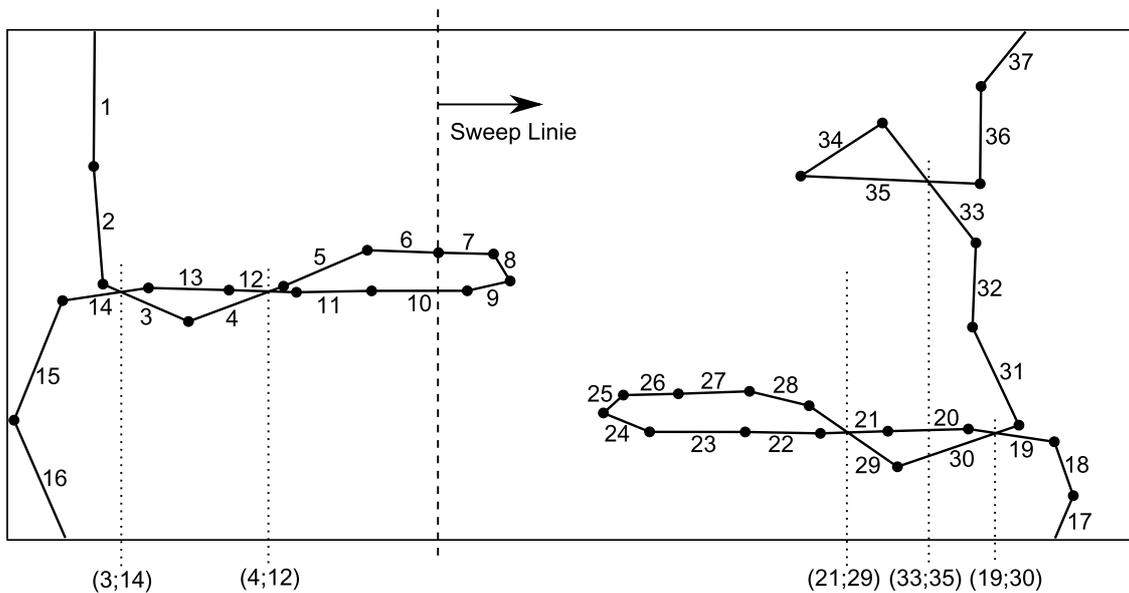


Abbildung 5.9 Sweepverfahren zum Entfernen von Schleifen bei der Profilevolution. Mithilfe des Sweep-Algorithmus [97] werden die Schnittpunkte der Stringabschnitte ermittelt und die Schleifenabschnitte notiert. Im Anschluss werden die Abschnitte aus dem String gelöscht.

Für eine Oberfläche mit 1000 Knoten und nur wenigen Schleifen sind mit dem verbesserten Verfahren somit nur Schnittpunkttests in der Größenordnung von $\approx 20\,000$ (anstelle der erwähnten $\approx 500\,000!$) nötig.

Durch die gefundene Verbesserung des Stringalgorithmus mithilfe des Sweep-Verfahrens reduziert sich der Aufwand des Stringmanagements besonders bei vielen Knoten im String erheblich: Laufzeitmessungen von typischen Simulationen mit ≈ 1000 Knoten ergaben eine bis zu 20 mal schnellere Berechnung der Oberflächengeometrie im Vergleich mit der in [101] postulierte Methode. Umgekehrt können bei gleicher Laufzeit von Simulationen mit dem Sweep-Verfahren Oberflächen mit mehr Knoten, d. h. mit höherer Genauigkeit, simuliert werden. Innerhalb des Managementschrit-

tes ist es außerdem notwendig, neue Knoten in Segmenten einzufügen, deren Länge zu groß im Vergleich zur erforderlichen Genauigkeit geworden ist oder Knoten, die zu dicht beieinander liegen, aus Effizienzgründen zu entfernen. Die Punkte müssen dabei keineswegs äquidistant sein. Eine weitere Verbesserung des Stringalgorithmus wurde in dieser Arbeit dadurch erreicht, dass die Richtungsänderung des Linienzuges (Krümmung) an den benachbarten Eckpunkten als Maß für das Einfügen neuer Punkte dient. Dadurch wird eine adaptive Verteilung der Knoten erreicht. Bereiche, in denen sich kleine Substrukturen ausbilden, sind dadurch durch entsprechend viele Knoten approximiert, während weitestgehend ebene Bereiche mit nur wenigen Knoten ausreichend genau modelliert sind (Abb. 5.10).

Besondere Sorgfalt erfordert die Implementierung des Netzmanagements, weil sich

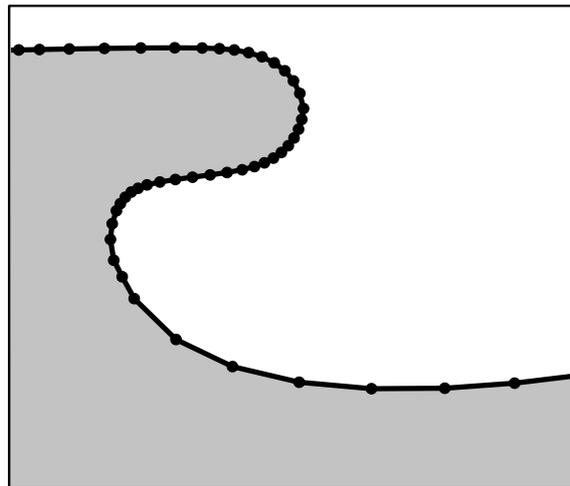


Abbildung 5.10 *Adaptive Verteilung der Stringknoten. Die Dichte der eingefügten Knoten orientiert sich an der Krümmung der approximierten Oberfläche*

beim Durchlaufen des Strings in einer bestimmten Reihenfolge, z. B. von Anfang zum Ende oder von links nach rechts, bevorzugte Ätzrichtungen und Asymmetrien einstellen.

5.2.4 Netzfremde Methoden

Während die Volumenzellalgorithmen und die Flächennetze auf einer Aufteilung des betrachteten Gebietes in ein Gitter oder Netz basieren, verwenden netzfremde Methoden direkt die gegebene Geometrie der simulierten Strukturen für die Berechnung. Ein Beispiel ist die geglättete Teilchen-Hydrodynamik, die eingesetzt wird, um Hy-

drodynamische Gleichungen zu lösen [102]. Darin werden eine große Zahl von Partikeln simuliert, die jedoch durch eine Glättungsfunktion über ein lokales Raumgebiet "verwaschen" werden. Die Berechnung der partiellen Differentialgleichungen für dieses Modell wird dann auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen abgebildet. Durch Superposition der Partikel, lässt sich eine Näherungslösung für das gesamte untersuchte Gebiet konstruieren.

Die netzfreien Methoden beinhalten sowohl Elemente der Monte Carlo-Simulation, indem man eine große Anzahl zufällig verteilter Partikel simuliert, als auch Eigenschaften der Finiten Elemente Methode, bei der lokale Lösungen des Problems durch Superposition zu einer globalen Lösung zusammengefügt werden.

Die netzfreien Methoden sind noch nicht mathematisch ausreichend fundiert, um für allgemeine Feldsimulationen korrekte und physikalisch nachvollziehbare Ergebnisse zu liefern.

Kapitel 6

Entwicklung des allgemeinen Teilchentransportmodells

Ausgehend von den Betrachtungen über die Eigenschaften von Plasmen und den Transport von Teilchen in verdünnten Gasen soll in diesem Kapitel als Schwerpunkt dieser Arbeit ein neues Modell des Transports von Plasmaspezies in Mikrostrukturen entwickelt werden. Die vorgestellte Modellierung unterscheidet sich grundsätzlich von der hydrodynamischen Betrachtung [37], die nur für dichte Gase in ausgedehnten Volumina gilt, und der Moleküldynamik, die die Ausbreitung und Interaktion von Einzelmolekülen modelliert [103].

Basierend auf der ähnlichen Problemstellung bei der Simulation der Lichtausbreitung in computergenerierten Szenen wird ein neuartiges mathematisches Modell entwickelt, welches die Ausbreitung von Teilchen in Mikrostrukturen unter den Bedingungen, wie sie in einem Plasmareaktor herrschen, beschreibt.

Durch die Entwicklung des allgemeinen Transportmodells im Rahmen dieser Arbeit wurde erstmalig eine analytisch-numerische Betrachtung des Teilchentransportes für die Entwicklung einer effizienten und exakten Simulation ermöglicht. Es stellt die Grundlage für die in den weiteren Kapiteln spezialisierten Modelle für den Transport sowohl von elektisch neutralen als auch geladenen Plasmaspezies dar.

Zunächst sollen die wichtigsten physikalischen Größen der Transporttheorie eingeführt und ihre Bedeutung erläutert werden. Mit ihrer Hilfe wird das allgemeine Transportmodell entwickelt.

6.1 Analogie zur Optik

Die räumliche und zeitliche Ausbreitung der Radikale, Ionen und Elektronen wird durch die Bewegung der Teilchen selbst, von den elektrischen und magnetischen Feldern, sowie der Geometrie innerhalb der geätzten Strukturen bestimmt. Die Partikel bilden Flüsse innerhalb und außerhalb der geätzten Strukturen. Deshalb heißt das Teilgebiet der Physik, welches sich mit dem Fließen von “Stoffen” befasst, Transporttheorie. Der betrachtete Stoff kann dabei sowohl Materie, Energie, Ladung oder sogar Licht sein.

Das Fachgebiet, welches am meisten von der Entwicklung der Transporttheorie profitierte und gleichzeitig die Methoden zur effektiven Berechnung von Transportphänomenen hervorbrachte, ist überraschenderweise die Computergraphik [104]. Für die realistische Darstellung der Beleuchtung von Szenen wurden seit der Einführung von grafikfähigen Computern verschiedene Verfahren entwickelt, die die Ausbreitung von Licht und dessen optische Wechselwirkung mit Oberflächen effizient modellieren.

Für die Eigenschaften und Besonderheiten der Lichtausbreitung werden innerhalb der physikalisch basierten Computergrafik folgende Annahmen getroffen

1. Licht breitet sich geradlinig aus.
2. Die Ausbreitung erfolgt mit Lichtgeschwindigkeit und somit in kleinem Maßstab praktisch verzögerungsfrei.
3. Lichtquanten interagieren nicht miteinander.
4. Licht kann sowohl als Fluss von Partikeln (Lichtquanten) als auch als Welle angesehen werden (Teilchen-Welle-Dualismus).

Im folgenden soll dargelegt werden, welche Gemeinsamkeiten und Unterschiede es bei der Berechnung der Verteilung von Reaktanten in geätzten Strukturen und der Modellierung von globalen Beleuchtungsmodellen gibt und wie die Methoden der Computergrafik effizient zur Berechnung verwendet werden können.

6.1.1 Problemstellung in der Computergrafik

Seit der Einführung grafikfähiger Computer war die realistische Darstellung von Szenen die treibende Kraft zur Entwicklung immer leistungsfähigerer Algorithmen

und Grafikhardware. Das Ziel einer photorealistischen computergenerierten Szenerie erforderte die Entwicklung globaler Beleuchtungsmodelle, die nicht nur die lokale Strahlungsintensität, sondern auch den Austausch von Licht zwischen Flächen beschreiben. Ein erster Ansatz eines globalen Beleuchtungsmodells war das Ray-Tracing-Verfahren, bei dem Strahlen durch die Szene geschickt werden und an den getroffenen Flächen Effekten wie Reflexion, Brechung und Absorption unterliegen. Das Ray-Tracing-Verfahren ist jedoch nicht für die Darstellung diffuser Reflexionen praktikabel [64].

Die ersten physikalisch basierten globalen Modelle, die auch diffuse Lichtreflexionen umfassten, wurden aus dem Bereich des Wärmetransportes durch Strahlung entlehnt. Die ersten Methoden dafür wurden bereits in den 1950er Jahren entwickelt [105].

6.1.2 Rechtfertigung der Analogie

Um die Methoden der Computergrafik auf den Transport von Reaktanten zu übertragen, müssen die Annahmen aus Abschnitt 6.1 über die Lichtausbreitung auch für den Stofftransport in geätzten Strukturen während des gesamten Ätzprozesses gelten.

Geradlinige Teilchenausbreitung

Ungeladene Teilchen in Gasen bewegen sich solange gleichförmig geradlinig, bis sie mit anderen Teilchen oder festen oder flüssigen Oberflächen wechselwirken oder eine äußere Kraft auf sie einwirkt.¹ Geladene Teilchen erfahren durch die Anwesenheit eines elektrischen oder magnetischen Feldes eine Beschleunigung. Die Annahme der geradlinigen Bewegung von geladenen Teilchen gilt also nur für Strukturen, in denen elektrische und magnetische Felder vernachlässigbar sind.

Verzögerungsfreier Austausch von Teilchen zwischen Flächen

Die mittlere Geschwindigkeit von Gasteilchen hängt von deren Temperatur ab (vgl. Abschn. 2.2). Bei den üblichen Prozesstemperaturen liegt die mittlere Geschwindigkeiten (Gl. (2.7)) von Gasmolekülen in der Größenordnung von einigen hundert Metern pro Sekunde. Die Gasmoleküle durchqueren somit die Strukturen in wenigen

¹Die Wirkung des Gravitationsfeldes kann hierbei vernachlässigt werden.

Nanosekunden. Verglichen mit den Prozesszeiten im Bereich von einigen Sekunden erfolgt der Austausch von Gasmolekülen zwischen beteiligten Flächen somit praktisch ohne Verzögerung.

Wechselwirkungsfreie Teilchenausbreitung

In Abschnitt 1.1 wurde bereits die typische Plasmadichte in Ätzprozessen genannt. Unter diesen Bedingungen liegt die mittlere freie Weglänge der Teilchen, wie sie in Abschnitt 2.3.1 definiert wurde, in der Größenordnung von einigen Zentimetern bis zu mehreren Metern. Verglichen mit den geätzten Strukturen, die eine Größe von $0.001 \dots 100 \mu\text{m}$ besitzen, sind Stöße zwischen Teilchen untereinander in den Strukturen äußerst unwahrscheinlich und können deshalb vernachlässigt werden.

Teilchen-Welle-Dualität von Gasmolekülen

Eine Aussage der Quantenmechanik ist, dass sich jedes Objekt der Quantenwelt sowohl als Teilchen als auch als Welle begreifen lässt.

Die klassische geometrische Optik, die bereits im 17. Jahrhundert durch Newton entwickelt wurde, basierte bereits auf der Annahme, dass Licht aus Teilchen bestehe. Weil die hier vorgestellten Methoden auf dieser klassischen geometrischen Optik basieren, ist der Wellencharakter der beteiligten Teilchen in diesem Zusammenhang deshalb ohne Bedeutung.

6.1.3 Äquivalenz der physikalischen Größen

Während sich die Computergrafik und die Theorie des Wärmestrahlungsaustausches mit dem "Transport" von Strahlung auseinander setzt, werden beim Ätzen masse-behaftete Materieteilchen innerhalb der Strukturen transportiert. Damit verbunden sind Unterschiede in der Notation der jeweiligen physikalischen Größen. Nachfolgend sollen die notwendigen physikalischen Größen und ihre jeweilige Entsprechung eingeführt werden.

Partikeldichte n / Konzentration

Sehr anschaulich ist die Vorstellung von Partikeln, die in einem gegebenem Volumen umherfließen. Partikel sind leicht zu zählen und ihre Bewegung im Raum kann nachvollzogen werden. Die Gesamtzahl $N(x)$ von Partikeln, bezogen auf ein Volumen V ,

ist die Partikeldichte n . Für einen Ort x ist sie definiert als

$$n(x) = \frac{dN(x)}{dV}. \quad (6.1)$$

Während in der klassischen Newtonschen Strahlenoptik von Partikeln oder Korpuskeln (kleinen Körperchen) ausgegangen wird, so spricht man in der Plasmachemie von der volumenbezogenen Teilchenzahl oder einfacher Konzentration.

Teilchenflussdichte ϕ

Man betrachtet nun einen Strom von Partikeln, die sich alle mit der gleichen Geschwindigkeit \vec{v} in die gleiche Richtung bewegen. Wie groß ist nun die Anzahl von Partikeln, die in einer Zeit dt eine infinitesimal kleine Fläche dA mit dem Winkel θ_\perp zur Flächennormalen durchqueren? Offensichtlich können nur Partikel, die sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Volumen mit der Grundfläche $dA \cos \theta_\perp$ und der Länge $v \cdot dt$ befunden haben, die Fläche in der Zeit dt durchdringen (Abb. 6.1). Die Gesamtzahl der Teilchen, die eine Fläche dA durchqueren, ist darum gegeben durch

$$\begin{aligned} N(\vec{x}) &= p(\vec{x}) dV \\ &= n(\vec{x})(v dt \cos \theta_\perp) dA. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Die Anzahl der Partikel ist somit proportional zur durchdrungenen Fläche und zur Zeit.

Der Grenzwert der Teilchenzahl für $t \rightarrow 0$ und $A \rightarrow 0$ heißt Teilchenflussdichte und ist definiert als

$$\phi(\vec{x}) = \frac{dN(\vec{x})}{\cos \theta_\perp dA dt} = \frac{d\Phi}{\cos \theta_\perp dA}. \quad (6.3)$$

Die Größe

$$\Phi(A) = \int_A \phi(\vec{x}) \cos \theta_\perp dA \quad (6.4)$$

heißt Teilchenfluss durch die Fläche A . Im Allgemeinen bewegen sich die Teilchen nicht alle in gleicher Richtung. Die Teilchenflussdichte ist daher von zwei Veränderlichen – dem Ort \vec{x} und der Richtung $\vec{\omega}$ – abhängig. Die Größe $\phi(\vec{x}, \vec{\omega})$ sei deshalb die Teilchenflussdichte in eine bestimmten Raumrichtung $\vec{\omega}$. Der Vektor $\vec{\omega}$ bezeichnet darin einen Raumvektor, dessen Größe durch den Betrag ω gegeben ist. Bezieht man nun die Teilchenflussdichte auf die Größe des Raumwinkels, so erhält man nach Gl. (6.4)

$$\Phi(A) = \int_A \int_{\Omega_K} \frac{\phi(\vec{x}, \vec{\omega})}{d\omega} \cos \theta_\perp d\omega dA = \int_A \int_{\Omega_K} L(\vec{x}, \vec{\omega}) \cos \theta_\perp d\omega dA \quad (6.5)$$

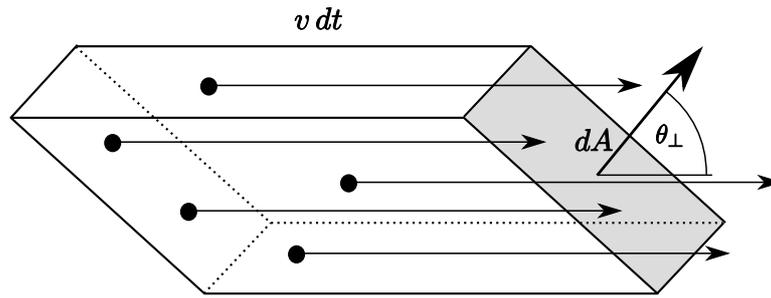


Abbildung 6.1 Anzahl der Teilchen, die eine Fläche dA in $v dt$ durchdringen.

Der Term $L(\vec{x}, \vec{\omega})$ heißt spezifische Intensität oder Strahldichte². In Gl. (6.5) wird im inneren Integral über den Raumwinkel Ω_K , der die gesamte Kugel um \vec{x} bezeichnet, integriert.

Spezifische Intensität L

Die spezifische Intensität $L(\vec{x}, \vec{\omega})$ ist die Emissionsleistung³ pro Zeiteinheit per projizierter Fläche senkrecht zum Strahl und per Raumwinkel in Richtung des Strahls. Die geometrischen Beziehungen sind in Abb. 6.2 definiert. Mit ihrer Kenntnis lassen

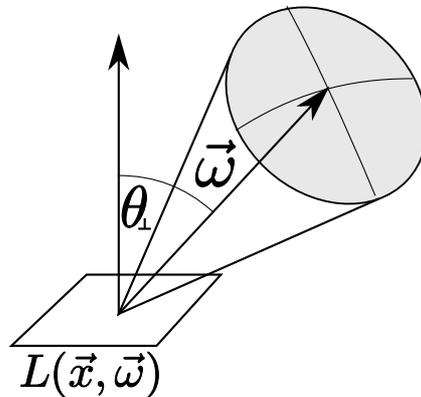


Abbildung 6.2 Die spezifische Intensität ist die Emissionsleistung per projizierter Fläche senkrecht zum Strahl per Einheitsraumwinkel in Richtung des Strahls

sich alle übrigen Größen berechnen. So ist beispielsweise der differentielle Fluss in

²Das Formelzeichen L für die spezifische Intensität oder Strahldichte entspricht in der Photometrie der Leuchtdichte (engl. luminance) und wird deshalb ebenfalls in der Transporttheorie verwendet.

³In der Radiometrie betrachtet man die Energie der abgegebenen Strahlung. Daher hat die spezifische Intensität die Einheit $(W \cdot m^{-2} \cdot sr^{-1})$. Für die Teilchenzahl als betrachtete Größe ergibt sich die Einheit $(s^{-1} \cdot m^{-2} \cdot sr^{-1})$

einem infinitesimal kleinem Strahlkegel mit der Schnittfläche dA und differentiellm Streuwinkel $d\omega$

$$d\Phi = L(\vec{x}, \vec{\omega}) \cos \theta_{\perp} d\omega dA. \quad (6.6)$$

Die spezifische Intensität entlang eines Strahls ist konstant, solange Effekte wie Absorption und Streuung vernachlässigbar sind. Den Beweis dafür liefern Abb. 6.3 und folgende Argumentation.

Der totale Fluß, welcher die erste Fläche in Richtung der zweiten verlässt, muss gleich dem Fluß sein, der die zweite Fläche erreicht (Abb. 6.3).

$$L_1 d\omega_1 dA_1 = L_2 d\omega_2 dA_2. \quad (6.7)$$

Es gilt allerdings $d\omega_1 = dA_2/r^2$ und $d\omega_2 = dA_1/r^2$ und somit

$$T_{tp} = d\omega_1 dA_1 = d\omega_2 dA_2 = \frac{dA_1 dA_2}{r^2}. \quad (6.8)$$

Die Größe T_{tp} wird Durchsatz (engl. throughput) des Strahlbündels genannt. Aus ihr folgt die Schlussfolgerung $L_1 = L_2$ Gl. (6.8).

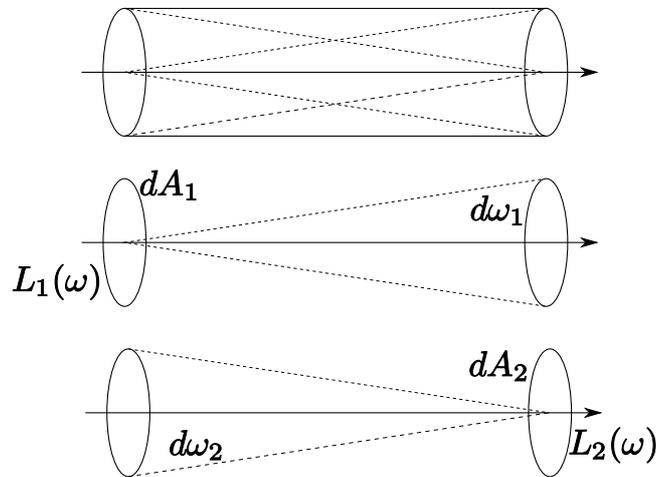


Abbildung 6.3 Gleichheit der Flüsse von emittierter und empfangender Fläche

Bestrahlungsstärke und spezifische Ausstrahlung

Um die Größe des einfallenden (engl. incident⁴) Flusses auf eine Oberfläche zu charakterisieren, wird im folgenden die Bestrahlungsstärke E eingeführt. Sie ist definiert

⁴einfallende und emittierte Größen werden mit den englischen Indizes i (incident) und o (outgoing) bezeichnet.

als

$$E(\vec{x}) = \frac{d\Phi_i}{dA} = \int_{\Omega} L_i(\vec{x}, \vec{\omega}) \cos \theta_{\perp} d\omega \quad (6.9)$$

Die spezifische Ausstrahlung B entspricht dem auf die Fläche bezogenen Teilchenfluss, welcher eine Oberfläche verlässt und ist analog zur Bestrahlungsstärke definiert als

$$B(\vec{x}) = \frac{d\Phi_o}{dA} = \int_{\Omega} L_o(\vec{x}, \vec{\omega}) \cos \theta_{\perp} d\omega. \quad (6.10)$$

Bestrahlungsstärke und spezifische Ausstrahlung sind physikalische Intensitäten, d.h. sie beschreiben die Energie oder Teilchenzahl pro Zeit und pro Fläche.

6.2 Das globalen Transportmodell (Rendering-Gleichung)

Globale Transportmodelle berücksichtigen den Austausch von Materie oder Energie jedes einzelnen Punktes mit allen anderen Punkten der untersuchten Struktur.

Von besonderer Bedeutung sind dabei die geometrischen Beziehungen zwischen den Punkten der Oberfläche, sowie deren Emissions-, Reflexions- und Absorptionseigenschaften.

6.2.1 Sichtbarkeit von Strahlungsquellen

Der einfallende Fluss an einem Punkt der Oberfläche setzt sich aus dem von einer Quelle direkt ausgesendeten und dem an anderen Oberflächen reflektierten Fluss zusammen. Teile von ausgedehnten Quellen oder Oberflächen können jedoch durch andere Teile verdeckt werden. Dies führt zu einer Abschattung von einfallender Strahlung. Geht man davon aus, dass sich Strahlung bzw. Teilchen einer Spezies geradlinig ausbreiten und nicht miteinander interagieren, kann die Berechnung der Sichtbarkeit von Oberflächen als rein geometrisches Problem aufgefasst werden.

Die Sichtbarkeit zwischen zwei Punkten der Oberfläche kann als zweiwertige Funktion $V(x, x')$ aufgefasst werden, die den Wert "1" hat, wenn der Transport von Teilchen oder Strahlung auf direktem - in der Regel geradlinigem - Weg erfolgen kann und "0" wenn andere Teile der Oberfläche zwischen den beiden Punkten liegen.

$$V(x, x') = V(x', x) = \begin{cases} 1 & : \text{ wenn } x' \text{ sichtbar von } x \\ 0 & : \text{ sonst.} \end{cases} \quad (6.11)$$

6.2.2 Bidirektionale Reflexionsfunktion

Für globale Beleuchtungsmodelle spielt die Reflexion von Strahlung an Oberflächen, neben anderen wellenoptischen Phänomenen wie Brechung, Streuung und Beugung, die zentrale Rolle.

Zur Charakterisierung der Reflexion an Oberflächen betrachtet man die einfallende Strahlung entlang eines schmalen Strahlbündels aus der Raumrichtung $\vec{\omega}_i$. Der Anteil reflektierter Strahlungsleistung in eine Richtung $\vec{\omega}_o$ ist proportional zum Anteil der ankommenden Strahlungsleistung aus Richtung $\vec{\omega}_i$

$$dL_o(\vec{\omega}_o) \propto dE(\omega_i). \quad (6.12)$$

Gl. (6.12) sagt nichts anderes aus, als dass eine Verstärkung der einfallenden Strahlungsenergie pro Flächeneinheit eine ebenso große Verstärkung der reflektierten Strahlungsenergie bewirkt. Der Proportionalitätsfaktor ist die so genannte Bidirektionale Reflexionsfunktion (BDRF) [106]. Sie ist definiert als

$$f(\vec{\omega}_i \rightarrow \vec{\omega}_o) = \frac{L_o(\vec{\omega}_o)}{L_i(\vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i}. \quad (6.13)$$

Die BDRF ist eine Verteilungsfunktion, d.h. sie ist immer positiv und kann jeden beliebigen Wert zwischen null und unendlich annehmen. Sie hat mehrere interessante Eigenschaften:

1. Wenn die BDRF auf realen physikalischen Gesetzmäßigkeiten basiert,⁵ so ist sie symmetrisch im Bezug auf die Vertauschung von $\vec{\omega}_i$ und $\vec{\omega}_o$

$$f(\vec{\omega}_i \rightarrow \vec{\omega}_o) \equiv f(\vec{\omega}_o \rightarrow \vec{\omega}_i) \quad (6.14)$$

Diese Gesetzmäßigkeit ist auch unter dem Namen Helmholtz-Prinzip der Gegenseitigkeit [106] bekannt.

2. Die BDRF ist im Allgemeinen anisotrop, d. h. wenn die reflektierende Fläche um ihre Oberflächennormale gedreht wird, so ändert sich das Verhältnis von einfallender zu reflektierter Strahlung. Beispiele dafür sind z. B. Kleidung, Haare oder gebürstetes Aluminium. Die meisten Materialien reflektieren allerdings unabhängig von ihrer Orientierung und es gilt

$$f_r((\theta_i, \phi_i + \phi) \rightarrow (\theta_o, \phi_o + \phi)) = f_r((\theta_i, \phi_i) \rightarrow (\theta_o, \phi_o)). \quad (6.15)$$

⁵In virtuellen Realitäten, wie z. B. Computerspielen, sind auch unsymmetrische BDRF denkbar.

Damit hat die BDRF für solche Materialien nur drei Freiheitsgrade anstatt vier.

Die Verwendung der bidirektionale Reflexionsfunktion (BDRF) hat jedoch den Nachteil, dass sie unter Umständen unendlich werden kann. Oftmals ist es intuitiver, mit der sogenannten bikonischen Reflektivität oder einfach Reflektivität zu arbeiten. Die Reflektivität ist das Verhältnis von einfallendem zu reflektierten Fluss an einer Oberfläche. Weil der reflektierte Fluss stets kleiner oder gleich dem einfallenden sein muss, liegt der Wert der Reflektivität stets zwischen 0 und 1.

$$\frac{d\Phi_o}{d\Phi_i} = \frac{\int_{\Omega_o} L_o(\vec{\omega}_o) \cos \theta_o d\omega_o}{\int_{\Omega_i} L_i(\vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i} \quad (6.16)$$

$$= \frac{\int_{\Omega_o} \int_{\Omega_i} f_o(\vec{\omega}_i \rightarrow \vec{\omega}_o) L_i(\vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i \cos \theta_o d\omega_o}{\int_{\Omega_i} L_i(\vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i}. \quad (6.17)$$

Als Integrationsgrenzen der einfallenden und reflektierten Strahldichte können ein einzelner infinitesimaler Raumwinkel, ein endlicher Raumwinkel oder die gesamte Hemisphäre eingesetzt werden. Aus der Kombination dieser drei Grenzen ergeben sich insgesamt neun verschiedene Möglichkeiten von bikonischen Reflektionsfunktionen.

Die Reflexion an Oberflächen verhält sich linear. Der absolute Anteil reflektierter Strahlung in eine bestimmte Richtung ergibt sich aus dem Integral der einfallenden Strahlung über die gesamte Hemisphäre Ω_{HK} . Diese Beziehung heißt Reflexionsfunktion (Gl. (6.18)).

$$L_o(\vec{\omega}_o) = \int_{\Omega_{HK}} f_r(\vec{\omega}_i, \vec{\omega}_o) L_i(\vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i. \quad (6.18)$$

Um die globale Verteilung des Strahlungsflusses zu modellieren, ist es zunächst notwendig, die an einem Punkt der Oberfläche reflektierte Strahlung zur einfallenden Strahlung der anderen Oberflächen in Beziehung zu setzen. Außerdem muss die Sichtbarkeit $V(x, x')$ in einer globalen Beschreibung berücksichtigt werden. Ausgehend von der Tatsache, dass die spezifische Intensität entlang eines Strahls konstant ist, kann die einfallende spezifische Intensität am Punkt x' der Oberfläche ausgehend vom Punkt x ausgedrückt werden als

$$L_i(x', \vec{\omega}'_i) = L_o(x, \vec{\omega}_o) V(x, x'). \quad (6.19)$$

Der Vektor $\vec{\omega}_i$ ist der Einheitsrichtungsvektor von x' nach x und $\vec{\omega}_o$ der Vektor in entgegengesetzter Richtung.

$$\vec{\omega}_i = -\vec{\omega}_o = \frac{x - x'}{|x - x'|}. \quad (6.20)$$

Ausgehend von der Reflexionsfunktion (Gl. (6.18)) soll nun das Integral über die sichtbare Halbkugel durch ein Integral über die gesamte reflektierende Oberfläche ersetzt werden. Durch Projektion des Raumwinkels auf die Oberfläche der Einheits-halbkugel ergibt sich

$$d\omega'_i = \frac{\cos \theta_o dA}{|x - x'|^2}. \quad (6.21)$$

Eingesetzt in die Reflexionsfunktion (Gl. (6.18)) ergibt sich die folgende Integral-funktion über die Oberfläche

$$L(x', \vec{\omega}') = \int_S f_r(x) L(x, \vec{\omega}) G(x, x') V(x, x') dA. \quad (6.22)$$

Weil diese Gleichung nur noch die ausgehenden spezifischen Intensitäten und Rich-tungen an jedem Punkt der Oberfläche enthält, kann man den Index, außer für f_r , weglassen.

Im Term $G(x, x')$ sind die geometrischen Relationen, d. h. die Größen die nur von der Lage der Punkte auf den beteiligten Oberflächen abhängen, zusammengefasst.

$$G(x, x') = G(x', x) = \frac{\cos \theta'_i \cos \theta'_o}{|x - x'|^2}. \quad (6.23)$$

Die Gleichung (Gl. (6.22)) wurde in der Computergrafik das erste Mal 1986 von Kajiyaya [107] eingeführt, der sie treffend Renderinggleichung nannte. Kajiyaya führ-te außerdem die Zweipunkt-Transportintensität $I(x \rightarrow x')$ ein. Die Zweipunkt-Transportintensität beschreibt den Fluß $d\Phi$, der durch den Strahl zwischen den Oberflächen an den beiden Punkten x und x' ausgetauscht wird:

$$d\Phi = I(x \rightarrow x') dAdA' = L(x, \vec{\omega}) G(x, x') dAdA'. \quad (6.24)$$

Um die vollständige Renderinggleichung zu erhalten, muss zusätzlich die von der Oberfläche selbst emittierte Strahldichte in die Gleichung eingehen. Die finale Ren-deringgleichung lautet unter Berücksichtigung der Eigenemission

$$L(x', \vec{\omega}') = L_e(x', \vec{\omega}') + \int_S f_r(x) L(x, \vec{\omega}) G(x, x') V(x, x') dA. \quad (6.25)$$

L_e ist darin die spezifische Intensität der Eigenemission [64]. Integriert wird über alle Oberflächen der betrachteten Domäne S .

Die Renderinggleichung ist ein zentraler Bestandteil der heutigen Computergrafik und fand Einzug in viele Wissenschaftsgebiete, in denen der Austausch von Materie- und Energietransporten in komplex strukturierten Umgebungen berechnet werden muss. Sie ist die allgemeinste Form eines globalen Transportmodells unter der Annahme intransparenter reflektierender Oberflächen und der wechselwirkungsfreien geradlinigen Ausbreitung der betrachteten Materie oder Strahlung.

6.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass die Bewegung von Teilchen einer Plasmaspezies unter den Bedingungen, wie sie in Plasmareaktoren herrschen, mit der Ausbreitung von Strahlung in einer durch Oberflächen begrenzten Umgebung vergleichbar ist.

Die Äquivalenz der physikalischen Größen, die den Austausch von Teilchen und Energie zwischen Oberflächen beschreiben, wurde dargestellt und die Renderinggleichung (Gl. (6.25)) als allgemeines Modell sowohl für den Austausch von Strahlung als auch den Transport von Speziesteilchen in Mikrostrukturen hergeleitet.

Die Renderinggleichung modelliert die spezifische Intensität einer Spezies in Abhängigkeit ihrer Wechselwirkung mit der Oberfläche und der Geometrie des betrachteten Gebietes.

Kapitel 7

Transportsimulation ungeladener Reaktanten

Im Abschnitt 6.1.2 wurde bereits festgestellt, dass sich Gasmoleküle und Atome unter den Bedingungen, wie sie in Plasmareaktoren vorherrschen, praktisch verzögerungsfrei im Reaktor ausbreiten.

Die Untersuchungen von Engstrom [108] zeigen außerdem, dass sich eine Bedeckung der Oberfläche mit Gasmolekülen – in diesem Falle von Fluor auf Silizium – innerhalb von Sekunden soweit einstellt, dass danach bei konstanten Prozessbedingungen praktisch keine Änderung der Bedeckung mehr zu beobachten ist.

Typische Prozesszeiten hingegen liegen in der Größenordnung von 10 Sekunden bis hin zu mehreren Minuten. Weil neutrale Moleküle und Atome auch nicht durch die elektrischen und magnetischen Felder im Innern des Reaktors beeinflusst werden, können die Transportprozesse von neutralen Teilchen in den geätzten Strukturen als quasistationär aufgefasst werden.

7.1 Globales Transportmodell bei diffuser Reflexion

Im Abschnitt 3.2.2 wurde bereits gezeigt, dass der direkte Fluss von Spezies aus dem Plasma zur Oberfläche in Strukturen mit großen Aspektverhältnissen die Ätzzraten am Boden und an abgeschatteten Stellen der Oberfläche nicht hinreichend erklären kann. Maßgeblich verantwortlich sind Reflexion und Desorption von neutralen Reaktanten an der Oberfläche [44]. Erstmals wurden solche reflektiven Transportmechanismen durch Coburn und Winters [44] genauer untersucht. Dabei wurde eine

diffuse Desorption der Teilchen auf der Oberfläche vorausgesetzt.

7.1.1 Lambertsche Diffuse Reflexion

Für die Reflexion von Radikalen an Oberflächen soll nur die diffuse oder Lambertsche Reflexion betrachtet werden. Ihr liegt die Annahme zugrunde, das Spezies an der Oberfläche mit gleicher Wahrscheinlichkeit und unabhängig von ihrer Einfallrichtung in jede beliebige Richtung reflektiert werden. Die bidirektionale Reflexionsfunktion $f_{r,d}$ ist daher konstant¹. Die Plausibilität dieser Näherung wurde bereits im Abschnitt 3.2.2 begründet.

Für die diffus reflektierte spezifische Intensität $L_{o,d}$ erhält man durch Einsetzen in die Reflexionsfunktion (Gl. (6.18))

$$L_{o,d}(\vec{x}) = \int_{\Omega_{HK}} f_{r,d} L_i(\vec{x}, \vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i \quad (7.1)$$

$$= f_{r,d} \int_{\Omega_{HK}} L_i(\vec{x}, \vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i \quad (7.2)$$

$$= f_{r,d} E(\vec{x}). \quad (7.3)$$

Eingesetzt in Gl. (6.17) ergibt sich für die (bihemisphärische) Reflektivität

$$\rho_d(2\pi \rightarrow 2\pi) = \frac{\Phi_{o,d}}{\Phi_i} = \frac{\int_{\Omega_{HK}} L_{o,d}(\vec{x}, \vec{\omega}_o) \cos \theta_o d\omega_o}{\int_{\Omega_{HK}} L_i(\vec{x}, \vec{\omega}_i) \cos \theta_i d\omega_i} \quad (7.4)$$

$$= \frac{L_{o,d}(\vec{x}) \int_{\Omega_{HK}} \cos \theta_o d\omega_o}{E(\vec{x})} \quad (7.5)$$

$$= \frac{\pi L_{o,d}(\vec{x})}{E(\vec{x})} \quad (7.6)$$

$$= \pi f_{r,d}. \quad (7.7)$$

Weil die bidirektionale Reflexionsfunktion konstant ist, ist auch die Reflektivität konstant und unabhängig vom Einfallswinkel. Durch Umstellen von Gl. (7.7) ergibt sich für die bidirektionale Reflexionsfunktion $f_{r,d} = \frac{\rho_d}{\pi}$.

Weil die ausgesendete spezifische Intensität $L_{o,d}$ konstant und unabhängig vom Ausfallswinkel ist, erhält man durch Einsetzen in Gl. (6.10) und anschließendes Integrieren

$$B(\vec{x}) = \pi L_{r,d}(\vec{x}). \quad (7.8)$$

¹Der Index d kennzeichnet, dass es sich um die diffuse Reflexion handelt.

Für diffus reflektierende Oberflächen ist die Reflektivität somit gegeben durch

$$\rho_d = \frac{B(\vec{x})}{E(\vec{x})}. \quad (7.9)$$

7.1.2 Radiositygleichung

Unter der Prämisse, dass alle Oberflächen einer Umgebung Lambertsche Strahler sind, vereinfacht sich die Renderinggleichung (Gl. (6.25)) dramatisch. Zum einen kann die konstante bidirektionale Reflexionsfunktion vor das Integral gezogen werden und zum anderen können die reflektierten Strahldichten durch die spezifische Ausstrahlung ausgedrückt werden. Die bidirektionale Reflexionsfunktion wird weiterhin durch die anschaulichere Reflektivität ρ ersetzt:

$$B(\vec{x}) = E(\vec{x}) + \rho_d(\vec{x}) \int_S B(\vec{x}') \frac{G(\vec{x}, \vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}')}{\pi} dA. \quad (7.10)$$

Diese Integralgleichung (Gl. (7.10)) heißt Radiositygleichung. Sie beschreibt vollständig die Ausbreitung von Energie- oder Teilchenflüssen in einer durchweg diffus reflektierenden Umgebung.

Für das Innere von geätzten Strukturen lässt sich Gl. (7.10) für eine elektrisch neutrale reaktive Spezies lösen und man erhält die lokale spezifische Ausstrahlung dieser Spezies an jedem Punkt an der Oberfläche der Struktur im stationären Fall. Die spezifische Ausstrahlung ist dabei identisch mit der emittierten Flussdichte (vgl. Gl. (6.10)).

Die festen Grenzflächen zwischen Probe, Reaktorkammer und Gasphase bilden bei der Berechnung den diffus reflektierenden Teil der Domäne S und die Oberfläche des Plasmas als primäre Quelle der Spezies wird als vollständig absorbierend angenommen. Für die Berechnung einer lokalen Ätzrate mithilfe eines Oberflächenreaktionsmodells, wie es im Kap. 4 vorgestellt wurde, ist die Kenntnis der lokalen Flussdichte² essentiell.

Neben der Ermittlung der lokalen Ätzrate muss ein Oberflächenreaktionsmodell auch die in Gl. (7.10) noch unbekannte Reflektivität $\rho_d(\vec{x})$ der Oberfläche korrekt vorher-sagen. Problematisch ist die gegenseitige Abhängigkeit der Berechnung der lokalen Flußdichte und der Reflektivität der Oberfläche. Eine pragmatische Lösung für diese

²Zur späteren Berechnung der Ätzrate wird die einfallende Flussdichte benötigt, die allerdings leicht aus der emittierten Flussdichte mithilfe der Reflektivität und bei bekannter Eigenemission berechnet werden kann.

Abhängigkeit wird im Abschnitt 7.5 vorgestellt.

Die Radiositygleichung ist eine Integralgleichung vom Typ eines Fredholmintegrals und für allgemeine Umgebungen existiert keine bekannte Lösung in geschlossener Form. Es ist daher notwendig, numerische Methoden zur Lösung heranzuziehen [109].

7.2 Finite Elemente-Methode zur Berechnung der Emission

Wie bereits in Abschn. 5.1.1 beschrieben, eignet sich die Finite Elemente-Methode zur numerischen Approximation von partiellen Differential- und Integralgleichungen. Im folgenden soll die Berechnung der spezifischen Ausstrahlung B , die durch die Radiositygleichung (Gl. (7.10)) modelliert wurde, mit der Finiten Elemente Methode durchgeführt werden. Diese Methode wurde für die Berechnung des Flusses von Neutralen in geätzten Strukturen erstmals im Rahmen dieser Forschungsarbeit angewendet und in [110] veröffentlicht.

7.2.1 Diskretisierung der Oberfläche

Die Aufteilung der Oberfläche in Elemente stellt ein zentrales und zugleich schwieriges Problem bei der Durchführung der Finiten Elemente Methode dar, weil die Größe und Form der einzelnen Elemente maßgeblich für die erzielbare Genauigkeit und den dafür notwendigen Rechenaufwand ist.

Für die Betrachtung von speziellen Geometrien, wie den Querschnitt langer gerader Gräben und rotationssymmetrischen Löchern, kann das Modell der zweidimensionalen Oberfläche durch Ausnutzung der Regelmäßigkeit in einer Dimension, so vereinfacht werden, daß sich das zweidimensionale Problem der Flussberechnung an der Oberfläche auf ein eindimensionales reduziert [111].

Insbesondere für lange parallele Gräben vereinfacht sich die Berechnung erheblich. Die Oberfläche kann dann im Querschnitt betrachtet werden. Die Diskretisierung einer solchen Oberfläche kann durch die Aufteilung in schmale Rechtecke durchgeführt werden, wobei die Dimension längs des Grabens aus der Berechnung eliminiert werden kann (Abb. 5.5).

Eine Aufteilung der Oberfläche in rechteckige Elemente ist für solche Umgebungen

leicht zu bewerkstelligen. Aus dem dreidimensionalen Problem der Flussberechnung wird in diesem Sonderfall ein zweidimensionales Problem, welches nur die Schnittfläche senkrecht zum Graben betrachtet. Die eigentliche Oberfläche wird auf einen (eindimensionalen) Linienzug reduziert. Abb. 5.5 zeigt die Schnittlinie eines solchen Grabens.

Für die Diskretisierung einer solchen Schnittlinie eignet sich eine Approximation durch einen zusammenhängenden Polygonzug. Die Oberfläche wird damit durch Anwendung des verbesserten Stringalgorithmus (vgl. Abschn. 5.2.3) approximiert. Im allgemeinen zweidimensionalen Fall werden Flächennetze, wie sie in Abschnitt 5.2.3 vorgestellt wurden, z.B. durch Anwendung der Delaunay-Triangulation erzeugt.

7.2.2 Approximation durch konstante Basisfunktionen

Die Idee der Finiten Elemente-Methode basiert auf der Approximation der unbekannt Funktion der spezifischen Ausstrahlung durch eine Linearkombination, einfacher Basisfunktionen mit lokalem Support.

$$B(x) \approx \hat{B}(x) = \sum_{i=1}^n B_i N_i(x). \quad (7.11)$$

Unter lokalem Support einer Funktion versteht man die Eigenschaft, dass sie nur in einem lokalen Gebiet des Definitionsbereiches verschieden von null ist.

Als Basisfunktionen werden üblicherweise Polynome niederen Grades gewählt. Für die Berechnung der spezifischen Ausstrahlung ist im Allgemeinen ein Ansatz mit konstanten Basisfunktionen ausreichend. Die konstante Basisfunktion mit lokalem Support auf einem Element ist definiert als

$$N_i(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x \text{ außerhalb des Elementes } i \\ 1 & \text{falls } x \text{ innerhalb des Elementes } i. \end{cases} \quad (7.12)$$

Ziel ist die Berechnung der Koeffizienten B_i dahingehend, dass die Approximation der Funktion $B(x)$ durch $\hat{B}(x)$ optimal wird. Der tatsächliche Fehler $\epsilon(x) = B(x) - \hat{B}(x)$ kann allerdings nicht berechnet werden, weil die gesuchte Funktion $B(x)$ unbekannt ist. Statt des Fehlers kann jedoch das Residuum der Näherungslösung minimiert werden. Ersetzt man in der originalen Radiositygleichung (Gl. (7.10)) beide Vorkommen von $B(x)$ durch die Näherung, so erhält man für das Residuum

$$r(x) = \hat{B}(x) - E(x) + \rho(x) \int_S \hat{B}(x') \frac{G(x, x') V(x, x')}{\pi} dA. \quad (7.13)$$

Im Allgemeinen ist es nicht möglich, das Residuum überall auf null zu reduzieren, weil die gewählten Basisfunktionen einem endlichdimensionalen Funktionsraum angehören. Es ist daher nötig, eine Fehlermetrik einzuführen, die $r(x)$ minimiert. Während allerdings die Basisfunktionen einen endlichdimensionalen Funktionsraum bilden, ist das Residuum nicht endlichdimensional. Zur Berechnung werden deshalb in der Finiten Elemente-Methode entsprechende Gewichtungsfunktionen W_i eingeführt, die ebenfalls wie die gewählten Basisfunktionen einen lokalen Support haben. Die Norm des Residuums kann somit als endliche Summe ausgedrückt werden

$$|r(x)| = \sum_{i=1}^n | \langle r(x), W_i(x) \rangle | = \sum_{i=1}^n \int_S r(x) W_i(x) dx \quad (7.14)$$

Durch geeignete Wahl der Koeffizienten der spezifischen Ausstrahlung B_i kann man nun erreichen, dass jeder der i Summanden Null wird. Das Resultat dieser Berechnungen ist ein lineares Gleichungssystem, dessen Lösung die gesuchten Werte B_i der spezifischen Ausstrahlung ist.

Die einfachste Fehlermetrik ist die Verwendung von Delta-Funktionen

$$W_i(x) = \delta(x - x_i). \quad (7.15)$$

Unter dieser Fehlermetrik stimmt die approximierte Funktion mit der gesuchten Funktion genau an den Stellen überein, an dem sich die Knoten befinden. An den übrigen Stellen kann der Fehler jedoch sehr viel größer sein. Dieser Ansatz soll deshalb nicht weiter verfolgt werden.

Eine alternative Methode, um ein lineares Gleichungssystem zur Minimierung des Residuums abzuleiten, ist die Verwendung gewichteter Integrale, wie sie erstmals von Galerkin beschrieben wurde. Eine ausführliche Darstellung findet sich in [112]. In der Methode nach Galerkin werden die Gewichtsfunktionen so gewählt, dass sie, wie die Basisfunktionen, über lokalen Support über ihre jeweiligen Elemente verfügen und an anderen Stellen der Oberfläche Null sind. In diesem Fall wird der gewichtete Durchschnitt des Residuums über die Elemente minimiert. Die Lösung des Problems ist gefunden, wenn für jede Gewichtungsfunktion $W_i(x)$ gilt

$$\langle W_i(x), r(x) \rangle = \int_S W_i(x) r(x) dA = 0, \forall i. \quad (7.16)$$

In der Methode von Galerkin sind die Gewichtsfunktionen identisch mit den gewählten Basisfunktionen $W_i(x) = N_i(x)$. Eingesetzt in Gl. (7.16) und mit Gl. (7.13)

erhält man

$$0 = \int_S N_i(x) \hat{B}(x) dA - \int_S N_i(x) E(x) dA - \int_S N_i(x) \rho(x) \int_S \hat{B}(x) \frac{G(x, x') V(x, x')}{\pi} dA' dA. \quad (7.17)$$

Das Einsetzen von $\hat{B}(x)$ und Gruppieren der Terme führt schließlich zu Gl. (7.18), in der die unbekanntenen Koeffizienten B_i isoliert wurden:

$$\left[\sum_{j=1}^n B_j \left[\int_S N_i(x) N_j(x) dA - \int_S N_i(x) \rho(x) \int_S N_j(x') \frac{G(x, x') V(x, x')}{\pi} dA' dA \right] - \int_S E(x) N_i(x) dA \right] = 0. \quad (7.18)$$

Die Terme in Gl. (7.18) bilden ein lineares Gleichungssystem, welches zur Berechnung der Koeffizienten B_j verwendet wird. In Matrixform lässt sich Gl. (7.18) notieren als

$$\mathbf{KB} = \mathbf{E}, \quad (7.19)$$

wobei die Elemente in \mathbf{K} die Form

$$K_{ij} = \int_S N_i(x) N_j(x) dA - \int_S N_i(x) \rho(x) \int_S N_j(x') \frac{G(x, x') V(x, x')}{\pi} dA' dA. \quad (7.20)$$

haben und die Elemente in \mathbf{E} definiert sind als

$$E_i = \int_S E(x) N_i(x) dA. \quad (7.21)$$

Die Methode von Galerkin zur Berechnung der Koeffizienten der spezifischen Ausstrahlung wurde für den zweidimensionalen Fall, d. h. für den Schnitt eines langen Grabenprofils in [113] detailliert beschrieben.

Unter den Annahmen, dass die spezifische Ausstrahlung auf einem hinreichend kleinem Element konstant ist und dass die Reflektivität auf dem gesamten Element ebenfalls konstant ist, kann man die in Gl. (7.12) definierte konstante Basisfunktion für die Berechnung der spezifischen Ausstrahlung verwenden. Der Ansatz mit konstanten Basisfunktionen bildet unter den getroffenen Annahmen den intuitiven physikalischen Ansatz.

Die Eigenschaft, dass diese Basisfunktionen nur diskrete Werte von 0 und 1 annehmen und sich nicht überlappen, führt zu einer Vereinfachung des Integrals

$$\int_S N_i(x) N_j(x) dA = \left\{ \begin{array}{ll} A_i & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{array} \right\} = \delta_{ij} A_i. \quad (7.22)$$

Für die rechte Seite des Gleichungssystems lässt sich das Integral ebenfalls leicht berechnen, da der Integrand für alle, außer dem Element in der jeweiligen Zeile, verschwindet

$$\int_S E(x) N_i(x) dA = E_i A_i, \quad (7.23)$$

E_i ist dabei der mittlere Emissionswert des betrachteten Elements.

Weil die Basisfunktionen nur für jeweils ein Element den konstanten Wert 1 besitzen, kann man die Basisfunktionen ganz aus Gl. (7.20) eliminieren und statt über die gesamte Oberfläche nur über das jeweilige Element integrieren. Dadurch reduziert sich Gl. (7.20) zu

$$\left[\sum_{j=1}^n B_j \left[\delta_{ij} A_i - \rho_i \int_{A_i} \int_{A_j} \frac{G(x, x') V(x, x')}{\pi} dA_j dA_i \right] \right] - E_i A_i = 0. \quad (7.24)$$

Nach dem Verschieben des Emissionsterms auf die rechte Seite und Division durch A_i erhält man

$$\sum_{j=1}^n B_j [\delta_{ij} - \rho_i F_{ij}] = E_i. \quad (7.25)$$

Der Term F_{ij} wird Formfaktor genannt. Er beschreibt genau den Anteil an Energie oder Partikeln, die Element i verlassen und direkt Element j erreichen:

$$F_{ij} = \frac{1}{A_i} \int_{A_i} \int_{A_j} \frac{G(x, x') V(x, x')}{\pi} dA_j dA_i. \quad (7.26)$$

Das lineare Gleichungssystem zur Berechnung der spezifischen Ausstrahlungen hat schließlich folgende Form

$$\begin{bmatrix} 1 - \rho_1 F_{1,1} & \dots & -\rho_1 F_{1,n} \\ -\rho_2 F_{2,1} & \dots & -\rho_2 F_{2,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -\rho_n F_{n,1} & \dots & 1 - \rho_n F_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \vdots \\ E_n \end{bmatrix}. \quad (7.27)$$

Im Gegensatz zu vielen anderen Problemstellungen, bei denen die Finite Elementemethode zum Einsatz kommt, ist das lineare Gleichungssystem in Gl. (7.27) im Allgemeinen stark besetzt.

Zur Ermittlung der Koeffizienten B_i verbleiben noch zwei weitere offene Probleme:

1. Die Berechnung der Formfaktoren F_{ij} ,
2. Die effiziente Lösung des großen linearen Gleichungssystems Gl. (7.27).

7.3 Formfaktoren

Der Formfaktor Gl. (7.26) charakterisiert die geometrische Relation zweier Elemente der Oberfläche. Er hängt sowohl von der Form, Lage und Entfernung der Flächen zueinander ab, nicht jedoch von deren physikalischen Eigenschaften, wie z. B. Reflektivität oder Emissionscharakteristik. Abhängig von der Wahl der Basisfunktionen hat der Formfaktor eine mehr oder weniger anschauliche physikalische Bedeutung. Im Allgemeinen ist eine geschlossene analytische Lösung des Vierfachintegrals über jeweils zwei Koordinaten der beteiligten Flächen nicht möglich. Bereits für Spezialfälle wie der Formfaktor zwischen parallelen oder senkrecht aufeinander stehenden Rechtecken sind analytische Lösungen extrem kompliziert [114].

Schon seit 1760 wurde von Lambert versucht, eine allgemeine Lösung zur Berechnung des Formfaktors zu gewinnen. Er schreibt dazu in [115] frei übersetzt: *„Obwohl diese Aufgabe einfach erscheint, ist die Lösung erheblich verzwickter als man annehmen könnte. Es ist sehr einfach, die Differentialgleichung vierten Grades niederzuschreiben, die man dann vierfach integrieren müsste; aber die hochgradig mühsame Berechnung würde selbst den Geduldigsten anwidern und ihn zum Aufgeben bewegen. Die einzige Vereinfachung, die ich finden konnte, war, die Gleichung in eine zweiter Ordnung umzuwandeln“*

Für die numerische Berechnung des Formfaktors existieren zahlreiche Verfahren, die zu Näherungslösungen führen [64]. Ein Vergleich hinsichtlich der Effizienz des hier vorgestellten Halbkugel-Sampling-Algorithmus (vgl. Abschn. 7.3.1) mit anderen üblichen numerischen Verfahren wird in [116] durchgeführt. Darin wurde festgestellt, dass der Halbkugel-Sampling-Algorithmus signifikant schneller als andere Lösungsverfahren konvergiert.

Für die numerische Berechnung ist es zunächst zweckmäßig, den geometrischen Kern Gl. (6.23) in Gl. (7.26) einzusetzen und das innere Integral durch das Integral über den Raumwinkel zu ersetzen:

$$F_{ij} = \frac{1}{A_i} \int_{A_i} \int_{A_j} \frac{\cos \theta_i \cos \theta_j}{\pi r^2} V(x_i, x_j) dA_j dA_i. \quad (7.28)$$

Das innere Integral kann durch Gl. (7.29) in ein Integral über die sichtbare Hemisphäre Ω_{HK} eines Punktes auf A_i transformiert werden:

$$d\omega_j = \frac{\cos \theta_j}{r^2} dA_j. \quad (7.29)$$

Die zu Gl. (7.26) äquivalente Darstellung des Formfaktors lautet

$$F_{ij} = \frac{1}{A_i} \int_{A_i} \int_{\Omega_{HK}} \frac{\cos \theta_i}{\pi} V_{(x_i, x_j)} d\omega_j dA_i. \quad (7.30)$$

Das innere Integral kann man als den Formfaktor einer Fläche A_j zu einer infinitesimal kleinen Fläche dA_i auffassen. Diese Größe $F_{dA_i \rightarrow A_j}$ wird differentieller Formfaktor genannt. Eine Näherung für den Formfaktor erhält man, wenn man annimmt, dass der Formfaktor in einem kleinen Gebiet um einen Punkt auf A_i konstant ist. Diese Annahme gilt insbesondere, wenn der quadrierte Abstand der Flächen r^2 groß im Vergleich zur Fläche A_i ist. Wählt man nun genügend Sampling-Punkte auf A_i , die zudem noch gleichverteilt sind, so erhält man die Näherung des Formfaktors als den mittleren Wert der differentiellen Formfaktoren. Näherungsweise gilt für k gleich verteilte Samplingpunkte auf A_i

$$F_{ij} = \frac{1}{A_i} \int_{A_i} \int_{\Omega_{HK}} G_{i\omega} d\omega dA_i \approx \frac{1}{k} \sum_1^k \int_{\Omega_{HK}} G_{k\omega} d\omega. \quad (7.31)$$

Darin sind in $G_{i\omega}$ die geometrischen Relationen und der sog. Sichtbarkeitsterm enthalten (Gl. (7.32)). Es bleibt jedoch immer noch das Problem, das innere Integral tatsächlich zu berechnen.

7.3.1 Halbkugel-Sampling-Algorithmus

Die Berechnung des Integrals über die gesamte Hemisphäre Ω_{HK} liefert eine Gesamtlösung über alle Elemente, die zum Wert des Formfaktors einer infinitesimalen Fläche dA_i beitragen. Der geometrische Kern in Gl. (7.31) hat die Form

$$G_{i\omega} = \frac{\cos \theta_i}{\pi} V_{ij}. \quad (7.32)$$

Die Berechnung des Sichtbarkeitstermes V_{ij} , welcher angibt, ob ein Punkt der Fläche A_j von dA_i aus sichtbar ist (1) oder nicht (0), ist der bei weitem aufwändigste Teil der gesamten Berechnung. Es existieren verschiedene Methoden der Sichtbarkeitsberechnung in komplexen Umgebungen, auf die später näher eingegangen werden soll.

Nusselt-Analogon

Eine interessante geometrische Interpretation des differentiellen Formfaktors ist die radiale Projektion der sichtbaren Flächen auf die Oberfläche einer imaginären Ein-

heitshalbkugel um die Fläche A_i . Dabei wird ausgenutzt, dass Flächen, welche unter dem gleichen Raumwinkel erscheinen, auch den gleichen Formfaktor (Abb. 7.1) haben. Die Projektion auf der Einheitshalbkugel wird weiter senkrecht auf die Grund-

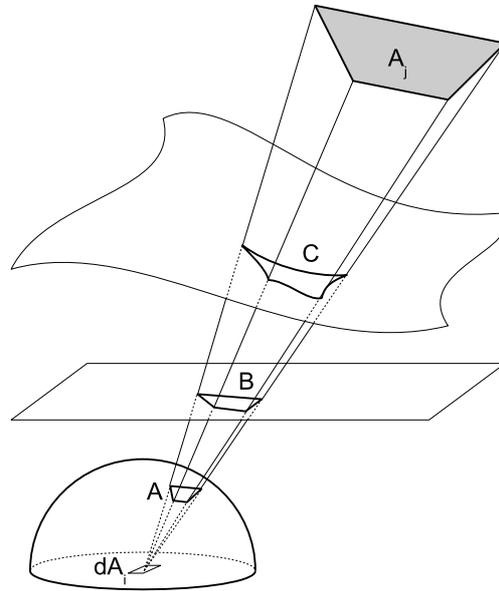


Abbildung 7.1 Flächen mit gleichem Formfaktor bezüglich der Fläche A_i

fläche der Einheitshalbkugel projiziert (Abb. 7.2). Der Anteil der projizierten an der Gesamtfläche des Einheitskreises ist der gesuchte Formfaktor. Diese geometrische Betrachtungsweise des Formfaktors ist als das Nusselt-Analogon bekannt [117].

Die Begründung für diese Interpretation folgt aus der Definition des Raumwinkels als die Fläche auf der Einheitskugel, die durch den Winkel eingenommen wird, unter dem das Element erscheint. Diese erste Projektion bildet den Term $\cos \theta_j / r^2$ ab. Die zweite Projektion steht für den Term $\cos \theta_i$ und das π im Nenner ist gleich der Fläche des Einheitskreises mit dem Radius $r = 1$. In den frühen Jahren der Kalkulation von Strahlungsaustausch zwischen Flächen wurden die Formfaktoren teilweise durch fotografische Verfahren ermittelt. Dazu wurde eine Fischaugenlinse – ein extremes Weitwinkelobjektiv mit 180° Öffnungswinkel – verwendet. Die Fläche der Abbildung wurde dann manuell vermessen [118]. Neben dem Halbkugel-Sampling Algorithmus existieren zahlreiche weitere Projektionsmethoden, wie z. B. auf Halbwürfel oder unendlich ausgedehnte Ebenen, die teilweise die Vorteile moderner Grafikhardware ausnutzen können [64]. Ebenfalls zur Verbesserung des Simulationsaufwandes tragen hierarchische Berechnung von Formfaktoren über Gruppen von Elementen bei. Diese Verfahren liefern jedoch allesamt nur Näherungslösungen.

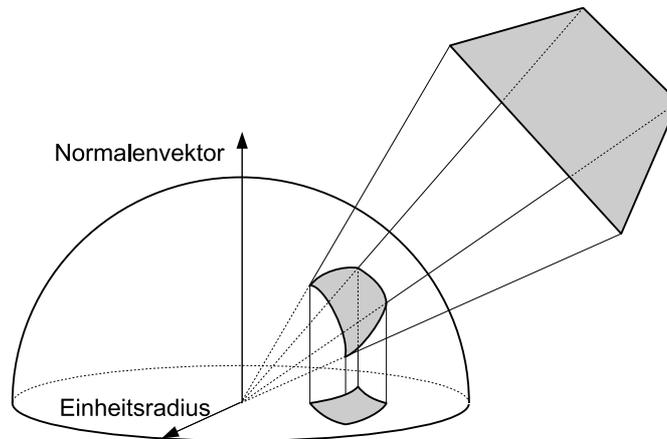


Abbildung 7.2 *Nusselt Analogon. Der Formfaktor der grauen Fläche zum Flächenstück dA_i entsteht durch Projektion auf die Einheitshalbkugel und senkrecht nach unten auf den Einheitskreis.*

7.4 Sichtbarkeit

Das letzte Problem, welches zur Berechnung der Formfaktoren verbleibt, ist die Ermittlung der Sichtbarkeitsrelation zwischen den einzelnen Flächen. Ein naiver Algorithmus wäre, die Flächen paarweise daraufhin zu untersuchen, ob eine der anderen Flächen die Sichtbarkeit einschränkt. Ein solcher Algorithmus hätte die Komplexitätsklasse $\mathcal{O}(n^3)$ und wäre bereits für sehr wenige Elemente unpraktikabel. Besonders im Bereich der Computergrafik und Computerspiele wurden zahlreiche Verfahren entwickelt, welche die Anzahl der Schnittpunkttests von Verbindungslinie und Flächen erheblich reduzieren.

7.4.1 Binäre Halbraumzerlegung (BSP)

Eine wesentliche Reduzierung der Schnittpunkttests ergibt sich, wenn man berücksichtigt, dass Flächen, die sich hinter einer anderen Fläche befinden, diese nicht verdecken können.

Für die Berechnung von Pixelbildern wurde bereits früh der z -Puffer-Algorithmus von Wolfgang Straßer [119] und Edwin Catmull [120] wahrscheinlich unabhängig voneinander entwickelt, der eine Tiefensortierung der zu zeichnenden Flächen vom Standort des Betrachters durchführt. Der z -Puffer-Algorithmus ist ein Bildraumalgorithmus und deshalb nur bedingt für den Einsatz in der Simulation geeignet.

Ein anderes Verfahren, welches im Objektraum der Elemente angewendet wird, ist

die binäre Zerlegung des Raumgebietes in Halbräume [121]. Die Halbräume werden durch Halbebenen geteilt, in denen die Elemente eingebettet sind. Dabei wird ein binärer Baum als Datenstruktur aufgebaut, in den sukzessive alle Elemente so einsortiert werden, dass sich Elemente, die **vor** einem anderen Element liegen, im linken Teilbaum, und Elemente, die **hinter** einem anderen Element liegen, im rechten Teilbaum befinden. Falls einzufügende Elemente von Halbebenen geschnitten werden, so müssen diese gegebenenfalls mehrmals zerteilt und die Teilstücke einzeln eingefügt werden. In Abb. 7.3 ist die Konstruktion einer binären Halbraumzerlegung im Zweidimensionalen dargestellt.

Die Zerlegung des Objektraumes in Halbräume ist nicht eindeutig und der so kon-

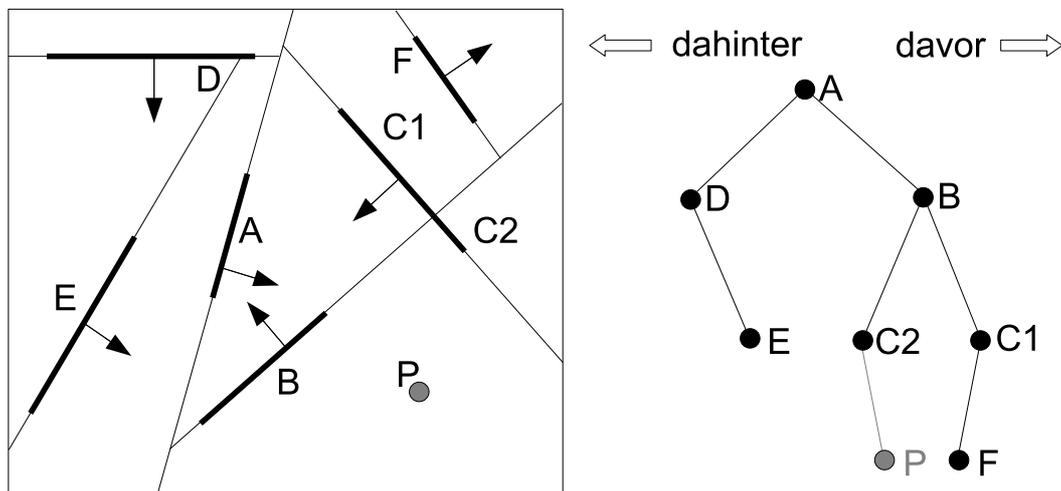


Abbildung 7.3 Konstruktion eines Binärbaums durch Halbraumzerlegung; die Ausgabereihenfolge (s. Text) für die Position P lautet $P - C2 - B - C1 - F - A - E - D$

struierte binäre Baum ist in der Regel nicht balanciert, weil nur eine Halbordnung statt einer strikten Ordnungsrelation auf dem Baum vorgegeben ist. Schlimmstenfalls degeneriert der Binärbaum zu einer linearen Liste und die Einfügeoperationen besitzen die Zeitkomplexität $\mathcal{O}(n^2)$. Im Durchschnitt besitzen die Einfügeoperationen im Baum jedoch nur eine Laufzeitkomplexität von $\mathcal{O}(n \log n)$. Nach der Konstruktion können für jede Position P innerhalb der Geometrie mit einem Durchlauf des Baumes die Elemente gemäß ihrer Verdeckungsreihenfolge ausgegeben werden. Für den originalen Verwendungszweck - dem Zeichnen von Polygonen - sollen Polygone vom fernsten bis zum nächstliegenden geliefert werden. Nähere Polygone überdecken weiter entfernte. Für den Halbkugel-Sampling-Algorithmus (7.3.1) ist

es jedoch zweckmäßiger, die Elemente in umgekehrter Richtung auszugeben. Dafür wird zunächst die Position innerhalb des Baumes ermittelt, die P nach dem Einfügen erhalten würde. Danach wird der Baum wie folgt durchlaufen, wobei mit P begonnen wird: Wenn sich P rechts vom aktuellem Knoten befindet, wird zunächst der rechte Teilbaum, danach der Knoten und dann der linke Teilbaum ausgegeben. Falls P links vom aktuellen Knoten liegt, wird zuerst der linke Teilbaum, dann der aktuelle Knoten und danach der rechte Teilbaum ausgegeben. Ein Beispiel für die Ausgabereihenfolge ist in Abb. 7.3 angegeben.

7.4.2 Clipping

Die Elemente können in der ermittelten Reihenfolge, wie im Abschn. 7.3.1 erläutert, auf die Einheitshalbkugel projiziert werden. Die später projizierten Elemente werden durch die bereits auf der Hemisphäre vorhandenen beschnitten (*engl. clipping*). Es ist zweckmäßig, die Projektion der beschnittenen Elemente auf der Hemisphäre

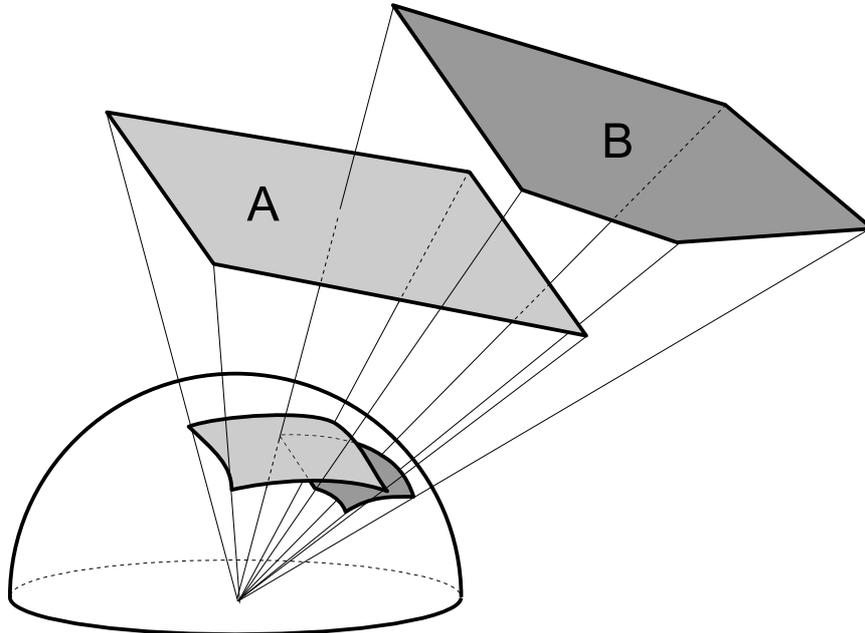


Abbildung 7.4 Weiter entfernt gelegene Elemente (B) werden durch bereits auf die Halbkugel projizierte Elemente (A) abgeschnitten.

in einer effizienten Datenstruktur zu hinterlegen, die das Auffinden von projizierten Elementen in einem Bereich sowie das Einfügen von neuen Elementen effizient unter-

stützt. Eine einfache und optimale Variante zur Speicherung solcher Punktmen- gen bieten die Bereichsbäume (*engl. range tree*) [121]. Zweidimensionale Bereichsbäume mit insgesamt n Punkten können in der Zeit $\mathcal{O}(n \log n)$ aufgebaut werden und unterstützen orthogonale Suchanfragen in Zeit $\mathcal{O}((\log n)^2 + a)$, wobei a die Anzahl der in der Anfrage enthaltenen Punkte darstellt [97]. Damit ist es sehr effizient, die sich überlappenden Elemente festzustellen.

Wenn es sich bei den Elementen um Polygone handelt, wie dies allgemein üblich ist, kann der in [97] vorgestellte Algorithmus zur Berechnung des Durchschnitts zweier Polygone in leicht abgewandelter Form verwendet werden. Die Laufzeit des optimalen Algorithmus beträgt für den Durchschnitt zweier Polygone P und Q mit insgesamt n Eckpunkten $\mathcal{O}(n \log n)$.

Um das vorgestellte Verfahren zum Beschneiden von Polygonen auf der Einheitshalbkugel durchführen zu können, ist es sinnvoll, die projizierten Polygone in sphärische Koordinaten $(\phi, \theta, r = 1)$ zu transformieren.

7.4.3 Sichtbarkeitspolynom in 2D

Für den Spezialfall sehr langer paralleler Strukturen, kann das Problem der dreidimensionalen Sichtbarkeitsberechnung von Flächen auf die senkrechte Schnittfläche der Struktur reduziert werden. In dieser zweidimensionalen Betrachtung werden die Oberflächenelemente auf miteinander verbundene Linienstücke reduziert. Man erhält somit einen offenen Polygonzug, der sich teilweise selbst verdeckt. Für jedes Element des Polygonzuges muss die Sichtbarkeit zu allen anderen Linienelementen der Oberfläche ermittelt werden.

Ein einfaches und zugleich laufzeitoptimales Verfahren bildet die Ermittlung des Sichtbarkeitspolynoms für einen Punkt im Inneren eines Polygons [97]. Das Sichtbarkeitspolynom für einen Punkt p im Inneren eines Polygons besteht aus den Kantenstücken, die von p aus direkt sichtbar sind, sowie Hilfskanten, die die Kantenstücke des Ursprungspolygons miteinander verbinden. Abb. 7.5 zeigt die Konstruktion des Sichtbarkeitspolygons.

Um das Verfahren anwenden zu können, muss der offene Polygonzug der Oberfläche zunächst durch Hilfskanten (gestrichelt in Abb. 7.5) geschlossen werden. Diese erhalten Markierungen und werden nach der Berechnung der Sichtbarkeit wieder entfernt.

Ausgehend von p wird ein Strahl im Uhrzeigersinn über alle Eckpunkte des Polygons

rotiert. Die besuchten Kanten des Polygons werden in einer linearen Liste notiert. Während des Polygonumlaufes kann der Strahl durch eine Wendung des Polygonzuges nach außen in Bereiche wandern, die durch das bereits überstrichene Teilpolygon verdeckt werden. Diese Abschnitte des Polygons werden nicht in die Sichtbarkeitsliste aufgenommen. Eine Wende nach innen kann dazu führen, dass bereits besuchte Teile des Polygons durch neu aufgesuchte Abschnitte verdeckt werden. Diese Verdeckung wird aus der Liste der besuchten Teilstücke entfernt [97; 122; 123].

Die Bestimmung des Sichtbarkeitspolynoms eines Punktes p in einem einfachen Polygon mit n Kanten lässt sich in der Zeit $\Theta(n)$ bestimmen. Ein formaler Korrektheitsbeweis dafür wird in [122] geführt.

Der Gesamtaufwand für die Sichtbarkeitsberechnung aller n Elemente der Oberflä-

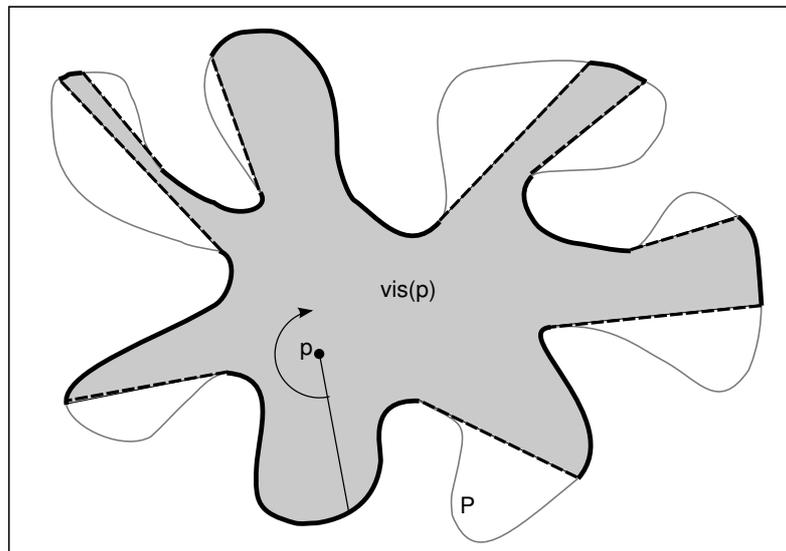


Abbildung 7.5 Sichtbarkeitspolygon eines Punktes p im Polygon P . Die gefundenen sichtbaren Teile sind fett dargestellt. Die Hilfskanten sind gestrichelt.

che liegt also im zweidimensionalen Fall bei $\mathcal{O}(n^2)$.

Eine Abschätzung für die mittlere Laufzeit des gesamten Verfahrens zur Berechnung der Formfaktoren ist nur schwer durchführbar, weil insbesondere die Berechnung der Sichtbarkeit stark von der Anordnung der Flächenelemente im Raum abhängt. Viele algorithmische Verbesserungen, die zu einer weiteren Beschleunigung der hier genannten Verfahren beitragen, wurden in den vergangenen Jahren entwickelt [64; 124]. Mit dem Entwicklung extrem leistungsfähiger Grafikhardware ist es außerdem möglich geworden, die hier entwickelte Methode zur Berechnung der Radiositygleichung zum Transport von Neutralen in weiten Teilen parallel auf spezialisierten Grafikpro-

zessoren durchzuführen [125].

7.5 Reflektivität der Oberfläche

Im Gegensatz zur Berechnung der spezifischen Ausstrahlung in der Computergrafik sind die Reflektivitäten der Elemente nicht unmittelbar bekannt, sondern hängen selbst vom Fluss Φ der Reaktanten ab. Das Gleichungssystem Gl. (7.27) wäre somit nichtlinear und hätte die Form

$$A(\rho(B)) = E. \quad (7.33)$$

Die Reflektivität ρ an der Oberfläche einer geätzten Struktur wird ganz entscheidend von der Oberflächenreaktion der Reaktanten bestimmt. Dabei spielen sowohl der Fluß und die Energieverteilung von Reaktanten, deren Oberflächenbedeckung, als auch die Prozessparameter wie Temperatur und Druck eine entscheidende Rolle (vgl. Kap. 4). Die Reflektivität der Ätzoberfläche bei diffuser Reflexion ist genau der Anteil an Reaktanten, welcher nicht an der Oberflächenreaktion beteiligt ist. Mithilfe des Verbrauchskoeffizienten S erhält man so die Reflektivität

$$\rho_i = 1 - S_i(B, \dots). \quad (7.34)$$

Der quasistationäre Zustand, für den die Simulation durchgeführt wird, stellt sich ein, wenn die Verbrauchskoeffizienten ein Gleichgewicht mit der Verteilung der Reaktanten in den Strukturen erreichen. Für den quasistationären Zustand gilt $\rho(B) = \text{const}$.

7.5.1 Iterative Approximation

Die Ermittlung der der gesuchten Verbrauchskoeffizienten ist ein nichtlineares Optimierungsproblem. Bei der Anwendung entsprechender Optimierungsmethoden ist allerdings zu beachten, dass die Funktion $S(x, B, \dots)$ meist nicht in expliziter Form vorliegt, sondern durch Computermodelle berechnet oder mithilfe empirische Daten interpoliert wird.

Die praktikabelste Methode ist die iterative Berechnung der Verteilung der Reaktanten und deren Reaktion an der Oberfläche, ausgehend von einer Näherungslösung.

Die Oberflächenreaktion liefert pro Iterationsschritt eine neue Schätzung der Reflektivität der Oberfläche, welche wiederum zur Neuberechnung der Flussverteilung genutzt wird. Das Verfahren endet, wenn die Differenz zweier aufeinanderfolgender Näherungslösungen einen absoluten Wert ϵ unterschreitet.

Die Konvergenzgeschwindigkeit dieser Methode hängt vom Berechnungsmodell für die Verbrauchskoeffizienten ab. Für physikalisch basierte Modelle konvergiert das Verfahren immer zu einer korrekten Lösung, da die Gesamtmenge der Reaktanten in einem Simulationsschritt konstant ist (Erhaltungsgröße).

Weil sich die Verhältnisse der Reaktanden und die Geometrie in aufeinander folgenden Ätzschritten nur wenig verändern, kann die gefundene Näherungslösung der Reflektivitäten als Anfangsnäherung für den jeweils nachfolgenden Ätzschritt dienen. Solange sich die Prozessparameter nicht ändern, sind somit im Normalfall keine weiteren Iterationen zwischen Simulationsschritten notwendig.

7.6 Lösung des LGS

In Abschnitt 7.2 wurde gezeigt, wie sich (Gl. (7.10)) mithilfe der Finiten Elementemethode näherungsweise durch ein Lineares Gleichungssystem (Gl. (7.27)) approximieren lässt. Die Genauigkeit der Approximation hängt stark von der Anzahl der Elemente und der Wahl der Basisfunktionen auf diesen Elementen ab. In praktischen Anwendungsfällen besteht das lineare Gleichungssystem aus wenigen hundert bis zu mehreren zehntausend Gleichungen.

Je nach Geometrie der geätzten Strukturen ist das Gleichungssystem mehr oder weniger stark besetzt. Es existieren eine Reihe von Lösungsverfahren für solche großen linearen Gleichungssysteme. Deren Effizienz hängt im wesentlichen davon ab, wie stark oder schwach die Systemmatrix besetzt und wie groß das Gleichungssystem ist.

Die beste bekannte untere Schranke $\mathcal{O}(n^{2.376})$ für die Lösung linearer Gleichungssysteme wurde 1990 von Coppersmith und Winograd gefunden [126]. Ein Lösungsverfahren, das diese Schranke erreicht, ist jedoch bisher nicht praktikabel.

Man unterscheidet beim Lösen linearer Gleichungssysteme im Allgemeinen direkte und iterative Methoden.

7.6.1 Direkte Verfahren

Beispiele für direkte Verfahren sind das Einsetzungsverfahren, das Gleichsetzungsverfahren und das Additionsverfahren für einfache Gleichungssysteme, sowie das auf dem Additionsverfahren basierende Gaußsche Eliminationsverfahren, das ein Gleichungssystem auf Stufenform bringt. Jedes dieser Verfahren basiert auf der äquivalenten Umformung der Gleichungen, so dass die Unbekannten nacheinander und direkt berechnet werden können.

Eine Variante des Gauß-Verfahrens ist die Cholesky-Zerlegung, die nur für symmetrische, positiv definite Matrizen funktioniert. Doppelt so viel Aufwand wie das Gauß-Verfahren braucht die QR-Zerlegung, die dafür stabiler ist. Alle bekannten direkten Verfahren benötigen mindestens $\mathcal{O}(n^3)$ Lösungsschritte und sind deshalb bei mehr als 10 000 Gleichungen nicht mehr effizient anwendbar.

Ein weiteres direktes Verfahren ist die Verwendung der Cramerschen Regel. Darin werden Determinanten verwendet, um Formeln für die Lösung eines quadratischen linearen Gleichungssystems zu erzeugen, wenn dieses eindeutig lösbar ist. Für die numerische Berechnung ist sie auf Grund des hohen Rechenaufwands jedoch nicht geeignet.

7.6.2 Iterative Näherungslösungen

Ausgehend von einer Näherungslösung nähern sich iterative Lösungsverfahren im Gegensatz zu direkten der gesuchten Lösung schrittweise an, bis eine ausreichende Genauigkeit erreicht wurde. Die verschiedenen Verfahren unterscheiden sich dabei hinsichtlich ihrer Konvergenzgeschwindigkeit. Für ein zu lösendes lineares Gleichungssystem

$$K B = E \tag{7.35}$$

für den unbekanntem Vektor B und die anfängliche Näherungslösung $B^{(0)}$, ist der Fehler $e^{(0)} = B - B^{(0)}$. Weil jedoch die tatsächliche Lösung B unbekannt ist, kann auch der Fehler nicht direkt ermittelt werden. Stattdessen wird das Residuum $r^{(0)} = K B^{(0)} - E$ zur Abschätzung der erreichten Genauigkeit verwendet. In jeder weiteren Iteration k wird, basierend auf dem ermittelten Residuum $r^{(k-1)}$ des vorangegangenen Schrittes, eine genauere Näherung $B^{(k)}$ ermittelt.

Für das Problem der diffusen Verteilung von Neutralen ist es zweckmäßig, als Anfangsnäherung $B^{(0)} = E$ zu wählen, weil Quellflächen normalerweise keine Reflekti-

vität besitzen.

Jacobi-Iteration

Das einfachste Iterationsschema ist die Jacobi-Iteration, bei dem jedes Element $B_i^{(k)}$ so geändert wird, dass Gleichung i mit der aktuellen Näherung $B^{(k)}$ gelöst wird. Eine einzelne Gleichung i des Gleichungssystems Gl. (7.35) hat die Form

$$\sum_j K_{ij} B_j = E_i. \quad (7.36)$$

Bringt man alle Terme außer dem Hauptdiagonalelement auf die rechte Seite, erhält man

$$K_{ii} = E_i - \sum_{j \neq i} K_{ij} B_j. \quad (7.37)$$

Eine neue Schätzung für B_i erhält man, indem man durch das Hauptdiagonalelement dividiert. Unter Verwendung des berechneten Residuumsvektors lässt sich die neue Näherung leicht berechnen:

$$B_i^{(k+1)} = E_i - \sum_{j \neq i} K_{ij} \frac{B_j^{(k)}}{K_{ii}} = B_i^{(k)} + \frac{r_i^{(k)}}{K_{ii}}. \quad (7.38)$$

Wenn der Residuumsvektor bekannt ist, so kann die Operation in linearer Zeit $\mathcal{O}(n)$ durchgeführt werden. Obwohl das Verfahren im Falle der Finiten Elemente-Methode zur Flussberechnung konvergiert, existieren effizientere Methoden als das Jacobi-Verfahren.

Gauss-Seidel-Verfahren

Besser geeignet zur Lösung der Flussberechnung ist das Gauss-Seidel-Verfahren, welches zunächst von Gauss entwickelt, später jedoch zuerst von Seidel veröffentlicht wurde. Es handelt sich um eine leichte Abwandlung des Jacobi-Verfahrens, bei dem die bereits aktualisierten Werte der Näherungslösung mit in die übrigen einfließen. Gl. (7.38) wird im Gauss-Seidel-Verfahren modifiziert nach

$$B_i^{(k+1)} = E_i - \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} \frac{B_j^{(k+1)}}{K_{ii}} - \sum_{j=i+1}^n K_{ij} \frac{B_j^{(k)}}{K_{ii}}. \quad (7.39)$$

Berechnet man das Residuum nach jedem Schritt

$$r_i^{(k)} = E_i - \sum_{j=0}^n K_{ij} B_k^{(k)}, \quad (7.40)$$

so kann die neue Näherung leicht berechnet werden zu

$$B_i^{(k+1)} = B_i^{(k)} + \frac{r_i^{(k)}}{K_{ii}}. \quad (7.41)$$

Für eine einzelne Gleichung sind die Kosten für die Berechnung des Residuums somit $\mathcal{O}(n)$ und die Aktualisierung von B_i erfolgt in konstanter Zeit $\mathcal{O}(1)$. Insgesamt kann ein Iterationsschritt somit in $\mathcal{O}(n^2)$ abgearbeitet werden.

Es existieren zahlreiche weitere Verbesserungen der iterativen Lösungsverfahren, wie z.B. das weniger bekannte Southwell-Iterationsverfahren [127]. Modernere Verfahren sind vorkonditionierte Krylow-Unterraum-Verfahren [128], die insbesondere für große dünn besetzte Matrizen sehr schnell sind. Diese spielen ihre Vorteile jedoch erst für sehr große lineare Gleichungssysteme aus.

Kapitel 8

Transportsimulation von Ionen

Der Transport von positiv geladenen Ionen innerhalb von geätzten Mikrostrukturen lässt sich wie der von neutralen Spezies auf das in Kap. 6 vorgestellte globale Transportmodell abbilden. Weil Ionen in der Randschicht jedoch stark beschleunigt werden, unterscheiden sich die $\mathcal{I}\mathcal{E}\mathcal{D}\mathcal{F}$ und die $\mathcal{I}\mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{F}$ grundsätzlich von denen der neutralen Teilchen.

In Abschn. 3.3.1 wurde gezeigt, dass Ionen an der Grenzschicht von Substrat und Randschicht eine bimodale $\mathcal{I}\mathcal{E}\mathcal{D}\mathcal{F}$ besitzen, die für hohe Anregungsfrequenzen oder große Randschichtdicken in eine unimodale übergeht. Detaillierte Messungen der $\mathcal{I}\mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{F}$ und $\mathcal{I}\mathcal{E}\mathcal{D}\mathcal{F}$ wurden durch vorangegangene Experimente unserer Arbeitsgruppe [129] sowie durch theoretische Modelle und Monte Carlo-Simulationen verifiziert [130]. Vereinfachend soll deshalb in diesem Kapitel die Betrachtung des Ionentransportes für monoenergetische Ionen durchgeführt werden. Für die bimodale $\mathcal{I}\mathcal{E}\mathcal{D}\mathcal{F}$ müssen die hier vorgestellten Berechnungen deshalb jeweils doppelt durchgeführt werden, um eine gute Näherung zu erreichen.

Um die Analogie zum Wärme- oder Lichtstrahlungstransport zu rechtfertigen, muss vorausgesetzt werden, dass sich Ionen geradlinig in der Struktur bewegen. Die Struktur muss daher frei von elektrischen und magnetischen Feldern sein. Insbesondere Aufladungseffekte der Maske oder von Dielektrika müssen für eine korrekte Berechnung mit der entwickelten Methode vernachlässigbar sein.

8.1 Globales Strahlungsmodell bei spekulärer Reflexion

In Gl. (6.25) wurde die allgemeine Transportgleichung als Äquivalent der Renderinggleichung in der Computergrafik aufgestellt. Durch das Einsetzen der diffusen oder lambertschen bidirektionalen Reflexionsfunktion Gl. (7.3) erhält man den Spezialfall für diffus reflektierende Oberflächen - die Radiositygleichung (Gl. (7.10)).

Die Reflexion von Ionen an Oberflächen ist jedoch im Gegensatz zu der der neutralen Teilchen nicht diffus, sondern spekulär und hängt darüber hinaus noch vom Einfallswinkel der Ionen zur Oberflächennormalen ab. Ein vereinfachtes Reflexionsgesetz der Ionen wurde bereits in Gl. (3.11) aufgestellt. Die bidirektionale Reflexionsfunktion der spekulären Reflexion lässt sich unter Verwendung der Deltafunktion darstellen als

$$f_{r,m} = S(\theta_i) \frac{\delta(\cos \theta_i - \cos \theta_r)}{\cos \theta_i} \delta(\phi_i - (\phi_r \pm \pi)), \quad (8.1)$$

wobei die δ -Funktion die drei Eigenschaften

1. $\delta(x) = 0$ wenn $x \neq 0$,
2. $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$,
3. $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) f(x) dx = f(y)$

besitzt. Eingesetzt in die Reflexionsfunktion Gl. (6.18) ergibt sich der Zusammenhang zwischen einfallender und reflektierter spezifischer Intensität zu [64]

$$\begin{aligned} L_r(\theta_r, \phi_r) &= \int_{\Omega_i} S(\theta_i) \frac{\delta(\cos \theta_i - \cos \theta_r)}{\cos \theta_i} \delta(\phi_i - (\phi_r \pm \pi)) \\ &\quad \cdot L_i(\theta_i, \phi_i) \cos \theta_i d\theta_i d\phi_i \\ &= S(\theta_r) L_i(\theta_r, \phi_r \pm \pi). \end{aligned} \quad (8.2)$$

Eingesetzt in die allgemeine Transportgleichung (Renderinggleichung Gl. (6.25)) erhält man

$$L(x', \vec{\omega}') = L_e(x', \vec{\omega}') + \int_S S(\theta_r) L(x, \vec{\omega}) G(x, x') V(x, x') dA. \quad (8.3)$$

Im Gegensatz zur Radiosity-Gleichung Gl. (7.10) kann Gl. (8.3) nicht auf die Berechnung einer reellen Funktion auf der Oberfläche vereinfacht werden, weil die spezifische Intensität an jedem Punkt der Oberfläche eine Funktion des Einfallswinkels ist, die zudem noch zahlreiche Unstetigkeiten, z. B. durch Schattenwurf, enthalten

kann.

Die Approximation durch die Finite Elemente-Methode, wie sie für den Transport von Neutralen bei diffuser Reflexion in Kap. 7 vorgestellt wurde, ist für die Berechnung des Ionentransportes damit ungeeignet.

8.2 Monte Carlo-Simulation

Die am häufigsten angewendete Methode zur Simulation der spezifischen Intensität von Ionen an der Oberfläche geätzter Strukturen ist die Monte Carlo-Simulation, die bereits in Abschn. 5.1.1 vorgestellt wurde.

Notwendig für die Anwendung der Monte Carlo-Simulation ist die Aufteilung der Oberfläche in diskrete Bereiche. In der Monte Carlo-Simulation wird eine große Anzahl virtueller Teilchen¹ an der Grenzschicht von Substrat und Randschicht erzeugt. Für die Simulation kleiner Strukturen kann der Ort der Ionen als gleichverteilt auf der Grenzfläche von Substrat und Randschicht angenommen werden. Die Winkel- und Energieverteilungen der simulierten Ionen entsprechen bei ihrer Erzeugung der $IADF$ und $IEDF$. Für jedes simulierte Teilchen wird die Flugbahn bis zur Absorption berechnet. Dabei können mehrere Reflexionen bzw. ein Ladungstransfer auftreten. Bei der Verwendung dieser Methode können auch elektrische und magnetische Felder berücksichtigt werden, die zu einer gekrümmten Ionenbahn führen.

Die simpelste Form der Simulation erfasst die relative Häufigkeit der Teilchenabsorption für jeden Bereich. Nach dem Gesetz der Großen Zahlen Gl. (5.1) nähert sich die relative Häufigkeit dem Ionenfluss in diesem Bereich, bezogen auf den gesamten Ionenfluss an der Oberfläche, an. Unter der Voraussetzung, dass die Bereiche, in die die Oberfläche unterteilt wurde, klein sind, so ist die einstrahlende spezifische Intensität von Ionen näherungsweise konstant bezüglich des Ortes auf dem betrachteten Bereich. Durch Diskretisierung des Winkels lässt sich die relative Häufigkeit einer Ionenabsorption für einen Bereich in Abhängigkeit des Auftreffwinkels bestimmen. Diese Form der Simulation ist relativ einfach zu implementieren und kann wegen der Ergodizität des Prozesses einfach parallelisiert werden.

Ein gravierender Nachteil ist allerdings die große Anzahl von simulierten Teilchen ($10^4 \dots 10^7$), die notwendig ist, um das Gesetz der Großen Zahlen näherungsweise zu erfüllen. Insbesondere Bereiche mit sehr geringen relativen Häufigkeiten erfordern

¹Ein simuliertes Teilchen kann mehreren Ionen entsprechen.

die Simulation sehr vieler Teilchen.

Der Fehler der relativen Häufigkeiten, der sich für jeden Bereich ergibt, ist wegen der Zufälligkeit der Teilchengenerierung ebenfalls eine Zufallsgröße.

Nicht zuletzt erfordert die Erzeugung von (Pseudo-)Zufallszahlen, wie sie in Computersimulationen verwendet werden, große Sorgfalt bei der Implementierung, um systematische Fehler zu unterbinden.

8.2.1 Raytracing

Das Raytracingverfahren² wurde im Zuge der photorealistischen Darstellung und der Berechnung von Verdeckungen in Szenen erstmals 1968 von Arthur Appel, Robert Goldstein und Roger Nagel veröffentlicht [131]. Der Algorithmus wurde zur Berechnung von Rasterbildern entwickelt. Das Grundprinzip ist die Verfolgung eines Strahls vom Augenpunkt des Betrachters durch die einzelnen Gitterpunkte des Rasters. Beim Auftreffen des Strahls auf Oberflächen wird der reflektierte Strahl weiterverfolgt. Das Verfahren bricht nach einer endlichen Zahl von Reflexionen oder dem Erreichen einer Strahlungsquelle ab. Bei jeder Reflexion werden die Reflexionseigenschaften des Materials zur Ermittlung der spezifischen Strahlintensität berücksichtigt.

Das Verfahren wurde seitdem stark verbessert und um zusätzliche Eigenschaften, wie Strahlteilung durch Lichtbrechung, Absorption durch Nebel etc., erweitert. Es eignet sich insbesondere für spekulare Reflexionen aber nicht für diffus reflektierende oder streuende Objekte.

Für die Simulation des Ionenflusses an der Oberfläche geätzter Strukturen kann ein modifiziertes Raytracingverfahren realisiert werden.

Für einen Bereich der Oberfläche wird, wie im Monte Carlo-Verfahren, angenommen, dass der Fluß bezüglich des Ortes konstant sei. Um die winkelabhängige spezifische Intensität zu ermitteln, wird die Oberfläche der Einheitshalbkugel über dem Element gerastert und Strahlen vom Mittelpunkt durch die Rasterpunkte berechnet. Trifft der Strahl eine Oberfläche, so wird für die Reflexion gemäß Gl. (8.2) die Einfallintensität und der Einfallswinkel des Strahls entsprechend rückwärts der Ionenflugbahn berechnet. Die Strahlverfolgung wird abgebrochen, wenn keine Reflexion möglich ist oder die Quelle der Ionen – die Grenzfläche zur Randschicht – erreicht wurde. In

²engl.: Strahlverfolgung

diesem Fall ist die spezifische Intensität in Richtung des errechneten Strahls

$$L(x, \vec{\omega}) = \mathcal{IADF}(\vec{\omega}) \phi(x). \quad (8.4)$$

Vorteilhaft am Raytracing-Verfahren ist – im Rahmen der Oberflächendiskretisierung und der Rasterung der Einstrahlungshemisphären – die genaue Berechnung der spezifischen Intensität in jeder Richtung. Das Verfahren lässt sich außerdem leicht parallelisieren, weil die Berechnung für jeden Oberflächenpunkt unabhängig voneinander erfolgen kann.

Nachteilig ist jedoch der extrem hohe Rechenaufwand zu sehen, der sich aus der Tatsache ergibt, dass für jeden Bereich der Oberfläche ein komplettes Raster auf der Einheitshemisphäre berechnet werden muss. Den bei weitem größten Aufwand beim Raytracingverfahren nimmt die Berechnung der Schnittpunkte von Strahlen und Oberflächen in Anspruch.

8.3 Iterative Vorwärtsreflexion

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine grundlegend neue Methode zur Approximation der spezifischen Intensität der Ioneneinstrahlung an der Oberfläche geätzter Strukturen entwickelt.

Ausgehend von der Tatsache, dass Ionen wegen ihrer geringen Reflexionswahrscheinlichkeit bei steilen Einfallswinkeln (Gl. (3.11)), nur wenige Male reflektiert werden, berechnet die Methode iterativ die spezifische Intensität für diskrete Orte der Oberfläche. Anstelle diskreter Orts- und Impulsvektoren, wie sie in der Monte Carlo-Methode generiert werden, wird jedoch die gesamte Funktion der spezifischen Intensität $L(x, \vec{\omega})$ durch stückweise Polynome über den Raumwinkel approximiert. Durch Anwendung arithmetischer Operationen auf die Polynome wird die Reflexion an Oberflächen berechnet.

8.3.1 Stückweise Polynome

Die Approximation von beliebigen stetig differenzierbaren Funktionen kann mithilfe von Polynomen durchgeführt werden. Ein reelles Polynom mit zwei Unbekannten x

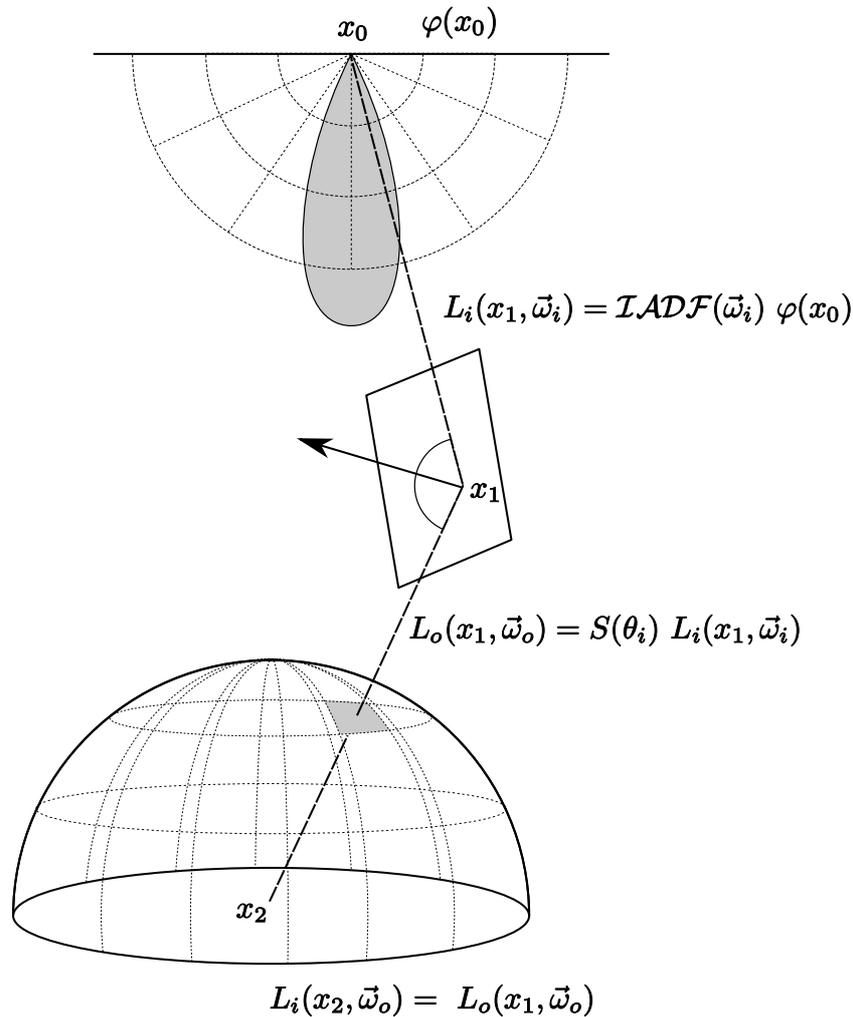


Abbildung 8.1 Verlauf eines Strahls beim Raytracingverfahren. Ausgehend von der Oberfläche werden Strahlen durch die gerasterte Oberfläche der Einheitskugel berechnet und Reflexionen bis zur Quelle des Strahls zurückverfolgt.

und y besitzt die Form

$$p(x, y) = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n p_{i,j} x^i y^j \quad (8.5)$$

Eine beliebige reelle Funktion $f(x, y)$ kann durch eine geeignete Wahl der Koeffizienten $p_{i,j}$ in einem Intervall durch ein Polynom angenähert werden.

Polynome der reellen Zahlen bilden einen Ring. Das heißt insbesondere, dass die Addition und Multiplikation von Polynomen wiederum ein Polynom liefert [132]. Die Integration und Differentiation von Polynomen liefern ebenfalls Polynome. Mit diesen Voraussetzungen lässt sich eine Intervallarithmetik aufstellen, die Polynomfunktionen als Ergebnis arithmetischer Operationen von Polynomen in einem Inter-

voll berechnet.

Im folgenden sollen die Operationen aus Gründen der Übersichtlichkeit nur für eindimensionale Polynome aufgezeigt werden. Die Verallgemeinerung auf zwei und mehr Dimensionen ist ausführlich in [Amann & Escher 132; 133] dargestellt.

Für ein Intervall $I = (u, v)$ und $x \in I$, in dem die Polynome $p(x) = \sum_{i=0}^n p_i x^i$ und $q(x) = \sum_{i=0}^m q_i x^i$ definiert sind, gilt

$$\begin{aligned}
 (p + q)(x) &= p(x) + q(x) &= \sum_{i=0}^{\max(m,n)} (p_i + q_i) x^i && \text{(Addition)} \\
 (p \cdot q)(x) &= p(x) q(x) &= \sum_{i=0}^{m+n} \left(\sum_{k=0}^i p_k q_{i-k} \right) x^i && \text{(Multiplikation)} \\
 p(ax) &= \sum_{i=0}^n p_i (ax)^i &&& \text{(Stauchung, Spiegelung)} \\
 p(x+a) &= \sum_{i=0}^n p_i (x+a)^i = \sum_{i=0}^n \left(\sum_{k=i}^n \binom{k}{k-i} a^{k-i} p_k \right) x^i &&& \text{(Verschiebung)} \\
 \frac{dp}{dx} &= p'(x) &= \sum_{i=1}^n i p_i x^{i-1} && \text{(Ableitung)} \\
 \int p(x) dx &= P(x) &= \sum_{i=0}^n \frac{1}{i+1} p_i x^{i+1} + c && \text{(Integration)}.
 \end{aligned}
 \tag{8.6}$$

Taylor-Polynome

Eine einfache Methode zur Approximation einer Funktion in einer Umgebung eines Punktes a sind die Taylor-Polynome³ [132]. Eine Funktion f in einer Veränderlichen x lässt sich durch das n -te Taylorpolynom T_n und ein Restglied R_n approximieren als

$$f(x) = T_n(x) + R_n(x). \tag{8.7}$$

Darin ist $T_n(x)$ das n -te Taylorpolynom an der Stelle a mit

$$T_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^k \tag{8.8}$$

und dem Restglied

$$R_n(x) = \int_a^x \frac{(x-t)^n}{n!} f^{(n+1)}(t) dt. \tag{8.9}$$

³benannt nach Brook Taylor (1685–1731)

So lässt sich beispielsweise die Kosinusfunktion an der Stelle 0 als Taylorpolynom vom Grad 4 darstellen als

$$\cos x \approx T_{4,\cos} = \frac{1}{24}x^4 - \frac{1}{2}x^2 + 1 \quad (8.10)$$

Für das Intervall $-\frac{\pi}{4} \leq x < \frac{\pi}{4}$ liegt die relative Abweichung $\left| \frac{T_{4,\cos}(x) - \cos x}{\cos x} \right|$ dieser Approximation unter 0.05%. Die Approximation von Taylorpolynomen lässt sich für mehrdimensionale Funktionen erweitern [133].

8.3.2 Polynomapproximation mit minimalem Fehler

Die Taylorpolynome approximieren eine Funktion f und deren Ableitungen an der Entwicklungsstelle und in seiner Umgebung. Um den quadratischen Approximationsfehler in einem Intervall I zu minimieren, muss das Integral

$$\int_I [p(x) - f(x)]^2 dx \quad (8.11)$$

minimal sein.

Das Optimierungsproblem kann entweder analytisch oder numerisch gelöst werden und liefert die Koeffizienten des Polynoms $p(x)$.

Für die Approximation der Kosinusfunktion durch ein Polynom vierten Grades ist das Minimum des Integrals (Gl. (8.11)) im Intervall $I = (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ $4,28 \cdot 10^{-7}$ und für das Taylorpolynom vierten Grades (Gl. (8.10)) $9,74 \cdot 10^{-5}$.

Die optimale Approximation der Kosinusfunktion durch ein Polynom vierten Grades im Intervall I lautet

$$\cos x \approx p_{\cos} = 0.03721 x^4 - 0.4964 x^2 + 1. \quad (8.12)$$

8.3.3 Approximation der ADF durch stückweise Polynome

Die Gaußsche Glockenkurve der Normalverteilung $\mathcal{N}(\mu = 0, \sigma)$ lässt sich durch drei Polynome vierten Grades nach Gl. (8.13) optimal approximieren.

$$p_{\mathcal{N}(\mu=0,\sigma)} = \begin{cases} \frac{0.00185}{\sigma^5}x^4 - \frac{0.00185}{\sigma^4}x^3 + \frac{0.22803}{\sigma^3}x^2 - \frac{0.66811}{\sigma^2}x + \frac{0.72125}{\sigma^1} & -5\sigma \leq x < -\sigma \\ \frac{0.03992}{\sigma^5}x^4 - \frac{0.19630}{\sigma^3}x^2 + \frac{0.398795}{\sigma} & -\sigma \leq x \leq \sigma \\ \frac{0.00185}{\sigma^5}x^4 + \frac{0.00185}{\sigma^4}x^3 + \frac{0.22803}{\sigma^3}x^2 + \frac{0.66811}{\sigma^2}x + \frac{0.72125}{\sigma^1} & +\sigma < x \leq 5\sigma \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (8.13)$$

Die Polynomapproximation der Gausschen Glockenkurve wird im zweidimensionalen Fall zur Beschreibung der \mathcal{IADF} an der Grenzfläche der Plasmarandschicht und der Substratoberfläche verwendet. Für eine dreidimensionale Betrachtung der \mathcal{IADF} (Gl. (3.9)) lassen sich die Koeffizienten zur Minimierung des quadratischen Fehlers in analoger Weise berechnen.

Zur Berechnung des reflektierten Ionenflusses werden in der entwickelten Methode der iterativen Vorwärtsreflexion auch die spezifischen Intensitäten und die Reflexionsfunktion (Gl. (3.12)) durch Polynome in Intervallen approximiert.

8.3.4 Geometrie und Sichtbarkeit

Zur Berechnung der spezifischen Intensität an einem Punkt der Oberfläche wird diese durch stückweise Polynomfunktionen auf der Einheitshalbkugel (Abb. 8.1) dargestellt. Die Intervallgrenzen⁴ sind durch die Unstetigkeiten bestimmt, die sich durch die Aufteilung der Oberfläche in kleine Elemente und deren Projektion auf die Einheitshalbkugel mit Berücksichtigung von Verdeckungen (siehe auch Abb. 7.4) ergibt.

8.3.5 Vorwärtsreflexion an Oberflächenelementen

Zur Berechnung der einfallenden spezifischen Intensität der Ionen an einem Punkt der Oberfläche wird über alle anderen Elemente der Oberfläche iteriert. Für jedes der Elemente wird die Projektion der sichtbaren Fläche auf die Oberfläche der Einheitshalbkugel ermittelt. Weil sich die geometrischen Gegebenheiten in einem Simulationsschritt nicht ändern, kann die aufwändige Sichtbarkeitsberechnung (vgl. Abschn. 7.4) für den Transport von neutralen Reaktanden und Ionen gemeinsam durchgeführt werden.

Die Aufteilung der Oberfläche in Elemente sowie die teilweisen Verdeckungen von Elementen führt zu Unstetigkeiten in der Funktion der spezifischen Intensität (Schattenwurf) und bedingt die Stückelung der Polynome. Weil die spezifische Intensität entlang eines Strahls konstant bleibt (vgl. Abschn. 6.1.3) entspricht die einfallende spezifische Intensität im Intervall der ausgehenden spezifischen Intensität des projizierten Elements.

Durch Anwenden der Gleichung Gl. (8.2) auf die projizierten Polynome und die Intervallgrenzen erhält man die reflektierte Spezifische Intensität der Ionen wieder-

⁴Im dreidimensionalen Fall sind die Intervalle auf der Einheitshalbkugel Oberflächengebiete.

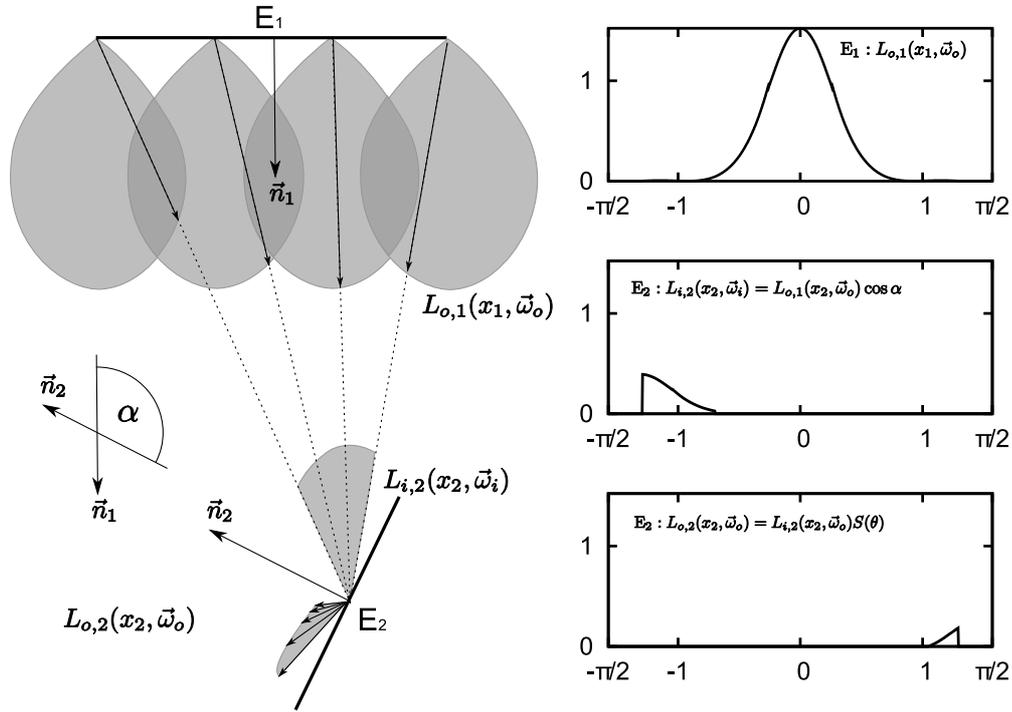


Abbildung 8.2 Vorwärtsreflexion von Ionen am Oberflächenelement E_2 . Die abgegebene spezifische Intensität $L_{o,1}$ ist gleich der eingestrahlten spezifischen Intensität auf E_2 senkrecht zum Strahl. Die Lage der beiden Flächen reduziert die einfallende spezifische Intensität $L_{i,2}$ um den Faktor $\cos \alpha$. Der Raumwinkel, unter dem E_1 Ionen nach E_2 sendet, ist durch die Größe und Lage beider Flächen bestimmt. Die reflektierte spezifische Intensität wird durch Gl. (8.2) berechnet. Aus den Intensitätsverteilungsdigrammen wird deutlich, dass nur ein sehr geringer Teil von Ionen tatsächlich an E_2 reflektiert wird.

um als stückweise Polynomapproximation (Abb. 8.2). Aus Gl. (8.6) folgt, dass bei jeder Multiplikation der Grad des Polynoms steigt. Zusätzlich steigt die Zerstückelung der Intervalle bei jeder Addition oder Multiplikation an. Aus diesem Grund ist die inkrementelle Vorwärtsiteration mit stückweisen Polynomen nur für wenige Iterationen geeignet.

8.3.6 Iteration

Die Berechnung der spezifischen Intensität der Ionen an der Oberfläche erfolgt iterativ.

Im ersten Iterationszyklus wird zunächst für jedes Oberflächenelement der direkt

aus der Randschicht auftreffende Ionenstrom mit der \mathcal{IADF} (Gl. (3.9)) und der reflektierte Anteil als stückweise Polynomfunktion berechnet.

In den folgenden Iterationen wird die jeweils aus der vorherigen Iteration entstandene reflektierte Anteil der spezifischen Intensität für jedes Element ermittelt und der einfallenden spezifischen Intensitätsfunktion hinzuaddiert.

In jedem Iterationsschritt wird somit eine weitere Reflexion der approximierten spezifischen Ionenintensität ermittelt.

8.3.7 Komplexität und Genauigkeit

Die Zeitkomplexität des in dieser Arbeit entwickelten Verfahrens der iterativen Vorwärtsreflexion hängt ganz wesentlich von den verwendeten Unteralgorithmen zur Implementierung der Sichtbarkeitsberechnung und der Speicherung stückweiser Polygone ab.

Die Berechnung der Sichtbarkeit und die Projektion auf die Einheitshalbkugel wurde bereits in Kap. 7 umfangreich dargelegt. Weil die Geometrie der Strukturen für den Transport von neutralen Spezies und Ionen übereinstimmt, kann der Simulationsaufwand auf die einmalige Berechnung der gegenseitigen Verdeckung von Elementen begrenzt werden.

Die Operationen, welche auf stückweise definierten Polynomen durchgeführt werden, umfassen

- Funktionswertberechnung,
- Teilung des Definitionsbereiches,
- Operationen mit Erhöhung des Grades des Polynoms.

Zum Speichern der Polynome werden zweckmäßig sequentielle Datenstrukturen verwendet, die ein effizientes Iterieren und Vergrößern unterstützen. Die Polynome werden darin durch ihre Koeffizienten dargestellt.

Die Funktionswertberechnung von stückweisen Polynomen erfordert das schnelle Auffinden des Intervalls und dessen Polynomkoeffizienten. Im zweidimensionalen Fall können Polynomstücke in den Blättern eines balancierten binären Suchbaumes gespeichert werden, dessen Knoten die Intervalle tragen. Der Aufwand zum Aufbauen des binären Suchbaumes beträgt dann bei n Intervallen $O(n \log n)$ und das Auffinden der Polynomkoeffizienten benötigt nur $O(2 \log n)$ Vergleiche.

Die numerische Genauigkeit der iterativen Vorwärtsreflexion hängt im wesentlichen von den folgenden Faktoren ab:

- Größe der Oberflächenelemente,
- Approximationsfehler durch Polynominterpolation,
- Anzahl von Vorwärtsiterationen.

Zum Erreichen der bestmöglichen numerischen Genauigkeit bei akzeptablen Simulationslaufzeiten müssen die Größe der Oberflächenelemente, der Grad der Polynomapproximation sowie die Anzahl von Iterationen gegeneinander abgewogen werden und hängen von den simulierenden Strukturen ab.

Kapitel 9

Software

Um Computersimulationen von Plasmaätzprozessen, wie sie in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellt wurden, effizient durchführen zu können, ist die Implementierung der vorgestellten Modelle in Software notwendig.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde, basierend auf den Vorarbeiten von [Volland 4], eine komplett überarbeitete und in allen Teilen verbesserte und erweiterte Simulationssoftware zum Plasmaätzen von Grabenstrukturen erstellt. Das Ziel war es, eine integrierte Simulation der makroskopischen Prozesse zur Erzeugung des Plasmas und der mikroskopischen Effekte, die die Ätzung von Mikro- und Nanostrukturen beeinflussen, zu entwickeln.

Die in dieser Arbeit entwickelte integrierte Gesamtsimulation von Plasmaätzprozessen dient der Verifikation von Prozessmodellen und Ätzmechanismen, sowie der Ätzprozessentwicklung und -optimierung. Die Software ist darüber hinaus ein nützliches Hilfsmittel in der Lehre. Dementsprechend erstreckt sich die Bandbreite potentieller Nutzer von Wissenschaftlern der Grundlagen- und angewandten Forschung, Prozessingenieuren, Equipmentsausrüstern bis hin zu Studenten.

9.1 Integrierte Ätzsimulation

Die Integration von makroskopischen Plasmamodellen, die die Erscheinungen im Plasma in der Größenordnung des Reaktors beschreiben und der Oberflächenprozesse die in mikroskopischer Größenordnung die Oberflächenprozesse modellieren, war das primäre Ziel bei der Neuentwicklung der Simulationssoftware. Ein Bindeglied zwischen beiden Modellklassen bildet das Randschichtmodell.

Eingabeparameter der integrierten Simulation sind

- Prozessparameter, wie sie an realen Ätzreaktoren in Form eines Ätzrezeptes verwendet werden,
- Reaktorparameter, die die Geometrie und physikalisch/chemischen Eigenschaften der Plasmakammer beschreiben,
- Modellparameter, die z.B. die numerische Genauigkeit und die verwendeten Lösungsverfahren festlegen.

In Abb. 9.1 ist das Zusammenwirken der Modelle, die jeweiligen Eingabeparameter und -daten, sowie deren Datenabhängigkeiten dargestellt. In der Abfolge der Simu-

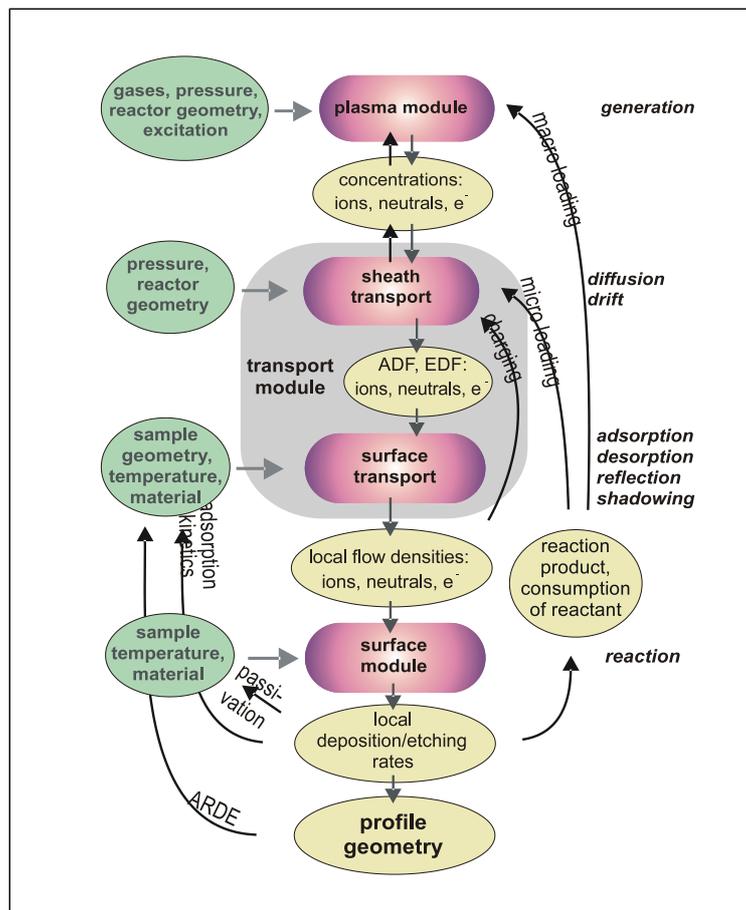


Abbildung 9.1 Modularer Aufbau einer integrierten Plasmaätzsimulation mit Parametern und Datenabhängigkeiten. (entnommen aus [4]).

lationsmodelle von der Plasmasimulation bis zu den Oberflächenreaktionen bilden

die jeweiligen Ausgaben die Eingabedaten für die nachfolgenden Simulationsmodule. Zusätzlich gibt es Feedbacks¹ die auf das Verhalten der vorangegangenen Modelle auswirken. Diese Größen sind physikalische Größen, die den Zustand der aktuellen Simulation beschreiben. Zusätzliche Eingaben in jedem Simulationsmodul legen die spezifischen Simulationsparameter fest, wie sie durch das aktuelle Ätzrezept und die experimentellen Bedingungen gegeben sind.

9.2 Softwarearchitektur

Wegen der unterschiedlichen Anforderungen der jeweiligen Nutzer von Simulationssoftware ist eine flexible Einsetzbarkeit unumgänglich.

Die Simulationssoftware, wie sie im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, besteht deshalb aus verschiedenen Modulen und Komponenten, die durch dokumentierte Schnittstellen (API²) miteinander zusammenarbeiten.

Wie in Abb. 9.2 dargestellt, ist die Simulationsbibliothek „SimLib“ das zentrale Modul zur Erzeugung und Durchführung von Simulationen, mit dessen API verschiedene Anwendungen erzeugt werden können. Darüber hinaus enthält diese Bibliothek die Implementierung von fest integrierten Modellen, wie z. B. der Randschichtsimulation, der elektrostatischen Aufladung und der in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellten Transportmechanismen für neutrale und ionisierte Reaktanten. Die Simulationsbibliothek enthält jedoch keine direkten Funktionen zum Speichern und Laden der Simulationsdaten in Dateien oder Datenbanken. Stattdessen werden Streams bereitgestellt, über die die Simulationsdaten ausgetauscht werden können. Streams sind eine Ein- und Ausgabetechnik, die eine standardisierte, erweiterbare und abstrakte Schnittstelle zwischen Programmen und Dateien oder Geräten implementieren [134]. Applikationen können über diesen Mechanismus flexibel die Verwaltung, Speicherung und den Zugriff auf Simulationsdaten implementieren.

9.2.1 APIs

Die Simulationssoftware wurde unter objektorientierten Gesichtspunkten entworfen und in der Programmiersprache C++ implementiert. Die SimLib-Bibliothek, die in dieser Arbeit entwickelt wurde, ist als dynamisch ladbare Programmbibliothek

¹Rückwirkungen auf vorhergehende Modelle, die eine Änderung der Eingaben nach sich ziehen.

²API - Anwendungsprogrammierschnittstelle (engl. application programming interface)

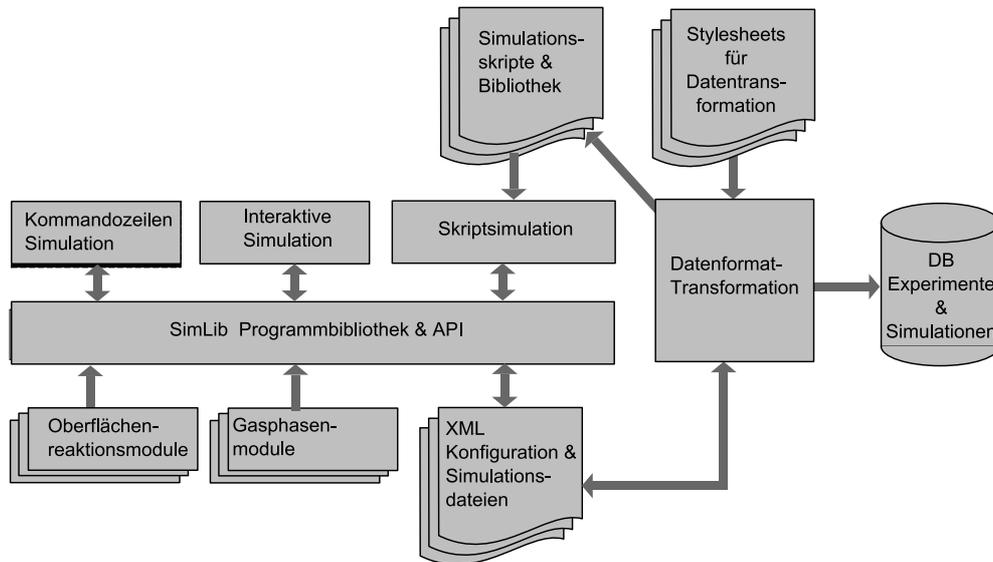


Abbildung 9.2 Softwarearchitektur der implementierten Simulationssoftware

(DLL) zusammen mit den Schnittstellenspezifikationen und einer vollständigen Dokumentation der API für jeden Nutzer der Software frei zugänglich und gestattet deshalb die Integration der Simulationsbibliothek in benutzerspezifische Anwendungen.

9.3 Plug-In-Konzept

Aufgrund der unüberschaubaren Palette an Ätzelementen und Materialien, die zum ionenunterstützten Ätzen in Plasmen verfügbar sind [17] und sich ständig erweiternder Erkenntnisse in der Modellierung solcher Prozesse, ist ein flexibles und erweiterbares Softwarekonzept vorteilhaft.

Um diesen Umständen Rechnung zu tragen, wurde ein Plug-In System³ in die Simulationsbibliothek „SimEtch“ implementiert, welches Nutzern gestattet, eigene Implementierungen von Plasma- und Oberflächenreaktionsmodellen hinzuzufügen. Auch der Austausch oder die Erweiterung der bereits bestehenden Modelle ist ohne Neuübersetzung der Software problemlos möglich.

Die Integration eines vom Benutzer der Software erstellten Modelles ist in Abb. 9.3

³Plug-In (engl. einstecken) ist ein Softwarekonzept, bei dem selbst erstellte oder von Drittanbietern veröffentlichte Programmteile in die Software integriert werden.

schematisch dargestellt. Basierend auf der Plug-In Schnittstelle der API wird ein neues Modell zunächst mithilfe einer Programmiersprache (z.B. C++) implementiert und zu einer dynamisch ladbaren Bibliothek übersetzt. Zusätzlich wird eine Konfigurationsdatei, welche z.B. Informationen über das Modell, die Art, Anzahl und vorgegebene Werte der Modellparameter und weitere relevante Informationen enthält, in Form einer strukturierten Textdatei (vgl. Abschn. 9.3.1) erstellt. Die beiden Dateien werden zur Laufzeit der Simulation verwendet, um die Modellimplementierung zu laden und auszuführen. Das Plug-In-Konzept bietet eine Reihe von

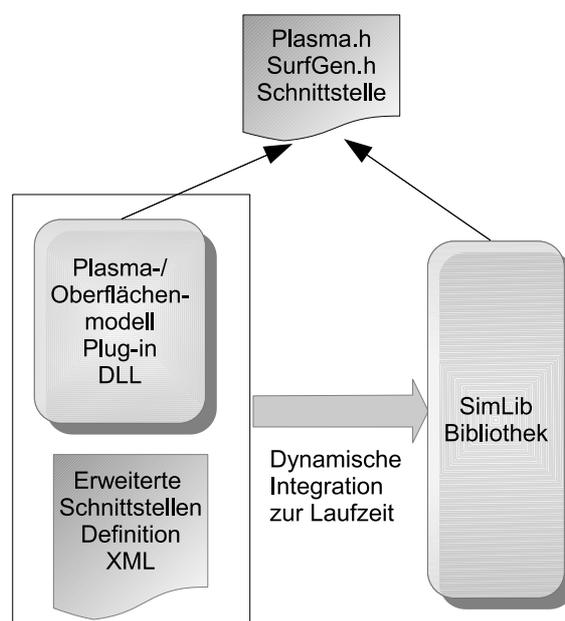


Abbildung 9.3 *Plug-In-Konzept zur Integration von Benutzermodellen. Basierend auf der gemeinsamen Schnittstelle können beliebige Plasma- und Oberflächenreaktionsmodelle zur Laufzeit integriert werden.*

Vorteilen:

- neue Gas/Material-Systeme können von Nutzern entwickelt und gegebenenfalls veröffentlicht werden,
- Weitergabe von Modellen ohne Veröffentlichung des Quelltextes ist möglich,
- Reparametrisierung und Anpassung von Modellen in strukturiertem Text.

Es obliegt allerdings dem Anwender, nur Plug-Ins aus vertrauenswürdigen Quellen zu verwenden, weil die Ausführung von unbekanntem Programmfragmenten unter Umständen ein Sicherheitsrisiko bedeutet.

9.3.1 XML

Externe und interne Modelle der Simulationsbibliothek SimLib, sowie Simulationsparameter, Prozessrezepte, Reaktorabmessungen und alle Daten, die die simulierte Probe definieren, werden im XML-Format⁴ gespeichert, ausgetauscht und verwaltet.

XML ist ein Standard des W3C-Konsortiums [135] zur Auszeichnung von Dokumenten. Darin wird eine einfache Syntax verwendet, um Dokumente mit lesbaren Markierungen – sogenannte Tags – zu strukturieren [136]. Damit wird ein Standardformat definiert, welches flexibel genug ist, um auf spezifische Problemdomänen, wie der Präsentation auf Webseiten oder dem Datenaustausch zwischen Anwendungen, angepasst zu werden.

In Quelltext 9.1 ist die Auszeichnung eines Dokumentes mit einem Prozessrezept beispielhaft gelistet.

```
<Recipe>
  <Loop iterations="6">
    <Sequence>
      <ProcessStep apc="0" dcbias="5." dome_temp="293.15"
        duration="30." power="1000."
        pressure="3.333" table_temp="293.15"
        timestep="1.">
        <GasFeed flow="60." name="C4F8" temp="293.15"/>
      </ProcessStep>
      <ProcessStep apc="0" dcbias="35." dome_temp="293.15"
        duration="60." power="1000."
        pressure="3.333" table_temp="293.15"
        timestep="1.">
        <GasFeed flow="50." name="SF6" temp="293.15"/>
      </ProcessStep>
    </Sequence>
  </Loop>
</Recipe>
```

Quelltext 9.1 *Prozessrezept in XML*

Durch die Verwendung von XML zum Speichern der Konfiguration und der Simulationsdaten ist der Datenaustausch mit anderen Softwarepaketen leicht zu realisieren. Mithilfe von Formatierungsvorschriften, so genannten Stylesheets, können XML-

⁴XML (engl. extensible markup language) erweiterbare Auszeichnungssprache

Dokumente nahezu beliebig in andere Formate, die nicht zwangsläufig XML oder menschenlesbar sein müssen, transformiert werden [137]. Eine standardisierte Sprache für Stylesheets ist XSLT⁵. Stylesheets für die Transformation von Simulationsergebnissen in Tabellendateien, SQL⁶ und TCL⁷ Skript Anweisungen sind Bestandteil des entwickelten Softwarepaketes. In Abb. 9.5 ist die Transformation von Ausgabedaten der Simulation in Tabellendokumente für die Nachbearbeitung und Visualisierung Bestandteil des dargestellten Datenflusses.

9.4 Interaktive Simulation

Für die interaktive Verwendung der Simulationsbibliothek im kommerziellen und universitären Umfeld wurde die Microsoft Windows basierte Applikation „WinSimEtch“, mit graphischer Benutzeroberfläche entwickelt.

Die WinSimEtch-Anwendung verwendet die SimLib-Simulationsbibliothek und ge-

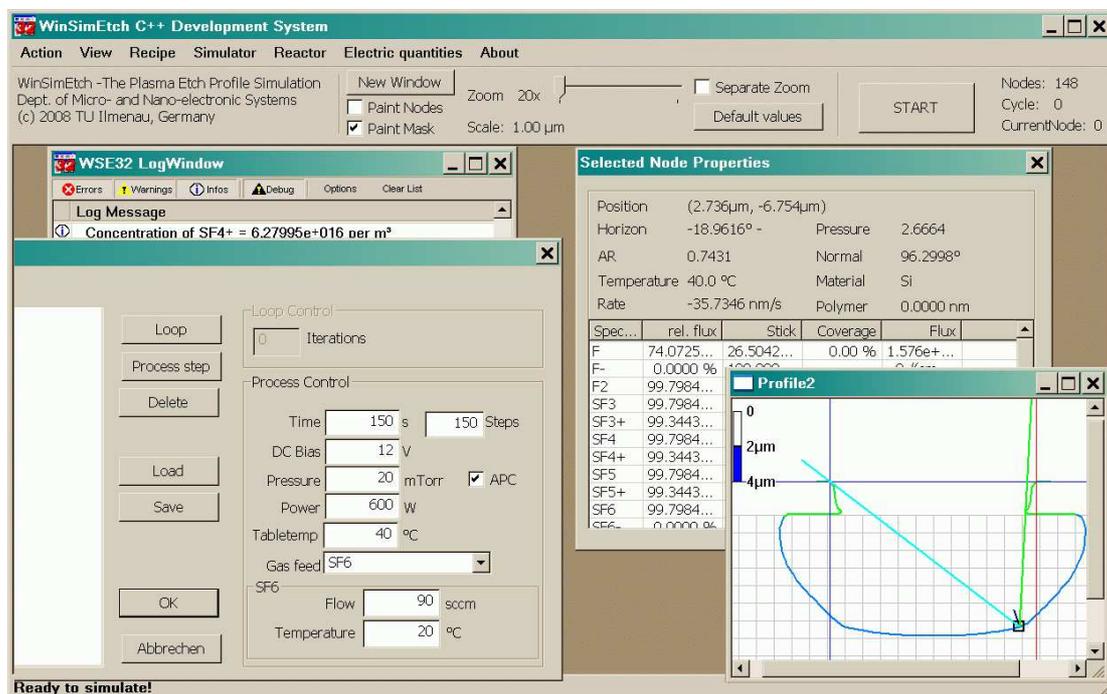


Abbildung 9.4 Graphische Oberfläche der WinSimEtch Anwendung

⁵XSLT (engl. extensible style sheet language for transformation) Erweiterbare Stylesheet Sprache für Transformationen

⁶SQL (engl. standard query language) Anfragesprache für relationale Datenbanksysteme

⁷TCL (engl. tool command language) Skriptsprache mit erweiterbarer Funktionalität

stattet es, interaktiv Simulationen zu erstellen, abzuarbeiten und die Ergebnisse zu visualisieren. Alle Funktionen der Simulationsbibliothek sind über Dialogfelder und graphische Steuerelemente zugreifbar. In Abb. 9.4 ist die graphische Oberfläche der WinSimEtch-Anwendung während einer Simulation abgebildet.

Während einer Simulation können die simulierten physikalischen Größen an der Ätzoberfläche und die Eigenschaften des Plasmas untersucht werden. Insbesondere diese „Echtzeitmessungen“ von Größen, die in realen Experimenten nicht oder nur schwer zugänglich sind, sind einer der wichtigsten Vorteile von Simulationen gegenüber Experimenten.

Die WinSimEtch-Anwendung realisiert außerdem die Verwaltung von Simulationsdaten in Dateien. Vollständige Simulationen, sowie einzelne Ätzrezepte, initiale Konfigurationen von Proben, Parametrisierungen von Plasma- und Oberflächenmodellen können im XML-Format gespeichert und geladen werden. Die separate Speicherung einzelner Simulationsteile gestattet deren Wiederverwendung in anderen Simulationen und die Weitergabe an andere Nutzer.

Das Laden und die Konfiguration von Modellen, die als Plug-Ins vorliegen (vgl. Abschn. 9.3), wird durch Dialogfelder ermöglicht.

9.5 Skriptsimulation

Neben den vielen Vorteilen, die eine interaktive Simulation hat, bestehen auch eine Reihe von Nachteilen.

- Simulationen müssen durch Benutzereingriff erstellt, geladen, ausgeführt und die Resultate gespeichert werden.
- Simulationsreihen und Prozeduren müssen durch den Benutzer exakt dokumentiert werden, um nachvollziehbar zu sein.
- Änderungen an Modellen oder Simulationsprozeduren erfordern manuelle Reevaluation von Simulationen

Vielfach benötigen einzelne Simulationen sehr viel Zeit oder es müssen sehr viele Simulationen mit unterschiedlichen Konfigurationen durchgeführt werden. Während im ersten Fall die Interaktivität während der Simulation nicht benötigt wird, wäre

es im zweiten Fall sehr aufwändig, viele Simulationen einzeln und interaktiv durchzuführen.

Um diese Nachteile zu beseitigen, wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Programmiersprache für die Simulation mit der SimLib-Bibliothek entwickelt, die auf der in Forschung und Industrie weit verbreiteten Tool Command Language (TCL) basiert. Mithilfe eines TCL-Interpreters, der zusätzliche Befehle zur Definition, Ausführung und Analyse von Simulationen enthält, können nahezu beliebig komplexe Programme für die Simulation von Plasmaätzprozessen abgearbeitet werden. In Quelltext 9.2 ist der Ausschnitt eines Skriptes zur Simulation eines Ätzrezeptes gelistet. Darin wird ein Ätzrezept mit verschiedenen Ätz- und Depositionszeiten wiederholt ausgeführt und bei jedem Wechsel des Prozessgases eine graphische Auswertung generiert.

```
# loop over time parameters
foreach etctime { 5 20 } {
  foreach depotime { 10 15 20 } {
    set simul_no 0
    set outputfile "${title}_${etctime}_${depotime}_${maskwd}"

    # define sample description to load
    set mask "../mask/${maskwd}.xml"
    set tSample [load sample $mask]
    set tRecipe [GC_recipe $etctime $depotime]
    set tReactor [ReactorIlmenau]

    # execute simulation
    puts "starting simulation_${title}"
    run -reactor $tReactor -recipe $tRecipe \
        -sample $tSample -ongasphase { plotProfile } \
        -onupdate {puts -newline "."}
  }
}
```

Quelltext 9.2 *Skriptausschnitt zur Simulation über Parameterbereiche der Depositions- und Ätzzeit*

Die Ergebnisse solcher Skriptsimulationen können in Dateien oder relationalen Datenbanken gespeichert oder direkt im Skript oder durch andere wissenschaftliche Softwarepakete ausgewertet werden. In Abb.9.5 ist die Verkettung von Simulationsinterpreter mit verschiedenen Softwarepaketen schematisch dargestellt. Der Interpreter liefert die Ergebnisse der Simulationen in Form von XML-Daten, die in

Dateien zwischengespeichert oder direkt an einen XSLT-Interpreter weitergeleitet werden. Dieser führt die Transformation der Daten mit Hilfe eines Stylesheets in ein geeignetes Datenformat des jeweiligen Softwarepaketes durch (vgl. Abschn. 9.3.1). Beispiele für solche Stylesheets wurden im Rahmen dieser Arbeit erstellt und sind im Softwarepaket enthalten. Die Steuerung von Software zur Visualisierung oder Aufbereitung von Daten kann ebenfalls durch das Simulationsskript erfolgen.

Das Erstellen von Skripten für umfangreiche Simulationen erscheint auf den ersten

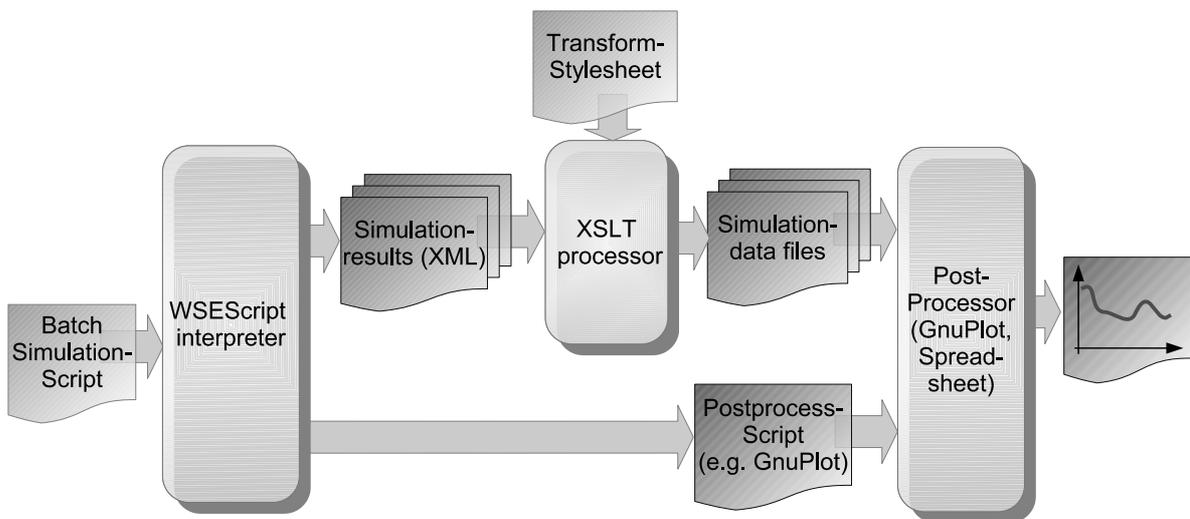


Abbildung 9.5 Verkettung von Simulationssoftware und Softwarepaketen zur Datenauswertung über XML. Die Simulationen werden durch ein Skript definiert und abgearbeitet. Die Ergebnisse daraus liegen im XML Format vor. Nach anwenden der Transformation, wie sie im XSLT Stylesheet festgelegt wurde, dienen die Daten als Eingaben für die Software zur Auswertung. Die Steuerung der Software zur Auswertung erfolgt durch Anweisungen, die vom Skript bei der Ausführung der Simulationen generiert werden.

Blick arbeitsintensiv und erfordert in gewissem Umfang Programmierkenntnisse des Anwenders. Dem gegenüber stehen die vielen Vorteile dieser Methode der Simulation

- umfangreiche Simulationen können ohne Benutzereingriff vollautomatisch durchgeführt werden.
- Das Skript ist gleichzeitig vollständige Dokumentation der durchgeführten Simulationen, weil es alle relevanten Parameter definiert. Zusätzlich kann Dokumentation z. B. in Form von Parametertabellen automatisch erzeugt werden.

- Simulationen sind jederzeit und vollautomatisch durch Ausführung des Skriptes wiederholbar.
- Bibliotheken stellen auf effektive Weise reparametrisierbare Modelle und Simulationsprozeduren zur Verfügung.
- Die Kopplung und Steuerung nachfolgender Softwareapplikationen ist innerhalb des Skriptes realisierbar.

9.5.1 Datenbanken

Die Verwaltung großer Datenmengen in Einzeldateien erfordert viel Sorgfalt des Nutzers bei der Verwaltung von Dateien und ist fehleranfällig in Bezug auf das Wiederfinden von Informationen sowie unbeabsichtigtes Ändern oder Löschen. Auch der Zugriff mehrerer Nutzer auf gleiche Simulationsdateien und der Schutz vor unberechtigtem Zugriff ist ohne geeignete Schutzmaßnahmen problematisch.

Diese Nachteile können durch die Speicherung der Simulationsdaten in (relationalen) Datenbanken aufgehoben werden.

Das Speichern von Daten hat viele Vorteile gegenüber lokalen oder auf Netzwerkservern befindlichen Dateien. Datenbanken besitzen eine explizite Struktur der gespeicherten Daten und gestatten deshalb Operationen wie Suchen, Filtern, Sortieren und Reorganisation. Transaktionen auf Datenbanken gestatten den gleichzeitigen Zugriff vieler Benutzer, ohne die Datenintegrität zu verletzen. Durch die Bereitstellung von Programmierschnittstellen (API) können Datenbanken in beliebige Anwendungen eingebunden werden.

Eine relationale Datenbank ist durch ein so genanntes Schema definiert, welches Tabellen und ihre Beziehungen untereinander sowie Beschränkungen von Wertebereichen und Datentypen formal beschreibt. Daten werden in den Tabellenzeilen gespeichert, die auch Records genannt werden. Die Administration, das Management, das Laden und Speichern von Daten wird im Allgemeinen mit Hilfe der SQL Sprache durchgeführt.

Weil die im XML-Format vorliegenden Daten der Simulationsbibliothek hierarchisch in Form von Elementen mit Attributen, die wiederum Elemente enthalten können, organisiert sind, ist eine eindeutige Abbildung auf die tabellarische Struktur der Datenbank notwendig [138]. Zur Anbindung einer relationalen Datenbank mit SQL, wurden in dieser Arbeit die folgenden Komponenten entwickelt

- Das Datenbankschema zur Festlegung der Struktur der Datenbank in SQL,
- ein Stylesheet in XSLT zur Transformation von XML-Ausgabedaten in SQL Kommandos,
- ein exemplarisches Stylesheet zur Transformation der Datenbankausgaben in XML.

In Abb.9.6 ist die Anbindung einer relationalen Datenbank an die Simulationsbibliothek schematisch dargestellt. Der Skriptinterpreter wurde um die entsprechenden Funktionen zum Laden und Speichern der Simulationsdaten erweitert.

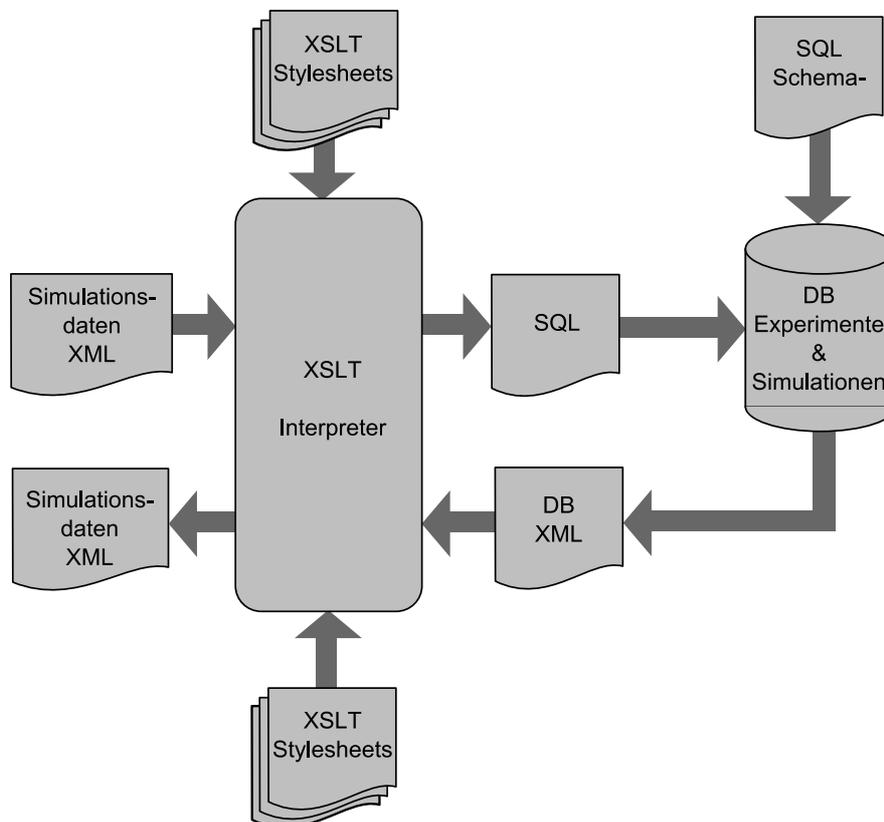


Abbildung 9.6 Datenfluss der Speicherung und Extraktion von Simulationsdaten in einer relationalen Datenbank. Die Transformation der Simulationsdaten in SQL und die Rückgewinnung und Reformatierung der Daten wird durch Befehle im Skriptinterpreter ausgeführt. Die Datenbank kann sich auf einem entfernt gelegenen Rechner im Netzwerk befinden und durch andere Nutzer gleichzeitig verwendet werden.

Kapitel 10

Experiment und Simulation

Die Korrektheit und die Grenzen der Anwendbarkeit der entwickelten Verfahren zum Transport von neutralen und geladenen Teilchen innerhalb geätzter Strukturen lässt sich nur durch einen Vergleich realer Experimente und Simulationen überprüfen. Allerdings ist die Verteilung der Flüsse von neutralen und ionisierten Spezies an der Oberfläche im Inneren von geätzten Strukturen nicht direkt messbar. Aus der Messung von Ätztiefen¹ und der Form des Querschnitts geätzter Profile lassen sich jedoch indirekt Rückschlüsse auf die Richtigkeit der entwickelten Modelle ziehen. Es wurde im Rahmen dieser Arbeit zwei große Serien von Ätz- und Depositionsexperimenten an einer ICP-ASE Anlage der Firma STS am Zentrum für Mikro- und Nanotechnologien (ZMN) der TU Ilmenau sowie an einem Prototyp einer neuen ICP Anlage der Firma Oxford Instruments Plasma Technologies (OIPT) in Yatton (GB), durchgeführt.

10.1 Ätzexperimente und -simulationen

Die entwickelten Transportmodelle für neutrale Spezies und Ionen wurden zunächst durch umfangreiche Experimente zum Ätzen langer gerader Gräben in Silizium in einem SF₆-Plasma verifiziert und deren Parameter an die jeweiligen Ätzreaktoren angepasst.

¹Die geätzte Tiefe eines Profils ergibt sich aus dem Produkt der mittleren Ätzrate und der -dauer.

10.1.1 Oberflächenmodelle

Für die Topografiesimulation von geätzten Strukturen sind neben den in dieser Arbeit primär entwickelten Transportmodellen für neutrale und ionisierte Spezies Oberflächenreaktionsmodelle nötig, die die lokalen Ätzzraten aus den berechneten Flussdichten und den physikalischen Zustandsgrößen, wie z.B. Druck und Temperatur an der Substratoberfläche, berechnen.

Zum Ätzen wurden Oberflächenreaktionsmodelle für das ionenunterstützte Ätzen von Silizium und von Photolack in einem SF_6 -Plasma im Rahmen des NanoPlasma-Projektes entwickelt.

Ionenunterstütztes Ätzen von Silizium im SF_6 Plasma

Unabhängig voneinander wurden zwei Modelle zum Ätzen von Silizium entwickelt. Das erste hier vorgestellte wurde durch die Projektgruppe am IMEL Demokritos, Athen² entwickelt.

Das Modell entspricht dem von Langmuir aufgestellten Reaktionstyp (vgl. Abschn. 2.3.6) und berücksichtigt die Bedeckung Θ_F der Oberfläche mit Fluor. Im Modell lautet die Gleichgewichtsbedingung für einen Ort an der Oberfläche

$$S_F(1 - \Theta_F)\Phi_F - 2\beta_F\Theta_F\Phi_{ion} = 0, \quad (10.1)$$

wobei Φ_F und Φ_{ion} die Flüsse von Fluor-Radikalen und positiv geladenen Ionen bezeichnen. S_F bezeichnet in diesem Modell die Haftwahrscheinlichkeit von Fluor auf unbedecktem Silizium und β_F ist der energieabhängige Koeffizient des ionenunterstützten Ätzanteils. Die Ätzrate ist proportional der Summe aus chemischer und ionenunterstützter Ätzrate auf der Fluorbedeckten Substratoberfläche

$$ER = \frac{k}{\rho_{Si}}\Phi_F + \frac{\beta_F}{\rho_{Si}}\Theta_F\Phi_{Ion} \quad (10.2)$$

$$\beta_F = \begin{cases} b_{F,0}\sqrt{E} - \sqrt{E_{th}}, & E \geq E_{th} \\ 0, & E < E_{th}. \end{cases} \quad (10.3)$$

Darin ist E die mittlere kinetische Energie der Ionen und E_{th} der Schwellenwert ab dem ein ionenunterstütztes Ätzen stattfindet.

²IMEL Demokritos, Athen - Institute of Microelectronics, National Center for Scientific Research (NCSR) „Demokritos“, Athen, Griechenland

Der effektive Haftwahrscheinlichkeit von Fluor auf (bedecktem) Silizium wird durch das Modell berechnet zu

$$S_{E,F} = S_F(1 - \theta_F) + 4k. \quad (10.4)$$

Die Werte der Parameter und eine kurze Erläuterung ihrer Bedeutung sind in Tabelle 10.1 zusammengefasst. Die Koeffizienten des Modells wurden durch die Pro-

Symbol	Bedeutung	Wert
S_F	Haftwahrscheinlichkeit von Fluor auf unbedecktem Silizium	0,2
k	Chemischer Ätzzratenkoeffizient	0,1
$b_{F,0}$	ionenunterstützter Ätzzratenkoeffizient	$7 (\text{eV}^{-\frac{1}{2}})$
E_{th}	Schwellwert der Energie für ionenunterstütztes Ätzen	4 eV
ρ_{Si}	atomare Dichte von Silizium	$5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$

Tabelle 10.1 *Koeffizienten und ihre Bedeutung im Ätzmodell*

jektgruppe am IMEL Demokritos Institut, so berechnet, dass sie mit den experimentell ermittelten Werten der Ätzrate im verwendeten ICP-Reaktor (ALCATEL MET ICP-Reaktor der Demokritos Plasma Gruppe) bestmöglich übereinstimmen. Insbesondere wurden dabei die Fluorkonzentration im Plasma mithilfe kalibrierter Actinometrie, die Ionenflussdichte mit einer Ionenflussprobe von Scientific Instruments und die Si-Ätzrate durch ein Profilometer gemessen. Die Messungen wurden bei verschiedenen Drücken (3-11 Pa), ICP-Leistungen (700-1800 W) und DC-Bias (0-100 V) durchgeführt [139].

Zum Vergleich wurde ein weiteres Modell – im folgenden Ilmenauer Modell genannt – im Rahmen dieser Arbeit entwickelt, welches auf den von Flamm in [74] getroffenen Überlegungen basiert. Ausgehend von der Annahme, dass Fluor der dominierende chemische Reaktionspartner und in Verbindung mit dem Ionenbombardement auch hauptsächlich am ionenunterstützten Ätzzvorgang beteiligt ist, erhält man für die Massenbilanz

$$\Phi_{F,imp} = (1 - S_F)\Phi_{F,imp} + P_{chem}\Phi_{F,imp} + ER_{ionenh}\frac{\rho_{Si}}{m_{Si}}b. \quad (10.5)$$

Darin wird der Fluss von einwirkendem reaktiven Fluor aufgeteilt in nicht reagierende Anteile, rein chemisch reaktives Fluor und den Anteil von Fluor, der bei der

ionenunterstützten Ätzung verbraucht wird.

Durch Umstellen von Gl. (10.5) erhält man für die effektive Haftwahrscheinlichkeit³

$$S_F = P_{chem} + \frac{1}{\Phi_{F,imp}} ER_{ionenh} \frac{\rho_{Si}}{m_{Si}} b. \quad (10.6)$$

Die chemische Ätzrate ergibt sich direkt aus der Menge einströmenden Fluors und der chemischen Reaktionswahrscheinlichkeit zu

$$ER_{chem} = \frac{m_{Si}}{a \rho_{Si}} P_{chem} \Phi_{F,imp}. \quad (10.7)$$

Der Koeffizient a definiert die mittlere Anzahl von Fluoratomen, die im Reaktionsprodukt SiF_x an ein Siliziumatom gebunden werden, bevor es die Oberfläche verlässt. Eingesetzt in Gl. (10.6) erhält man

$$S_F = P_{chem} \left(1 - \frac{b ER_{ionenh}}{a ER_{chem}} \right). \quad (10.8)$$

Darin sind a und b Verbrauchsfaktoren, die experimentell zu $a = 4$ und $b = 2, 5$ ermittelt wurden [4]. Die ionenunterstützte Ätzrate ist aufgrund der Überlegungen in Abschn. 4.3 proportional zum Grad der Bedeckung der Oberfläche mit Fluor Θ

$$ER_{ionenh} = \Theta k_{ion} \Phi_{ion}. \quad (10.9)$$

Nimmt man weiterhin eine Langmuir-Adsorption der Oberfläche mit Fluor an (vgl. Abschn. 2.3.6), so ist die effektive Haftwahrscheinlichkeit

$$S_F = S_F^0 (1 - \Theta). \quad (10.10)$$

Die Bedeckung der Oberfläche abhängig vom Fluor- und Ionenfluss erhält man durch Einsetzen von Gl. (10.10) in Gl. (10.5) zu

$$\Theta = \frac{(S_F^0 - P_{chem}) \Phi_F}{bk_{ion} \frac{\rho_{Si}}{m_{Si}} \Phi_{ion} + S_F^0 \Phi_F}. \quad (10.11)$$

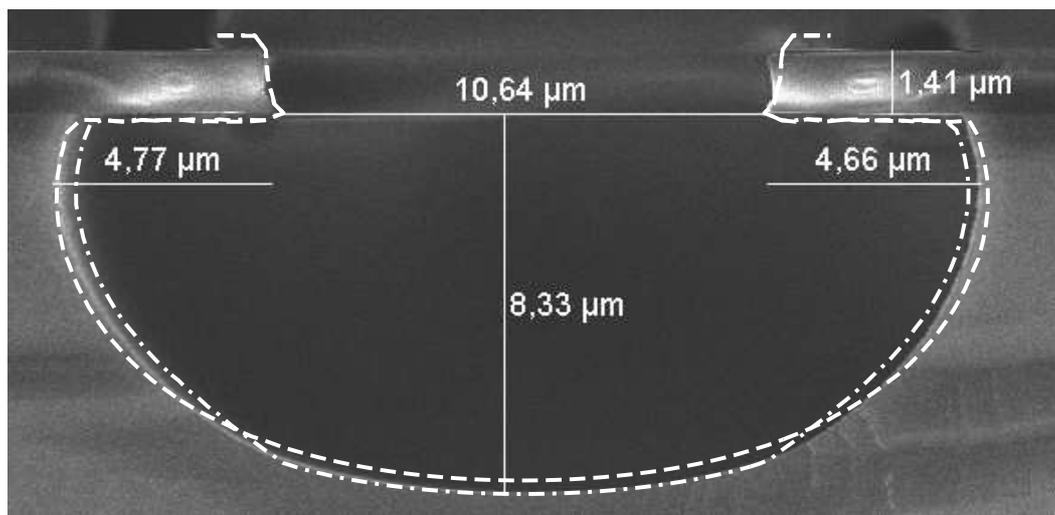
S_F^0 ist darin die Haftwahrscheinlichkeit von Fluor auf unbedecktem Silizium und hat nach [140] einen Wert von 0,2.

Somit hängen sowohl die effektive Haftwahrscheinlichkeit S_F als auch der Bedeckungsgrad Θ vom Fluor- und Ionenfluss ab.

³ S_F ist der Anteil des Fluors, der an der Oberfläche als Bedeckung anhaftend verbleibt oder chemisch reagiert.

Da der absolute Fluß von Fluor und Ionen auf der Oberfläche nur schwer messbar und in der Simulation durch Näherungen und Annahmen in Plasma- und Transportmodellen fehlerbehaftet⁴ ist, kann das vorgestellte Modell die absoluten Ätzzraten nur unzureichend genau berechnen. Um die absoluten Werte der Flüsse aus der Rechnung zu eliminieren, wurde das Modell in [4; 141] modifiziert. Anstelle der absoluten Flüsse und Bedeckungen werden diese normalisiert, d. h. auf den Fluss und die Bedeckung der nicht abgeschatteten Oberfläche unter Standardbedingungen bezogen. Eine ausführliche Herleitung des Modells findet sich in [4]. Die Haftwahrscheinlichkeit von Fluor auf unbedecktem Silizium verbleibt im Modell als freier Parameter und wurde zu $P_{chem} = 0,1$ ermittelt, was sehr gut mit den gemessenen Standardätzraten und den Ergebnissen in [142] übereinstimmt. In Abb. 10.1 wurden die Simulationen beider Modelle mit einem durchgeführten Ätzexperiment mit gleichen Parametern durchgeführt.

Ätzung von Si durch SF_6 Plasma (60s/60, DC-Bias=70 V, p=25 mTorr, P=1000 W, f(SF_6)=50 sccm)



simulierte Oberflächenreaktionsmodelle: TU Ilmenau Modell - - - -
IMEL Demokritos - - - -

Abbildung 10.1 Überlagerung von Simulationen mit dem Ätzmodell von IMEL Demokritos und dem TU Ilmenau Modell. Beide Modelle stimmen in den erreichten Ätzzraten sowohl vertikal als auch lateral im wesentlichen mit dem Experiment überein. Wegen der Berücksichtigung der tatsächlichen Fluor- und Ionenflüsse bei der Bedeckung der Oberfläche bildet das Ilmenauer Modell die Form des Querschnittes realistischer im Vergleich zum Modell der Demokritos-Gruppe ab.

⁴Der Fehler bezieht sich auf den Absolutwert der Konzentrationen und Flüsse, nicht jedoch auf das Verhältnis der Spezies.

Empirisches Ätzmodell

Beim Ätzen von Strukturen findet neben dem Ätzen des eigentlichen Substratmaterials auch eine Ätzung des Maskenmaterials statt. Das Verhältnis der Ätzraten von Masken- und Substratmaterial wird als Selektivität bezeichnet.

Zur Untersuchung von Transporteffekten in geätzten Strukturen ist es von Bedeutung, die Ätzrate – und damit den Verbrauch an reaktiven Spezies – sowie die effektive Haftwahrscheinlichkeit des Maskenmaterials zu kennen.

Für den als Maskenmaterial verwendeten Photolack wurde ein einfaches temperaturabhängiges lineares Modell der Ätzrate entwickelt:

$$ER = \sum_{i \in \text{Spezies}} k(T)\Phi_i. \quad (10.12)$$

Die temperaturabhängigen Koeffizienten $k(T)$ wurden durch Ätzexperimente ermittelt und sind tabellarisch im Modell enthalten. Wegen der viel geringeren Ätzrate von Maskenmaterial gegenüber Silizium ist die Haftwahrscheinlichkeit gering und wird vereinfacht als konstant angenommen.

10.1.2 Prozessparameter

Zur Ermittlung der freien Modellparameter und der Bestimmung von Korrekturfaktoren zur Simulation der korrekten Ätztiefen und Profilformen wurden Experimente durchgeführt, die zunächst den rein chemisch wirksamen Anteil der Plasmaspezies am Ätzprozess untersuchen sollten. Der Einfluss von Ionen wurde minimiert, indem der RF-Generator, der im Wesentlichen zur Ausbildung des Potentialunterschieds von Plasma und Probe dient, ausgeschaltet wurde. Für verschiedene Gasflüsse und Drücke wurden zahlreiche Experimente mit den in Tabelle 10.2 aufgeführten Prozessparametern durchgeführt. In einer zweiten Gruppe von Experimenten wurde die Leistung des RF-Generators so eingestellt, dass sich ein DC-Biaswert von bis zu 80 V einstellte. Unter diesen Bedingungen wurden unter Beibehaltung der übrigen Prozessparameter Experimente durchgeführt, die den Einfluss der beschleunigten Ionen auf die lokalen Ätzraten widerspiegeln.

10.1.3 Ätzraten

Nach Durchführung der Experimente an den Ätzreaktoren von Oxford Instruments und am ZMN Ilmenau wurden die Proben gespalten und im Rasterelektronenmi-

Prozessparameter	OIPT	TU Ilmenau
ICP-Leistung	1000 W	600 W
SF ₆ Gasfluss	25, 50 sccm	45, 90 sccm
Ar Gasfluss	1.25, 2.5 sccm	-
Druck	8. . . 25 mTorr	20,40 mTorr
Temperatur	20 °C	12. . . 40 °C
RF-Leistung	0. . . 35 W	0 W
Ätzdauer	60 s	90, 150, 180, 540 s
DC-Bias	0. . . 80 V	

Tabelle 10.2 *Parameter der Ätzexperimente an der ICP-Anlage bei Oxford Instruments und der ICP-Ätzanlage in Ilmenau. Das Argon wurde in geringen Mengen zugesetzt, um die Plasmadiagnostik bei den Ätzexperimenten durchführen zu können. Ausgewählte Kombinationen der angegebenen Ätzparameter wurden in Experimenten durchgeführt.*

kroskop vermessen. Die mittleren Ätzraten wurden durch Messung der erzielten Ätztiefen für verschiedene Maskenbreiten und an verschiedenen Positionen auf der Probe mithilfe der Ätzdauer errechnet.

Durch Vergleich verschiedener Experimente, bei denen jeweils ein Prozessparameter verändert wurde, wurde die Abhängigkeit der Ätzraten von den einzelnen Prozessparametern untersucht.

In Abb. 10.2 ist die Abhängigkeit der erzielten Ätzrate unter den in der Tabelle 10.2 gelisteten Ätzparameter für beide Reaktoren und abhängig von der Maskenöffnung dargestellt.⁵ In beiden Serien von Experimenten zeigt sich, dass die Ätzrate, wie im Kapitel 1 dargelegt wurde, stark vom Gasdruck im Reaktor abhängt. Die unterschiedlichen Ätzraten der Experimente sind auf die Unterschiede der beiden Reaktoren und die abweichenden Parameter der Ätzexperimente zurückzuführen.

Ein weiterer Parameter, der sich ganz entscheidend auf die Reaktion der Plasmaspezies mit der Probenoberfläche auswirkt, ist die Temperatur. Der Einfluss der Temperatur auf die Ätzrate ist jedoch wesentlich weniger stark ausgeprägt, als es eine Änderung des Druckes bewirkt. Mit der Anregung der Probenelektrode durch eine RF-Quelle wird eine negative Aufladung der Probe und die Ausbildung eines elektrischen Feldes zwischen Plasma und Probe hervorgerufen (vgl. Abschn. 1.2).

⁵Nicht alle Parameterkombinationen aus Tabelle 10.2 wurden experimentell durchgeführt.

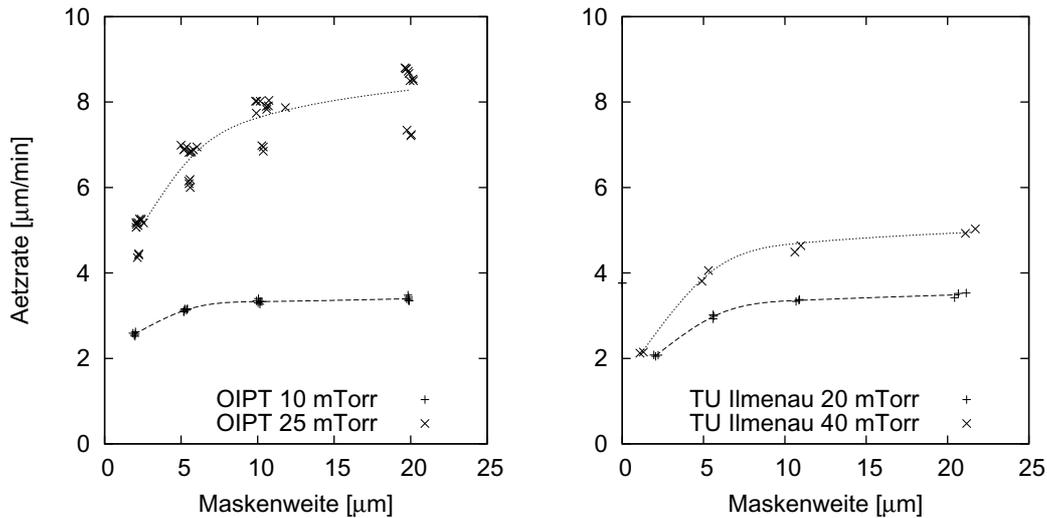


Abbildung 10.2 Druckabhängigkeit der Ätzrate bei abgeschalteter Elektrodenanregung ($RF\text{-Leistung} = 0\text{ W}$). Geätzt wurden lange gerade Gräben verschiedener Breite unter jeweils gleichen Bedingungen je Reaktor. Verändert wurde der Gasdruck im Reaktor. Durch photometrische Messung der Ätztiefen am REM wurden die mittleren Ätzraten an verschiedenen Punkten der Probe gemessen. Die Linien zeigen die ermittelte interpolierte mittlere Ätzrate. Aufgrund der Unterschiede der verwendeten Reaktoren und Ätzrezepte (insbesondere ICP-Leistung 1000/600 W) weichen die Ätzraten voneinander ab.

Durch die Beschleunigung der Ionen im elektrischen Feld steigt der ionenunterstützte Anteil an der Ätzrate. In Abb. 10.4 sind die berechneten Ätzraten für eine nicht angeregte und eine mit 35 W angeregte Probe in Abhängigkeit von der Maskenbreite dargestellt. Die durchgeführten Experimente dienen zunächst der Anpassung der Oberflächenmodelle zur Erzielung der experimentell bestimmten Ätzraten. Zu diesem Zweck wurden Skalierungsfaktoren für die berechneten Flussdichten für Fluor und Ionen in den Oberflächenmodellen eingeführt. In Abb. 10.1 ist der Querschnitt eines geätzten Profils und die korrespondierenden Simulationen dargestellt.

10.1.4 Reaktionskoeffizienten

Die Oberflächenmodelle zum Ätzen von Silizium und Maskenmaterial berechnen einen effektiven Verbrauchskoeffizienten, der dem Anteil des an der Oberfläche verbleibenden Flusses von Reaktanden entspricht. Der Verbrauchskoeffizient ist im Allgemeinen nicht konstant und hängt von der chemischen Reaktionswahrscheinlichkeit,

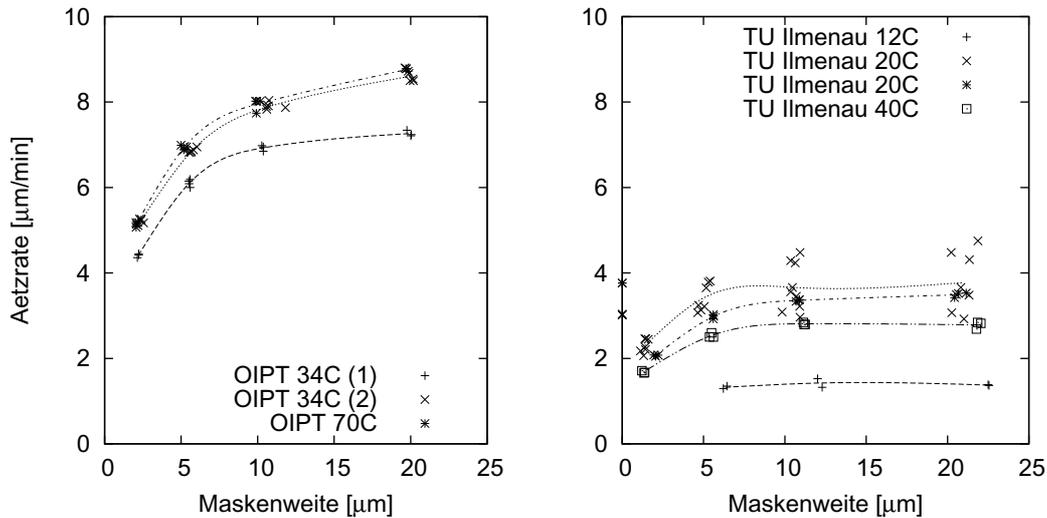


Abbildung 10.3 Temperaturabhängigkeit der Ätzrate bei abgeschalteter Elektrodenanregung ($RF\text{-Power} = 0\text{ W}$). Die Ätzbedingungen entsprechen denen in Abb. 10.2. Verändert wurde die Temperatur der Probe durch die Aufheizung oder Kühlung der Substratelektrode.

Die Ätzrate hängt im Vergleich zu Abb. 10.2 in weitaus geringerem Maße von der Temperatur ab und wird durch andere Einflüsse, wie z. B. den Zustand der Ätzkammer überlagert.

der Oberflächenbedeckung und anderen Faktoren ab (s. Abschn. 10.1.1).

Eine Veränderung der Verbrauchskoeffizienten hat Einfluss auf die lokalen Ätzraten innerhalb einer Struktur, da die Reflektivität an der Oberfläche und somit der Transport innerhalb einer Struktur maßgeblich davon abhängen.

Zur Bestimmung der Reaktionskoeffizienten wurden Simulationen mit verschiedenen Verbrauchskoeffizienten für Fluor und Ionen durchgeführt und mit Angaben aus der Literatur [17; 51; 142] verglichen. In Abb. 10.5 ist der Einfluss verschiedener Verbrauchskoeffizienten von Fluor auf Silizium und dem Maskenmaterial verglichen worden.

10.2 Vergleich von Simulation und Experiment

Zur Bewertung und dem Vergleich mit Experimenten wurde das Verhältnis aus mittlerer Unterätzung und Tiefe des geätzten Profils als Maß für die Anisotropie verwendet. In Abb. 10.8 ist der Vergleich des Verhältnisses für Simulationen

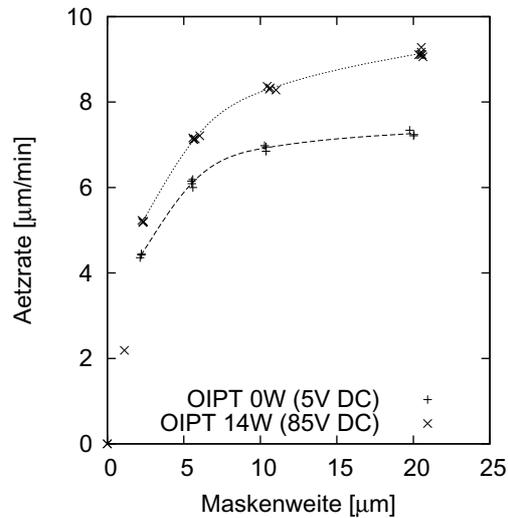


Abbildung 10.4 Veränderung der Ätzrate bei ab- und eingeschalteter Elektrodenanregung ($RF\text{-Power} = 0/35\text{ W}$). Die Ätzbedingungen entsprechen denen in Abb. 10.2. Durch Anregung der Probenelektrode bildet sich eine DC-Bias-Spannung von -85 V aus. Die gesteigerte Ätzrate ist auf den ionenunterstützten Anteil der Ätzrate zurückzuführen.

und Experimenten abhängig von der Maskenbreite und bei verschiedenen DC-Bias Werten dargestellt. Die experimentellen Daten zeigen – wie erwartet – eine größere Unterätzung bei kleinen DC-Bias-Werten. Dieser Trend wird auch durch die Simulationen korrekt reproduziert. Für die Experimente mit -70 V DC-Bias sind die simulierten Profile in sehr guter Übereinstimmung mit den Experimenten. Für die Experimente mit -40 V DC-Bias liefern die Simulationen einen etwas größeren Wert der Unterätzung für die kleinen Strukturen. Das Verhältnis aus Unterätzung und Ätztiefe vergrößert sich von kleinen Maskenbreiten (hohes Aspektverhältnis) hin zu größeren Strukturen und erreicht einen nahezu konstanten Wert für größere Maskenöffnungen mit geringem Aspektverhältnis. In kleinen Strukturen spielen Transporteffekte, wie die Abschattung des Flusses von Reaktanden und der steilere Einfallswinkel von Ionen auf die Bodenfläche des Profils, eine weit größere Rolle als für größere Strukturen mit geringem Aspektverhältnis (vgl. Abschn. 3.4). Bei abgeschalteter Anregung der Probe ($\approx 0\text{ V}$ DC-Bias) liefert die Simulation bei kleinen Strukturen etwas zu große Werte für die Unterätzung und bei großen Strukturen zu kleine Werte. Für diesen speziellen Fall, in dem die mittlere Ionenenergie unter den Schwellwert E_{th} fällt, hängt die Ätzrate nur vom Einfluss der neutralen Spezies ab.

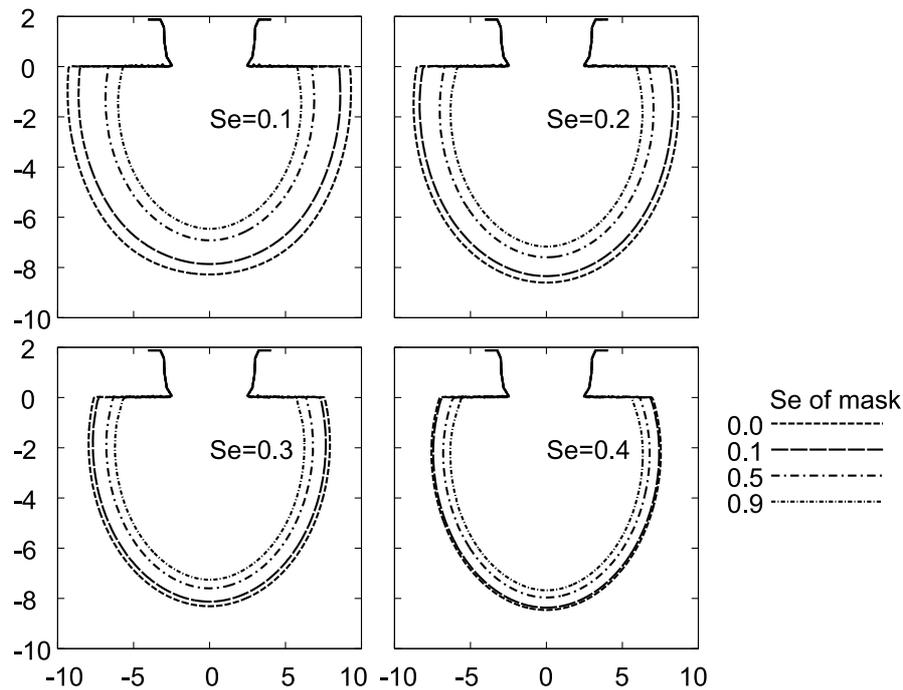


Abbildung 10.5 *Simulierte Auswirkung der effektiven Verbrauchskoeffizienten von Fluor auf Silizium und Maskenmaterial auf die Profilform. (veröffentlicht MNE 2008 [110])*

Das Floatingpotential der Probe wird im verwendeten Modell vernachlässigt [143]. In Verbindung mit den Ätzexperimenten wurden Konzentrationen von Plasmaspezies gemessen und die Resultate mit den Ergebnissen der Simulation des Plasmamodelles verglichen (Abb. 10.6). Mithilfe der optischen Emissionsspektrographie (OES) wurde die Konzentration der geladenen und neutralen Spezies gemessen und die relativen Konzentrationen bezüglich des eingeleiteten Argons berechnet. Die Messwerte wurden mit den Ausgaben der Plasmasimulation verglichen und entsprechende Anpassungen der Parameter vorgenommen.⁶ Durch die gemeinsame Integration der Plasma-, Transport- und Oberflächenreaktionsmodelle wurde eine gute Korrelation der plasmadiagnostischen Messungen und der simulierten Ätzrate gefunden (Abb. 10.7).

⁶Die Plasmamodelle wurden durch die Gruppe am IMEL Demokritos erstellt und verifiziert. Die OES Messungen dienen zur Kontrolle.

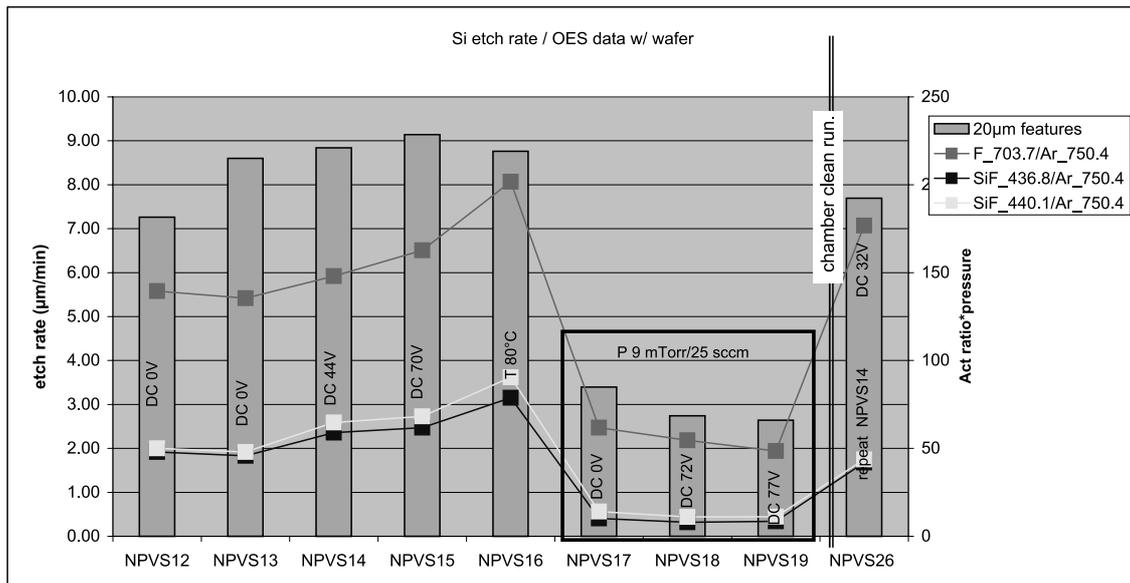


Abbildung 10.6 Konzentrationen der Plasmaspezies, gewonnen mithilfe der optischen Emissionsspektrographie, und zugehörige gemessene mittlere Ätzraten. Die Konzentrationen von Fluor und der Ätzprodukte SiF_x zeigen eine deutliche Korrelation mit der mittleren Ätzrate.

10.3 Deposition

Zum Ätzen von Strukturen mit hohen Aspektverhältnissen mit dem Gas-Chopping-Verfahren [144] ist die Passivierung der Seitenwände unumgänglich. Deshalb wurde für die Simulation ein kompletter Satz von Plasma- und Oberflächenreaktionsmodellen zur Deposition von Polymeren im C_4F_8 -Plasma in den Simulator integriert und verifiziert. Zur Verifikation von Transportprozessen in geätzten Strukturen eignen sich Depositionsexperimente außerdem, weil sich die Geometrie der Strukturen – außer bei sehr kleinen Strukturen oder sehr langen Depositionsdauern – während des Prozesses nur wenig ändert.

Im Rahmen der Entwicklung der Modelle und der Simulationssoftware wurden Depositionsexperimente am ICP-Reaktor von Oxford Instruments durchgeführt. Zur Deposition von Polymerfilmen wurden unstrukturierte sowie mit Gräben unterschiedlicher Breite und Ätztiefe vorstrukturierte Proben verwendet.

Zur Auswertung der Experimente wurden die Dicke der deponierten Polymerschicht mit einem Ellipsometer und Querschnitte der Proben im REM vermessen. In Abb. 10.9 ist der Querschnitt einer Deposition von Polymer in einem Grabenprofil und die zugehörige Simulation mit gleichen Parametereinstellungen dargestellt.

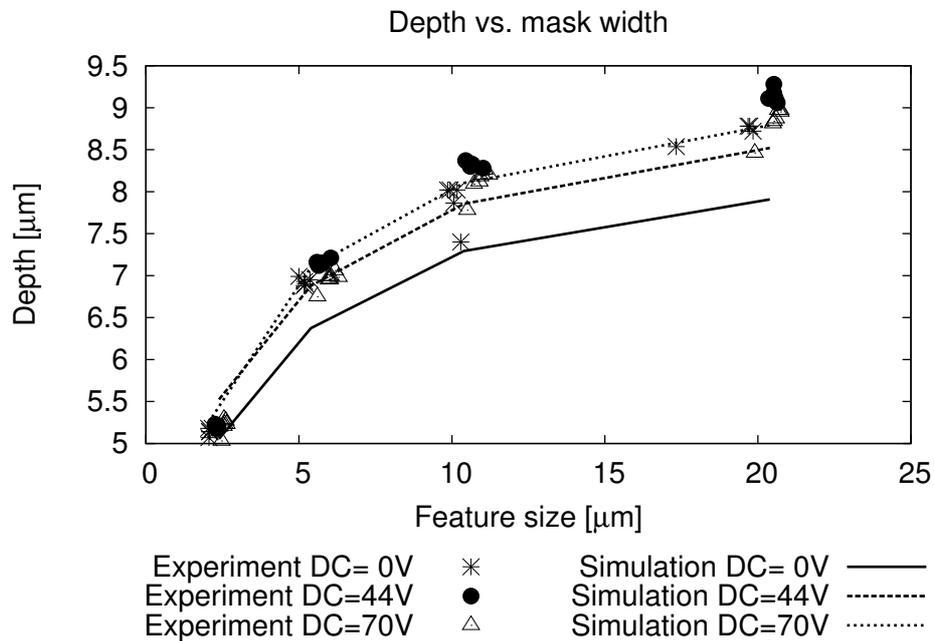


Abbildung 10.7 Vergleich der Ätztiefen von Experimenten und Simulationen mit kalibrierten Flussraten und Verbrauchskoeffizienten. Die simulierten Ätztiefen stimmen für verschiedene Ätzparameter sowohl für das chemisch dominierte ($RF\text{-Power} = 0\text{ W}$) als auch für das ionenunterstützte Ätzen gut mit den Experimenten überein.

10.3.1 Prozessparameter

Die Deposition von Polymerfilmen auf Siliziumoberflächen wurde im C_4F_8 Plasma durchgeführt. Die verwendeten Depositionsparameter sind in Tabelle 10.3 gelistet.

Als vorstrukturierte Proben wurden Gräben zwischen $2\ \mu\text{m}$ und $25\ \mu\text{m}$ mit $20 - 30\ \mu\text{m}$ Tiefe verwendet. Die Gräben wurden durch einen Gas-Chopping-Prozess erzeugt, bei dem feine horizontale Rillen an den nahezu senkrechten Seitenwänden der Gräben zurückbleiben [144].

10.3.2 Oberflächenreaktionsmodell

Ähnliche Experimente, die bereits 2003 unter vergleichbaren Bedingungen und vor der Entwicklung der Oberflächenreaktionsmodelle durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass die Deposition von Polymeren hauptsächlich vom Fluss der neutralen Monomer-Spezies abhängt [145]. Als Ergebnis der neutralen Transportmodelle in mikroskopischen Größenordnungen ist die Dicke des deponierten Polymerfilmes am

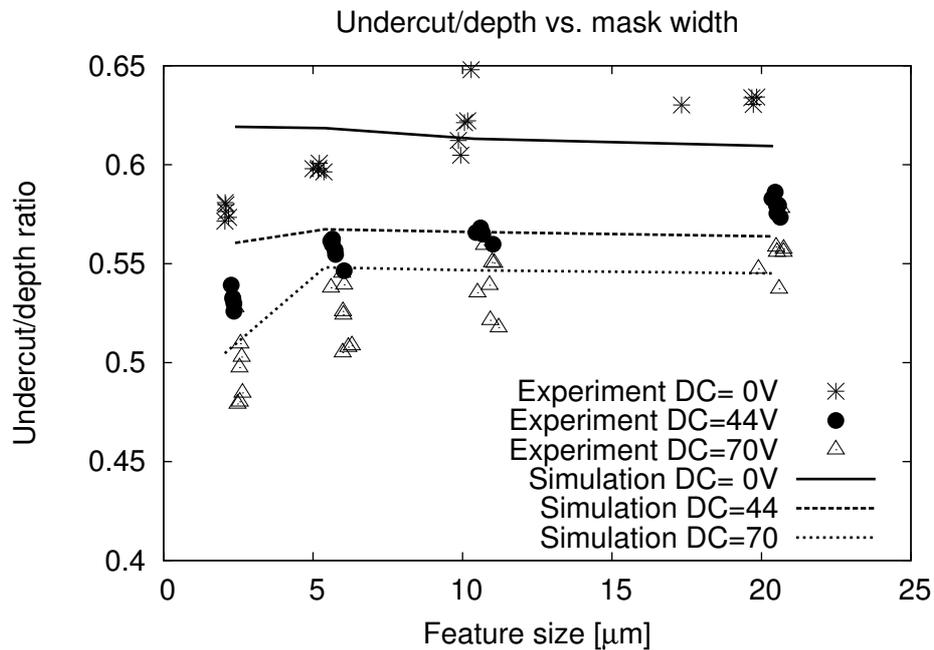


Abbildung 10.8 Das Verhältnis der Unterätzung zur Tiefe als Maß für die Anisotropie des Profils. Dargestellt sind die Messungen der Experimente und die Auswertung der Profilsimulationen aus Abb. 10.7. Die Simulationsergebnisse stimmen zufriedenstellend mit den Ätzexperimenten überein. Abweichungen ergeben sich aus den getroffenen Vereinfachungen der Oberflächenreaktionsmodelle (z. B. des Bedeckungsgrades) und im Plasmamodell.

Prozessparameter	Wertebereich
ICP-Leistung	1000 W
C ₄ F ₈ Gasfluss	50 sccm
Ar Gasfluss	2,5 sccm
Druck	25. . . 50 mTorr
Temperatur	20 °C
RF-Leistung	0, 5, 10, 18 W
DC-Bias	5. . . 20 V
Zeit	240, 360, 480 s

Tabelle 10.3 Parameter der Depositionsexperimente an der ICP-Anlage bei Oxford Instruments. Das Argon wurde in geringen Mengen zugesetzt um die Plasmadiagnostik bei den Ätzexperimenten durchführen zu können.

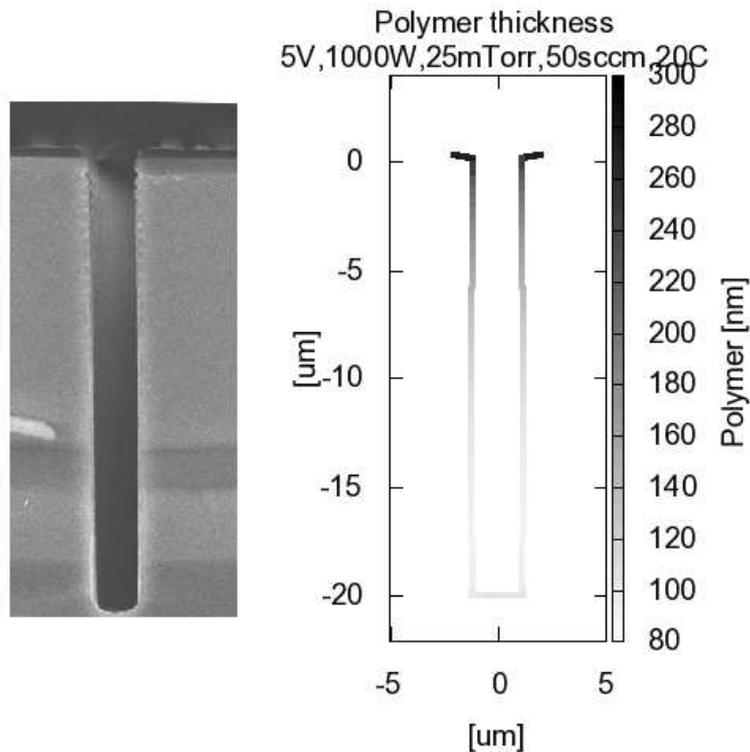


Abbildung 10.9 *Deposition von Polymer in vorstrukturiertem Graben (links) und zugehörige Simulation (rechts). Der Grauwert des simulierten Profils repräsentiert die Dicke des deponierten Polymerfilmes. Rechtes und linkes Teilbild sind im gleichen Maßstab dargestellt. (OIPT Prototyp ICP-Anlage, 1000 W ICP-Leistung, 25 mTorr, 50 sccm C₄F₈, 0 W RF-Leistung, 240 s Depositionszeit).*

größten auf der Oberseite der Probe und nimmt mit größer werdendem Aspektverhältnis an den Seitenwänden der Strukturen ab. Wegen der Orientierung der Bodenfläche eines Profils ist die Polymerdicke im Allgemeinen größer als die der Seitenwände, bei denen die Monomerpartikel in steilerem Winkel auf die Oberfläche auftreffen.

Zur Auswertung der Depositionsexperimente wurde die Dicke der deponierten Polymerschicht am Boden, in der Mitte der Seitenwand und an der Oberseite der Probe in der Nähe der Struktur gemessen.

In Abb. 10.11 ist das Depositionsverhältnis von Boden und Oberseite für eine Reihe von Experimenten dargestellt, die im Jahre 2003 durchgeführt wurden. Simulationen mit Oberflächenreaktionsmodellen, die nur den Monomerfluss zur Berechnung der Depositionsrate berücksichtigen, liefern Ergebnisse in guter Überein-

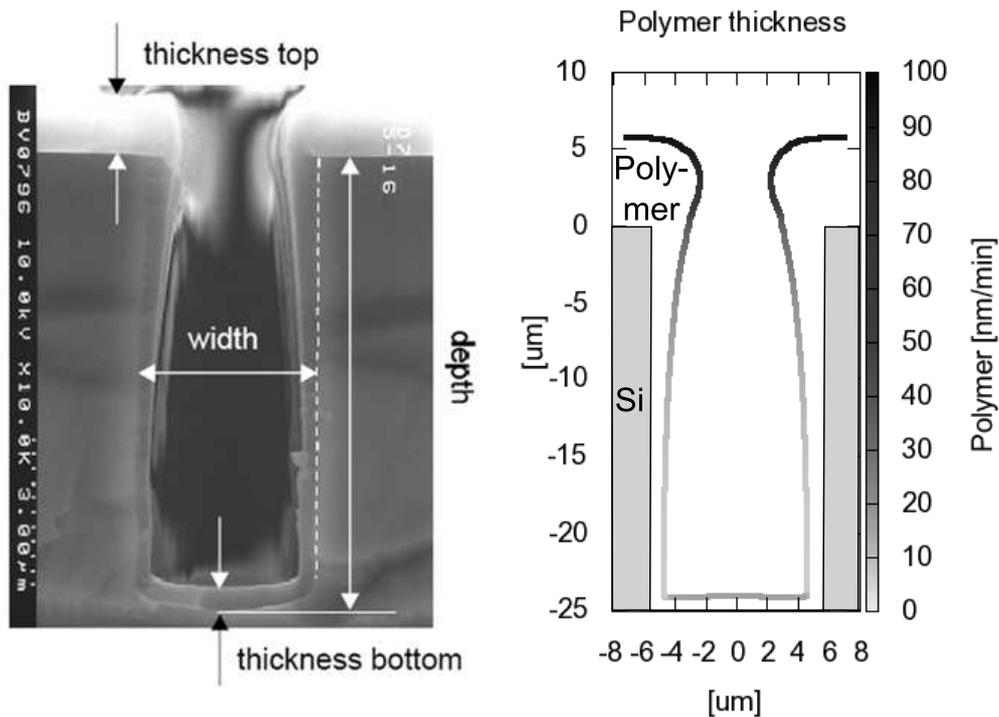


Abbildung 10.10 Langzeitdeposition von Polymer in Graben. Erwartungsgemäß ist die Polymerdicke auf der Oberseite der Probe am größten und sinkt an den Seitenwänden mit wachsendem Aspektverhältnis ab. Wegen der waagerechten Orientierung der Bodenfläche ist dort eine stärkere Deposition gegeben als an den unteren Seitenwänden. Der Vergleich von Experiment (links) und Simulation (rechts) zeigt eine gute Übereinstimmung der beobachteten Depositionsdicken mit den Vorhersagen des Depositionsmodells im Simulator. Deponiert wurde für 3600 s mit 600 W ICP-Leistung, 20 mTorr 85 sccm C_4F_8 , 0 W RF-Leistung. (Experiment durchgeführt von Dr. B. E. Volland, Univ. Kassel, 2003)

stimmung mit den Experimenten. Neuere Experimente, die am Prototyp-Reaktor von OIPT durchgeführt wurden, zeigten jedoch unerwartete Ergebnisse, bei denen eine größere Dicke der Polymerschicht am Boden von Strukturen mit geringem Aspektverhältnis im Vergleich zur Oberseite sowie eine ansteigende Dicke der Polymerschicht vom oberen zum unteren Rand der Seitenwände beobachtet wurde. Wie in Abb. 10.11 abgebildet, war die Dicke der Polymerschicht am Boden von Gräben mit sehr geringem Aspektverhältnis sogar größer als auf der flachen Oberseite der Probe. Ein Querschnitt eines solchen Experiments ist in Abb. 10.12 dargestellt. Die Oberflächenreaktionsmodelle, welche nur den Monomerfluss berücksichtigen, können

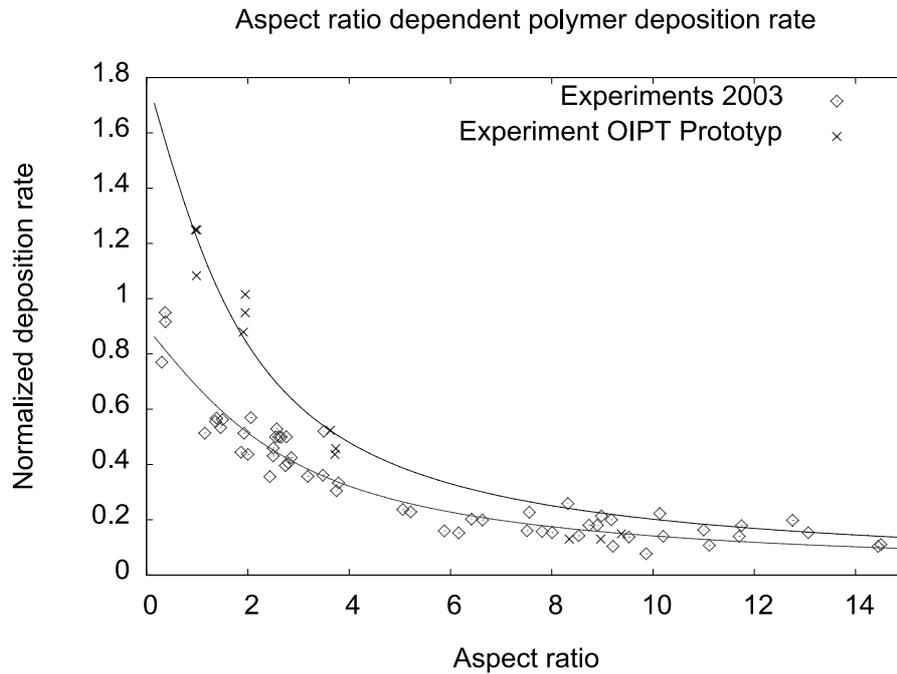


Abbildung 10.11 Verhältnis der Depositionsraten von Boden und der Oberseite in Abhängigkeit vom Aspektverhältnis der Strukturen

diese Beobachtungen nicht erklären. Die Simulation der Polymerdeposition wurde mit den exakt gleichen Parametern sowie einem empirischen Oberflächenreaktionsmodell durchgeführt. Die Depositionsraten in Abhängigkeit vom berechneten Fluss der Monomere CF_x und Ionen CF_y^+ wurde durch Messung der Depositionsrate an unstrukturierten Proben berechnet.

Zur Validierung der Plasma- und Transportmodelle wurden zusätzlich während der Experimente plasmadiagnostische Untersuchungen mit der OES durchgeführt. Die OES zeigte einen beträchtlichen Anteil von Fluorradikalen im C_4F_8 Plasma (Abb. 10.13). Fluor kann sowohl Silizium als auch einen bereits deponierten Polymerfilm ätzen.

Als Hypothese wurde der Effekt der größeren Ablagerung von Polymer am Boden und tieferen Seitenwänden im Vergleich mit der Oberseite der Probe auf die Verteilung und das Ätzen durch Fluor angenommen. Die Hypothese basiert auf den Beobachtungen von Motomura [146], nach dem das Ätzen von Silizium in C_5F_8 -Plasmen bei etwa 50 V DC-Spannung und für C_4F_8 -Plasmen bei geringeren Werten beginnt.

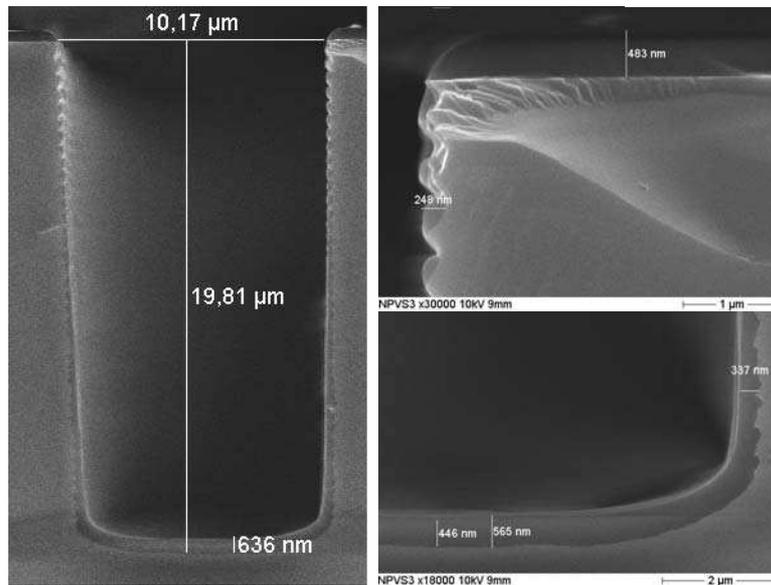


Abbildung 10.12 Querschnitt eines Profils (links) und vergrößerte Details (rechts) mit unerwarteter Verteilung der Polymerdicke. Das deponierte Polymer am Boden ist dicker als auf der Oberseite der Probe. Die Polymerdicke an den Seitenwänden steigt zum Boden hin an.

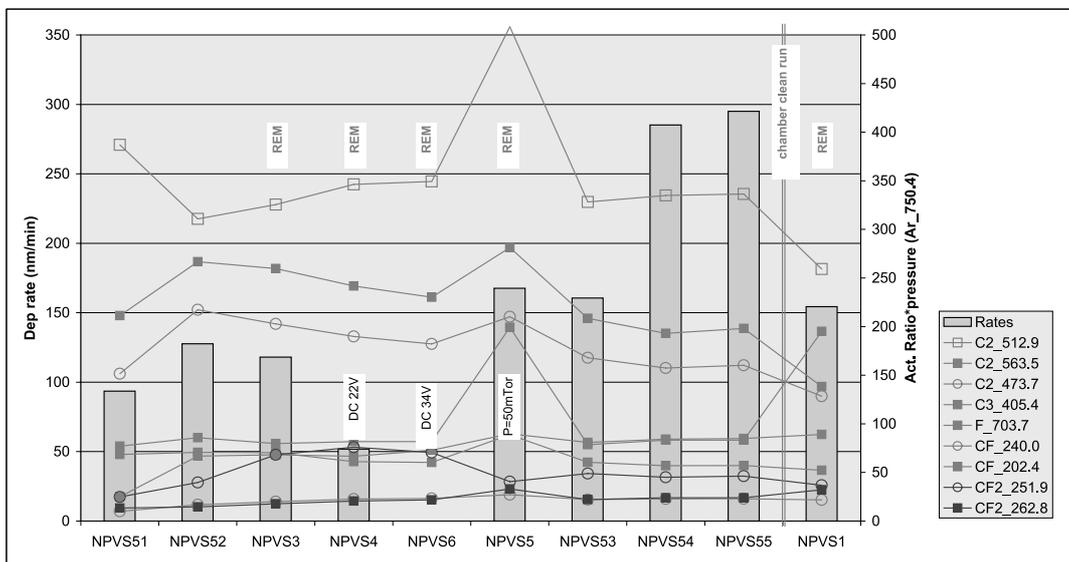


Abbildung 10.13 Resultate der Plasmadiagnostik für Depositionsexperimente im OIPT Reaktor. Der hohe Anteil an Fluor legt eine gleichzeitige Ätzung der deponierten Schicht nahe.

10.3.3 Erweitertes Depositionsmodell

Zur Verifizierung der Hypothese der simultanen Deposition und der Ionen unterstützten Ätzung durch Fluor wurde das existierende Oberflächenreaktionsmodell zu

einem kombinierten Ätz- und Depositionsmodell erweitert. Vereinfachend wurde die Deposition des Polymerfilmes durch die Monomerspezies C_4F_7 , C_2F_4 , C_2F_3 , CF_3 , CF , C und die Ätzung des deponierten Filmes durch Fluor als unabhängig voneinander angenommen. Weil im Allgemeinen nicht bekannt ist, wieviel jede der Spezies zur Deposition des Polymerfilmes beiträgt, werden die Flüsse der einzelnen Spezies gewichtet und zu einem Ratenkoeffizienten C_{Monomer} summiert. Die Gewichtung der Spezies entspricht dabei ihrem Kohlenstoffanteil.

Obwohl die typische Flussdichte der Ionen um nahezu drei Größenordnungen kleiner als die der Monomere und des Fluors ist, tragen die Ionen zur anisotropen Deposition oder Ätzung entscheidend bei. In [147; 148] zeigten Messungen in CF_4 und CHF_3 -Plasmen einen signifikanten Beitrag der Ionen mit geringer Energie an der Deposition. Aus diesem Grund wurde der Einfluß der positiv geladenen Ionenspezies $C_2F_4^+$, $C_3F_5^+$, CF^+ , CF_2^+ , CF_2 und CF_3^+ ebenfalls durch Aufsummierung zu einem Ätzratenkoeffizienten C_{Ion} berücksichtigt. Die Gewichtung der Flussdichten nach ihrem Kohlenstoffanteil hat keinen signifikanten Einfluss und wurde deshalb für Ionen nicht durchgeführt. Unter diesen Annahmen wurde ein lineares Modell für die Depositionsrate DR aufgestellt

$$DR = C_F \Phi_F + C_{\text{Monomer}} \Phi_{\text{Monomer}} + C_{\text{Ion}} \Phi_{\text{Ion}}. \quad (10.13)$$

Darin sind die Koeffizienten

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{Monomer}} &= 4\Phi_{C_4F_7} + 2\Phi_{C_2F_4} + 2\Phi_{C_2F_3} + \Phi_{CF_3} + \Phi_{CF} + \Phi_C \\ \Phi_{\text{Ion}} &= \Phi_{C_2F_4^+} + \Phi_{C_3F_5^+} + \Phi_{CF^+} + \Phi_{CF_2^+} + \Phi_{CF_2} + \Phi_{CF_3^+}. \end{aligned} \quad (10.14)$$

Um den Einfluss der Ionen auf die Depositionsrate zu untersuchen, wurde ein noch einfacheres Modell aufgestellt, bei dem der Ionenfluß gänzlich vernachlässigt wurde. Die mittlere Depositionsrate wurde mithilfe eines REM vermessen. Für jedes Depositionsexperiment wurden die deponierten Filmdicken für Gräben von 2, 5, 10 und 20 μm Breite auf der Oberseite, an den Seitenwänden und in der Mitte des Bodens ermittelt. Die Flussdichte der einzelnen Spezies ist nicht überall gleich und hängt wesentlich von der Form des Profils sowie der physikalischen und chemischen Eigenschaften der Oberfläche ab. Wie in [4] nahegelegt wurde, wird für die Bewegung der ungeladenen Spezies in den Strukturen eine isotrope Winkelverteilung und diffuse Desorption an der Oberfläche angenommen. Die Messung der Flussdichten innerhalb der Strukturen ist nicht durchführbar. Aus diesem Grund wurden eine Reihe von Simulationen durchgeführt, die mit dem vorgestellten Transportmodell [110] eine

Schätzung der Flussdichten lieferten.

Ein Verbrauchskoeffizient für jede Spezies auf jedem der beteiligten Materialien definiert die Reaktionswahrscheinlichkeit an der Oberfläche.

Da die Flussdichten von der korrekten Wahl der Verbrauchskoeffizienten abhängen, wurde eine Reihe von Simulationen durchgeführt, in denen die Verbrauchskoeffizienten von Fluor und Monomeren jeweils im Bereich von 0 bis 1 variiert wurden. Die ermittelten Flussdichten wurden ausgewertet und in Übereinstimmung mit den durchgeführten Experimenten für die Oberseite, die Seitenwände und den Boden des Profils berechnet.

Unter Verwendung der Methode der kleinsten Quadrate wurden mit Hilfe der gemessenen Depositionsraten und der simulierten Flussdichten aus Gl. (10.13) die wahrscheinlichsten Koeffizienten \hat{C}_F , \hat{C}_{Monomer} und \hat{C}_{Ion} ermittelt. Das Residuum der geschätzten Depositionsrate für eine durchgeführte Messung i ist damit gegeben durch

$$r(i) = DR_i - (\hat{C}_F \Phi_F + \hat{C}_{\text{Monomer}} \Phi_{\text{Monomer}} + \hat{C}_{\text{Ion}} \Phi_{\text{Ion}}) \quad (10.15)$$

Durch Variation der Verbrauchskoeffizienten von Fluor und Monomeren, die sich auf die simulierten Flussdichten auswirkt, konnte die quadrierte Summe der Residuen $\sum_i r(i)^2$ minimiert werden.

Einschränkungen

Die Schätzung der Verbrauchskoeffizienten und der Ätzratenkoeffizienten enthalten eine Reihe von Annahmen und Vereinfachungen: Das Modell mittelt die Effekte und Anteile der verschiedenen Monomere in einem Monomerdepositionskoeffizienten und einer Monomerflussdichte. Auf ähnliche Weise sind die Anteile der verschiedenen Ionenspezies zusammengefasst. Die Bedeckung der Oberfläche durch Fluor wird in diesem Modell nicht berücksichtigt.

Zweitens ist der Messfehler der am REM ermittelten Depositionsraten relativ groß, weil die Dicke des Polymerfilmes entlang der Seitenwand und der Bodenfläche variiert. Durch die geriffelte Struktur der Seitenwände ist eine exakte Bestimmung der Polymerdicke schwierig, weil sich die Struktur normalerweise bei längerer Deposition glättet. Die feinen Rillen der Seitenwände sind nicht in der Simulation berücksichtigt. Die Limitierung der Messungen auf drei pro geätztem Profil (Oberseite, Seitenwand, Boden) gibt den Verlauf der Polymerdicke im Profilquerschnitt nur sehr ungenau wieder.

Wegen der langen Depositionsdauer ändert sich die Querschnittsform der Profile und somit ist der Fluss der Spezies zeitlich nicht konstant. Die simulierten Flussdichten wurden jedoch aus der Simulation kurzer Depositionsdauern entnommen, bei denen die anfängliche Profilform weitestgehend erhalten bleibt.

Vergleich von Simulation und Experimenten

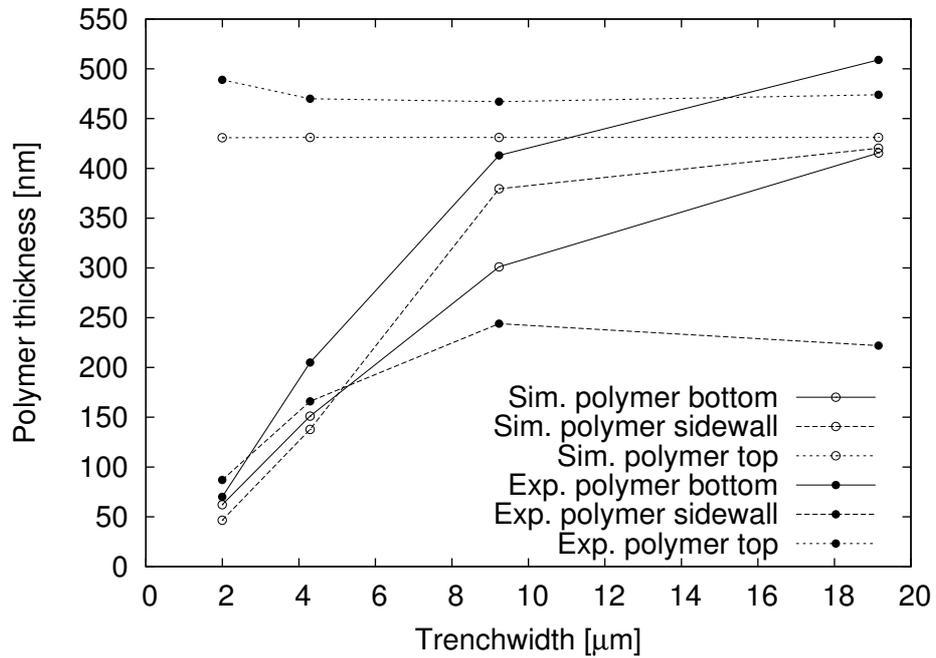
Der objektive Vergleich der simulierten und experimentell hergestellten Polymer-schicht ist wegen der kontinuierlichen Ausdehnung über die gesamte Struktur schwierig.

In Abb. 10.14 ist die gemessene Polymerdicke für verschieden breite Gräben und die zugehörigen Simulationsergebnisse mit und ohne Berücksichtigung der Ionen an verschiedenen Stellen des Querschnitts dargestellt. Die Resultate in Abb. 10.14 (oben) zeigen, dass die Depositionsraten am Boden, die an der Oberseite in keinem Fall überschreiten. Die Polymerdicke der Seitenwände wird durch dieses Modell nicht korrekt vorhergesagt. Bei Einbeziehung der Ionen Abb. 10.14 (unten) stimmen simulierte und gemessene Depositionsraten wesentlich besser miteinander überein.

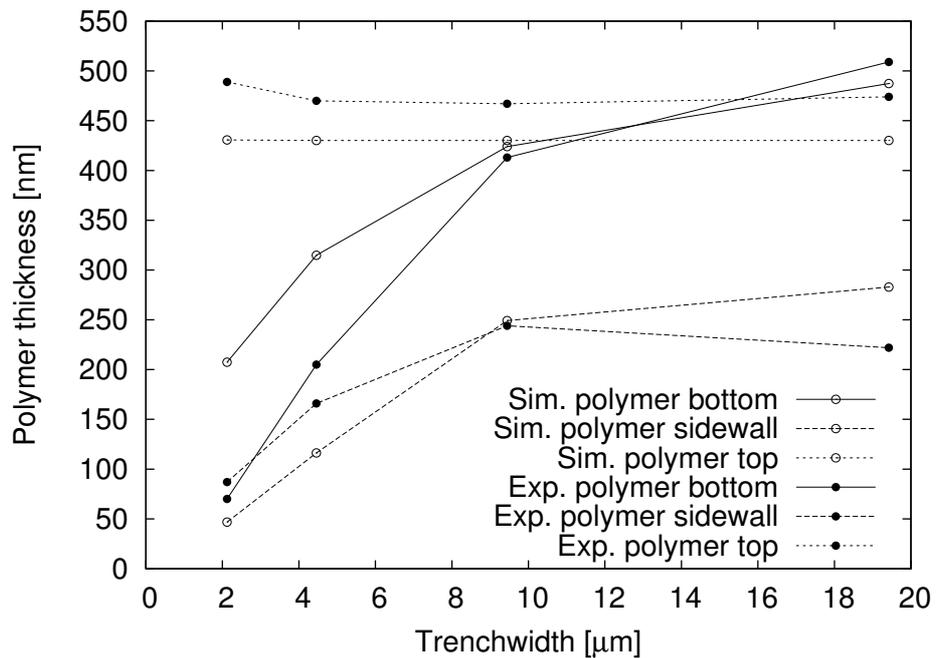
Abgesehen vom systematischen Fehler der Polymerdicke an der Oberseite, der wahrscheinlich von den beschriebenen Vereinfachungen herrührt, und der Abweichung der Polymerdicke am Boden kleiner Strukturen, wird die Polymerdeposition in guter Übereinstimmung mit den Experimenten durch das einfache Modell reproduziert. Für eine Maskenbreite von $20\ \mu\text{m}$ und einem geringen Aspektverhältnis konnte eine höhere Depositionsrate am Boden im Vergleich zur Oberseite durch die Simulation reproduziert werden (Abb. 10.15). Die berechneten Ratenkoeffizienten legen nahe, dass Fluor wegen des negativen Ratenkoeffizienten \hat{C}_F für die Ätzung des Polymerfilms verantwortlich ist und Monomere sowie Ionen die Deposition hervorrufen. Diese Vermutung wird für Ionen durch die Ergebnisse in Abb. 10.14 untermauert.

Die simulierte Dicke des Polymerfilmes in der Mitte der Seitenwände stimmt ebenfalls gut mit den gemessenen Werten überein. Die Detailauschnitte in Abb. 10.15 zeigen jedoch, dass die Dicke des Polymerfilmes von der Oberseite der Gräben zum Boden hin anwächst. Diese Beobachtung konnte durch das vereinfachte Depositionsmodell nicht reproduziert werden.

Der Effekt der inversen Verteilung der Polymerdicke erzeugt am Boden von geätzten Strukturen eine dickere Passivierungsschicht als an der Oberseite der Probe. Um das Polymer vom Boden der Struktur in Vorbereitung eines weiteren Ätzschrittes



a) ohne Ionenunterstützung



b) mit Ionenunterstützung

Abbildung 10.14 Vergleich der Polymerdicke an der Oberseite, dem Boden und in der Mitte der Seitenwand für Experiment und Simulation mit optimierten Verbrauchs- und Ratenkoeffizienten \hat{C}_F , \hat{C}_{Monomer} und \hat{C}_{Ion}

zu befreien, ist deshalb eine längeres ionenunterstütztes Ätzen notwendig. Der Effekt könnte in solchen Gas-Chopping-Prozessen zu einem frühen Ätzstopp in solchen Strukturen führen.

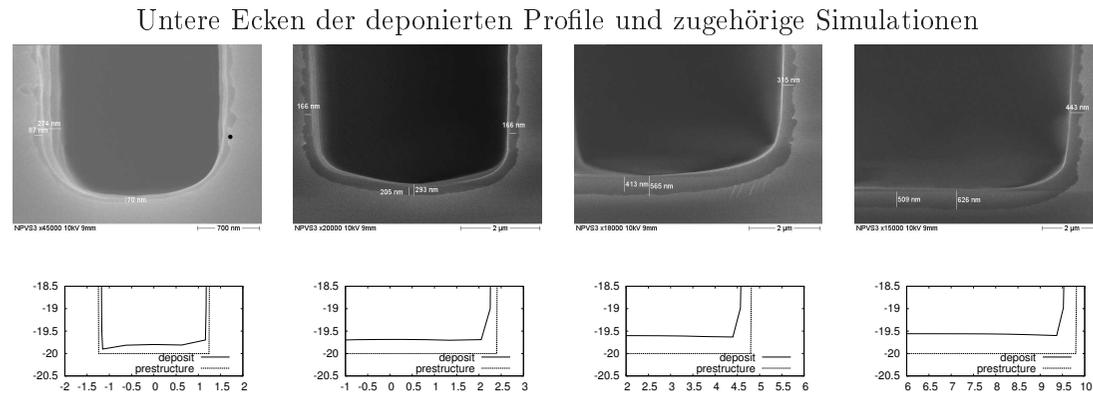
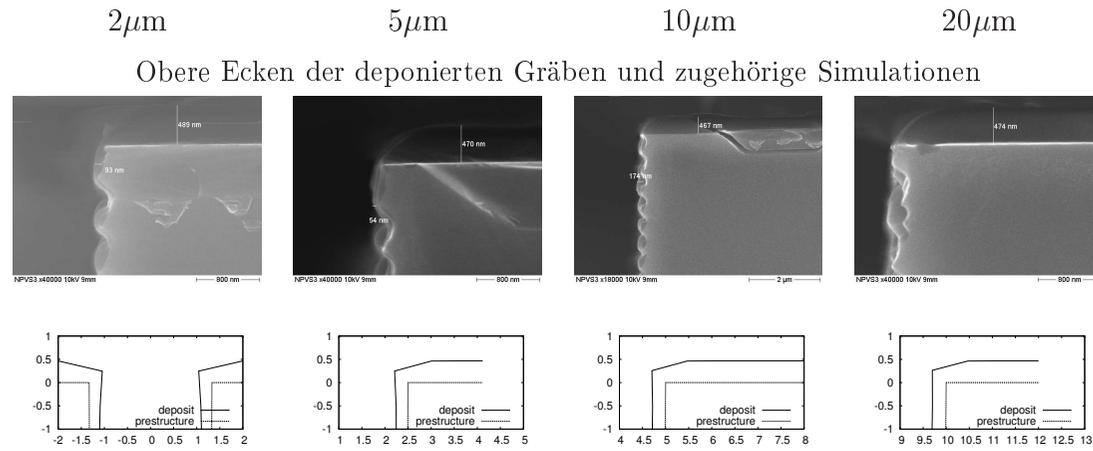


Abbildung 10.15 Gemessene und simulierte Polymerfilme an der Oberseite und am Boden von Gräben mit 2...20 μm Breite.

10.4 Gas-Chopping

In den vorangegangenen beiden Abschnitten wurden die Modelle zur Simulation des Ätzens von Silizium in einem SF_6 -Plasma und die Deposition von Polymerfilmen auf den Oberflächen geätzter Strukturen in einem C_4F_8 -Plasma vorgestellt und verifiziert.

Durch alternierende Depositions- und Ätzschritte lässt sich die Ätzung von Strukturen mit sehr großen Aspektverhältnissen (>20) erreichen. Dieses Verfahren wird Gas-Chopping genannt [144; 149–151]. Der Gas-Chopping Prozess besteht aus aufeinander folgenden Zyklen von jeweils drei Phasen [149]:

1. Deposition eines Polymerfilms, der als Passivierungsschicht dient. Die gesamte Fläche, welche vom Polymer bedeckt wird, wird nur mit sehr geringer Ätzrate geätzt.
2. Entfernung des Polymerfilmes am Boden der Strukturen, hauptsächlich durch Ionenbombardement.
3. Ätzen der freigelegten Siliziumoberfläche durch chemisches oder ionenunterstütztes Ätzen von Silizium.

Je nach Anzahl, Dauer und Zeitverhältnis von Depositions- und Ätzschritt können Strukturen mit großen Aspektverhältnis geätzt werden. Die Zyklen spiegeln sich in mehr oder minder großen horizontalen Rillen an den Seitenwänden der Profile wieder. In Abb. 10.16 sind die Rillen der Seitenwände wegen der hohen Depositions- und Ätzdauern sehr stark ausgeprägt. Durch Reduzierung der Depositions- und Ätzzeiten pro Zyklus bei einer gleichzeitigen Erhöhung der Zyklenanzahl kann die Rauigkeit der Seitenwände durch die Rillen verringert werden.

In Abb. 10.16 sind die Simulationsergebnisse sowie die experimentellen Ergebnisse eines Gas-Chopping Experimentes für verschiedene Maskenbreiten dargestellt. In diesem Experiment wurden im OIPT-Plasmareaktor fünf Gas-Chopping-Zyklen, mit einem Zeitverhältnis von 30:60 s für Deposition und Ätzung durchgeführt. Deponiert wurde mit 1000 W ICP-Leistung bei 25 mTorr Druck, 60 sccm C_4F_8 Zufluss und abgeschalteter RF-Anregung der Probe. Die Ätzung erfolgte bei gleicher Leistung und Druck mit 50 sccm SF_6 und -35 V DC-Bias-Spannung. Bei beiden Schritten wurden im Experiment jeweils 2,5 sccm Argon zur Plasmadiagnose mit OES hinzugegeben. Die Beigabe von Argon konnte durch die Beschränkungen der Plasmamodelle in der

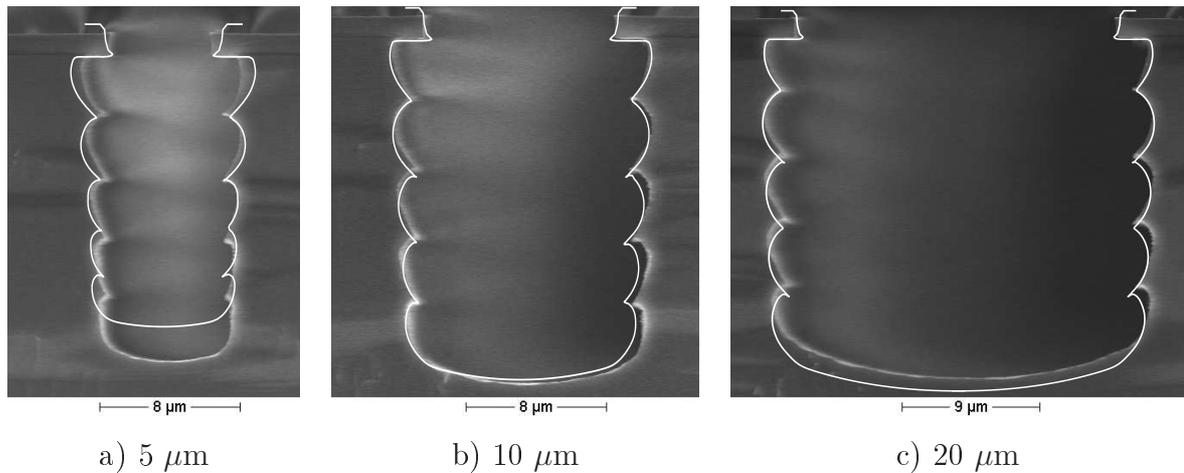


Abbildung 10.16 *Gas-Chopping Experiment und zugehörige Simulationen bei Maskenbreiten von 5, 10 und 20, μm . Durchgeführt wurden fünf Gas-Chopping-Zyklen mit einem Zeitverhältnis von 30:60 s (Deposition:Ätzen). Die Simulation unterschätzt die erreichte Tiefe für kleinere Strukturen a) und überschätzt sie für große c). Die Form der Rillen an den Seitenwänden wird durch die Simulation sehr gut vorhergesagt.*

Simulation nicht berücksichtigt werden.

Die Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Ergebnisse mit sehr guter Näherung. Allerdings wird die erreichte Ätztiefe für kleine Strukturen unterschätzt (Abb. 10.16 a) und für große Strukturen leicht überschätzt (Abb. 10.16 c). Die Form und Größe der horizontalen Rillen wird hingegen sehr gut durch die Simulation wiedergegeben.

Um die Abhängigkeit der erreichbaren mittleren Ätzrate mithilfe des Gas-Chopping Verfahrens vom Zeitverhältnis der Depositions- und Ätzschritte zu untersuchen, wurde eine Simulationsstudie angefertigt. Eine Auswahl der simulierten Profile dieser Studie sind in Abb. 10.17 dargestellt.

Die mittlere Ätzrate hängt im wesentlichen von drei folgenden Faktoren ab:

1. Depositionsrate und -dauer des Passivierungsschrittes,
2. Ätzrate des Polymerfilmes am Boden der Struktur,
3. vertikale Ätzrate von Silizium während des Ätzschrittes.

Die Dicke der deponierten Polymerschicht sollte für eine Maximierung der mittleren Ätzrate so gering wie möglich sein, jedoch so dick, daß die Seitenwände während des Ätzschrittes vollständig bedeckt bleiben. Die Simulation bietet eine effektive

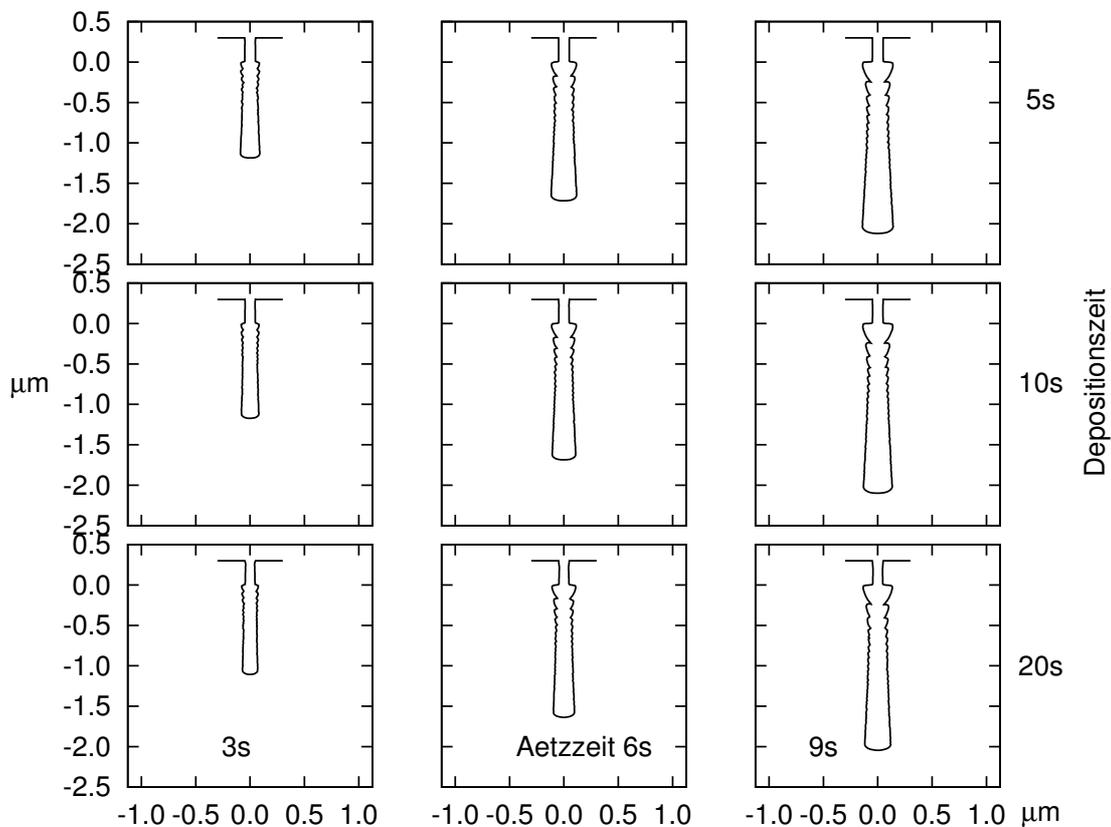


Abbildung 10.17 *Simulationsstudie Zeitverhältnis von Depositions- und Ätzzeit. Die Ätztiefe hängt im Wesentlichen von der Dauer des Ätzschrittes ab. Profilform und Größe der Seitenwandrillen sind abhängig von Zeitverhältnis Deposition:Ätzung und Aspektverhältnis im jeweiligen Zyklus.*

Möglichkeit, verschiedene Dauern und Zeitverhältnisse von Depositions- und Ätzschritten schnell zu untersuchen.

In Abb. 10.17 wurden die Profile für verschiedene Zeitverhältnisse von Deposition und Ätzung simuliert. Das verwendete Rezept entspricht, abgesehen von den Prozesszeiten, dem in Abb. 10.16. Simuliert wurden 30 Gas-Chopping-Zyklen und die initiale Maskenöffnung betrug für diese Simulationen nur 100 nm. Horizontal sind jeweils Profile mit 3, 6 und 9 s Ätzdauer dargestellt. Die Depositionszeiten betragen jeweils vertikal 5, 10 und 20 s.

Erwartungsgemäß steigt die erreichbare Ätztiefe mit wachsender Ätzdauer an. Gleichzeitig tritt dabei eine Verbreiterung des Profils zur Unterseite hin ein, was durch die Unterätzung durch Fluor zu erklären ist.

An der Ausprägung der Rillen an den Seitenwänden ist deutlich zu erkennen, dass zu Beginn des Gas-Chopping-Prozesses eine deutlich größere Ätzrate vorliegt als in späteren Zyklen, in denen das Aspektverhältnis am Boden deutlich ansteigt. Die verringerte Ätzrate führt zu deutlich glatteren Seitenwänden mit steigendem Aspektverhältnis.

Die Simulationsstudie wurde mithilfe der in dieser Arbeit entwickelten Simulationssoftware durchgeführt. Sie zeigt beispielhaft die Vorteile einer ganzheitlichen Plasmaätzsimulation gegenüber herkömmlichen experimentellen Methoden der Prozessoptimierung.

Die Definition der simulierten Prozesse in einem Simulationsskript erlaubt jederzeit die Wiederholung der virtuellen Experimente in kurzer Zeit mit gleichen oder veränderten Prozessparametern. Nach Bewertung und Vorauswahl simulierter Prozesse kann die Anzahl der notwendigen physischen Experimente deutlich reduziert werden.

10.4.1 Einfluss von elektrischer Aufladung

Beim Ätzen von SOI-Wafern⁷ tritt der in Abschn. 3.3.4 beschriebene Aufladungseffekt ein. Um die entwickelten Ätz- und Depositionsmodelle unter dem Einfluss der elektrostatischen Aufladung zu verifizieren,⁸ wurden Experimente simuliert, die in der bereits beschriebenen Ätzanlage von Oxford Instruments Plasma Technology durchgeführt wurden. In diesen Experimenten wurde 10 μm breite Linien auf SOI-Wafern mit 20 μm dicker Siliziumoberfläche geätzt bis die unterliegende SiO_2 Schicht erreicht wurde. Das Gas-Chopping-Rezept bestand aus 17 Zyklen von Deposition mit C_4F_8 und Ätzung mit SF_6 und den Parametern

- 450 sccm C_4F_8 4s, -5 V DC-Bias, 24 mTorr, 3750 W ICP-Leistung,
- 800 sccm SF_6 7s, -50 V DC-Bias, 71 mTorr, 4000 W ICP-Leistung.

Zunächst wurden Simulationen der Experimente ohne Berücksichtigung des Aufladungseffektes durchgeführt. In Abb. 10.18 ist der dabei entstandene nahezu senk-

⁷SOI-Wafer (engl: Silicon on insulator), sind Siliziumwafer mit einer eingebetteten SiO_2 -Schicht, die eine vergleichsweise dünne Siliziumschicht auf der Oberfläche gegenüber dem restlichen Substratmaterial elektrisch isoliert.

⁸Die Entwicklung von Modellen und Simulation der elektrostatischen Aufladung von Proben ist Gegenstand einer parallel zu dieser Arbeit angefertigten Dissertation von V. Ishchuk.

rechte Graben abgebildet. Beim Erreichen der SiO_2 -Schicht trat ein Ätzstopp ein. In weiteren Vergleichssimulationen wurde die Aufladung des Maskenmaterials, und der darunterliegenden SiO_2 -Schicht berücksichtigt. Aufgrund der anfänglichen Aufladung der Maskenränder durch Elektronen konnte die in den Experimenten beobachtete Verbreiterung des Grabens simuliert und durch die Ablenkung einfallender positiv geladener Ionen erklärt werden.

Beim Erreichen der Oxidschicht beginnt diese, sich durch den Einfall positiv gela-

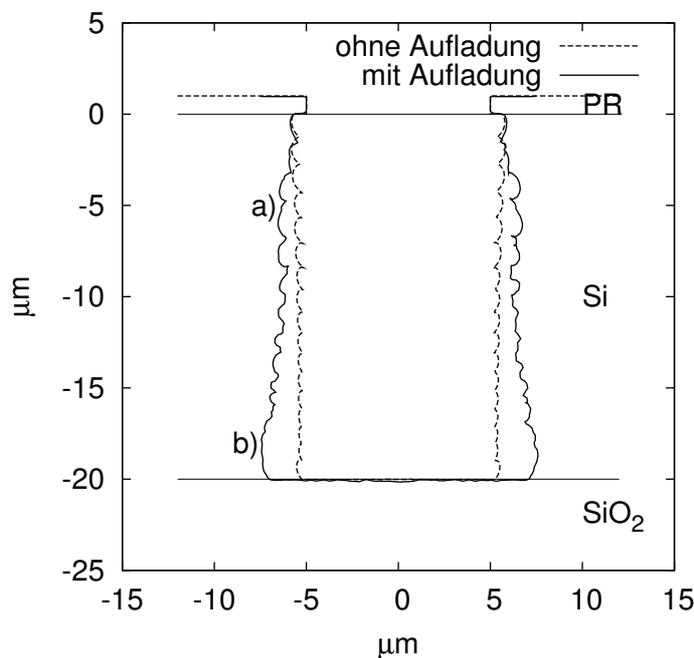


Abbildung 10.18 Vergleich von Gas-Chopping Simulationen mit und ohne Aufladungssimulation auf SOI-Wafern. Abgebildet ist das nahezu senkrechte Profil, welches sich ohne Berücksichtigung der lokalen elektrostatischen Aufladungen ergibt und das nach unten hin verbreiterte Profil mit Aufladung. Deutlich zu erkennen sind die mit a) markierten Beschädigungen der Seitenwandpassivierung durch abgelenkte Ionen und b) die Verbreiterung der Basis (Notching, Simulation von V. Ishchuk).

dener Ionen, aufzuladen und bildet ein ausgeprägtes positives Potential in der Mitte der Bodenfläche aus (Abb. 10.19). Daraufhin kommt es zu einer starken seitlichen Ablenkung der Ionen und einer Beschädigung der unteren Seitenwandpassivierung. Durch chemisches und ionenunterstütztes Ätzen kommt es zur Bildung von seitlichen Einkerbungen (engl. notch), diese sind in Abb. 10.18 durch b) markiert.

In Abb. 10.19 sind die Profilquerschnitte der Gas-Chopping-Simulation und des kor-

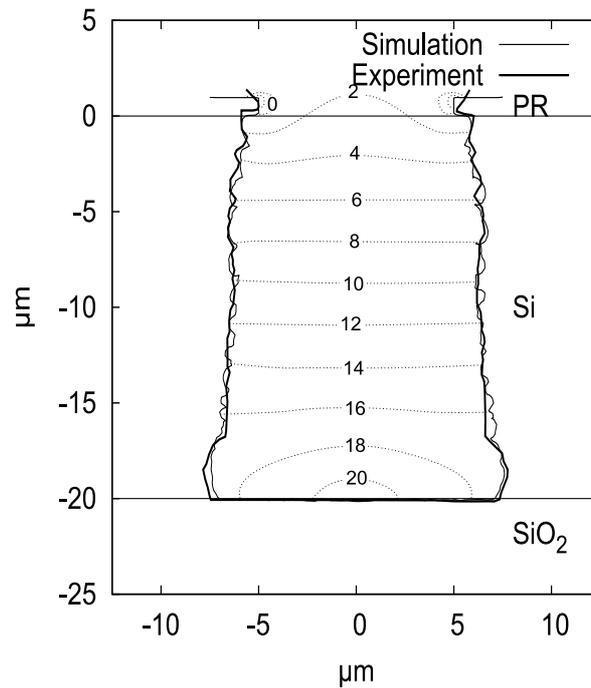


Abbildung 10.19 Vergleich von Simulation mit Potentiallinien und experimentell ermittelten Ätzprofil. Am Boden der isolierenden SiO_2 -Schicht bildet sich ein positives Potential aus, welches für eine Ablenkung der positiven Ionen zu den Seitenwänden hin verantwortlich ist (Simulation V. Ishchuk).

respondierenden Experimentes gemeinsam mit den Potentiallinien der lokalen Aufladung dargestellt. Darin ist die Ausbildung eines positiven Potential am Boden der Struktur zu erkennen, welches eine Ablenkung der Ionen zu den Seitenwänden hin bewirkt. Der Vergleich der experimentell ermittelten und mit der elektrostatischen Aufladung simulierten Profile zeigen eine sehr gute Übereinstimmung (Abb. 10.19).

10.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Validierung der entwickelten Transportmodelle und deren Simulation durch Vergleich mit den Ergebnissen realer Ätzsimulationen erläutert.

Zunächst wurden zwei phänomenologische Oberflächenreaktionsmodelle zur ionenunterstützten Ätzung von Silizium im SF_6 -Plasma sowie ein empirisches Ätzmodell für Photolacke als Maskenmaterial vorgestellt.

Die Anpassung der Reaktionskoeffizienten wurde mithilfe der experimentell ermit-

telten Ätzraten und Profilformen vorgenommen.

In einer Reihe von Ätzexperimenten in zwei verschiedenen Plasmaätzreaktoren und den dazu äquivalenten Simulationen wurde die Gültigkeit der Modelle bei verschiedenen Parametern wie Prozessdruck, Substrattemperatur und Anregungsleistung der Substratelektrode verifiziert.

Im Anschluss wurde die Deposition von dünnen Polymerfilmen auf die Siliziumoberfläche geätzter Strukturen in einem C_4F_8 -Plasma untersucht und unter Verwendung eines einfachen Depositionsmodells konnten die Ergebnisse früherer Experimente korrekt simuliert werden. Ein neues erweitertes Modell wurde vorgestellt, um unerwartete Depositionsraten in aktuell durchgeführten Experimenten zu erklären.

Die Anwendung von kombinierter Ätzung und Deposition im Gas-Chopping-Verfahren demonstriert die praktische Anwendbarkeit der entwickelten Transport- und Oberflächenreaktionsmodelle. Im Vergleich von Experimenten und Simulationen wurde eine gute Übereinstimmung der ermittelten Profilformen gefunden. Abschließend wurde gezeigt, wie die Berücksichtigung von lokalen elektrostatischen Aufladungen zur Verbesserung der simulierten Profilform beitragen können.

Kapitel 11

Zusammenfassung und Ausblick

Abschließend sollen noch einmal die wichtigsten Ergebnisse der Arbeit, ein Ausblick auf den weiteren Forschungsbedarf sowie das Potential für Weiterentwicklungen gegeben werden.

Im ersten Teil der Dissertation wurden zunächst die physikalischen Grundlagen sowie die technische Realisierung des Plasmaätzens in Vakuum-Ätzreaktoren beschrieben. Die speziellen Eigenschaften von ionisierten Gasen im Hochvakuum wurden erläutert und die darauf basierenden Verfahren zur mikrotechnischen Plasmastrukturierung vorgestellt. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt dabei auf dem Transport von geladenen und ungeladenen Reaktanden bei sehr niedrigen Drücken innerhalb von Mikrostrukturen und deren Interaktion mit der Probenoberfläche.

Im zentralen Teil der Arbeit wurde zunächst ein allgemeines Transportmodell für Teilchen unter Vakuumbedingungen, in Analogie zu den Strahlungstransportmodellen, wie sie in der Computergrafik Verwendung finden, aufgestellt. Das Modell wurde anschließend auf die beiden Spezialfälle des Transports von Neutralen und Ionen konkretisiert und neue Methoden der effizienten Berechnung entwickelt. Techniken aus der Computergrafik wurden adaptiert, um die geometrischen Formfaktoren, die Sichtbarkeitsbedingungen und die Reflektionseigenschaften der Oberflächen zu ermitteln. Der Transport von neutralen Reaktanden wurde mithilfe der Finiten-Elemente-Methode für nahezu beliebige Strukturen approximiert. Die Ergebnisse dieser Entwicklung wurden auf der Konferenz Micro- & Nanoengineering Conference (MNE) 2007 vorgestellt und im Anschluß veröffentlicht [110].

Für die Berechnung der Ionentransports innerhalb von Mikrostrukturen wurde eine gänzlich neuartige Methode entwickelt, die auf der stückweisen Approximation

der Flussdichte durch Polynome basiert und die gemeinsamen geometrischen Informationen mit dem Neutralentransport kombiniert. Durch iterative Berechnung der Teilchenreflexionen kann damit die richtungsabhängige Flussdichte auf der gesamten Oberfläche effizient und genau ermittelt werden.

Im abschließenden Teil dieser Dissertation wurde die technische Realisierung der Modelle, die innerhalb der entwickelten Simulationsumgebung implementiert wurde, diskutiert. Der Entwurf und die Implementierung der Software wurden auf die Gesamtsimulation des Plasmaätzprozesses ausgerichtet. Die Integration von makroskopischen Plasma- und mikroskopischen Topografiesimulationen erlauben die Durchführung virtueller Ätzexperimente am Simulator. Die Integration von Plasma- und Topografiesimulation in der Simulationssoftware wurde auf der MNE-Konferenz 2008 präsentiert und veröffentlicht [143]. Durch eine strikte Modularisierung und die Bereitstellung von offenen Anwendungsschnittstellen können neue und modifizierte Modellimplementierungen einfach integriert werden.

Die Verifizierung und Parameterisierung der simulierten Modelle wurde durch eine Reihe von Experimenten durchgeführt, die im abschließenden Teil der Arbeit vorgestellt wurden. Aus den Ergebnissen der Experimente und dem Vergleich mit zugehörigen Simulationen wurden wichtige Erkenntnisse zur weiteren Verbesserung der Simulationsmodelle gewonnen.

Die in dieser Arbeit von mir vorgestellten Modelle und Simulationen wurden 2009 auf Einladung von Oxford Instruments Plasma Technology auf Workshops am Lawrence Berkeley National Laboratory (USA) und der Technischen Universität Eindhoven (Niederlande), präsentiert.

Im Verlauf der Entwicklung dieser Arbeit offenbarten sich mehrere wichtige Problemstellungen, deren Klärung in den nächsten Jahren entscheidend für die weitere Entwicklung im Bereich der Simulation von Plasmastrukturierungsprozessen in der Mikro- und Nanosystemtechnik sein wird.

Die größte Herausforderung einer integrierten Simulation besteht in der Identifizierung und korrekten Modellierung der Vielzahl von Prozess-, Modell- und Simulationsparametern über alle Größenskalen der Simulation. Weil viele der Parameter in nichtlinearer Beziehung zueinander stehen und außerdem innerhalb des Reaktors zeit- und ortsabhängig sind, ist eine Messung und Modellierung äußerst anspruchsvoll.

Die Verbesserung der Plasma-, Randschicht- und Oberflächenreaktionsmodelle so-

wie die Integration weiterer Phänomene, wie z. B. die lokale elektrische Aufladung, Oberflächenrauigkeit und die Teilchendiffusion an der Probenoberfläche, sind wichtige Schritte zu einer exakteren Simulation von Ätzprozessen. Mit dem Übergang von Mikro- auf Nanostrukturen gewinnen diese Phänomene zunehmend größere Bedeutung.

Die gegenwärtige Beschränkung der Simulationssoftware auf lange parallele Grabenstrukturen ist für die Entwicklung von Modellen und Algorithmen hilfreich, weil die zweidimensionale Betrachtung einer Schnittfläche die Berechnung wesentlich vereinfacht. Für praktische Anwendungsfälle ist die Beschränkung auf Gräben jedoch inadäquat, weil Probleme, die eine Simulation wirtschaftlich rechtfertigen, größtenteils an komplizierten dreidimensionalen Strukturen auftreten. Die Erweiterung der Simulationssoftware auf dreidimensionale Strukturen ist daher notwendig.

Der Übergang von zwei auf drei Dimensionen ist allerdings mit einem erheblich größerem Rechenaufwand der Simulation verbunden. Während sich die physikalischen Modelle des Plasmas, des Teilchentransportes und der Reaktion mit Oberflächen kaum ändern, ist der geometrische Berechnungsaufwand in drei Dimensionen ungleich höher. Eine effiziente Implementierung der Simulationssoftware, die Verwendung von spezialisierten Hardwareressourcen – z. B. 3D-Grafikhardware – und eine Beschleunigung durch Parallelisierung sollten zur weiteren Verbesserung der Simulationen beitragen.

Basierend auf den Erkenntnissen und technischen Entwicklungen der letzten Jahre wird die Modellierung und computergestützte Simulation von physikalisch-technischen Prozessen immer größere Bedeutung erlangen.

Literaturverzeichnis

- [1] SANDNER, G. ; PRIBYL, W.: Mikroelektronik in Österreich – eine Chronologie der Meilensteine. In: *e & i Elektrotechnik und Informationstechnik* 125 (2008), May, Nr. 5, 202–208. <http://dx.doi.org/10.1007/s00502-008-0533-0>. – DOI 10.1007/s00502-008-0533-0
- [2] SUKHAREV, V.: Multiscale modeling of plasma etch processing. In: *Vacuum* 65 (2002), Nr. 3-4, 281 - 289. [http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0042-207X\(01\)00432-8](http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0042-207X(01)00432-8). – DOI DOI: 10.1016/S0042-207X(01)00432-8. – ISSN 0042-207X
- [3] KUSHNER, M. J. ; COLLISON, W. Z. ; GRAPPERHAUS, M. J. ; HOLLAND, J. P. ; BARNES, M. S.: A three-dimensional model for inductively coupled plasma etching reactors: Azimuthal symmetry, coil properties, and comparison to experiments. In: *Journal of Applied Physics* 80 (1996), August, S. 1337–1344. <http://dx.doi.org/10.1063/1.362932>. – DOI 10.1063/1.362932
- [4] VOLLAND, Burkhard E.: *Profile simulations of gas chopping etching processes: model development and comparison with experiments*, University of Kassel, Diss., 2004
- [5] BROCKHAUS ; F.A. BROCKHAUS AG MANNHEIM F.A. BROCKHAUS GMBH, Bibliografisches I. (Hrsg.): *Brockhaus Enzyklopädie in 30 Bänden*. 21. F.A. Brockhaus GmbH, Leipzig, Bibliografisches Institut und F.A. Brockhaus AG, Mannheim, 2006
- [6] BITTENCOURT, J. A.: *Fundamentals of plasma physics*. 3rd. Springer, 2004
- [7] SEIDEL, Joachim ; STEIGER, Andreas: Plasmen – Materie und Strahlung bei sehr hohen Temperaturen. In: *PTB Mitteilungen* 117 (2007), S. 282–286

- [8] FRANZ, Gerhard: *Oberflächentechnologie mit Niederdruckplasmen : Beschichten und Strukturieren in der Mikrotechnik*. Bd. 2., völlig Neubearb. Aufl. Springer-Verlag Berlin, 1994. – ISBN 3-540-57360-7
- [9] BITZER, D. L. ; SLOTTOW, H. G.: The plasma display panel: a digitally addressable display with inherent memory. In: *AFIPS '66 (Fall): Proceedings of the November 7-10, 1966, fall joint computer conference*. New York, NY, USA : ACM, 1966, 541-547
- [10] VOSSEN, John L. ; KERN, Werner: *Thin film processes*. Bd. 2. Boston: Academic Press, 1991. – ISBN 0-12-728251-3
- [11] LANCASTER, J.F.: The physics of welding. In: *Physics in Technology* 15 (1984), Nr. 2, 73-9. <http://stacks.iop.org/0305-4624/15/73>
- [12] REBUT, P-H: ITER: the first experimental fusion reactor. In: *Fusion Engineering and Design* 30 (1995), Nr. 1-2, S. 85-118
- [13] GOLDSTON, Robert J. ; RUTHERFORD, Paul H.: *Plasmaphysik : eine Einführung*. Vieweg, Braunschweig, 1998 (Vieweg-Lehrbuch : Physik). – ISBN 3-528-06884-1
- [14] FRANZ, Gerhard: Some aspects of dissipation mechanisms in chlorine containing capacitively coupled discharges, AVS, 2006, 1360-1365
- [15] KAUFFMAN, George B.: Chemical Creativity: Ideas from the Work of Woodward, Hückel, Meerwein and Others : by J.A. Berson Wiley-VCH, 1999. £27.50 paperback (xii + 195 pages) ISBN 3 527 29754 5. In: *Endeavour* 23 (1999), Nr. 4, 189 - 189. [http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0160-9327\(99\)80051-9](http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0160-9327(99)80051-9). – DOI DOI: 10.1016/S0160-9327(99)80051-9. – ISSN 0160-9327
- [16] BRUSH, S. G. ; SAHLIN, H. L. ; TELLER, E.: Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I. In: *The Journal of Chemical Physics* 45 (1966), Nr. 6, 2102-2118. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1727895>. – DOI 10.1063/1.1727895
- [17] COBURN, J. W.: Plasma-assisted etching. In: *Plasma Chemistry and Plasma Processing* 2 (1982), Mar, Nr. 1, 1-41. <http://dx.doi.org/10.1007/BF00566856>. – DOI 10.1007/BF00566856

- [18] KAWAMURA, E. ; VAHEDI, V. ; LIEBERMAN, M.A. ; BIRDSALL, C.K.: Ion energy distributions in rf sheaths; review, analysis and simulation. In: *Plasma Sources Science and Technology* 8 (1999), R45-R64(1). <http://www.ingentaconnect.com/content/iop/psst/1999/00000008/00000003/art00202>
- [19] HERSHKOWITZ, N. ; CHO, M. H.: Measurement of plasma potential using collecting and emitting probes. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 6 (1988), Nr. 3, 2054-2059. <http://dx.doi.org/10.1116/1.575600>. – DOI 10.1116/1.575600
- [20] LIEBERMAN, Michael A. ; LICHTENBERG, Alan J.: *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. John Wiley & Sons, 2005. – ISBN 0-471-72001-1
- [21] FICHELSCHER, Andreas ; RANGELow, Ivo W. ; STAMM, Andreas: Influence of sheath properties on the profile evolution in reactive ion etching processes, SPIE, 1991, 77-83
- [22] GOECKNER, M. J. ; GOREE, J. ; SHERIDAN, T. E.: Measurements of ion velocity and density in the plasma sheath. In: *Physics of Fluids B: Plasma Physics* 4 (1992), Nr. 6, 1663-1670. <http://dx.doi.org/10.1063/1.860074>. – DOI 10.1063/1.860074
- [23] SHERIDAN, T. E. ; GOREE, J.: Collisional plasma sheath model. In: *Physics of Fluids B: Plasma Physics* 3 (1991), Nr. 10, 2796-2804. <http://dx.doi.org/10.1063/1.859987>. – DOI 10.1063/1.859987
- [24] WEISSLER, G. L. ; CARLSON, Robert Warner: *Vacuum physics and technology*. Academic Press, 1979. – ISBN 0124759149, 9780124759145
- [25] *Oxford Plasma Technology Website*. <http://www.oxfordplasma.de>.
Version: 2009
- [26] BACA, Albert G. ; ASHBY, Carol Iris H.: *Fabrication of GaAs devices*. Inst. of Electrical Engineers, London, 2005 (Processing series 6). – ISBN 0-86341-353-6, 978-0-86341-353-7

- [27] SHAW, K. A. ; ZHANG, Z. L. ; MACDONALD, N. C.: SCREAM. I: Single mask, single-crystal silicon, reactive ion etching process for microelectromechanical structures. 40 (1994), Nr. 1, S. 63–70. – Anglais
- [28] VÖLKLEIN, Friedemann ; ZETTERER, Thomas: *Praxiswissen Mikrosystemtechnik*. Vieweg+Teubner Verlag / GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2006 <http://ebooks.ub.uni-muenchen.de/16871/>
- [29] HOPWOOD, J: Review of inductively coupled plasmas for plasma processing. In: *Plasma Sources Science and Technology* 1 (1992), Nr. 2, 109. <http://stacks.iop.org/0963-0252/1/i=2/a=006>
- [30] Schutzrecht United States Patent US 4,948,458 (8 1989). OGLE, John S. (Erfinder).
- [31] SHUL, R. J. ; MCCLELLAN, G. B. ; CASALNUOVO, S. A. ; RIEGER, D. J. ; PEARTON, S. J. ; CONSTANTINE, C. ; BARRATT, C. ; R. F. KARLICEK, Jr. ; TRAN, C. ; SCHURMAN, M.: Inductively coupled plasma etching of GaN. In: *Applied Physics Letters* 69 (1996), Nr. 8, 1119-1121. <http://dx.doi.org/10.1063/1.117077>. – DOI 10.1063/1.117077
- [32] KHAN, F. A. ; ADESIDA, I.: High rate etching of SiC using inductively coupled plasma reactive ion etching in SF₆-based gas mixtures. In: *Applied Physics Letters* 75 (1999), Nr. 15, 2268-2270. <http://dx.doi.org/10.1063/1.124986>. – DOI 10.1063/1.124986
- [33] FULLER, N. C. M. ; DONNELLY, Vincent M. ; HERMAN, Irving P.: Electron temperatures of inductively coupled Cl₂–Ar plasmas. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 20 (2002), Nr. 1, 170-173. <http://dx.doi.org/10.1116/1.1427884>. – DOI 10.1116/1.1427884
- [34] HUANG, Mao ; HIEFTJE, Gary M.: Simultaneous measurement of spatially resolved electron temperatures, electron number densities and gas temperatures by laser light scattering from the ICP. In: *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* 44 (1989), Nr. 8, 739 - 749. [http://dx.doi.org/10.1016/0584-8547\(89\)80072-2](http://dx.doi.org/10.1016/0584-8547(89)80072-2). – DOI 10.1016/0584-8547(89)80072-2. – ISSN 0584-8547

- [35] CARDINAUD, Christophe ; PEIGNON, Marie-Claude ; TESSIER, Pierre-Yves: Plasma etching: principles, mechanisms, application to micro- and nanotechnologies. In: *Applied Surface Science* 164 (2000), Nr. 1-4, 72 - 83. [http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0169-4332\(00\)00328-7](http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0169-4332(00)00328-7). – DOI DOI: 10.1016/S0169-4332(00)00328-7. – ISSN 0169-4332
- [36] KNUDSEN, Martin: Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren. In: *Annalen der Physik* 333 (1909), Nr. 1, 75-130. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.19093330106>. – ISSN 1521-3889
- [37] JOUSTEN, Karl: *Wutz Handbuch Vakuumtechnik: Theorie und Praxis; 9. Aufl.* Wiesbaden : Vieweg, 2006
- [38] BLAHOUS, Josef: *Statistische Thermodynamik.* Hirzel S. Verlag, 2007. – ISBN 3-7776-1451-3
- [39] BONDI, A.: van der Waals Volumes and Radii. In: *The Journal of Physical Chemistry* 68 (1964), March, Nr. 3, 441-451. <http://dx.doi.org/10.1021/j100785a001>. – ISSN 0022-3654. – doi: 10.1021/j100785a001
- [40] KARNIADAKIS, George ; BESKOK, Ali ; ALURU, Narayan: *Microflows and Nanoflows - Fundamentals and Simulation.* Springer, 2005. – ISBN 0-387-22197-2
- [41] STOFFEL, Alexander: *Finite Elemente und Wärmeleitung : eine Einführung.* WILEY-VCH, Weinheim, Berlin, 1992. – ISBN 3-527-28252-1
- [42] DEBROGLIE, Louis: *The wave nature of the electron.* Nobel lecture, December 1929
- [43] JOSEPHY, B.: Die Reflexion von Quecksilber-Molekularstrahlen an Kristallspaltflächen. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 80 (1933), S. 755-762. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01342590>. – DOI 10.1007/BF01342590. – ISSN 0939-7922
- [44] COBURN, J. W. ; WINTERS, Harold F.: Conductance considerations in the reactive ion etching of high aspect ratio features. In: *Applied Physics Let-*

ters 55 (1989), Nr. 26, 2730-2732. <http://dx.doi.org/10.1063/1.101937>.
– DOI 10.1063/1.101937

- [45] ANTROPOFF, A. von: Untersuchungen Über die Adsorption von Gasen von kleinsten bis zu höchsten Drücken II. Ableitung und physikalische Diskussion der Gleichungen der idealen Adsorption. In: *Colloid & Polymer Science* 99 (1942), Apr, Nr. 1, 35–52. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01496996>. – DOI 10.1007/BF01496996
- [46] ANTROPOFF, A. von: Untersuchungen Über die Adsorption von Gasen von kleinsten bis zu höchsten Drücken. In: *Colloid & Polymer Science* 129 (1952), Nov, Nr. 1, 1–10. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01802753>. – DOI 10.1007/BF01802753
- [47] LEVAN, M. D. ; VERMEULEN, Theodore: Binary Langmuir and Freundlich isotherms for ideal adsorbed solutions. In: *The Journal of Physical Chemistry* 85 (1981), May, Nr. 22, 3247–3250. <http://dx.doi.org/10.1021/j150622a009>. – ISSN 0022–3654. – doi: 10.1021/j150622a009
- [48] LANGMUIR, Irving: Surface Chemistry. In: *Nobel Lectures, Chemistry 1922-1941* (1932), December 14. – Nobel Lecture
- [49] MASEL, Richard I.: *Principles of adsorption and reaction on solid surfaces*. Wiley, New York, 1996 (Wiley series in chemical engineering). – ISBN 0–4713–0392–5. – A Wiley-Interscience publication.
- [50] GIRARD, R ; BELHAOUARI, J B. ; GONZALEZ, J J. ; GLEIZES, A: A two-temperature kinetic model of SF₆ plasma. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 32 (1999), Nr. 22, 2890-2901. <http://stacks.iop.org/0022-3727/32/2890>
- [51] KOKKORIS, George ; PANAGIOTOPOULOS, Apostolos ; GOODYEAR, Andy ; COOKE, Mike ; GOGOLIDES, Evangelos: A global model for SF₆ plasmas coupling reaction kinetics in the gas phase and on the surface of the reactor walls. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 42 (2009), Nr. 5, 055209 (15pp). <http://stacks.iop.org/0022-3727/42/055209>

- [52] KOKKORIS, George ; GOODYEAR, Andy ; COOKE, Mike J. ; GOGOLIDES, Evangelos: A global model for C_4F_8 plasmas coupling gas phase and wall surface reaction kinetics. In: *J. Phys. D.: Appl. Phys.* 41 (2008), S. 195211
- [53] LOEB, Leonard B.: Kinetic Theory of Gases. In: *Journal of the American Chemical Society* 81 (2002), May, Nr. 5, 1267–1267. <http://dx.doi.org/10.1021/ja01514a075>. – ISSN 0002–7863. – doi: 10.1021/ja01514a075
- [54] KNUDSEN, Martin ; METHUEN (Hrsg.): *The kinetic theory of gases : some modern aspects*. Repr. Wiley, New York, 1952 (Methuen's monographs on physical subjects)
- [55] CELESTINI, Franck ; MORTESSAGNE, Fabrice: The cosine law at the atomic scale: Toward realistic simulations of Knudsen diffusion. (2008). <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00166706/en/>
- [56] FERES, R. ; YABLONSKY, G.: Knudsen's cosine law and random billiards. In: *Chemical Engineering Science* 59 (2004), Nr. 7, 1541 - 1556. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2004.01.016>. – DOI 10.1016/j.ces.2004.01.016. – ISSN 0009–2509
- [57] ARNOLD, John C. ; GRAY, David C. ; SAWIN, Herbert H.: Influence of reactant transport on fluorine reactive ion etching of deep trenches in silicon. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 11 (1993), Nr. 6, 2071-2080. <http://dx.doi.org/10.1116/1.586545>. – DOI 10.1116/1.586545
- [58] LIU, J. ; HUPPERT, G. L. ; SAWIN, H. H.: Ion bombardment in rf plasmas. In: *Journal of Applied Physics* 68 (1990), Nr. 8, 3916-3934. <http://dx.doi.org/10.1063/1.346278>. – DOI 10.1063/1.346278
- [59] BECKER, F. ; RANGELOW, IW ; MASSELI, K. ; KASSING, R.: Diagnostic on N_2 plasma with an energy resolved quadrupole mass spectrometer at the powered electrode in a reactive ion etching system: ion energy distribution of N_2^+ and N^+ . In: *Surface and Coatings Technology* 74 (1995), S. 485–490
- [60] BENOIT-CATTIN, P. ; BERNARD, L. C. ; BORDENAVE-MONTESQUIEU, A.: ENERGY DISPERSION OF IONS PRODUCED BY A HIGH-FREQUENCY EXCITATION SOURCE. X. In: *Entropie* (1967), Nov

- [61] WILSON, I. H.: Ion bombardment modification of surfaces - Fundamentals and applications. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 12 (1985), Oktober, S. 441–441. [http://dx.doi.org/10.1016/0168-583X\(85\)90048-5](http://dx.doi.org/10.1016/0168-583X(85)90048-5). – DOI 10.1016/0168–583X(85)90048–5. ISBN ISBN 0–444–42365–6
- [62] RANGELOW, I.W.: Ion-beam etching, and chemically-assisted ion-beam etching to produce x-ray masks for synchrotron-radiation-lithography. In: *Microelectronic Engineering* 3 (1985), Nr. 1-4, 639 - 646. [http://dx.doi.org/10.1016/0167-9317\(85\)90079-6](http://dx.doi.org/10.1016/0167-9317(85)90079-6). – DOI 10.1016/0167–9317(85)90079–6. – ISSN 0167–9317
- [63] KOWALSKI, Zbigniew W.: Ion-bombardment modification of surface morphology of solids: a new direction in materials science. In: *Journal of Materials Science Letters* 7 (1988), 8, 845–848. <http://dx.doi.org/10.1007/BF00723781>. – DOI 10.1007/BF00723781
- [64] COHEN, M.F. ; WALLACE, J.R.: *Radiosity and Realistic Image Synthesis*. Morgan Kaufmann, 1993
- [65] HWANG, Gyeong S. ; GIAPIS, Konstantinos P.: On the origin of the notching effect during etching in uniform high density plasmas. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 15 (1997), Nr. 1, 70-87. <http://dx.doi.org/10.1116/1.589258>. – DOI 10.1116/1.589258
- [66] GOTTSCHO, Richard A. ; JURGENSEN, C. W. ; VITKAVAGE, D. J.: Microscopic uniformity in plasma etching. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 10 (1992), Nr. 5, 2133-2147. <http://dx.doi.org/10.1116/1.586180>. – DOI 10.1116/1.586180
- [67] SHAQFEH, Eric S. G. ; JURGENSEN, Charles W.: Simulation of reactive ion etching pattern transfer. In: *Journal of Applied Physics* 66 (1989), Nr. 10, 4664-4675. <http://dx.doi.org/10.1063/1.343823>. – DOI 10.1063/1.343823
- [68] GIAPIS, Konstantinos P. ; SCHELLER, Geoffrey R. ; GOTTSCHO, Richard A. ; HOBSON, William S. ; LEE, Yong H.: Microscopic and macroscopic uniformity control in plasma etching. In: *Applied Physics Letters* 57 (1990), Nr. 10, 983-985. <http://dx.doi.org/10.1063/1.103532>. – DOI 10.1063/1.103532

- [69] SIGMUND, Peter: Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets. In: *Phys. Rev.* 184 (1969), Aug, Nr. 2, S. 383–416. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.184.383>. – DOI 10.1103/PhysRev.184.383
- [70] ECKSTEIN, W.: Physical sputtering and reflection processes in plasma-wall interactions. In: *Journal of Nuclear Materials* 248 (1997), 1 - 8. [http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0022-3115\(97\)00109-8](http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0022-3115(97)00109-8). – DOI DOI: 10.1016/S0022-3115(97)00109-8. – ISSN 0022-3115. – Interfacial Effects in Quantum Engineering Systems
- [71] ZAIM, PC: Elementary processes in plasma-surface interactions with emphasis on ions. In: *Name: Pure Appl. Chem* (1985)
- [72] STEINBRÜCHEL, Christoph: Universal energy dependence of physical and ion-enhanced chemical etch yields at low ion energy. In: *Applied Physics Letters* 55 (1989), Nr. 19, 1960-1962. <http://dx.doi.org/10.1063/1.102336>. – DOI 10.1063/1.102336
- [73] COBURN, J. W. ; WINTERS, Harold F.: Plasma etching - a discussion of mechanisms. In: *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* 10 (1981), Nr. 2, 119–141. <http://www.informaworld.com/10.1080/10408438108243630>
- [74] FLAMM, Daniel L. ; DONNELLY, Vincent M. ; MUCHA, John A.: The reaction of fluorine atoms with silicon. In: *Journal of Applied Physics* 52 (1981), Nr. 5, 3633-3639. <http://dx.doi.org/10.1063/1.329098>. – DOI 10.1063/1.329098
- [75] MULLINS, C. B. ; COBURN, J. W.: Ion-beam-assisted etching of Si with fluorine at low temperatures. In: *Journal of Applied Physics* 76 (1994), Nr. 11, 7562-7566. <http://dx.doi.org/10.1063/1.357990>. – DOI 10.1063/1.357990
- [76] ORTION, J. M. ; CORDIER, Y. ; GARCIA, J. C. ; GRATTEPAIN, C.: Temperature dependence of GaAs chemical etching using AsCl₃. In: *Journal of Crystal Growth* 164 (1996), Nr. 1-4, 97 - 103. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(95\)01019-X](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(95)01019-X). – DOI 10.1016/0022-0248(95)01019-X. – ISSN 0022-0248. – Chemical Beam Epitaxy and Related Growth Techniques 1995

- [77] WINTERS, Harold F. ; COBURN, J. W. ; KAY, E.: Plasma etching A "pseudo-black-box" approach. In: *Journal of Applied Physics* 48 (1977), Nr. 12, 4973-4983. <http://dx.doi.org/10.1063/1.323628>. – DOI 10.1063/1.323628
- [78] SOWA, M. J. ; LITTAU, M. E. ; POHRAY, V. ; CECCHI, J. L.: Fluoro-carbon polymer deposition kinetics in a low-pressure, high-density, inductively coupled plasma reactor. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 18 (2000), Nr. 5, 2122-2129. <http://dx.doi.org/10.1116/1.1286396>. – DOI 10.1116/1.1286396
- [79] D'AGOSTINO, Riccardo: *Plasma deposition, treatment, and etching of polymers*. Academic Press, Boston, 1990. – ISBN 0-12-200430-2
- [80] KELLER, Alexander ; TALAY, Denis ; HICKERNELL, Fred ; CHOIRAT, Christine ; SERI, Raffaello ; L'ECUYER, Pierre: *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods*. Springer Berlin Heidelberg, 2004. <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-31186-6>. <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-31186-6>. – ISBN 978-3-540-25541-3 (Print) 978-3-540-31186-7 (Online)
- [81] BOSSEL, Hartmut: *Systeme, Dynamik, Simulation : Modellbildung, Analyse und Simulation komplexer Systeme*. Norderstedt : Books on Demand, 2004. – ISBN 3-8334-0984-3
- [82] GILKS, Walter R. ; GILKS, Walter R. (Hrsg.): *Markov chain Monte Carlo in practice*. Chapman & Hall, London, 1996 (Interdisciplinary statistics). – ISBN 0-412-05551-1
- [83] VENTZEK, Peter L. G. ; HOEKSTRA, Robert J. ; KUSHNER, Mark J.: Two-dimensional modeling of high plasma density inductively coupled sources for materials processing. In: *Second workshop on high density plasmas and applications* 12 (1994), Nr. 1, 461-477. <http://dx.doi.org/10.1116/1.587101>. – DOI 10.1116/1.587101
- [84] HWANG, Helen H. ; GOVINDAN, T. R. ; MEYYAPPAN, M.: Feature Profile Evolution Simulation Using a Level Set Method. In: *Journal of The Electrochemical Society* 146 (1999), Nr. 5, 1889-1894. <http://dx.doi.org/10.1149/1.1391861>. – DOI 10.1149/1.1391861

- [85] VYVODA, M. A. ; LI, M. ; GRAVES, D. B. ; LEE, H. ; MALYSHEV, M. V. ; KLEMENS, F. P. ; LEE, J. T. C. ; DONNELLY, V. M.: Role of sidewall scattering in feature profile evolution during Cl₂ and HBr plasma etching of silicon. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 18 (2000), Nr. 2, 820-833. <http://dx.doi.org/10.1116/1.591282>. – DOI 10.1116/1.591282
- [86] GODYAK, Valery A. ; STERNBERG, Natalia: Dynamic model of the electrode sheaths in symmetrically driven rf discharges. In: *Phys. Rev. A* 42 (1990), Aug, Nr. 4, S. 2299–2312. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.42.2299>. – DOI 10.1103/PhysRevA.42.2299
- [87] MCVITTIE, James P. ; REY, Juan C. ; BARIYA, A. J. ; ISLAMRAJA, M. M. ; CHENG, L. Y. ; RAVI, S. ; SARASWAT, Krishna C.: SPEEDIE: a profile simulator for etching and deposition. In: *Advanced Techniques for Integrated Circuit Processing* 1392 (1991), Nr. 1, 126-138. <http://dx.doi.org/10.1117/12.48908>. – DOI 10.1117/12.48908
- [88] HOEKSTRA, Robert J. ; KUSHNER, Mark J.: The effect of subwafer dielectrics on plasma properties in plasma etching reactors. In: *Journal of Applied Physics* 77 (1995), Nr. 8, 3668-3673. <http://dx.doi.org/10.1063/1.358604>. – DOI 10.1063/1.358604
- [89] GRAVES, David B. ; KUSHNER, Mark J.: Influence of modeling and simulation on the maturation of plasma technology: Feature evolution and reactor design. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 21 (2003), Nr. 5, S152-S156. <http://dx.doi.org/10.1116/1.1600447>. – DOI 10.1116/1.1600447
- [90] STRASSER, E. ; SELBERHERR, S.: Algorithms and models for cellular based topography simulation. In: *Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, IEEE Transactions on* 14 (1995), Sep, Nr. 9, S. 1104–1114. <http://dx.doi.org/10.1109/43.406712>. – DOI 10.1109/43.406712. – ISSN 0278–0070
- [91] GAROZZO, Giuseppe ; MAGNA, Antonino L. ; COFFA, Salvo ; D'ARRIGO, Giuseppe ; PARASOLE, Nicolò ; RENNA, Marco ; SPINELLA, Corrado: Topographic and structural evolution of etched Si samples. In: *Computational*

- Materials Science* 24 (2002), Nr. 1-2, 246 - 251. [http://dx.doi.org/10.1016/S0927-0256\(02\)00176-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0927-0256(02)00176-3). – DOI 10.1016/S0927-0256(02)00176-3. – ISSN 0927-0256
- [92] LIU, G. R.: *Meshfree Methods: Moving Beyond the Finite Element Method*. Second Edition. CRC Press, Taylor & Francis LLC., 2009. – ISBN 9781420082098, 1420082094
- [93] SETHIAN, James A.: Theory, algorithms, and applications of level set methods for propagating interfaces. In: *Acta Numerica* 5 (1996), Nr. - 1, 309-395. <http://dx.doi.org/10.1017/S0962492900002671>. – DOI 10.1017/S0962492900002671
- [94] SETHIAN, J. A.: A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 93 (1996), February, Nr. 4, 1591-1595. <http://www.pnas.org/content/93/4/1591.abstract>
- [95] JEWETT, R. E. ; HAGOUEL, P. I. ; NEUREUTHER, A. R. ; DUZER, T. V.: Line-Profile resist development simulation techniques. In: *Polymer Engineering & Science* 17 (1977), Nr. 6, 381-384. <http://dx.doi.org/10.1002/pen.760170610>. – ISSN 1548-2634
- [96] TOH, K.K.H. ; NEUREUTHER, A.R. ; SCHECKLER, E.W.: Algorithms for simulation of three-dimensional etching. In: *Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, IEEE Transactions on* 13 (1994), May, Nr. 5, S. 616-624. <http://dx.doi.org/10.1109/43.277635>. – DOI 10.1109/43.277635. – ISSN 0278-0070
- [97] KLEIN, Rolf: *Algorithmische Geometrie*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-27619-X>. <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-27619-X>. ISSN 16145216
- [98] SHEWCHUK, J.R.: Triangle: Engineering a 2D Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator. In: *Applied Computational Geometry: Towards Geometric Engineering* 1148 (1996), S. 203-222
- [99] OWEN, S.J.: A survey of unstructured mesh generation technology. In: *7th International Meshing Roundtable* 3 (1998), Nr. 6

- [100] LEE, D. T. ; SCHACHTER, B. J.: Two algorithms for constructing a Delaunay triangulation. In: *International Journal of Parallel Programming* 9 (1980), Jun, Nr. 3, 219–242. <http://dx.doi.org/10.1007/BF00977785>. – DOI 10.1007/BF00977785
- [101] JEWETT, Robert: A string model etching algorithm / College of Engineering, University of California, Berkeley 94720. 1979 (UCB/ERL M79/68). – memorandum
- [102] MONAGHAN, J. J.: Smoothed Particle Hydrodynamics. In: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 30 (1992), Nr. 1, 543–574. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.aa.30.090192.002551>. – DOI 10.1146/annurev.aa.30.090192.002551
- [103] GRIEBEL, M. ; KNAPEK, S. ; ZUMBUSCH, G.: *Numerical simulation in molecular dynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007
- [104] ARVO, James ; KIRK, David: Particle transport and image synthesis. In: *SIGGRAPH '90: Proceedings of the 17th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. New York, NY, USA : ACM, 1990. – ISBN 0–89791–344–2, S. 63–66
- [105] SIEGEL, R. ; HOWELL, J.R.: *Thermal radiation heat transfer (3rd revised and enlarged edition)*. 4. Washington, DC (United States); Hemisphere Publishing Corp.; National Aeronautics and Space Administration, Cleveland, OH (United States). Lewis Research Center, 1992. – ISBN 0–89116–271–2
- [106] SCHLICK, Christophe: An Inexpensive BRDF Model for Physically-based Rendering. In: *Computer Graphics Forum* 13 (1994), Nr. 3, 233–246. <http://dx.doi.org/10.1111/1467-8659.1330233>. – ISSN 1467–8659
- [107] KAJIYA, J.T.: THE RENDERING EQUATION. In: *do* 510 (1986), S. 1
- [108] ENGSTROM, J.R. ; NELSON, Mark M. ; ENGEL, Thomas: The adsorption and reaction of fluorine on the Si(100) surface. In: *Surface Science* 215 (1989), Nr. 3, 437 - 500. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(89\)90271-9](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(89)90271-9). – DOI 10.1016/0039–6028(89)90271–9. – ISSN 0039–6028

- [109] ATKINSON, Kendall E.: *The numerical solution of integral equations of the second kind*. Cambridge Uni. Press, 1997 (Cambridge monographs on applied and computational mathematics ; 4). – ISBN 0–521–58391–8
- [110] HAUGUTH, Maik ; DANZ, Tobias ; VOLLAND, Burkhard E. ; RANGELOW, Ivo W.: New method for the precise flux calculation of neutrals for arbitrary surfaces in profile etch simulations. In: *Proceedings of the MNE 2007 Conference* Bd. 85, 2008, S. 982–984
- [111] KOKKORIS, George ; BOUDOUVIS, Andreas G. ; GOGOLIDES, Evangelos: Integrated framework for the flux calculation of neutral species inside trenches and holes during plasma etching. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 24 (2006), Nr. 6, 2008-2020. <http://dx.doi.org/10.1116/1.2345643>. – DOI 10.1116/1.2345643
- [112] FINLAYSON, Bruce A.: *Mathematics in science and engineering*. Bd. 87: *The method of weighted residuals and variational principles, with application in fluid mechanics, heat and mass transfer*. New York, Academic Press, 1972. – ISBN 0122570502
- [113] HECKBERT, P.S.: Radiosity in Flatland. In: *Computer Graphics Forum (Proc. Eurographics 92)* 11 (1992), Nr. 3, S. 181–192
- [114] SCHRÖDER, Peter ; HANRAHAN, Pat: On the form factor between two polygons. In: *SIGGRAPH '93: Proceedings of the 20th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. New York, NY, USA : ACM, 1993. – ISBN 0–89791–601–8, S. 163–164
- [115] LAMBERT, Johann H.: *I.H. Lambert Photometria, sive, De mensura et gradibus luminis, colorum et umbrae [microform]*. V.E. Klett, Augustae Vindelicorum :, 1760. – [16], 547, [13] p., [8] folded leaves of plates : S.
- [116] YAMADA, Noboru ; SHINODA, Tomoaki ; TAKIZAWA, Hiroyuki: Performance of hemisphere algorithm for fast form factor calculation. In: *Heat Transfer – Asian Research* (2009). <http://dx.doi.org/10.1002/htj.20259>. – ISSN 1523–1496
- [117] NUSSELT, Wilhelm: Graphische Bestimmung des Winkelverhältnisses bei der Wärmestrahlung. 72 (1928), S. 673

- [118] STEYN, D.G.: The calculation of view factors from fisheye-lens photographs. In: *Atmospheric Research* 18 (1980), S. 254–258
- [119] STRASSER, W.: *Schnelle Kurven- und Flächendarstellung auf graphischen Sichtgeräten*, Technische Universität Berlin, Diss., 1974
- [120] CATMULL, Edwin: A hidden-surface algorithm with anti-aliasing. In: *SIGGRAPH '78: Proceedings of the 5th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. New York, NY, USA : ACM, 1978, S. 6–11
- [121] BERG, Mark de ; CHEONG, Otfried ; KREVELD, Marc van ; OVERMARS, Mark: *Computational Geometry: Algorithms and Applications*. 3rd. Springer, 2008. – ISBN 3540779736
- [122] JOE, B. ; SIMPSON, R. B.: Corrections to Lee's visibility polygon algorithm. In: *BIT Numerical Mathematics* 27 (1987), Dec, Nr. 4, 458–473. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01937271>. – DOI 10.1007/BF01937271
- [123] HIPKE, C. A.: *Computing Visibility Polygons with LEDA*. 1996
- [124] DURAND, Frédo ; DRETTAKIS, George ; PUECH, Claude: The 3D visibility complex: a new approach to the problems of accurate visibility. In: *Proceedings of the eurographics workshop on Rendering techniques '96*. London, UK : Springer-Verlag, 1996. – ISBN 3-211-82883-4, S. 245–256
- [125] COOMBE, Greg ; HARRIS, Mark J. ; LASTRA, Anselmo: Radiosity on graphics hardware. In: *GI '04: Proceedings of Graphics Interface 2004*. School of Computer Science, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada : Canadian Human-Computer Communications Society, 2004. – ISBN 1-56881-227-2, S. 161–168
- [126] COPPERSMITH, D. ; WINOGRAD, S.: Matrix multiplication via arithmetic progressions. In: *STOC '87: Proceedings of the nineteenth annual ACM symposium on Theory of computing*. New York, NY, USA : ACM, 1987. – ISBN 0-89791-221-7, S. 1–6
- [127] BARRETT, R. ; BERRY, M. ; CHAN, T. F. ; DEMMEL, J. ; DONATO, J. ; DONGARRA, J. ; EIJKHOUT, V. ; POZO, R. ; ROMINE, C. ; VORST, H. V.: *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative*

Methods, 2nd Edition. Philadelphia, PA : SIAM, 1994 http://www.netlib.org/linalg/html_templates/Templates.html

- [128] VORST, H. A. van d.: *Cambridge monographs on applied and computational mathematics.* Bd. 13: *Iterative Krylov methods for large linear systems.* Cambridge University Press, 2003. – ISBN 0–5218–1828–1
- [129] RANGELOW, I.W.: Critical tasks in high aspect ratio silicon dry etching for microelectromechanical systems. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 21 (2003), S. 1550
- [130] VOLLAND, Burkhard E. ; RANGELOW, Ivo W.: The influence of reactant transport on the profiles of gas chopping etching processes: a simulation approach. In: *Microelectron. Eng.* 67–68 (June 2003), S. 338–348
- [131] APPEL, Arthur: Some techniques for shading machine renderings of solids. In: *AFIPS '68 (Spring): Proceedings of the April 30–May 2, 1968, spring joint computer conference.* New York, NY, USA : ACM, 1968, S. 37–45
- [132] AMANN, Herbert ; ESCHER, Joachim: *Analysis 1.* Basel : Birkhäuser, 2006
- [133] AMANN, Herbert ; ESCHER, Joachim: *Analysis 2.* Basel : Birkhäuser, 2006
- [134] STROUSTRUP, Bjarne: *Die C++-Programmiersprache.* 4., aktualisierte und erw. Aufl. Addison-Wesley, München, Boston, 2009. – ISBN 978–3–8273–2823–6
- [135] BRAY, Tim ; PAOLI, Jean ; SPERBERG-MCQUEEN, C. M. ; MALER, Eve ; YERGEAU, François: *Extensible Markup Language (XML) 1.0 (Fifth Edition) W3C Recommendation.* online. <http://www.w3.org/TR/2008/REC-xml-20081126/>. Version: November 2008
- [136] HAROLD, Elliotte Rusty ; MEANS, W. Scott: *XML in a Nutshell.* 3. 2004. – ISBN 978–0–596–00764–5
- [137] TIDWELL, Doug: *XSLT. XML-Dokumente transformieren.* O'Reilly, 2002. – ISBN 3897212927

- [138] SHANMUGASUNDARAM, Jayavel ; TUFTE, Kristin ; ZHANG, Chun ; HE, Gang ; DEWITT, David J. ; NAUGHTON, Jeffrey F.: Relational Databases for Querying XML Documents: Limitations and Opportunities. In: *VLDB '99: Proceedings of the 25th International Conference on Very Large Data Bases*. San Francisco, CA, USA : Morgan Kaufmann Publishers Inc., 1999. – ISBN 1-55860-615-7, S. 302-314
- [139] GOGOLIDES, Evangelos ; VAUVERT, Philippe ; KOKKORIS, George ; TURBAN, Guy ; BOUDOUVIS, Andreas G.: Etching of SiO₂ and Si in fluorocarbon plasmas: A detailed surface model accounting for etching and deposition. In: *Journal of Applied Physics* 88 (2000), Nr. 10, 5570-5584. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1311808>. – DOI 10.1063/1.1311808
- [140] GRAY, David C. ; TEPERMEISTER, I. ; SAWIN, Herbert H.: Phenomenological modeling of ion-enhanced surface kinetics in fluorine-based plasma etching. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 11 (1993), Nr. 4, 1243-1257. <http://dx.doi.org/10.1116/1.586925>. – DOI 10.1116/1.586925
- [141] VOLLAND, Burkhard E. ; IVANOV, Tzvetan ; RANGELow, Ivo W.: Profile simulation of gas chopping based etching processes. In: *J. Vac. Sci. Technol. B* 20(6) (2002), S. 3111-3117
- [142] RAUF, Shahid ; DAUKSHER, William J. ; CLEMENS, Stephen B. ; SMITH, Kenneth H.: Model for a multiple-step deep Si etch process. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 20 (2002), Nr. 4, 1177-1190. <http://dx.doi.org/10.1116/1.1477418>. – DOI 10.1116/1.1477418
- [143] HAUGUTH, M. ; VOLLAND, B.E. ; ISHCHUK, V. ; DRESSLER, D. ; DANZ, T. ; RANGELow, I.W. ; KOKKORIS, G. ; GOGOLIDES, E. ; GOODYEAR, A. ; COOKE, M.: Integrated plasma processing simulation framework, linking tool scale plasma models with 2D feature scale etch simulator. In: *Microelectronic Engineering* 86 (2009), Nr. 4-6, 976 - 978. <http://dx.doi.org/DOI:10.1016/j.mee.2009.02.012>. – DOI DOI: 10.1016/j.mee.2009.02.012. – ISSN 0167-9317. – MNE '08 - The 34th International Conference on Micro- and Nano-Engineering (MNE)

- [144] *Dry etching with gas chopping without rippled sidewalls*. Bd. 17. AVS, 1999 . – 2768–2771 S.
- [145] RHEE, Hyongmoo ; LEE, Hae M. ; NAMKOUNG, Yun M. ; KIM, Chang-Koo ; CHAE, Heeyeop ; KIM, Yil W.: Dependence of etch rates of silicon substrates on the use of C₄F₈ and C₄F₆ plasmas in the deposition step of the Bosch process. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 27 (2009), Nr. 1, 33-40. <http://dx.doi.org/10.1116/1.3039690>. – DOI 10.1116/1.3039690
- [146] MOTOMURA, Hideki ; IMAI, Shin ichi ; TACHIBANA, Kunihide: Surface reaction processes in C₄F₈ and C₅F₈ plasmas for selective etching of SiO₂ over photo-resist. In: *Thin Solid Films* 390 (2001), Nr. 1-2, 134 - 138. [http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0040-6090\(01\)00948-8](http://dx.doi.org/DOI:10.1016/S0040-6090(01)00948-8). – DOI DOI: 10.1016/S0040-6090(01)00948-8. – ISSN 0040-6090
- [147] OEHRLEIN, G. S. ; ZHANG, Y. ; VENDER, D. ; HAVERLAG, M.: Fluorocarbon high-density plasmas. I. Fluorocarbon film deposition and etching using CF₄ and CHF₃. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 12 (1994), Nr. 2, 323-332. <http://dx.doi.org/10.1116/1.578876>. – DOI 10.1116/1.578876
- [148] OEHRLEIN, G. S. ; ZHANG, Y. ; VENDER, D. ; JOUBERT, O.: Fluorocarbon high-density plasmas. II. Silicon dioxide and silicon etching using CF₄ and CHF₃. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 12 (1994), Nr. 2, 333-344. <http://dx.doi.org/10.1116/1.578877>. – DOI 10.1116/1.578877
- [149] VOLLAND, B. E. ; IVANOV, Tzv. ; RANGELOW, I. W.: Profile simulation of gas chopping based etching processes, AVS, 2002, 3111-3117
- [150] PAUL, A. K. ; RANGELOW, I. W.: Fabrication of high aspect ratio structures using chlorine gas chopping technique. In: *Microelectronic Engineering* 35 (1997), Nr. 1-4, 79 - 82. [http://dx.doi.org/10.1016/S0167-9317\(96\)00157-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0167-9317(96)00157-8). – DOI 10.1016/S0167-9317(96)00157-8. – ISSN 0167-9317. – Micro- and Nano- Engineering 96

- [151] RANGELOW, Ivo W.: High-resolution tri-level process by downstream-microwave rf-biased etching, SPIE, 1991, 180-184

Symbolverzeichnis

λ	de-Broglie-Wellenlänge
λ_{therm}	thermische de-Broglie-Wellenlänge
V_{RF}	Amplitude der Anregungsspannung der Probenelektrode
ρ	Dichte
σ	Wirkungsquerschnitt
$I(x \rightarrow x')$	Zweipunkt-Transportintensität
n_x	volumenbezogene Teilchendichte, Konzentration der Teilchensorte x
f	Bidirektionale Reflexionsfunktion (BDRF)
n_0	Ladungsdichte
Θ	Belegungsgrad, Bedeckungsgrad einer Monomolekularen Schicht
σ_A	Wirkungsquerschnitt
V_{DC}	DC-Bias-Spannung
λ_D	Debye-Länge
DR	Depositionsrate senkrecht zur Oberfläche
E_{kin}	kinetische Energie von Teilchen
n_e	Elektronendichte
m_e	Elektronenmasse
T_e	Temperatur des Elektronengases

ϵ_0 Dielektrizitätskonstante, elektrische Feldkonstante

e_0 Elementarladung

\mathcal{ADF} Winkelverteilungsdichtefunktion

\mathcal{EDF} Energiedichteverteilungsfunktion

μ Mittelwert der Normalverteilung

Ω Raumwinkelgebiet über das integriert wird

σ Varianz der Normalverteilung

θ Elevationswinkel

$\vec{\omega}$ Raumwinkel

sh Abschattungsgrad

T Temperatur

V elektrisches Potenzial

ER Ätzrate senkrecht zur Oberfläche

m_g Masse eines Gasmoleküls

Ω_{HK} Raumwinkel der sichtbaren Halbkugel

n_I Ionendichte

m_I Ionenmasse

E Bestrahlungsstärke

k_B Boltzmann Konstante

Kn Knudsen Zahl

K_L Langmuir-Koeffizient

\bar{v} mittlere Geschwindigkeit

λ_{MFP} Mittlere freie Weglänge

θ_{\perp}	Winkelabweichung von der Oberflächennormale
n	Teilchendichte, Konzentration
Φ	Teilchenfluss
ϕ	Teilchenflussdichte
N	Teilchenanzahl
ω_P	Plasmafrequenz
V_P	elektrisches Plasmapotenzial
P	Gasdruck
P	Wahrscheinlichkeit
p	Wahrscheinlichkeitsdichte
B	spezifische Ausstrahlung
S	Reaktionswahrscheinlichkeit
ρ	Reflektivität
L	spezifische Intensität (Emmissionsleistung per Fläche per Zeit und per Raumwinkel)
u, v	Geschwindigkeit
c_s	Schallgeschwindigkeit
Ω_K	Raumwinkel der Kugel
V	Volumen
V_W	elektrisches Potenzial der Reaktorwandung
D	Diffusionskoeffizient
h	Planksches Wirkungsquantum

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wäre nicht möglich gewesen, ohne die außergewöhnlich gute und inspirierende Zusammenarbeit mit Prof. Dr. Ivo W. Rangelow. Ihm sei an dieser Stelle herzlich für die Vergabe des Themas und die umfassende Betreuung gedankt.

Diese Arbeit wäre nicht möglich gewesen ohne die sehr enge Zusammenarbeit mit Dr. Burkhard E. Volland, der mir jederzeit ein hilfreicher Diskussionspartner und Ratgeber bei theoretischen und praktischen Fragen im Zusammenhang mit dem Thema war.

Ein Dank gilt auch meinen Kollegen Valentyn Ishchuk, Alexander Reum und Tobias Danz sowie Tim Gnörrlich für ihre Mitarbeit an der Entwicklung der Simulationssoftware und dem intensiven Gedankenaustausch während des Projektes.

Danken möchte ich auch den Projektpartnern des NanoPlasma Projektes ohne deren Beiträge zur Simulationssoftware und die Unterstützung bei der Durchführung von Experimenten die Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Mein besonderer Dank gilt Dr. George Kokkoris und Dr. Evangelos Gogolides vom IMEL Demokritos Institut, Athen für die Bereitstellung der Gasphasenmodule und die fruchtbaren Diskussionen zur Verbesserung der Softwareschnittstelle.

Danken möchte ich auch Dr. Mike Cooke und Dr. Andy Goodyear von Oxford Instruments Plasma Technologies, die unserer Gruppe die Experimente am Reaktorprototyp ermöglichten.

Nicht zuletzt danke ich den Bürgern der Europäischen Union für die Finanzierung meiner Arbeit im Rahmen des NanoPlasma Projektes.

Ein sehr herzlicher Dank gilt meinen Eltern und Freunden die auf ihre Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Diese Arbeit wurde durchgeführt im Rahmen des EU Projektes

NanoPlasma – Plasma etching for desired nano-feature shape and nanotexture: an advanced reactor and simulation software for feedback-loop plasma control

gefördert durch die Europäische Kommission
Sechstes Framework Programm 2002-2006
(Vertrag Nr. 016424)

Thesen

1. Niederdruckplasmen sind zum Ätzen und der Oberflächenbehandlung kleinster Strukturen geeignet. Die kapazitive oder induktive Erzeugung hat entscheidenden Einfluss auf die physikalischen Eigenschaften des Plasmas.
2. Die Verteilung und Bewegung von neutralen und geladenen Plasmaspezies wird durch Adsorption, Desorption, Reflexion und physikalisch-chemische Reaktionen an Oberflächen bestimmt.
3. Die relevanten Reaktionen der Plasmaspezies mit den Oberflächen sind das Sputtern, chemisches Ätzen, ionenunterstütztes Ätzen und die Plasma-Polymer-Deposition.
4. Durch Computersimulation kann die räumliche Verteilung der Spezies und die Evolution der Mikrostrukturen während des Prozesses vorhergesagt werden.
5. Für die Simulation der Mikrostrukturierung werden effiziente Verfahren aus der Computergrafik adaptiert und mit Hilfe der Finiten Elemente Methode berechnet.
6. Für die exakte Vorhersage der Form von Mikrostrukturen sind die geometrischen Formfaktoren der Oberflächen zueinander zu berechnen. Die effiziente Approximation der Formfaktoren ist mit dem entwickelten Verfahren durchführbar.
7. Der Transport ungeladener Spezies des Plasmas innerhalb von Mikrostrukturen ist durch Lambertsche-Reflexion an Oberflächen dominiert.
8. Die Verteilung von Ionen wird durch direkten Ionenfluss aus dem Plasma und spiegelnde Reflexion an Oberflächen bestimmt. Ein globales Strahlungsmodell und die effiziente iterative Berechnung wurden in der Arbeit entwickelt.
9. Die Simulation verschiedener Plasma-Material-Systeme wurde mit dem integrierten Plugin-Konzept der entwickelten Simulationssoftware realisiert. Die Software ermöglicht sowohl die graphisch-interaktive als auch eine skriptbasierte Simulation von Prozessen.
10. Die Verifikation der entwickelten Modelle und die Validierung der Simulationssoftware erfolgt durch Vergleich von Simulationen mit realen Ätz- und Depositionsexperimenten in drei Plasmareaktoren.