

Name: Dipl. Phys. Benjamin Schröder

Titel der Dissertation: Modellierung und Simulation eines plasma-ionengestützten Beschichtungsprozesses

Kurzfassung

Die Arbeit befasst sich mit der Beschreibung des Plasmas in einem Plasma-Ion-Assisted Deposition (PIAD) Prozess. Dieser Prozess entspricht einer Dampfabscheidung, wird aber zusätzlich durch ein Plasma unterstützt, das in einiger Entfernung (ca. 80 cm) von den zu beschichtenden Substraten erzeugt wird. Dieses Plasma expandiert und tritt am Substrat mit der aufwachsenden Schicht über den Energieeintrag schneller Ionen in Wechselwirkung. Durch diesen Energieeintrag lassen sich selbst auf temperaturempfindlichen Substraten hochwertige optische Schichten herstellen. Der Prozess findet in einer Vakuumkammer mit einem Hintergrundgasdruck von typischerweise 0.02 Pa statt.

Für das expandierende Plasma wird ein Modell in Radialsymmetrie entwickelt. Aufgrund des sehr niedrigen Druckes kann dabei keine reine Fluidbeschreibung angewandt werden. Die Ionen werden in zwei Gruppen aufgeteilt, nämlich in schnelle Strahlionen und langsame Sekundärionen, wobei letztere durch resonanten Ladungsaustausch der Strahlkomponente mit dem Hintergrundgas erzeugt werden. Die Eigenschaften der Strahlkomponente sind über eine vereinfachte Boltzmann-Gleichung gegeben, während die Sekundärkomponente durch fluiddynamische Gleichungen beschrieben wird. Für die nahezu stoßfreien Elektronen wird Boltzmann-Gleichgewicht angenommen. Daraus leitet sich eine quasi-lineare Differentialgleichung erster Ordnung ab, welche die Geschwindigkeit der Sekundärkomponente beschreibt. Die möglichen Lösungen der Gleichung besitzen kritische Punkte und Singularitäten, die einerseits physikalisch interpretiert werden und andererseits Randbedingungen liefern. Über die Lösung der Gleichung unter der Annahme sinnvoller, aus experimentellen Daten folgenden Parameter erhält man eine vollständige Beschreibung der orts aufgelösten Dichten und Flussdichten der primären und sekundären Ionenkomponente, sowie aufgrund der Quasineutralitätsbedingung ebenfalls der Elektrodendichte. Ausserdem folgt aus dem Modell das elektrische Feld, welches für die Berechnung der Ionen-Geschwindigkeits- und Winkelverteilung genutzt wird. Dazu wird eine Ionen-Monte-Carlo-Simulation entwickelt, in der mit Hilfe des im Strahlmodell berechneten elektrischen Feldes die Bewegungsgleichungen für die Ionen gelöst werden. Dabei werden die elastischen Stöße und Ladungsaustauschstöße auf statistischem Weg durch die Nullstoß-Methode berechnet. Durch die Berücksichtigung von durch Ladungsaustausch entstehenden schnellen Neutralen als zusätzliche Spezies in der Simulation stellt sich heraus, dass diese für den Energieübertrag auf das Substrat ebenfalls relevant sind. Es wird gezeigt, dass die Ionen-Geschwindigkeitsverteilung und andere Plasmagrößen im Vergleich mit experimentellen Daten qualitativ und quantitativ gute Übereinstimmungen liefern.

In einem weiteren Schritt soll das Plasma im inneren Bereich der Advanced Plasma Source beschrieben werden. Dazu wird der Weg über ein kinetisches Modell der Elektronen eingeschlagen. Dieser Weg berücksichtigt die starke Magnetisierung der Elektronen in der Quelle und trägt den großen freien Weglängen Rechnung. Über eine Transformation des Ortsraums auf Flusskoordinaten und eine Transformation des Geschwindigkeitsraums auf Gyrokoordinaten wird die Struktur und der Einfluss des Magnetfelds auf die Elektronenbewegung in der kinetischen Gleichung abgebildet. Durch eine Störungsrechnung wird eine Gleichungshierarchie aufgestellt. Die Lösung der Gleichungen erfolgt zum einen durch sinnvolle Annahmen über die Abhängigkeiten der einzelnen Anteile der Verteilungsfunktion. Dazu gehört insbesondere die Annahme der Nichtlokalität. Zum anderen wird eine Mittelung über die schnelle Gyrationbewegung vorgenommen, um die letzte Gleichung von Störtermen höherer Ordnung zu entkoppeln. Nach einer zusätzlichen Winkelmittelung bezüglich der Geschwindigkeit sowie einer räumlichen Mittelung entlang der Feldlinien wird eine Gleichung für die Verteilungsfunktion niedrigster Ordnung gewonnen, die nur von der Gesamtenergie und einer Flusskoordinate abhängt. Diese hat die für praktische Rechnungen sehr günstige Form einer inhomogenen Diffusionsgleichung.