

Particle Transport in Technological Plasmas

Die Oberflächenprozessierung mittels Zerstäubungsplasmen findet breite Anwendung in der Abscheidung von metallischen und keramischen Dünnschichten. Vereinfacht dargestellt werden Atome aus einem Festkörperpräkursor herausgeschlagen und anschließend durch die Prozesskammer transportiert, bis sie auf eine Wand treffen und abgeschieden werden. Für eine präzise und verlässliche Vorhersage der intrinsischen physikalischen Vorgänge, ist die Kenntnis über die relevanten Dichten $n_s(\vec{r}, t)$ und Flüsse $\vec{I}_s(\vec{r}, t)$ aller Teilchenspezies s unerlässlich. In der Dünnschichtabscheidung betrifft dies insbesondere die Flüsse und Energiebeiträge der jeweiligen Spezies auf die Oberfläche. Eine theoretische Vorhersage dieser Kenngrößen ist unmittelbar mit einer konsistenten Beschreibung des Teilchentransports innerhalb der Gasphase verknüpft.

Letztere gibt gleichermaßen das Thema dieser Arbeit vor: Angestrebt wird eine physikalisch konsistente Modellierung des Transports zerstäubten Metalls durch eine inerte Gasphase. Zerstäubungsprozesse werden in der Regel bei niedrigen Prozessgasdrücken $p \lesssim 1$ Pa betrieben. In diesem Regime sind nur kinetische Ansätze anwendbar. Dies lässt sich mithilfe der Knudsen-Zahl $Kn = \lambda/L$ abschätzen, welche durch das Verhältnis aus mittlerer freier Weglänge λ und einer typischen Systemlänge L bestimmt ist (beide größenordnungsmäßig einige Zentimeter). Eine Knudsen-Zahl $Kn \gtrsim 0.5$ deutet auf das Regime der Übergangsströmung hin, welches nur kinetisch hinreichend beschrieben wird. Für dessen Beschreibung sind die Verteilungsfunktionen $f_s(\vec{r}, \vec{v}, t)$ der Teilchenspezies s von entscheidender Bedeutung. Diese quantifizieren inhärent die vormals dargelegten Kenngrößen $n_s(\vec{r}, t)$ und $\vec{I}_s(\vec{r}, t)$ mittels entsprechender Momente.

In dieser Arbeit werden zuerst die theoretischen Gesichtspunkte kinetischer Transportphänomene und die relevanten physikalischen Aspekte von Niederdruckplasmen dargelegt. Die Monte Carlo (MC) Methode wird nachfolgend als ein ausgewählter statistischer Simulationsansatz vorgestellt. Die konzeptionellen Besonderheiten einiger darauf aufbauender Modellvarianten, wie der »Test Particle Method« (TPM), des »Direct Simulation Monte Carlo« (DSMC) Ansatzes und des »Particle In Cell« (PIC) Schemas, werden erörtert. Die Diskussion wird mit der Ausarbeitung eines kinetischen Schwerteilchenmodells (genannt KHP: »Kinetic Heavy Particle«) abgeschlossen, welches im Rahmen dieser Arbeit entworfen und implementiert wurde.

Eine vereinfachte Version des KHP-Modells, welche lediglich neutrale Schwerteilchen berücksichtigt, findet Anwendung in der kinetischen Simulation der Gasströmung und des Transports zerstäubter Teilchen. Konkret werden drei Prozesskammern und Entladungsregime betrachtet: Ein »Multi Frequency Capacitively Coupled Plasma« (MFCCP), ein »Direct Current Magnetron Sputtering« (dcMS) Prozess und eine »High Power Impulse Magnetron Sputtering« (HiPIMS) Entladung. Nur wenn notwendig, wird das Prozessgas (Argon; häufig angenommen als stationärer Hintergrund) dynamisch in die Berechnung miteinbezogen. Die Ergebnisse weisen die kinetische Natur der Transportphysik nach, z.B. die Interaktion nicht-thermischer Teilchenflüsse.

Das vollständige KHP-Modell wird abschließend für die einheitliche kinetische Beschreibung von Neutralen und Ionen verwendet. Das Modell wird zuerst mithilfe eines systematischen Vergleichs mit einem PIC-Modell validiert. Ferner werden vereinfachte Elektronenmodelle für eine konsistente Schwerteilchenbeschreibung in dcMS und HiPIMS-Prozessen herangezogen. Hiermit stehen schließlich Energieverteilungsfunktionen $f_s(\epsilon, \vartheta, \varphi)$ an den Oberflächen zur Analyse von *a priori* vorhergesagten elektrischen Potentialstrukturen in HiPIMS-Entladungen zur Verfügung.