

1

Auszug aus dem Jahresbericht 2017
Zur aktuellen Website: www.ist.fraunhofer.de

MODELLIERUNG DER BESCHICHTUNG AUF 3D-BAUTEILEN

Beschichtungen auf 3D-Substraten gewinnen in immer mehr Anwendungsbereichen zunehmend an Bedeutung. Beispiele sind optische Schichtsysteme auf Linsen oder die Beschichtung gewölbter Fahrzeug- oder Display-Scheiben. Mittels kinetischer Simulationsverfahren lassen sich Beschichtungsprozesse im Niederdruckbereich modellieren und damit auch das Schichtdickenprofil vorhersagen. Im Gegensatz zu planen Flächen spielt bei 3D-Substraten auch der Substratwinkel in Relation zur Beschichtungsquelle eine wichtige Rolle. Bei 3D-Substraten, die während der Beschichtung bewegt werden, müsste daher die Bewegungssequenz in kleine Schritte unterteilt und für jeden Teilschritt eine Beschichtungssimulation durchgeführt werden. Da dies sehr zeitaufwändig ist, wurde am Fraunhofer IST ein Verfahren zur Beschleunigung der Simulation des Schichtdickenprofils auf 3D-Substraten entwickelt.

Das Simulationsverfahren

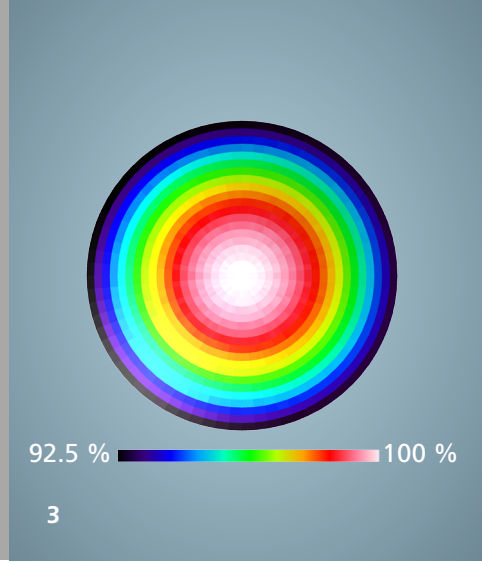
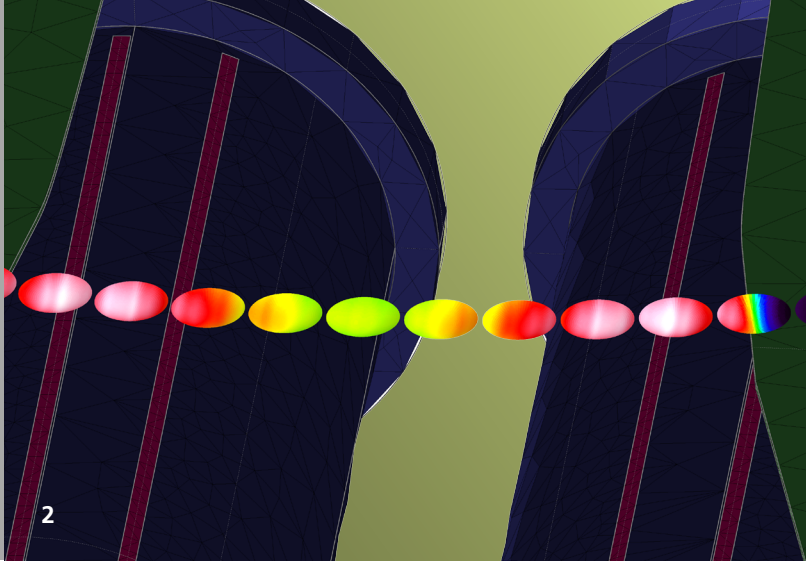
Zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in Niederdruck-Beschichtungsprozessen eignet sich das »Direct Simulation Monte Carlo« (DSMC)-Verfahren. Dieses beschreibt die Bewegung von Molekülen und Atomen mittels repräsentativer Simulationsteilchen und stellt einen statistischen Ansatz zur Lösung der Boltzmann-Transportgleichung dar. DSMC eignet sich z. B. zur Modellierung der Gasströmung und des Schichtdickenprofils beim Magnetron-Sputtern. Im Fall bewegter 3D-Substrate wäre die Unterteilung der Bewegungssequenz in viele Teilschritte mit jeweiliger Durchführung einer DSMC-Rechnung jedoch zu zeitaufwändig.

Das neuentwickelte Simulationsverfahren erfordert hingegen lediglich eine einzelne DSMC-Simulation. In dieser wird in einer substratnahen Ebene das Teilchenflussprofil sowohl orts- als auch winkelaufgelöst erfasst und als Datensatz abgespeichert. Damit lässt sich in einem nächsten Schritt das Schichtdickenprofil für 3D-Substrate in beliebigen Positionen mittels eines schnellen Ray-Tracing-Verfahrens berechnen, bei dem das orts- und winkelaufgelöste Teilchenstromprofil auf die Substratflächen an den jeweils unterschiedlichen Positio-

nen projiziert wird. Dies ist zulässig, da für den verbleibenden geringen Abstand zwischen Ebene und Substrat die Streuung im Gas vernachlässigt werden kann. Somit ermöglicht dieses Verfahren eine schnelle Berechnung des Schichtdickenprofils bei bewegten 3D-Substraten mit feiner Auflösung der Bewegungssequenz. Ein Beispiel für eine orts- und winkelaufgelöste Teilchenstromverteilung in einem Modell einer Sputterkammer ist in Abbildung 1 dargestellt.

Beispiel: Dynamische Beschichtung einer Linse

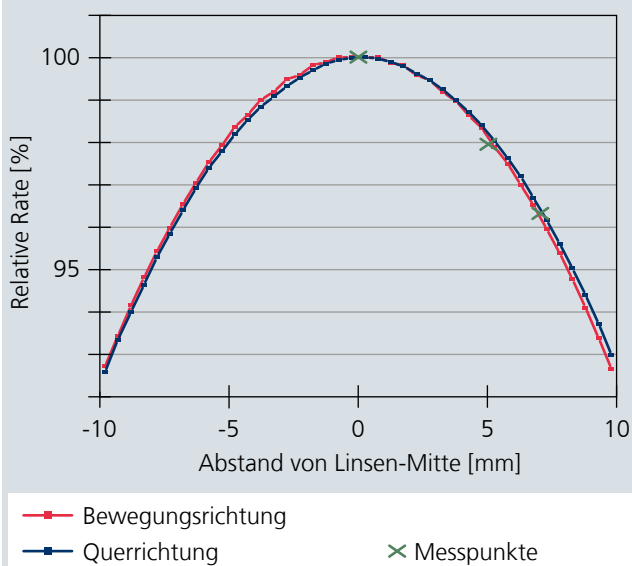
Ausgehend von dem in Abbildung 1 gezeigten Teilchenstromprofil und der gewählten Blendenform kann mittels des Ray-Tracing-Verfahrens die Beschichtung einer sphärischen Linse, die auf einem Drehteller durch die Beschichtungszone bewegt wird, auf schnelle Weise berechnet werden. Die Linse hat einen Durchmesser von 20 mm und auf der konvexen Seite einen Krümmungsradius von 25,8 mm. Abbildung 2 zeigt die partiellen Beschichtungsprofile auf der Linsenfläche für unterschiedliche Positionen des Bewegungsablaufs sowie das daraus resultierende Gesamtprofil. Die Diskretisierung der Drehtellerbewegung erfolgt im Gesamtprofil mit einer Winkelgenauigkeit von 0,1 °, die Rechenzeit hierfür beträgt auf



einer Einzel-CPU nur wenige Sekunden, und das resultierende Ratenprofil auf der Linse deckt sich in guter Näherung mit den Messdaten (vgl. unten stehendes Diagramm).

Das neue kombinierte Berechnungsverfahren ermöglicht eine effiziente Berechnung und Optimierung der Schichtdickenverteilung und lässt sich prinzipiell auf beliebig gekrümmte Substratformen erweitern.

Gerechnetes Beschichtungsprofil auf der Linsenfläche in Bewegungsrichtung des Drehtellers (rot) und in Querrichtung (schwarz) im Vergleich mit Schichtdickenmessungen.



1 *Simuliertes Teilchenstromprofil gesputterter Atome an der Substratebene und Winkelverteilungsfunktionen an ausgewählten Punkten.*

2-3 *Teil-Beschichtungsprofile einer Linse an verschiedenen Positionen (2) und das dazugehörige Gesamtprofil (3).*

KONTAKT

Dr. Andreas Pflug
 Telefon +49 531 2155-629
 andreas.pflug@ist.fraunhofer.de