# Zur thermomechanischen Modellierung von Annealprozessen für große Silizium-Waferscheiben

Von der Fakultät für Maschinenbau, Elektrotechnik und Wirtschaftsingenieurwesen der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktor - Ingenieurs genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Diplom - Ingenieur Johannes Studener geboren am 12.03.1977 in Leipzig

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. C. Leyens Gutachter: Prof. Dr.-Ing. A. Kühhorn Gutachter: Prof. Dr.-Ing. C. Egbers Tag der mündlichen Prüfung: 14.06.06

# Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl Strukturmechanik und Fahrzeugschwingungen der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus im Rahmen einer Zusammenarbeit mit der Firma Siltronic AG.

Zunächst möchte ich meinem Betreuer und Gutachter Herrn Prof. A. Kühhorn für seine hervorragende wissenschaftliche Betreuung und die fachliche Unterstützung danken. Herrn Prof. Egbers sei im Rahmen seiner Gutachtertätigkeit und Herrn Prof. Leyens für den Prüfungsvorsitz gedankt.

Herrn Dr. T. Müller, sowie allen am Projekt beteiligten Mitarbeitern der Firma Siltronic AG möchte ich hiermit für die gute Zusammenarbeit danken.

Herrn K.-H. Trautmann von der DLR Köln/Institut für Werkstoffforschung danke ich für die gute Zusammenarbeit und die Durchführung der Zugversuche zur Bestimmung der temperaturabhängigen Fließgrenze von Silizium.

Für die Durchführung der Versuche zur Bestimmung der Reflexionseigenschaften von Waferoberflächen danke ich Herrn Dr. U. Fischer und Herrn Dr. T. Häusler vom Lehrstuhl Angewandte Physik/Thermophysik der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus.

Mein ganz persönlicher Dank gilt allen Mitarbeitern des Lehrstuhls Strukturmechanik und Fahrzeugschwingungen, welche insbesondere durch ihre Verbesserungsvorschläge einen großen Anteil am erfolgreichen Zustandekommen dieser Arbeit geleistet haben.

Meiner Schwester und meinem Vater danke ich für das Korrekturlesen dieser Arbeit.

Cottbus, Juli 2006 Johannes Studener

III Zusammenfassung

# Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit einem Prozeßschritt bei der Herstellung von Siliziumwafern, welche als Ausgangsprodukt für Halbleiterbauelemente dienen. Die Wafer durchlaufen bei der Herstellung unterschiedliche Prozesse, unter anderem das Annealing. Während des Anneals werden intrinsische Kristalldefekte, sog. Crystal originated Pits (COPs), bei über 1000°C thermisch aufgelöst. Der Temperaturbereich liegt dabei 200-300 °C unterhalb der Schmelztemperatur von Silizium. Demzufolge ist die Fließgrenze extrem herabgesetzt, so daß es infolge mechanischer und thermischer Belastungen zum Vergleiten (Fließen) im Kristallgitter und damit zur Qualitätsbeeinträchtigung kommen kann.

Es wird erstmals aus mechanischer Sicht der komplexe Annealprozeß mit allen Einzelaspekten simulatorisch abgebildet und quantitativ erfaßbar gemacht. Dabei wird zum Einen das Ziel verfolgt, ein Lagerungskonzept zu entwickeln, welches den Ansprüchen an Reinheit, Temperaturbeständigkeit und Herstellbarkeit gerecht wird und zum Anderen den gesamten Anneal - Prozeß so zu gestalten, daß die Ausbeute von Wafern pro Zeiteinheit maximiert wird, ohne mit unerwünschten Vergleitungen rechnen zu müssen.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in einen Grundlagenteil und einen praktischen Teil. Wesentlich für die Erfassung des Prozesses im Simulationsmodell sind verschiedene Effekte, welche zunächst theoretisch anhand einfacher analytischer und numerischer Beispiele, sowie versuchstechnisch aufgearbeitet werden sollen. Die in der Arbeit untersuchten Effekte beziehen sich auf:

- die besonderen Materialeigenschaften des Silizium Einkristalls, insbesondere dessen temperaturabhängige Fließgrenze ( $\underline{U}$ pper  $\underline{Y}$ ield  $\underline{S}$ tress)
- das Lagerungskonzept, verbunden mit Kontaktproblemen zwischen Wafer und Lager (Support)
- das Biegeproblem im Wafer
- das Aufheizproblem bedingt durch die Wärmeübertragungsmechanismen Strahlung (zwischen Ofenwand und Wafer/Support), Leitung (innerhalb des Wafers und des Supports) und Konvektion des Gases (innerhalb des Ofens)

Im praktischen Teil soll der Anneal mit Hilfe von Simulationssoftware (Finite Elemente Methode, Computational Fluid Dynamics), durch Optimierung der Lagerung und des Aufheizprozesses verbessert werden. Für die Bearbeitung dieses Kapitels werden die Untersuchungen aus dem theoretischen Teil der Arbeit als Referenz herangezogen.

Summary IV

# Summary

In this work a production step of silicon wafers, which is a semifinished part of semiconductor products, is discussed. Many different processes are necessary for fabrication of wafers, amongst others the annealing. During the annealing intrinsic crystal defects, so called crystal originated pits (COPs), are thermal disintegrated. The process temperature is defined above 1000°C (200-300°C lower than melting point). Hence, the yield point is considerable reduced. The silicon material may be yield during mechanical and thermal loads. Caused by this effect, the quality of the wafer is decreased.

The complex anneal-process is quantitative simulated including all single aspects for the first time. The intentions are:

- to develop a support concept, which satisfy the requirements of cleanness, producibility and temperature resistance,
- to improve the process, which maximise the production of wafers without any yield on the wafers.

The present work is divided into a basic and a applied chapter. For a better understanding of the whole anneal-process the simulation model has to include different effects of significance. These effects are discussed using simple analytical and numerical examples as well as experimental investigations. This effects refer to:

- the special material properties of silicon single crystal, in particular the temperature dependent <u>upper yield stress</u> (UYS)
- the support concept, considering the problem of contact stress between wafer and support
- the bending problem in the wafer
- the heating-up problem, caused by heat transfer including radiation (between furnace and wafer/support), conduction (inside the wafer and support) and convection of gas (inside the funace).

The applied chapter includes the optimisation of the support concept and the improvement of the heating process. The used simulation tools are <u>finite element method</u> (FEM) and <u>computational fluid dynamics</u> (CFD). The studies of the theoretical part are used as reference for the simulation of processes.

V Symbolverzeichnis

# Symbolverzeichnis

# Lateinische Symbole

a	[m],[mm]	Kontaktflächenradius
A	$[m^2]$	Fläche
A	[-]	Anisotropiefaktor
$c_0$	[m/s]	Vakuumlichtgeschwindigkeit $c_0 = 2,9979 \times 10^8 \text{ m/s}$
$\begin{matrix} C_{ly} \\ C_{uy} \\ C\end{matrix}$	[MPa]	experimentell ermittelte Konstante für den LYS
$C_{uv}$	[MPa]	experimentell ermittelte Konstante für den UYS
C	[-]	Integrationskonstante
$c/c_p$	[J/kg/K]	spezifische Wärmekapazität
d	[m]	Waferdurchmesser
E	$[kN/m^2]$	E-Modul
F	[kN]	Kraft
$F_{k-j}$	[-]	Formfaktor zwischen Oberfläche k und j
$G^{k-j}$	$[kN/m^2]$	Schubmodul
Gr	[-]	Grashof-Zahl
g	$[m/s^2]$	Erdbeschleunigung
h	[Js]	Planck-Konstante $h = 6.626 \times 10^{-34} Js$
k	$[W/m^2/K]$	Leitfähigkeit von Silizium
k		Stefan-Boltzmann Konstante =1,380658e -23 J/K
1	[J/K]	Sliplänge
	[m]	- <del>-</del>
$L'_{s\lambda}$	$[W/m^2]$	spektrale Strahldichte
m M/	[-]	Spannungsexponent
M'	$[W/m^2]$	gerichtete spezifische Ausstrahlung
Nu	[-]	Nußelt-Zahl
$N_a$	$[mol^{-1}]$	Avogadro-Konstante $6,0221367 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$
n	[-]	Konstante
n	[-]	Kriechexponent/Spannungsexponent
p	[N/mm <sup>2</sup> ]	Kontaktpressung
p	[Pa]	Gasdruck
$\mathbf{p}_0$	[N/mm <sup>2</sup> ]	Kontaktpressung im Zentrum der Kontaktfläche
P	[kN]	Lagerkraft
Pr	[-]	Prandtl-Zahl
q	[kN/m]	Linienlast
$q_{a, k}$	$[W/m^2]$	spezifische Ausstrahlung der Oberfläche k
Q	[eV]	Aktivierungsenergie
Q	[W]	Wärmeleistung
r	[m]	Radius
R	[K/s],[K/min]	Ramprate
R	[J/mol/K]	allgemeine Gaskonstante $R = 8,314$ J/mol/K
$R_{\mathfrak{q}}$	[m]	Mittelrauhwert
$R_s^q$	[m]	Krümmungsradius der Lagerfläche
Si	[-]	Silizium
SiC	[-]	Siliziumcarbit
S	[m]	Schichtdicke
T	[K],[°C]	Temperatur
$T_0$	[K]	Temperatur in der Mitte des Wafers
U		1

Symbolverzeichnis VI

$\begin{array}{c} T_{a0} \\ \Delta T \\ \dot{T} \\ t \\ u \\ U \\ v \\ v_0 \\ w \end{array}$	[K] [K/s] [M],[mm] [m],[mm] [eV] [m/s] [m/MPa/s] [m],[mm]	Starttemperatur Temperaturdifferenz Ramprate Waferdicke Abstand zum Zentrum der Kontaktfläche Aktivierungsenergie Versetzungsgeschwindigkeit materialabhängige Konstante, hier 2.64 eV Waferabstand untereinander (Pitch)
<u>Griechisch</u>	<u>he Symbole</u>	
$egin{array}{c} \alpha & & & \\ \alpha & & & \\ \alpha_T & & & \\ \beta & & & \end{array}$	[W/m²/K] [-] [1/m] [1/K]	Wärmeübergangskoeffizient Absorptionskoeffizient Wärmeausdehnungskoeffizient linearisierter Ausdehnungskoeffizient für Gas
$\varepsilon$	[1/s] [-] [-] [-] [-]	Dehnungsrate Dehnung/Verzerrung Emissionskoeffizient Radialverzerrung Umfangsverzerrung Schubverzerrung
$\dot{\epsilon}_{ ext{II}}$	[1/s]	Kriechrate
$\eta \\ \theta$	[Pa s] [rad]	dynamische Viskosität Raumwinkel
$_{i}^{o}\lambda_{j}^{R}$	[-]	Schmidfaktor der Gleitebene i und Gleitrichtung j
$\lambda$ $\lambda$ $\nu$ $\nu$ $\rho$ $\rho$ $\sigma$ $\sigma$ $\sigma$ $\sigma$ $\tau_{r\phi}$	[W/m/K] [m] [-] [m²/s] [kg/m³] [-] [J/K] [N/mm²] [N/mm²] [N/mm²]	Wärmeleitfähigkeit Wellenlänge Querdehnzahl kinematische Viskosität Dichte Reflexionskoeffizient Stefan-Boltzmann Konstante =1,380658e-23 J/K Spannung Radialspannung Umfangsspannung Schubspannung
$\boldsymbol{\tau}_{ly}$	[MPa]	lower yield stress (LYS)
$\tau_{\mathrm{uy}}$	[MPa]	upper yield stress (UYS)
τ <sup>n</sup> k R	[MPa]	Kristallschubspannung (resolved shear stress)
k R i <sup>τ</sup> j o R	[MPa]	kubische Kristallschubspannung der Gleitebene i und Gleitrichtung j
o R i <sup>τ</sup> j	[MPa]	Oktaederschubspannung der Gleitebene i und Gleitrichtung j Raumwinkel
$\stackrel{ extsf{\phi}}{\Omega}$	[rad] [-]	Beiwert zur Vereinfachung der Wärmespannungsberechung

VII Symbolverzeichnis

# Vektoren, Matrizen und Tensoren

b BurgersvektorC ElastizitätsmatrixD Verzerrungstensor

e; Einheitsvektor der Gleitebene i und Gleitrichtung j

i**e**j Einheitsvekt **e** Basisvektor **F** Kraftvektor

F Kraftvektor

Normaleneiheitsvektor der Oktaedergleitebene i

Normaleneiheitsvektor der kubischen Gleitebene i

 $egin{array}{lll} R & & & & & & \\ R & & & & & & \\ S_{\alpha\beta} & & & & & \\ \textbf{U} & & & & & \\ \textbf{V} & & & & & \\ \textbf{Geschwindigkeitsvektor} & & & \\ \end{array}$ 

st Spannungsvektor der Gleitebene i

 $\sigma/\sigma_{ij}$  Spannungstensor  $\Phi$  Dissipationsfunktion  $\Delta$  Laplace-Operator  $\nabla$  Nabla-Operator div Divergenz grad Gradient

# Tiefgestellte Indizes

a außena ausgestrahltdiff diffus

eingestrahlt e gesamt ges innen i i Gleitebene i Oberfläche i i Gleitrichtung j Oberfläche k k kon konvektiver Anteil Strahlungsanteil rad

s bezogen auf den schwarzen Körper

sp spiegelnd

λ wellenlängenabhängig

# **Hochgestellte Indizes**

' gerichtet

gerichtet-gerichtet

k kubisch o oktaeder

# Abkürzungen und Fachbegriffe

Anneal Glühprozeß zur Auflösung von  $\rightarrow$  COPs im  $\rightarrow$  Wafer

Boat Haltevorrichtung für → Wafer und → Support

CFD Computational Fluid Dynamics

COP <u>Crystal Originated Pits</u> - Kristalldefekte

DGL <u>Differentialgleichung</u>

DLR Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt

Elevator Hubeinrichtung

FEM <u>Finite Elemente Methode</u>

IC <u>Integrated Circuit</u> - Integrierter Schaltkreis LYS <u>Lower Yield Stress</u> - untere Streckgrenze

Pinlager Punktlager

Pitch Waferabstand im Vertikalofen Ramprate Aufheizgeschwindigkeit

Rod vertikale Abstützungen innerhalb des → Boats

RTA Rapid Thermal Anneal  $\rightarrow$  Annealprozeß mit hohen  $\rightarrow$  Rampraten

Si Silizium SIC Siliziumcarbit

SIRD Scanning Infrared Depolarization Technique

Slip plastische Verformungen im → Wafer entlang bestimmter Gleitrichtungen

Slug Rohling

Support Lagervorrichtung für → Wafer

Suszeptor Vorrichtung zur verbesserten Wärmeaufnahme während der → UYS-Messungen

UYS <u>Upper Yield Stress</u> - obere Streckgrenze

Wafer einkristalliner, kreisscheibenförmiger Halbleiter, hier Siliziumwafer

IX Inhaltsverzeichnis

# Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung	1
2.	Allgemeines	3
	2.1 Halbleitertechnik, Waferproduktion	. 3
	2.2 Anneal Prozeß	. 6
	2.2.1 Beschreibung des Gesamtprozesses.	. 6
	2.2.2 Aufteilung in Teilprobleme	. 8
	2.2.2.1 Das Lagerungsproblem	. 8
	2.2.2.2 Das Wärmetransportproblem	11
	2.2.2.3 Das thermomechanische Gesamtproblem	13
	2.3 Stand der Technik	15
	2.3.1 Allgemein	15
	2.3.2 Kontakt- und Biegespannungen	15
	2.3.3 Wärmespannungen	16
	2.3.4 Upper Yield Stress (UYS)	19
3.	Physikalische Grundlagen	22
	3.1 Besonderheiten des thermomechanischen Verhaltens des Si-Einkristall-Werkstoffes	S .
	3.1.1 Allgemeines	22
	3.1.1.1 Hooke'sches Gesetz für einkristallines Silizium	22
	3.1.1.2 Thermische Materialkonstanten	24
	3.1.2 Gleitsysteme und projezierte Schubspannungen des kubisch-flächenzentrierter Kristalls	
	3.1.2.1 Oktaeder - Gleitsysteme	26
	3.1.2.2 Kubische Gleitsysteme	29
	3.1.2.3 Schmid-Faktoren bei einachsigem Spannungszustand	31
	3.1.3 Die experimentelle Bestimmung der elastischen Grenze bzw. des "Upper Yiele Stress"	
	3.1.3.1 Versuchsaufbau, Versuchsdurchführung	
	3.1.3.2 Ergebnisse	34
	3.1.3.3 Auswertung	

<u>Inhaltsverzeichnis</u> X

3.2 Die Lagerungskontaktproblematik
3.2.1 Halbanalytische Bestimmung der Kontaktspannungen
3.2.2 Numerische Untersuchungen
3.2.3 Problematik der FE - Diskretisierung
3.2.4 Zusammenfassung zu den gravitationsinduzierten Spannungen
3.3 Besonderheiten der Wärmeübertragung
3.3.1 Reine Leitung
3.3.1.1 Berechnung der Temperaturverteilung im Wafer
3.3.1.2 Berechnung des Verschiebungs-, Verzerrungs- und Spannungsfeldes . 56
3.3.1.3 Ermittlung der Kristallschubspannungen
3.3.2 Wärmestrahlung
3.3.2.1 Allgemeines, Begriffe, spiegelnde und diffuse Oberflächen 62
3.3.3 Numerische Umsetzung. 67
3.3.3.1 Netto Strahlungsmethode für diffuse Oberflächen 67
3.3.3.2 Netto Strahlungsmethode für spiegelnde Oberflächen 69
3.3.3.3 Weitere Berechnungsmethoden für Strahlung
3.3.3.4 Strahlungsverhalten im Spalt bei spiegelnden/diffusen Oberflächen 71
3.3.4 Leitung und Konvektion im Ofeninnenraum
3.3.4.1 Grundlagen und analytische Abschätzung des Wärmeüberganges 72
3.3.4.2 Numerisches Konvektionsmodell
3.3.4.3 FE-Wärmestrahlungsmodell mit Netto-Strahlungsmethode 78
4. Untersuchung realer, thermomechanischer Anneal - Prozesse mit unter-
schiedlichen Support Konzepten 81
4.1 Wafer ohne Lagerung im Vertikalofen
4.1.1 Temperaturverteilung im Wafer
4.1.1.1 Modellbeschreibung
4.1.1.2 Auswertung der Ergebnisse
4.1.1.3 Wärmespannungen
4.2 Wafer mit Lagerung im Vertikalofen
4.2.1 Temperaturen, Wärmespannungen
4.2.1.1 Modellannahmen, Modellbeschreibung

XI Inhaltsverzeichnis

6.	Ouellenverzeichnis 1	04
5.	Zusammenfassung und Ausblick 1	02
	4.4.2 Entwicklung eines empirischen Ersatzmodells unter Berücksichtigung spiegelne Oberflächen	
	4.4.1 Entwicklung eines Bemessungsmodells für eine vereinfachte Rampratenoptim rung im Vertikalofen	
	4.4 Hinweise und Empfehlungen	98
	4.3.2 Ergebnisse	94
	4.3.1 Das Modell	94
	4.3 Rapid Thermal Anneal (RTA)	94
	4.2.3 Überlagerung von Biege- und Wärmespannungen	91
	4.2.2.2 Auswertung der Ergebnisse	90
	4.2.2.1 Das Kontaktmodell	89
	4.2.2 Biegespannungen	89
	4.2.1.3 Wärmespannungen / maximale Kristallschubspannungen	87

# 1. Einleitung

# Allgemein

Während Halbleiterbauelemente in früherer Zeit fast ausschließlich im Bereich der Informations- und Datenverarbeitung eingesetzt wurden, findet man sie heute in fast allen technischen Erzeugnissen. Exemplarisch seien hier die Bereiche Telekommunikation oder Regelungs- und Automatisierungstechnik genannt. Der Bedarf nach Halbleiterbauelementen ist aus diesem Grund stetig gewachsen und ein Ende dieser Entwicklung ist nicht abzusehen. Gleichzeitig stehen die Hersteller unter einem enormen Kosten- und Innovationsdruck. Um hier konkurrenzfähig zu bleiben, ist ein Zusammenwirken von unterschiedlichen Disziplinen innerhalb der gesamten Prozeßkette notwendig.

# *Annealproze* $\beta$

Als Halbzeug von integrierten Schaltkreisen wird im Allgemeinen ein Halbleiter verwendet. Unter einem Halbleiter versteht man ein Material, welches je nach Dotierung (Anreicherung von Fremdatomen) eine bestimmte Leitfähigkeit besitzt. Als Halbleiter kommen verschiedene Materialien in Frage, unter anderem Silizium. In Form von einkristallinen, dünnen Siliziumscheiben (Wafer) werden diese an den Chiphersteller ausgeliefert. Die Herstellung von Wafern unterliegt einer sehr genau festgelegten Reihe von Bearbeitungsschritten (Abschnitt 2.1). Diese Arbeit befaßt sich mit einem solchen speziellen Bearbeitungsschritt, dem sogenannten Anneal (Abschnitt 2.2).

Mit dem Anneal bezeichnet man im Allgemeinen einen thermischen Vorgang, bei dem die Wafer auf über 1000 °C aufgeheizt werden. Der Anneal ist notwendig, damit sich Kristalldefekte an der Waferoberfläche auflösen.

Für den Hersteller ist hier von entscheidender Bedeutung, möglichst viel nutzbare, d.h. defektund vergleitungsfreie Waferfläche pro Zeiteinheit zu erreichen. Deshalb sind die Durchmesser der Wafer kontinuierlich auf heute bis zu 300 mm vergrößert worden. Die nutzbare Fläche vergrößert sich gegenüber den üblichen 200 mm Wafern um den Faktor 2,25.

Aus struktureller Sicht hat ein größerer Wafer aber auch Nachteile. Die deutlich höheren Eigenlasten, sowie die vergrößerte thermische Masse führen zu einem erhöhten Spannungsniveau während des hier untersuchten Annealing - Prozesses. Dieses hohe Spannungsniveau führt, zusammen mit einer sehr niedrigen Fließgrenze von Silizium, zu Vergleitungen (Slip) und damit zu Qualitätseinbußen. Dieses Problem ist auch schon bei 200 mm Wafern aufgetreten und konnte unter verhältnismäßig geringem technischen Aufwand bisher weitestgehend vermieden werden. Die Umstellung auf 300 mm Wafer hat das Problem weiter verschärft, welches nähere theoretische und experimentelle Untersuchungen notwendig macht.

#### **Motivation**

Experimentelle Untersuchungen bezüglich der Slipentstehung während des Anneals beschränken sich bisher auf die Durchführung von Versuchsprozessen mit anschließender Beurteilung hinsichtlich der entstandenen Vergleitungen. Die Anbringung von Meßeinrichtungen (Temperatursensoren, Dehnungsmeßstreifen, etc.) zur Überwachung des gesamten Prozesses ist sehr aufwändig und steht nur in wenigen Fällen zur Verfügung. Weiterhin sind Versuche immer mit der Belegung von Produktionsanlagen verbunden, wodurch sich ein erheblicher Kosten- und Zeitaufwand ergibt.

Mit der Simulation des Anneal-Prozesses ergeben sich folgende Vorteile:

2 1. Einleitung

- ein tiefergehendes Verständnis für die thermomechanischen Zusammenhänge während des Anneals

- Maßnahmen zur Verbesserung der Lagerung des Wafers
- die Möglichkeit der Prozeßoptimierung
- umfangreiche Parameterstudien bei geringem Kosten und Zeitaufwand

Im Zusammenspiel mit einzelnen ausgewählten experimentellen Untersuchungen können die Prozeßmodelle schließlich unter einem vertretbaren Kosten- und Zeitaufwand validiert werden.

# Stand der Forschung und Zielstellung

Bisherige Arbeiten zu diesem Thema (Abschnitt 2.3) beschränken sich entweder nur auf einzelne ausgewählte Teilbereiche dieses Prozesses oder geben in den vorgestellten Gesamtmodellen den Prozeß unbefriedigend wieder. Desweiteren werden viele Effekte, welche für die Modellierung von großer Bedeutung sind, nur unzureichend behandelt (z.B. Kontaktspannungen, Kristallschubspannungen, temperaturabhängige Fließgrenze von Si über 1000 °C). Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines thermomechanischen Gesamtmodells, welches den Annealprozeß ausreichend genau abbildet. Unter Verwendung dieses Modells verspricht man sich eine vergleitungsfreie Prozeßführung bei maximalem Waferdurchsatz, unter voller Ausnutzung der Produktionsanlagen sowie mit möglichst geringem Investitionsaufwand.

# 2.1 Halbleitertechnik, Waferproduktion

Gewinnung von Silizium (Abbildung 2.3 a)

Als Ausgangsmaterial für IC's werden Halbleiter (z.B. Silizium, Germanium) verwendet, wobei Silizium heutzutage am häufigsten zum Einsatz kommt. Rohsilizium wird aus Quarzsand in einer Reaktion bei Zugabe von Kohlenstoff unter 1413 °C gewonnen.

$$SiO_2 + 2C \rightarrow Si + 2CO$$
 (2.1)

Um eine ausreichende Reinheit des so gewonnenen Siliziums zu gewährleisten, erfolgt eine Destillation. Dabei wird Rohsilizium unter Chlorwasserstoff zu Trichlorsilan (Gleichung (2.2)), welches sich dann bei erneutem Aufheizen auf 1400 °C als hochreines polykristallines Silizium abscheidet (Gleichung (2.3)).

$$Si + 3HCl \rightarrow SiHCl_3 + 2H_2 \tag{2.2}$$

$$SiHCl3 + 2H2 \rightarrow Si + 3HCl$$
 (2.3)

Kristallziehen (Abbildung 2.3 b)

Im anschließenden Produktionsschritt wird aus dem polykristallinen Silizium ein Monokristall gezüchtet. Für die Kristallzüchtung gibt es zwei verschiedene Verfahren:

# (I) Das Czochralski-Verfahren

Bei diesem Verfahren wird das polykristalline Silizium in einem Schmelztiegel mittels Widerstandsheizung auf 1440 °C im Hochvakuum aufgeheizt und geschmolzen. In diese Schmelze können eventuell erforderliche Dotierstoffe (z.B. Bor, Phosphor) hinzugefügt werden. Ein einkristalliner Impfling wird nun in die Siliziumschmelze getaucht. Dieser Impfling wird mit einer kontinuierlichen Kristall- und Tiegelrotation langsam aus dieser Schmelze gezogen. Dabei lagert sich das erstarrte Silizium in der vom Impfling vorgegebenen Kristallorientierung an, so daß nach einiger Zeit ein einkristalliner Stab entsteht. Die Ziehgeschwindigkeit entscheidet über den Durchmesser des Siliziumstabes (Abbildung 2.1, Abbildung 2.3 a).

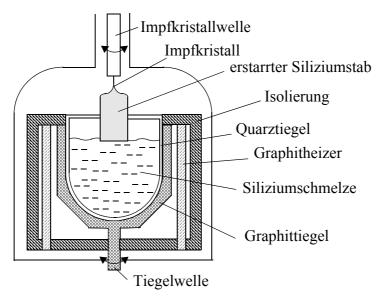


Abbildung 2.1:Kristallzüchtung mittels Czochralski-Verfahren in Anlehnung an [4] und [2]

# (II) Das Zonenziehverfahren

Beim Zonenziehverfahren schmilzt man das Polysilizium an seiner unteren Stelle an und taucht in den angeschmolzenen Bereich den Impfkristall. Wie auch beim Czochralski-Verfahren lagert sich das erstarrende Silizium in der gewünschten Kristallorientierung unter einer kontinuierlichen Drehbewegung langsam an. Durch langsames Bewegen der HF - Spule nach oben wächst nun der Einkristall zu einem langen Stab. Der Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, daß weniger Verunreinigungen in das Silizium dringen können (Abbildung 2.2), denn ein großer Teil der Verunreinigungen im Czochralski-Kristall stammt aus dem Tiegel(höhere Widerstände sind möglich, Oi - Konzentration ist 2 Größenordnungen kleiner)

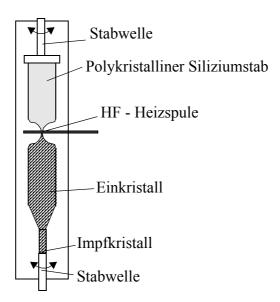


Abbildung 2.2: Kristallzüchtung mittels Zonenziehverfahren in Anlehnung an [4] und [2]

Nach der Kristallzüchtung erfolgt das Absägen der beiden Enden des Kristallstabes, da diese nicht für die weitere Verarbeitung zu Wafern geeignet sind. Um den Kristall auf den gewünsch-

ten Durchmesser zu bringen, wird der Einkristall auf ein bestimmtes Maß abgedreht und mit Flats oder Notchs (kleine Einfräsungen) versehen, um die Kristallorientierung anzugeben.

Zersägen (Abbildung 2.3 c)

Zum Zersägen des Einkristallstabes in einzelne Waferscheiben gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten. Bei kleinen Durchmessern verwendet man die Innenlochdiamantsäge, bei der der Kristallzylinder in das Innenloch eines diamantbesetzten Sägeblattes eingeführt und zu Waferscheiben zersägt wird. Bei größeren Durchmessern wird der Kristallrohling mittels Drahtsäge, welche als ein endloser Metalldraht über Umlenkrollen verläuft, in einzelne Wafer zerlegt.

Kantenabrundung, Oberflächenvergütung (Abbildung 2.3d)

Silizium ist bei Raumtemperatur ein sehr sprödes Material. Um ein Ausbrechen der Ränder zu verhindern, müssen die Waferkanten abgerundet werden.

Im Zerschneideprozeß werden Wafer mit viel zu unregelmäßigen Oberflächen erzeugt. Damit wären sie als Träger für Halbleiterbauelemente ungeeignet. Beim Schleifen und/oder Läppen werden diese Unregelmäßigkeiten an der Oberfläche mechanisch beseitigt. Die Atome werden dabei bis in einige Mikrometer Tiefe aus ihrem Kristallgefüge herausgerissen. Dies führt dazu, daß die Oberfläche mikroskopisch geschädigt ist.

Mit einem nachträglichen Ätzen wird dieser geschädigte Bereich abgetragen, so daß eine rauhe aber kristallographisch fehlerfreie Oberfläche entsteht.

Diese durch das Ätzen entstandene Oberflächenrauhigkeit wird anschließend durch ein nachträgliches Polieren entfernt. Das Polieren geschieht im Wesentlichen chemisch und nicht mechanisch, so daß eine weitere Oberflächenbeschädigung infolge mikroskopischer Materialausbrüche ausgeschlossen ist.

Am Ende der Prozeßkette steht ein Wafer mit sehr genau festgelegten Spezifikationen. Dies betrifft insbesondere den Waferdurchmesser, die Waferdicke, die Dickentoleranz, die Oberflächenebenheit, die Kristallorientierung sowie die Dotierung. Im einfachsten Fall wird der Wafer mit diesen Spezifikationen als polierter Wafer ausgeliefert (Abbildung 2.3g).

# <u>Crystal Originated Pits (COPs) - Kristalldefekte</u>

Die Entwicklungen auf dem Chipsektor, insbesondere die Verkleinerungen der Halbleiterstrukturen, führen zu immer größeren Anforderungen an die Oberflächenqualität des Wafers. Damit werden meist weitere Bearbeitungsschritte vom Chiphersteller gefordert.

Ein spezielles Problem stellen Kristalldefekte, sogenannte Crystal Originated Pits (COPs), dar. Diese vermindern die Leistungsfähigkeit von integrierten Schaltkreisen und führen zur Verschlechterung verschiedener elektrischer Parameter. Die Ursachen für COPs liegen im Czochralski-Ziehverfahren und im nachträglichen Polieren und Reinigen der Waferoberfläche. COPs besitzen eine Oktaederform mit einer Größe von ~0,1-0,15  $\mu$ m und sind mit einer 2-4 nm dicken Oxidschicht überzogen. Die Anzahl dieser Defekte auf der Waferoberfläche liegt bei  $1-10~{\rm cm}^{-2}$ .

#### Epitaxie (Abbildung 2.3e)

Im Epitaxieverfahren werden COPs durch das Aufbringen einer möglichst homogenen einkristallinen Schicht vermieden. Dabei dient der Wafer als Träger für die aufzubringende Si-Schicht. Bei hohen Temperaturen (900-1200 °C) scheidet sich das zersetzende Prozeßgas (üb-

licherweise Silane) als Silizium auf dem Träger ab und bildet somit eine verunreinigungsfreie und defektfreie Oberfläche.

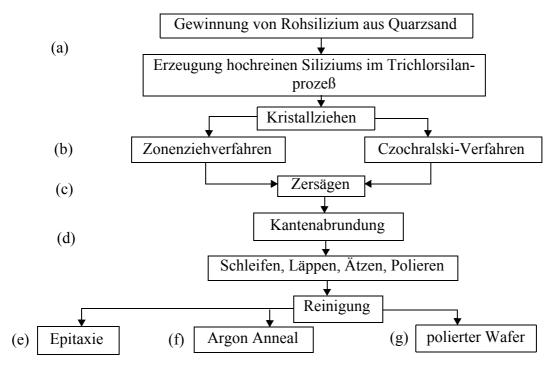


Abbildung 2.3 Überblick über die Herstellung von Wafern

#### 2.2 Anneal Prozeß

## 2.2.1 Beschreibung des Gesamtprozesses

Auflösung von COPs im Anneal

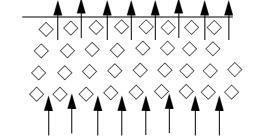
Eine alternative Methode zur Epitaxie stellt die Auflösung der COPs im Anneal (Abbildung 2.3f) dar. Bei diesem Vorgang wird der Wafer auf eine Temperatur von bis zu 1200 °C aufgeheizt. Nach 1-2 Stunden findet man eine COP-freie Oberfläche bis in eine Tiefe von 10 μm vor. Hintergrund für die Auflösung der Defekte ist die stabilisierende Oxidschicht auf den Innenwänden der COPs. Bei den hohen Temperaturen wird der Sauerstoff gelöst und diffundiert aus dem oberflächennahen Bereich heraus (Abbildung 2.4a). Das führt dazu, daß die verbleibenden Hohlräume durch Eigen-Siliziumatome aufgefüllt werden. Der oberflächennahe Bereich ist damit COP-frei. Mit Argon als Prozeßgas wird eine Oxidation oder Nitridierung zwischen der Atmosphäre und dem Silizium verhindert.

Im Waferinneren reichert sich der Sauerstoff in Form von Oxidpräzipitaten an (Abbildung 2.4b), welcher zusätzliche Metallkontaminationen aus der Waferunterseite bindet und die Waferoberfläche frei von Verunreinigungen hält.

2.2 Anneal Prozeß

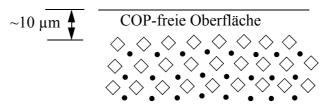
COPs heilen im oberflächennahen Bereich aus

(a) während des Anneals



Anreicherung von Sauerstoff in den COPs als Präzipitate

(b) nach dem Anneal



Waferinneres mit Oxidpräzipitaten angereichert

Abbildung 2.4: Auflösung von <u>Crystal Originated Pits</u> (COPs) beim Anneal in Anlehnung an [5] und [6]

# Slipentstehung

Die Entstehung lokaler Vergleitungen im Wafer (Slip) ist mit diesem Prozeß verbunden, welche nach Möglichkeit vermieden werden müssen. Bei Temperaturen von ~1000°C und höher, ist die Fließgrenze von Silizium stark herabgesetzt. Mit der Fließgrenze bezeichnet man den Übergang vom elastischen zum plastischen Materialverhalten, bei deren Überschreitung es zu irreversiblen plastischen Verformungen (Gleitungen) kommt. Diese treten linienförmig auf und sind vom Monokristall und damit vom Kristallgitter bevorzugten Gleitrichtungen vorgegeben. Eine Vergleitung (Slip) setzt dann ein, wenn eine Kristallschubspannung die Fließgrenze in einer der Gleitrichtungen überschreitet. Wafer mit Vergleitungen, haben verminderte Qualität, da hier das Kristallgefüge gestört ist.

Der Übergang von der 200 mm auf die 300 mm Technologie bereitete für den Annealprozeß in Bezug auf die Slipentstehung große Probleme. Aufgrund des größeren Eigengewichtes und der erhöhten thermischen Masse eines 300 mm Wafers wird das Wärme-, Kontakt-, und Biegespannungsniveau ebenfalls erhöht.

#### Ofenbauweise

Während für die 200 mm Technologie noch teilweise Horizontalöfen für den Anneal eingesetzt wurden (Abbildung 2.5), sind es bei 300 mm Wafern ausschließlich Vertikalöfen (Abbildung 2.6a). Die Vorteile von Vertikalöfen liegen in der vollautomatischen Beladung durch Roboter, in der geschlossenen Bauweise (im Ofeninneren herrscht Reinraumklasse 1) und der absoluten Gasdichtheit. Bei einer Lagerung im Horizontalofen liegen die Wafer unmittelbar an ihrer Aussenkante, was zu hohen Kontaktspannungen überlagert mit Wärmespannungen und somit zu Slipentstehung führt.

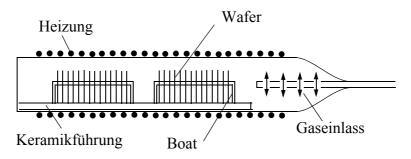


Abbildung 2.5: Prinzipskizze eines Horizontalofens

Im RTA-Prozeß (Rapid Thermal Anneal) besteht eine weitere Möglichkeit des Anneals (typischerweise kein COP - Anneal). Dazu kommen verschiedene Systeme zum Einsatz. Prinzipiell ist bei allen RTA - Systemen gleich, daß der Anneal mit nur einem Wafer unter hohen Rampraten und Temperaturen stattfindet. Im RTA nach Abbildung 2.6b wird nur ein Wafer in einer Heizkammer erhitzt. Diese Heizkammer wird vorwiegend von oben beheizt, wodurch ein in vertikaler Richtung von unten nach oben ansteigender Temperaturverlauf erzielt wird. Durch Veränderung der Position des Wafers mittels einer Haltevorrichtung (Elevator) kann dessen Temperatur gesteuert werden. Den hohen Waferdurchsatz erreicht man bei deutlich kürzeren Annealzeiten und höheren Temperaturen. Die Spannungen sind für die hohen Aufheiz- und Abkühlraten vergleichsweise niedrig, da alle Seiten des Wafers am Wärmeaustausch gleichmäßiger beteiligt sind.

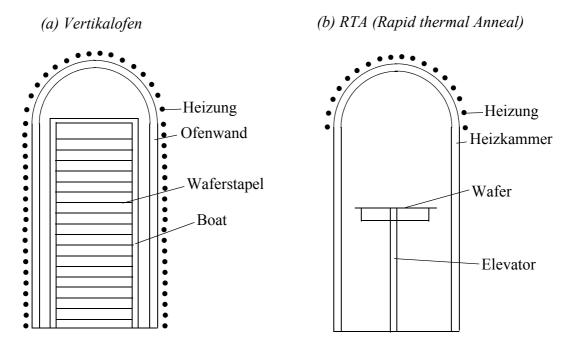


Abbildung 2.6: Prinzipskizze eines Vertikalofens und eines RTA - Ofens

# 2.2.2 Aufteilung in Teilprobleme

# 2.2.2.1 Das Lagerungsproblem

Die Lagerung der Wafer im Vertikalofen erfolgt über ein sog. Boat (Abbildung 2.7). Dieses

2.2 Anneal Prozeß

Boat besteht in der Regel aus 3 Rods. Aus mechanischer Sicht ideal wäre eine Anordnung der Rods im Winkel von jeweils 60° zueinander, da eine gleichmäßigere Stützung erfolgt. Dies ist insofern nicht umsetzbar, da ein Beladen des Boates mit Wafern nicht möglich wäre (Abbildung 2.7a). An den Rods sind jeweils in festen Abständen (Pitch, Abbildung 2.7b) Einschübe für die Lagerungen (Supports) vorgesehen, auf denen dann die Wafer mittels Laderoboter positioniert werden.

Für die Supportgeometrie gibt es 3 verschiedene grundsätzliche Konzepte:

- 1. Pinlagerung: Der Wafer liegt auf mehreren festen Lagerpunkten (Pins) auf. Variabel sind dabei die Anzahl der Pins, das Material (Silizium, Siliziumcarbit), die radiale Anordnung und der Krümmungsradius der Pinoberfläche.
- 2. Lagerung auf offenen, hufeisenförmigen Ringen auch Horseshoe Supports genannt: Die Wafer liegen flächig auf dem Support und es entstehen geringere Kontaktspannungen im Vergleich zur Pinlagerung, wobei das Beladesystem durch die offene Bauweise gegenüber der Pinlagerung nicht verändert werden muß. Der Supportinnenradius, die Oberfläche (insbesondere die Rauhigkeit) und das Material können variiert werden.
- 3. Lagerung auf geschlossenen Ringen (Abbildung 2.7): Diese Ringe sind ähnlich wie die Horseshoe Supports, jedoch ist ein spezielles Beladesystem erforderlich. Die Vorteile liegen in der höheren Steifigkeit der Ringe mit den damit verbundenen geringeren Verformungen.

Im RTA erfolgt die Lagerung ähnlich wie im Vertikalofen. Der Support wird ohne das Boat direkt von einer speziellen Haltevorrichtung gelagert.

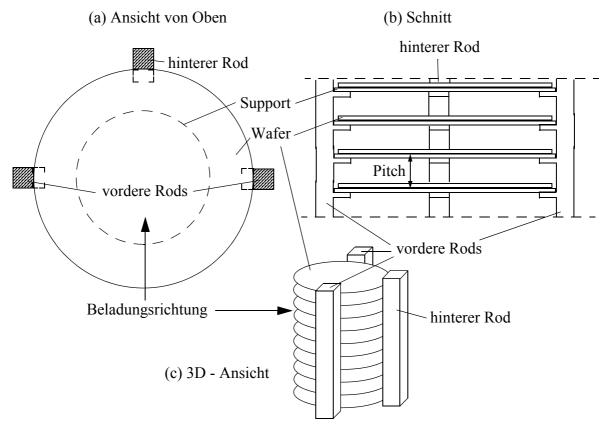


Abbildung 2.7: Lagerung der Wafer im Vertikalofen

Das Lagerungsproblem läßt sich mechanisch in 2 Teilprobleme unterteilen - Biegung und Kontakt.

# Biegung

Aufgrund der flächigen Ausdehnung und der verhältnismäßig kleinen Dicke eines Wafers ist eine Idealisierung als schubstarre Platte nach der Kirchhoff´schen Plattentheorie möglich. Je nach Lagerung stellt sich infolge des Eigengewichtes des Wafers eine Biegeverformung ein. Exemplarisch ist in Abbildung 2.8 das Verformungsbild aus einer FE-Rechnung für eine 4-Pin Lagerung dargestellt.

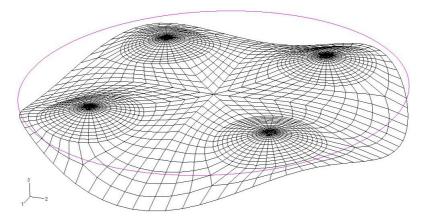


Abbildung 2.8: überhöhte Darstellung der Biegeverformung eines Wafers bei 4-Pin Lagerung (entnommen aus [7])

Verbunden mit der Verformung stellt sich ein linearer Spannungsverlauf über die Waferdicke mit einer Zug- und einer Druckzone ein (Abbildung 2.9).

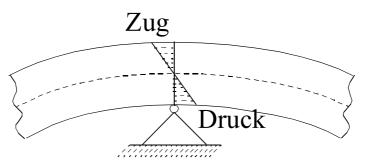


Abbildung 2.9: Biegespannungen im Wafer (entnommen aus [8])

#### Kontakt

Während mit Biegespannungen in der Regel auf dem gesamten Wafer zu rechnen ist, treten Kontaktspannungen im Gegensatz dazu nur lokal und unmittelbar im Bereich der Kontaktstellen auf (Abbildung 2.10). In den meisten technischen Anwendungen können Kontaktspannungen vernachlässigt werden. Die niedrige Fließspannung von Silizium bei hohen Temperaturen verbunden mit äußerst kleinen Kontaktflächen läßt dieses Problem aber nunmehr in den Vordergrund der mechanischen Betrachtungen rücken.

Im Kontaktbereich stellt sich im Allgemeinen ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen Bela-

2.2 Anneal Prozeß

stung und Verformung ein, was insbesondere die numerische Berechnung mittels FEM erschwert. In einigen Fällen können Kontaktspannungen aber auch analytisch nach der Hertz'schen Theorie berechnet werden.

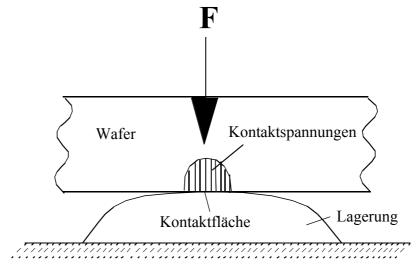


Abbildung 2.10: Kontaktspannungen bei Pinlagerung (entnommen aus [8])

# 2.2.2.2 Das Wärmetransportproblem

instationäres Temperaturfeld

Der Gesamtprozeß unterteilt sich in einen Aufheiz- und Abkühlvorgang, sowie das eigentliche Annealing (Abbildung 2.11, Abbildung 2.12). Wärmespannungen treten nur während der instationären thermischen Prozesse (Aufheiz- und Abkühlvorgang) auf. Während der stationären Annealphase werden die Wärmespannungen über den gesamten Wafer zu null. Von ganz entscheidender Bedeutung während des Aufheizens und Abkühlens sind die folgenden 3 Wärmetransportmechanismen:

- 1. Leitung findet innerhalb des Wafers, des Boats und des Supports statt. Entscheidende Parameter sind die thermische Masse und die Leitfähigkeit.
- 2. Strahlung ist nach dem Stefan-Boltzmann Gesetz bei den Prozeßtemperaturen der dominierende Wärmetransportmechanismus. Die Strahlung wird zwischen Oberflächen des Ofens, des Wafers, des Supports und des Boates ausgetauscht. Parameter für den Strahlungsaustausch sind Emissivität und Reflexionsverhalten.
- 3. Konvektion findet im Ofeninneren statt. Hierbei handelt es sich um erzwungene Konvektion, da der Ofenraum mit dem Prozeßgas Argon durchspült wird. Gegenüber der Wärmestrahlung nimmt die Konvektion eine untergeordnete Rolle ein (siehe Abschnitt 3.3.4) und soll in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt werden.

Der Wärmetransport findet beim Aufheizen von der Ofenwand in den Waferinnenbereich und beim Abkühlen in engegengesetzter Richtung statt. Trotz des instationären Prozesses stellt sich bei konstanter Aufheizgeschwindigkeit (Ramprate) eine nahezu konstante Temperaturdifferenz von Waferaußenkante und Wafermittelpunkt ein (leichte Abweichungen nur auf Grund der mäßig temperaturabhängigen Materialparameter). Meist handelt es sich um einen näherungsweise quadratischen Temperaturverlauf, der je nach Supportkonfiguration qualitativ ein wenig davon abweicht.

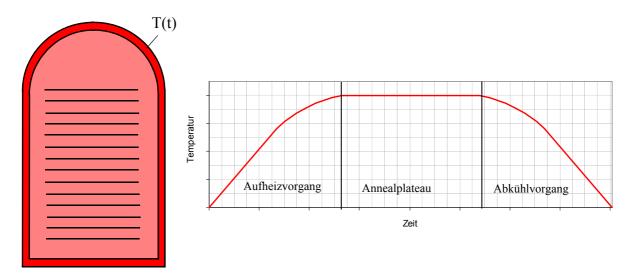


Abbildung 2.11: instationäres Temperaturfeld im Vertikalofen

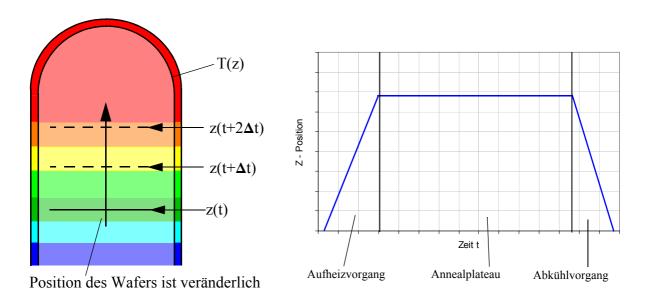


Abbildung 2.12: Temperaturfeld im untersuchten RTA-Aufbau

# Wärmespannungen

Folgende 2 Vorraussetzungen müssen erfüllt sein, um Spannungen in einer Struktur infolge Temperatur zu erzeugen:

1. innere oder äußere Zwängungen - dies ist beim Wafer als platten- bzw. scheibenartiges Tragwerk gegeben

#### und

2. zeitliche oder räumliche Temperaturunterschiede - der Aufheizvorgang geschieht am Außenrand des Ofens, wodurch ein Wärmestrom und somit Temperaturunterschiede vorhanden sind

2.2 Anneal Prozeß

Wie schon beschrieben stellen sich die Temperaturgradienten in radialer Richtung des Wafers ein. Die Temperaturgradienten über die Waferdicke sind dagegen vernachlässigbar. Dies führt dazu, daß sich im Wafer infolge der Temperatureinwirkung ein Scheibenspannungszustand einstellt.

### 2.2.2.3 Das thermomechanische Gesamtproblem

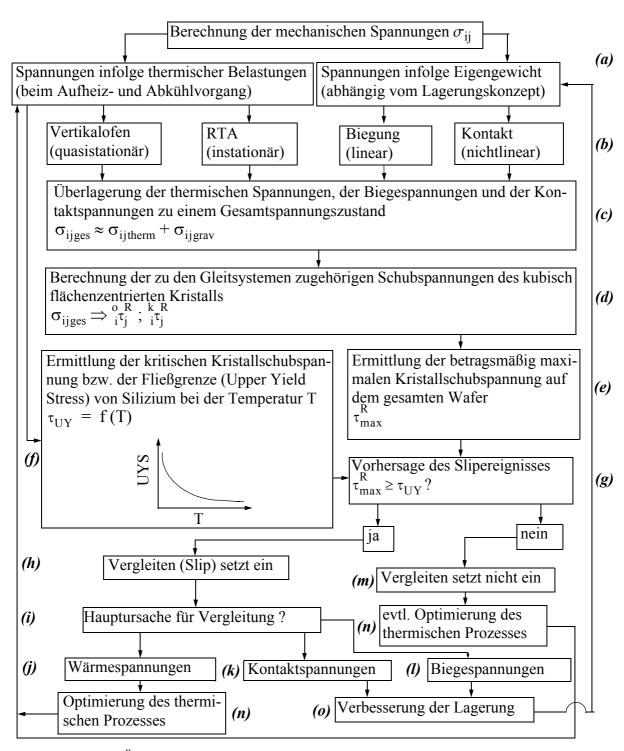


Abbildung 2.13: Übersicht über die Erstellung eines Simulationsmodells

Wie schon in den Abschnitten 2.2.2.1 und 2.2.2.2 beschrieben, wird das Gesamtproblem zunächst in das Supportproblem und das Wärmetransportproblem zerlegt (Abbildung 2.13a und b).

Man erhält aus den Teilmodellen jeweils einen Spannungszustand für den Wafer, welche zu einem Gesamtspannungszustand überlagert werden müssen (Abbildung 2.13c). Diese Überlagerung ist nur in diesem speziellen Fall zulässig, da es sich um kleine Verformungen mit linearelastischem Materialverhalten handelt. Desweiteren liegen die Verzerrungstensoren aus Kontakt- und Biegeproblem näherungsweise orthogonal zueinander, d.h. eine Verzerrung tritt bei Kontakt im Wesentlichen über die Waferdicke und bei Biegung in radialer und tangentialer Richtung auf. Somit lassen sich beide Probleme für den praktischen Anwendungsfall näherungsweise entkoppeln und entsprechend superponieren.

Da der Siliziumwafer ein kubisch flächenzentrierter Monokristall ist, tritt Slip immer in einer bestimmten Gleitebene entlang einer bestimmten Gleitrichtung auf. Dazu werden die projizierten Schubspannungen in den insgesamt 18 Gleitsystemen aus dem Spannungstensor ermittelt (Abbildung 2.13d).

Für den gesamten Prozeß muß über dem gesamten Wafer ein Überschreiten der Fließspannung ausgeschlossen sein, weshalb zunächst nur das betragsmäßige Maximum aus allen 18 Kristallschubspannungen im gesamten überlagerten Spannungsfeld interessant ist (Abbildung 2.13e). Die Simulation des instationären Aufheizprozesses erfolgt in diskreten Zeitschritten mit jeweils zugehörigen Temperaturen. Zu jeder Temperatur wird die experimentell ermittelte Fließgrenze herangezogen (Abbildung 2.13f).

Wird die Fließgrenze im Teilschritt des Prozesses nicht überschritten (Abbildung 2.13g), treten keine Vergleitungen im Wafer (Abbildung 2.13m) auf und der Prozeßschritt kann entweder noch weiter optimiert oder es kann zum nächsten Prozeßschritt übergegangen werden (Abbildung 2.13n).

Wird die Fließgrenze überschritten, tritt Slip auf (Abbildung 2.13h). Die maximale Kristallschubspannung, welche für die Vergleitung verantwortlich ist, muß nun hinsichtlich ihrer Hauptursache bewertet werden (Abbildung 2.13i). Dafür kommen Wärmespannung, Biegespannung und Kontaktspannung in Frage (Abbildung 2.13j,k,l). Zur Verringerung der Wärmespannung genügt es meist, den thermischen Teilprozeß (Abbildung 2.13n) weiter zu optimieren. Bei zu hohen Kontakt- und Biegespannungen muß ein neues Supportkonzept entwickelt werden (Abbildung 2.13o).

#### meßtechnische Verifikation

Mit den vorgegebenen Prozeß- und Supportparametern aus den Simulationsmodellen werden Versuche in den Öfen durchgeführt. Nach erfolgter Prozessierung dient das sogenannte SIRD (Scanning Infrared Depolarization Technique) zur Lokalisation von Slip auf dem Wafer [9]. Da Silizium bei Raumtemperatur für Infrarotlicht transparent ist, können die Gesetze der Spannungsoptik in diesem Wellenlängenbereich ausgenutzt werden. Dazu durchdringt ein linear polarisierter Laserstrahl mit einer Wellenlänge von 1,3 µm den Wafer. Dieser Laserstrahl tastet den gesamten Wafer ab. An den Stellen, bei denen Spannungen im Wafer auftreten, wird das Infrarotlicht depolarisiert. Auf der Waferrückseite befindet sich ein Detektor, in welchem das Licht in einen ordentlich und außerordentlichen Strahl aufspaltet und das Verhältnis aus beiden gebildet wird. Nach erfolgtem Abtasten kann ein Bild über den ganzen Wafer mit spannungsbehafteten und spannungsfreien Bereichen gewonnen werden. Die spannungsbehafteten Bereiche sind im Meßgerät ein Indiz für Slip.

2.3 Stand der Technik

#### 2.3 Stand der Technik

#### 2.3.1 Allgemein

Zur mechanischen Beschreibung der Slipentstehung werden nachfolgend verschiedene, bereits veröffentlichte Arbeiten näher erläutert. Schon in den 60er Jahren mit dem Aufkommen der ersten integrierten Schaltkreise wurde das Problem der plastischen Verformungen in Si-Wafern bei Hochtemperaturprozessen erkannt. In den ersten Arbeiten aus dieser Zeit findet sich zunächst nur das Wärmespannungsproblem beim Aufheiz- und Abkühlprozess. Mit größer werdenden Waferdurchmessern in den darauffolgenden Jahren gewann auch das Biege- und Kontaktspannungsproblem an Bedeutung. [10] gibt dazu einen historischen Überblick, wobei dort auch eine ganze Reihe wissenschaftlicher Veröffentlichungen bis zu diesem Zeitpunkt Erwähnung findet.

# 2.3.2 Kontakt- und Biegespannungen

# Kontaktspannungen

Die nichtlineare Kontaktproblematik und deren Einfluß auf die Slipentstehung im Wafer ist erst sehr spät erkannt worden.

Abhängig vom Lagerungskonzept wurde eine Kontaktfläche einfach angenommen, um mit dem Eigengewicht des Wafers die Kontaktspannungen zu berechnen. In [11] beträgt diese Kontaktfläche für Pinlagerungen 1 mm² und in [12] und [13] für Linien-, Ringlagerung 10000 µm \* 50 µm.

Die Gleichungen (2.4) und (2.5) aus [14] zeigen erstmalig die Nichtlinearität des Kontaktproblems auf. Hier wurde auch die Abhängigkeit des Krümmungsradius auf die Kontaktspannung erkannt.

$$\tau_c \approx \sqrt[3]{\frac{P \cdot E^2}{R_s^2}} \rightarrow \text{für Pin-/Kugellagerung}$$
 (2.4)

$$\tau_c \approx \sqrt{\frac{q \cdot E}{R_s}}$$
 -> für Linien-/Ringlagerung (2.5)

P Lagerkraft E - Modul

R<sub>s</sub> Krümmungsradius der Lagerfläche

q Linienlast

Diese Formeln leiten sich aus den Hertz'schen Kontaktformeln her und berücksichtigen näherungsweise durch einen Vorfaktor (Schmidfaktor/Siehe Abschnitt 3.1.2.3) die Kristallschubspannungen. Vernachlässigt wurde jedoch, daß die kritischen Schubspannungen nicht an der Kontaktfläche sondern im Waferinneren auftreten.

Dieses Problem unter Berücksichtigung der Nichtlinearität, der Spannungsmaxima im Waferinneren und der genauen Umrechnung in die Kristallschubspannungen ist somit bis heute nicht ausreichend untersucht worden.

# Biegespannungen

Die Bedeutung der Biegespannungen wurde erst 1995 in [15] erkannt. Zur Berechnung der Bie-

geverformungen für 6,8" und 12"-Wafer ist nach der Kirchhoffschen Plattentheorie ein Fourieransatz gewählt worden. Die Annahme einer Einspannung in der Mitte (Abbildung 2.14a) des Wafers als Lagerung ist bezüglich der tatsächlichen Lagerung nicht sinnvoll. Ebenfalls analytisch mittels Fourierreihe, jedoch mit passenden Randbedingungen für eine 3-Pinlagerung (Abbildung 2.14b), wurden die Biegespannungen in [16] berechnet.

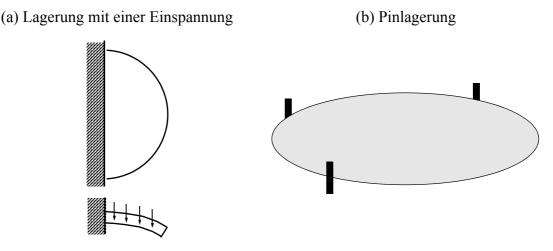


Abbildung 2.14 Lagerung in Anlehnung an [15] und [16]

[19] und [21] haben die Pinlagerung aufgegriffen und deren Position radial und tangential zur Minimierung der Biegespannungen optimiert. In [21] wurden auch erstmalig Kristallschubspannungen berechnet, welche sich allerdings nur auf die Oktaedergleitsysteme beschränken. Mit den aufkommenden Ringlagerungen wurde das Problem auch für Horseshoe-Supports (Abbildung 2.15) in [18] analysiert und in [17] und [20] mittels FEM numerisch gelöst.

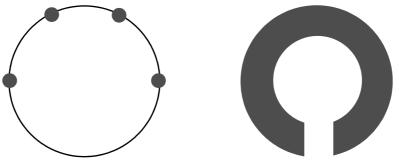


Abbildung 2.15 Lagerungen in Anlehnung an [17]

Ohne die Berücksichtigung der Verformbarkeit des Ringsupports und der sich daraus ergebenden nichtlinearen Kontaktproblematik bleibt das Biegeproblem unzureichend gelöst. Ebenfalls numerisch, nur unter Verwendung von 3D-Solid-Elementen (5 Elemente über die Waferdicke) sollte in [11] das Kontakt- und Biegeproblem in einem FE-Modell gelöst werden. Ein dabei verwendeter linearer Berechnungsalgorithmus unter Annahme einer Kontaktfläche stellt die Ergebnisse allerdings in Frage.

# 2.3.3 Wärmespannungen

analytische Prozeßmodelle

In der Literatur gibt es verschiedene Ansätze, die Wärmespannungen aus dem Aufheiz- und Abkühlprozess zu ermitteln. Im einfachsten Fall wurde ein rotationssymmetrischer Temperatur2.3 Stand der Technik

verlauf mit parabelförmigem Verlauf in radialer Richtung gewählt:

$$T(r) = T_0 + \Delta T \left(\frac{r}{R}\right)^2$$
 (2.6)

T Temperatur

T<sub>0</sub> Temperatur in der Mitte des Wafers

 $\Delta T$  radiale Temperaturdifferenz zwischen r = 0 und r = R

Der Temperaturverlauf ist in radialer Richtung des Wafers angenommen und für ein vorgegebenes  $\Delta T$  sind die Wärmespannungen  $\sigma_r$  und  $\sigma_\phi$  analytisch ermittelt worden (Siehe [12], [13] und [18]). Da  $\Delta T$  maßgeblich von der Aufheizgeschwindigkeit der Ofenwand und den Wärmeübertragungsmechanismen von Ofenwand zur Waferoberfläche abhängt, sind diese Ansätze nur bedingt brauchbar.

[16] und [17] geben für  $\Delta T$  eine analytische Lösung des Aufheizprozesses an:

$$\Delta T = \frac{R\rho c d^2}{16} \left[ k + 4,66\sigma T^3 w \left( \frac{w}{t} \right) \left( \frac{w}{d} \right)^{-1/4} \right]^{-1}$$
 (2.7)

R Ramprate

d Waferdurchmesser

w Waferabstand untereinander (Pitch)

t Waferdicke

k Leitfähigkeit von Silizium

ρ Dichte von Silizium

c spezifische Wärmekapazität σ Stefan-Boltzmann-Konstante

Diese Gleichung leitet sich aus der Wärmestrahlung zwischen Ofenwand und Wafer sowie der Wärmeleitung innerhalb des Wafers ab.

Einen analytischen Ansatz für einen unendlichen Waferstapel gab Hu [28] bereits 1969. Unter Verwendung der Netto-Strahlungsmethode für diffuse und spiegelnde Oberflächen wurden Reihen entwickelt, mit welchen der Wärmestrom zwischen Ofenwand und Wafer berechnet wurde. Mit der damals zur Verfügung stehenden Rechentechnik konnten diese Reihenansätze für endlich gestapelte Wafer unter Berücksichtigung der Wärmeleitung innerhalb des Wafers für einen Abkühlvorgang numerisch gelöst werden.

# Konvektion

Weiterhin liefert Hu [28] eine Abschätzung des konvektiven Anteils am Wärmetransport und somit eine Argumentation für dessen Vernachlässigung. Dieser Anteil beträgt nach [23] bei Strömungsgeschwindigkeiten von 0,01 m/s weniger als 5% vom Wärmestrahlungsanteil und nimmt bei zunehmender Temperatur weiter ab.

Für Horizontalöfen wurde mittels Netto-Strahlungsmethode für den Wärmestrahlungsaustausch und Finite-Differenzen-Methode für die Wärmeleitung in [27] ein numerisches Modell für 150 mm Wafer mit 5 und 10 mm Pitch entwickelt. Abweichend von [28] wird der Schwerpunkt der Simulationen auf den Be- und Entladevorgang gelegt. Bei den niedrigen Temperaturen (Wafertemperatur < 500 K) während dieser Vorgänge gewinnt wiederum die freie Konvektion an Bedeutung. Entsprechende Vergleiche zwischen Strahlungs- und Konvektionsanteil bei

verschiedenen Temperaturen wurden hier deshalb angestellt.

# numerische Prozeßmodelle

In [23] und [24] finden ebenfalls die Netto-Strahlungsmethode und die Finite-Differenzen-Methode Anwendung, jedoch abweichend zu [27] für Vertikalöfen im Temperaturbereich von 800 - 1200 °C. Eine Besonderheit stellt die Aufteilung des gesamten Ofenmodells in ein globales Ofenmodell, welches die stationäre Temperaturverteilung im Ofen und ein lokales Ofenmodell, welches die instationäre Temperaturverteilung in den einzelnen Wafern berechnet (Abbildung 2.16).

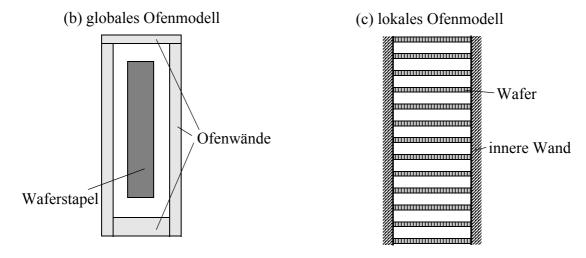


Abbildung 2.16 Ofenmodelle in Anlehnung an [23]

[25] ermittelt aus dem Wärmespannungsfeld die Kristallschubspannungen aus 5 Gleitsystemen. Unter Berücksichtigung der temperaturabhängigen Fließgrenze von Silizium gelingt eine Aussage über die maximalen Aufheizgeschwindigkeiten (Rampraten) in Abhängigkeit vom Waferabstand, jedoch ohne eine Überlagerung der Wärmespannungen mit den Biege- und Kontaktspannungen durchzuführen.

Eine vollständige Überlagerung von Biege- und Wärmespannungen wurde in [22] für einen Rapid Thermal Process (RTP) durchgeführt. Die Kristallschubspannungen beschränken sich allerdings nur auf die 12 Oktaedergleitsysteme. Unter Berücksichtigung semitransparenter Materialeigenschaften mit diffusem Reflexionsverhalten in einem Ray-Tracing-Monte Carlo-Strahlungsmodell und Konvektion in einem Strömungsmodell gelingt hier ein sehr realitätsnahes Gesamtmodell für den Aufheizprozeß.

#### Temperaturmessungen während des Prozesses

Neben den analytischen und numerischen Prozeßmodellen wurden in den 1960er Jahren [26] für 32mm Wafer Temperaturmessungen in Horizontalöfen durchgeführt. Durch die Anordnung der Meßpunkte an verschiedenen Positionen am Wafer konnte aus den gewonnenen Temperaturdaten das Spannungsfeld analytisch berechnet werden.

2.3 Stand der Technik

# 2.3.4 Upper Yield Stress (UYS)

untere Streckgrenze (LYS)

Eng verbunden mit der meßtechnischen Ermittlung der oberen Streckgrenze (Upper Yield Stress = UYS) fand in der Vergangenheit die Messung der unteren Streckgrenze (Lower Yield Stress = LYS) statt (Siehe Abbildung 3.12). Der LYS gehorcht ähnlichen Gesetzmäßigkeiten (insbesondere der Fließtheorie nach Haasen [29]) wie der UYS und stellt deshalb für die weitere Arbeit eine wichtige Einflußgröße dar. Außerdem sind hierfür bereits Messungen im Temperaturbereich oberhalb von 1000 °C erfolgt.

In [30] und [31] wurden Druckversuche mit 3,4 x 3,4 x 15 mm³ Silizium- und Germaniumprobekörpern bei 1100 °C und 1300 °C durchgeführt. Mit unterschiedlichen Verformungsgeschwindigkeiten konnte ein funktioneller Zusammenhang zwischen Dehnungsrate, Temperatur und LYS gewonnen werden.

$$\tau_{ly} = C_{ly} \dot{\varepsilon}^{1/(2+m)} exp\left(\frac{U}{(2+m)kT}\right)$$
 (2.8)

 $\tau_{ly}$  Lower Yield Stress (LYS)

ε Dehnungsrate

m Spannungsexponent U Aktivierungsenergie

k Stefan - Boltzmann - Konstante

C<sub>Iv</sub> experimentell ermittelte Konstante für den LYS

obere Streckgrenze (UYS)

Der Upper Yield Stress ist die kennzeichnende Größe zur Vorhersage des erstmaligen Auftretens von Vergleitungen. Diesbezüglich wurde ebenfalls eine Reihe von Versuchen durchgeführt. [35] gibt dazu den funktionellen Zusammenhang nach [29] an:

$$\tau_{\rm uy} = L_{\rm i} \tau_{\rm p} \exp \left[ 2.4 \left( 1 - \frac{T}{273 \rm K} \right) \right]$$
 (2.9)

τ<sub>P</sub> Peierls Spannung siehe [29]

L<sub>i</sub> Experimentell bestimmte empirische Konstante

τ<sub>uy</sub> Upper Yield Stress

In [32] wurde experimentell festgestellt, daß der UYS maßgeblich vom Ziehverfahren (Zonenziehverfahren/Czochralski-Ziehverfahren, siehe Kap. 2.1) und der Dauer unter der die Probe bei einer bestimmten Temperatur gehalten wird, abhängt. Es wurden dabei Zugversuche unter Dehnungsraten von 1,1x10<sup>-4</sup>s<sup>-1</sup> im Vakuum bei 600 - 1050 °C durchgeführt. Die Proben hatten einen Stickstoffgehalt von 5.4x10<sup>15</sup>cm<sup>-3</sup> und 4,5x10<sup>15</sup>cm<sup>-3</sup>. Eine höhere Stickstoffdotierung ist im Allgemeinen mit einem höheren UYS verbunden.

In [33] und [34] wurden ebenfalls Zugversuche bei Temperaturen von 650 - 1000 °C an geätzten Probenstücken von 12 x 4.5 x 5 mm³ mit unterschiedlichen Dehnungsraten und verschiedenen Stickstoffdotierungen durchgeführt. Für den sich aus diesen Messungen ergebenden funktionalen Zusammenhang wurde ebenfalls ein Exponentialansatz nach [29] verwendet:

$$\tau_{\rm uy} = C \cdot \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \tag{2.10}$$

Für die empirischen Konstanten C und E aus den UYS-Messungen ergeben sich nach Tabelle 2.1 folgende Werte, sowie nach Abbildung 2.17 und Abbildung 2.18 die dazugehörigen UYS Verläufe:

Quelle	C [MPa]	E [eV]	$\dot{\varepsilon}$ [s <sup>-1</sup> ]	N-Konzentration [cm <sup>-3</sup> ]	O-Konzentration [cm <sup>-3</sup> ]
[34]	1.18x10 <sup>-3</sup>	0.86	7 x 10 <sup>-6</sup>	$< 3x10^{13}$	6.5x10 <sup>17</sup>
[34]	3.11x10 <sup>-3</sup>	0.77	7 x 10 <sup>-6</sup>	$3x10^{13} - 3x10^{14}$	6.5x10 <sup>17</sup>
[34]	6.15x10 <sup>-3</sup>	0.74	7 x 10 <sup>-6</sup>	$3x10^{14} - 3x10^{15}$	6.5x10 <sup>17</sup>
[33]	4.27x10 <sup>-3</sup>	0.7	7.6x10 <sup>-6</sup>	undotiert	1x10 <sup>17</sup>
[33]	1.33x10 <sup>-3</sup>	0.85	2.4x10 <sup>-5</sup>	undotiert	1x10 <sup>17</sup>
[33]	4.17x10 <sup>-4</sup>	1.0	7.6x10 <sup>-5</sup>	undotiert	1x10 <sup>17</sup>

Tabelle 2.1 empirische Konstanten C und E aus Messungen von [33] und [34]

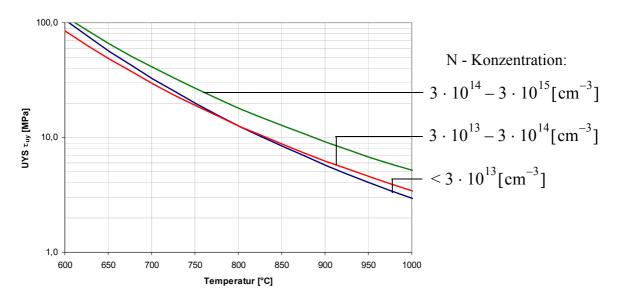


Abbildung 2.17: UYS-Verläufe nach [34]

2.3 Stand der Technik 21

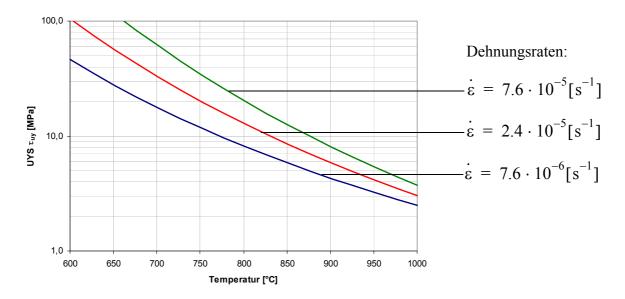


Abbildung 2.18: UYS-Verläufe nach [33]

analytische Ermittlung der Sliplänge

Weiterführend wurde in [17] eine Theorie entwickelt, welche auf die Abschätzung der Sliplänge (Länge der Vergleitung) zielt. Im Falle eines Überschreitens des UYS wird mit Hilfe einer Versetzungsgeschwindigkeit nach Gleichung (2.11) die Sliplänge nach Gleichung (2.12) über die Zeit integriert.

$$v(\tau, T) = v_0 \tau_s^n \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$$
 (2.11)

$$1 = \int v(\tau, T) dt \tag{2.12}$$

v Versetzungsgeschwindigkeit

v<sub>0</sub> materialabhängige Konstante, hier 2.64 eV

n Konstante, hier 1.3

τ<sup>n</sup> Kristallschubspannung (Resolved Shear Stress)

U Aktivierungsenergie

1 Sliplänge

Diese Methode beschränkt sich allerdings nur auf Spannungszustände, bei denen nur eine Kristallschubspannung wirkt. Weiterhin kommt es durch Spannungsumlagerung während des Plastifizierens zur Aktivierung anderer Gleitrichtungen. Eine Anwendung auf reale, mehrachsige Spannungszustände ist deshalb fraglich. Prinzipielle Vorgehensweisen bei der Modellierung von Kristallplastizität sind [36], [37] und [38] zu entnehmen.

# 3. Physikalische Grundlagen

### 3.1 Besonderheiten des thermomechanischen Verhaltens des Si-Einkristall-Werkstoffes

## 3.1.1 Allgemeines

#### 3.1.1.1 Hooke'sches Gesetz für einkristallines Silizium

Elastizitätskonstanten

In der Voigt'schen Matrizenschreibweise nimmt ein allgemein anisotrop linear elastisches Materialgesetz die folgende Gestalt an:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6x6 \\ 8ymm \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \end{bmatrix}$$

$$(3.1)$$

Orientiert man das Koordinatensystem parallel zu den Kristallachsen, so ergibt sich aufgrund der speziellen Symmetrie des kubisch-flächenzentrierten Kristallgitters (kubische Orthotropie) folgende Besetzung der Elastizitätsmatrix:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{bmatrix}$$
(3.2)

Mit den elastischen Konstanten nach [39], [40] und [41]:

Chen Konstanten nach [39], [40] und [41]:
$$C = \begin{bmatrix} 1,657 & 0,639 & 0 & 0 & 0 \\ 1,657 & 0,639 & 0 & 0 & 0 \\ 1,657 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,796 & 0 & 0 & 0 \\ \text{sym} & 0,796 & 0 & 0 \\ 0,796 & 0 & 0,796 \end{bmatrix} \cdot 10^{5} \text{MPa}$$
(3.3)

Attropiefaktor (Gleichung (3.4)) gibt an wie sich die mechanischen Eigenschaften

Der sog. Anisotropiefaktor (Gleichung (3.4)) gibt an, wie sich die mechanischen Eigenschaften eines orthotropen Materials von einem isotropen Material unterscheiden. Beträgt dieser Faktor 1 ist das Material isotrop, bei A > 1 oder A < 1 anisotrop.

$$A = \frac{2 \cdot C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \Rightarrow A_{Si} = 1.57$$
 (3.4)

Der Elastizitätsmodul kann nach Gleichung (3.5) für jede beliebige Raumrichtung [xyz] berechnet werden:

$$\frac{1}{E_{[xyz]}} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})} - \left[\frac{2}{C_{11} - C_{12}} - \frac{1}{C_{44}}\right] [\alpha^2 \beta^2 + \alpha^2 \gamma^2 + \beta^2 \gamma^2]$$
(3.5)

mit den Koordinaten:

$$\alpha = \sin(\theta) \cdot \cos(\phi) \tag{3.6}$$

$$\beta = \cos(\theta) \cdot \sin(\varphi) \tag{3.7}$$

$$\gamma = \cos(\varphi) \tag{3.8}$$

Die spherische Funktion  $E_{[xyz]}$  in Abhängigkeit der Kugelkoordinaten  $\theta$ ,  $\phi$  als Inverse der Gleichung (3.5) ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Der Abstand r der Oberflächenkontour zum Koordinatenursprung gibt den Wert der Steifigkeit an.

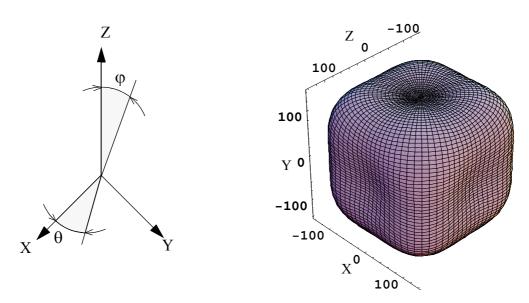


Abbildung 3.1:  $E_{[hkl]}$  von Silizium in jede Raumrichtung  $\theta$  und  $\phi$  in [GPa]

Oft ist im praktischen Anwendungsfall (z.B. rotationssymmetrische Modelle) eine isotrope Näherung der Materialeigenschaften von Silizium notwendig. In [39] werden zwei Näherungsmethoden beschrieben.

#### 1. Isotrope Näherung nach Voigt

Diese Methode ist für Polykristalle geeignet, bei denen die Teileigenschaften der Einzelkristalle zu einer isotropen Gesamteigenschaft des gesamten Kristallgefüges "verschmieren".

$$G = C_{44} - \frac{1}{5} \cdot H \tag{3.9}$$

$$v = \frac{C_{12} - H/5}{(2C_{12} + C_{44} - 2H/5)}$$
(3.10)

$$E = 2G(1 - v) (3.11)$$

$$H = 2C_{44} + C_{12} - C_{11} \tag{3.12}$$

## 2. Isotrope Näherung nach Reuss

Die isotrope Näherung ist speziell auf den Anwendungsfall von Einkristallen zugeschnitten, bei denen aus Gründen der Praktikabilität und der Einfachheit häufig auf eine Modellierung orthotroper Eigenschaften verzichtet wird. Deshalb wird dieses Verfahren im Weiteren bevorzugt.

$$G = \left(S_{44} + \frac{4}{5}J\right)^{-1} \tag{3.13}$$

$$v = \left(-S_{12} - \frac{J}{5}\right) \left(S_{11} - \frac{2J}{5}\right)^{-1}$$
 (3.14)

$$E = \left(S_{11} - \frac{2J}{5}\right)^{-1} \tag{3.15}$$

mit:

$$J = S_{11} - S_{12} - \frac{S_{44}}{2} \tag{3.16}$$

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$$
(3.17)

$$S_{12} = \frac{C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$$
(3.18)

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}} \tag{3.19}$$

Die Auswertung der Gleichungen (3.9) - (3.19) ist in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

	Reuss	Voigt
G [MPa]	6,488×10 <sup>4</sup>	6,805×10 <sup>4</sup>
ν	0,228	0,218
E [MPa]	1,594×10 <sup>5</sup>	1,657×10 <sup>5</sup>

Tabelle 3.1: Isotrope Näherungen der elastischen Konstanten für Si nach Reuss und Voigt

#### 3.1.1.2 Thermische Materialkonstanten

Zur Berechnung der Wärmespannungen sind desweiteren thermische Materialkonstanten erforderlich. In Anlage A1 sind entsprechende temperaturabhängige und - unabhängige Parameter aufgelistet.

Für die Lagerung ist häufig Siliziumcarbit vorgesehen. Die dafür notwendigen Parameter finden

sich in Anlage A2.

# 3.1.2 Gleitsysteme und projezierte Schubspannungen des kubisch-flächenzentrierten Kristalls

Während bei Polykristallen die mikroskopischen Eigenschaften der einzelnen Körner zu einer Gesamteigenschaft des Materials "verschmieren", finden sich diese mikroskopischen Eigenschaften in Einkristallen auch makroskopisch wieder.

Die plastische Verformbarkeit metallischer Kristalle wird durch Abgleitungsvorgänge (Slip) im Kristallgitter entlang ausgezeichneter Richtungen erklärt. Diese Gleitrichtungen werden durch den Burgersvektor **b** [29] definiert. Ein Verständnis dieser sogenannten Gleitsysteme ist für eine Beurteilung bezüglich des erstmaligen Auftretens von Vergleitungen unumgänglich. In einem kubisch-flächenzentrierten Kristall (Abbildung 3.2), wie Silizium, finden sich 12 Oktaeder-Gleitsysteme und 6 kubische Gleitsysteme.

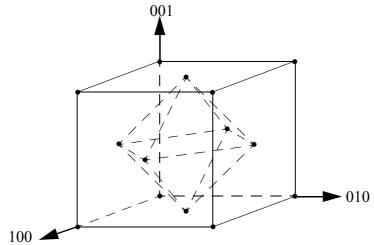


Abbildung 3.2: kubisch-flächenzentrierter Kristall

Ein Vergleiten setzt erstmalig ein, wenn die Projektion des Spannungsvektors it einer Gleitebene i einen kritischen Betrag (Fließgrenze) überschreitet.

$${}^{o}_{i} {}^{R}_{j} \ge {}^{o}_{tritisch} {}^{R}$$
 (3.20)

bzw.:

$$_{i}^{k}\tau_{j}^{R} \ge _{\tau_{kritisch}}^{k}$$
 (3.21)

Aus den Normaleneinheitsvektoren in der Gleitebenen i und dem Spannungstensor  $\sigma_{ij}$  erhält man mittels der Chauchy'schen Formel [44] über das Skalarprodukt den Spannungsvektor it:

$$_{i}\mathbf{t} = _{i}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = _{i}\mathbf{t}_{m} = _{i}\mathbf{n}_{n}\boldsymbol{\sigma}_{nm}$$
 (3.22)

Die Projektion des Spannungsvektors  $_i$ t auf die jeweiligen Gleitrichtungen j ergibt schließlich die Kristallschubspannungen (Resolved Shear Stress).  $_i$ e $_j$  gibt dazu den Einheitsvektor der Gleitrichtung an.

$${}_{i}\tau_{i}^{R} = {}_{i}\mathbf{e}_{i} \cdot {}_{i}\mathbf{t} = {}_{i}\mathbf{e}_{i} \cdot ({}_{i}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$
(3.23)

Um die Kristallflächen zu beschreiben, werden diese durch die Miller'schen Indizes gekennzeichnet. Zur Darstellung der Kristallebenen und deren Richtungen wird hier eine spezielle in der Kristallphysik übliche Notation eingeführt:

- mit den Gleitebenen in geschweiften Klammern: {xyz}
- mit den Gleitrichtungen in eckigen Klammern:  $\langle xyz \rangle$
- negative Indizes werden mit einem Balken über der Zahl dargestellt:  $\bar{1} = -1$
- für Oktaeder- und kubische Gleitsysteme werden die Indizes o bzw. k oben links verwendet
- für die Gleitebene i und Gleitrichtung j gilt die Schreibweise: ¡x;
- für die projezierten Kristallschubspannungen gilt:  $\tau^R$

## 3.1.2.1 Oktaeder - Gleitsysteme

Zur Herleitung der Kristallschubspannungen ist eine Einteilung der Gleitsysteme in kubische (Abbildung 3.2/durchgezogene Linien) und oktaeder - Gleitsysteme (Abbildung 3.2/gestrichelte Linien) sinnvoll. Für die oktaeder - Gleitsysteme gilt:

mit den Normalen der Gleitebenen (Oktaederflächen siehe Abbildung 3.3 bis Abbildung 3.6)  $^{\rm o}_{\rm i}$ n mit i=1...4 entsprechend der 4 unterschiedlich orientierten Flächen:

$${}_{1}^{o}n = \frac{1}{\sqrt{3}}\{111\} \tag{3.24}$$

$${}_{2}^{o}n = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \overline{111} \} \tag{3.25}$$

$${}_{3}^{o}n = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\bar{1}11\} \tag{3.26}$$

$${}_{4}^{o}n = \frac{1}{\sqrt{3}}\{1\overline{1}1\} \tag{3.27}$$

und den zugehörigen Gleitrichtungen:

$${}_{1,4}^{o}e_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle \bar{1}01\rangle \tag{3.28}$$

$$_{2, 3}^{0}e_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 101\rangle$$
 (3.29)

$$_{1,3}^{0}e_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 01\overline{1}\rangle$$
 (3.30)

$$_{2,4}^{\circ}e_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 0\overline{1}\overline{1}\rangle$$
 (3.31)

$${}_{1}^{o}e_{3} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1\overline{1}0\rangle = {}_{2}^{o}e_{3}$$
 (3.32)

$${}_{3}^{o}e_{3} = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle = {}_{4}^{o}e_{3}$$
 (3.33)

graphische Darstellung der Gleitsysteme:

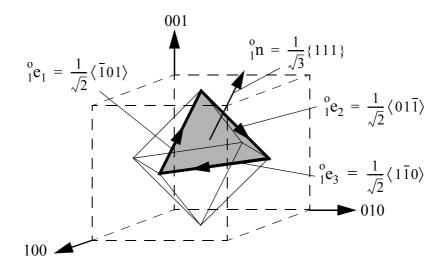


Abbildung 3.3: Gleitebene  $_1^o$ n mit Gleitrichtungen  $_1^o$ e $_1$ ,  $_1^o$ e $_2$  und  $_1^o$ e $_3$ 

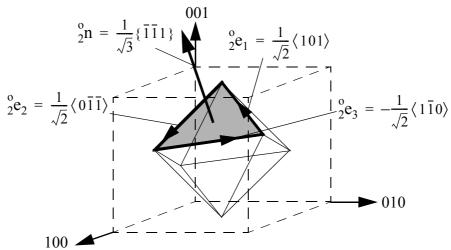


Abbildung 3.4: Gleitebene  $_2^{o}$ n mit Gleitrichtungen  $_2^{o}$ e $_1$ ,  $_2^{o}$ e $_2$  und  $_2^{o}$ e $_3$ 

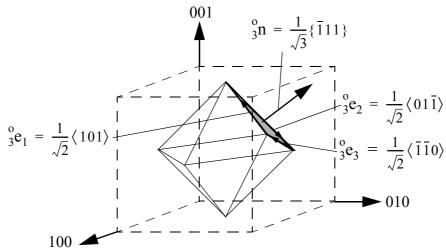


Abbildung 3.5: Gleitebene  $^o_3$ n mit Gleitrichtungen  $^o_3$ e $_1$ ,  $^o_3$ e $_2$  und  $^o_3$ e $_3$ 

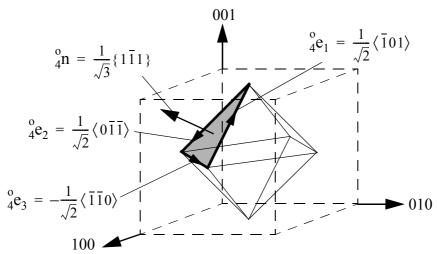


Abbildung 3.6: Gleitebene  ${}^o_4n$  mit Gleitrichtungen  ${}^o_4e_1$ ,  ${}^o_4e_2$  und  ${}^o_4e_3$ 

Spannungsvektoren it der Gleitebenen i:

$$\mathbf{i} = 1: \qquad \qquad \mathbf{0}_{1}^{\mathbf{o}} \mathbf{t} = \mathbf{0}_{1}^{\mathbf{o}} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx} + \tau_{yx} + \tau_{zx} \\ \tau_{xy} + \sigma_{yy} + \tau_{zy} \\ \tau_{xz} + \tau_{yz} + \sigma_{zz} \end{array} \right\}$$
(3.34)

$$i = 2: \qquad {}_{2}^{o}\mathbf{t} = {}_{2}^{o}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{array}{l} -(\sigma_{xx} + \tau_{yx}) + \tau_{zx} \\ -(\tau_{xy} + \sigma_{yy}) + \tau_{zy} \\ -(\tau_{xz} + \tau_{yz}) + \sigma_{zz} \end{array} \right\}$$
(3.35)

$$\mathbf{i} = 3: \qquad \qquad \mathbf{o}_{3}^{\mathbf{o}} \mathbf{t} = \mathbf{o}_{3}^{\mathbf{o}} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{array}{l} -\sigma_{xx} + \tau_{yx} + \tau_{zx} \\ -\tau_{xy} + \sigma_{yy} + \tau_{zy} \\ -\tau_{xz} + \tau_{yz} + \sigma_{zz} \end{array} \right\}$$
(3.36)

$$i = 4: \qquad \qquad {}^{o}_{4}\mathbf{t} = {}^{o}_{4}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx} - \tau_{yx} + \tau_{zx} \\ \tau_{xy} - \sigma_{yy} + \tau_{zy} \\ \tau_{xz} - \tau_{yz} + \sigma_{zz} \end{array} \right\}$$
(3.37)

projizierte Kristallschubspannungen:

$$\{111\}: \langle \bar{1}01 \rangle: \qquad \qquad {}_{1}^{0}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}} [(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) - \tau_{yx} + \tau_{yz}]$$
 (3.38)

$$\{111\}: \langle 01\overline{1}\rangle: \qquad \qquad {}_{1}^{o}\tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) - \tau_{xz} + \tau_{xy}]$$
 (3.39)

$$\{111\}: \langle 1\bar{1}0\rangle: \qquad \qquad {}_{1}^{0}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}} [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) - \tau_{zy} + \tau_{zx}]$$
 (3.40)

$$\{\bar{1}\bar{1}1\}\langle 101\rangle: \qquad \qquad {}_{2}^{0}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) - \tau_{yx} - \tau_{yz}] \qquad (3.41)$$

$$\{\bar{1}\bar{1}1\}\langle 0\bar{1}\bar{1}\rangle:$$
  ${}^{0}_{2}\tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) + \tau_{xz} + \tau_{xy}]$  (3.42)

$$\{\overline{1}\overline{1}1\}\langle\overline{1}10\rangle: \qquad \qquad {}_{2}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zx}] \qquad (3.43)$$

$$\{\bar{1}11\}\langle 101\rangle:$$
  ${}^{o}_{3}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) + \tau_{yx} + \tau_{yz}]$  (3.44)

$$\{\bar{1}11\}\langle 01\bar{1}\rangle: \qquad \qquad {}_{3}^{0}\tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) + \tau_{xz} - \tau_{xy}] \qquad (3.45)$$

$$\{\bar{1}11\}\langle\bar{1}\bar{1}0\rangle: \qquad \qquad {}_{3}^{0}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) - \tau_{zy} - \tau_{zx}] \qquad (3.46)$$

$$\{1\overline{1}1\}\langle\overline{1}01\rangle:$$
  ${}^{0}_{4}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) + \tau_{yx} - \tau_{yz}]$  (3.47)

$$\{1\bar{1}1\} \langle 0\bar{1}\bar{1}\rangle : \qquad {}_{4}^{0}\tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}} [(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) - \tau_{xz} - \tau_{xy}]$$
 (3.48)

$${1\overline{1}1}\langle 110\rangle:$$
  ${}^{o}_{4}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} + \tau_{zx}]$  (3.49)

## 3.1.2.2 Kubische Gleitsysteme

mit den Normalen der Gleitebenen  $_{i}^{k}$ n mit i = 1...3:

$$_{1}^{k}n = \{100\}$$
 (3.50)

$${}_{2}^{k}n = \{010\} \tag{3.51}$$

$$_{3}^{k}n = \{001\}$$
 (3.52)

und den zugehörigen Gleitrichtungen:

$${}_{1}^{\mathbf{k}}\mathbf{e}_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 011\rangle \tag{3.53}$$

$${}_{2}^{\mathbf{k}}\mathbf{e}_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 101\rangle \tag{3.54}$$

$${}_{3}^{\mathbf{k}}\mathbf{e}_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 110\rangle \tag{3.55}$$

$${}_{1}^{k}\mathbf{e}_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 01\overline{1}\rangle \tag{3.56}$$

$${}_{2}^{\mathbf{k}}\mathbf{e}_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 10\overline{1}\rangle \tag{3.57}$$

$${}_{3}^{\mathbf{k}}\mathbf{e}_{2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1\overline{1}0 \rangle \tag{3.58}$$

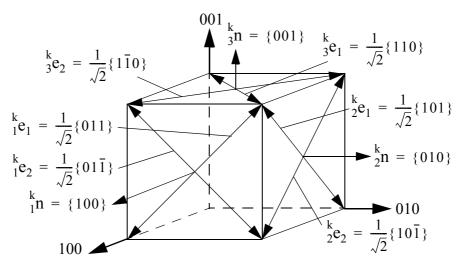


Abbildung 3.7: kubische Gleitsysteme

Spannungsvektoren it der Gleitebenen i:

$$\mathbf{i} = 1: \qquad \qquad \mathbf{t} = \mathbf{t} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \left\{ \begin{array}{l} \sigma_{\mathbf{x}\mathbf{x}} \\ \tau_{\mathbf{x}\mathbf{y}} \\ \tau_{\mathbf{x}\mathbf{z}} \end{array} \right\}$$
 (3.59)

projizierte Kristallschubspannungen:

$$\{100\} \langle 011 \rangle : \qquad \qquad {}_{1}^{k} \tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{xy} + \tau_{xz})$$
 (3.62)

$$\{100\} \langle 01\bar{1}\rangle : \qquad \qquad {}_{1}^{k} \tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{xy} - \tau_{xz})$$
 (3.63)

$$\{010\} \langle 101\rangle : \qquad \qquad {}_{2}^{k} \tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{yx} + \tau_{yz})$$
 (3.64)

$$\{010\} \langle 10\overline{1} \rangle : \qquad \frac{{}_{2}^{k} \tau_{2}^{R}}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{yx} - \tau_{yz})$$
 (3.65)

$$\{001\} \langle 110\rangle : \qquad \frac{{}^{k}_{3}\tau_{1}^{R}}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{zx} + \tau_{zy})$$
 (3.66)

$$\{001\} \langle 1\bar{1}0\rangle : \qquad \qquad {}_{3}^{k} \tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{zx} - \tau_{zy})$$
 (3.67)

## 3.1.2.3 Schmid-Faktoren bei einachsigem Spannungszustand

Beim einachsigen Zugversuch ist die Kristallorientierung der Probe entscheidend für das Ergebnis. Je nach Ausrichtung des Kristalls werden andere Gleitsysteme aktiviert. Ausgangspunkt der Betrachtung ist die einachsig wirkende Spannung  $\sigma_{77}$  in Kristallachsenrichtung 001.

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{77} \mathbf{e}_z \circ \mathbf{e}_z = \sigma_{33} \mathbf{e}_3 \circ \mathbf{e}_3 \tag{3.68}$$

Die klassische Ableitung des Schmid-Faktors folgt aus der Gleichgewichtsbedingung (Siehe Abbildung 3.8). Der Kraftvektor auf der Ebene z entspricht dem Kraftvektor auf einer zunächst beliebigen Gleitebene n:

$$\sigma_{nz}dA_n = \sigma_{zz}dA_z \Rightarrow \sigma_{nz} = \sigma_{zz} \cdot \frac{dA_z}{dA_n}$$
 (3.69)

Mit der Projektion einer Oktaeder - Gleitfläche dA<sub>n</sub> mit dem Normaleneinheitsvektor:

$$\mathbf{e}_{\mathrm{n}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1\\1\\1 \end{bmatrix} \tag{3.70}$$

auf die Ebene z = const. mit dem Normaleneinheitsvektor:

$$\mathbf{e}_{\mathbf{z}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3.71}$$

folgt:

$$dA_z = \mathbf{e}_z \cdot d\mathbf{A}_n = dA_n \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_n = dA_n \cos \angle_{z, n} = dA_n \cdot \frac{1}{\sqrt{3}}$$
(3.72)

Es gilt weiterhin für die Ebenen x = const. und y = const.:

$$\Rightarrow dA_z = dA_x = dA_y = \frac{1}{\sqrt{3}} dA_n = \cos\alpha \ dA_n \Rightarrow \alpha = 54,73^{\circ}$$
 (3.73)

α entspricht dem Winkel zwischen Normalenvektor und jeder Achse Abbildung 3.8 (rechts). Der Spannungsvektor t lautet:

$$\Rightarrow \mathbf{t}_{z} = \sigma_{nz} \mathbf{e}_{z} = \frac{1}{\sqrt{3}} \sigma_{zz} \mathbf{e}_{z} \tag{3.74}$$

Sowie der Projektion des Spannungsvektors t auf eine Gleitrichtung, z.B.:

$${}_{1}^{0}\mathbf{e}_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{0;-1;1\} \tag{3.75}$$

ergibt die Oktaederschubspannung:

$${}_{1}^{o}\tau_{1}^{R} = \mathbf{t}_{z} \cdot {}_{1}^{o}\mathbf{e}_{1} = |\mathbf{t}_{z}| {}_{1}^{o}\mathbf{e}_{1} |\cos \beta$$
 (3.76)

$$\Rightarrow \cos \beta = \frac{\mathbf{t}_z \cdot {}_1^0 \mathbf{e}_1}{|\mathbf{t}_z| |{}_1^0 \mathbf{e}_1|} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \beta = 45^{\circ}$$
 (3.77)

 $\beta$  ist der Winkel zwischen dem Spannungsvektor  $\mathbf{t}$  und der Gleitrichtung  ${}^{o}_{1}\mathbf{e}_{1}$  (Abbildung 3.8 Mitte).

$$\Rightarrow {}_{1}^{o}\tau_{1}^{R} = \cos\alpha\cos\beta\sigma_{zz} = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_{zz} = \frac{1}{\sqrt{6}}\sigma_{zz}$$
Schmid - Faktor

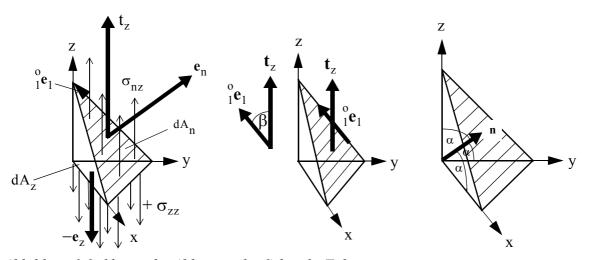


Abbildung 3.8: klassische Ableitung des Schmid - Faktors

Der Schmid - Faktor ergibt sich für diesen speziellen Fall zu:

$${}_{1}^{o}\lambda_{1}^{R} = \frac{{}_{1}^{o} {}_{1}^{R}}{\sigma_{zz}} = \frac{1}{\sqrt{6}} \approx 0,41$$
 (3.79)

# 3.1.3 Die experimentelle Bestimmung der elastischen Grenze bzw. des "Upper Yield Stress"

Bei den im Auftrag der Firma Siltronic AG bei der DLR durchgeführten und vom Lehrstuhl Strukturmechanik und Fahrzeugschwingungen (BTU - Cottbus) fachlich betreuten Zugversuchen ([47] und [48]), wurde der "upper yield stress" experimentell ermittelt. Da die bisherigen

Untersuchungen (siehe Kap. 2.3.4) insbesondere bei Temperaturen >1000 °C noch nicht ausreichend waren, sind die Ergebnisse für die Genauigkeit einer Slipvorhersage von entscheidender Bedeutung.

## 3.1.3.1 Versuchsaufbau, Versuchsdurchführung

#### Probenherstellung

Bei den Versuchskörpern nach [48] handelt es sich um 5mm dicke Flachproben mit den Abmessungen nach Abbildung 3.9. Die Proben sind in [47] nur 200 mm lang.

Die Herstellung der Proben erfolgte mittels Wasserstrahlschneidtechnik aus einem 5mm dicken Si - Einkristallwafer (Slug - siehe Abbildung 3.10). Die Oberflächenbeschädigungen wurden durch Abschleifen und nachträglichem Abätzen (62  $\mu m$  - 464  $\mu m$  Tiefe) beseitigt.

Die Probenausrichtung und anschließende Belastung erfolgt entlang der Kristallorientierung 100.

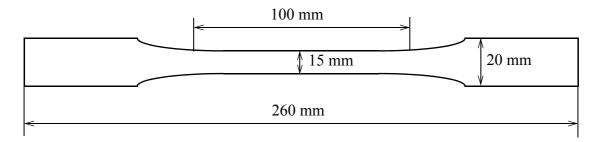


Abbildung 3.9:Probengeometrie nach [48] (nicht maßstabsgetreu)

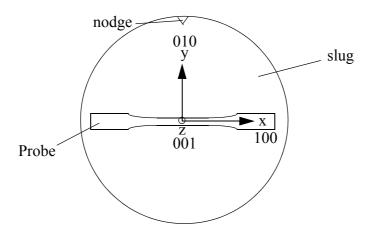


Abbildung 3.10: Kristallorientierung der Proben nach [48]

#### Versuchsaufbau und Versuchsdurchführung

Das Aufheizen der Probekörper erfolgte mittels Induktionsspule. Eine größere Temperaturhomogenität wird durch den Susceptor aus Siliziumcarbit (SIC) erreicht (Abbildung 3.11). Bei den langen Probekörpern [48] wurde eine maximale Temperaturdifferenz zwischen den Dehnungsaufnehmern von etwa 50 K und bei kürzeren Proben in [47] eine Temperaturdifferenz von bis zu 100 K erreicht. Die Temperaturen während der Versuches betrugen 1000, 1100, 1200, 1320

und 1350 °C.

Die Versuche liefen weggesteuert mit einer konstanter Dehnungsrate von  $1,6\times10^6\,\mathrm{s}^{-1}$ . Die Belastung erfolgte über den elastischen Bereich hinaus bis zum Bruch der Probekörper.

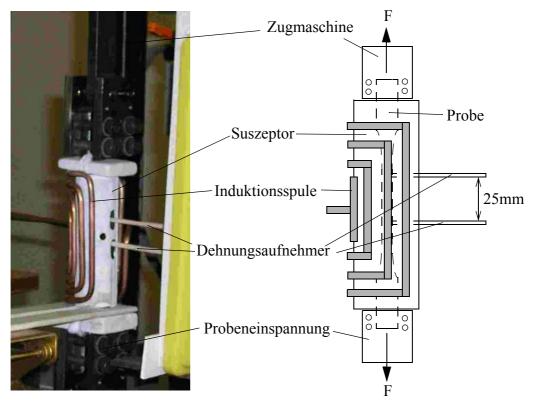


Abbildung 3.11: Versuchsaufbau nach [48]

## 3.1.3.2 Ergebnisse

Abbildung 3.12 zeigt den, auch für andere Materialien häufig vorkommenden Spannungs-Dehnungsverlauf des einachsigen Zugversuches. Silizium ist zwar bei Raumtemperatur spröde, jedoch im hier interessanten Temperaturbereich duktil.

Der Verlauf erstreckt sich im Allgemeinen über einen elastischen Bereich bis zum Erreichen des Upper Yield Stresses. Danach fällt die Kurve auf den Lower Yield Stress ab. Anschließend erfolgt eine sehr starke Verfestigung des Materials. Die Bruchspannung übersteigt bei einigen Versuchen sogar das 10fache des Upper Yield Stresses.

Die absoluten Dehnungen bis zum Erreichen des Upper Yield Stresses betragen bei den höchsten Temperaturen nur wenige µm. Die gesamte Versuchseinrichtung reagiert aufgrund dessen sehr sensitiv auf äußere Einflüsse. Damit läßt die Qualität der Versuchsergebnisse mit höherer Temperatur deutlich nach und ein klares Ablesen des Upper Yield Stresses, wie in Abbildung 3.12, wird erschwert. Dies hat zur Folge, daß die Upper Yield Stress-Werte mit höherer Temperatur eine größere Streuung aufweisen. Eine Verbesserung der Meßergebnisse ist in naher Zukunft nicht zu erwarten, da die Versuchseinrichtungen in diesem Fall an der Grenze des technisch Machbaren arbeiten.

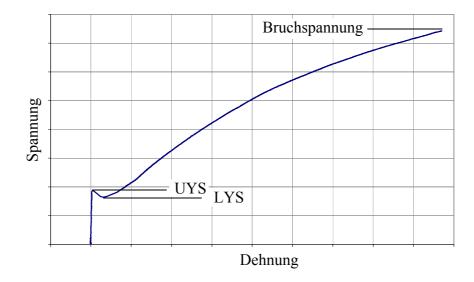


Abbildung 3.12: Spannungs - Dehnungsverlauf exemplarisch für einen Zugversuch

## 3.1.3.3 Auswertung

#### Plastizität

Nach Überschreiten der kritischen Schubspannung in einem der 18 möglichen Gleitsysteme tritt eine Verschiebung entlang der zugehörigen Gleitrichtungen auf. Dabei werden die Bindungspaare auf atomarer Ebene im Kristallgitter so lange gestreckt, bis es zum sogenannten Umklappen dieser Bindungen kommt. Die Gleitebene ist um eine Atomreihe verschoben. Dieser Prozeß dauert an, solange die kritische Schubspannung auf der Gleitebene überschritten bleibt.

Für den einachsigen Zugversuch in 100-Richtung hat das zur Folge, daß in der Probe durch Abgleiten entlang einer Oktaedergleitrichung (Abbildung 3.13a) versetzt wird. Die angreifenden Zugkräfte liegen infolge des Versatzes nicht mehr auf einer Linie.

Dieses Problem wird durch Orientierungsänderung des Kristallgitters gelöst. Die Abgleitungswinkel werden flacher (Abbildung 3.13b). Man spricht von einer einfachen Translation. In den durchgeführten Zugversuchen konnte dieses Verhalten beobachtet werden (Abbildung 3.14b). Die Dehnung kann aus der Winkeländerung des Gleitsystems nach folgender Gleichung ermittelt werden:

$$\frac{\sin(\chi_0)}{\sin(\chi)} = \frac{\sin(\lambda_0)}{\sin(\lambda)} = \frac{1}{l_0} = 1 + \varepsilon \tag{3.80}$$

Eine weitere Möglichkeit ist die gleichzeitige Aktivierung mehrerer Gleitsysteme. Der Versatz wird dadurch ausgeglichen, daß es zu einer Rückvergleitung entlang einer zweiten Gleitrichung kommt, wobei die Kristallorientierung im Wesentlichen erhalten bleibt. Man spricht hierbei von einer doppelten Translation. In Abbildung 3.14(a) konnte dieser Vorgang ebenfalls experimentell nachgewiesen werden.

Eine ausführliche Beschreibung dieser Vorgänge liefern [29] und [41].

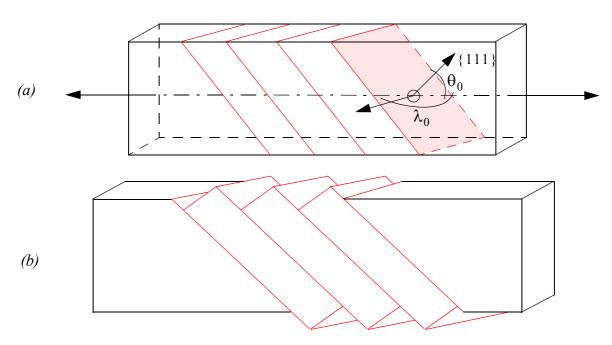


Abbildung 3.13: Abgleitungsvorgang auf der Gleitebene {111} während des Zugversuches mit anschließender Orientierungsänderung

(a) Abgleitung entlang mehrerer Gleitsysteme (b) Abgleitung durch Orientierungsänderung

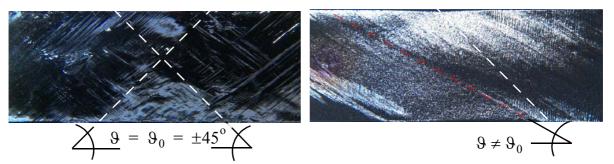


Abbildung 3.14: Abgleitungsvorgänge nach verschiedenen Zugversuchen nach [48]

## Upper Yield Stress Verläufe

Bei höherer Temperatur besitzen die Atome eine entsprechend höhere mittlere kinetische Energie. Im Kristallgefüge werden demzufolge auch die Schwingungsamplituden der Atome größer. Ein Umklappen einzelner Bindungen wird statistisch gesehen immer wahrscheinlicher oder aus makroskopischer Sicht ist der Vergleitungsprozeß zeitabhängig (Kriechen).

Das Kriechverhalten von Silizium ist in [33] durch Versuche mit verschiedenen Dehnungsraten ausreichend belegt worden. Bei den von der DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt) durchgeführten Versuchen sind die eingebrachten Dehnungsraten vergleichsweise niedrig gehalten, da die realen Prozesse ebenfalls sehr langsam ablaufen. Die tatsächlichen Dehnungsraten werden in den nachfolgenden Kapiteln berechnet.

Nach [41] findet sich ein Zusammenhang zwischen Kriechrate, Spannung und Temperatur:

$$\dot{\varepsilon}_{\rm II} \sim \sigma^{\rm n} \exp\left(-\frac{\rm Q}{\rm R\,T}\right) \tag{3.81}$$

 $\dot{\epsilon}_{II}$  Kriechrate

n Kriechexponent/Spannungsexponent

Q Aktivierungsenergie

R allgemeine Gaskonstante R = 8,314 J/mol/K

Das bedeutet, wie bereits erläutert, daß Kriechen ein thermisch aktivierter Vorgang ist, weswegen dieser bei höheren Temperaturen stärkere Relavanz besitzt. In [47] erfolgten zusätzlich Zugversuche mit unterschiedlichen Dehnungsraten, mit dem Ergebnis, daß der Kriechanteil sehr klein ist. Ein Langzeitversuch, welcher sich über mehrere Stunden erstreckt, ist bisher noch ausgeblieben und wäre für eine quantitative Auswertung des Kriechverhaltens wünschenswert. Im Zugversuch mit  $\dot{\epsilon}_{\rm II}=\dot{\epsilon}={\rm const.}$  kann durch Umstellung von Gleichung (3.81) der funktionale Verlauf des UYS gewonnen werden:

$$\sigma_{uy} \sim \dot{\varepsilon}^{1/n} \exp\left(\frac{Q}{nRT}\right)$$
 (3.82)

In den Gleichungen (2.8) - (2.10), sowie in [29] finden sich ähnliche Zusammenhänge. Die Versuchsergebnisse werden aus diesem Grund durch Regression an die folgende Gleichung angepaßt:

$$\tau_{\rm uy} = C_{\rm uy} \cdot \exp\left(\frac{Q}{kT}\right) \tag{3.83}$$

mit der Stefan-Boltzmann-Konstante:

$$k = \frac{R}{N_a} \tag{3.84}$$

 $egin{array}{ll} C_{uy} & \text{experimentell ermittelte Konstante für den UYS} \\ N_a & \text{Avogadro-Konstante} \\ \end{array}$ 

Die Anpassung der Meßwerte wird gemäß [48] an Gleichung (3.83) mit  $C_{uy}$  und Q für 3 untersuchte Materialien (Tabelle 3.2) vorgenommen. Die Aktivierungsenergie beträgt 1.7eV für Materialklasse 1 mit  $C_{uy} = 1.9 \times 10^{-6} MPa$ .

Materialklasse	N - Konzentration	O <sub>i</sub>
1: 0.9-1.4Ωcm	$1-2\times10^{14} \text{cm}^{-3}$	$6.3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$
2: 8.2-10.0Ωcm	$1-2\times10^{14} \text{cm}^{-3}$	$5.9 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$
3: 70-75Ωcm	$3-4\times10^{13} \text{cm}^{-3}$	$6.8 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$

Tabelle 3.2: Konstanten  $C_{uy}$  und U für verschiedene Materialien

Die Verläufe sind mit den Meßpunkten in Abbildung 3.15 dargestellt.

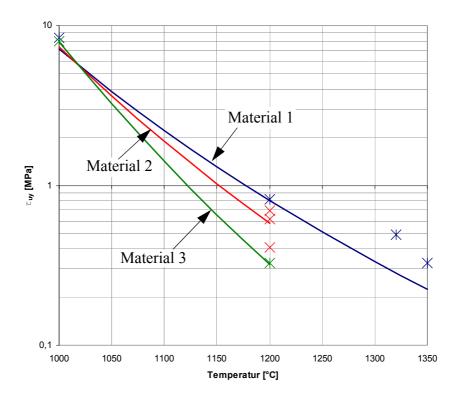


Abbildung 3.15: Upper Yield Stress  $\tau_{uv}$  - Regressionskurven und Meßpunkte nach [48]

## 3.2 Die Lagerungskontaktproblematik

# 3.2.1 Halbanalytische Bestimmung der Kontaktspannungen

Grundlagen des Herz'schen Kontaktproblems

Bei den meisten technischen Anwendungen wird die Herz'sche Kontaktpressung häufig vernachlässigt. Die hohen Prozeßtemperaturen mit der damit verbundenen niedrigen Fließgrenze, sowie die sehr kleinen Kontaktflächen können schon unter dem Wafereigengewicht zu Vergleitungen führen. Eine detaillierte Betrachtung dieses Problems wird damit notwendig. Ausgehend von 2 Kugeln, welche sich gegenseitig berühren (Abbildung 3.16) finden sich analytische Lösungen ([49], [50], [51]) zur Ermittlung der Kontaktspannung und Kontaktfläche.

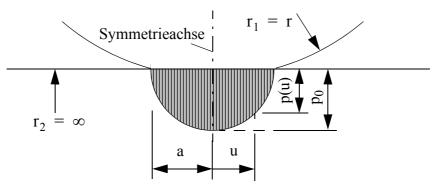


Abbildung 3.16: Verlauf der Kontaktpressung nach Herz

Der Verlauf der Kontaktpressung in Abhängigkeit des Abstandes u von der Symmetrieachse der Kontaktfläche berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$p(u) = p_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{u^2}{a^2}}$$
 (3.85)

p Kontaktpressung

u Abstand zur Symmetrieachse der Kontaktfläche

a Kontaktflächenradius

p<sub>0</sub> Kontaktpressung im Zentrum der Kontaktfläche

Unter Annahme eines gleichen E-Moduls beider Körper, sowie  $r_2 = \infty$  und  $r_1 = r$  lautet die analytische Lösung für die Kontaktpressung und den Kontaktflächenradius:

$$p_0 = \frac{1}{\pi} \cdot \sqrt[3]{\frac{3 \cdot FE^2}{2 \cdot r^2 (1 - v^2)^2}}$$
 (3.86)

$$a = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot \operatorname{Fr}(1 - v^2)}{2 \cdot \operatorname{E}}}$$
 (3.87)

F Gesamtkraft im Kontaktbereich

E E-Modul

v Querdehnungszahl

r Krümmungsradius der ersten Kontaktfläche  $r_1 = r$ 

## Spannungen entlang der Symmetrieachse x

Zunächst könnte man annehmen, daß die maximale Beanspruchung des Materials direkt an der Kontaktstelle auftritt. In [52] wurde jedoch gezeigt, daß sich bei räumlicher Betrachtung ein wesentlich komplexerer Zustand einstellt. An der Kontaktstelle herrscht ein nahezu hydrostatischer Druck, wonach die Gestaltänderung des Materials eher gering ist. Es gilt nun, den Ort aufzufinden, an welchem das Material am größten beansprucht ist.

Der Spannungszustand in unmittelbarer Nähe der Kontaktstelle wird in o.g. Literaturstelle analytisch angegeben. Man spricht vom unendlich-isotropen Halbraum, da der zu betrachtende Körper zwar unendlich groß, aber in eine Richtung begrenzt ist. Damit beschränkt sich die Betrachtung der Spannungen ebenfalls nur in diese Richtung. Die Begrenzung des Wafers in alle Raumrichtungen (Dicke, Durchmesser) wird bei der analytischen Lösungsfindung vernachlässigt. Der Spannungszustand klingt ohnehin sehr stark ins Waferinnere ab, wonach diese Annahme ausreichend ist.

In Abbildung 3.17 sind die Spannungsverläufe im Halbraum entlang der Symmetrieachse für  $p_0 = 1$  und a = 1 dargestellt.

Der Spannungsverlauf  $\sigma_x$  in Richtung der Waferdicke x lautet:

$$\sigma_{x}(x) = -p_0 \frac{a^2}{x^2 + a^2}$$
 (3.88)

sowie der Verlauf der Radialspannung  $\sigma_r$  und der Umfangspannung (Tangentialspannung)  $\sigma_t$  :

$$\sigma_{\rm r}({\rm x}) = \sigma_{\rm t}({\rm x}) = -(1+{\rm v}) \cdot p_0 \left(1 - \frac{{\rm x}}{{\rm a}} \cdot \arctan \frac{{\rm a}}{{\rm x}}\right) + \frac{p_0}{2} \cdot \frac{{\rm a}^2}{{\rm x}^2 + {\rm a}^2}$$
 (3.89)

Nach der Mohrschen Theorie wird die Beanspruchung des Materials dort am größten, wo die Schubspannungen maximal werden. Die Hauptschubspannungen treten unter 45° zur x- Achse auf:

$$\tau(x) = \frac{(\sigma_r - \sigma_x)}{2} \tag{3.90}$$

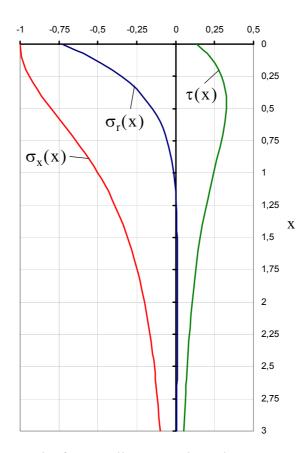


Abbildung 3.17: Spannungsverläufe im Halbraum entlang der Symmetrieachse

#### Kristallschubspannungen

Der Spannungszustand liegt nun im zylindrischen Koordinatensystem vor. Die Gleitsysteme und zugehörigen Kristallschubspannungen ergeben sich aus dem Spannungszustand im kartesischen Koordinatensystem. Im Winkel von 0° (z - Achse fällt mit  $\phi=0$  zusammen) erfolgt die Transformation des Spannungszustandes wie folgt:

$$\begin{pmatrix}
\sigma_{x} & 0 & 0 \\
0 & \sigma_{r} & \tau_{rt} \\
0 & \tau_{tr} & \sigma_{t}
\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}
\sigma_{xx} & 0 & 0 \\
0 & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\
0 & \tau_{zy} & \sigma_{zz}
\end{pmatrix}$$
(3.91)

Mit  $\tau_{xr}=0$  in der Symmetrieachse und den Gleichungen (3.38) - (3.49) wird die Oktaeder - Kristallschubspannungen beispielsweise  $_1^o\tau_1^R$  zu:

$${}_{1}^{o}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}(\sigma_{t} - \sigma_{x}) \tag{3.92}$$

Mit:

$$\sigma_{\rm r} = \sigma_{\rm t} \tag{3.93}$$

sowie Gleichung (3.90) findet sich eine einfache Form:

$${}_{1}^{0}\tau_{1}^{R} = \frac{2}{\sqrt{6}}\tau$$
 (3.94)

Für alle weiteren Oktaeder-Kristallschubspannungen ergeben sich die Zusammenhänge nach Tabelle 3.3:

o R i <sup>t</sup> j		j		
		1	2	3
	1	$\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$	0	$-\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$
i	2	$\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$	0	$-\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$
	3	$\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$	0	$-\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$
	4	$\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$	0	$-\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$

Tabelle 3.3: Oktaeder-Kristallschubspannungen entlang der Symmetrieachse

Da in der Symmetrieachse ein Hauptachsenzustand vorliegt, werden alle kubischen Kristallschubspannungen zu Null.

$${}^{\mathbf{k}}_{\mathbf{i}} \mathbf{\tau}^{\mathbf{R}}_{\mathbf{j}} = 0 \tag{3.95}$$

Mit der Symmetrie in den Oktaeder-Kristallschubspannungen, sowie Gleichung (3.95) reduziert sich die Auswertung auf prinzipiell 3 Kristallschubspannungen (für jeweils alle j=1,2,3), welche eine einfache Behandlung des Kontaktproblemes ermöglicht. Für ein orthotropes Material existiert kein analytischer Ansatz. Aus diesem Grund wird mit einer isotropen Näherung nach Reuss weitergearbeitet.

Der Verlauf der betragsmäßig maximalen Kristallschubspannung orientiert sich nach Tabelle 3.3 am Verlauf der Hauptschubspannung. Ausgeschrieben erhält man für diesen Verlauf:

$$\tau(x) = \frac{(\sigma_r - \sigma_x)}{2} = \frac{1}{2} \left( -\frac{3}{2} \cdot \frac{a^2 p_0}{(a^2 + x^2)} - (1 + v) \cdot p_0 \left( 1 - \frac{x \cdot \arctan\left(\frac{a}{x}\right)}{a} \right) \right)$$
(3.96)

mit der betragsmäßig maximalen Kristallschubspannung:

$$\max \left| {}_{i}^{o} \tau_{j}^{R} \right| (x) = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \left( -\frac{3}{2} \cdot \frac{a^{2} p_{0}}{\left(a^{2} + x^{2}\right)} - (1 + v) \cdot p_{0} \left( 1 - \frac{x \cdot \arctan\left(\frac{a}{x}\right)}{a} \right) \right|$$
(3.97)

Mit der Querdehnzahl ergibt sich der Ort des Spannungsmaximums:

$$v_{\text{Reuss}} = 0.228 \tag{3.98}$$

mit der Lösung für x an der Stelle:

$$\frac{d}{dx} \max \left| {}_{i}^{0} \tau_{j}^{R} \right| (x) = 0 \Rightarrow x = 0.457 \cdot a$$
 (3.99)

Die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung an der Stelle  $x = 0.457 \cdot a$  wird schließlich zu:

$$\max \left| {}_{i}^{o} \tau_{j}^{R} \right| (x) = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \left( -\frac{3}{2} \cdot \frac{p_{0}}{1,209} - (1+v) \cdot p_{0} \cdot 0,478 \right) \right|$$
(3.100)

Biegespannungen

Bei realer Lagerung des Wafers findet eine Überlagerung von Kontakt- und Biegespannungszustand statt. Es entstehen die in Abbildung 3.18 skizzierten Verhältnisse.

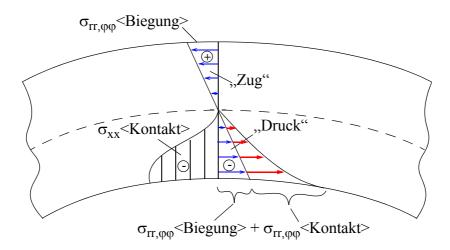


Abbildung 3.18 Biege- und Kontaktproblem

Wie gezeigt, ist die Kontaktproblematik nichtlinear. Der reine Biegespannungszustand ließe sich hingegen linear berechnen. Eine Superposition ist damit nicht zulässig.

Betrachtet man aber die jeweiligen Verzerrungszustände in unmittelbarere Näher eines Lagerpunktes, so ist das Biegeproblem vorwiegend mit Verzerrungen in Scheibenebene verbunden  $(\epsilon_{rr}, \epsilon_{\phi\phi})$ , wobei die Verzerrungen in Dickenrichtung  $(\epsilon_{xx})$  demgegenüber sehr gering ausfallen. Beim Kontaktproblem werden wiederum die Verzerrungen in Dickenrichtung dominieren, während die Verzerrungen in Scheibenebene, infolge behinderter Querdehnung wieder kleiner sind. Ähnliche Zusammenhänge ergeben sich für die jeweiligen Schubverzerrungen (vgl. Abbildung 3.19). Damit kann davon ausgegangen werden, daß die Verzerrungstensoren nähe-

rungsweise orthogonal zueinander liegen und sich die Verzerrungszustände nur unwesentlich gegeneinander beeinflussen.

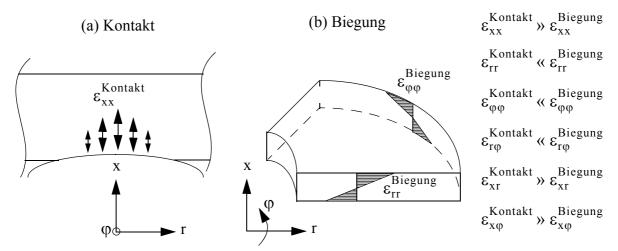


Abbildung 3.19: Verzerrungen bei Kontakt und Biegung

Diese Annahmen und die damit verbundene Zulässigkeit einer Überlagerung beider Spannungszustände wird im nachfolgenden Kapitel numerisch überprüft. Für eine Überlagerung gibt es zunächst 2 Möglichkeiten:

- 1. Überlagerung der einzelnen Komponenten des Spannungstensors mit anschließender Ermittlung der Kristallschubspannungen
- 2. Getrennte Ermittlung der Kristallschubspannungen für Biegung und Kontakt sowie anschließende Überlagerung aller Kristallschubspannungen

Die Berechnung aller 18 Kristallschubspannungen gestaltet sich im Allgemeinen als sehr zeitaufwändig. Aufgrund der Symmetrien (Tabelle 3.3) und der zu Null werdenden kubischen Kristallschubspannungen wird aber die Möglichkeit 2 als optimal angesehen, da sich eine anschließende Auswertung nur noch auf insgesamt 3 Kristallschubspannungen reduziert. Es wird darauf hingewiesen, daß die Spannungen beider Zustände in identischen Koordinatensystemen für eine Superposition vorliegen müssen.

Für die Ermittlung der Biegespannungen ist eine analytische Lösung bei Punktlagerung (Pinlagerung) sehr aufwändig. Es wird deshalb auf numerische Methoden (FEM) zurückgegriffen. Dazu dient als Programmsystem Abaqus 6.5-1. In [7] sind die Biegespannungen für verschiedene Pinkonfigurationen mittels Abaqus berechnet worden. Variiert wurden dabei die radiale Position der Pins (bei  $R_L = 50;\,75;\,100;\,112.5;\,125;\,137.5;\,149$  mm), sowie die Anzahl der Pins (4-, 6-Pinlagerung).

Das verwendete Modell wurde mit 2D-Shell-Elementen vernetzt. Unter der Annahme, daß sich die Lagerpins auf ideal gleicher Höhe befinden und symmetrisch angeordnet sind, verteilen sich die Lagerkräfte unter Eigengewicht des Wafers auf jeden Pin gleich.

Mit einer punktförmigen Lagerung wird das Biegeproblem in unmittelbarer Nähe des Lagerpunktes nicht ausreichend abgebildet. Die Theorie liefert bei einer 2D - Elementierung eine Singularität für die Biegespannungen. Mit einer konstanten Verteilung der Lagerkräfte auf eine Kreisfläche mit dem Radius r = 0.5 mm wird dieses Problem gelöst. Diese Annahme wird damit begründet, daß es unter der punktförmigen Lagerung zu einem Durchstanzkegel bzw. Lastausbreitungswinkel ([53], [54]) kommt. Dieser Durchstanzkegel besitzt abhängig vom Material un-

terschiedliche Winkel (Abbildung 3.20), aus welchem sich auch der Radius der Kreisflächenlagerung ableitet.

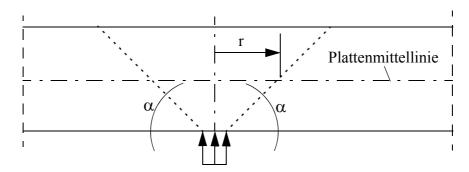


Abbildung 3.20: prinzipielle Lastverteilung bei Punktlagerung

Unter Heranziehung eines orthotropen Materials wird für eine 4-Pinlagerung, unter Ausnutzung doppelter Symmetrie (Abbildung 3.21), ein FE-Modell zur Berechnung der Biegespannungen entwickelt (Abbildung 3.22).

Die radiale Position der Pins ist auf r = 112.5 mm nach [7] gewählt. Bei r < 112.5 mm werden die Radial(-biege-)spannungen größer als die Umfangs(-biege-)spannungen über dem Lagerpunkt und bei r > 112.5 mm dominieren die Umfangs(-biege-)spannungen gegenüber den Radial(-biege-)spannungen. Das Optimum bezüglich der Ausnutzung des Materials liegt somit dort, wo Radial- und Umfangsspannungen etwa gleich groß sind.

Für eine entsprechende Genauigkeit der Biegespannungen und um auch die Stützfläche von  $0.5\,$ mm abzubilden ist im FE-Modell das Netz im Lagerbereich stark verfeinert worden (Abbildung  $3.21\,$ unten). Die Spannungen liegen zunächst in zylindrischen Koordinaten r,  $\phi$  vor (Abbildung  $3.21\,$ oben). Zur Berechnung der Kristallschubspannungen wurden die zylindrischen Biegespannungen in kartesische Koordinaten überführt und anschließend daraus nach Anlage  $A3\,$ die Kristallschubspannungen ermittelt. Die Auswertung der Biegespannungen erfolgt auf der Waferunterseite, da hier im Anschluß eine Überlagerung mit den Kontaktspannungen erfolgen soll. In Anlage  $A4\,$ sind die Spannungsfelder des Waferviertelmodells als Kontourplot dargestellt.

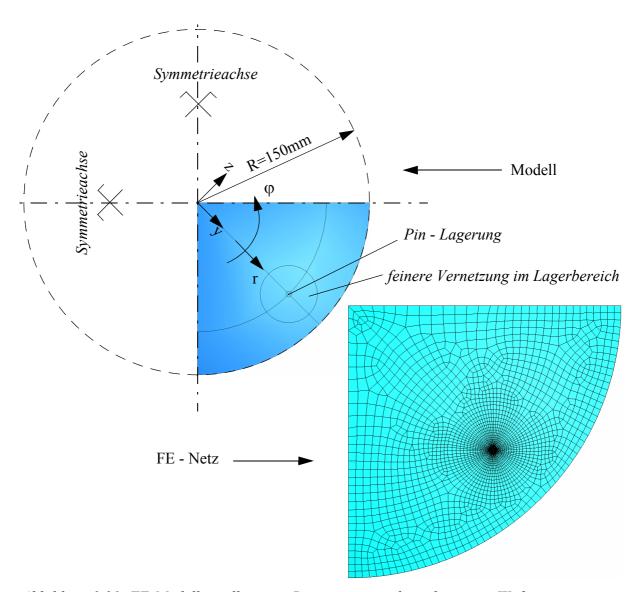


Abbildung 3.21: FE-Modellerstellung zur Biegespannungsberechnung im Wafer

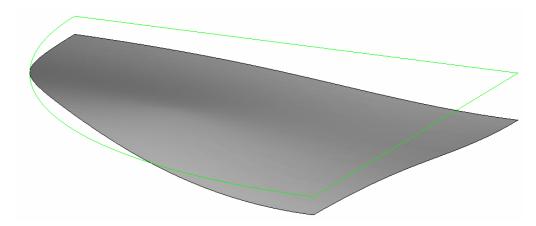


Abbildung 3.22: Verformungsbild im Wafer-Viertelmodell unter Eigenlast

Eine Zusammenfassung der maximalen Kristallschubspannungen kann Anlage A4 und über dem Lagerpunkt aus Tabelle 3.4 entnommen werden. Es zeigte sich eine ähnliche Symmetrie in

den Kristallschubspannungen wie in Tabelle 3.3. Die leichte Abweichung ist darauf zurückzuführen, daß der Biegespannungszustand im Bereich des Lagerpunktes nicht 100%ig rotationssymmetrisch ist.

${\displaystyle \mathop{\circ}_{i}}^{R}{\displaystyle \mathop{\tau}_{j}}$		j		
	/IPa]	1	2	3
	1	-0,6131	0	0,5387
i	2	-0,6131	0	0,5387
	3	-0,6131	0	0,5387
	4	-0,6131	0	0,5387

Tabelle 3.4: Oktaeder-Kristallschubspannungen im Lagerpunkt

Alle kubischen Kristallschubspannungen  ${}^k_i \tau^R_j$  werden entlang der Symmetrieachse zu Null. Beim Vergleich von Tabelle 3.3 mit Tabelle 3.4 fällt weiterhin auf, daß sich die Biegespannungen im Hinblick auf die zu erwartenden Vergleitungen positiv auswirken (entgegengesetzte Vorzeichen). Für das erstmalige Einsetzen von Vergleitungen ist zunächst irrelevant, in welche Richtungen diese stattfinden. Es soll deshalb eine Überlagerung mit den betragsmäßig maximalen Schubspannungen  ${}^o_i \tau^R_3$  vollzogen werden.

Unter Annahme eines lineares Biegespannungsverlaufes über die Waferdicke beträgt  ${}_{i}^{o}\tau_{3}^{R}$  nach Tabelle 3.4 auf Waferunter- und -oberseite:

$$_{i}^{o}\tau_{3}^{R} = \tau_{\text{Biegung}}^{\text{unten}} = 0,5387\text{MPa} = -\tau_{\text{Biegung}}^{\text{oben}}$$
 (3.101)

Beginnend mit x = 0 auf der Waferunterseite ergibt sich der lineare funktionale Zusammenhang der Kristallschubspannung aus Biegung:

$$\tau_{\text{Biegung}}(x) = 0.539 \text{MPa} - 1.39 \frac{\text{MPa}}{\text{mm}} \cdot x$$
 (3.102)

Für die Kontaktspannung aus Tabelle 3.3:

$${}_{i}^{o}\tau_{3}^{R} = \max \left| {}_{i}^{o}\tau_{j}^{R} \right|(x) = \tau_{Kontakt}(x) = -\frac{2}{\sqrt{6}}\tau$$
(3.103)

mit dem betragsmäßigen Maximum bei:

$$x = 0.457 \cdot a \tag{3.104}$$

Gleichung (3.100) gibt die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung infolge Kontakt an. Zusammen mit der Gleichung (3.86) kann die Kristallschubspannung in Abhängigkeit der Lagerkraft, des E-Moduls und der Querkontraktionszahl angegeben werden.

Numerisch ergibt sich für F = 0.313 N die max. Kristallschubspannung in Abhängigkeit des Lagerkrümmungsradius (r in [mm];  $\tau$  in [MPa]):

$$\tau_{\text{Kontakt}}(x = 0.457 \cdot a) = -201.334 \cdot \sqrt[3]{\frac{1}{r^2}}$$
 (3.105)

Die Biegespannung am Ort des Maximums ( $x = 0.457 \cdot a$ ) der Kontaktspannung lautet nach den Gleichungen (3.87) und (3.102):

$$\tau_{\text{Biggung}}(x = 0.457 \cdot a) = 0.539 - 1.01775 \times 10^{-2} \cdot \sqrt[3]{r}$$
 (3.106)

Schließlich lautet die aus Biege- und Kontaktspannung überlagerte Gesamtspannung (r in [mm];  $\tau$  in [MPa]):

$$\tau_{\text{Gesamt}}(x = 0.457 \cdot a) = 0.539 - 1.01775 \times 10^{-2} \cdot \sqrt[3]{r} - 201.334 \cdot \sqrt[3]{\frac{1}{r^2}}$$
 (3.107)

## 3.2.2 Numerische Untersuchungen

Während der halbanalytischen Herleitung aus Abschnitt 3.2.1 wurden zwei Annahmen getroffen:

- Zulässigkeit einer Überlagerung von Spannungen aus Kontakt (nichtlinear) mit Spannungen aus Biegung (linear)
- konstante Verteilung der Lagerkräfte auf eine Kreisfläche mit dem Radius r = 0.5 mm

Diese Annahmen gilt es nun in Hinblick auf ihre Zulässigkeit zu überprüfen. Eine detaillierte numerische Untersuchung des Kontaktbereiches mit einzelnen ausgewählten Lagerkrümmungsradien erscheint daher sinnvoll.

Die Entwicklung eines Wafergesamtmodelles unter Berücksichtigung von Biege- und Kontaktspannungen gestaltet sich aufgrund der Komplexität und außerordentlich hohen Rechenzeit als sehr aufwendig. Da ohnehin nur die Spannungen direkt über dem Kontaktbereich von Interesse sind, wird die Möglichkeit eines reduzierten Modells herangezogen.

Anlage A4 zeigt in der Umgebung des Lagerpunktes einen nahezu rotationssymmetrischen Spannungszustand. Die vorliegende (näherungsweise) Rotationssymmetrie dient als Grundlage eines rotationssymmetrischen Teilmodells, mit welchem die genannten Probleme gelöst werden können

Ausgehend vom Waferviertelmodell (Abbildung 3.21, Abbildung 3.23a) wird ein Waferausschnitt im Radius von 25 mm gedanklich herausgetrennt und die verbleibenden Schnittkräfte (rotationssymmetrisch) angetragen (Abbildung 3.23b). Diese aus der FE-Berechnung bereits bekannten Schnittkräfte werden in äquivalente Einzelkräfte über den Waferquerschnitt umgerechnet und an ein rotationssymmetrisches Teilmodell angetragen (Abbildung 3.23c).

Mit diesem vereinfachten rotationssymmetrischen Wafermodell wird anschließend das Pinlager mit verschiedenen Krümmungsradien (r = 100, 500, 1000, 5000 mm) modelliert (Abbildung 3.23c). Unter Belastung stellt sich nun eine Kontaktfläche mit entspechender Flächenpressung ein.

In Anlage A5 sind für die gegebenen Krümmungsradien die zugehörigen Spannungzustände  $(\sigma_{VM},\sigma_{rr},\sigma_{xx},\sigma_{\phi\phi} \text{ und } \tau_{xr}) \text{ dargestellt. Zur Berechnung der Kristallschubspannungen }_{i}^{o}\tau_{j}^{R} \text{ und }_{i}^{k}\tau_{j}^{R} \text{ erfolgte die Transformation analog zu Gleichung (3.91).}$ 

$$\begin{pmatrix}
\sigma_{xx} & \tau_{xr} & 0 \\
\tau_{rx} & \sigma_{rr} & 0 \\
0 & 0 & \sigma_{00}
\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}
\sigma_{xx} & \tau_{xx} & 0 \\
\tau_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\
0 & 0 & \sigma_{zz}
\end{pmatrix}$$
(3.108)

Eine Zusammenfassung aller betragsmäßig maximalen Kristallschubspannungen in den Gleitsystemen wird im Anschluß an Anlage A5.5 gegeben.

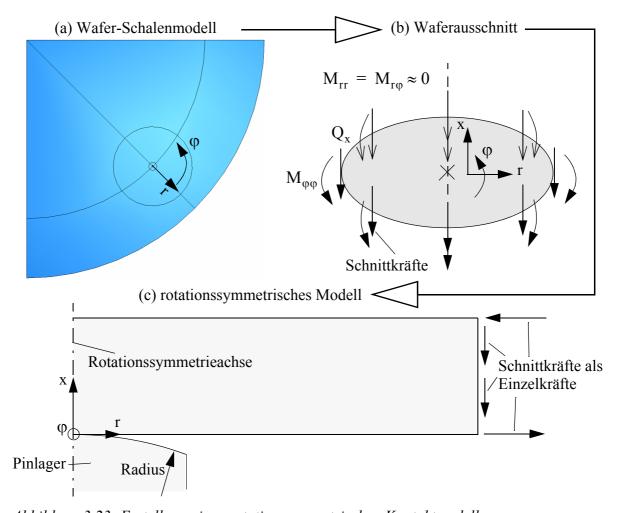


Abbildung 3.23: Erstellung eines rotationssymmetrischen Kontaktmodells

Zum Vergleich mit den analytischen Lösungen aus Abschnitt 3.2.1 werden in einem Diagramm (Abbildung 3.24) die betragsmäßig maximalen Kristallschubspannungen in Abhängigkeit vom Lagerkrümmungsradius dargestellt.

Die betragsmäßig maximalen Kristallschubspannungen der numerischen FE-Berechnungen finden sich im Diagramm als Punkte wieder. Im Vergleich dazu sind die analytischen Herleitungen als Linien dargestellt.

Die blaue Linie gibt die Kristallschubspannung infolge reinem Kontakt nach Gleichung (3.105) und die grüne Linie die Kristallschubspannung aus reiner Biegung (Tabelle 3.4) an. Da sich der Ort der maximalen Kristallschubspannung mit zunehmendem Lagerkrümmungsradius weiter ins Waferinnere verlagert, nimmt die der Kontaktspannung überlagerten Biegespannung nach Gleichung (3.106) ab (Strichpunktlinie). Die Biegespannung besitzt das entgegengesetzte Vorzeichen zur Kontaktspannung und wirkt damit entlastend auf das Gesamtspannungsniveau (Gleichung (3.107), rote Linie).

Zunächst zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der betragsmäßig maximalen Kristallschubspannungen aus den FE-Berechnungen mit der roten Kurve für r = 100, 500 und 1000 mm. Bei r = 5000 mm sinkt die maximale Kristallschubspannung nicht mehr weiter ab. Dies wird damit begründet, daß die maximalen Kontaktspannungen mit zunehmendem Lagerkrümmungsradius kleiner werden und immer weiter ins Waferinnere reichen, während die Biegespannungen auf der Waferoberseite nur gering beeinflußt werden. Ab einem Lagerkrümmungsradius

von r  $\sim$  1200 mm (Verzweigungspunkt) finden sich die maximalen Kristallschubspannungen nicht mehr auf der Waferunterseite (Kontakt), sondern auf der Waferoberseite (Biegung) - vgl. Anlage A5.

Die maximale Kristallschubspannung fällt bei r = 5000 mm etwas höher aus, als die theoretisch vorhergesagte Biegespannung auf der Waferoberseite. Dies liegt am geringen aber trotzdem vorhandenen Einfluß der Kontaktspannungen, welcher sich bis auf die Waferoberseite auswirkt. Für eine Überlagerung der Spannungszustände auf der Waferoberseite besitzen die Biege- und Kontaktspannung außerdem gleiche Vorzeichen.

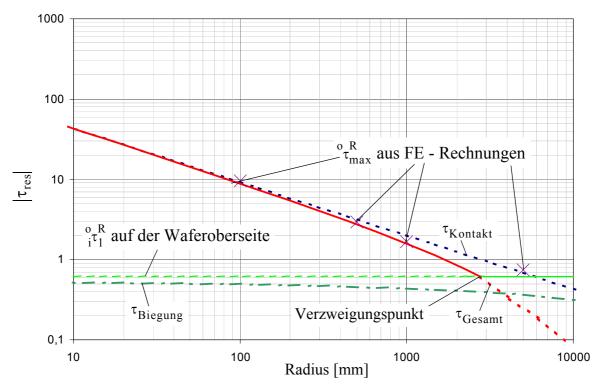


Abbildung 3.24: Vergleich der maximalen Kristallschubspannungen  ${}^{\rm o}_{\rm i} {}^{\rm R}_{\rm i}$  im Kontaktbereich

## 3.2.3 Problematik der FE - Diskretisierung

Das Kontaktproblem ist wie bereits erläutert nichtlinear. Infolge der Berührung zweier Körper entsteht zwischen ihnen eine Kontaktfläche. Innerhalb dieser Kontaktfläche werden die Kräfte über Flächenpressung übertragen. Mit zunehmender Kraft vergrößert sich die Kontaktfläche. Die in der Realität kontinuierliche Verteilung der Kontaktpressung erfolgt in der FE-Diskretisierung über Knoteneinzelkräfte an den Oberflächenelementen. Die beiden sich gegenseitig berührenden Oberflächen werden im FE-Programm jeweils als Master- und Slaveoberfläche definiert. Diese Definition ist für die Kontaktprozedur notwendig ([55], [56]). Die folgenden Probleme stellen sich bei der Bearbeitung dieses Kontaktproblemes mit FEM:

- die Diskretisierung der Kontaktfläche
- die Konvergenz des Kontaktalgorithmus
- die Rechenzeit

Für eine ausreichende Diskretisierung der Kontaktfläche ist es zunächst notwendig die Größe der Kontaktfläche abzuschätzen. Analytisch kann der Kontaktflächenradius nach Gleichung

(3.87) ermittelt werden (Abbildung 3.25, blaue Kurve). Für den kleinsten gewählten Krümmungsradius von 100 mm ergibt sich ein Kontaktflächenradius von 65.33 µm. Eine entsprechende Vernetzung muß demnach mit Elementen mit Kantenlängen von einigen Mikrometern erfolgen (Abbildung 3.26). Mit diesen äußerst geringen Elementgrößen ergibt sich eine unvermeidbar hohe Netzdichte beider Körper.

Das Konvergenzproblem stellt sich dahingehend dar, daß ein für die Kontaktberechnung komplexer Lösungsalgorithmus notwendig ist. Dieser führt oftmals zu einem Abbruch der Lösung. Insbesondere kann die Konvergenz erschwert werden, wenn:

- sich im Laufe der Berechnung einzelne Oberflächenknoten nach Kontakt wieder lösen, d.h. wenn eine Laststeigerung zu einer Umlagerung der Kräfte führt.
- die Master- und Slave-Oberflächen nicht richtig zugewiesen sind (Abbildung 3.27). Man beachte, daß Masterknoten während der Berechnungsprozedur in die Slaveoberfläche eindringen können (Abbildung 3.27b), aber Slaveknoten dagegen nicht in die Master- oberfläche (Abbildung 3.27a). Zur Vermeidung dieses Problemes sollten entweder gleich dichte Netze mit direkt gegenüberliegenden Knoten verwendet werden, oder die dichter vernetzte Oberfläche als Slave Fläche im FE-Programm definiert werden (Siehe auch [55] und [56]).

Das für dieses Kontaktproblem erforderliche dichte Netz, eine hohe Anzahl von Iterationen, sowie zusätzlichen Konvergenzproblemen, hat eine hohe Rechenzeit zur Folge. Aus diesem Grund wurde auf ein vereinfachtes rotationssymmetrisches Modell zurückgegriffen.

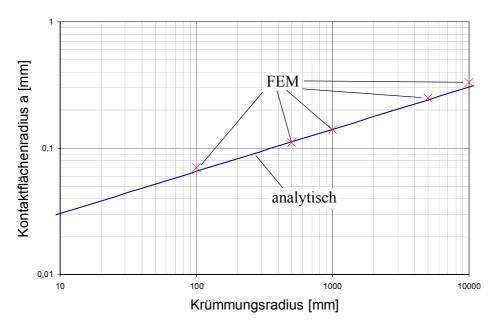


Abbildung 3.25: Kontaktflächenradius a in Abhängigkeit vom Lagerkrümmungsradius

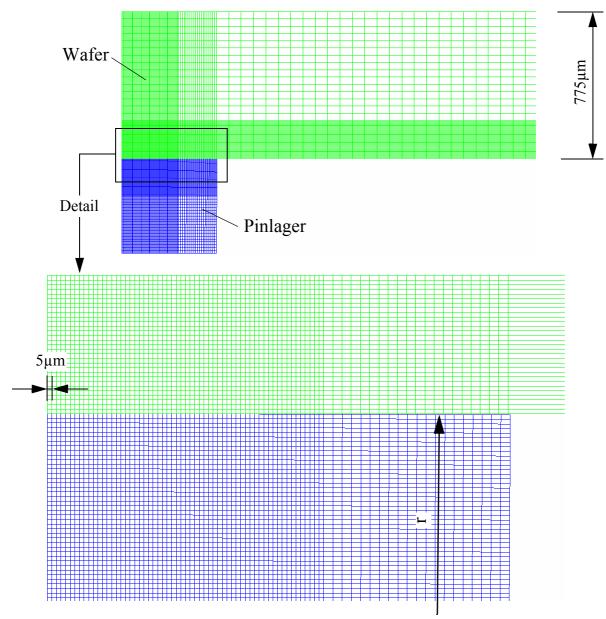


Abbildung 3.26: FE-Netz im Kontaktbereich

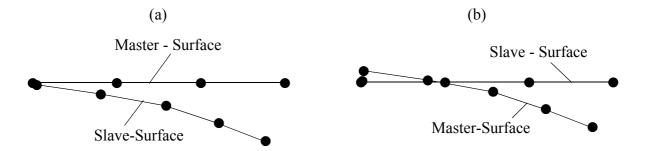


Abbildung 3.27: Definition der Kontaktflächen

## 3.2.4 Zusammenfassung zu den gravitationsinduzierten Spannungen

Für die stationäre Plateauphase des Annealing-Prozesses unter Höchsttemperatur bei Gravitationsbelastung ist für Pin-Lagerungen der Kontaktbereich von dominanter Bedeutung. Um das Vergleiten zu verhindern sollte, falls der Upper Yield Stress unterschritten werden soll, für das vorliegende Problem eine kugelförmige Lageroberfläche mit einem Krümmungsradius r vorgesehen werden gemäß:

$$\tau_{Gesamt}(r) \le \tau_{uv} \tag{3.109}$$

Zur Verifizierung dieser theoretischen Erkenntnisse wurden durch den Lehrstuhl Mikrosystemtechnik der BTU-Cottbus [58] im Auftrag der Firma Siltronic AG spezielle Lagerpins mit großem Krümmungsradius hergestellt. Mittels eigens umgebauter Läppmaschine konnte die Oberfläche der Lagerpins (Ø 5mm) entsprechend bearbeitet werden. Die Positionierung dieser Pins wurde durch einen Grundträger mit eingefrästen Löchern größeren Durchmessers realisiert (Abbildung 3.28). Zu beachten ist dabei, daß:

- der Grundträger eine entsprechend hohe Biegesteifigkeit aufweisen muß, um Verformungen infolge Eigengewicht möglichst gering zu halten
- die PIN's parallel auf dem Träger aufliegen müssen, damit die Wafer auch die Wirkfläche der PIN's berühren

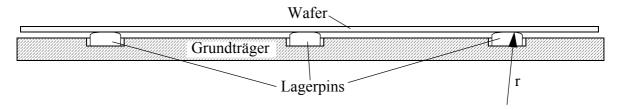


Abbildung 3.28: Prototyp für Lagerung eines Wafers auf Pins mit großem Krümmungsradius r

Mit den zur Verfügung stehenden Meßmethoden (SIRD), konnten Plastifizierungen im Wafer nach Testfahrten mit geringer Aufheizgeschwindigkeit lokalisiert und quantitativ bewertet werden. Dabei wurde eine gute Übereinstimmung der Meßergebnisse mit den theoretischen Biegeund Kontaktmodellen festgestellt.

## 3.3 Besonderheiten der Wärmeübertragung

Im Annealprozeß ist dem Biege- und Kontaktspannungszustand ein Wärmespannungszustand überlagert. Das hier vorliegende zeitlich (Vertikalofenanneal) oder räumlich (Rapid Thermal Anneal = RTA) veränderliche Temperaturfeld der Ofenwände verursacht im Wafer ein ungleichmäßiges Temperaturfeld mit Temperaturgradienten und somit Wärmespannungen. Die Wärmeübertragung findet zunächst von der Ofenwand auf den Wafer durch Konvektion und Wärmestrahlung und innerhalb des Wafers durch Wärmeleitung statt. In den folgenden Kapiteln wird auf die einzelnen Übertragungsmechanismen detailliert eingegangen und es werden entsprechende vereinfachte analytische Modelle vorgestellt.

#### 3.3.1 Reine Leitung

Während des Aufheizprozesses im Vertikalofenanneal werden die Ofenwände zunächst mit einer konstanten Geschwindigkeit (Ramprate) aufgeheizt. Diese Ramprate wird im Verlauf des Prozesses stufenweise angepaßt. Als einfachsten Zugang vernachlässigt man die Effekte der

Wärmestrahlung (Boltzmann-Gesetz) und der Konvektion im Ofen und nimmt stattdessen einen direkten Kontakt zwischen Ofenwand und Waferaußenkante an. Dabei treten folgende Effekte auf:

- die Temperatur im Wafer steigt mit der Temperatur der Ofenwand (temperaturgesteuert)
- es entsteht ein Temperaturgefälle (Temperaturgradient) von Waferaußenkante zu Waferzentrum
- die Temperaturgradienten erzeugen Spannungen im Wafer

Für diesen instationären Prozeßabschnitt werden nun weitere Vereinfachungen getroffen:

- es findet kein Wärmeaustausch über die Waferober- und -unterseite statt -> Scheibenproblem
- die Ofenwandtemperatur wird mit einer konstanten Ramprate erhöht
- die Materialparameter werden als temperaturunabhängig angenommen
- es wird angenommen, daß die Temperaturerhöhung unendlich lang stattfindet
- somit stellt sich ein konstantes Temperaturgefälle ein (quasistationär)
- das zeitlich konstante Temperaturgefälle erzeugt zeitlich konstante Spannungen

Mit diesen Annahmen ist es im folgenden möglich, ein analytisches Prozeßmodell unter Berücksichtigung der Wärmeleitung im Wafer zu entwickeln (Siehe [62]).

Die analytische Lösung dieses Modelles erfolgt sequentiell. In einem ersten Schritt wird die instationäre Temperaturverteilung nach der Wärmebilanzgleichung bestimmt:

$$\lambda \cdot \Delta T = c \cdot \rho \cdot \dot{T} \tag{3.110}$$

Im zweiten Schritt erfolgt die Ermittlung des Verschiebungsfeldes (Scheibentheorie) aus dem gewonnenen Temperaturfeld:

$$\Delta \mathbf{u} + \frac{(1+\nu)}{(1-\nu)} \cdot \operatorname{graddiv} \mathbf{u} = 2 \cdot \frac{(1+\nu)}{(1-\nu)} \cdot \alpha_{\mathrm{T}} \cdot \operatorname{gradT}$$
 (3.111)

Die Spannungen werden im Anschluß daran mittels Hooke'schem Gesetz aus den Verschiebungen bzw. daraus resultierenden Verzerrungen gewonnen.

In Abbildung 3.29 ist das analytische Prozeßmodell für den Wafer dargestellt. Diesem Modell folgt ein konstanter Temperaturverlauf über den Waferumfang bei konstantem Radius und kann demzufolge als rotationssymmetrisch angenommen werden. Weiterhin ist der Temperaturverlauf über die Waferhöhe konstant.

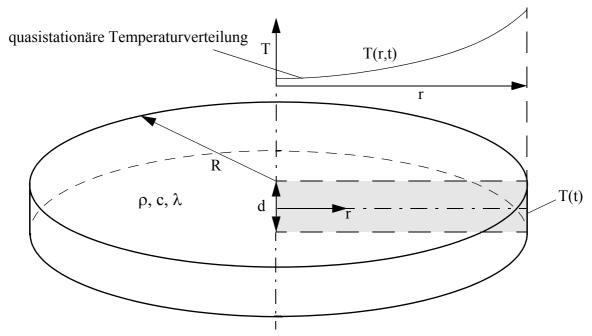


Abbildung 3.29: Kreisscheibenmodell zur analytischen Berechnung eines Aufheizprozesses

## 3.3.1.1 Berechnung der Temperaturverteilung im Wafer

Allgemeine Lösung der Wärmebilanzgleichung

Die Gleichung (3.110) erfordert den ebenen Laplace-Operator in karthesischen Koordinaten:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$
 (3.112)

In Zylinderkoordinaten lautet der Laplace-Operator (Siehe [59]):

$$\Delta_{r,\phi} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$
 (3.113)

Angewendet auf die Wärmebilanzgleichung lautet die gesamte Differentialgleichung für das in Abbildung 3.29 dargestellte Problem:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{\lambda}$$
(3.114)

Bei Rotationssymmetrie ist die Änderung der Temperatur bei konstantem Radius = 0

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} = 0 \tag{3.115}$$

womit sich Gleichung (3.114) weiter vereinfachen läßt:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{\lambda} \text{ oder mit } \frac{\partial}{\partial r} = ()' \text{ folgt } T'' + \frac{1}{r} \cdot T' = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{\lambda}$$
(3.116)

Diese Gleichung läßt sich als eine Eulersche DGL identifizieren. Die allgemeine Lösung für T(r) lautet nach Anlage A6.1:

$$T(r) = C_2 + C_1 \ln(r) + \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{4\lambda} \cdot r^2$$
 (3.117)

Anpassung an die Randbedingungen

Nach der allgemeinen Lösung der Wärmebilanzgleichung erfolgt die Anpassung an die Randbedingungen. Die folgenden 2 Randbedingungen ergeben sich für das Kreisscheibenproblem:

1. Der Temperaturgradient im Waferzentrum ist Null:

$$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r} = 0) = 0 \tag{3.118}$$

Die Ableitung von Gleichung (3.117) ergibt:

$$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{C}_1 \frac{1}{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{\rho} \cdot \dot{\mathbf{T}}}{2\lambda} \cdot \mathbf{r} \tag{3.119}$$

Mit der Randbedingung wird diese zu:

$$\frac{\partial T}{\partial r}(r=0) = C_1 \frac{1}{0} = 0$$
 (3.120)

Die erste Integrationskonstante lautet:

$$C_1 = 0$$
 (3.121)

2. Für die zweite Randbedingung wird die Temperatur  $T_a$  an der Waferaußenkante r = R vorgegeben:

$$T(r = R) = T_a \tag{3.122}$$

Woraus durch Einsetzen in Gleichung (3.117), unter Verwendung der bereits ermittelten ersten Integrationskonstanten die zweite Integrationskonstante  $C_2$  nach folgender Gleichung berechnet wird:

$$T(r = R) = T_a = C_2 + \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{4\lambda} \cdot R^2$$
 (3.123)

Die zweite Integrationskonstante wird aus Gleichung (3.123) ermittelt:

$$C_2 = T_a - \frac{c \cdot \rho \cdot T}{4\lambda} \cdot R^2 \tag{3.124}$$

Der radiale Temperaturverlauf lautet nach Einsetzen aller Integrationskonstanten:

$$T(r) = T_a - \frac{c \cdot \rho \cdot T}{4\lambda} \cdot R^2 + \frac{c \cdot \rho \cdot T}{4\lambda} \cdot r^2$$
 (3.125)

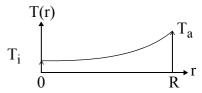
oder:

$$T(r) = T_a + \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{4\lambda} \cdot (r^2 - R^2) = T_a - \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T} \cdot R^2}{4\lambda} \cdot \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right]$$
(3.126)

mit der Temperaturdifferenz zwischen Scheibenaußenrand und Scheibenmittelpunkt:

$$\Delta T = T_a - T(r = 0) = \frac{c \cdot \rho}{4 \cdot \lambda} \cdot R^2 \cdot \dot{T}$$
(3.127)

folgt nach Einsetzen in Gleichung (3.126):



$$T(r) = T_a - \Delta T \cdot \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right]$$
 (3.128)

Dieser Verlauf stellt die zeitabhängige radiale Temperaturverteilung bei quasistationärem Aufheizprozeß mit konstanter Aufheizgeschwindigkeit  $\dot{T} = const$  dar.

## 3.3.1.2 Berechnung des Verschiebungs-, Verzerrungs- und Spannungsfeldes

Allgemeine Lösung der Lamé - Navier'schen Gleichung der Scheibentheorie

Der quasistationäre Aufheizprozeß ist charakterisiert durch eine zeitunabhängige und konstante Temperaturdifferenz zwischen Kreisscheibenrand und Kreisscheibenmitte. Der Temperaturverlauf erzeugt infolge der thermischen Ausdehnung  $\alpha_T$  ein Verschiebungsfeld.

Das Verschiebungsvektorfeld **u** aus einem vorgegebenen Temperaturfeld berechnet sich nach der Lamé-Navier'schen Gleichung der Scheibentheorie:

$$\Delta \mathbf{u} + \frac{(1+\nu)}{(1-\nu)} \cdot \operatorname{graddiv} \mathbf{u} = 2 \cdot \frac{(1+\nu)}{(1-\nu)} \cdot \alpha_{\mathrm{T}} \cdot \operatorname{gradT}$$
 (3.129)

mit den Komponenten des Verschiebungsvektors für das vorgegebene rotationssymmetrische Problem:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_r \neq 0 \\ u_{\varphi} = 0 \end{bmatrix}_{\langle \mathbf{e}_i \rangle} = u_r \mathbf{e}_r \tag{3.130}$$

Nach Anlage A6.2 läßt sich Gleichung (3.129) in die folgende verkürzte Form überführen:

$$\operatorname{mit} \frac{\partial}{\partial r} = ()' \operatorname{folgt} u'' + \frac{1}{r}u' - \frac{1}{r^2}u = (1 + v) \cdot \alpha_{\mathrm{T}} \cdot \mathrm{T}'$$
 (3.131)

Woraus deren allgemeine Lösung nach Anlage A6.2 folgt:

$$u(r) = u^{h}(r) + u^{p}(r) = C_{1} \cdot r + C_{2} \cdot \frac{1}{r} + (1 + v) \cdot \alpha_{T} \cdot \frac{\Delta T}{4R^{2}} \cdot r^{3}$$
 (3.132)

Verzerrungen

Der Verzerrungstensor ergibt sich aus dem Verschiebungsfeld, sowie nach Anlage A6.3 zu folgendem Ausdruck:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{u}_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}} & 0 \\ 0 & \frac{\mathbf{u}_{\mathbf{r}}}{\mathbf{r}} \end{bmatrix}$$
 (3.133)

Anpassung der der Lamé-Navier'schen Gleichung der Scheibentheorie an die Randbedingungen

Folgende Randbedingungen sind vorgegeben:

1. 
$$u_r(r=0) = 0$$
 (3.134)

2. 
$$\sigma_{rr}(r = R) = 0$$
 (3.135)

Für die Randbedingung 1 folgt nach Einsetzen in Gleichung (3.132):

$$C_2 = 0 \tag{3.136}$$

Für die Randbedingung 2 folgt nach Anlage A6.4:

$$C_1 = \alpha_T \left( (T(r) - T_0) - \frac{(3+v)}{4} \Delta T \right)$$
 (3.137)

Die Lösung der Verschiebungsdifferentialgleichung unter Berücksichtigung der Randbedingungen lautet:

$$u(r) = \alpha_T \left( (T(r) - T_0) - \frac{(3+\nu)}{4} \Delta T \right) \cdot r + (1+\nu) \cdot \alpha_T \cdot \frac{\Delta T}{4R^2} \cdot r^3$$
 (3.138)

Spannungsverläufe

Unter Berücksichtigung des Hooke'schen Gesetzes (Anlage A6.4) ergeben sich schließlich die Spannungsverläufe:

$$\sigma_{rr}(r) = \frac{E \cdot \alpha_{T} \cdot \Delta T}{4} \cdot \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^{2}\right]$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}(r) = \frac{E \cdot \alpha_{T} \cdot \Delta T}{4} \cdot \left[1 - 3 \cdot \left(\frac{r}{R}\right)^{2}\right]$$
(3.140)

$$\sigma_{\varphi\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{E} \cdot \alpha_{\mathrm{T}} \cdot \Delta \mathbf{T}}{4} \cdot \left[ 1 - 3 \cdot \left( \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{R}} \right)^2 \right] \tag{3.140}$$

$$\tau_{r\varphi}(r) = 0 \tag{3.141}$$

Die Verläufe der Spannungskomponenten  $\sigma_{rr}$  und  $\sigma_{\phi\phi}$  in radialer Richtung sind in Abbildung 3.30 qualitativ dargestellt.

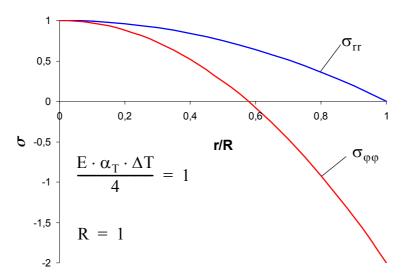


Abbildung 3.30: Qualitativer Verlauf der Spannungskomponenten

## 3.3.1.3 Ermittlung der Kristallschubspannungen

Transformation der Spannungsverläufe

Da die Ausrichtung des Kristallgitters orthogonal ist, ist es zur Berechnung der Kristallschubspannungen einfacher, die Spannungsverläufe vom zylindrischen in das karthesische Koordinatensystem zu transformieren.

Die Transformation der Basisvektoren lautet:

$$\mathbf{e}_{\mathbf{x}} = \mathbf{e}_{\mathbf{r}} \cos \varphi - \mathbf{e}_{\varphi} \sin \varphi \tag{3.142}$$

$$\mathbf{e}_{v} = \mathbf{e}_{r}\sin\phi + \mathbf{e}_{o}\cos\phi \tag{3.143}$$

Für  $\tau_{r\phi}=0$  gilt für die Komponenten des Spannungstensors in xy-Koordinaten:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{rr} \cos^2 \varphi + \sigma_{\varphi\varphi} \sin^2 \varphi \tag{3.144}$$

$$\sigma_{vv} = \sigma_{rr} \sin^2 \varphi + \sigma_{\varphi\varphi} \cos^2 \varphi \tag{3.145}$$

$$\tau_{xy} = \sigma_{rr} \sin\varphi \cos\varphi - \sigma_{\varphi\varphi} \sin\varphi \cos\varphi = \tau_{yx}$$
 (3.146)

Mit den Gleichungen (3.139), (3.140) und (3.141) lauten die Spannungskomponenten:

$$\sigma_{xx}(r, \varphi) = \frac{E \cdot \alpha_{T} \cdot \Delta T}{4R^{2}} \cdot ((R^{2} - r^{2})\cos^{2}\varphi + (R^{2} - 3r^{2})\sin^{2}\varphi)$$
 (3.147)

$$\sigma_{yy}(r,\varphi) = \frac{E \cdot \alpha_T \cdot \Delta T}{4R^2} \cdot ((R^2 - r^2)\sin^2\varphi + (R^2 - 3r^2)\cos^2\varphi)$$
(3.148)

$$\tau_{xy}(r, \phi) = \frac{E \cdot \alpha_T \cdot \Delta T}{4R^2} \cdot ((R^2 - r^2) \sin\phi \cos\phi - (R^2 - 3r^2) \sin\phi \cos\phi) \quad (3.149)$$

Sowie nach Vereinfachung:

$$\sigma_{xx}(r,\varphi) = \frac{E \cdot \alpha_T \cdot \Delta T}{4R^2} \cdot (R^2 - 2r^2 + r^2 \cos(2\varphi))$$
 (3.150)

$$\sigma_{yy}(r, \varphi) = \frac{E \cdot \alpha_T \cdot \Delta T}{4R^2} \cdot (R^2 - 2r^2 - r^2 \cos(2\varphi))$$
 (3.151)

$$\tau_{xy}(r,\varphi) = \frac{E \cdot \alpha_T \cdot \Delta T}{4R^2} \cdot (2r^2) \sin\varphi \cos\varphi \qquad (3.152)$$

Oktaeder-Kristallschubspannungen

Im nächsten Schritt erfolgt die Umrechnung der transformierten Spannungskomponenten in Kristallschubspannungen. Die Gleichungen (3.150), (3.151) und (3.152) werden in die Gleichungen aus Anlage A3 eingesetzt.

Zur besseren Übersicht sind die Oktaeder-Kristallschubspannungen in Tabelle 3.5 sortiert nach Gleitebene i und Gleitrichtung j mit:

$$\Omega = \frac{E \cdot \alpha_{T} \cdot \Delta T}{4R^{2}} \tag{3.153}$$

eingetragen.

C	R	j		
ο R i <sup>τ</sup> j		1	2	3
i	1 2	$\frac{\Omega}{\sqrt{6}}(-\sigma_{xx}-\tau_{yx})$	$\frac{\Omega}{\sqrt{6}}(\sigma_{yy} + \tau_{xy})$	$\frac{\Omega}{\Omega}$ ( $\sigma$ = $\sigma$ )
	3	$\frac{\Omega}{\sqrt{6}}(-\sigma_{xx}+\tau_{yx})$	$\frac{\Omega}{\sqrt{6}}(\sigma_{yy} - \tau_{xy})$	$\frac{\Omega}{\sqrt{6}}(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})$

Tabelle 3.5: Oktaeder-Kristallschubspannungen im Aufheizvorgang

Aufgrund von Symmetrien bei den Oktaeder-Kristallschubspannungen beschränkt sich die anschließende Auswertung auf insgesamt 5 Oktaeder-Kristallschubspannungen:

(1) Gleitebene 1 und 2; Gleitrichtung 1:

$$\int_{1,2}^{0} \tau_{1}^{R}(r, \varphi) = \frac{\Omega}{\sqrt{6}} \left( -R^{2} + 2r^{2} - r^{2} \sqrt{2} \sin\left(\frac{\pi}{4} + 2\varphi\right) \right)$$
(3.154)

Die jeweiligen Extremwerten am Waferrand (r = R) treten unter folgenden Winkeln auf:

$$\frac{d}{d\varphi_{1,2}^{0}} \tau_{1}^{R}(\mathbf{r},\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = 22.5^{\circ}; 112.5^{\circ}; 202.5^{\circ}; 292.5^{\circ}$$
(3.155)

$$\int_{1,2}^{\phi} \tau_1^R(r = R, \phi = 22.5^\circ; 202.5^\circ) = \frac{1 - \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^2$$

$$\int_{1,2}^{\phi} \tau_1^R(r = R, \phi = 112.5^\circ; 292.5^\circ) = \frac{1 + \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^2$$
(3.156)

(2) Gleitebene 3 und 4; Gleitrichtung 1:

$${}_{3,4}^{o}\tau_{1}^{R}(r,\varphi) = \frac{\Omega}{\sqrt{6}} \left( -R^{2} + 2r^{2} - r^{2}\sqrt{2}\sin\left(\frac{\pi}{4} - 2\varphi\right) \right)$$
(3.158)

Die jeweiligen Extremwerten am Waferrand (r = R) treten unter folgenden Winkeln auf:

$$\frac{d}{d\varphi^{3,4}} {}^{\circ} {}^{R}_{1}(r,\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = 67.5^{\circ}; 157.5^{\circ}; 247.5^{\circ}; 337.5^{\circ}$$
(3.159)

$$\int_{3,4}^{9} \tau_{1}^{R}(r = R, \phi = 67.5^{\circ}; 247.5^{\circ}) = \frac{1 + \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$

$$\int_{3,4}^{9} \tau_{1}^{R}(r = R, \phi = 157.5^{\circ}; 337.5^{\circ}) = \frac{1 - \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$
(3.160)

(3) Gleitebene 1 und 2; Gleitrichtung 2:

$$\int_{1,2}^{0} \tau_{2}^{R}(r, \varphi) = \frac{\Omega}{\sqrt{6}} \left( R^{2} - 2r^{2} - r^{2} \sqrt{2} \sin\left(\frac{\pi}{4} - 2\varphi\right) \right)$$
(3.162)

Die jeweiligen Extremwerten am Waferrand (r = R) treten unter folgenden Winkeln auf:

$$\frac{d}{d\phi^{1,2}} \overset{\circ}{\tau_{2}^{R}} (r, \phi) = 0 \Rightarrow \phi = 67.5^{\circ}; 157.5^{\circ}; 247.5^{\circ}; 337.5^{\circ}$$
(3.163)

$$\int_{1,2}^{y} \int_{2}^{x} r_{2}^{R}(r = R, \phi = 67.5^{\circ}; 247.5^{\circ}) = \frac{-1 + \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$

$$\int_{1,2}^{x} \int_{2}^{x} r_{2}^{R}(r = R, \phi = 157.5^{\circ}; 337.5^{\circ}) = \frac{-1 - \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$
(3.164)

(4) Gleitebene 3 und 4; Gleitrichtung 2:

$${}_{3,4}^{o}\tau_{2}^{R}(r,\varphi) = \frac{\Omega}{\sqrt{6}} \left( R^{2} - 2r^{2} - r^{2}\sqrt{2}\sin\left(\frac{\pi}{4} + 2\varphi\right) \right)$$
(3.166)

Die jeweiligen Extremwerten am Waferrand (r = R) treten unter folgenden Winkeln auf:

$$\frac{d}{d\varphi^{3,4}} \tau_{2}^{R}(\mathbf{r},\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = 22.5^{\circ}; 112.5^{\circ}; 202.5^{\circ}; 292.5^{\circ}$$
(3.167)

$$\int_{3,4}^{9} \tau_{2}^{R}(r = R, \phi = 22.5^{\circ}; 202.5^{\circ}) = \frac{-1 - \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$

$$\int_{Max}^{0} \int_{3,4}^{R} \tau_{2}^{R}(r = R, \phi = 112.5^{\circ}; 292.5^{\circ}) = \frac{-1 + \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$
(3.168)

Die Extremwerte liegen nach (1) - (4) um 22,5° zueinander versetzt mit:

$$\frac{1+\sqrt{2}}{\sqrt{6}}\Omega R^2 \tag{3.170}$$

(5) Gleitebene 1, 2, 3 und 4; Gleitrichtung 3:

$$\int_{1,2,3,4}^{0} \sigma_{3}^{R}(r,\phi) = \frac{\Omega}{\sqrt{6}} (2r^{2}\cos(2\phi))$$
 (3.171)

Die jeweiligen Extremwerten am Waferrand (r = R) treten unter folgenden Winkeln auf::

$$\frac{d}{d\omega^{1,2,3,4}} \overset{\circ}{\tau_3^{R}} (r, \varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = 0^{\circ}; 90^{\circ}; 180^{\circ}; 270^{\circ}$$
(3.172)

$$\frac{1}{1,2,3,4} \frac{\sigma^{R}}{\sigma^{R}} (r = R, \varphi = 0^{\circ}; 180^{\circ}) = \frac{2}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$

$$\frac{1}{1,2,3,4} \frac{\sigma^{R}}{\sigma^{R}} (r = R, \varphi = 90^{\circ}; 270^{\circ}) = -\frac{2}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$
(3.173)

### Kubische Kristallschubspannungen

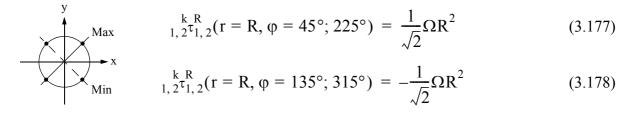
Die Ermittlung der kubischen Kristallschubspannungen erfolgt analog zu den Oktaeder - Kristallschubspannungen. Deren Auswertung beschränkt sich auf insgesamt zwei zu untersuchende Fälle.

(1) Gleitebene 1 und 2; Gleitrichtung 1 und 2:

$${}_{1,2}^{k}\tau_{1,2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}}\tau_{xy} = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}r^{2}\sin 2\varphi$$
 (3.175)

Die jeweiligen Extremwerten am Waferrand (r = R) treten unter folgenden Winkeln auf::

$$\frac{d}{d\varphi^{1,2}} \tau_{1,2}^{R}(r,\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = 45^{\circ}; 135^{\circ}; 225^{\circ}; 315^{\circ}$$
(3.176)



(2) Gleitebene 3; Gleitrichtung 1 und 2:

$${}_{3}^{k}\tau_{1,2}^{R} = 0 (3.179)$$

# Verteilung der Kristallschubspannungen

Die Gesamtverteilung der Kristallschubspannung über den gesamten Wafer von  $r=0\dots R$  und  $\phi=0^{\circ}\dots 360^{\circ}$  ist Gegenstand der folgenden Betrachtungen. Hiermit läßt sich ein Überblick über den qualitativen Verlauf der Kristallschubspannungen geben. Die optimalen Lagerpositionen des Wafers lassen sich damit besser finden, bei denen eine ungünstige Überlagerung der Wärmespannungen mit Biege- und Kontaktspannungen vermieden werden kann.

Zur Darstellung der Spannungsverläufe eignet sich ein Polarkoordinatensystem. Zunächst sind sämtliche Kristallschubspannungen  ${}^{0,\,k}_{i} \tau_{j}^{R}$  (Abbildung 3.31 links) in z-Richtung vom Koordinatenursprung (0,0,0) aus in radialer Richtung r und Umfangsrichtung  $\phi$  aufgetragen.

Maßgebend für die Slipentstehung sind die Extremwerte und damit die betragsmäßig maximalen Kristallschubspannungen an der jeweiligen Position r und  $\phi$  (Siehe auch Abbildung 3.31 rechts):

$$\max_{i} \left| {\stackrel{o, k}{\tau_{i}}} {\stackrel{R}{\tau_{i}}} \right| (r, \varphi) = \max_{i} \left\{ \left| {\stackrel{o}{\tau_{i}}} {\stackrel{R}{\tau_{i}}} (r, \varphi) \right|, \left| {\stackrel{k}{\tau_{i}}} {\stackrel{R}{\tau_{i}}} (r, \varphi) \right| \right\}$$
(3.180)

Sliplinien

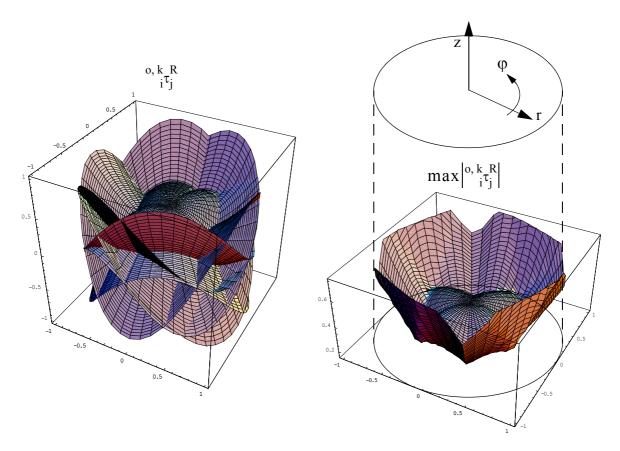


Abbildung 3.31:  ${}^{o, k}_{i} {}^{R}_{i}$  und  $\max \left| {}^{o, k}_{i} {}^{R}_{i} \right|$  im Wafer beim Aufheizvorgang

Erstmalig setzen Vergleitungen infolge Wärmespannungen entsprechend der Herleitungen an folgenden Positionen ein:

- (a) in radialer Richtung bei r = R
- (b) in Umfangsrichtung unter den Winkeln

$$\phi \; = \; 22.5^{\circ}, \, 67.5^{\circ}, \, 112.5^{\circ}, \, 157.5^{\circ}, \, 202.5^{\circ}, \, 247.5^{\circ}, \, 292.5^{\circ}, \, 337.5^{\circ}$$

Das Slipereignis setzt in den Oktaedergleitsystemen mit den Gleitebenen 1, 2, 3 und 4 und Gleitrichtungen 1 und 2 ein. Die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung beträgt:

$$\max_{1,2,3,4} \frac{{}_{1,2}^{R}}{{}_{1,2}} = \frac{1+\sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^{2}$$
 (3.181)

Für die kubischen Gleitsysteme und alle anderen Oktaedergleitsysteme werden an den Stellen  $\phi=0^\circ,45^\circ,90^\circ,135^\circ,180^\circ,225^\circ,270^\circ$  und 315° lokale Extremwerte der Kristallschubspannungen erreicht. Diese sind aber für das erstmalige Auftreten von Slip irrelevant, da die Beträge der Kristallschubspannungen unterhalb von Gleichung (3.181) liegen.

## 3.3.2 Wärmestrahlung

## 3.3.2.1 Allgemeines, Begriffe, spiegelnde und diffuse Oberflächen

Spektrale Strahldichte des schwarzen Körpers

Jeder Körper emittiert Strahlungsenergie je nach Oberflächentemperatur in die Umgebung. Diese Strahlungsenergie wird in Form elektromagnetischer Wellen abgegeben. Die Charakteristik der emittierten Wellenlängen (spektrale Verteilung) wird durch das Planck'sche Strahlungsgesetz definiert. Als Referenz der emittierten Energie wird ein idealer schwarzer Körper herangezogen, da dessen Oberfläche die höchste Strahlungsenergie emittiert. Die vom schwarzen Körper emittierte Strahlungsenergie pro Flächeneinheit einer senkrecht zur Strahlungsrichtung projezierten Fläche je Zeiteinheit und abhängig von der Wellenlänge bezeichnet man als spektrale Strahldichte:

$$L'_{s\lambda}(\lambda, T) = \frac{2c_1}{\lambda^5 (e^{c_2/(\lambda T)} - 1)}$$
 (3.182)

Mit den Konstanten:

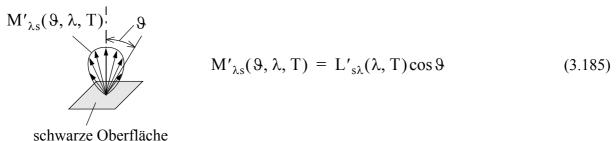
$$c_1 = hc_0^2 (3.183)$$

$$c_2 = h \frac{c_0}{k} (3.184)$$

$$\begin{array}{ll} L'_{s\lambda} & spektrale \, Strahldichte \\ c_0 & Vakuumlichtgeschwindigkeit c_0 = 2,9979 \times 10^8 \frac{m}{s} \\ h & Planck-Konstante \, h = 6,626 \times 10^{-34} Js \\ k & Stefan-Boltzmann-Konstante \, k = 1,381 \times 10^{-23} \frac{J}{K} \\ \lambda & Wellenlänge \end{array}$$

gerichtete spezifische Ausstrahlung des schwarzen Körpers

Die Energie, welche in eine Raumrichtung  $\vartheta$  von einem schwarzen Körper je Fläche, Wellenlänge und Zeit ausgestrahlt (emittiert) wird, bezeichnet man als gerichtete spektrale spezifische Ausstrahlung  $M'_{\lambda s}$ . Diese definiert sich nach dem Lambert'schen Kosinus-Gesetz:



Durch den Strich wird entgegen der bisherigen Schreibweise nicht die Ableitung einer Größe sondern die Richtungsabhängigkeit von Strahlungsgrößen gekennzeichnet. Der Index s für die Strahlungsgröße bezieht sich auf die Ausstrahlung von einem schwarzen Körper.

Für die weitere Behandlung des vorliegenden Problemes können, wie später durch entsprechende Versuche belegt, die wellenlängenabhängigen (spektralen) Oberflächeneigenschaften vernachlässigt werden. Zu diesem Zweck wird die Strahlungsgröße L' eingeführt. Diese ist dabei die über alle Wellenlängen integrierte spektrale Strahldichte. Sie kann aus der spektralen Strahldichte des schwarzen Körpers hergeleitet werden und ist nach [66] definiert als die in gegebener Richtung pro Flächeneinheit einer senkrecht zur Abstrahlungsrichtung projizierten Fläche pro Zeit emittierten Energie und berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$L'_{s}(T) = \int_{0}^{\infty} L'_{s\lambda}(\lambda, T) d\lambda$$
 (3.186)

Unter Verwendung des Planck'schen Strahlungsgesetzes nach Gleichung (3.182):

$$L'_{s}(T) = \int_{0}^{\infty} \frac{2c_{1}}{\lambda^{5}(e^{c_{2}/(\lambda T)} - 1)} d\lambda = \frac{2c_{1}T^{4}\pi^{4}}{15c_{2}^{4}}$$
(3.187)

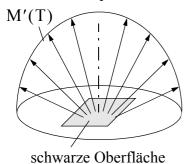
sowie der Stefan-Boltzmann Konstante:

$$\sigma = \frac{2c_1\pi^5}{15c_2^4} = 5,6703 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$$
 (3.188)

ergibt sich:

$$L_{s}'(T) = \frac{\sigma T^{4}}{\pi}$$
 (3.189)

Bisher wurden die Strahlungsgrößen richtungsabhängig behandelt. Eine integrale Betrachtungsweise der gerichteten spezifischen Ausstrahlung über alle Raumwinkel liefert die hemisphärische spezifische Ausstrahlung. Die hemisphärische spezifische Ausstrahlung  $M_s$  des schwarzen Körpers berechnet sich dann nach folgender Gleichung:



$$M_s(T) = \int_{\Omega} L'_s(\vartheta, T) \cos \vartheta d\omega = \pi \cdot L'_s(T) = \sigma T^4 (3.190)$$

mit der Integration über die gesamte Halbkugel:

$$\int_{\Omega} d\omega \text{ sowie } d\omega = \sin \theta d\theta d\phi \qquad (3.191)$$

Definition der Berechnungsgrößen für graue, wellenlängenunabhängige Oberflächen

Die Strahlung des schwarzen Körpers stellt lediglich eine Obergrenze des Strahlungverhaltens realer Oberflächen dar. Der schwarze Körper besitzt kein Reflexionsverhalten, so daß auftreffende Strahlung vom schwarzen Körper vollkommen absorbiert wird. Die in der Natur vorkommenden Körper besitzen aber die Fähigkeit, Strahlung mehr oder weniger zu reflektieren. Hierfür werden gesonderte Strahlungsgrößen eingeführt.

Je nach Betrachtungsweise finden gerichtete (´) oder spektrale/wellenlängenabhängige ( $\lambda$ ) Eingenschaften Verwendung. Im Nachfolgenden werden die spektralen Eigenschaften vernachlässigt. Gerichtete Eigenschaften werden bei dem Emissions- und Absorptionsverhalten ebenfalls vernachlässigt. Es darf also von integralen Mittelwerten ausgegangen werden. Für das Reflexionsverhalten ist aufgrund des Vorhandenseins spiegelnder Oberflächen eine gesonderte Betrachtung heranzuziehen.

Der Emissionsgrad gibt das Verhältnis von Abstrahlung der realen Oberfläche M(T) zu der Abstrahlung eines schwarzen Körpers  $M_s(T)$  an. Der hemisphärische Gesamtemissionsgrad lautet:

 $\varepsilon(T) = \frac{M(T)}{M_s(T)} \tag{3.192}$ 

Der Wert des Emissionsgrades realer Oberflächen liegt zwischen 0 und 1 (Gleichung (3.193)). Ein Emissionsgrad von 0 bedeutet, daß die Oberfläche keine Strahlungsenergie emittiert. Es handelt sich um eine weiße bzw. spiegelnde Oberfläche. Der Emissionsgrad von 1 gibt das

Strahlungsverhalten des oben behandelten scharzen Körpers wieder.

$$0 < \varepsilon < 1 \tag{3.193}$$

Eine weitere Oberflächeneigenschaft ist der Absorptionsgrad. Nach dem Kirchhoffschen Gesetz gilt: In einem geschlossenen, schwarzen Raum muß die Isotropie der Strahlung erhalten bleiben. Die absorbierte Energie entspricht der emittierten Energie.

$$\alpha(T) = \varepsilon(T) \tag{3.194}$$

Wenn Strahlung auf einen Körper fällt, wird ein Teil  $\alpha$  dieser Strahlung absorbiert. Ist  $\alpha(T) < 1$ , d.h. handelt es sich nicht um einen schwarzen Körper, so wird ein Teil der Strahlung wieder in die Umgebung reflektiert. Zur Behandlung der Reflexionseigenschaft wird ebenfalls eine dimensionslose Größe eingeführt. Unter Annahme einer opaken Oberfläche wird die Reflektivität definiert als der Anteil der nichtabsorbierten Strahlungsenergie von der gesamten eintreffenden Strahlungsenergie. Der hemisphärische Gesamtreflexionsgrad lautet:

$$\rho(T) + \alpha(T) = 1 \tag{3.195}$$

Das gerichtete Reflexionsverhalten ist für die Aufheizproblematik von besonderer Bedeutung. Die polierte Oberfläche eines Wafers reflektiert die eintreffende Strahlung unter Beibehaltung der Richtung, wohingegen eine matte Oberfläche diese Strahlung in alle Richtungen gemäß dem Lambert'schen Gesetz streut. Wenn man vom Reflexionsgrad mit gerichteten Eigenschaften spricht, muß demzufolge nicht nur der Eintrittswinkel der auf die Oberfläche fallenden Strahlung, sondern auch der Austrittswinkel der von der Oberfläche aus reflektierten Strahlung berücksichtigt werden. Diese doppelte Richtungsabhängigkeit wird durch 2 Striche (") gekennzeichnet. Für die aus den Richtungen  $\vartheta_r$  und  $\varphi_r$  einfallenden und die in Richtung  $\vartheta$  und  $\varphi$  reflektierten Strahlungsenergie gilt folgender Zusammenhang:

$$\rho''(\vartheta, \varphi, \vartheta_r, \varphi_r) = \rho''(\vartheta_r, \varphi_r, \vartheta, \varphi)$$
(3.196)

Bei gleichem hemisphärischem Gesamtemissionsgrad können demnach zwei Oberflächen unterschiedliche gerichtete Reflexionsgrade besitzen. Bei optisch rauhen Oberflächen wird die einfallende Strahlung in verschiedene Richtungen reflektiert. Die Oberfläche erscheint im sichtbaren Licht matt. Sinkt die Rauhigkeit der Oberfläche, so bleibt die Richtung der reflektierten Strahlung erhalten und die Oberfläche wird spiegelnd. Der entscheidende Parameter zur Charakterisierung des Reflexionsverhaltens ist die optische Rauhigkeit (Siehe [66]):

$$\frac{R_{g}}{\lambda} \tag{3.197}$$

Es gilt:

Für matte Oberflächen: 
$$\frac{R_q}{\lambda} > 1$$
 (3.198)

Für spiegelnde Oberflächen 
$$\frac{R_q}{\lambda} \ll 1$$
 (3.199)

Die dargestellten Zusammenhänge zeigen nicht nur eine Abhängigkeit des Mittelrauhwertes  $R_q$ , sondern auch der einfallenden Wellenlänge  $\lambda$  vom Reflexionsverhalten. In der Natur bedeutet das, eine Oberfläche kann für IR-Strahlung durchaus spiegelnd sein, obwohl sie für sichtbares Licht matt erscheint.

Um dieser Frage für den vorliegenden Anwendungsfall auf den Grund zu gehen, wurden in [71] mit einem UV-VIS-NIR-Spektrometer und einer Ulbrichtkugel Versuche durchgeführt, bei denen der winkelabhängige Reflexionsgrad in Abhängigkeit der Wellenlänge des einfallenden Lichts auf einem polierten Wafer-Probekörper gemessen wurde. Die Versuche fanden bei

Raumtemperatur statt.

Bei einer Ulbrichtkugel handelt es sich um eine Hohlkugel, welche innen beschichtet ist. Die Beschichtung erfolgt mit einem weiß-diffusen und hochgradig reflektierenden Material. An den Außenwänden der Ulbrichtkugel ist jeweils eine Lichteintritts- und eine Lichtaustrittsöffnung angeordnet. Die Öffnungen sind in ihrem Winkel variabel einstellbar. Tritt ein Lichtstrahl durch die Lichteintrittsöffnung ein, wird dieser von einer Probe innerhalb der Ulbrichtkugel absorbiert und reflektiert. An der Lichtaustrittsöffnung kann in Abhängigkeit vom Reflexionswinkel die Intensität des reflektierten Lichtes durch einen Detektor gemessen werden. Wird die Intensität des reflektierten Lichts in das Verhältnis zur Intensität des einfallenden Lichts gesetzt, läßt sich daraus der gerichtet-gerichtete Reflexionskoeffizient in Abhängigkeit der Einfalls- und Reflexionswinkel bestimmen.

Der Einfallswinkel für das einfallende Licht ist mit 8° zur Flächennormalen des Waferprobekörpers festgelegt worden. Der spiegelnde Anteil des Lichts wird entsprechend bei 8° zur Flächennormalen auf der gegenüberliegenden Seite zurückreflektiert. Die Messung der Strahlungsintensität an diesem Punkt gibt den spiegelnden Anteil des Lichtes wieder. Bei den vorliegenden Messungen wurde neben der Reflektivität auch die Transmissivität gemessen. Die Versuchsergebnisse lieferten im Infrarotbereich die Transmissivität  $\tau > 0$  (siehe Abbildung 3.32, dunkelblauer Verlauf). Dieses Phänomen verschwindet aber im hohen Temperaturbereich oberhalb 500 °C, womit der Si-Wafer im vorliegenden Anwendungsfall als lichtundurchlässig angenommen werden kann. Die Ergebnisse werden deshalb nur für den Wellenlängenbereich  $\lambda < 1000\,\text{nm}$  verwertet.

Folgende Parameter wurden meßtechnisch bestimmt:

- 1. Die Transmissivität τ (Abbildung 3.32 / dunkelblaue Kurve)
- 2. Die globale Reflexion  $\rho_{ges}$  (Abbildung 3.32 / rote Kurve)
- 3. Die diffuse Reflexion  $\rho_{diff}$  (Abbildung 3.32 / hellblaue Kurve)

Es gelten weiterhin die Zusammenhänge für die hemisphärische Gesamtreflexion:

$$\rho_{ges} = \rho_{sp} + \rho_{diff} \tag{3.200}$$

nach Gleichung (3.195) für die Absorption:

$$\rho_{\text{ges}} + \alpha = 1 \tag{3.201}$$

 $\rho_{ges} + \alpha = 1$  sowie nach Gleichung (3.194) für die Emission:

$$\alpha = \varepsilon \tag{3.202}$$

Der spiegelnde Anteil  $\rho_{sp}$  der Reflexion läßt sich aus Gleichung (3.200) ermitteln (Abbildung 3.32 / grüne Kurve). Für den Wellenlängenbereich  $\lambda < 1000$ nm beträgt dieser Anteil 100% des Gesamtreflexionsgrades. Die spiegelnde Eigenschaft ist, wie bereits erläutert, abhängig von der Oberflächenrauhigkeit und der Wellenlänge der einfallenden Strahlung. Die Oberflächenrauhigkeit wird auch im Hochtemperaturbereich gegenüber der Raumtemperatur unverändert bleiben. Bei der Wellenlänge vollzieht sich nach dem Wien'schen Verschiebungsgesetz mit zunehmender Temperatur ein Übergang zu kurzwelliger Strahlung. Das zu erwartende Maximum des Emissionsspektrums hat bei 1300 °C die Wellenlänge:

$$\lambda_{\text{max}} = \frac{c_3}{T} \text{ mit } c_3 = 2,8977 \times 10^{-3} \text{mK}$$
 (3.203)

$$\lambda_{\text{max}} = 1842 \,\text{nm} \tag{3.204}$$

Bei dieser Wellenlänge ist der Probekörper noch teilweise transparent. Diese Eigenschaft verschwindet, wie bereits erläutert, bei höheren Prozeßtemperaturen. Das Verhältnis  $R_q/\lambda$  wird bei größeren Wellenlängen aber kleiner, weshalb die spiegelnde Eigenschaft auch auf

diesen Wellenlängenbereich übertragen werden kann. Weiterhin ist anzumerken, daß die Oberflächeneigenschaften bei Wellenlängen unter 1842 nm weitgehend konstant sind. Die vereinfachte Annahme einer wellenlängenunabhängigen, grauen Oberfläche ist damit zulässig.

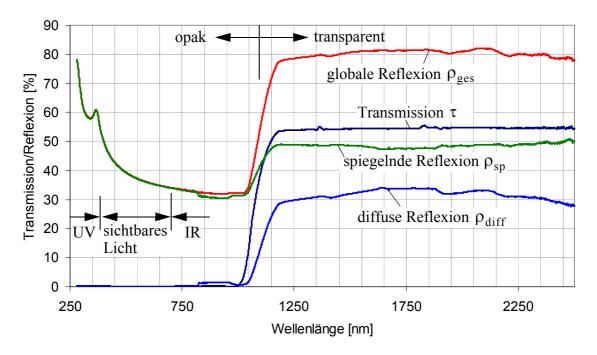


Abbildung 3.32: Ergebnisse der Messung zur Reflektivität an einem Si - Wafer Probekörper entnommen aus [71]

### 3.3.3 Numerische Umsetzung

## 3.3.3.1 Netto Strahlungsmethode für diffuse Oberflächen

## Grundlagen

Die Netto Strahlungsmethode ist ein Lösungsverfahren zur Berechnung des Energieaustausches zwischen Oberflächen innerhalb von Umhüllungen. Diese Umhüllungen werden in N einzelne, endlich große Oberflächenbereiche unterteilt (Abbildung 3.33). Damit wird eine Diskretisierung einer in der Realität kontinuierlichen Strahlungsverteilung erreicht. Es handelt sich deshalb um ein Näherungsverfahren, dessen Genauigkeit von der gewählten Diskretisierung abhängt.

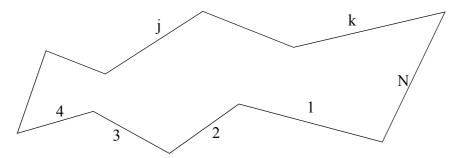


Abbildung 3.33: Diskretisierung einer Umhüllung in N Teiloberflächen

Ausgehend von 2 endlich großen Oberflächenelementen müssen im ersten Schritt die Formfaktoren [67] berechnet werden:

$$F_{1-2} = \frac{1}{A_1} \int_{A_1 A_2} \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2}{\pi S^2} dA_2 dA_1$$
 (3.205)

Für die Formfaktoren gilt die Reziprozitätsbeziehung:

$$A_1 F_{1-2} = A_2 F_{2-1} \tag{3.206}$$

Für mehr als aus 2 Teiloberflächen bestehende Umhüllungen, werden die Indizes k und j eingeführt und die jeweiligen Formfaktoren zwischen den Teiloberflächen berechnet. Es entsteht unter Verwendung von Gleichung (3.205) und der Reziprozitätsbeziehung in Gleichung (3.206) eine Formfaktormatrix.

Aus der Formfaktormatrix und Gleichung (3.207) wird anschließend ein Gleichungssystem aufgebaut. Man bezeichnet dies als Lösungsmethode mit spezifischen Ausstrahlungen  $q_a$  für diffuse Oberflächen [67]:

$$q_{a,k} - (1 - \varepsilon_k) \sum_{j=1}^{N} F_{k-j} q_{a,j} = \varepsilon_k \sigma T_k^4$$
 (3.207)

T<sub>k</sub> Temperatur der Teiloberfläche k

 $F_{k-j}$  Formfaktor zwischen Oberfläche k und j

q<sub>a, k</sub> spezifische Ausstrahlung der Oberfläche k

Zur Kontrolle gilt für alle Formfaktoren in Umhüllungen weiterhin:

$$\sum_{j=1}^{N} F_{k-j} = 1 \tag{3.208}$$

Beispiel: Lösung für unendlich lange konzentrische Zylinder

Für die Geometrische Anordnung zweier konzentrischer Zylinder nach Abbildung 3.34 wird im Nachfolgenden der Gesamtwärmeübergang infolge Strahlung analytisch bestimmt. Die Formfaktoren lauten für den Innenzylinder (Oberfläche 1) und den Außenzylinder (Oberfläche 2) wie folgt:

$$F_{1-2} = 1 (3.209)$$

Entsprechend der Reziprozitätsbeziehung nach Gleichung (3.206) führt dies zu:

$$A_1 = A_2 F_{2-1} \Rightarrow F_{2-1} = \frac{A_1}{A_2}$$
 (3.210)

Weiterhin gilt nach Gleichung (3.208) für k = 1:

$$F_{1-1} + F_{1-2} = 1 \Rightarrow F_{1-1} = 0$$
 (3.211)

und für k = 2:

$$F_{2-1} + F_{2-2} = 1 \Rightarrow F_{2-2} = 1 - \frac{A_1}{A_2}$$
 (3.212)

Mit den Formfaktoren kann das Gleichungssystem nach Gleichung (3.207) für 2 Unbekannte aufgestellt werden.

Mit 
$$k = 1$$
:  

$$q_{a1} - (1 - \varepsilon_1) F_{1-1} q_{a1} - (1 - \varepsilon_1) F_{1-2} q_{a2} = \varepsilon_1 \sigma T_1^4$$
(3.213)

und k = 2:  $q_{a2} - (1 - \varepsilon_2)F_{2-1}q_{a1} - (1 - \varepsilon_2)F_{2-2}q_{a2} = \varepsilon_2\sigma T_2^4$ (3.214)

Das Gleichungssystem lautet schließlich:

Mit 
$$k = 1$$
:  
 $q_{a1} - (1 - \varepsilon_1)q_{a2} = \varepsilon_1 \sigma T_1^4$  (3.215)

und k = 2:

$$q_{a2} - (1 - \varepsilon_2) \frac{A_1}{A_2} q_{a1} - (1 - \varepsilon_2) \left( 1 - \frac{A_1}{A_2} \right) q_{a2} = \varepsilon_2 \sigma T_2^4$$
 (3.216)

Aufgelöst nach den spezifischen Ausstrahlungen q<sub>a.k.</sub> ergeben sich:

$$q_{a1} = \varepsilon_1 \sigma T_1^4 + \frac{(1 - \varepsilon_1)(\varepsilon_1 A_1 \sigma T_1^4 - \varepsilon_1 \varepsilon_2 A_1 \sigma T_1^4 + \varepsilon_2 A_2 \sigma T_2^4)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 A_1 - \varepsilon_1 A_1 - \varepsilon_2 A_2}$$
(3.217)

$$q_{a2} = -\frac{\varepsilon_1 A_1 \sigma T_1^4 - \varepsilon_1 \varepsilon_2 A_1 \sigma T_1^4 + \varepsilon_2 A_2 \sigma T_2^4}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 A_1 - \varepsilon_1 A_1 - \varepsilon_2 A_2}$$
(3.218)

Die übertagene Gesamtwärme bildet sich aus der Differenz der jeweiligen spezifischen Ausstrahlungen q<sub>a. k</sub> der beiden Strahlerflächen:

$$q = q_{a1} - q_{a2} (3.219)$$

 $q = q_{a1} - q_{a2}$  (3.2) Woraus mittels der Gleichungen (3.217), (3.218) und (3.219) der folgende Ausdruck wird:

$$q = \frac{\sigma(T_1^4 - T_2^4)}{1/\epsilon_1 + (A_1/A_2)(1/\epsilon_2 - 1)}$$
(3.220)

## 3.3.3.2 Netto Strahlungsmethode für spiegelnde Oberflächen

Die prinzipielle Vorgehensweise zur Berechnung des Wärmeaustausches in Umhüllungen mit spiegelnden Oberflächen ist ähnlich zu der oben Erläuterten. Da sich bei spiegelnden Oberflächen die Richtung der reflektierten Strahlung nicht von der einfallenden Strahlung unterscheidet, kann die Modellerstellung durch Rekonstruktion virtueller gespiegelter Bilder der Umhüllung auf den jeweiligen spiegelnden Oberflächen erfolgen (Siehe Abbildung 3.34). Für die Formfaktoren wird ein entsprechend modifizierter Syntax eingeführt, um eine Verwechslung von realen Oberflächen und virtuellen Oberflächen aus Spiegelbildern zu vermeiden. Die Schreibweise für den Formfaktor einer auf die Oberfläche j gespiegelten Oberfläche k zur Oberfläche k lautet:

$$F_{k(j)-k} \tag{3.221}$$

Entsprechende Reziprozitätsbeziehungen lassen sich nun auch für Formfaktoren für spiegelnde Oberflächen herleiten. Zur Vollständigkeit wird dazu auf [67] verwiesen.

In dieser Schreibweise sind Mehrfachreflexionen von Oberflächen zu sich selbst und auch zu anderen in der Umhüllung vorhandenen Oberflächen enthalten. Für die in Kapitel 3.3.3.1 behandelten konzentrisch angeordneten Zylinder ist das virtuelle Bild in Abbildung 3.34 bei spiegelnder Oberfläche des Außenzylinders dargestellt.

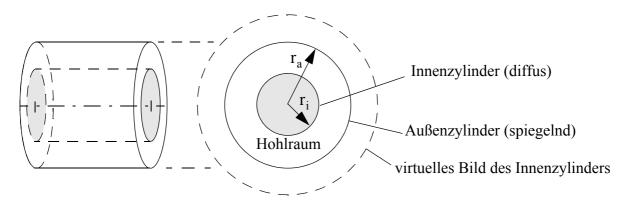


Abbildung 3.34: Rekonstruktion eines virtuellen Bildes bei spiegelnden Oberflächen

Analog zum Gleichungssystem (3.207) ist anschließend auch ein entsprechendes Gleichungssystem für Umhüllungen bestehend aus spiegelnden und diffusen Oberflächen zu entwickeln. Das Gesamtgleichungssystem setzt sich aus den Gleichungen für jedes diffuses Oberflächenelement und jedes spiegelnde Oberflächenelement zusammen. Für alle diffusen Oberflächen  $1 \le k \le d$  gilt:

$$q_{a,k} - (1 - \varepsilon_k) \sum_{j=1}^{d} q_{a,j} F_{k-j}^{s} = \varepsilon_k \sigma T_k^4 + (1 + \varepsilon_k) \sigma \sum_{j=d+1}^{N} \varepsilon_j T_j^4 F_{k-j}^{s}$$
 (3.222)

Dieses Gleichungssystem wird nach den spezifischen Ausstrahlungen  $q_a$  für diffuse Oberflächen gelöst. Damit können nachträglich die  $q_a$  für alle spiegelnden Oberflächen  $(d+1) \le k \le N$  verwendet werden, um die spezifischen Einstrahlungen  $q_e$  nach Gleichung (3.223) zu berechnen:

$$q_{e,k} = \sum_{j=1}^{d} q_{a,j} F_{k-j}^{s} + \sigma \sum_{j=d+1}^{N} \varepsilon_{j} T_{j}^{4} F_{k-j}^{s}$$
(3.223)

Für das oben analytisch behandelte Problem zweier konzentrisch angeordneter Zylinder ergibt der Wärmestrom für eine spiegelnde Oberfläche des Außenzylinders:

$$q = \frac{\sigma(T_1^4 - T_2^4)}{1/\epsilon_1 + 1/\epsilon_2 - 1}$$
 (3.224)

### 3.3.3.3 Weitere Berechnungsmethoden für Strahlung

Zur Berechnung des Wärmeaustausches zwischen Oberflächen innerhalb von Umhüllungen bietet die Netto-Strahlungsmethode eine Möglichkeit. Bei sehr viel komplizierteren Sachverhalten wie bespielsweise Streuung von Strahlung (Siehe [68]) innerhalb transparenter Medien spiegelnder oder spektraler Oberflächeneigenschaften liefern unter Umständen alternative Methoden entweder bessere Ergebnisse oder erleichtern deren Implementierung in ein Computerprogramm. Zu nennen wären beispielsweise die Methode der Diskreten Ordinaten ([72] und [70]) oder die Ray-Tracing-Methode (Siehe [72]).

# Die Methode der Diskreten Ordinaten

Mit der Methode der Diskreten Ordinaten wird die Wärmetransportgleichung für Strahlung für eine bestimmte Anzahl diskreter Raumwinkel gelöst. Für diese vorher festgelegten Raumwinkel wird die Wärmetransportgleichung in mehrere Gleichungen zerlegt. Die Wahl der Diskreti-

sierung der Raumwinkel bestimmt die Genauigkeit der Lösung.

Ray Tracing Methode

Die Ray Tracing Methode ist ein statistisch numerisches Lösungsverfahren. Hierbei wird davon ausgegangen, daß sich über die Mittelung der Strahlungsintensität einzeln verfolgter Strahlengänge eine gute Näherung des Energieaustausches zwischen Oberflächen erzielen läßt. Wie bei der Methode der diskreten Ordinaten kann die Diskretisierung der einzelnen Strahlengänge (Energiepakete) vorher gewählt werden.

# 3.3.3.4 Strahlungsverhalten im Spalt bei spiegelnden/diffusen Oberflächen

Das Aufheizverhalten eines Waferstapels infolge Wärmestrahlung im Vertikalofen kann folgendermaßen charakterisiert werden:

- jede Oberfläche (Wafer, Ofenwand) sendet in Abhängigkeit von deren Oberflächentemperatur und Emissivität eine bestimmte Strahlungsleistung an die Umgebung aus
- da die Ofenwand während des Aufheizprozesses die höhere Temperatur besitzt, strahlt diese eine größere Leistung ab als die Waferoberflächen
- die direkt von der Ofenwand ausgestrahlte Energie gelangt zu einem großen Teil auf die am günstigsten zur Ofenwand liegenden Waferteilflächen - dies betrifft insbesondere die Waferaußenkanten und die ofennahen Waferober- und -unterseiten
- durch Vielfachreflexionen innerhalb des Spaltes des Waferstapels gelangt schließlich auch ein Rest dieser Wärmestrahlung in dessen Inneres

Ausgehend von diffusen oder spiegelnden Waferoberflächen in Abbildung 3.35 (a und b) nehmen die von der Ofenwand ausgesendeten Wärmestrahlen im Spalt des Waferstapels jeweils unterschiedliche Wege.

Trifft ein Wärmestrahl im Spalt zunächst auf eine Waferoberfläche, wird dieser zu einem Teil  $\alpha$  absorbiert und zu einem Teil  $\rho$  reflektiert. Die Reflektivität setzt sich nach Gleichung (3.200) aus einem spiegelnden und diffusen Anteil zusammen.

Ist der spiegelnde Anteil  $\sigma_{sp}$  Null, reflektiert die Oberfläche den auftreffenden Wärmestrahl diffus nach dem Lambert'schen Kosinusgesetz (Gleichung (3.185)). Bei Vielfachreflexionen im Spalt wird ein Teil der Wärmestrahlung auch wieder zurück in Richtung Ofenwand reflektiert. Die Strahlung wird somit zu einem großen Teil im äußeren Bereich des Wafers absorbiert (Siehe Abbildung 3.35 (a)).

Ist hingegen der diffuse Anteil  $\sigma_{diff}$  Null, ist die Waferoberfläche spiegelnd. Es wird die Richtung des einfallenden Wärmestrahls beibehalten. Durch Vielfachreflexionen kann deutlich mehr Energie in den Waferinnenbereich durch Strahlung transportiert werden als bei diffusen Oberflächen (Siehe Abbildung 3.35 (b)).

Es wird darauf hingewiesen, daß die Annahme diffuser Oberflächen zu einer anderen, nicht der Realität entsprechenden Lösung führen kann. Inwieweit der Einfluß der spiegelnden Waferoberflächen vernachlässigt werden kann, muß weitergehend überprüft werden.

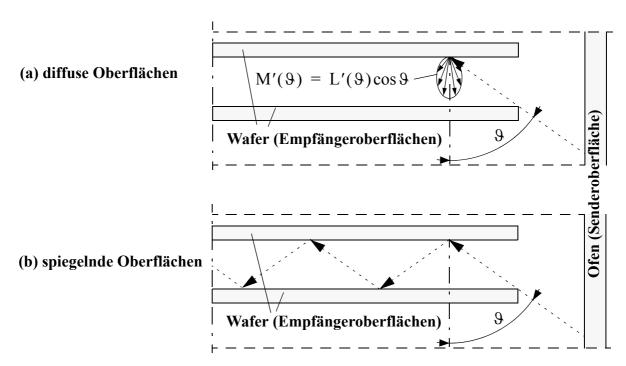


Abbildung 3.35: spiegelnd/diffuse Reflexion von Strahlung im Waferstapel

# 3.3.4 Leitung und Konvektion im Ofeninnenraum

Neben den behandelten Wärmetransportmechanismen Leitung im Wafer und Wärmestrahlung ist die Konvektion auf ihren Einfluß hin zu untersuchen. In [27] finden sich diesbezüglich analytische Zahlenbeispiele für verschiedene Wafer- und Ofentemperaturen. Diese wurden allerdings nur für Horizontalöfen und für wesentlich geringere Temperaturen durchgeführt. Dagegen wird sich in den hier behandelten Vertikalöfen aufgrund der veränderten Richtung der Gravitation eine andere Konvektionsströmung einstellen und infolge der höheren Prozeßtemperaturen ein größerer Einfluß der Wärmestrahlung zu erwarten sein. Der Wärmeübergang durch Konvektion wird in den nachfolgenden Kapiteln an einem einfachen analytischen Beispiel grob abgeschätzt und mit einem genaueren CFD-Modell validiert, sowie dem Anteil der Wärmestrahlung am Gesamtwärmeübergang gegenübergestellt.

### 3.3.4.1 Grundlagen und analytische Abschätzung des Wärmeüberganges

Wärmeübergang infolge freier Konvektion und Leitung in einer geschlossenen Schicht

Der Wärmeübergang infolge freier Konvektion entsteht infolge von Dichteunterschieden im Fluid. An Wänden mit relativ hoher Temperatur zur Umgebung (Ofenwand) wird das Fluid aufgeheizt, wodurch dessen Volumen zunimmt und die Dichte sinkt. Es steigt entgegen der Richtung der wirkenden Gravitation auf. An Wänden mit relativ niedrigerer Temperatur (Wafer) sinkt das Volumen des sich abkühlenden Fluids und dessen Dichte steigt. Die Strömungsrichtung verläuft nun entlang der wirkenden Gravitation. Als Folge entstehen sogenannte Konvektionswirbel. Diese Konvektionswirbel transportieren die Wärme sehr viel besser zwischen den Wänden innerhalb der Fluidschichten als durch reine Leitung. Dies betrifft insbesondere Gasströmungen, da die Leitfähigkeit von Gasen sehr viel niedriger liegt, als die von Flüssigkeiten

und Festkörpern.

Alle Kenngrößen zur Berechnung des Wärmeüberganges in geschlossenen Fluidschichten sind in Anlage A7.1 erläutert.

Analytisches Zahlenbeispiel eines vertikalen Ringspaltes

In Abbildung 3.36 ist das vereinfachte Modell, welches zur analytischen Lösung des Aufheizproblems herangezogen wird, dargestellt. Vereinfachend wird der Waferstapel als monolitischer Innenzylinder angenommen, in dessen Inneren keine Fluidströmung vorkommt. Der Wärmeaustausch findet nur zwischen der Ofenwand mit dem Radius  $r_a$  und einer fiktiven Oberfläche des Waferstapels mit dem Radius  $r_i$  statt. Als Grundvorraussetzung für das Eintreten einer freien Konvektion ist die Gravitation g in vertikaler Richtung vorgegeben.

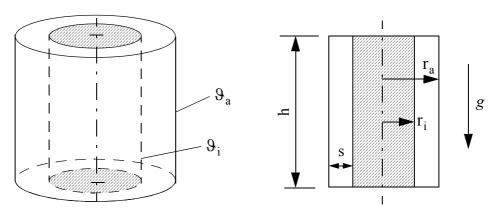


Abbildung 3.36: Modell zweier konzentrisch angeordneter Zylinder

Die Modellparameter zur Berechnung des Wärmeüberganges infolge freier Konvektion und Leitung im Ringspalt finden sich in Anlage A7.2.

Ermittlung des Wärmestrahlungsanteils

Für die konzentrisch angeordneten Zylinder wurde bereits der Wärmeübergang infolge Strahlung bestimmt (Siehe Gleichung (3.220)). Dieser lautet:

$$q = \frac{\sigma(T_i^4 - T_a^4)}{1/\epsilon_i + (A_i/A_a)(1/\epsilon_a - 1)}$$
(3.225)

ε<sub>i</sub> Emissivität der Oberfläche des Innenzylinders

 $\epsilon_{\rm a}$  Emissivität der Oberfläche des Außenzylinders

Stefan-Boltzmann-Konstante:  $5,6703 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$ 

A<sub>i</sub> Fläche des Innenzylinders

A<sub>a</sub> Fläche des Außenzylinders

T<sub>i</sub> Temperatur des Innenzylinders

T<sub>a</sub> Temperatur des Außenzylinders

Vergleich Wärmeübergang Strahlung / Konvektion

Wenn die Oberflächentemperaturen als Randbedingungen vorgegeben sind, können die Wärmeübergänge aus Konvektion, Leitung und Strahlung getrennt voneinander ermittelt werden. Für den Fall anderer Randbedingungen (vorgegebender Wärmestrom) muß das Gesamtproblem

gekoppelt behandelt werden, so daß sich der Aufwand deutlich erhöht. Im Sinne einer analytischen Abschätzung und eines anschließenden Vergleiches der Anteile Strahlung, Konvektion und Leitung am Gesamtwärmeübergang wird auf eine solche Vorgehensweise verzichtet. Das Prozeßgas im Ofen ist Argon, welches als Schutzgas durch den Ofen im Laufe des Prozesses gespült wird. So wird verhindert, daß von außen Luft eindringt. Es handelt sich demzufolge um eine erzwungene Konvektion, wobei die Strömungsgeschwindigkeiten des Gases gegenüber der freien Konvektionsströmung vergleichsweise gering sind. Deshalb wurde eine freie anstelle der tatsächlich erzwungenen Konvektion angenommen. Für Argon findet sich in [69] eine Auflistung der Materialparameter in Abhängigkeit der Temperatur. Bei 800 °C nimmt die kinematische Viskosität den Wert:

$$v = 1182 \times 10^{-7} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \tag{3.226}$$

an. Daraus läßt sich mittels der Gleichungen (A.57) und (A.61) (Anlage A7.1 und Anlage A7.2) sowie einer Temperaturdifferenz zwischen Ofenwand und Waferstapel von:

$$\Delta T = 100K \tag{3.227}$$

die Grashof-Zahl bestimmen.

$$Gr = 1213$$
 (3.228)

Die Rayleigh-Zahl lautet mit der Prantl-Zahl:

$$Pr = 0.71 (3.229)$$

nach Gleichung (A.55):

$$Ra = 862$$
 (3.230)

Die Strömung ist damit nach Gleichung (A.56) laminar. Mit einer fiktiven Ofenhöhe h von 10 cm gilt nach Gleichung (A.63):

$$N \approx 0.05 \tag{3.231}$$

Aus Anlage A7.2 folgen aus der 1. Zeile der Tabelle für die Konstanten  $\,C_1$ ,  $\,C_2$ ,  $\,n_1$  und  $\,n_2$ , mit denen die Nusselt-Zahl berechnet wird. Die Gleichung (A.59) liefert schließlich, nach  $\,\alpha$  umgestellt, den gesuchten Wärmeübergangskoeffizienten:

$$\alpha_{\rm kon} = \frac{\rm Nu \cdot \lambda}{\rm s} \tag{3.232}$$

mit der Wärmeleitfähigkeit für Stickstoff bei 800 °C:

$$\lambda = 0.0425 \frac{W}{mK} \tag{3.233}$$

Schließlich lautet der Wärmeübergang für freie laminare Konvektion bei 800 °C:

$$\alpha_{\rm kon} = 2.88 \frac{\rm W}{\rm m^2 K} \tag{3.234}$$

Im zweiten Schritt erfolgt eine Gegenüberstellung mit dem Wärmeübergang durch Strahlung. Aus Gleichung (3.225) wird dieser Anteil ermittelt. Die Ofenwand ist als diffus-graue Oberfläche mit einer Emissivität von:

$$\varepsilon_a = 0.7 \tag{3.235}$$

angenommen. Für den Waferstapel gilt nach Abschnitt 3.3.3.4, daß die Strahlung im Spalt sowohl bei spiegelnden als auch diffusen Waferoberflächen fast vollständig absorbiert wird. Mit Ausnahme eines kleinen reflekierenden Anteils der Waferaußenkanten besitzt der Innenzylinder als schwarze Oberfläche die Emissivität von:

$$\varepsilon_i = 1.0 \tag{3.236}$$

Der Wärmestrom q aus Wärmestrahlung für die oben festgelegte Temperaturdifferenz beträgt danach:

$$q_{rad} = 14450 \frac{W}{m^2} \tag{3.237}$$

Bezogen auf 100 K beträgt schließlich der Wärmeübergang α durch Strahlung:

$$\alpha_{\rm rad} = 144,5 \frac{W}{m^2 K}$$
 (3.238)

In Abbildung 3.37 sind die Wärmeübergänge aus Leitung/Konvektion (rote Kurve) und aus Strahlung (blaue Kurve) für den Temperaturbereich von 800 °C - 1200 °C dargestellt. Der Anteil der Konvektion und Leitung am Gesamtwärmeübergang beläuft sich auf etwa 2% bei 800 °C und sinkt auf unter 1% bei 1200 °C. Eine Vernachlässigung der Konvektion erscheint deshalb aus Sicht des vereinfachten analytischen Prozeßmodells gerechtfertigt.

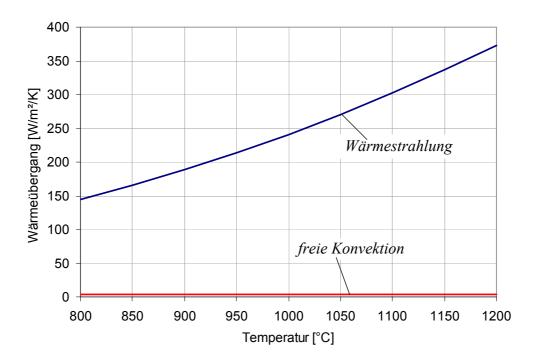


Abbildung 3.37: Vergleich der Wärmeübertragung Konvektion/Strahlung

### 3.3.4.2 Numerisches Konvektionsmodell

Allgemeines und Modellbeschreibung

Zur Validierung des analytischen Strömungsmodells aus Abschnitt 3.3.4.1 wird zusätzlich ein numerisches CFD-Modell herangezogen. Aus Gleichung (A.62) geht hervor, daß die übertragene Wärme unter anderem von der Ofenhöhe h abhängt. Die Modellierung des Ofens kann demzufolge nicht anhand eines Waferstapelsektors mit periodischer Symmetrie sondern nur unter Verwendung eines Gesamtofenmodells erfolgen. Für die Erstellung des Gesamtofenmodells wurde ein vernetzter Waferstapelsektor 16fach kopiert und entsprechend zusammengefügt (Siehe Abbildung 3.38 und Anlage A8 (d)). Die realen Vertikalöfen besitzen allerdings eine größere Höhe als 16 gestapelte Wafer, deren Berücksichtigung aber aus Gründen der Rechenzeit und für eine Abschätzung des Wärmeüberganges nicht sinnvoll erschien. Eine Abweichung von dem tatsächlichen Wärmeübergang ist zu erwarten und sollte bei einer detaillierten Behandlung des

konvektiven Anteils des Wärmeüberganges berücksichtigt werden.

Eine Abgrenzung des Ofens nach oben und unten (Abbildung 3.38) geschieht durch adiabate Wände, womit ein Austausch von Wärme verhindert ist. Den Ofenwänden (Abbildung 3.38 rechts) ist im CFD-Modell eine Temperatur von 800 °C vorgegeben. Für die Waferoberflächen ist eine Temperatur von 700 °C festgelegt worden. Die Temperaturrandbedingungen entsprechen somit den Randbedingungen aus den analytischen Abschätzungen nach Abschnitt 3.3.4.1. Durch Verwendung eines rotationssymmetrischen Modells (Siehe Symmetrieachse in Abbildung 3.38) wurde die Rechenzeit gegenüber einem 3D-Modell erheblich verringert.

Die Gravitation ist der für die Ausbildung eine freien Konvektion entscheidende Parameter. Da es sich um einen Vertikalofen handelt, ist die Richtung der Gravitation vertikal von oben nach unten vorgegeben. Es wird aufgrunddessen darauf hingewiesen, daß die Verwendung dieses CFD-Modells für Horizontalöfen nicht möglich ist.

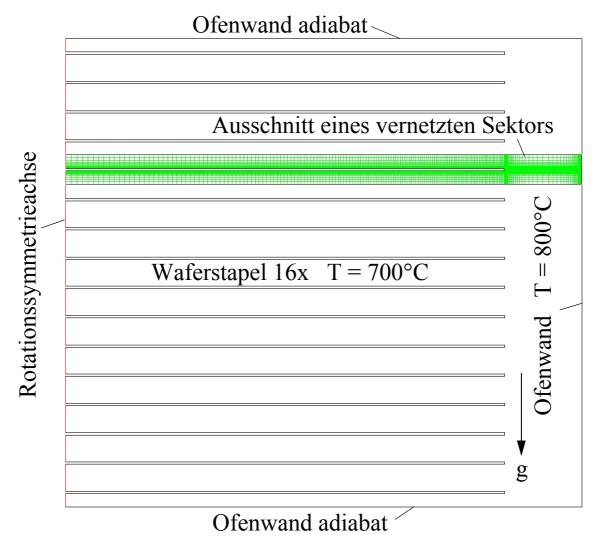


Abbildung 3.38: CFD-Ofenmodell zur Berechnung des konvektiven Anteils

## Modellparameter

Das Fluid im Ofen wird wie in Abschnitt 3.3.4.1 mit Argon angenommen und durch folgende Materialparameter spezifiziert:

1. Die Wärmeleitfähigkeit

$$\lambda = 0.0425 \frac{W}{m \cdot K} \tag{3.239}$$

2. Die spezifische Wärmekapazität

$$c_p = 520 \frac{J}{kg \cdot K} \tag{3.240}$$

3. Die Dichte

$$\rho = 0.45 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \tag{3.241}$$

4. Die dynamische Viskosität

$$\eta = 5.32 \times 10^{-5} \text{Pa} \cdot \text{s} \tag{3.242}$$

## Auswahl der Grundgleichungen

Die für Konvektion maßgebenden Grundgleichungen sind die Masseerhaltung, die Impulserhaltung und die Energieerhaltung (siehe [73]). In den Gleichungen (A.55) und (3.230) wurde bereits analytisch festgestellt, daß eine laminare Strömung herrscht. Unter der Annahme, daß sich zum numerischen Modell keine großen Unterschiede im Strömungsverhalten einstellen, kann hier ebenfalls von einer laminaren Strömung ausgegangen werden. Bei den geringen Strömungsgeschwindigkeiten (niedrige Machzahl) kann desweiteren ein inkompressibles Fluid angenommen werden. Für die Grundgleichungen können somit gewisse Vereinfachungen getroffen werden. Eine Zusammenstellung aller Grundgleichungen finden sich in Anlage A8.1.

# Auswahl der Lösungsmethoden

Das verwendete Programmsystem ist Fluent 6.1.22. Als Lösungsmethode für die Energie und Impulsbilanz nach Gleichung (A.64), (A.65) und (A.66) ist das First Order Upwind-Verfahren gewählt worden.

Die Änderung der Dichte und damit des Gasvolumens in Abhängigkeit von der Temperatur erfolgt mit der Boussinesq-Approximation nach Gleichung (A.58).

Die Prozedur wird mit 15000 Iterationen durchgeführt und die Ergebnisse anschließend ausgewertet.

## Auswertung der Lösung

Abbildung 3.39 zeigt anhand eines Geschwindigkeitsvektorfeldes den sich aus der CFD-Berechnung ergebenden rotationssymmetrischen Konvektionswirbel (Anlage A8.4). Das Gas wärmt sich demzufolge an der Ofenwand auf und steigt infolge geringerer Dichte nach oben. Am Waferstapel wird das Gas wieder abgekühlt und sinkt nach unten (vgl. auch Temperaturverteilung in Anlage A8.3).

Die Geschwindigkeitsverteilung der Gasströmung in Anlage A8.2 zeigt deutlich, daß das Gas zwischen den Wafern im Wesentlichen ruht. Die Konvektionsströmung kann dort demzufolge vernachlässigt werden. Die behandelte analytische Lösung, bei der ebenfalls nur ein Wärmeaustausch zwischen einem Außen- und Innenzylinder stattfindet, erscheint damit sehr realitätsnah. Aus dieser Abbildung wird auch deutlich, daß sich bei höheren Öfen dieser Konvektionswirbel und damit auch das Wärmeübertragungsverhalten verändert, was sich ebenfalls in Übereinstimmung mit der analytischen Gleichung (A.62) bringen läßt.

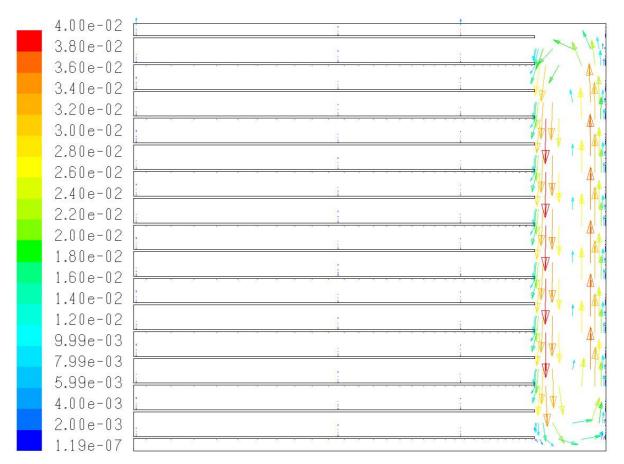


Abbildung 3.39: Geschwindigkeitsvektorfeld infolge Konvektion im Ofen

Die übertragene Wärmeleistung aus Konvektion beträgt aus der Simulation:

$$Q_{kon} = 1,549W$$
 (3.243)

Bei einer Sektorfläche des Ofens von:

$$A_{\text{Sektor}} = 0.0111 \,\text{m}^2$$
 (3.244)

beträgt der Wärmeübergang pro Fläche:

$$q_{kon} = 139,55 \frac{W}{m^2}$$
 (3.245)

Mit der Temperaturdifferenz nach Gleichung (3.227) beträgt der Wärmeübergangskoeffizient infolge Konvektion:

 $\alpha_{\text{kon}} = 1,40 \frac{W}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \tag{3.246}$ 

# 3.3.4.3 FE-Wärmestrahlungsmodell mit Netto-Strahlungsmethode

## Strahlungsmodell

Zum Vergleich mit dem numerischen CFD-Konvektionsmodell erfolgt die Erstellung eines numerischen FE-Strahlungsmodells.

Bei dem numerischen Konvektionsmodell wird der Strömungsraum vernetzt und die Strukturen Wafer und Ofen nicht vernetzt. Im Gegensatz dazu bleibt der Strömungsraum beim Strahlungsmodell unvernetzt, wohingegen Wafer und Ofen mit je einem Finiten Element mit linerarer Ansatzfunktion vernetzt werden. Mittels Netto-Strahlungmethode werden die Formfaktoren

(Gleichung (3.205)) der Oberflächen dieser Elemente numerisch bestimmt, um im Anschluß die Wärmeübergänge zu berechnen (Gleichung (3.207)).

Das Gesamtofenmodell wird reduziert zu einem Sektormodell. Mit Hilfe dieses Sektormodells kann anschließend der Wärmeübergang im ungestörten Innenbereich des Waferstapels angegeben werden. An den Ober - und Untergrenzen zu den jeweiligen Nachbarsektoren erfolgt die Definition einer periodischen Symmetrie (Abbildung 3.40). Die Rotationsachse ist in Abbildung 3.40 rot dargestellt. Die Wandtemperaturen sind identisch mit denen in Abbildung 3.38 vorgegeben, wobei die Wärmeleitung innerhalb von Wafer und Ofen nicht berücksichtigt wird. Das verwendete FE-Programm ist Abaqus 6.5-1.

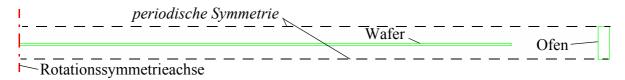


Abbildung 3.40: Strahlungsmodell des Ofens

Auswertung und Vergleich

Eine anschließende Auswertung der Wärmeübergänge im Postprocessing liefert den Wärmefluß infolge Strahlung:

$$Q_{rad} = 75,473 W$$
 (3.247)

Bei einer Sektorfläche des Ofens nach Gleichung (3.244) beträgt der Wärmeübergang pro Fläche

$$q_{rad} = 6805,58 \frac{W}{m^2}$$
 (3.248)

Der Wärmeübergangskoeffizient infolge Strahlung beträgt bei der gewählten Temperaturdifferenz:

$$\alpha_{\text{rad}} = 68,06 \frac{W}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \tag{3.249}$$

Der Anteil der Konvektion (Gleichung (3.246)) am Gesamtwärmeübergang (zusammen mit Gleichung (3.249)) beträgt aus den numerischen Untersuchungen 2%.

In Tabelle 3.6 sind zur Vollständigkeit alle Wärmeübergänge aus den analytischen und numerischen Modellen infolge Strahlung und Leitung zusammengefaßt. Gegenüber dem numerischen Modell werden die Wärmeübergänge beim analytischen Modell etwa doppelt so hoch. Die Erklärung liegt darin, daß bei konzentrisch angeordneten Zylindern (analytisches Modell) die Oberfläche des Innenzylinders direkt gegenüber dem äußeren Zylinder liegt. Bei stapelförmig angeordneten Wafern muß die Wärme bei Konvektion und Strahlung einen wesentlich komplizierteren Weg nehmen, wodurch eine gewisse Behinderung des Wärmeflusses zustande kommt.

Abschließend kann aber die Größenordnung der Wärmeübergänge aus den analytischen Modellen bestätigt werden. Die Tendenz, daß Strahlung gegenüber Konvektion dominiert, ist in beiden Modellen aufgezeigt worden. Eine Vernachlässigung des konvektiven Anteils am Gesamtwärmeübergang ist unter den vorrausgesetzten Temperaturrandbedingungen (T > 800 °C) für den Vertikalofen mit 300 mm Wafern gerechtfertigt.

α	numerisch	analytisch
Strahlung $\alpha_{rad}$ in $\left[\frac{W}{m^2 \cdot K}\right]$	68,06	144,5
Konvektion $\alpha_{kon}$ in $\left[\frac{W}{m^2 \cdot K}\right]$	1,40	2,88
konvektiver Anteil in [%]	2,0	1,95

Tabelle 3.6: Vergleich der Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$  infolge Strahlung und Konvektion

# 4. Untersuchung realer, thermomechanischer Anneal - Prozesse mit unterschiedlichen Support Konzepten

Dieses Kapitel beschränkt sich auf die phänomenologische Betrachtung einzelner ausgewählter Aufheizprozesse. Dabei werden die einzelnen Mechanismen erläutert, welche die Hauptursache für Spannungs- und Slipentstehung darstellen. Die Ergebnisse sind somit auch entsprechend qualitativ auf ähnliche Prozesse übertragbar. Zur Slipvermeidung wird im Nachgang ein vereinfachtes Bemessungskonzept vorgestellt, welches unter geringem Aufwand erlaubt, einen optimierten Prozeß zu entwickeln.

### 4.1 Wafer ohne Lagerung im Vertikalofen

# 4.1.1 Temperaturverteilung im Wafer

## 4.1.1.1 Modellbeschreibung

Das zur Berechnung der Wärmestrahlung zum Einsatz kommende Programmsystem ist Abaqus 6.5-1. Dieses Programm arbeitet mit der Netto-Strahlungsmethode für diffuse Oberflächen. Bei zu großen Modellen kann dies bei der Ermittlung der Formfaktormatrix zu sehr langen Rechenzeiten führen. Durch Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften (periodische Symmetrie, Axialsymmetrie, zyklische Symmetrie, Spiegelsymmetrie) können die Rechenzeiten enorm verringert werden.

Analog zum verwendeten Strahlungsmodell in Kapitel 3.3.4.3 wird ein ähnliches Modell nach Abbildung 4.1 erstellt. Die periodische Symmetrie wird auch hier dazu verwendet, um die Stapelung endlich vieler Wafer in Ofenvertikalrichtung zu berücksichtigen. Die Ergebnisse sind deshalb nur auf den hier interessierenden, ungestörten Innenbereich im Vertikalofen übertragbar. Folgende vereinfachende und sinnvolle Annahmen werden mit dem Ofenmodell getroffen:

- es findet keine Übertragung von Wärme infolge Konvektion statt
- spiegelnde Oberflächeneigenschaften der Wafer bleiben unberücksichtigt
- es werden graue Oberflächen angenommen
- der Einfluß des Boates wird vernachlässigt
- die in der Realität runde Waferaußenkante ist eckig angenommen
- die Temperaturgradienten in vertikaler Richtung werden vernachlässigt (Vernetzung mit 1 Element / Waferhöhe)
- das Wärmeübertragungsproblem wird entkoppelt vom Wärmespannungsproblem, sowie vom Biege- und Kontaktproblem behandelt

Zunächst werden zur Erlangung grundsätzlicher Einsichten axialsymmetrische Modelle verwendet. Dadurch wird nicht nur die Rechenzeit vermindert, sondern auch die Handhabbarkeit des Problems sowohl im Pre- als auch im Postprocessing erleichtert. Solche Modelle sind insbesondere auch für Parameterstudien geeignet.

Im Strahlungsmodell nach Kapitel 3.3.4.3 wurden Wafer und Ofen mit je einem Element vernetzt. Dies erlaubte eine integrale Bestimmung des Wärmestrahlungsüberganges. Demgegenüber ist zur Berechnung der radialen Verteilung des Wärmestrahlungsüberganges auf den Wafer und der Wärmeleitung innerhalb des Wafers eine möglichst feine Vernetzung zu wählen. Die Vernetzung erfolgt für den Wafer mit > 10 Elementen über den Radius und für den Ofen mit > 4 Elementen je Pitch.

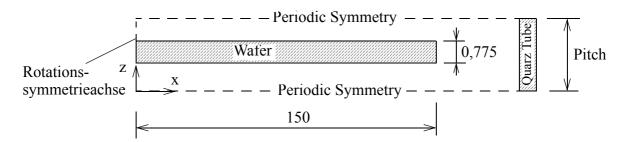


Abbildung 4.1: Wärmestrahlungsmodell für den Vertikalofen (Angaben in [mm])

Der Prozeß läuft temperaturgesteuert. Als Randbedingung ist dafür die Temperatur auf der Ofenwand vorgegeben. Die Temperatur wird mit einer konstanten Aufheizgeschwindigkeit (Ramprate) erhöht. Die Simulation erfolgt somit für einen instationären Prozeß. Durch Wärmestrahlung wird die thermische Energie des Ofens auf den Waferstapel übertragen. Je nach Ramprate entsteht eine Temperaturdifferenz zwischen Ofenwand und Wafer. Innerhalb des Wafers wird die Wärme durch Wärmeleitung in dessen Inneres transportiert. Es entsteht ein Temperaturgefälle über den Wafer in radialer Richtung. Dieses Temperaturgefälle ist qualitativ vergleichbar mit der analytischen Lösung aus Kapitel 3.3.1, hat aber quantitativ bedeutende Unterschiede.

# 4.1.1.2 Auswertung der Ergebnisse

Die Wärmestrahlung hängt stark von der absoluten Temperatur der Strahleroberfläche ab. Der Wärmestrom steigt bekanntermaßen mit der 4. Potenz der absoluten Temperatur nach folgender Gleichung an:

 $q = C \cdot (T_1^4 - T_2^4) \tag{4.1}$ 

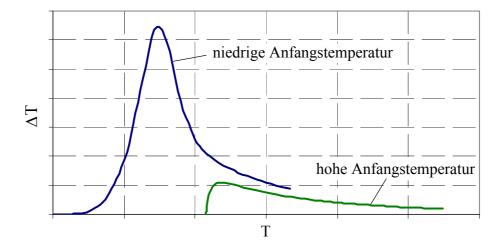


Abbildung 4.2 Temperaturdifferenz im Wafer in Abhängigkeit der Ofenwandtemperatur bei unterschiedlichen Anfangstemperaturen unter konstanter Ramprate

Wählt man die Temperaturdifferenz  $\Delta T$  zwischen Waferaußenkante und Waferzentrum als charakteristische Größe und trägt diese über die absolute Temperatur T des Ofens auf, so zeigen sich bei zwei verschiedenen Starttemperaturen der Ofenwand unter jeweils gleicher konstanter Aufheizgeschwindigkeit die in Abbildung 4.2 dargestellten Verläufe.

Bei niedriger Anfangstemperatur (blaue Kurve) ist die Wärmeübertragung nach dem Stefan-Boltzmann-Gesetz geringer. Demzufolge entsteht durch den geringen Wärme(-strahlungs-)fluß eine größere Temperaturdifferenz über den Wafer und es kann der Prozeßanfang für die maximale Temperaturdifferenz  $\Delta T$  durchaus eine wichtige Größe sein. Nach entsprechend langer Prozeßzeit nähern sich aber beide Lösungen einander an.

Die analytische Lösung des Scheibenproblems (Abschnitt 3.3.1) lieferte eine parabolische, radiale Temperaturverteilung gemäß:

$$T(r) = T_a - \Delta T \cdot \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right]$$
 (4.2)

Benutzt man weiterhin  $\Delta T$  als wesentliche Größe, so läßt sich auch fortan mit Gleichung (4.2) der radiale Temperaturverlauf ausreichend genau darstellen, sofern nur  $\Delta T$  realitätsnah ermittelt wird. Abbildung 4.3 zeigt den Unterschied zwischen der analytischen Scheibenlösung nach Gleichung (3.217), den numerischen Strahlungsmodellen für verschiedene Waferabstände (Pitch) und den jeweils zugehörigen quadratischen Regressionen.

Es zeigt sich bei größerem Pitch aufgrund des besseren Strahlungseintrages in den Spalt eine geringere Temperaturdifferenz. Die quadratische Temperaturverteilung bleibt aber für alle Waferabstände näherungsweise erhalten. Ohne die Berücksichtigung des Strahlungseintrages, fällt die Temperaturdifferenz nach der Scheibenlösung (blaue Kurve) entsprechend hoch aus und ist für eine weitere quantitative Behandlung unbrauchbar.

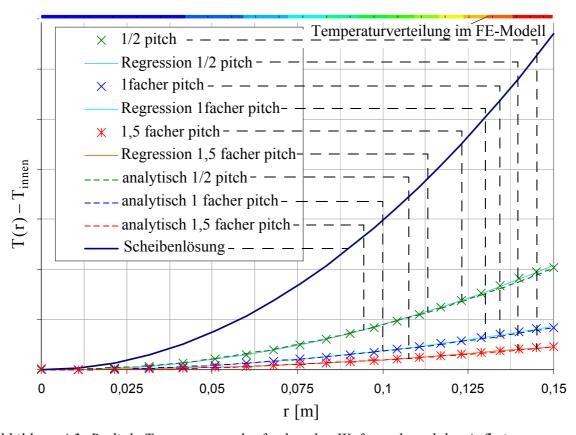


Abbildung 4.3: Radiale Temperaturverläufe über den Wafer während des Aufheizprozesses

Abbildung 4.4 zeigt die Wärmeflußvektoren beim Aufheizprozeß. Der Wärmeeintrag infolge Strahlung ist nicht über den Waferradius konstant verteilt, was zu einem ungleichmäßigen aufheizen führt. Es entsteht somit ein Wärmefluß infolge Wärmeleitung vom Waferaußenbereich

in dessen Inneres.

Abbildung 4.4: Wärmeflußvektoren im Wafer während des Aufheizprozesses (über die Waferdicke vergrößerte Darstellung)

## 4.1.1.3 Wärmespannungen

Im Anschluß bieten sich zwei Möglichkeiten an, die Wärmespannungen entkoppelt vom Wärmeübertragungsproblem zu bestimmen:

- durch analytische Herleitung nach Kapitel 3.3.1 bei bekanntem  $\Delta T$
- durch eine linear-elastische FE-Simulation bei Übergabe der Temperaturdaten

In Abbildung 4.5 sind sowohl die analytischen als auch numerischen Spannungsverläufe zum Vergleich dargestellt. Mit Ausnahme eines Kanteneffekts infolge eines erhöhten Wärmeeintrages am Waferaußenrand können im vorliegenden Fall näherungsweise quadratische Spannungsverläufe angenommen werden.

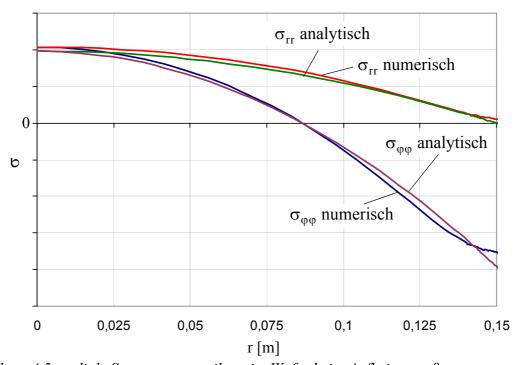


Abbildung 4.5: radiale Spannungsverteilung im Wafer beim Aufheizprozeß

Die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung berechnet sich analytisch aus den Gleichungen in Kapitel 3.3.1.3:

$$\max |\tau_{\rm res}| = \frac{1 + \sqrt{2}}{\sqrt{6}} \Omega R^2 \tag{4.3}$$

Mit der Radialspannung am Waferrand nach Gleichung (3.139):

$$\sigma_{rr}(r=R) = 0 \tag{4.4}$$

und der Umfangspannung am Waferrand nach Gleichung (3.140):

$$\sigma_{\varphi\varphi}(r = R) = -2\Omega R^2 \tag{4.5}$$

läßt sich die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung am Waferrand aus der Umfangsspannung bestimmen:

$$\max |\tau_{res}| = \frac{1 + \sqrt{2}}{2 \cdot \sqrt{6}} \sigma_{\varphi\varphi}(r = R) \approx 0.49 \cdot \sigma_{\varphi\varphi}(r = R)$$
 (4.6)

Die Auswertung der Kristallschubspannungen über den gesamten Prozeß gestaltet sich damit wesentlich einfacher.

Weitergehend werden Simulationen mit einer Initialtemperatur von 550 °C unter jeweils verschiedenen, aber konstanten Rampraten des Ofens durchgeführt. Im Anschluß erfolgt die Auswertung der betragsmäßig maximalen Kristallschubspannung unter Verwendung von Gleichung (4.6). Es zeigt sich unabhängig von den Rampraten, daß bei allen Prozesse die Kristallschubspannungen sehr schnell auf einen bestimmten Wert ansteigen und danach sehr langsam abfallen (vgl. Abbildung 4.6). Die Ursache dafür liegt im Stefan-Boltzmann-Gesetz. Mit zunehmender absoluter Prozeßtemperatur vergrößert sich der Wärmeübergang vom Ofen zum Wafer. Damit verbunden stellen sich im Wafer geringere Temperaturdifferenzen ein, die ihrerseits geringere Spannungen und damit Kristallschubspannungen zur Folge haben (vgl. auch Abbildung 4.2). Ergänzend wird vermerkt, daß die Spannungssprünge im unteren Temperaturbereich auf temperaturabhängige Materialkonstanten (Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit) zurückzuführen sind.

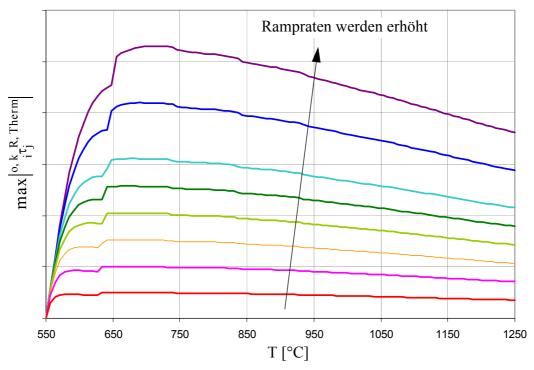


Abbildung 4.6: betragsmäßig maximale Kristallschubspannung in Abhängigkeit der Ramprate und der Temperatur bei einer Ofenstarttemperatur von 550°C

## 4.2 Wafer mit Lagerung im Vertikalofen

### 4.2.1 Temperaturen, Wärmespannungen

# 4.2.1.1 Modellannahmen, Modellbeschreibung

Bei Hinzunahme von Lagerringen wird durch den veränderten Wärmetransport auch der ursprünglich quadratische Temperaturverlauf in radialer Richtung gestört.

Im Kontaktbereich (Abbildung 4.7) zwischen Wafer und Support wird Wärme über Leitung und Wärmestrahlung übertragen. Im Gegensatz zur Wärmeübertragung zwischen Quarztube und Wafer/Support wird hier der Wärmeleitungseffekt dominant, da durch den geringen Abstand (< 0,1 mm) zwischen beiden Körpern die Isolationswirkung des Gases verschwindend gering wird. Variiert man den Spalt zwischen Wafer und Support im Bereich 0,1 ... 0,001 mm so ergibt sich eine Wärmeleitfähigkeit von 800 - 80.000 W/m²/K. Aus diesem Grund wurde kein Wärmewiderstand im Kontaktbereich angesetzt. Beide Körper verhalten sich nun so, als wären sie miteinander wie ein Körper verbunden.

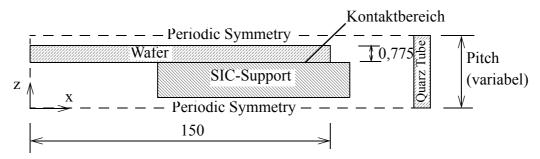


Abbildung 4.7 Axialsymmetrisches Modell mit SIC-Lagerring

## 4.2.1.2 Ergebnisse

Im ersten Schritt wird zu einem festen Zeitpunkt unter einer konstanten Ramprate in Abbildung 4.8 der radiale Temperaturverlauf ausgewertet. Zum Vergleich ist nochmal der Temperaturverlauf für einen Wafer ohne Lagerung dargestellt.

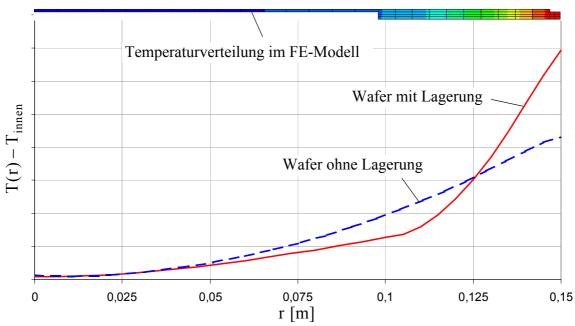


Abbildung 4.8: Radiale Temperaturverteilung im Wafer bei 10mm Pitch unter einer konstanten Ramprate

Deutlich zu erkennen ist dabei, daß die Störung des quadratischen Temperaturverlaufes im Bereich des Supports einsetzt. Der Wärmetransport in das Innere des Wafers wird damit maßgeblich durch den Support beeinflußt. Durch dessen veränderte Wärmeleitfähigkeit und thermische Masse bildet sich ein veränderter Wärmestrom aus (Abbildung 4.9), was eine Veränderung der Temperaturgradienten zur Folge hat. Im vorliegenden Fall bewirkt die höhere thermische Masse des Supports trotz dessen besserer Leitfähigkeit eine Verringerung des Wärmestromes in das Waferinnere. Die Temperaturdifferenz im Vergleich zum Wafer ohne Lagerung wird vergrößert.

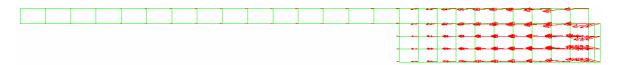


Abbildung 4.9: Wärmeflußvektoren im Wafer und Support während des Aufheizprozesses (über die Waferdicke vergrößerte Darstellung)

### 4.2.1.3 Wärmespannungen / maximale Kristallschubspannungen

Im Nachlauf erfolgt die Ermittlung der Wärmespannungen aus den Temperaturdaten mittels FEM (Abaqus 6.5-1). In Abbildung 4.10 sind die zum Temperaturverlauf aus Abbildung 4.8 zugehörigen Spannungsverläufe  $\sigma_{rr}$  und  $\sigma_{\phi\phi}$  dargestellt. Die Schubspannung  $\tau_{r\phi}$  wird infolge der Rotationssymmetrie wie bei der analytischen Lösung zu Null. Die Auswirkungen des durch das Lager veränderten Temperaturverlaufes auf die Spannungsverläufe sind deutlich zu erkennen.

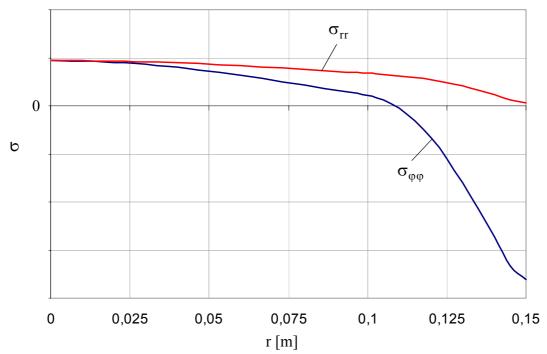


Abbildung 4.10: radiale Spannungsverteilung im Wafer beim Aufheizprozeß mit Ringlagerung

Um eine Aussage zur Kristallplastizierung (Slip) treffen zu können, müssen die Kristallschubspannungen aus den vorliegenden Spannungsverläufen berechnet werden. Wie bei der analytischen Lösung des Aufheizprozesses einer Kreisscheibe kommen auch hier insgesamt 5 verschiedene Oktaeder-Schubspannungen nach Tabelle 3.5 und eine kubische Kristallschubspannung in Betracht. Die Radial-, als auch Umfangsspannung sind in jedem Radialschnitt aufgrund der Rotationssymmetrie identisch. Für die Kristallschubspannungen muß aber die jeweilige Kristallorientierung berücksichtigt werden. Eine Auswertung der Kristallschubspannungen <sup>0, k R</sup> erfolgt in Anlage A10 für bestimmte ausgewählte Radialschnitte von 0°, 22.5°, 45°, 67.5° und 90° zur x-Achse. Von Interesse sind davon wiederum nur die jeweiligen betragsmäßig maximalen Kristallschubspannungen max <sup>0, k R</sup> it in Die radialen Spannungsverläufe dazu sind in Abbildung 4.11 dargestellt. Auch hier treten die Maximalwerte wie beim Wafer ohne Lagerung jeweils an der Waferaußenkante und in den Winkeln von 22.5° und 67.5° auf.

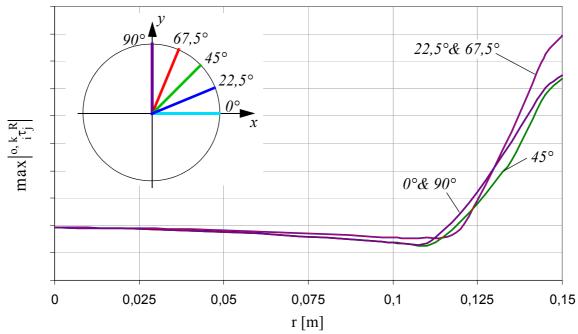


Abbildung 4.11: betragsmäßig maximale Kristallschubspannung während eines Aufheizprozesses mit konstanter Ramprate

# 4.2.2 Biegespannungen

### 4.2.2.1 Das Kontaktmodell

Nachstehend wird dieses Lagerungskonzept in Hinblick auf dessen Biegespannungsniveau infolge Eigengewicht mittels FEM untersucht. Das verwendete Programmsystem ist Abaqus Version 6.5-1.

Bezüglich der FE - Modellierung wurden sowohl der Wafer als auch die Lagerstruktur mit ebenen Schalenelementen ohne Zwischenknoten (linearer Ansatz) abgebildet.

Da das Spannungsniveau stark von den sich infolge der flexiblen Wafer- und Lagerstruktur unter Gravitationsbelastung einstellenden Kontaktbereichen abhängt, müssen diese sorgfältig modelliert werden. Hierbei ergeben sich aufgrund der Kontaktnichtlinearität und der bekannten langsamen Konvergenz sehr lange Rechenzeiten.

Um ein niedriges Spannungsniveau zu erzielen, ist auf einen flächigen Kontakt mit möglichst wenig Kantenpressung Wert zu legen. Erst hierdurch sind die in der Kontaktzone induzierten Druckspannungen so klein zu halten, daß die Biegespannungen infolge des Durchhanges die begrenzende Größe darstellen.

Man beachte allerdings, daß die Rechnung an einer geometrisch perfekten Struktur ausgeführt wurde, weswegen geometrische Imperfektionen wie Fertigungsungenauigkeiten zunächst unbeachtet bleiben.

Durch die Geometrie des Boats ist eine Stützung der Lagerträger in der Weise gegeben, daß der vordere Halbkreis zum Be- und Entladen des Wafers frei bleibt. Diese Stützung erfolgt durch das Boat bei 9-12-3 Uhr (Siehe Abbildung 4.12).

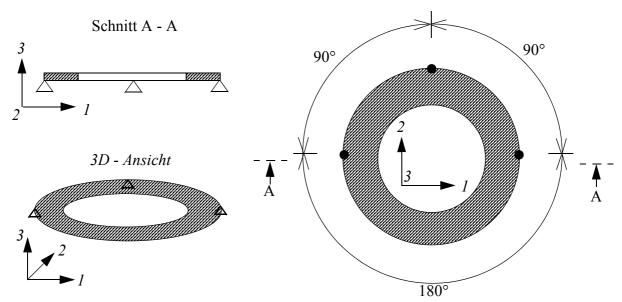


Abbildung 4.12 Lagerung des SIC-Ringes

## 4.2.2.2 Auswertung der Ergebnisse

Betrachtet man das Tragverhalten der Ringlagerung bei Belastung durch den aufliegenden Wafer (Eigengewicht) und dem Eigengewicht des Lagerringes bei einer Dreipunktlagerung des Lagerringes (Außenrand), so stellt sich eine Verformung des Ringes gemäß Abbildung 4.13 ein. Die gesamte Last von Wafer und Support wird von den beiden vorderen Rods aufgenommen. Der hintere Rod dient nur zur Stabilisierung des Systems. Damit verbunden stellen sich auch höhere Kontaktspannungen im Wafer ein, als bei einer symmetrischen 3-Punktlagerung des Supports.

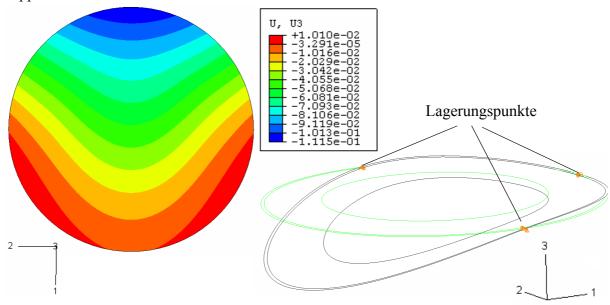


Abbildung 4.13: Verformung U des Wafers und des Ringes in vertikaler Richtung infolge Eigengewicht

In Anlage A9 sind die Ergebnisse der FE-Berechnung dargestellt und zwar jeweils:

- die Kontaktpressung (sie zeigt die Lage der Kontaktstellen und das Vorhandensein von Kantenpressung und gibt einen qualitativen Hinweis auf das Kontaktspannungsniveau allerdings nur bei gleicher Netzdichte für eine quantitative Aussage wäre ein extrem feineres Netz im Kontaktbereich notwendig)
- die Durchsenkung des Wafers
- die von Mises-Vergleichsspannung in der Lagerstruktur und im Wafer (die Ausgabe erfolgte jeweils auf der Unterseite)
- die radialen Verläufe der Kristallschubspannungen auf der Waferunterseite in den Winkeln von 0°, 22.5°, 45°, 67.5° und 90° zur x-Achse (Siehe auch Abbildung 4.14)

Bei Überschreitung der Fließspannung im Wafer kommt es zu Umlagerungen im Spannungsfeld, wodurch andere Bereiche (z.B. durch größere Kontaktflächen) zum Lastabtrag aktiviert werden. Wie groß diese Vergleitungen im Einzelfall sind, hängt unter anderem von der Steifigkeit und Geometrie des Lagerrings ab. Ziel ist es, möglichst keine Plastizierungen, oder größtmögliche Umlagerungen bei kleinsten Plastizierungen zu erreichen.

Hinsichtlich der Materialparameter wurden für den Wafer die kubisch orthotropen Werte von Silizium (Anlage A1) und für die Lagerstruktur die isotropen Werte von Siliziumcarbit (Anlage A2) herangezogen.

Die radialen Verläufe der betragsmäßig maximalen Kristallschubspannungen sind in Abbildung 4.14 dargestellt. Entgegen den Spannungsverläufen aus dem Aufheizvorgang, befinden sich die Maxima nicht an der Waferaußenkante, sondern im Waferinneren. Dies wirkt sich positiv auf den überlagerten Gesamtspannungszustand aus.

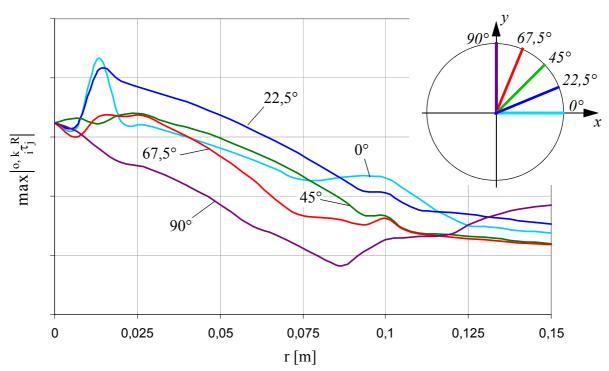


Abbildung 4.14: betragsmäßig maximale Kristallschubspannung aus Biegung auf der Waferunterseite bei Ringlagerung infolge Eigengewicht

## 4.2.3 Überlagerung von Biege- und Wärmespannungen

Mit den radialen Spannungsverläufen aus Biegung (Waferunterseite) und dem Aufheizprozeß erfolgt die Überlagerung zu einem Gesamtspannungszustand (Abbildung 4.15). Die Überlage-

rung ist entweder mit den Spannungen im Zylinderkoordinatensystem (Gleichung (4.9)), im karthesischen Koordinatensystem (Gleichung (4.8)) oder mit den Kristallschubspannungen (Gleichung (4.7)) möglich.

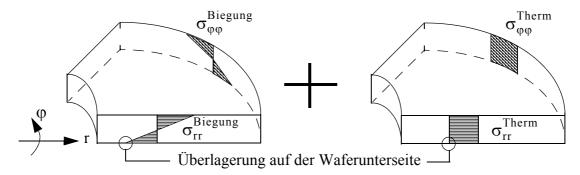


Abbildung 4.15: Überlagerung der Spannungszustände

$${}^{o, k}{}_{i}\tau_{j}^{R, \text{Biegung}}(\varphi) + {}^{o, k}{}_{i}\tau_{j}^{R, \text{Therm}}(\varphi) = {}^{o, k}{}_{i}\tau_{j}^{R}(\varphi) \longrightarrow \max_{i} \left| {}^{o, k}{}_{i}\tau_{j}^{R} \right| (\varphi)$$
(4.7)

$$\sigma_{xx}^{Biegung}(\varphi) + \sigma_{xx}^{Therm}(\varphi) = \sigma_{xx}^{Gesamt}(\varphi) \xrightarrow{o, k R \atop i \tau_{j}} (\varphi) \rightarrow max \begin{vmatrix} o, k R \\ i \tau_{j} \end{vmatrix} (\varphi)$$

$$\sigma_{yy}^{Biegung}(\varphi) + \sigma_{yy}^{Therm}(\varphi) = \sigma_{yy}^{Gesamt}(\varphi) \xrightarrow{o, k R \atop i \tau_{j}} (\varphi) \rightarrow max \begin{vmatrix} o, k R \\ i \tau_{j} \end{vmatrix} (\varphi)$$
(4.8)

$$\sigma_{\phi\phi}^{Biegung} + \sigma_{\phi\phi}^{Therm} = \sigma_{\phi\phi}^{Gesamt} \xrightarrow{Transformation} \sigma_{xx}^{Gesamt}(\phi) \xrightarrow{o, k \atop o, k \atop i} \tau_{j}^{R}(\phi) \rightarrow max \begin{vmatrix} o, k \atop i \tau_{j} \end{vmatrix} (\phi) \quad (4.9)$$

$$\sigma_{rr}^{Biegung} + \sigma_{rr}^{Therm} = \sigma_{rr}^{Gesamt} \xrightarrow{\sigma_{yy}} \sigma_{yy}^{Gesamt}(\phi) \xrightarrow{i} \tau_{j}^{R}(\phi) \rightarrow max \begin{vmatrix} o, k \atop i \tau_{j} \end{vmatrix} (\phi) \quad (4.9)$$

In Abbildung 4.16 sind die betragmäßig maximalen Kristallschubspannungen des überlagerten Gesamtspannungszustandes für verschiedene Schnittwinkel φ dargestellt. Bei einer Ramprate von 5 K/min dominieren die Wärmespannungen gegenüber den Biegespannungen, so daß sich der Gesamtspannungszustand nur unwesentlich von den Wärmespannungen in Abbildung 4.11 unterscheidet. Die Spannungsmaxima treten wie bei der analytischen Lösung der Kreisscheibe im Winkel von 22.5° und 67.5° auf.

Verringert man die Rampraten auf 0,5 K/min, werden die Wärmespannungen kleiner. Infolgedessen verlagern sich nicht nur die  $\varphi$ -Positionen der überlagerten Gesamtspannungsmaxima auf 0° und 90°, sondern auch die radialen Positionen vom Waferaußenrand in das Waferinnere (Abbildung 4.17). Dies ist darauf zurückzuführen, daß hier die Biegespannungen dominieren (Vgl. mit Abbildung 4.14).

Mit den so gewonnenen Erkenntnissen lassen sich folgende Schlußfolgerungen ziehen:

- (1) Bei hohen Rampraten dominieren die Wärmespannungen. Im vorliegenden Fall gilt dies bei  $\dot{T} > 0.5 \ \text{K/min}$ . Die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung tritt am Waferaußenrand auf.
- (2) Bei niedrigen Rampraten dominieren die Biegespannungen. Die Rampraten betragen hier  $\dot{T} \leq 0,5~\text{K/min}$ . Die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung tritt am Ort der maximalen v. Mises-Biegespannung auf.

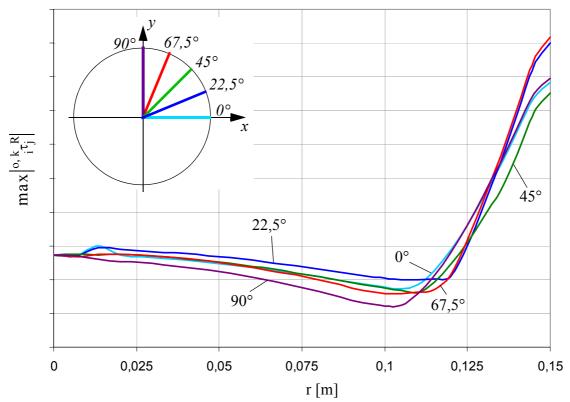


Abbildung 4.16: Überlagerte betragsmäßig maximale Kristallschubspannung bei 5K/min

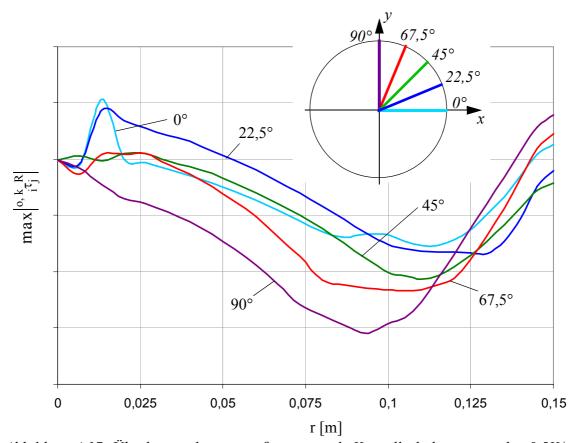


Abbildung 4.17: Überlagerte betragsmäßig maximale Kristallschubspannung bei 0,5K/min

# 4.3 Rapid Thermal Anneal (RTA)

#### 4.3.1 Das Modell

Die Heizkammer im hier untersuchten RTA-System (Abbildung 2.6) läßt sich zusammen mit dem Wafer rotationssymmetrisch modellieren (Abbildung 4.18). Der Ofen besitzt ein vorgegebenes und somit bekanntes stationäres Temperaturfeld und der Wafer wird durch Veränderung seiner vertikalen z-Position durch dieses Temperaturfeld geführt (siehe auch Abbildung 2.12). Die Formfaktoren der Teiloberflächen des FE - Netzes werden inkrementell nach einer vorher festgelegten Verschiebung neu ermittelt und daraus das Temperaturfeld berechnet.

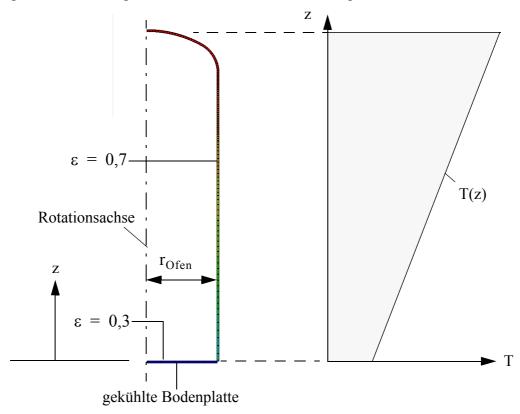


Abbildung 4.18: FE-Modell der Heizkammer und in Höhe abhängiges Temperaturprofil

Die Bodenplatte besitzt im Modell eine deutlich niedrigere Temperatur als die Ofenwände und eine Emissivität von 0,3. Der Elevator (Hubeinrichtung) findet keine Berücksichtigung. Eine direkter Vergleich zwischen RTA und Vertikalofen ist nicht möglich, da durch die gänzlich unterschiedliche Funktionsweise andere Mechanismen beim Aufheizen auftreten. Problematisch ist die Steuerung der Rampraten, da die Temperatur des Wafers von der vertikalen Position abhängt und nicht direkt vorgegeben werden kann.

## 4.3.2 Ergebnisse

Insgesamt entstehen während des RTA-Prozesses höhere Wärmespannungen als beim Vertikalofenprozess. Daß dieser Prozeß erfahrungsgemäß mit vergleichsweise wenig Vergleitungen vonstatten geht, ist auf die extrem hohen Aufheizgeschwindigkeiten und damit sehr kurzen Zeit, in der die Wärmespannungen auftreten, zurückzuführen.

Um einen Überblick über die wesentlichen Effekte beim Aufheizen zu erhalten, ist es sinnvoll, den Wafer ohne zusätzliche Einbauten zu simulieren. Der Wafer befindet sich dabei zum Zeitpunkt 0 an der angenommenen Nullposition (z=0) der Heizkammer und wird mit einer kon-

stanten Geschwindigkeit in den heißeren Bereich gefahren. Nach Erreichen einer vorgegebenen Endhöhe und nachdem sich ein stationäres Temperaturfeld eingestellt hat, wird die Berechnung automatisch abgebrochen, der Wafer auf die ursprüngliche Nullposition gebracht und erneut mit einer höheren Geschwindigkeit hochgefahren.

Beim Hochfahren des Wafers lassen sich 2 Grenzfälle feststellen:

(1) Der Wafer wird extrem langsam (rote Kurve in den Diagrammen in Abbildung 4.19) hochgefahren, so daß sich zu jedem Zeitpunkt ein stationäres Temperaturfeld einstellt.

(2)
Der Wafer wird so schnell hochgefahren (violettfarbene Kurve in den Diagrammen), daß er "keine Zeit hat", die Temperatur der benachbarten Ofenwände anzunehmen (Abbildung 4.19 links). Beim Anhalten des Wafers benötigt er dann eine gewisse Zeit um diese Temperatur zu übernehmen.

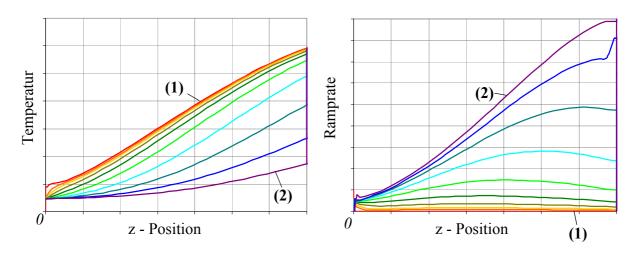


Abbildung 4.19: Temperatur und Ramprate in der Mitte des Wafers bei verschiedenen Anfahrgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von dessen vertikalen z - Position im Ofen

Abbildung 4.19 zeigt die Diagramme für den Aufheizprozeß eines Wafers bei unterschiedlichen Hochfahrgeschwindigkeiten. Dadurch ergeben sich auch verschiedene Prozeßzeiten und eine Darstellung über die Zeit auf der Abszisse wäre nicht übersichtlich und die Prozesse untereinander nicht vergleichbar. Aus diesem Grund ist auf der Abszisse die z-Position des Wafers aufgetragen.

Beim stationären Anfahrprozeß sind die Rampraten nahezu Null (Abbildung 4.19 links, rote Kurve) und beim schnellen Hochfahren am größten.

Nach dem Erreichen einer vorgegebenen Endhöhe ist das Aufheizen des Wafers für den Prozeß (2) noch nicht abgeschlossen. Es ist deshalb sinnvoll, wieder die Zeit auf der Abszisse zu wählen (Abbildung 4.20).

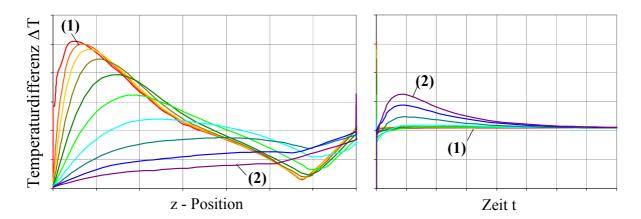


Abbildung 4.20: Maximale Temperaturdifferenz über den Wafer bei verschiedenen Anfahrgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von dessen vertikaler z - Position im Ofen (links) und nach dem Erreichen einer Endhöhe von der Zeit (rechts)

Die für das Spannungsfeld wesentliche Einflußgröße ist die betragsmäßig maximale Temperaturdifferenz über den Wafer (Abbildung 4.20). Dabei zeigt sich, daß beim schnellen Hochfahren des Wafers diese Größe zunächst sehr gering ausfällt (linkes Diagramm), aber im Plateaubereich (rechtes Diagramm) wieder sehr hoch ist, bevor sich das gesamte Temperaturfeld nach einer bestimmten Zeit ausgeglichen hat. So ist auch diese Darstellung mit der Höhe im Anfahrbereich und mit der Zeit in der Plateauphase als x-Achse zwar für das Verständnis des Prozesses sinnvoll, aber nicht für den Vergleich zwischen maximaler Kristallschubspannung und Upper Yield Stress. In Abbildung 4.21 wurde für die x-Achse die absolute Temperatur in der Mitte des Wafers verwendet.

Ein interessantes Merkmal ist, daß sich bei einer bestimmten z-Position unter einer zugehörigen Temperatur ein Minimum für die Temperaturdifferenzen und die Spannungen einstellt (rote Kurve - bei höheren Anfahrgeschwindigkeiten liegt die Temperatur niedriger). Die Ursache liegt darin begründet, daß unterhalb von dieser z-Position der Waferinnenbereich wärmer ist (Position 1/Abbildung 4.21) als der Waferaußenbereich und oberhalb davon (Position 3) der Waferaußenbereich heißer wird (Abbildung 4.21 oben rechts). Bei den Spannungen findet sich der Nulldurchgang als Knick (Position 2) in den Kurven wieder (Abbildung 4.21 oben links). Die Strahlungswärme wird in Position 1 zum größten Teil auf die Wafermitte eingetragen und dann nach außen weitergeleitet (Abbildung 4.22 oben). In Position 2 (Abbildung 4.22 Mitte) findet der Wärmetransport vom heißen Ofenbereich in den kälteren Bereich direkt vertikal durch den Wafer hindurch statt. Wird der Wafer in Position 3 (Abbildung 4.22 unten) gebracht, entsteht der klassische Kanteneffekt - die Außenkante wird durch die umgebenden wärmeren Ofenwände stärker als die Innenfläche des Wafers aufgeheizt, so daß sich der Wärmefluß umkehrt.

Der Vergleich zwischen betragsmäßig maximaler Temperaturdifferenz (Abbildung 4.21 unten) und betragsmäßig maximaler Kristallschubspannung (Abbildung 4.21 oben links) zeigt, daß beide Verläufe qualitativ nahezu identisch sind.

Der eingezeichnete UYS (schwarze Linie Abbildung 4.21 oben links) wird zwar in Position 2 nicht erreicht aber beim Anfahren überschritten. Die Aussage, ob Slip entsteht oder nicht, ist aufgrund der fehlenden bzw. ungenauen Meßwerte noch nicht möglich. Bei diesen hohen Dehnungsraten kann der UYS aber höher liegen.

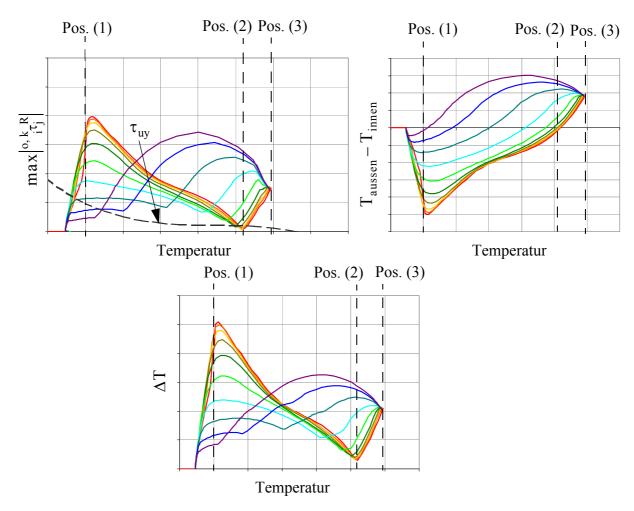


Abbildung 4.21: Maximale Kristallschubspannung (oben links), Differenz aus Außen- und Innentemperatur (oben rechts) und maximale Temperaturdifferenz (unten) über den Wafer bei verschiedenen Anfahrgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der absoluten Temperatur

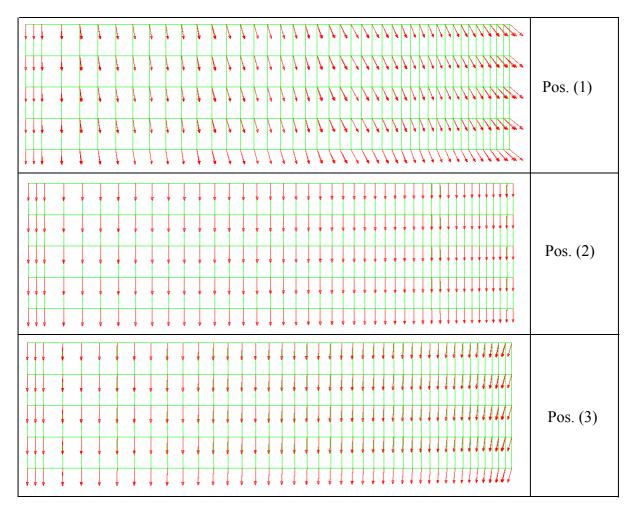


Abbildung 4.22: Wärmestrahlungsfluß im Wafer an verschiedenen Positionen bei der geringsten Anfahrgeschwindigkeit (über die Waferdicke vergrößerte Darstellung)

#### 4.4 Hinweise und Empfehlungen

# 4.4.1 Entwicklung eines Bemessungsmodells für eine vereinfachte Rampratenoptimierung im Vertikalofen

Folgende Vereinfachungen ergeben sich mit diesem Bemessungsmodell:

- Es wird vorrausgesetzt, daß die Kontaktstellen nicht an der Waferaußenkante liegen und somit eine Überlagerung der maximalen Wärmespannungen mit den Kontaktspannungen ausgeschlossen ist.
- Der Ort der betragsmäßig maximalen Kristallschubspannung ist die Waferaußenkante, da dort bei hohen Rampraten die höchste thermische Beanspruchung zu erwarten ist. Bei geringeren Rampraten (vgl. Abbildung 4.16 mit Abbildung 4.17) dominieren die Biegespannungen, womit sich der Ort der betragsmäßig maximalen Kristallschubspannung verlagert.
- Das thermomechanische Gesamtproblem wird quasistationär ( $\dot{T}=const$ ) und entkoppelt behandelt. Die Zeiten, welche das System zum Erreichen des quasistationären Zustandes benötigt bleiben unberücksichtigt.

#### Ermittlung der Rampraten

Der Rampratenoptimierung liegt die Forderung zu Grunde, daß an jedem Temperaturpunkt die betragsmäßig maximale Kristallschubspannung im Wafer stets unterhalb des Upper Yield Stress liegen muß. Damit wird erreicht, daß einerseits eine volle Ausnutzung der Rampraten und andererseits keine Schubspannungen über der Fließgrenze liegen.

Das Aufheizen eines Wafers im Vertikalofen ist dadurch charakterisiert, daß sich bei konstanter Ramprate innerhalb einer bestimmten Zeit ein quasistationäres Temperaturfeld ausbildet. Nach dem Stefan-Boltzmann-Gesetz wird dieses Temperaturfeld nur noch von der absoluten Temperatur beeinflußt (Siehe Abbildung 4.2). Ebenso verhalten sich die daraus induzierten Spannungen.

Zieht man die Spannungsverläufe der thermisch induzierten betragsmäßig maximalen Kristallschubspannung im Wafer für jeweils konstante Rampraten heran, erhält man die bereits erläuterten Verläufe nach Abbildung 4.6.

Im zweiten Schritt können diese Schubspannungen vom Upper Yield Stress (Abbildung 3.15) abgezogen werden.

$$\tau_{\text{rest}}(T, \dot{T}) = \tau_{\text{uy}}(T) - \max_{i} \left| {c_i^{k} \tau_j^{R, \text{Therm}} \right| (T, \dot{T})$$
(4.10)

Dies entsprich dem Temperaturfeld überlagerte Restschubspannungen (Abbildung 4.23 links), welche für Kontakt- und Biegespannungen zur Verfügung stehen. Je höher diese Restschubspannungen gewählt werden, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit der Slipentstehung im Wafer.

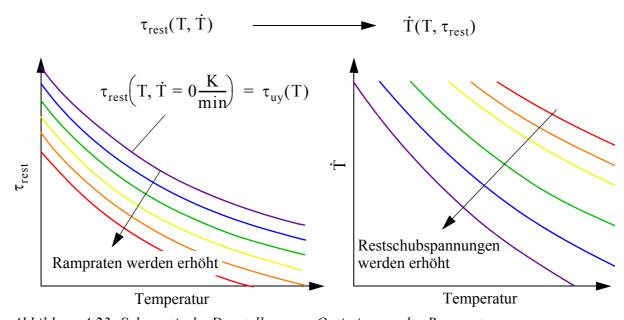


Abbildung 4.23: Schematische Darstellung zur Optimierung der Rampraten

In Abbildung 4.23 rechts wird daraus ein Diagramm entwickelt, womit diejenigen Rampraten direkt abgelesen werden können, welche bei einer bestimmten Temperatur unter Einhaltung der gewählten Restschubspannung nicht überschritten werden sollten.

#### Bestimmung der Restschubspannungen

Um die passende Restschubspannung  $\tau_{rest}$  zu bestimmen, dienen die Simulationen aus Abschnitt 4.2.2. Hier kann die Biegespannung für einen Wafer bei Lagerung auf den SIC-Supports

abgelesen werden. Die Überlagerung der Biegespannung (Abbildung 4.14) erfolgt an der Stelle der maximalen Wärmespannung (Abbildung 4.11).

## 4.4.2 Entwicklung eines empirischen Ersatzmodells unter Berücksichtigung spiegelnder Oberflächen

Für die Simulation des Aufheizprozesses bietet das FE-Programm Abaqus 6.5-1 nicht die Möglichkeit der Einbeziehung spiegelnder Oberflächen. Im CFD-Löser Fluent 6.1.22 sind außer der Netto-Strahlungsmethode weitere Strahlungsalgorithmen implementiert. Unter Fluent können mittels der Methode der Diskreten Ordinaten (Abschnitt 3.3.3.3) spiegelnde Oberflächen mit der Emissivität  $\epsilon=0$  und den Reflexionseigenschaften  $\rho_{sp}=1$  und  $\rho_{diff}=0$  berechnet werden. Auf diese Methode wird in diesem Abschnitt nicht näher eingegangen und das Programm Fluent unter Kenntnis der Netto-Strahlungsmethode für diffuse Oberflächen als "Black Box" behandelt.

Die Idee ist nun, die Oberflächen in abwechselnd schwarze und 100%ig spiegelnde Oberflächen zu unterteilen. Die Richtung der reflektierten Strahlung bleibt bei Reflexion an den spiegelnden Oberflächen erhalten und ein bestimmter Anteil der Strahlung wird an den schwarzen Teilflächen absorbiert. Bei ausreichend feiner Vernetzung sollten die Teileigenschaften der Oberfläche zu einer grau-spiegelnden Gesamteigenschaft verschmieren. Je nach Verhältnis von schwarzen und spiegelnden Teiloberflächen läßt sich die Emissivität der Gesamtoberfläche steuern.

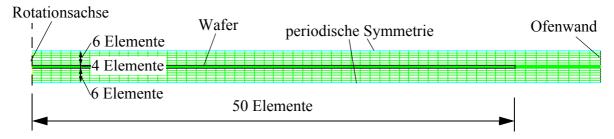


Abbildung 4.24: CFD - Wärmestrahlungsmodell Wafer/Ofen

Mit Hilfe eines einfachen, rotationssymmetrischen Modells bestehend aus Wafer ohne Support (Abbildung 4.24) soll der Aufheizprozeß für eine Ramprate von wenigen K/min simuliert werden. Für das Medium im Ofen wurde eine sehr niedrige Leitfähigkeit angenommen. Dies führt dazu, daß zunächst der Wafer durch Wärmestrahlung aufgeheizt wird und dann durch Wärmeleitung seine Temperatur an die Umgebung abgibt. Zusätzliche Effekte wie Konvektion und Leitung können damit als unberücksichtigt angesehen werden. Folgende temperaturunabhängige Parameter wurden der Einfachheit halber verwendet:

$$\lambda_{\rm Si} = 25 \frac{\rm W}{\rm m \cdot K} \tag{4.11}$$

$$\rho = 2500 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \tag{4.12}$$

$$c_{p} = 725 \frac{J}{kg \cdot K} \tag{4.13}$$

$$\varepsilon_{Si} = 0.5 \tag{4.14}$$

$$\varepsilon_{\text{ofenwand}} = 0.7$$
 (4.15)

Als Referenz dazu wurde Abaqus verwendet, welches mit der Netto - Strahlungsmethode arbeitet

Abbildung 4.25 zeigt den deutlichen Einfluß spiegelnder Oberflächen. Die Temperaturdifferenz zwischen Waferaußenkante und Waferzentrum liegt bei der Annahme spiegelnder Waferoberflächen zu jedem Zeitpunkt niedriger als bei diffusen Oberflächen.

Auch wenn diesbezüglich noch keine quantitativen Aussagen möglich sind, so wird die Vermutung in Abschnitt 3.3.3.4 sowie Abbildung 3.35 hiermit bestätigt.

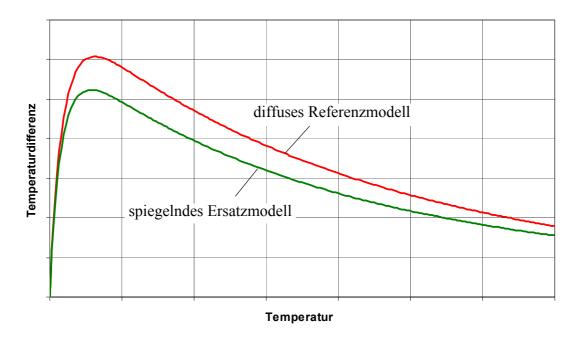


Abbildung 4.25: Vergleich der Temperaturdifferenz über die absolute Temperatur bei konstanter Ramprate

#### 5. Zusammenfassung und Ausblick

#### Allgemein

Mit der vorliegenden Arbeit wurden verschiedene Modelle entwickelt, welche den Annealprozeß mit dem Ziel der Berechnung des Spannungsfeldes im Wafer, wirklichkeitsnah simulatorisch abbilden. Zusammengefaßt zu einem entkoppelten thermomechanischen Gesamtmodell ermöglichen diese Modelle nun erstmalig eine realitätsnahe quantitative Beschreibung des Anneals bis zum erstmaligen Eintreten von Slip im Wafer. Eine Allgemeingültigkeit der erstellten Modelle ist in der Weise gegeben, daß sie sich sowohl auf andere Lagerstrukturen (z.B. Lager aus Silizium) als auch andere Prozeßparameter (z.B. veränderte Rampraten oder anderes Prozeßgas) anwenden lassen.

#### UYS

Nach dem bisherigen Stand der Technik sind Zugversuche mit einkristallinem Silizium zur Ermittlung der Fließgrenze bei Temperaturen über 1000 °C erstmalig durchgeführt worden. Die Ergebnisse geben Aufschluß über den Verlauf des UYS in Abhängigkeit der Temperatur über 1000 °C. Dieser Verlauf gibt die obere Grenze der für das Material ertragbaren Spannung an, wodurch sich der Gesamtprozeß bezüglich der Optimierung von Lagerstrukturen und Rampraten daran anpassen läßt.

Weiter offen bleiben Kriechversuche, welche die Auswirkungen von Langzeit- (Plateauphase im Vertikalofenanneal) und Kurzzeitbelastungen (RTA) auf den UYS untersuchen. Beispielsweise wären dazu folgende Versuche sinnvoll:

- Langzeitversuche bei 1100 und 1300 °C mit einer Zugbelastung von  $\sigma \approx 0,75 \cdot \sigma_{uy}$  über einen Zeitraum von 2 Stunden oder länger
- Kurzzeitkriechversuche mit "Überspannung",  $\sigma > \sigma_{uy}$  z.B.  $\sigma = 110\%$   $\sigma_{uy}$  bei 1100 und 1300 °C

#### Kontakt

Die analytischen und numerischen Kontaktberechnungen erklären das Auftreten von Vergleitungen durch Lageroberflächen mit geringem Krümmungsradius (Pinlagerung). Mit Hilfe der vorliegenden Herleitungen können nun die für das Einsetzen von Vergleiten kritischen Krümmungsradien bestimmt werden. Die Kontaktmodelle beschränken sich allerdings bisher auf rotationssymmetrische Probleme mit kugelförmiger Lageroberfläche. Auf Kontaktprobleme mit flächenartigen Lageroberflächen (Ringlager) sind die Modelle aus folgenden Gründen nicht übertragbar:

- die bisherigen analytischen Modelle beschränken sich auf Kugel- oder Zylinderlagerung
- für eine Kontaktmodellierung mittels FEM sind sehr komplexe 3D-Modelle mit hoher Rechenzeit nötig
- ringförmige Lagerstrukturen sind in Bezug auf ihre geometrische Perfektion äußerst sensitiv, bereits Abweichungen von wenigen μm verursachen ein komplett anderes Tragverhalten verbunden mit veränderten Kontaktspannungen

#### thermomechanisches Gesamtmodell

Das entkoppelte thermomechanische Gesamtmodell erlaubt eine Optimierung der Prozeßführung unter Berücksichtigung von thermischen und gravitatorisch induzierten Belastungen bei gleichzeitiger Gegenüberstellung mit dem UYS.

Mit den bisherigen Annahmen können die Rampraten des Aufheizprozesses auf den Abkühlprozeß übertragen werden. Dies ist insofern richtig, wenn der Vorgang entsprechend lange dauert, so daß dem thermisch-trägen System genügend Zeit gelassen wird, sich der Ramprate anzupassen. Bei den (infolge des hohen UYS bei niedrigen Temperaturen) sehr hohen Rampraten ist diese Annahme nur noch bedingt gültig.

Geht man davon aus, daß der UYS bei einem bestimmten Temperaturpunkt unter einer bestimmten Ramprate gerade erreicht wird, muß der Prozeß mit entsprechend niedrigeren Rampraten (geringere Wärmespannungen) angepaßt werden. Das System benötigt aber noch etwas Zeit, sich den nun niedrigeren Rampraten anzupassen. In dieser Zeit ist aber die Temperatur schon längst höher, so daß der UYS ebenfalls überschritten wird. Genau umgekehrt verhält es sich beim Abkühlen. Hier können eher höhere Rampraten erzielt werden, da die Temperaturen beim Erreichen des quasistationären Zustandes, gerade bei nun höheren Rampraten, schon längst viel niedriger liegen, um den UYS zu überschreiten. Allerdings liegt der UYS insgesamt nach dem Anneal niedriger, da infolge der Oxidpräzipitation das Gitter geschwächt ist. Im Allgemeinen läßt sich schlußfolgern, daß das Abkühlen insbesondere bei hohen Rampraten schneller geschehen kann als das Aufheizen. Dieses Problem wird mit der bestehenden Methode der Rampratenoptimierung nicht ausreichend erfaßt und kann nur mit einem thermomechanisch gekoppelten Modell iterativ gelöst werden.

Verbesserung des Modells unter Berücksichtigung spiegelnder Oberflächen

Das vorgestellte Ersatzmodell erlaubt die qualitative Beurteilung des Einflusses spiegelnder Waferoberflächen auf den Aufheizprozeß. Um dieses Problem auch quantitativ erfaßbar zu machen bieten sich die vorgestellten Strahlungsmethoden (Netto-Strahlungsmethode, Ray Tracing, Methode der diskreten Ordinaten) an. Diese Methoden müssen in entsprechende Algorithmen durch hauseigene Subroutinen oder in einem kommerziellen Programm umgesetzt werden.

Entwicklung eines Materialmodells zur Ermittlung der plastischen Verformungen

Die bisher entwickelten Modelle erlauben die Berechnung des Spannungszustandes bis zum erstmaligen Eintreten von Vergleitungen. Für eine quantitative Aussage bezüglich der Größe der zu erwartenden Vergleitungen besitzen die Modelle keine Gültigkeit. Zu diesem Zweck wäre die Anwendung eines Materialmodells erforderlich, welches durch schrittweise Laststeigerung:

- das Gleitsystem identifiziert, bei dem erstmalig die Vergleitung einsetzt
- die Größe der Vergleitung berechnet
- die Spannungsumlagerung vom betreffenden Gleitsystem auf andere Gleitsysteme berechnet

Mit Hilfe eines solchen Materialmodells könnte das Ausmaß der Vergleitungen berechnet werden. Bisher bevorzugen die Hersteller vergleitungsfreie Wafer, weswegen die hier vorgestellte Prozeßsimulation ein hervorragendes Werkzeug zur Prozeßführung darstellt.

#### 6. Quellenverzeichnis

- [1] c't 2000; Heft 24; "Chip, Chip, hurra! Die Herstellung von Halbleiterbauelementen"; S. 274-284
- [2] www.uwetran.de/verfahren/waferherstellung.html (Allgemeines)
- [3] www.uni-stuttgart.de/izfm/lehre/Werk\_Her.pdf (Kristallziehverfahren)
- [4] www.eecs.iu-bremen.de/archive/bsc-2004/toktosunov.pdf (COPs)
- [5] T. Müller et al.; ECS 2002
- [6] T. Müller, A. Zeller, M. Stallmann; Argon Annealing; Wacker World Wide; 2003
- [7] C. Corte, A. Kühhorn; Vergleichende Betrachtung der Spannungsniveaus infolge Gravitation bei unterschiedlichen Pin-Lagerungen; interner Bericht LS Strukturmechanik, BTU Cottbus; 2001
- [8] A. Kühhorn, M. Golze, C. Corte; Pin-Lagerungen für den Annealprozess bei 300 mm Scheiben, Teil B: Betrachtung der (nichtlinearen) Pinlagerungs- Kontaktproblematik; interner Bericht LS Strukturmechanik, BTU Cottbus; 2002
- [9] J. Niess, W. Dietl., O. Altug, W. Lerch; "Analysis of pinmark induced defects after RTP"; 199th ECS Meeting Washington; 25-29. März 2001
- [10] Howard R. Huff, Randal K. Goodall; Challenges and Opportunities für Dislocation Free Silicon Wafer Fabrication and Thermal Processing: An Historical Review; 3rd International Rapid Thermal Processing Conference; 30. August 1. September 1995
- [11] M.V. Mezhennyi, M.G. Mil'vidskii, A.I. Prostomolotov; Simulation of the Stresses Produced in Large Diameter Silicon Wafers during Thermal Annealing; Physics of the Solid State, Vol. 45, No. 10, 2003, S. 1884-1889
- [12] A. Fischer, H. Richter, W. Kürner, P. Kücher; "Slip-free processing of 300mm silicon batch wafers"; Journal of Applied Physics, Vol. 87, No. 3, 2000, S. 1543-1549
- [13] A. Fischer, Th. Grabolla, H. Richter, G. Obermeier, P. Krottenthaler, R. Wahlich; "Mechanical strength of 300mm diameter silicon wafers at high temperatures: modeling and simulation; Microelectronic Engineering 45, 1999, S. 209-223
- [14] Ping Xin; Stress Analysis of Large Diameter Silicon Wafers under Thermal Processing; Electrochemical Society Proceedings, Vol. 98-1, 1998, S.660-670
- [15] Tetsuo Fukuda; The Relationship between the Bending Stress in Silicon Wafers and the Mechanical Strength of Silicon Crystals; Journal of Applied Physics, Vol. 34, 1995, S.3209-3215
- [16] S.K.Griffiths, R.H.Nilson; Thermal Gradients, Gravitational Stress and Plastic Deformation in Large Wafers; Third 300mm Wafer Specification Workshop; San Francisco, California; July 10, 1995
- [17] M. Akatsuka, K. Sueoka, H. Katahama, N. Adachi; Calculation of Slip Length in 300mm Silicon Wafers during Thermal Processes; Journal of The Electrochemical Society; 146 (7) S. 2683-2688, 1999
- [18] Ping Xin; Stress Analysis of Large Diameter Silicon Wafers during Thermal Processing; Electrochemical Society Proceedings, Volume 98-1, 1998
- [19] Tetsuo Fukuda; The Analysis of Bending Stress and Mechanical Property of Ultralarge

- Diameter Silicon Wafers at High Temperatures; Journal of Applied Physics, Vol. 35, 1996, S.3799-3806
- [20] H. Shimizu, S. Isomae, K. Minowa, T. Satoh, T. Suzuki; Gravitational Stress Induced Dislocations in Large Diameter Silicon Wafers Studied by X-Ray Topography and Computer Simulation
- [21] R. Takeda, P. Xin, J. Yoshikawa, Y. Kirino, Y. Matsushita, Y. Hosoki, N. Tsuchiya, O. Fujii; 300mm Diameter Hydrogen Annealed Silicon Wafers; Journal of The Electrochemical Society, Vol. 144, No.10, October 1997
- [22] A. Kersch, T. Schafbauer; Thermal modeling of RTP and RTCVD processes; Thin Solid Films 365, S. 307-321, 2000
- [23] S. Hirasawa, S. Kieda, T. Watanabe, T. Torii, T. Takagaki, T. Uchino; Temperature Distribution in Semiconductor Wafers Heated in a Vertical Diffusion Furnace; IEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, Vol. 6, No. 3, August 1993
- [24] M. Schrems, A. Yamamoto, Y. Mikata, K. Usuda, K. Nakao; Simulation Of Temperature Distribution During Fast Thermal Processing, Semiconductor Si 1994
- [25] Y. H. Fan, T. Qiu; Analyses of Thermal Stresses and Control Schemes for Fast Temperature Ramps of Batch Furnaces; IEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, Vol. 10, No. 4, November 1994
- [26] K. Morizane, P. S. Gleim; Thermal Stress and Plastic Deformation of Thin Silicon Slices; Journal of Applied Physics; Vol. 40, No. 10, S. 4104-4107, September 1969
- [27] B. J. Schravendijk, W. L. De Koning, W. C. Nuijen; Modeling and control of the Wafer temperature in a diffusion furnace; Journal of Applied Physics 61 (4), S. 1620-1627, February 1987
- [28] S. M. Hu; Temperature Distribution and Stresses in Circular Wafers in a Row During Radiative Cooling; Journal of Applied Physics, Vol. 40, No. 11, S. 4413-4423, October 1969
- [29] P. Haasen; Physikalische Metallkunde; Springer Verlag, Berlin Heidelberg; 3. Auflage; 1994; ISBN 3-540-57210-4
- [30] W. Schröter, H.G. Brion, H. Siethoff, Yield point and dislocation mobility in silicon and germanium; Journal of Applied Physics 54 (4), S. 1816 1820, November 1982
- [31] H. Siethoff, H.G. Brion, W. Schröter; A regime of the yield point of silicon at high temperatures; Applied Physics Letters; Volume 75, Number 9, S. 1234-1236; August 1999
- [32] K. Sumino, I. Yonenaga, M. Imai, T. Abe; Effects of nitrogen on dislocation behavior and mechanical strength in silicon crystals; Journal of Applied Physics 54 (9), S. 5016-5020, September 1983
- [33] A. Fischer, H. Richter, A. Shalynin, P. Krottenthaler, G. Obermeier, U. Lambert, R. Wahlich; Upper yield point of large diameter silicon; E-MRS 2000
- [34] V. Orlov, H. Richter, A. Fischer, J. Reif, T. Müller, R. Wahlich; Mechanical properties of nitrogen doped silicon single crystals; E-MRS 2002
- [35] B. Leroy, C. Plougonven; Warpage of silicon wafers, Journal of the Electrochemical Society, vol.127, no.4, pp. 961-970, April 1980
- [36] E. Schmid, W. Boas; Kristallplastizität mit besonderer Berücksichtigung der Metalle; Springer Berlin 1935

- [37] L. Méric, P. Poubanne, G. Cailletaud; Single Crystal Modeling for Structural Calculations: Part 1 Model Presentation; Journal of Engineering Materials and Technology, Vol. 113, January 1991
- [38] L. Méric, G. Cailletaud; Single Crystal Modeling for Structural Calculations: Part 2 Finite Element Implementation; Journal of Engineering Materials and Technology, Vol. 113, January 1991
- [39] R. Hull; Properties of crystalline silicon; London, Institution of Electrical Engineers; EMIS Datarewievs Series No. 20; 1999
- [40] Properties of silicon; London, Institution of Electrical Engineers; Datarewievs Series No. 4; 1988
- [41] J. Rösler, H. Harders, M. Bäker; Mechanisches Verhalten der Werkstoffe; Teubner Verlag; Wiesbaden 2003
- [42] W. Schatt; Einführung in die Werkstoffwissenschaft; Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie; Leipzig 1972
- [43] F. Hemberger, K. Krause, V. Drach; ZAE Bayern; Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit von SiC; interner Bericht im Auftrag der Wacker Siltronic AG; 24. Oktober 2003
- [44] A. Kühhorn, G. Silber; Technische Mechanik für Ingenieure, Hüthig, 2000
- [45] H. Schade; Tensoranalysis; de Gruyter Lehrbuch; Berlin, New York, 1997
- [46] P. Hagedorn; Technische Mechanik; Band 2 Festigkeitslehre; Frankfurt a.M.; 1995
- [47] K. H. Trautmann; Voruntersuchungen zur Ermittlung des "upper yield stress" an Si Platten bei Temperaturen von 1000 1300°C; Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Institut für Werkstoff-Forschung; interner Bericht im Auftrag der Siltronic AG; 31.10.2003
- [48] T. Müller, R. Wahlich, P. Krottenthaler, J. Studener, A. Kühhorn, W.v. Ammon; Modeling and experimental verification of the 300mm Ar anneal process; European Material Research Society (E-MRS) Tagung, Spring Symposium D, Straßburg, 2005
- [49] W. Beitz, K.-H. Grote; Dubbel Taschenbuch für den Maschinenbau; 20. Aufl. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York; 2001
- [50] Szabó, I.; Höhere Technische Mechanik; 4. Aufl. Springer Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg; 1964
- [51] Czichos, H.; Hütte Die Grundlagen der Ingenieurwissenschaften, 30. Aufl. Springer Verlag; Berlin, Heidelberg, New York; 1996
- [52] L. Föppl; Der Spannungszustand und die Anstrengung des Werkstoffes bei der Berührung zweier Körper; Forschung auf dem Gebiete des Ingenieurwesens; Bd. 7 Nr. 5, S. 209-221; Berlin, September/Oktober 1936
- [53] K.-J. Schneider; Bautabellen für Ingenieure; 11. Aufl. Werner Verlag; Düsseldorf; 1994
- [54] R. Wendehorst; Bautechnische Zahlentafeln; 27. Aufl. Teubner Verlag; Berlin; 1996
- [55] Hibbit, Karlsson & Sorensen, Inc.; Abaqus Theory Manual; Vers. 5.7
- [56] Hibbit, Karlsson & Sorensen, Inc.; Abaqus/ Standard Users Manual Volume III; Vers. 6.5
- [57] Stephen Wolfram; The Mathematica Book; 4th ed.; Wolfram Media/Cambrige University Press, 1999

- [58] U. Geißler, L. Kiesewetter; Herstellung von Lagerpins mit großem Krümmungsradius; Lehrstuhl Mikrosystemtechnik / BTU Cottbus; interner Bericht; 2003
- [59] D. Leine; Herleitung des Laplace Operators in Kugelkoordinaten; April 2005
- [60] P. Furlan; Das gelbe Rechenbuch 3; Verlag Martina Furlan; Dortmund
- [61] W. Göhler, Formelsammlung Höhere Mathematik; Verlag Harry Deutsch; Frankfurt am Main, 1996
- [62] A. Kühhorn, M. Golze, C. Corte; Quasistationärer Aufheizprozess einer Kreisscheibe; interner Bericht LS Strukturmechanik, BTU Cottbus; 2002
- [63] C. Groth, G. Müller; FEM für Praktiker Band 3: Temperaturfelder; Expert Verlag; Renningen; 1995
- [64] H. Oertel, M. Böhle; Strömungsmechanik; Grundlagen, Grundgleichungen, Lösungsmethoden, Softwarebeispiele; 2. Auflage; Vieweg Verlag; Braunschweig/Wiesbaden; 2002
- [65] H. Oertel; Prantl Führer durch die Strömungslehre; 10. Auflage; Vieweg Verlag; Braunschweig/Wiesbaden; 2001
- [66] R. Siegel, J. R. Howell, J. Lohrengel; Wärmeübertragung durch Strahlung; Teil 1 Grundlagen und Materialeigenschaften; Springer Verlag; Berlin, Heidelberg; 1988
- [67] R. Siegel, J. R. Howell, J. Lohrengel; Wärmeübertragung durch Strahlung; Teil 2 Strahlungsaustausch zwischen Oberflächen und Umhüllungen; Springer Verlag; Berlin, Heidelberg; 1991
- [68] R. Siegel, J. R. Howell, J. Lohrengel; Wärmeübertragung durch Strahlung; Teil 3 Strahlungsübertragung in absorbierenden, emittierenden und streuenden Medien; Springer Verlag; Berlin, Heidelberg; 1993
- [69] VDI Wärmeatlas; Berechnungsblätter für den Wärmeübergang; 8. Auflage; Springer Verlag; Berlin; 1997
- [70] M. F. Modest; Radiative Heat Transfer; McGraw Hill; 1993
- [71] U. Fischer, T. Häusler; Experimentelle Untersuchung des Reflexionsverhaltens an einem Probekörper eines Si Wafers; Interne Arbeit; BTU Cottbus, Institut für Physik und Chemie; 2003
- [72] Fluent Inc.; FLUENT 6.1 Documentation
- [73] W. Roetzel, B. Spang; Manuskript zur Vorlesung Wärmeübertragung; Universität der Bundeswehr Hamburg, Fachbereich Maschinenbau, Institut für Thermodynamik; 5. Auflage; 1997; http://www2.hsu-hh.de/watt/wue/wueman.pdf

Anlage A1: Thermische und mechanische Materialkonstanten von Silizium

isotrope Näherung (nach Reuss):

$$E = 1,596 \cdot 10^5 MPa, v = 0,228$$

9 [°C]	$\lambda [W/m/K]$	c <sub>p</sub> [J/kg/K]	$\alpha_{\rm T} [10^{-6} {\rm K}^{-1}]$
626,5	38,24	922,1	4,185
676,5	36,24	930,5	4,222
726,5	34,39	938,7	4,258
776,5	32,68	946,7	4,290
826,5	31,12	954,5	4,323
876,5	29,70	962,2	4,353
926,5	28,43	969,8	4,384
976,5	27,30	977,2	4,413
1027,0	26,31	984,6	4,442
1076,5	25,47	992,0	4,471
1127,0	24,77	999,2	4,500
1176,5	24,22	1006,0	4,528
1227,0	23,82	1014,0	4,556
1276,5	23,55	1021,0	4,584
1327,0	23,43	1028,0	4,612
1376,5	23,46	1035,0	4,640

Quellen: [39], [40]

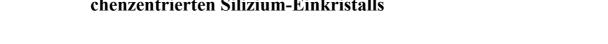
Anlage A2: Thermische und mechanische Materialkonstanten von Siliziumcarbit

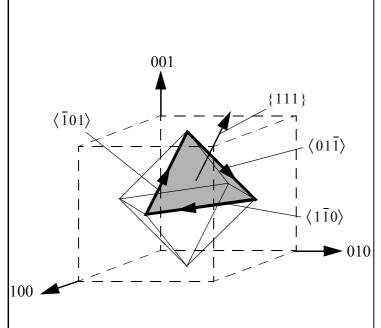
E[MPa]	ν[/]	$\rho \left[ \frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m}^3} \right]$	
$4.5 \times 10^5$	0,22	$3,21 \times 10^3$	

θ [°C]	λ [W/m/K]	θ [°C]	$c_p \left[ \frac{J}{kg \cdot K} \right]$	θ [°C]	$\alpha_{\mathrm{T}} \left[ 10^{-6} \frac{1}{\mathrm{K}} \right]$
503	53,7	500	1261,25	100	3,55
602	46,9	600	1285,92	200	3,72
701	44,7	700	1316,73	300	3,89
800	42,6	800	1353,68	400	4,01
902	42,6	900	1396,77	500	4,14
1001	40,1	1000	1446,00	600	4,24
1100	40,7	1100	1501,37	700	4,34
1200	42,8	1200	1562,88	800	4,42
1300	44,1	1300	1630,53	900	4,48
1399	42,9			1000	4,53

Quellen: [43]

Anlage A3: Gleitsysteme und zugehörige Schubspannungen des kubisch flächenzentrierten Silizium-Einkristalls



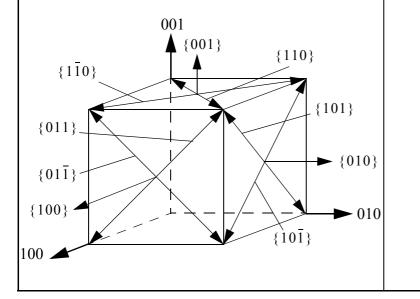


Oktaederschubspannungen:

$$\begin{array}{c} {}_{1}^{o}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) - \tau_{yx} + \tau_{yz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) - \tau_{xz} + \tau_{xy}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) - \tau_{zy} + \tau_{zx}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) - \tau_{yx} - \tau_{yz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) + \tau_{xz} + \tau_{xy}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zx}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) + \tau_{yx} + \tau_{yz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) + \tau_{xz} - \tau_{xy}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) + \tau_{yx} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) + \tau_{yx} - \tau_{yz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}) + \tau_{yx} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) - \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac{1}{\sqrt{6}}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) + \tau_{zy} - \tau_{zz}] \\ {}_{0}^{o}\tau_{3}^{R} = \frac$$

kubische Gleitsysteme:

Oktaedergleitsysteme:



kubische Schubspannungen:

$$k_{1}^{R} \tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{xy} + \tau_{xz})$$

$$k_{1}^{R} \tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{xy} - \tau_{xz})$$

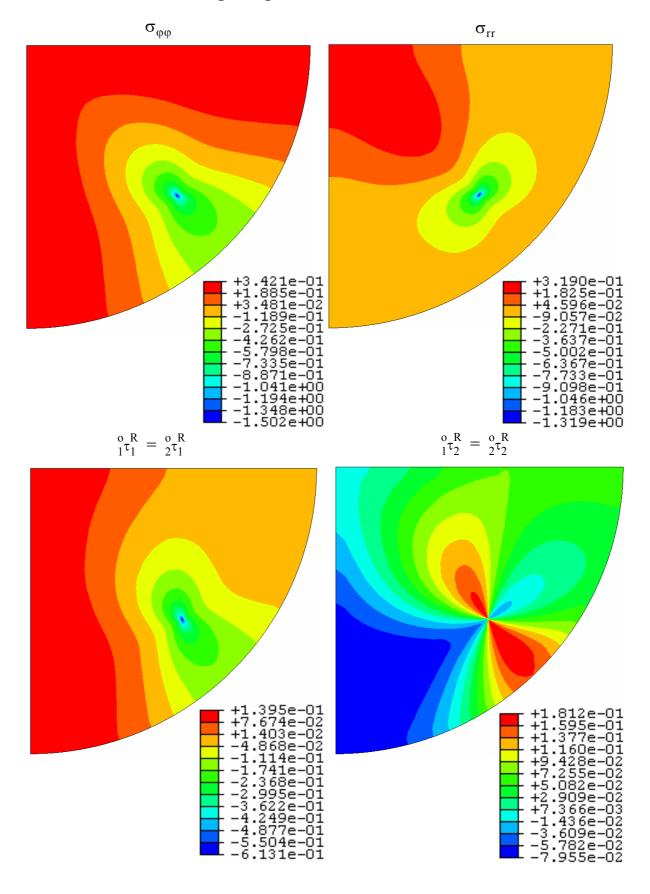
$$k_{2}^{R} \tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{yx} + \tau_{yz})$$

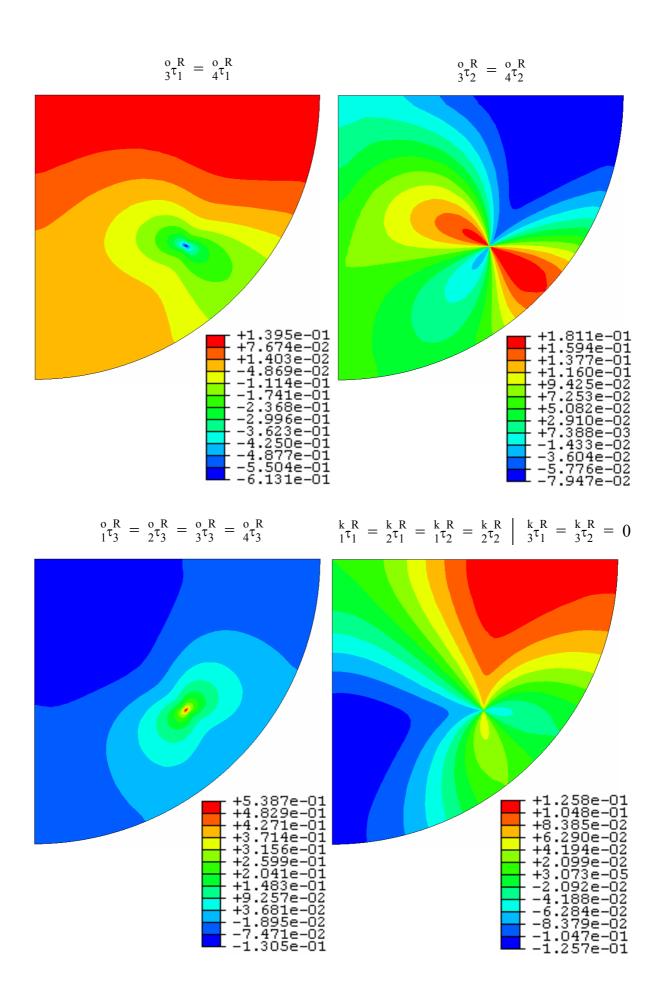
$$k_{2}^{R} \tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{yx} - \tau_{yz})$$

$$k_{3}^{R} \tau_{1}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{zx} + \tau_{zy})$$

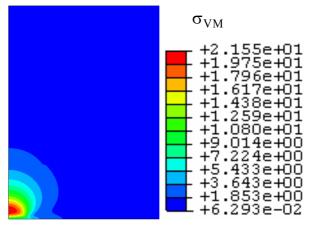
$$k_{3}^{R} \tau_{2}^{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tau_{zx} - \tau_{zy})$$

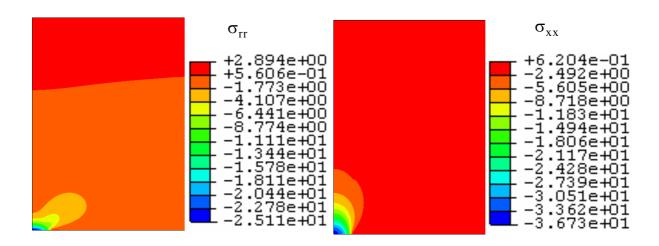
Anlage A4: Biegespannungen auf der Waferunterseite infolge Eigengewicht bei 4-Punktlagerung

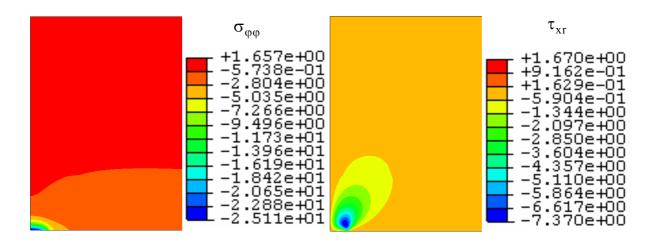


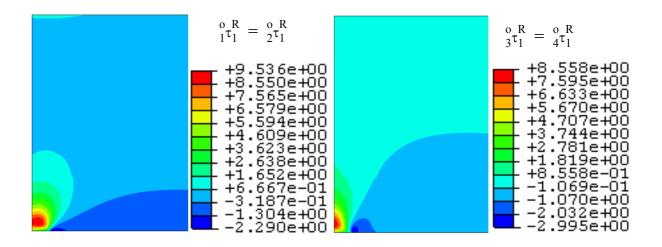


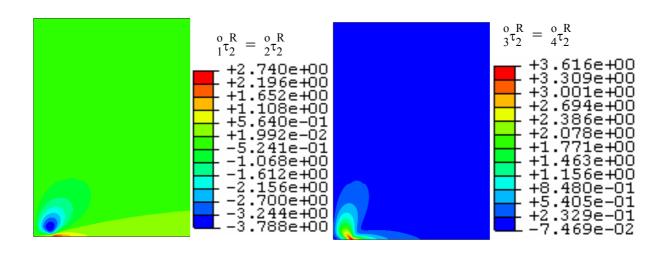
Anlage A5: Kontaktspannungen aus FE-Berechnungen Anlage A5.1: r = 100 mm

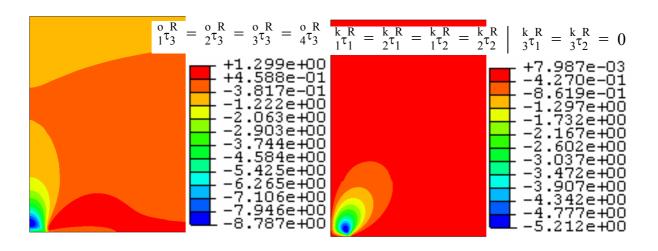




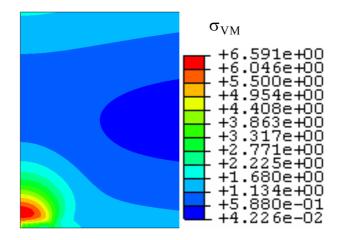


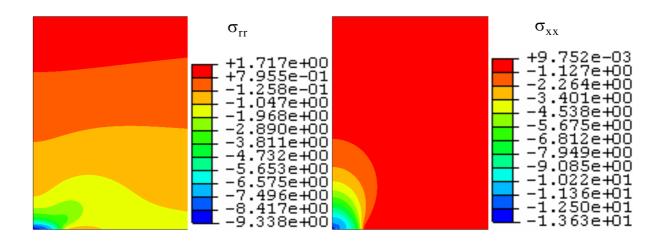


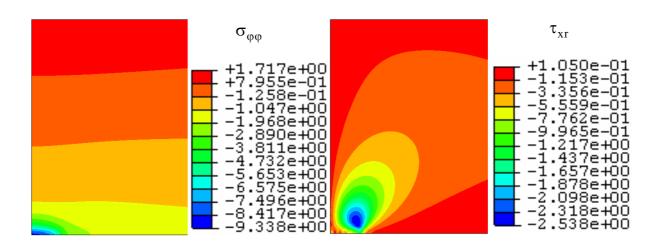


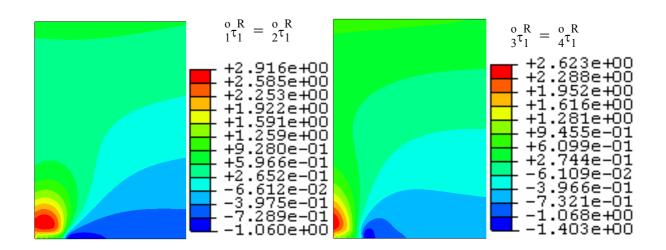


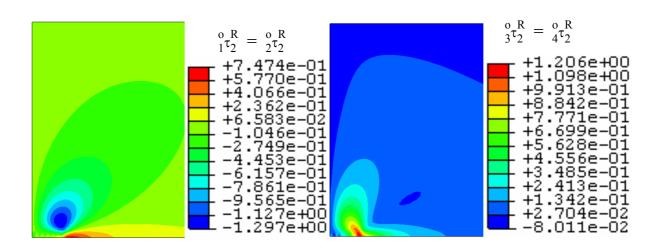
Anlage A5.2: r = 500 mm

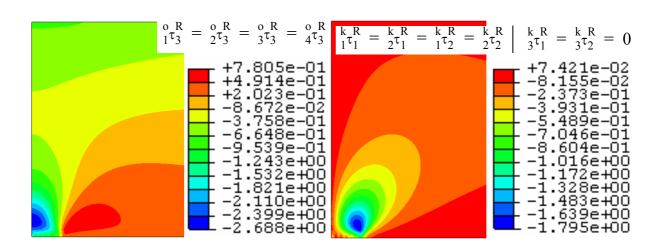




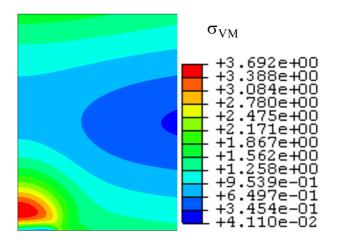


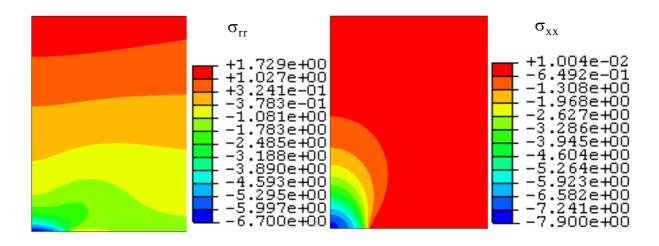


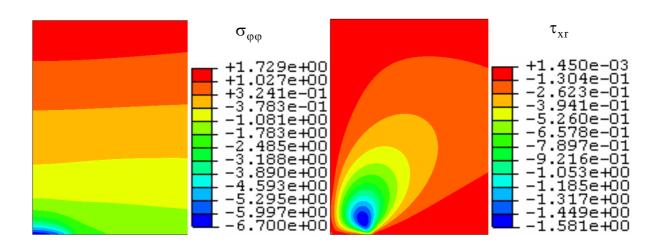


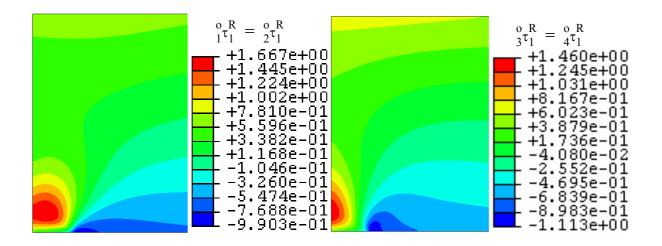


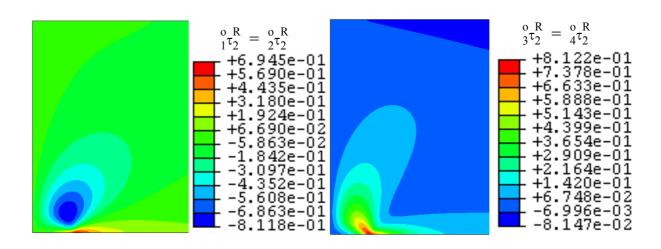
Anlage A5.3: r = 1000 mm

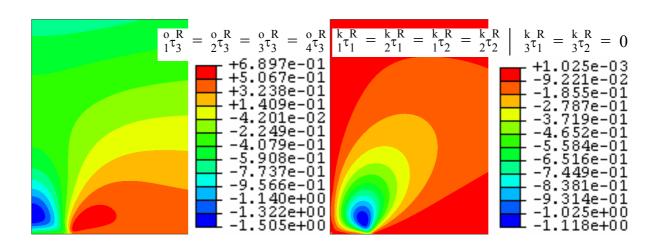




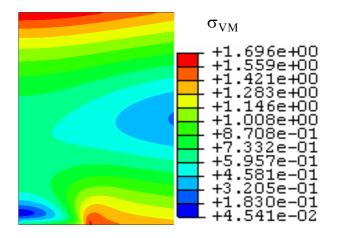


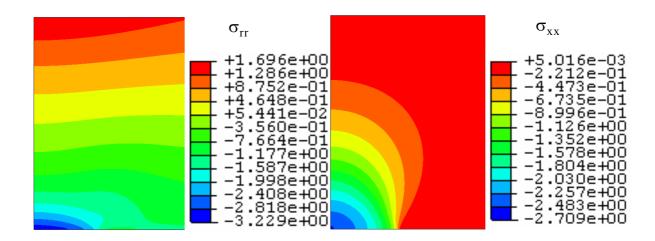


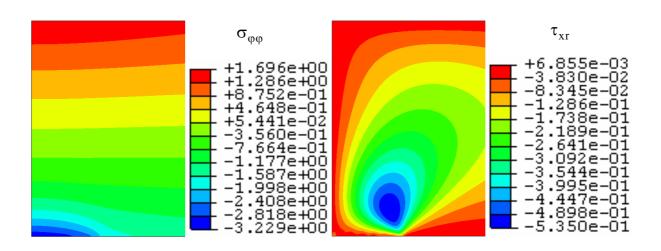


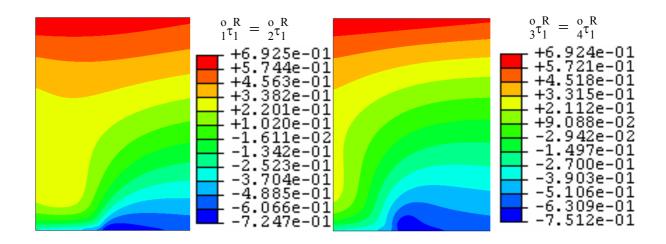


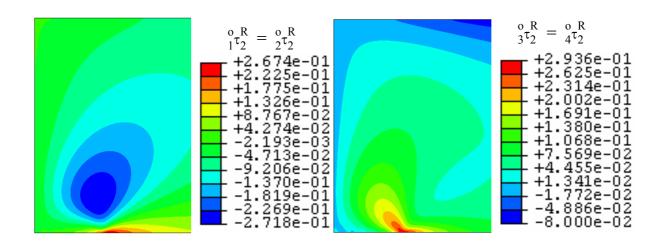
Anlage A5.4: r = 5000 mm

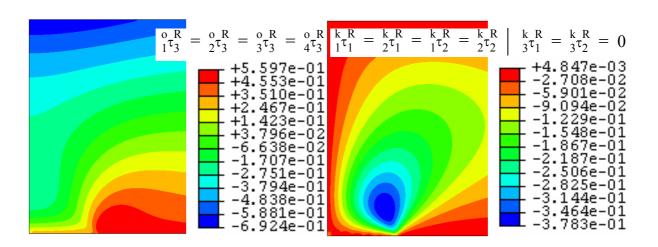












Anlage A5.5: Zusammenfassung maximaler/minimaler Kristallschubspannungen der Gleitsysteme

r = 100mm:

C	$r_j^R$		j	
[MPa]		1	2	3
	1	9,536	-3,788	-8,787
i	2	9,536	-3,788	-8,787
	3	8,558	3,616	-8,787
	4	8,558	3,616	-8,787

$$_{1}^{k}\tau_{1}^{R} = _{2}^{k}\tau_{1}^{R} = _{1}^{k}\tau_{2}^{R} = _{2}^{k}\tau_{2}^{R} = -5,212 \text{ MPa}$$

r = 500mm:

C	R i <sup>t</sup> j		j	
	/IPa]	1	2	3
	1	2,916	-1,297	-2,688
i	2	2,916	-1,297	-2,688
	3	2,623	1,206	-2,688
	4	2,623	1,206	-2,688

$$_{1}^{k}\tau_{1}^{R} = _{2}^{k}\tau_{1}^{R} = _{1}^{k}\tau_{2}^{R} = _{2}^{k}\tau_{2}^{R} = -1,795 \text{ MPa}$$

r = 1000mm:

C	R i <sup>τ</sup> j		j	
	/Pa]	1	2	3
	1	1,667	-0,812	-1,505
i	2	1,667	-0,812	-1,505
	3	1,460	0,812	-1,505
	4	1,460	0,812	-1,505

$$_{1}^{k}\tau_{1}^{R} = _{2}^{k}\tau_{1}^{R} = _{1}^{k}\tau_{2}^{R} = _{2}^{k}\tau_{2}^{R} = -1,118 \text{ MPa}$$

## r = 5000mm:

C	R i <sup>t</sup> j		j	
[MPa]		1	2	3
	1	-0,725	-0,271	-0,6924
i	2	-0,725	-0,271	-0,6924
	3	-0,751	0,294	-0,6924
	4	-0,751	0,294	-0,6924

$$_{1}^{k}\tau_{1}^{R} = _{2}^{k}\tau_{1}^{R} = _{1}^{k}\tau_{2}^{R} = _{2}^{k}\tau_{2}^{R} = -0,378 \text{ MPa}$$

## r = 10000mm:

C	$r_j^R$		j	
	IPa]	1	2	3
	1	-0,658	-0,169	0,5431
i	2	-0,658	-0,169	0,5431
	3	-0,677	0,1824	0,5431
	4	-0,677	0,1824	0,5431

$$_{1}^{k}\tau_{1}^{R} = _{2}^{k}\tau_{1}^{R} = _{1}^{k}\tau_{2}^{R} = _{2}^{k}\tau_{2}^{R} = -0,239 \text{ MPa}$$

### Anlage A6: Herleitungen zum analytischen Kreisscheibenproblem

### Anlage A6.1: Lösung der Wärmebilanzgleichung

Die Gleichung:

$$T'' + \frac{1}{r} \cdot T' = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{\lambda} \tag{A.1}$$

läßt sich in eine Eulersche DGL der allgemeinen Form:

$$c_n x^n y^{(n)} + c_{n-1} x^{n-1} y^{(n-1)} + \dots + c_2 x^2 y'' + c_1 x y' + c_0 y = f(x)$$
 (A.2)

mit:

$$T' = y \text{ und } r = x \tag{A.3}$$

überführen und lautet:

$$y' + \frac{1}{r} \cdot y = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{\lambda} \tag{A.4}$$

Diese wird nach der Methode der direkten Ansätzen (Siehe [60] und [61]) gelöst.

$$y = x^{\lambda} \text{ und } y' = \lambda \cdot x^{\lambda - 1}$$
 (A.5)

wird in die homogene DGL eingesetzt:  $\lambda \cdot x \cdot x^{\lambda-1} + x^{\lambda} = 0$ 

$$\lambda \cdot \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}^{\lambda - 1} + \mathbf{x}^{\lambda} = 0 \tag{A.6}$$

Das charakteristische Polynom lautet:

$$x^{\lambda}(\lambda + 1) = 0 \tag{A.7}$$

Mit der Nullstelle:

$$\lambda = -1 \tag{A.8}$$

Die homogene Lösung lautet mit  $x^{\lambda}$ :

$$y^{h}(x) = C_{1} \frac{1}{x}$$
 (A.9)

Der Resonanzfaktor k gibt an, wie oft der Exponent μ als Nullstelle λ des Polynoms (Gleichung (A.7)) vorkommt. Mit der allgemeinen Form der rechten Seite:  $x^\alpha \Rightarrow \mu = \alpha \Rightarrow \mu = 1$ 

$$\mathbf{x}^{\bar{\alpha}} \Rightarrow \mathbf{\mu} = \mathbf{\alpha} \Rightarrow \mathbf{\mu} = 1 \tag{A.10}$$

ergibt sich:

$$k = 0 (A.11)$$

Daraus folgt nach [60] der allgemeine Ansatz:

$$y = C \cdot x \tag{A.12}$$

eingesetzt in die DGL wird:

$$C \cdot x + C \cdot x \stackrel{!}{=} \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{\lambda} \tag{A.13}$$

und somit:

$$C = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{2\lambda} \tag{A.14}$$

Die partikuläre Lösung lautet schließlich:

$$y^{p}(x) = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{2\lambda} \cdot x \tag{A.15}$$

Sowie die allgemeine Lösung:

$$y(x) = y^{h}(x) + y^{p}(x) = C_{1}\frac{1}{x} + \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{2\lambda} \cdot x$$
 (A.16)

Über direkte Integration von y:

$$T(r) = \int y(x)dx \tag{A.17}$$

erhält man schließlich die Lösung für T(r):

$$T(r) = C_2 + C_1 \ln(r) + \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{4\lambda} \cdot r^2$$
 (A.18)

#### Anlage A6.2: Lösung der Lamé-Navier'schen Gleichung der Scheibentheorie

Nach der Lamé-Navier'schen Gleichung der Scheibentheorie gilt:

$$\Delta \mathbf{u} + \frac{(1+v)}{(1-v)} \cdot \operatorname{graddiv} \mathbf{u} = 2 \cdot \frac{(1+v)}{(1-v)} \cdot \alpha_{\mathrm{T}} \cdot \operatorname{gradT}$$
 (3.250)

mit den Komponenten des Verschiebungsvektors für das vorgegebene rotationssymmetrische Problem:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_r \neq 0 \\ u_{\varphi} = 0 \end{bmatrix}_{\langle \mathbf{e}_i \rangle} = u_r \mathbf{e}_r \tag{A.19}$$

Es gilt für Polarkoordinaten:

$$\frac{\partial \mathbf{e}_{r}}{\partial r} = 0; \frac{\partial \mathbf{e}_{r}}{\partial \varphi} = \mathbf{e}_{\varphi}; \frac{\partial \mathbf{e}_{\varphi}}{\partial r} = 0; \frac{\partial \mathbf{e}_{\varphi}}{\partial \varphi} = -\mathbf{e}_{r}$$
(A.20)

woraus die speziellen Darstellungen folgen für:

$$\Delta \mathbf{u} = \mathbf{e}_{r} \left( \frac{\partial^{2} \mathbf{u}_{r}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}_{r}}{\partial r} - \frac{1}{r^{2}} \cdot \mathbf{u}_{r} \right)$$
 (A.21)

graddiv**u** = 
$$\mathbf{e}_{r} \left( \frac{\partial^{2} \mathbf{u}_{r}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}_{r}}{\partial r} - \frac{1}{r^{2}} \cdot \mathbf{u}_{r} \right)$$
 (A.22)

$$gradT = \mathbf{e}_{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r}$$
 (A.23)

Gilt für  $\frac{\partial}{\partial r} = (\ )'$ , so folgt die Verschiebungsdifferentialgleichung in verkürzter Form:

$$u'' + \frac{1}{r}u' - \frac{1}{r^2}u = (1 + v) \cdot \alpha_T \cdot T'$$
 (A.24)

Mit

$$T' = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{c \cdot \rho \cdot \dot{T}}{2\lambda} \cdot r = 2 \cdot \Delta T \cdot \frac{r}{R^2}$$
 (A.25)

wird die DGL zu:

$$\mathbf{u''} + \frac{1}{r}\mathbf{u'} - \frac{1}{r^2}\mathbf{u} = (1 + \mathbf{v}) \cdot \alpha_{\mathrm{T}} \cdot 2 \cdot \Delta \mathbf{T} \cdot \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{R}^2}$$
 (A.26)

Diese läßt sich in eine Euler'sche Differentialgleichung überführen:

$$r^{2} \cdot u'' + r \cdot u' - u = (1 + \nu) \cdot \alpha_{T} \cdot 2 \cdot \Delta T \cdot \frac{r^{3}}{R^{2}}$$
(A.27)

Zur Berechnung der homogenen Lösung wird das charakteristische Polynom gebildet.

Mit dem Ansatz  $u = r^{\lambda}$ ,  $u' = \lambda \cdot r^{\lambda - 1}$  sowie  $u'' = \lambda(\lambda - 1) \cdot r^{\lambda - 2}$  ergibt sich:

$$r^{2} \cdot \lambda(\lambda - 1) \cdot r^{\lambda - 2} + r \cdot \lambda \cdot r^{\lambda - 1} - r^{\lambda} = 0$$
 (A.28)

Die Nullstellen lauten:

$$\lambda_{1/2} = \pm 1 \tag{A.29}$$

Die Elemente des Fundamentalsystems lauten:

$$C_1 \cdot r \text{ und } C_2 \cdot \frac{1}{r}$$
 (A.30)

Die homogene Lösung ergibt:

$$u^{h}(r) = C_1 \cdot r + C_2 \cdot \frac{1}{r}$$
 (A.31)

Der Exponent der Störfunktion ist  $\mu=3$  und somit der Resonanzfaktor k=0. Der Ansatz für die partikuläre Lösung wird damit zu:

$$u(r) = C \cdot r^3 \tag{A.32}$$

mit den Ableitungen:

$$u'(r) = 3C \cdot r^2 \text{ und } u''(r) = 6C \cdot r \tag{A.33}$$

In die Differentialgleichung eingesetzt ergibt sich:

$$r^{2} \cdot 6C \cdot r + r \cdot 3C \cdot r^{2} - C \cdot r^{3} = (1 + \nu) \cdot \alpha_{T} \cdot 2 \cdot \Delta T \cdot \frac{r^{3}}{R^{2}}$$
(A.34)

Die Konstante C wird durch Umstellen der Gleichung (A.34) zu:

$$C = (1 + v) \cdot \alpha_{T} \cdot \frac{\Delta T}{4R^{2}}$$
 (A.35)

Die partikuläre Lösung lautet:

$$u^{p}(r) = (1 + v) \cdot \alpha_{T} \cdot \frac{\Delta T}{4R^{2}} \cdot r^{3}$$
(A.36)

Die Gesamtlösung wird zu:

$$u(r) = u^{h}(r) + u^{p}(r) = C_{1} \cdot r + C_{2} \cdot \frac{1}{r} + (1 + v) \cdot \alpha_{T} \cdot \frac{\Delta T}{4R^{2}} \cdot r^{3}$$
 (A.37)

### Anlage A6.3: Bestimmung des Verzerrungstensors aus dem Verschiebungsfeld

Der Verzerrungstensor ergibt sich aus dem Verschiebungsfeld nach folgender Gleichung:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\operatorname{grad}\mathbf{u} + \operatorname{grad}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}) \tag{A.38}$$

mit:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_{i} \mathbf{e}_{i} \text{ und } i = \mathbf{r}, \mathbf{\varphi} \tag{A.39}$$

sowie:

$$\operatorname{grad} \mathbf{u} = \nabla \mathbf{u} \text{ und } \operatorname{grad}^{\mathrm{T}} \mathbf{u} = \mathbf{u} \nabla$$
 (A.40)

Der Nablaoperator wird in Polarkoordinaten dargestellt:

$$\nabla = \mathbf{e}_{r} \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_{\phi} \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \phi}$$
 (A.41)

Der Gradient des Verschiebungsfeldes lautet:

$$\operatorname{grad} \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_{r}}{\partial r} & \frac{\partial u_{\phi}}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial u_{r}}{\partial \varphi} - \frac{u_{\phi}}{r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_{\phi}}{\partial \varphi} + \frac{u_{r}}{r} \end{bmatrix}$$
(A.42)

Mit Gleichung (A.38) lautet der Verzerrungstensor:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{u}_{r}}{\partial \mathbf{r}} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \mathbf{u}_{\phi}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}_{r}}{\partial \phi} - \frac{\mathbf{u}_{\phi}}{\mathbf{r}} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \mathbf{u}_{\phi}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}_{r}}{\partial \phi} - \frac{\mathbf{u}_{\phi}}{\mathbf{r}} \right) & \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}_{\phi}}{\partial \phi} + \frac{\mathbf{u}_{r}}{\mathbf{r}} \end{bmatrix}$$
(A.43)

Für das berechnete Verschiebungsfeld gilt unter Beachtung der Rotationssymmetrie weiterhin:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_r \neq 0 \\ u_{\varphi} = 0 \end{bmatrix}_{\langle \mathbf{e}_i \rangle}, \text{ sowie } \frac{\partial}{\partial \varphi} = 0$$
 (A.44)

und somit:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{u_r}}{\partial \mathbf{r}} & 0 \\ 0 & \frac{\mathbf{u_r}}{\mathbf{r}} \end{bmatrix}$$
 (A.45)

# Anlage A6.4: Anpassung der der Lamé-Navier'schen Gleichung der Scheibentheorie an die Randbedingung $\sigma_{rr}(r=R)=0$

Nach dem Hooke'schen Gesetz für isotropes Material und dem ebenen Spannungszustand (in Polarkoordinaten) gilt:

$$\sigma_{rr} = \frac{E}{(1 - v^2)} (\varepsilon_{rr} + v \cdot \varepsilon_{\phi\phi} - (1 + v) \cdot \alpha_T \cdot (T(r) - T_0))$$
 (A.46)

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{E}{(1 - v^2)} (\varepsilon_{\varphi\varphi} + v \cdot \varepsilon_{rr} - (1 + v) \cdot \alpha_T \cdot (T(r) - T_0))$$
 (A.47)

$$\sigma_{r\phi} = \frac{E}{1+v} \varepsilon_{r\phi} \tag{A.48}$$

 $T_0$  wird als Starttemperatur zu Beginn des Aufheizprozesses definiert. Für die Komponenten des Verzerrungstensors  $\epsilon_{rr}$ ,  $\epsilon_{\phi\phi}$  und  $\epsilon_{r\phi}$  gelten die Beziehungen nach Gleichung (3.133):

$$\varepsilon_{\rm rr} = \frac{\partial u_{\rm r}}{\partial r} = C_1 + 3(1 + \nu) \cdot \alpha_{\rm T} \cdot \frac{\Delta T}{4R^2} \cdot r^2 \tag{A.49}$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{\mathbf{u}_{r}}{r} = C_{1} + (1 + \mathbf{v}) \cdot \alpha_{T} \cdot \frac{\Delta T}{4R^{2}} \cdot r^{2}$$
(A.50)

$$\varepsilon_{r\phi} = 0 \tag{A.51}$$

 $\epsilon_{r\phi} = 0 \label{eq:epsilon}$  Somit folgt für die 2. Randbedingung  $\sigma_{rr}(r=R) = 0$  :

$$\frac{E}{1-\nu} \left( C_1 + 3(1+\nu) \cdot \alpha_T \cdot \frac{\Delta T}{4R^2} \cdot r^2 + \dots \right) \tag{A.52}$$

... + 
$$\nu \left( C_1 + (1 + \nu) \cdot \alpha_T \cdot \frac{\Delta T}{4R^2} \cdot r^2 \right) - (1 + \nu) \cdot \alpha_T \cdot (T(r) - T_0) = 0$$
 (A.52)

nach Umstellung:

$$C_1 = \alpha_T \left( (T(r) - T_0) - \frac{(3+\nu)}{4} \Delta T \right)$$
 (A.53)

### Anlage A7: Berechnungsgrößen für Konvektionsströmung

## Anlage A7.1: Wärmeübergang infolge freier Konvektion und Leitung in einer geschlossenen Schicht

Der Wärmeübergang q infolge Wärmeleitung in Konvektion in einer geschlossenen Fluidschicht wird nach folgender Gleichung berechnet:

$$q = \alpha \cdot \Delta T \tag{A.54}$$

α Wärmeübergangskoeffizient

ΔT Temperaturdifferenz der benachbarten Wände

Als Unbekannte ist der Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha$  zu bestimmen. In der Strömungsmechanik ist die Behandlung mittels dimensionsloser Kennzahlen üblich (Siehe [64] und [65]). Im ersten Schritt muß festgestellt werden, ob es sich tatsächlich um eine laminare und nicht turbulente Strömung handelt. Als Abgrenzungskriterium zur Turbulenz dient die dimensionslose Rayleigh-Zahl:

$$Ra = Gr \cdot Pr \tag{A.55}$$

Gr Grashof-Zahl Pr Prandtl-Zahl

Nach [69] handelt es sich um eine laminare Strömung für:

$$Ra < 10^7$$
 (A.56)

mit der Grashof- Zahl:

$$Gr = \frac{g \cdot s^3 \cdot \beta \cdot \Delta T}{v^2}$$
 (A.57)

s Schichtdicke

β thermischer Ausdehnungskoeffizient

v [m<sup>2</sup>/s] kinematische Viskosität

g Erdbeschleunigung

Die Linearisierung des Ausdehnungsverhaltens des Gases ermöglicht die Einführung eines thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Für ideale Gase gilt bei konstantem Druck:

$$\beta = \frac{1}{T[K]} \tag{A.58}$$

Zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$  aus Gleichung (A.54) dient der mittlere dimensionslose Wärmeübergangskoeffizient Nu:

$$Nu = \frac{\alpha \cdot s}{\lambda} \tag{A.59}$$

Die Nusselt-Zahl ist als Funktion der Rayleigh-Zahl darstellbar:

$$Nu = f(Ra) (A.60)$$

## Anlage A7.2: Modellparameter für das analytische Zahlenbeispiel eines vertikalen Ringspaltes

Die charakteristische Länge s für Gleichung (A.59) ist nach [69] für Ringspalte:

$$s = \sqrt{r_a r_i} \ln \frac{r_a}{r_i}$$
 (A.61)

r<sub>a</sub> Außenradius des Ringspaltesr<sub>i</sub> Innenradius des Ringspaltes

Die Nusselt-Zahl kann aus der Literatur [69] für das gegebene Problem nach folgender Gleichung berechnet werden:

$$Nu = \frac{C_1 Ra\left(\frac{h}{s}\right)^2}{C_2 \left(\frac{h}{r_s}\right)^4 \left(\frac{r_i}{h}\right) + \left[Ra\left(\frac{h}{s}\right)^3\right]^{n_1} \left(\frac{r_i}{h}\right)^{n_2}}$$
(A.62)

Die Größe N nach Gleichung (A.63),

$$N = \left[Ra\left(\frac{h}{s}\right)^{3}\right]^{-0.25} \left(\frac{h}{r_{i}}\right) \tag{A.63}$$

liefert die Faktoren  $C_1$ ,  $C_2$  und die Exponenten  $n_1$  und  $n_2$  nach [69] aus folgender Tabelle:

	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	$n_1$	$n_2$
N < 0,2	0,48	854	0,75	0
0,2 < N < 1,48	0,93	1646	0,84	0,36
1,48 < N	0,49	862	0,95	0,80

### Anlage A8: Ergebnisse der CFD-Berechnung für freie Konvektion im Ofen

#### Anlage A8.1: Auswahl der Grundgleichungen

Ausgehend von der Annahme, daß die zeitliche Änderung der Masse eines infinitesimalen Volumenelements genau der Masse der einströmenden abzüglich der ausströmenden Massenströme entspricht, lautet die Grundgleichung für die Massenerhaltung für ein inkompressibles Fluid (Siehe [64] und [65]):

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{A.64}$$

Die Navier-Stokes Gleichung für laminare Strömungen beinhaltet die Impulserhaltung in einem infinitesimalen Volumenelement. Die Gleichung setzt sich zusammen aus den Beschleunigungskräften (linke Seite der Gleichung), den von außen einwirkenden Kräften  $\boldsymbol{F}$ , den Druckkräften  $\nabla p$  und den Reibungskräften  $\eta \Delta \boldsymbol{v}$ :

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = \mathbf{F} - \nabla p + \eta \Delta \mathbf{v}$$
 (A.65)

Für die Energiegleichung eines idealen Gases und laminarer Strömung gilt in einem Volumenelement: Die zeitliche Änderung der Energie entspricht der Summe aus den ein- und ausströmenden Energieströmen, den Wärmeleitungsenergieströmen, der von außen eingetragenen Energie und der durch Spannungs- und Volumenkräften geleisteten Arbeit je Zeit:

$$\rho c_{p} \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{dp}{dt} + \eta \Phi$$
 (A.66)

**F** Volumenkraftvektor

V Geschwindigkeitsvektor

λ Wärmeleitfähigkeit

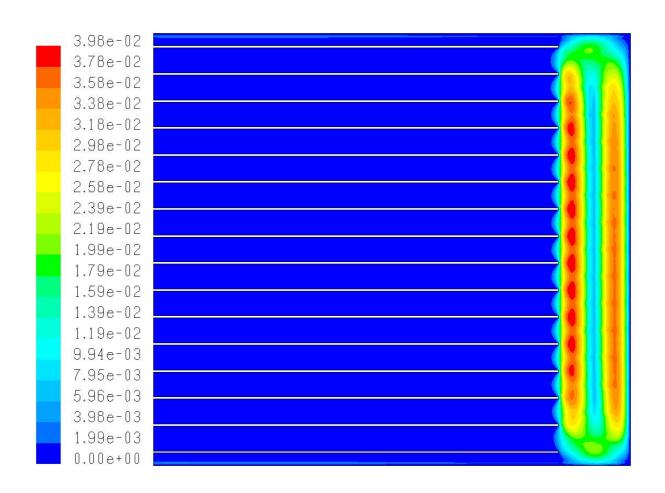
c<sub>p</sub> spezifische Wärmekapazität

p Gasdruck

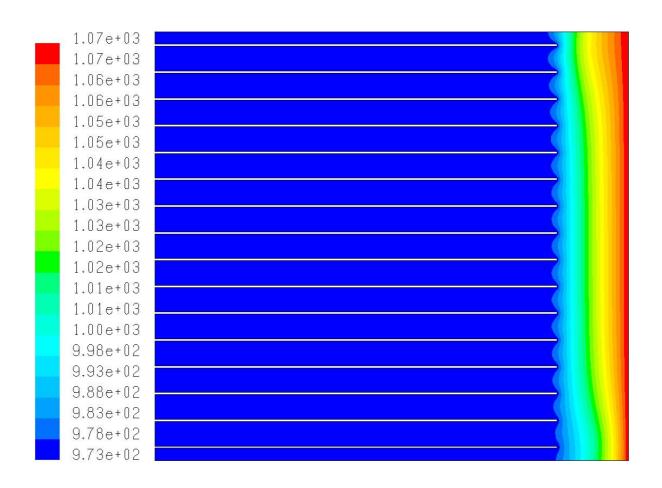
η dynamische Viskosität

Φ Dissipations funktion

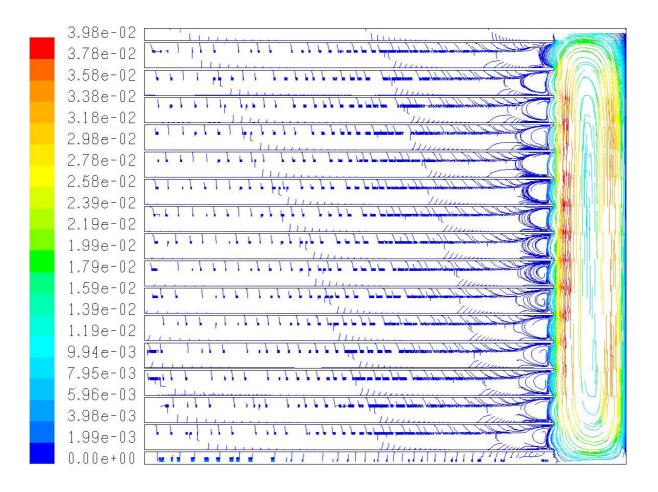
Anlage A8.2: Magnitude der Geschwindigkeitsverteilung im Ofen



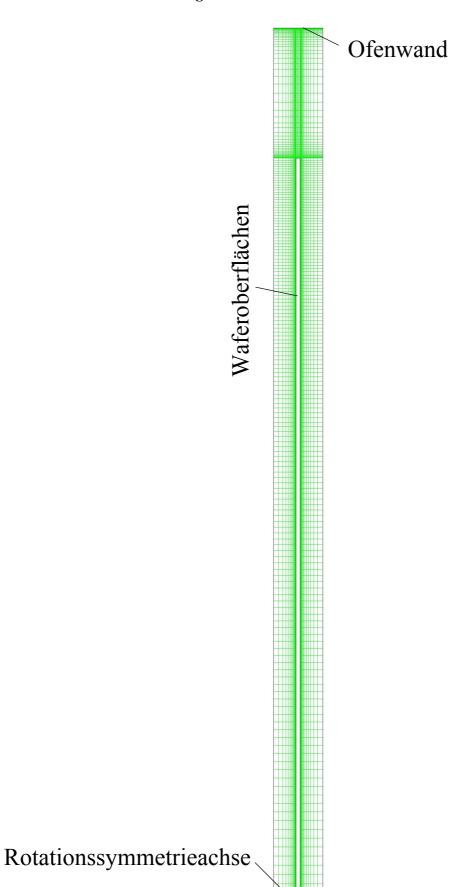
Anlage A8.3: Temperaturverteilung im Ofen



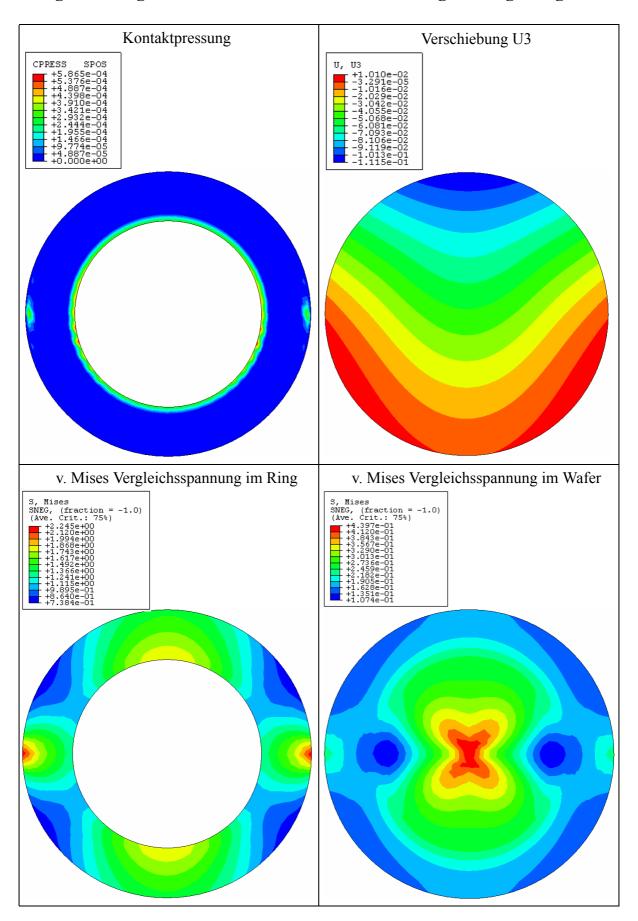
Anlage A8.4: Strömungslinien im Ofen



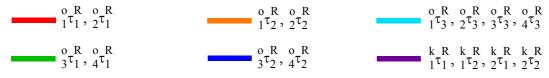
Anlage A8.5: detaillierte Darstellung des Netzes eines Sektors



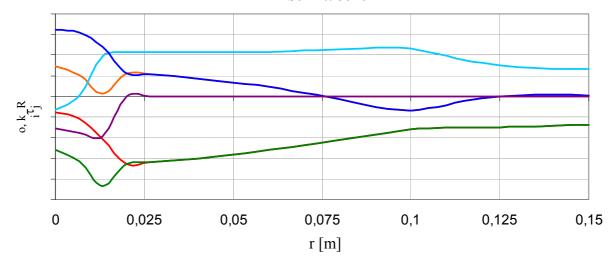
Anlage A9: Ergebnisse der FEM-Kontaktberechnung mit Lagerring



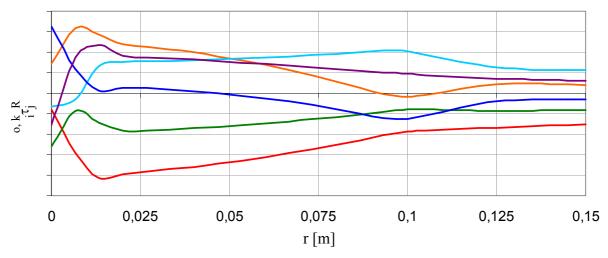
#### Anlage A9.1: Kristallschubspannungen



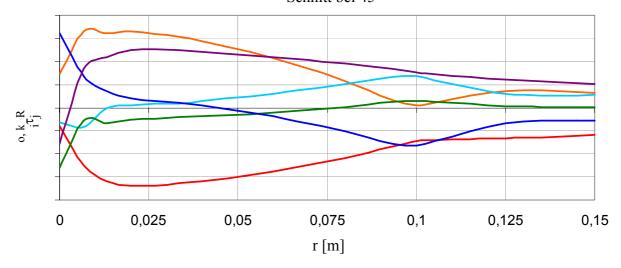
#### Schnitt bei 0°

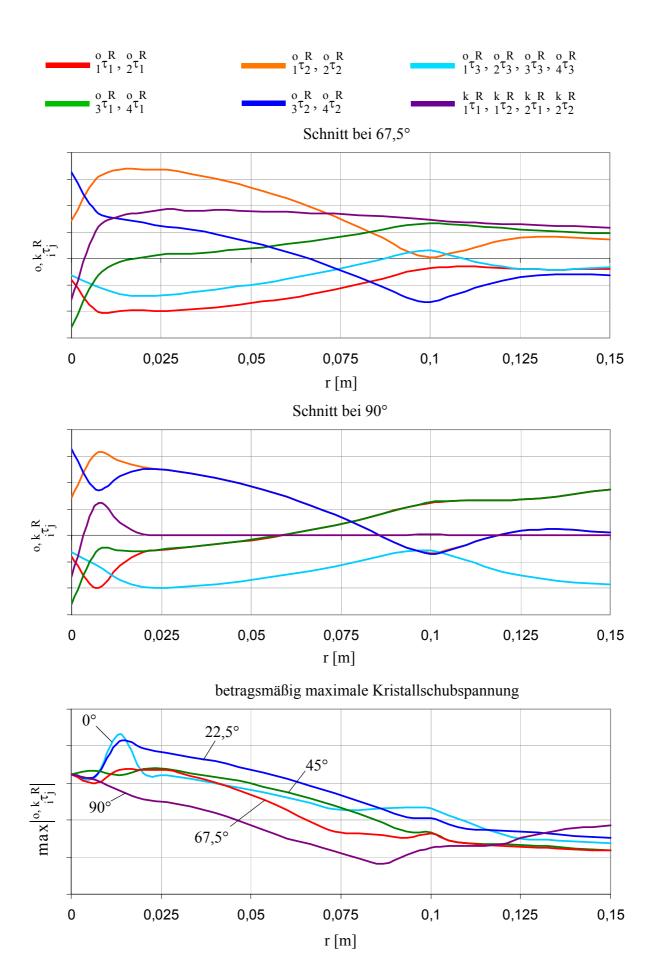


### Schnitt bei 22,5°

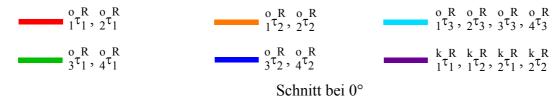


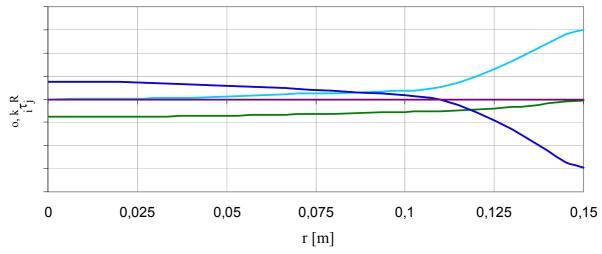
#### Schnitt bei 45°



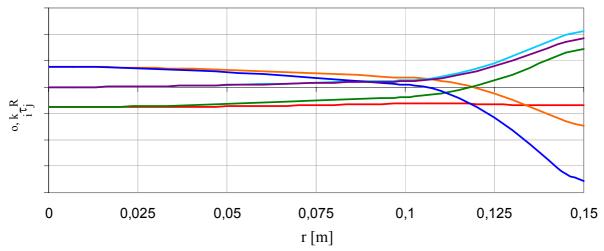


## Anlage A10: Wärmespannungen aus der FE - Aufheizsimulation





## Schnitt bei 22,5°



#### Schnitt bei 45°

