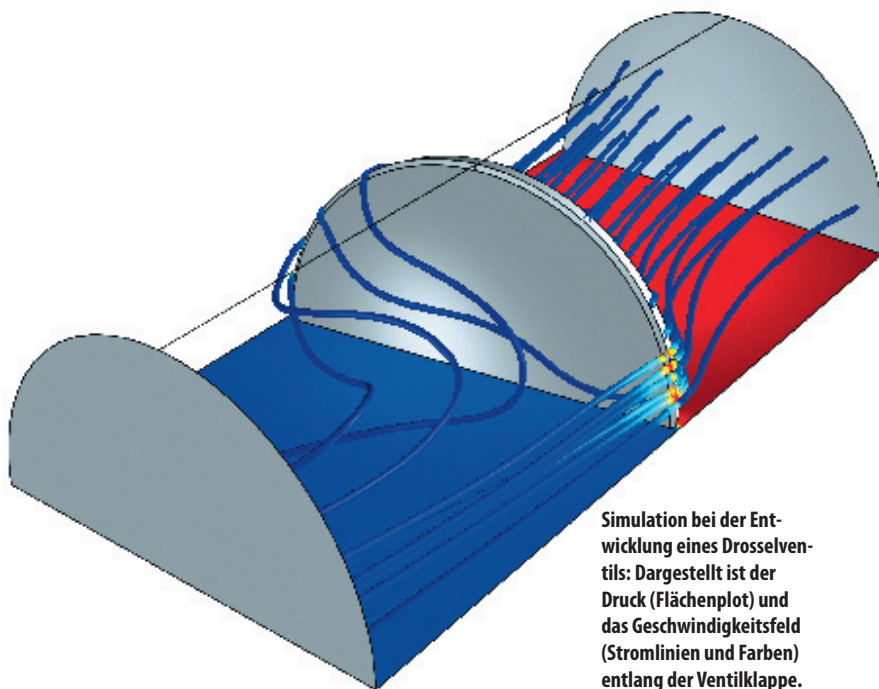


Physikalische Prozesse einfach veranschaulichen

Optimale Entwicklung von Druckanstiegsmessgerät und Drosselventil durch Simulation

In der Advanced Technology Group des amerikanischen Unternehmens MKS Instruments ist die Modellierung mit Comsol Multiphysics ein entscheidender Bestandteil des Designprozesses geworden. Durch den Einsatz dieser vielseitigen und leistungsfähigen Simulationssoftware konnte die Entwicklung neuer Produkte – etwa eines hochmodernen Druckanstiegsmessgeräts und eines Drosselventils für chemische Bedampfungsprozesse deutlich beschleunigt werden.

■ Bernhard Fluche



Simulation bei der Entwicklung eines Drosselventils: Dargestellt ist der Druck (Flächenplot) und das Geschwindigkeitsfeld (Stromlinien und Farben) entlang der Ventilklappe.



Dr. Bernhard Fluche
ist Geschäftsführer der Femlab GmbH
in Göttingen

T +49/551/99721-0
info@femlab.de

Bei der Entwicklung von neuen Produkten und Verfahren besteht der erste Schritt immer darin, ein zugrunde liegendes Konzept aufzustellen und zu optimieren. Indem die Aufgabenstellung mithilfe einer Simulationssoftware auf ein eindimensionales Modell zurückgeführt wird, kann man sich leicht mit den physikalischen Phänomenen eines Prozesses vertraut machen. Comsol Multiphysics bietet als attraktives Feature die Möglichkeit zur Berechnung von mehrdimensionalen Problemen. Das Modell wird ausgehend von 1D später zu einem 2D- oder 3D-Modell

erweitert, sodass der Zeitaufwand für Fehlersuche oder -beseitigung hier praktisch entfällt. Die Femlab GmbH ist der offizielle Distributor für Comsol Multiphysics in Deutschland und Österreich. Bei der Modellierung eines modernen Druckanstiegsmessgeräts erwies sich dieses Verfahren als überaus hilfreich. Druckanstiegsgeräte werden vor allem bei der Fertigung von Halbleitern eingesetzt und messen die Geschwindigkeit der Druckänderung in einem festen Volumen. Anhand dieser Größe kann dann die Geschwindigkeit des Massenstroms in das Volumen bestimmt werden.



Der Anwender

Über MKS Instruments

MKS Instruments Inc mit Geschäftssitz in Wilmington ist ein führender Anbieter von Technologien für die Steuerung komplexer Fertigungsprozesse. Die Produkte und Lösungen des Unternehmens werden unter anderem in der Halbleiterindustrie, bei der Herstellung von TFT-Displays, optischen Speichermedien, Ornamentgläsern und elektrooptischen Erzeugnissen sowie in der medizinischen Bildverarbeitung eingesetzt. Dank hoch entwickelter Technologien für die Messung, Steuerung und Überwachung der Fertigung unter Verwendung von Gasen steigern die Instrumente, Komponenten und Subsysteme von MKS Instruments die Ausfallsicherheit, den Ertrag und den Durchsatz und tragen so zu einer erhöhten Produktivität und Investitionsrentabilität für den Kunden bei.

Ein neues Produkt der MKS Instruments, der pi-MFV (kurz für „Mass-Flow Verifier“), ist ein kompaktes Diagnoseinstrument für die Vor-Ort-Kontrolle von Mengenflussregelgeräten (Mass-Flow Controllern, MFCs) und zeichnet sich durch technische Verbesserungen aus, die zu einem erhöhten Werkzeugdurchsatz in der Halbleiterfertigung und bei der Herstellung hochreiner Dünnschichten beitragen. Es ermöglicht eine präzise Mengenflussregelung in Echtzeit und ist unempfindlich gegen Druckstörungen in Strömungsrichtung und auch entgegen der Strömungsrichtung. Dazu verfügt es über einen integrierten Prozessor mit komplexen digitalen Algorithmen, mit dem es eine deutlich höhere Genauigkeit erreicht als herkömmliche digitale MFCs auf der Basis integrierter Leistungsschaltungen.

Da bei herkömmlichen Massenstrom-Prüfgeräten der Anstieg der Gastemperatur innerhalb des Volumens während des Messvorgangs nicht berücksichtigt wird, entsteht ein Messfehler von bis zu zehn Prozent. Bei der Modellierung eines Geräts, das diesen Effekt mit einbezieht, mussten unter anderem die zeitabhängigen Navier-Stokes-Gleichungen für kompressible Fluide in 3D berechnet werden.

Integrierter Prozessor vermindert Messfehler

Das eigentliche Ziel des Projekts bestand darin, diese Gleichungen in einem integrierten Prozessor zu implementieren, der eine Berechnung durch den pi-MFV in Echtzeit ermöglicht. Für Letzteres wurde das Programm Matlab verwendet (siehe Kasten „Navier-Stokes in Echtzeit“). Um die numerische Richtigkeit des integrierten Codes sicherzustellen, wurden Ergebnisse für die Temperaturdynamik im Volumen aus dem Echtzeitmodell, das auf den vereinfachten Gleichungen basiert, mit den Werten des in Comsol

Multiphysics erstellten 3D-Modells verglichen, die aus den vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen berechnet wurden.

Die benötigten Versuchsdaten wurden mit der Data Acquisition Toolbox von Matlab und einer PC-gestützten Digitalisierungs-Hardware erfasst. Da sämtliche Versuchsdaten somit bereits im Matlab-Format vorlagen, konnte der Druck in Matlab problemlos als Funktion der Zeit ausgegeben und in einen ähnlichen, in Comsol Multiphysics erstellten Plot implementiert werden. Das Team war sehr zufrieden als es feststellen konnte, dass die Daten zwischen dem erstellten Modell und den Versuchsdaten bei unterschiedlichsten Gasen und Strömungsgeschwindigkeiten zu über 99 Prozent übereinstimmen. Das im Gerät integrierte Echtzeitmodell ermöglicht somit eine Bestimmung der Strömungsgeschwindigkeit mit einer Abweichung von maximal einem Prozent gegenüber dem Sollwert für praktisch beliebige Gase.

Die Untersuchungen führten darüber hinaus zu weiteren interessanten Erkenntnissen. So stellte sich bei der Auswertung der in Comsol Multiphysics durchgeführten Simulationen heraus, dass sich Gasblasen innerhalb des Volumens bei hohen Strömungsgeschwindigkeiten um bis zu 100 °C erwärmen können. Mithilfe der Simulationssoftware konnte das Team nachvollziehen, wie sich diese Temperatursteigerungen auf die gemessene Strömungsgeschwindigkeit auswirken.

Drosselventil für die chemische Bedampfung

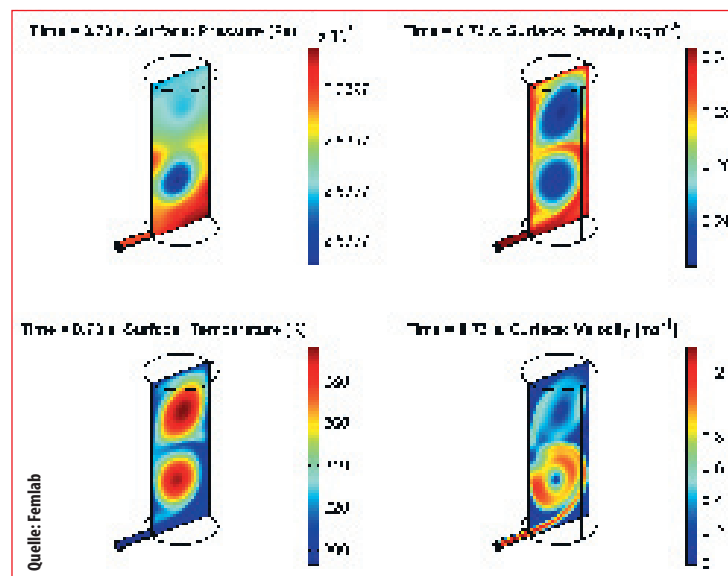
Auch bei der Entwicklung eines Drosselventils für die chemische Bedampfung (Chemical Vapor Deposition, CVD) erwies sich Comsol Multiphysics als ein nützliches Werkzeug. Bei der



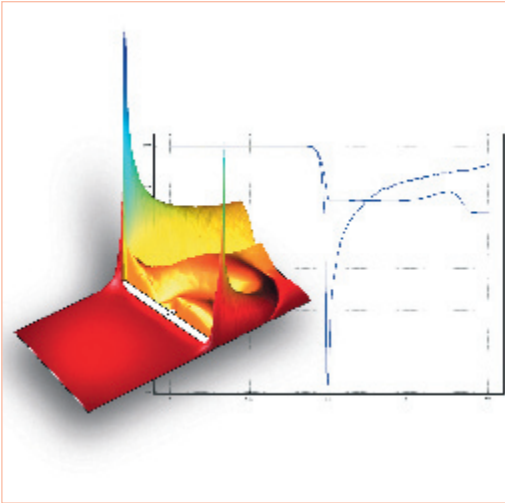
Im Mengenflussregelgerät pi-MFC führt ein integrierter Prozessor in Echtzeit vereinfachte Navier-Stokes-Gleichungen aus.

CVD werden chemische Stoffe in sehr dünnen Schichten auf eine vorgegebene Fläche (Substrat) aufgetragen, zumeist auf ein großes Einzelkristall aus einem Material wie Silizium oder Quarz. Die aufgedampfte Substanz wird als Präkursor bezeichnet und tritt in gasförmigem Zustand in eine CVD-Kammer ein. Häufig wird hierbei ein Trägergas zu Hilfe genommen, das sich nicht auf dem Substrat abgelagert.

Viele der verwendeten Trägergase sind bei Raumtemperatur und unter Druck flüchtig. Zudem beträgt der Dampfdruck des Präkursors bei gängigen Verarbeitungstemperaturen oftmals nur einige wenige Torr (1 Torr = 1 mmHg und >



Die Simulation des Druckmessgeräts zeigt zwei umfangreiche Wirbel mit eingeschlossenen heißen Gasblasen. Durch die Erfassung des Temperaturanstiegs in Echtzeit kann die Messgenauigkeit deutlich gesteigert werden.



In dieser mit den Postprocessingfunktionen von Comsol Multiphysics erstellten Grafik des Drosselventils ohne Klappe wird der starke Temperaturabfall innerhalb des Ventils sichtbar, der zur Kondensation und zur allmählichen Verringerung der Leistungsfähigkeit des Ventils führt.



Die Advanced Technology Group der MKS Instruments nutzt Comsol Multiphysics zur Simulation und Fehlerbeseitigung im Rahmen der Produktentwicklung.

760 Torr = 1 Atmosphäre = 101,325 kPa). In der Praxis setzen sich zunehmend Präkursoren mit niedrigerem Dampfdruck durch. Anhand eines mit der Simulationssoftware erstellten Modells konnten die sich daraus ergebenden Designfragen detailliert untersucht und auf überzeugende Weise gelöst werden.

Zu den entscheidenden Parametern eines CVD-Prozesses gehört der Druck im Reaktor, der mithilfe eines Drosselventils geregelt wird. Das Ventil unterbindet die Strömung vollständig, was zu erheblichen Druckunterschieden vor und hinter dem Ventil führen kann. Während der Druck in der Verarbeitungskammer (also vom Ventil aus gesehen in Strömungsrichtung) bis zu 10 Torr erreichen kann, beläuft sich der Druck entgegen der Strömungsrichtung nur auf einige Hundert Millitorr. Ein derart drastischer Druckabfall innerhalb weniger Millimeter kann einen starken Abfall der Temperatur des Trägergases nach sich ziehen. Darüber hinaus kann es stromabwärts vom Ventil zur Wirbelbildung kommen, da die Öffnung nicht ganz symmetrisch und der Strömungsquerschnitt somit auf einer Seite größer ist. Der Wirbel bedingt

wiederum einen Anstieg des örtlichen Partialdrucks im Präkursor.

Probleme können auftreten, wenn der Präkursor im Laufe des Prozesses nicht vollständig verbraucht wird. Druckabfall und der Wirbel können also zu einem Temperaturabfall führen, durch den der verbleibende Präkursor kondensiert. Das Kondensat zieht Verunreinigungen im Prozess nach sich und kann auf Dauer zum Verstopfen des Ventils führen. Vor den Untersuchungen mit Comsol Multiphysics gab es für die Entstehung des Kondensats keine Erklärung; anhand des Modells konnten die Effekte jedoch analysiert und entsprechende Gegenmaßnahmen entwickelt werden.

Die Untersuchungen wurden mit dem „Chemical Engineering“-Modul der Simulationssoftware und dessen Anwendungsmodi für nichtisotherme Strömungen (Non-Isothermal Flow), Konvektion und Wärmeleitfähigkeit (Convection and Conduction) sowie Konvektion und Diffusion (Convection/Diffusion) durchgeführt. Die größten Schwierigkeiten bei der Erstellung der Simulation bereitete der Überdruck stromabwärts von der Ventilmembran. Um diesen Überdruck nachbilden und den daraus resultierenden großen Druckabfall beobachten zu können, musste eine künstliche Diffusion im Strömungsverlauf angenommen und eine hohe Gitterdichte gewählt werden.

Die Simulationen zeigen deutlich, dass die Erwärmung der Membran nicht ausreichte, um die Kondensation des Gases infolge der Ausdehnung des Trägergases zu verhindern. Auf der Grundlage dieser Erkenntnisse konnte das Team ein neues Verfahren entwickeln, mit dem sich dieses Problem umgehen lässt. Das Verfahren wird derzeit erprobt und soll bei zukünftigen Entwicklungen zur Anwendung kommen.

Auch in Zukunft soll Comsol Multiphysics bei MKS Instruments zur Simulation und Fehlerbeseitigung im Rahmen der Produktentwicklung eingesetzt werden. Mit seinen Möglichkeiten zur Berechnung von 1D bis 3D-Problemen und zur raschen Bewertung von Konzepten, zur freien Bearbeitung partieller Differenzialgleichungen und zur Verwendung gewöhnlicher Differenzialgleichungen als Randbedingungen bietet Comsol Multiphysics entscheidende Vorteile gegenüber anderen Softwarelösungen im Bereich der Finite-Elemente-Analyse.

Mithilfe der Mathematischen Modellierung ist es MKS gelungen, sich ein genaues Bild von den Vorgängen im Innern der Geräte zu machen und so die Ursachen unerwünschter Effekte zu ermitteln. Modelle, deren Übereinstimmung mit den Versuchsdaten nachgewiesen wurde, können als „rauschfreie“ Labors für die weitere Optimierung des Produktdesigns verwendet werden. Unter Betriebsbedingungen durchgeführte Messungen und Versuche unterliegen von Natur aus einem gewissen Rauschen und sind in ihrer Genauigkeit begrenzt. In Comsol Multiphysics erstellte Simulationen ermöglichen es, die Grundlagen neuer Steuerungsalgorithmen und Regelkreise unabhängig von solchen Faktoren zu untersuchen. In der aktuellen Softwareversion können erstmals Wechselwirkungen zwischen Strömungen und Strukturen mit großen Deformationen mittels ALE-Verfahren (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) berechnet werden, sodass nun auch die Strömungsmechanik mit freien Oberflächen bisheriger und zukünftiger Produkte simuliert werden kann. ■

Dieser Beitrag als PDF und weiterführende Informationen (ähnliche Beiträge, technische Daten, Direktlinks zum Hersteller etc.) sind online verfügbar auf www.PuA24.net

Weiterführende Infos auf www.PuA24.net

more @ click PA056003



Hintergrund

Navier-Stokes in Echtzeit

Der Code zur Berechnung der Navier-Stokes-Gleichungen durch den integrierten Prozessor des pi-MFV wurde in C erstellt. Hierbei spielte Matlab eine wichtige Rolle. Anhand überschlüssiger Berechnungen wurde zunächst das Modellkonzept erstellt; anschließend ein Matlab-Skript geschrieben für die Implementierung und das Debugging der Steuerungsalgorithmen auf der Basis der Gleichungen. Eine vereinfachte Form der Gleichungen diente als Grundlage eines Echtzeitmodells, das das Team mithilfe von Matlab in C-Code umwandelte, der so kompakt ist, dass er in den Prozessorspeicher des Geräts passt. Nachdem Vergleiche eines in Comsol Multiphysics erstellten Modells mit Versuchsergebnissen dessen Richtigkeit bestätigt hatten, konnte der Code schließlich in die Produktionsmodelle des Geräts übernommen werden.

Modelle als „rauschfreie“ Labors