



UvA-DARE (Digital Academic Repository)

A virtual reactor for simulation of plasma enhanced chemical vapor deposition

Krzhizhanovskaya, V.

[Link to publication](#)

Citation for published version (APA):

Krzhizhanovskaya, V. V. (2008). A virtual reactor for simulation of plasma enhanced chemical vapor deposition

General rights

It is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), other than for strictly personal, individual use, unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Disclaimer/Complaints regulations

If you believe that digital publication of certain material infringes any of your rights or (privacy) interests, please let the Library know, stating your reasons. In case of a legitimate complaint, the Library will make the material inaccessible and/or remove it from the website. Please Ask the Library: <http://uba.uva.nl/en/contact>, or a letter to: Library of the University of Amsterdam, Secretariat, Singel 425, 1012 WP Amsterdam, The Netherlands. You will be contacted as soon as possible.

Chapter 8. Nederlandse Samenvatting

Dit proefschrift beschrijft het ontwerp en de ontwikkeling van een modelleer- en simuleeromgeving waarmee complexe processen uit Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) bestudeerd kunnen worden. Het resulterende computer simulatiesysteem noemen we de 'Virtuele Reactor'. PECVD processen zijn notoire gecompliceerde processen met vele multi-schaal (ruimte en tijd), multi-fysische en multi-chemische aspecten. De Virtuele Reactor beoogt tot een beter begrip van deze processen te leiden en te helpen in de ontwikkeling en optimalisatie van de werkelijke (niet gesimuleerde) experimenten. De uitdaging lag er voornamelijk in om het juiste nivo van abstractie te vinden voor al de relevante processen, zodanig dat de simulaties ons een adequate, betrouwbare en computationeel efficiënte kijk geven op de PECVD processen.

Hoofdstukken 2 en 3 beschrijven de fysica en de chemie alsook de numerieke modellen welke essentieel zijn om stroming in 1, 2 en 3 dimensies met een één dimensionaal plasma model in PECVD te bestuderen. In onze simulaties onderzoeken we welke parameters van belang zijn voor de reactor performance. Hierbij kijken we ondermeer naar gas stromingsnelheid, reactor volume, silaan concentratie, ontladingsruimte en substraat scheiding. Vergelijking met experimentele data laat zien dat het model in staat is de film-groei snelheid en de concentraties van de individuele componenten met redelijke nauwkeurigheid te voorspellen. De simulaties lieten verder zien dat de veel gebruikte techniek om silaan te verdunnen met moleculair waterstof de groeisnelheid doet toenemen en de productie van hogere silanen doet afnemen. Dit is een opmaat voor een schonere en een meer economisch en ecologische verantwoord productie proces. Numerieke simulaties geven aan dat de effectieve decompositie van silylyl buiten de ontladingszone de bijdrage aan het groeiproces reduceert indien het substraat verder weg komt van de feitelijke ontlading. We vonden een goede overeenkomst tussen de afgeleide analytische vergelijkingen en de numerieke simulaties welke we verkregen voor de silyl en silylyl flux en voor het atomair waterstof profiel.

Omdat reactoren vaak niet symmetrisch zijn besloten we de invloed van de reactorgeometrie op de gasstroming verder te bestuderen. Hiertoe ontwikkelden we een 2D en 3D gasstroming computersimulatie, waarmee we de invloed van de reactorconfiguratie op het stromingsveld en op de homogeniteit van de depositie bestudeerden. Deze simulaties lieten zien dat onder sommige condities de 2D en 3D simulaties een bijna volkomen symmetrische radiale verdeling van de concentraties van de chemische componenten over de wafer voorspellen. Hieruit concluderen we dat de homogeniteit van deze componenten in de buurt van de wafer voornamelijk bepaald wordt door transport middels diffusie en niet door convectie. Echter, in enkele gevallen (met hoge stromingsnelheid) wordt de symmetrie gebroken, daaruit leiden we af dat voor een correcte voorspelling van de (in-) homogeniteit van het depositie proces een volledig 3 dimensionale simulatie noodzakelijk is. De virtuele reactor stelt ons ook in staat om ook de film *degradatie* processen te bestuderen alsmede de trends in systeemrespons gegeven variaties van de fysische en

chemische parameters. Zo konden we de mechanismes duiden welke verantwoordelijk zijn voor de gelaagde substraat compositie tijdens de laatste fasen van de film productie cyclus.

Interessant was de observatie van een discrepantie tussen de experimenteel gevonden filmdikte en de gesimuleerde dikte voorspellingen. Additionele numerieke simulaties lieten zien dat de correcte experimentele vorm verkregen kan worden door de elektron dichtheidsverdeling, en niet de gasstroming parameters, te variëren. Hieruit concludeerden we dat een 2 dimensionaal ontladingsmodel essentieel is. Hoofdstuk 4 beschrijft de ontwikkeling en implementatie van een dergelijk model. De simulatie resultaten met dit model laten een kwalitatief goede overeenkomst zien met de experimenteel verkregen data van de film distributie en de geobserveerde dikte variatie. Bovendien verkregen we ook een goede correlatie tussen de gemeten film eigenschappen en de gesimuleerde ion en radicaal flux in de buurt van het substraat. Verder bestudeerden we de invloed van druk, temperatuur en ontladingsparameters (intensiteit en frequentie) op het PECVD proces voor een grote range van parameter instellingen. Ook keken we naar kleine veranderingen in de inlaat en uitlaat posities en namen relatief grote effecten waar op de uniformiteit en samenstelling van de groeiende film. Hieruit concluderen we dat de depositie eigenschappen werkelijk gevoelig zijn voor de *gehele* experimentele parameter ruimte. De resultaten laten zien dat de Virtuele Reactor in staat is om trends te voorspellen in de meest relevante groei parameters en gebruikt kan worden voor de bestudering en optimalisatie van de bijzonder complexe PECVD technologie.

Na de ontwikkeling en validatie van numerieke modellen voor het PECVD proces zijn we in detail gaan kijken naar de computationele performance en de gebruikersvriendelijkheid van de Virtuele Reactor (Hoofdstukken 5 en 6). De ontwerpkeuzes waren hier dat de simulaties efficiënt dienen te lopen in zowel de *capacity* als de *capability* varianten van de Virtuele Reactor. Hiertoe bestudeerden we in detail de computationele complexiteit van de PECVD simulaties en ontwikkelden nieuwe parallelisatie methoden om de numerieke processen te versnellen. In deze optimalisatie hebben we rekening gehouden met executie van de Virtuele Reactor op sterk gekoppelde (parallele clusters) en zwak gekoppelde (grid-gebaseerde) computersystemen. Een van de grootste uitdagingen hier was het migreren van parallele modules van homogene clusters naar heterogene grid-resources, onder behoud van parallele efficiëntie. Om het intrinsieke load-balancing probleem op te lossen hebben we een theoretisch model ontwikkeld en een generieke loadbalancing techniek welke dynamisch de specifieke grid-resource parameters en de applicatie parameters meeneemt in het executie optimalisatie proces. Het ontwikkelde algoritme is gevalideerd op ondermeer het Russisch-Nederlandse grid (RDG) testbed.

De resource management strategie waarin de gedistribueerde componenten afgebeeld worden op de onderliggende architectuur werd geoptimaliseerd door een serie van benchmarks op verschillende resources van het RDG testbed in detail te bestuderen. De resultaten laten zien dat de algoritmes welke ontwikkeld zijn efficiënt een dynamische adaptatie van de workload op dynamisch veranderende resources ondersteunen.

Ten slotte hebben we alle numerieke en computationele methoden geïntegreerd in één enkel 'Problem Solving Environment' (PSE). De Virtuele Reactor werd geïmplementeerd op het grid onder gebruikmaking van de Cross-Grid infrastructuur en werd getest met een groot aantal verschillende testbed configuraties. Hierbij verkregen we

in één systeem: veilige grid-toegang, resource discovery en resource registratie, grid-data transfer, applicatie initialisatie, editing van fysische en chemische databases, parameter specificatie, job submitie, gedistribueerde simulatie en geavanceerde visualisatie. Uitgebreide experimenten met deze Virtuele Reactor PSE leidden ons tot de conclusie dat de 'core' parallelle solver efficiënt draait op een cluster met high-speed interconnectiviteit, terwijl de andere componenten van de Virtuele Reactor efficiënt gedistribueerd kunnen worden over de (zwak gekoppelde) grid resources. Hiermee maximaliseren we de totale efficiënt van de gehele samengestelde applicatie. Loadbalancing kan verkregen worden door middel van de nieuw ontwikkelde algoritmie zodat de simulaties automatisch adaptief geoptimaliseerd worden naar resource behoefte en resource aanwezigheid.

Na een aanloop met relatief eenvoudige modellen, via nieuwe numerieke en computationele methoden heeft dit werk geresulteerd tot een geavanceerde simulatieomgeving welke intensief gebruikt wordt in een aantal internationale projecten. Recent nog heeft dit onderzoek aanleiding gegeven tot het opstarten van een drietal nieuwe internationale samenwerkingsverbanden waarin de methoden, algoritmen en computer systemen verder ontwikkeld worden. Veel werk is gedaan en veel werk is gepland en, zoals de geschiedenis van de wetenschap ons leert, het oplossen van het ene vraagstuk opent dikwijls de deur naar vele nieuwe uitdagende en spannende vraagstukken.