

# 8. Anhänge

*Anhang A: Potentialverteilung einer ITO-Schicht im Elektrolyten*

*Anhang B: Flussdiagramm des Programms zur Auswertung von JEBIC-Messungen*

*Anhang C: Simulation der Einsammelwahrscheinlichkeit  $\varphi(x, z)$*

*Anhang D: Potentialverteilung im CIS unter Elektronenbeschuss: Simulation in kartesischen Koordinaten*

*Anhang E: Die Lambert-Funktion*

*Anhang F: Potentialverteilung im CIS unter Elektronenbeschuss: Simulation in Zylinderkoordinaten*



## ANHANG A: Potentialverteilung einer ITO-Schicht im Elektrolyten

Zur Simulation wird die quadratische ITO-Schicht in  $n \times n$  finite Elemente zerlegt. Die Elemente werden der Reihe nach in x- und y-Richtung durchnummeriert. Das Potential des Elementes  $(i, j)$  wird mit  $U_{i,j}$  bezeichnet. Der Strom, der in x-Richtung vom Element  $(i, j)$  zum Element  $(i, j+1)$  fließt, wird mit  $I_{x_{i,j}}$  notiert.  $I_{y_{i,j}}$  ist in Analogie der Strom in y-Richtung zwischen Element  $(i, j)$  und Element  $(i+1, j)$ . Außerdem gibt es für jedes Element eine Größe  $G_{i,j}$ , die angibt, wieviel Strom an dieser Stelle in die ITO-Schicht fließt. Alle definierten Größen sind in Abbildung A illustriert. In lateraler Richtung kann über die ITO-Schicht hinaus kein Strom fließen, d. h. für alle  $i, j$  gilt:

$$I_{x_{i,0}} = I_{x_{i,n}} = I_{y_{0,j}} = I_{y_{n,j}} = 0 \quad (\text{A.1})$$

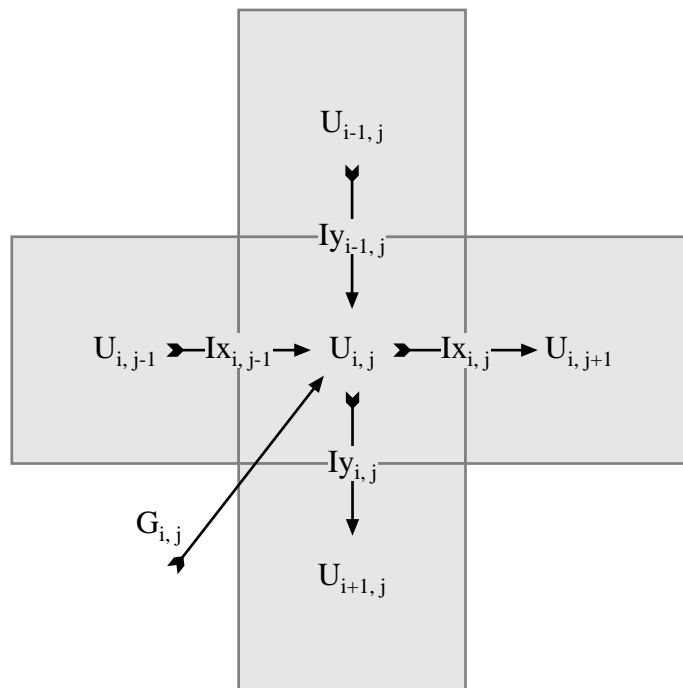


Abbildung A: Skizze zur Verdeutlichung der verwendeten Größen

Als erstes wird die Strombilanz im Element  $(i, j)$  betrachtet:

$$I_{x_{i,j-1}} - I_{x_{i,j}} + I_{y_{i-1,j}} - I_{y_{i,j}} = -G_{i,j} \quad i, j = 1 \dots n \quad (\text{A.2})$$

Für die Potentialdifferenz zu den Nachbarelementen ergibt sich mit der angenommenen quadratischen Form der finiten Elemente:

$$U_{i,j} - U_{i,j+1} = R_{\square} I_{x_{i,j}} \quad i = 1 \dots n, j = 1 \dots (n-1) \quad (\text{A.3})$$

und

$$U_{i,j} - U_{i+1,j} = R_{\square} I_{y_{i,j}} \quad i = 1 \dots (n-1), j = 1 \dots n \quad (\text{A.4})$$

Durch Einführung der  $n \times (n-1)$  Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ -1 & \diagdown & \\ & \diagdown & 1 \\ 0 & & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

können die Gleichungen (A.2) bis (A.4) in die Matrixschreibweise überführt werden.

$$\mathbf{I} \mathbf{x} \mathbf{A}^T + \mathbf{A} \mathbf{I} \mathbf{y} = \mathbf{G} \quad (\text{A.6})$$

$$\mathbf{U} \mathbf{A} = R_{\square} \mathbf{I} \mathbf{x} \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{U} = R_{\square} \mathbf{I} \mathbf{y} \quad (\text{A.8})$$

Die Größen  $\mathbf{U}$  und  $\mathbf{G}$  sind  $n \times n$  Matrizen der oben definierten Größen.  $\mathbf{I} \mathbf{x}$  bzw.  $\mathbf{I} \mathbf{y}$  sind  $n \times (n-1)$  bzw.  $(n-1) \times n$  Matrizen. Die Randspalten für  $j = 0, n$  sind bei  $\mathbf{I} \mathbf{x}$  und die Randzeilen für  $i = 0, n$  sind bei  $\mathbf{I} \mathbf{y}$  nicht enthalten, da sie wegen Gleichung (A.1) alle gleich null sind. Durch Einsetzen der Gleichungen (A.7) und (A.8) in Gleichung (A.6) folgt

$$\mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{A}^T + \mathbf{A} \mathbf{A}^T \mathbf{U} = R_{\square} \mathbf{G} \quad (\text{A.9})$$

$\mathbf{A} \mathbf{A}^T$  kann zu einer neuen  $n \times n$  Matrix zusammengefasst werden:

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & 0 \\ -1 & 2 & \diagdown & \\ & \diagdown & \diagdown & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

Die zu lösende Matrixgleichung ist also:

$$\mathbf{U} \mathbf{B} + \mathbf{B} \mathbf{U} - R_{\square} \mathbf{G} = 0 \quad (\text{A.11})$$

Diese Gleichung ist eine zweidimensionale *Poisson*-Gleichung, wie durch den Übergang zu infinitesimal kleinen Elementen gezeigt werden kann.

$\mathbf{G}$  hat an den Stellen positive Einträge, an denen die Kontaktnadeln sitzen. Der Gesamtstrom aller Kontakte muss für alle zu simulierenden Kontaktgeometrien konstant gehalten werden. Alle anderen Einträge von  $\mathbf{G}$  sind negativ. Ihre Summe muss ebenfalls den Gesamtstrom ergeben, da alles, was in die Schicht fließt, auch wieder rausfließen muss. Alle negativen Einträge von  $\mathbf{G}$  sind gleich groß, da die elektrochemische Abscheidung im Bereich des Diffusionsgrenzstromes stattfindet. Dieser Strom stellt sich ein, wenn der Ladungstransport diffusionskontrolliert ist. Kleine Variatio-

nen im Abscheidungspotential beeinflussen ihn kaum.

In Gleichung (A.11) kann  $\mathbf{U}$  nicht isoliert werden, da die Matrizenmultiplikation nicht kommutativ ist. Deshalb kommt zur Lösung ein iteratives Verfahren zum Einsatz, welches auf *Jacobi* zurückgeht. Es wird in [Press 90] beschrieben. Dabei wird eine beliebige Matrix  $\mathbf{U} \neq 0$  als Startwert vorgegeben. Diese wird in eine inhomogene Form von Gleichung (A.11) eingesetzt.

$$\mathbf{U} \mathbf{B} + \mathbf{B} \mathbf{U} - \mathbf{R}_{\square} \mathbf{G} = \mathbf{F} \quad (\text{A.12})$$

$\mathbf{F}$  ist eine Gütematrix. Sie gibt an, inwieweit und wo das gewählte  $\mathbf{U}$  die Gleichung (A.11) erfüllt. Ist  $\mathbf{F} = 0$ , so ist  $\mathbf{U}$  die gesuchte Lösung. Weicht  $\mathbf{F}$  an einer Stelle von 0 ab, so ist diese Stelle so zu variieren, dass der Betrag der Abweichung kleiner wird. Hierfür wird  $\mathbf{F}$  mit der Iterationsstärke  $\varepsilon$  multipliziert, und ergibt so eine Korrekturmatriix für  $\mathbf{U}$ .

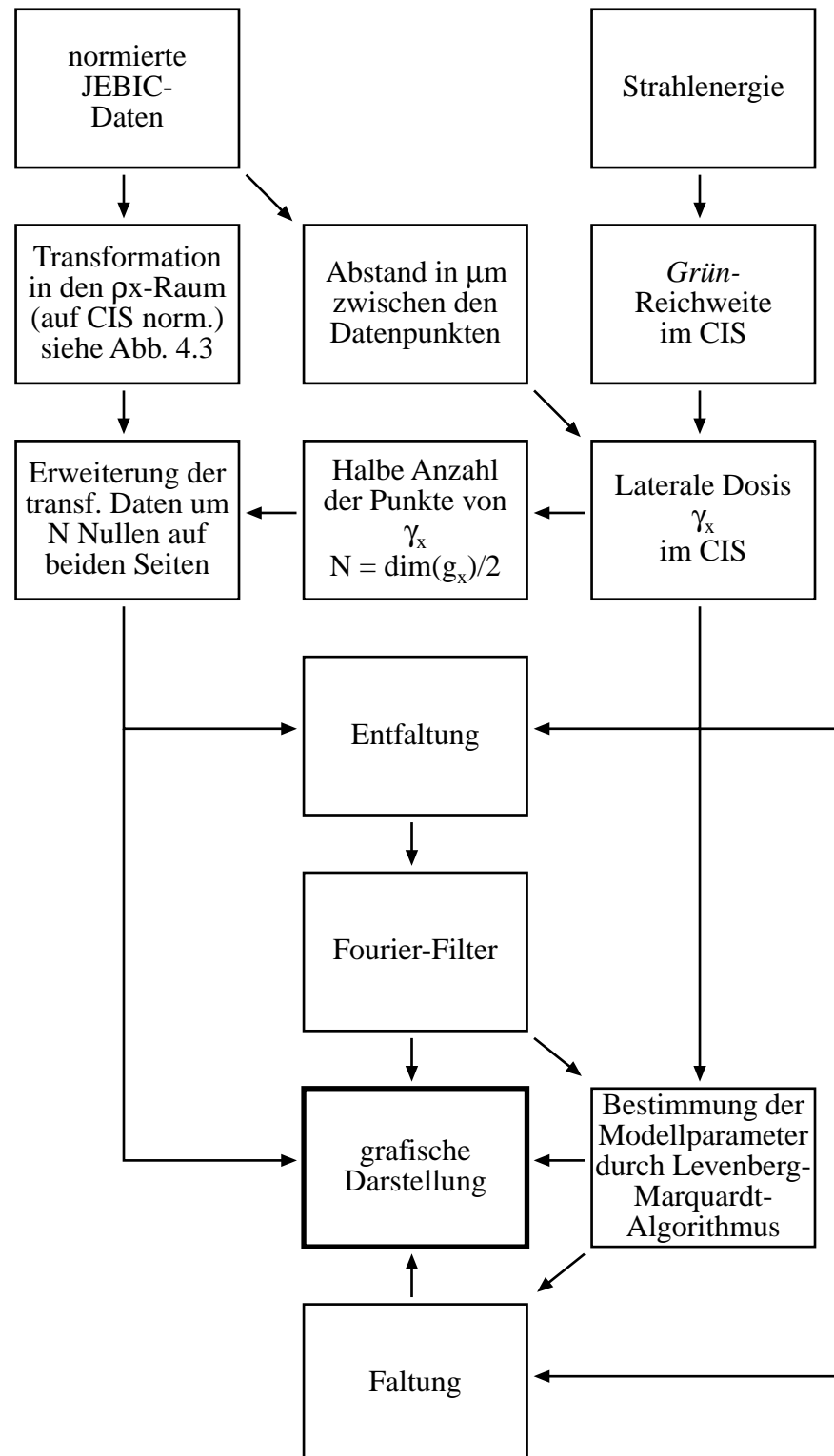
$$\mathbf{U}_{\text{neu}} = \mathbf{U}_{\text{alt}} + \varepsilon \mathbf{F} \quad (\text{A.13})$$

Das so bestimmte  $\mathbf{U}_{\text{neu}}$  wird nun als neuer Startwert für Gleichung (A.12) verwendet. Der Iterationszyklus wird solange durchlaufen, bis  $|\varepsilon \mathbf{F}|$  an allen Stellen kleiner als eine vorgegebene Abbruchschranke wird.  $\varepsilon$  muss sorgfältig gewählt werden. Ist  $\varepsilon$  zu klein, dauert es sehr lange, bis die Lösung konvergiert. Ist  $\varepsilon$  zu groß, konvergiert sie nicht.

Da  $\mathbf{U}$  zur Lösung einer *Poisson*-Gleichung konvergiert, ist sie bis auf eine beliebige Konstante  $U_0$  festgelegt.  $U_0$  wird nach jeder Korrektur gemäß Gleichung (A.13) so gewählt, dass  $\mathbf{U}_{\text{neu}}$  an einer der Kontaktnadeln die Randbedingung eines vorgegebenen Potentials erfüllt.



## ANHANG B: Flussdiagramm des Programms zur Auswertung von JEBIC-Messungen







## ANHANG C: Simulation der Einsammelwahrscheinlichkeit $\varphi(x, z)$

Die zu lösende Gleichung ist

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{\varphi}{L^2} = 0 \quad (\text{C.1})$$

mit den Randbedingungen

$$\varphi(x = 0, z) = 1 \quad (\text{C.2})$$

$$\varphi(x \rightarrow \infty, z) = 0 \quad (\text{C.3})$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{s}{L} \varphi(x, z = 0) \quad (\text{C.4})$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=z_{\text{KG}}} = \frac{s_{\text{KG}}}{L} \varphi(x, z = z_{\text{KG}}) \quad (\text{C.5})$$

Für ein System finiter Elemente haben diese Gleichungen das folgende Aussehen:

$$\frac{\mathbf{B} \boldsymbol{\varphi}}{\Delta x^2} + \frac{\boldsymbol{\varphi} \mathbf{B}}{\Delta z^2} - \frac{\boldsymbol{\varphi}}{L^2} = 0 \quad (\text{C.6})$$

$$\varphi_{0,z} = 1 \quad (\text{C.7})$$

$$\varphi_{n,z} = \varphi_{n-1,z} e^{-\Delta x/L} \quad n \gg L/\Delta x \quad (\text{C.8})$$

$$\varphi_{x,0} = \varphi_{x,1} \left( 1 - \frac{\Delta z s}{L} \right) \quad (\text{C.9})$$

$$\varphi_{x,k_m} = \varphi_{x,k_m+1} \left( 1 - \frac{\Delta z s_{\text{KG}}}{L} \right) \quad (\text{C.10})$$

mit

$$k_m = m \cdot \text{Kornlänge} / \Delta z \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{C.11})$$

$\Delta x$  und  $\Delta z$  sind die Abmessungen eines finiten Elements.  $\mathbf{B}$  ist in Gleichung (A.10) definiert.

Da die Randbedingung (C.3) im Unendlichen numerisch nicht zu handhaben ist, wurde sie insofern abgeschwächt, als bei  $x_n = n \Delta x$  nur ein exponentieller Abfall verlangt wird (siehe Gleichung (C.8)). Wenn  $x_n$  groß gegen  $L$  ist, macht diese Randbedingung keine Probleme.

In Analogie zum Vorgehen im Anhang A wird nun mit einem beliebigen Startwert  $\varphi \neq 0$  die inhomogene Form von Gleichung (C.6) berechnet

$$\frac{\mathbf{B} \varphi}{\Delta x^2} + \frac{\varphi \mathbf{B}}{\Delta z^2} - \frac{\varphi}{L^2} = \mathbf{F} \quad i, j = 0 \dots n \quad (\text{C.12})$$

Die Gütematrix  $\mathbf{F}$  wird mit der Iterationsstärke  $\varepsilon$  multipliziert und für alle ( $i = 1 \dots n-1, j = 1 \dots n-1$  ohne  $k_m$ ) zu  $\varphi$  addiert.

$$\varphi_{\text{neu}} = \varphi_{\text{alt}} + \varepsilon \mathbf{F} \quad (\text{C.13})$$

Durch Anwendung der Randbedingungen (C.7) bis (C.10) werden die noch fehlenden Werte von  $\varphi_{\text{neu}}$  für ( $i = 0, n; j = 0, k_m, n$ ) berechnet. Das so erhaltene  $\varphi$  wird wieder zur Berechnung von  $\mathbf{F}$  gemäß Gleichung (C.12) verwendet. Die Iteration wird solange fortgeführt, bis  $|\varepsilon \mathbf{F}|$  in allen Punkten kleiner als eine vorgegebene Abbruchschranke ist. Abbildung C zeigt ein Simulationsergebnis.

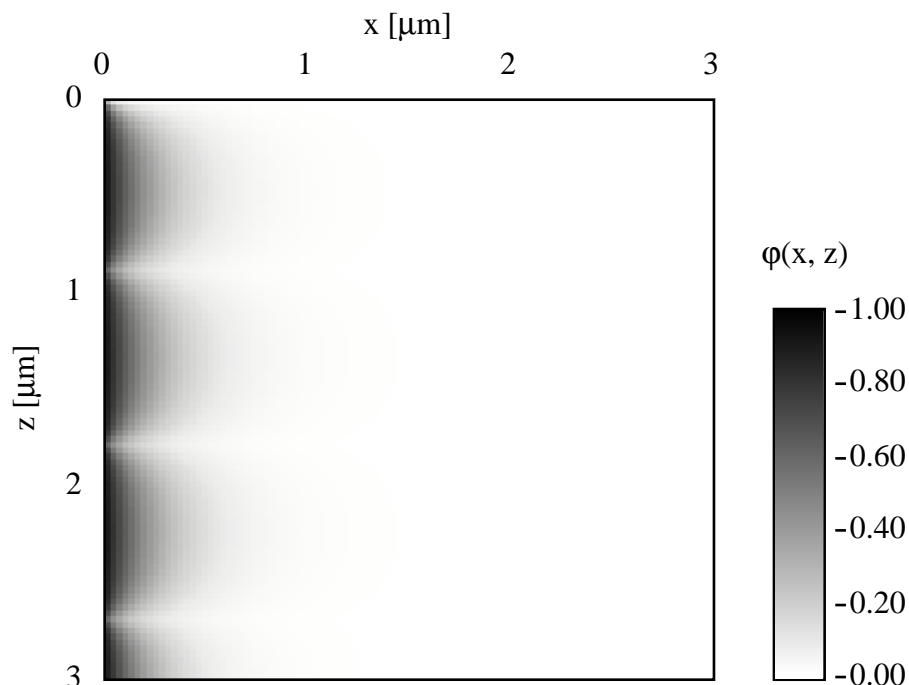


Abbildung C: Simulationsergebnis für  $L = 310 \text{ nm}$ ,  $s = 30$ ,  $s_{\text{KG}} = 3$  und  $z_{\text{KG}} = m \cdot 900 \text{ nm}$  ( $m = 1, 2, 3$ )  
Aufgetragen ist die zwei-dimensionale Einsammelwahrscheinlichkeit  $\varphi = \varphi(x, z)$  über den Ort  $(x, z)$ .

## ANHANG D: **Potentialverteilung im CIS unter Elektronenbeschuss: Simulation in kartesischen Koordinaten**

Zur Berechnung des in Abbildung 5.3 dargestellten Netzwerks wird genauso vorgegangen wie im Anhang A. Der Unterschied besteht darin, dass  $G$  nicht konstant ist, sondern in jedem Iterationsschritt neu berechnet wird. Hierfür wird das iterativ bestimmte  $U$  für alle Punkte außerhalb des Metallkontaktes in die Diodengleichung und für alle Punkte innerhalb des Metallkontaktes in ein *ohmsches* Gesetz eingesetzt. Der Metallkontaktwiderstand wird in jedem Zyklus so gewählt, dass der Gesamtstrom durch den Metallkontakt gerade so groß ist wie der Gesamtstrom durch alle finite Dioden. Dieser Gesamtstrom entspricht dem PEBIC-Strom. In  $G$  ist ebenfalls eine Stromquelle am Aufpunkt des Elektronenstrahls enthalten.

Das Potential im Zentrum des Metallkontaktes wird durch eine Randbedingung auf Null gehalten. In Abbildung 5.5 sind zwei Simulationsergebnisse enthalten.



## ANHANG E: Die *Lambert-Funktion*

Die *Lambert-Funktion*  $W$  ist Lösung der Exponentialgleichung:

$$W(x) e^{W(x)} = x \quad (\text{E.1})$$

Sie hat folgende Eigenschaften:

$$W(x e^x) = x \quad (\text{E.2})$$

und

$$\frac{dW(x)}{dx} = \frac{W(x)}{x + xW(x)} \quad (\text{E.3})$$

Sie ist über folgende unendliche Summe berechenbar (siehe [Corless]):

$$W(x) = \ln(x) - \ln(\ln(x)) + \sum_{n,m=0}^{\infty} c_{n,m} \frac{\ln(\ln(x))^{m+1}}{\ln(x)^{m+n+1}} \quad (\text{E.4})$$

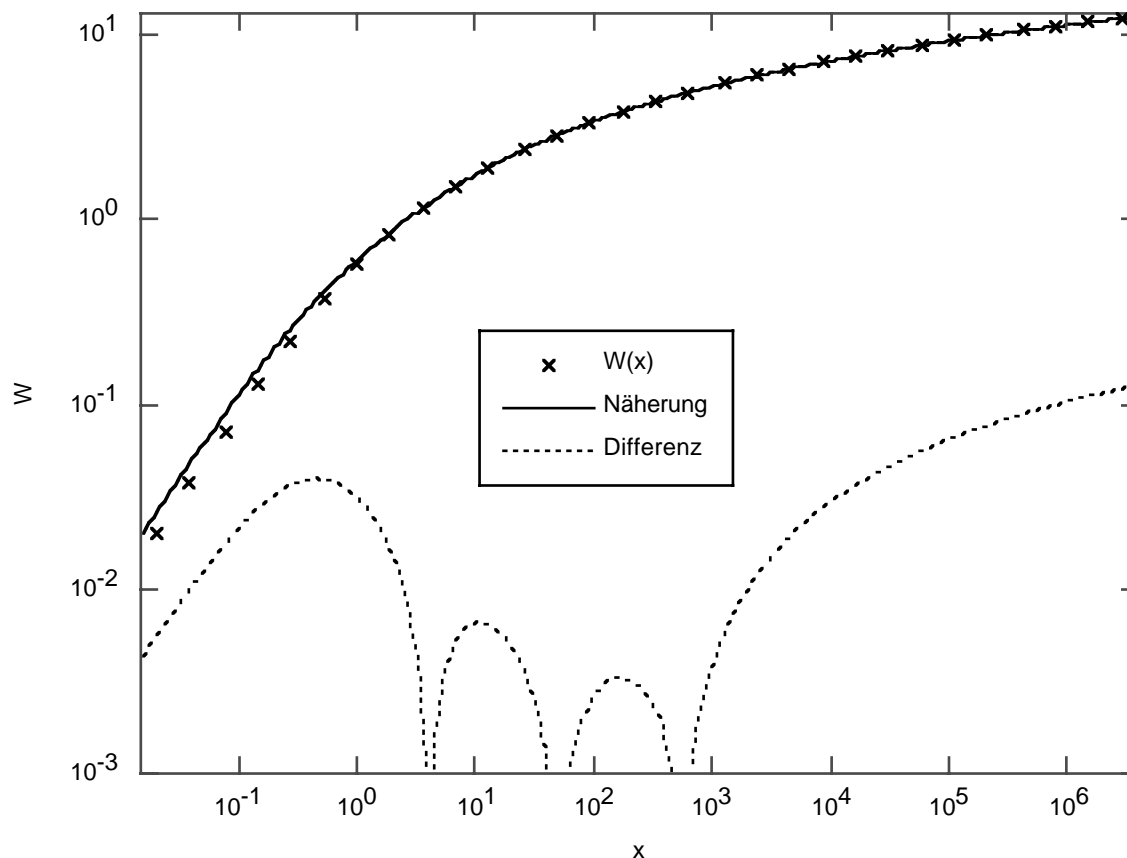


Abbildung E: Die *Lambert-Funktion*, ihre Näherung und die Differenz zwischen beiden

Das Aussehen der  $c_{n,m}$  ist [Corless] zu entnehmen.

Für alle praxisrelevanten Anwendungen ist eine eigens gefundene, leicht berechenbare Näherung gegeben durch:

$$W(x) = 1.0004 \ln(x+1) - 2.1037 \ln(\ln(x+1)+1) + 2.3948 \ln(\ln(\ln(x+1)+1)+1) \quad (\text{E.5})$$

Diese Näherung ist im Intervall von  $3.88 \cdot 10^0$  bis  $3.6 \cdot 10^6$  auf 1% genau. Abbildung E zeigt sie im Vergleich zum tatsächlichen  $W(x)$ . Wenn eine bessere Genauigkeit erforderlich ist, oder das Gültigkeitsintervall größer sein muss, kann ein weiterer verschachtelter Logarithmus-Term an die Näherung angefügt werden. Die Gewichtungsfaktoren müssen dann allerdings alle neu bestimmt werden.

## ANHANG F: Potentialverteilung im CIS unter Elektronenbeschuss: Simulation in Zylinderkoordinaten

Da die Randbedingungen für  $I(r)$  leichter numerisch behandelt werden können als die für  $U(r)$ , wird hier eine zur Gleichung (5.14) äquivalente Gleichung für  $I$  statt  $U$  abgeleitet. Sie wird durch Lösen des Systems gekoppelter linearer Differenzialgleichungen (5.9) und (5.10) ermittelt. Dabei muss vor dem Differenzieren von Gleichung (5.9)  $G'$  durch die Gleichungen (5.5) und (5.6) ersetzt werden:

$$I' = -2\pi r j_D(U) \quad (\text{F.1})$$

$$I'' = -2\pi r \frac{\partial j_D}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial r} - 2\pi j_D(U) \quad (\text{F.2})$$

mit Gleichung (5.10) folgt:

$$I'' - \frac{1}{r} I' - R_D I \frac{\partial j_D}{\partial U} \Big|_{U=U_D(-I'/2\pi r)} = 0 \quad (\text{F.3})$$

Die partielle Ableitung im letzten Term kann elementar in den Fittparametern und  $I'$  ausgedrückt werden.

$$\frac{\partial j_D}{\partial U} \Big|_{U=U_D(-I'/2\pi r)} = \frac{1}{1 + \hat{W}} \left( \frac{\hat{W}}{R_s} + \frac{1}{R_s + R_p} \right) \quad (\text{F.4})$$

mit

$$\hat{W} = W \left( \frac{e R_s R_p j_0}{nkT(R_s + R_p)} \exp \left( \frac{e R_s (R_s + R_p) (j_0 + \hat{j}) - \tilde{W} nkT / e}{nkT(R_s + R_p)} \right) \right) \quad (\text{F.5})$$

$$\tilde{W} = W \left( \frac{e R_p j_b}{nkT} \exp \left( \frac{e R_p (j_b + \hat{j})}{nkT} \right) \right) \quad (\text{F.6})$$

$$\hat{j} = -\frac{I'}{2\pi r} \quad (\text{F.7})$$

$W$  ist die Lambert-Funktion. Ihre Eigenschaften sind in Anhang E zu finden.

Gleichung (F.3) ist numerisch unter den Randbedingungen

$$\mathbf{I}(0) = \mathbf{I}_0 \quad (\text{F.8})$$

$$\mathbf{I}'(0) = 0 \quad (\text{F.9})$$

zu lösen.

Dazu wird zunächst für einen beliebigen Startvektor  $\mathbf{I} \neq 0$  die erste Ableitung  $\mathbf{I}'$  berechnet. Dabei wird bei  $r_0 = 0$  die Randbedingung (F.8) und bei  $r_n = n \Delta r$  eine durch lineare Approximation gebildete Randbedingung berücksichtigt. Sodann wird die zweite Ableitung  $\mathbf{I}''$  mit der Randbedingung (F.7) bei  $r_0$  und einer linearen Approximation bei  $r_n$  bestimmt.

Nun kann mit den Gleichungen (F.4) bis (F.7) die inhomogene Form von Gleichung (F.3) berechnet werden.

$$\mathbf{I}'' - \frac{1}{\mathbf{r}} \mathbf{I}' - \mathbf{R}_{\square} \mathbf{I} \left. \frac{\partial j_D}{\partial \mathbf{U}} \right|_{\mathbf{U} = \mathbf{U}_D(-\Gamma/2\pi r)} = \mathbf{F} \quad (\text{F.10})$$

Der Gütefaktor  $\mathbf{F}$  wird mit der Iterationsstärke  $\varepsilon$  multipliziert und dann zu  $\mathbf{I}$  addiert.

$$\mathbf{I}_{\text{neu}} = \mathbf{I}_{\text{alt}} + \varepsilon \mathbf{F} \quad (\text{F.11})$$

Mit  $\mathbf{I}_{\text{neu}}$  wird der Zyklus erneut durchlaufen. Die Iteration wird abgebrochen, wenn  $|\varepsilon \mathbf{F}|$  kleiner als eine vorgegebene Schranke wird.