

Schlussbericht

zu dem IGF-Vorhaben

CAPRICE – Computer Aided Process Refinement for Intelligent Coatings

der Forschungsstellen

Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik IST

Laser Zentrum Hannover e.V.

gemeinsamer Zwischenbericht aller beteiligten Forschungsstellen)

Das IGF-Vorhaben IGF 101 EN der Forschungsvereinigung
Europäische Forschungsgesellschaft dünne Schichten e.V.

wurde über die



im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung
(IGF) vom



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Energie

aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Braunschweig,
17.02.2016

Ort, Datum

Andreas Pflug

Name und Unterschrift des Projektleiters
an der (ggf. federführenden) Forschungsstelle

Hannover, 17.02.2016

Ort, Datum

Marco Jupé

Name und Unterschrift des Projektleiters
an der (ggf. federführenden) Forschungsstelle

Inhalt

1. Zusammenfassung	2
2. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Berichtszeitraum	5
2.1 Teilziel Arbeitspaket 1 (IST) Definition von Spezifikationen und Anwendungen	5
2.1.1 Definition der Geometrien der Referenzbeschichtungsanlagen (3 MM)	5
2.1.2 Erstellung der geometrischen Modelle der Referenz-Kammern (3 MM)	5
2.1.3 Priorisierung der Materialien von Interesse für das Projekt und zukünftige Untersuchungen	7
2.1.4 Schnittstellen zwischen den PIC-MC, kMC und MD Methoden (3 MM)	7
2.2 Teilziel Arbeitspaket 2 (FUNDP) – Film growth simulation by kinetic Monte Carlo method	9
2.3 Teilziel Arbeitspaket 3 (LZH) – Film growth simulation by Molecular Dynamics	13
2.3.1 Übersicht: Schichtwachstumssimulation mittels Molekulardynamik (MD)	13
2.3.2 Durchgeführte Arbeiten:	13
2.3.3 Erzielte Ergebnisse:	21
2.4 Teilziel Arbeitspaket 4 (IST) – Plasma chemistry database	26
2.4.1 Übersicht	26
2.4.2 Durchgeführte Arbeiten	26
2.4.3 Verwendete Literaturquellen	27
2.5 Teilziel Arbeitspaket 5 (FUNDP) – Kombinierte Simulationen	28
2.5.1 Vorgehensweise bei der Prozessmodellierung	28
2.5.2 Multiskalenansatz mit MD Simulation	31
2.5.3 Multiskalenansatz mit kinetic Monte Carlo Simulation (kMC)	39
2.6 Teilziel Arbeitspaket 6 (CRM) – Plasma- und Schichtcharakterisierung	47
2.6.1 Übersicht	47
2.6.2 Durchgeführte Arbeiten	47
3. Verwendung der Zuwendung	54
4. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit	54
5. Ergebnistransfer in die Wirtschaft	55
5.1 Darstellung des wissenschaftlich-technischen und wirtschaftlichen Nutzens der erzielten Ergebnisse insbesondere für KMU sowie ihres innovativen Beitrags und ihrer industriellen Anwendungsmöglichkeiten	55
5.1.1 Anwendbarkeit der Projektergebnisse für KMU	55
5.1.2 Wirtschaftlicher Nutzen für KMU	57
5.2 Einschätzung zur Realisierbarkeit des vorgeschlagenen und aktualisierten Transferkonzepts	58
5.3 Im Projektzeitraum durchgeführte Maßnahmen zum Ergebnistransfer	60
5.4 Weitere geplante Aktivitäten zum Ergebnistransfer	64
5.5 Veröffentlichungen und Vorträge aus dem Projekt	65
6. Literatur	66

1. Zusammenfassung

Beschichtungstechnologien aus dem Bereich der physikalischen Gasphasenabscheidung (PVD) wie Magnetron-Sputtern oder Ionenstrahl-Sputtern (IBS) sind Schlüsseltechnologien zur Herstellung dünner, funktionaler Schichtsysteme. Diese kommen in einer Vielzahl von Produkten zum Einsatz, Beispiele sind Architektur- und Automobilverglasung, Photovoltaik und Solarthermie, elektronische Produkte wie Smartphones, Displays, Werkzeuge und Maschinenbau sowie Produkte aus der Fein- und Präzisionsoptik. Aufgrund der stetigen Weiterentwicklung dieser Technologien steigen auch die Anforderungen an die Schichtsysteme kontinuierlich. Dies gilt sowohl für die Komplexität und Präzision als auch für die Substratgröße und den Durchsatz beim Beschichtungsprozess. Insbesondere reicht es nicht aus, den Prozess hinsichtlich homogener Schichtdicke und Schichtzusammensetzung zu kontrollieren. Vielmehr werden auch intrinsische Schichteigenschaften wie z.B. kristalline Phasenzusammensetzung, optische, mechanische, chemische und/oder elektrische Eigenschaften in zunehmendem Maße spezifiziert.

Für eine effiziente und nachhaltige Entwicklung der Beschichtungsprozesse müssen die relevanten Mechanismen zur Bildung der gewünschten Schichteigenschaften verstanden und gezielt eingesetzt werden. Um ein entsprechendes Verständnis zu erreichen, werden Experimente in Kombination einer theoretischen Modellierung des Beschichtungsprozesses und des Schichtwachstums benötigt. Das Cornet-Projekt CAPRICE (Computer Aided Process Refinement for Intelligent Coatings) setzt genau hier an: In Form eines „virtuellen Coaters“ wird eine Softwareplattform entwickelt, die eine Modellierung sowohl der Prozessdynamik als auch des Schichtwachstums bei PVD-Beschichtungsprozessen ermöglicht.

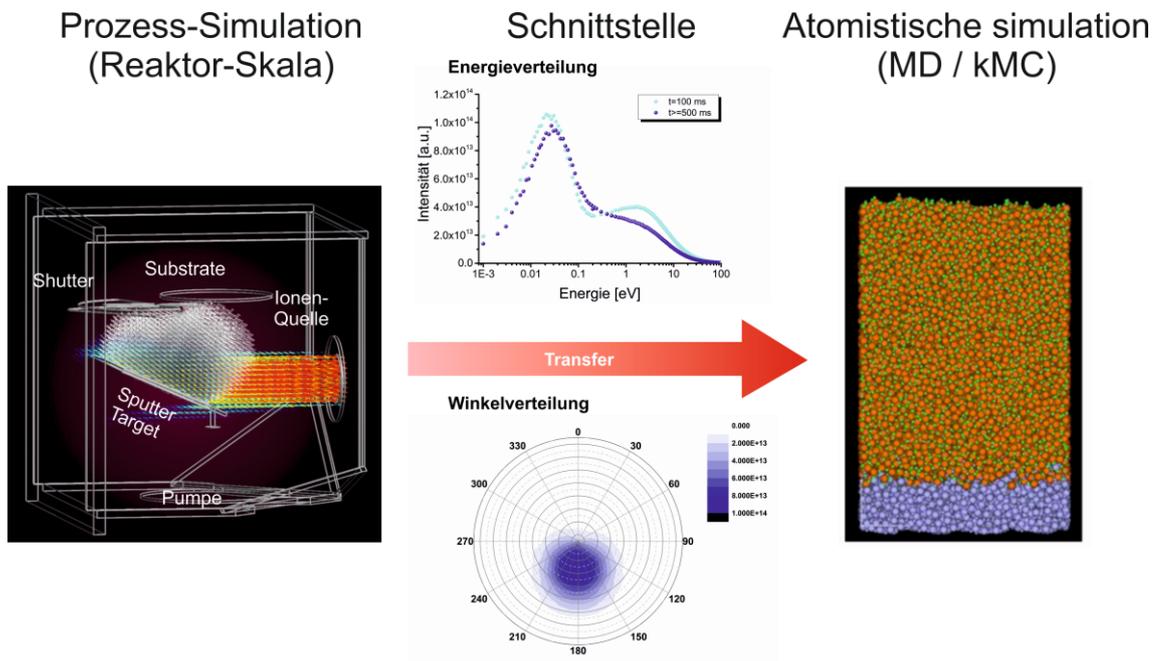


Abbildung 1: Im Projekt CAPRICE realisierte Simulationskette von der Reaktorskala bis hin zur atomistischen Skala beim Schichtwachstum.

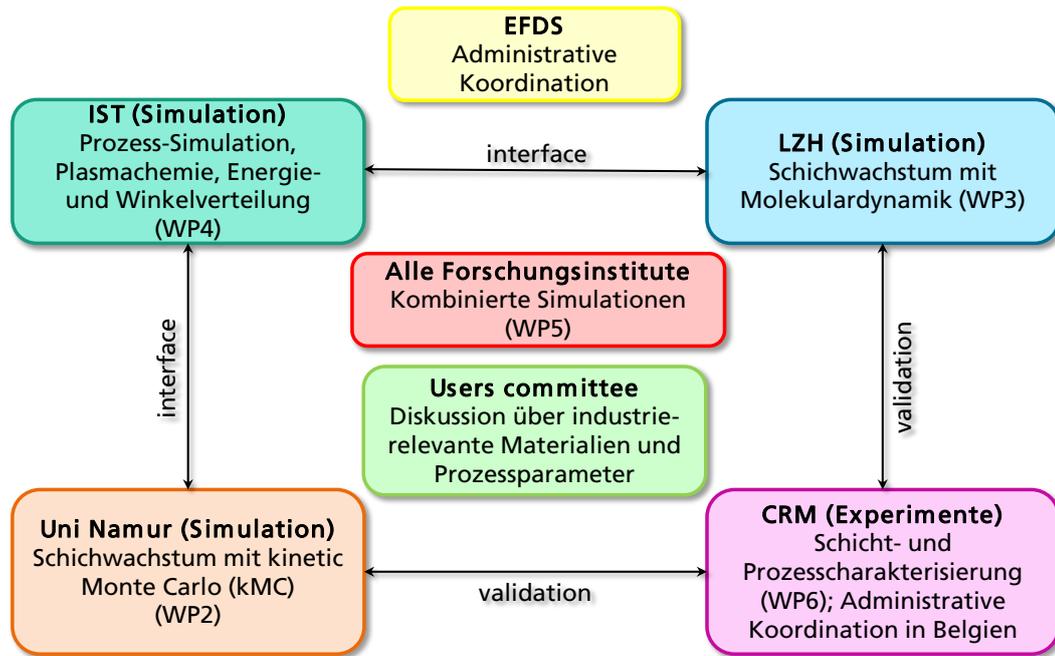


Abbildung 2: Kooperationsstruktur im Projekt CAPRICE.

Die Softwareplattform setzt auf bereits bei den Forschungsstellen existierende Simulationsverfahren im Bereich Prozess-Simulation und atomistische Schichtwachstumssimulation auf. Der Mehrwert entsteht durch Verknüpfung dieser Verfahren zu einer Multiskalen-Simulationskette wie in Abbildung 1 gezeigt. Ein zentrales Ergebnis des Projekts CAPRICE ist der Nachweis der grundsätzlichen Machbarkeit und physikalischen Aussagekraft dieses Ansatzes anhand numerischer Durchführung an drei Referenz-Beschichtungskammern und experimenteller Validierung.

Erreicht wird dies durch eine Kooperation anhand der in Abbildung 2 gezeigten Kooperationsstruktur im Rahmen des Cornet-Förderprogramms zwischen Centre de Recherches Métallurgiques (CRM) und Universität Namur (FUNDP) in Belgien sowie Laserzentrum Hannover (LZH) und Fraunhofer IST (IST) in Deutschland. Das EFDS führt in Deutschland die Administrative Koordination durch, auf belgischer Seite erfolgt dies seitens CRM. Die Kompetenzen und Ressourcen verteilen sich, wie im Folgenden in Tabelle 1 gezeigt, auf die Projektpartner.

Tabelle 1: Rollen und Kompetenzen der Partner in CAPRICE.

Partner	Wesentliche Aufgabe im Projekt	Personaleinsatz	Verwendete Geräte
IST	DSMC- und PIC-MC Prozess-Simulation, wissenschaftliche Koordination	37 PM Wissenschaftler	Linux-Cluster Analytik: REM, AFM und EPMA
LZH	Simulation des Schichtwachstums mit Molekulardynamik (MD)	28 PM Wissenschaftler	IBS-Anlage
FUNDP	Simulation des Schichtwachstums mit kinetic Monte Carlo (kMC) – Verfahren	36 PM Wissenschaftler	Mantis-Sputteranlage mit zwei planaren Rundkatoden, Analytik: Prozessdiagnostik und RBS
CRM	Beschichtungsexperimente und Charakterisierung, administrative Koordination in Belgien	13.5 PM Wissenschaftler, 13.5 PM Techniker	In-line Sputteranlage MAEVA, Prozessdiagnostik, Analytik: XRF, REM, Spektroskopie

Das Projekt umfasst die sechs in Tabelle 2 aufgeführten Arbeitspakete. Auch wenn einige Arbeitspakete von mehreren Partnern bearbeitet wurden, gibt es für jedes Arbeitspaket einen verantwortlichen Partner. Die Kommunikation der Ergebnisse an die beteiligten Firmen (siehe Abbildung 3) erfolgte innerhalb von 5 Projekttreffen und einem Workshop zur Anwendung der Software. Weiterhin wurden die Ergebnisse im Rahmen zahlreicher Konferenzen und Workshops (siehe Tabelle 12 in Abschnitt 5.3) einer breiten Öffentlichkeit vorgestellt. Nachdem die physikalische Aussagekraft und die Nutzbarkeit für KMU des in CAPRICE verfolgten Konzepts gezeigt ist, laufen derzeit Beantragungen von Nachfolgeprojekten, in denen die in CAPRICE entwickelten Simulationswerkzeuge konkret auf Beschichtungsanlagen in der Produktion bei den KMU angewendet werden, und die KMU erhalten die Option, die Simulationen unter Anleitung selbst durchzuführen.

Tabelle 2: Arbeitspakete im Projekt CAPRICE. Der für das jeweilige Arbeitspaket verantwortliche Partner ist fett gedruckt.

Nr.	Partner	Zeitraum	Beschreibung
WP1	IST , LZH, FUNDP, CRM	M1-M6	Definition of specifications and applications Spezifikation relevanter Materialien und Prozessparameter, Geometrien der Referenzkammern sowie Schnittstellen zwischen den Softwaremodulen
WP2	FUNDP	M1-M28	Film growth simulation by kMC method Weiterentwicklung des an der Universität Namur entwickelten kinetic Monte Carlo Softwarepakets NASCAM hinsichtlich Behandlung von Metalloxiden.
WP3	LZH	M1-M28	Film growth simulation by MD Weiterentwicklung der am LZH entwickelten Softwareumgebung für MD-Simulation, Einbeziehung der klassischen Potentiale für Metalloxide (TiO ₂ u.a.)
WP4	IST	M3-M12	Plasma chemical database Reaktionsdatensatz für Gasfluss- und Plasmasimulation des reaktiven TiO ₂ -Sputterprozesses.
WP5	FUNDP , LZH, IST	M7-M28	Combined simulations Modellierung von Prozessen und Schichtwachstum in der multiskaligen Simulationskette für die drei Referenz-Beschichtungsprozesse
WP6	CRM , FUNDP, IST	M4-M28	Plasma and film characterization Durchführung von Beschichtungsexperimenten, Prozessdiagnostik und Charakterisierung der beschichteten Proben

Abbildung 3: Firmen des „Users Committee“ auf belgischer und deutscher Seite.

-  Advanced Coating (Liège, BE)
-  AMOS – Advanced Mechanical and Optical Systems (Liège, BE)
-  BE-SOL – Bureau d’Eudes Solaires (Rochefort, BE)
-  Bühler Alzenau GmbH (Alzenau, DE; formerly Leybold Optics GmbH)
-  CEC - Cutting Edge Coating GmbH (Hannover, DE)
-  HVT – High Vacuum Technology (Assesse, BE)
-  Manz AG (Karlstein, DE)
-  Roth & Rau AG (Hohenstein-Ernstthal, DE)
-  Optics Balzers (Jena, DE)
-  La Nitruation Moderne (Liège, BE)
-  Robeko (Münchweiler, DE)
-  Ing. Büro D. Wurzinger (Bad Vilbel, DE)
-  VON ARDENNE Anlagentechnik (Dresden, DE)